优化区域形状的 SCFT 模拟

作者:周铁军

2019 年 9 月 16 日

1 问题简述

1.1 引言

考虑了 nAB 二嵌段共聚物与 N 在 S 表面聚合的总表面积 $|S|$,A 块的体积分数是 f, B 块的体积分数是 $1-f$,两个嵌段不同点在于其 Flory-Huggins 参数 χN。

考虑一般曲面的 SCFT 问题, 假设统计段的长度和体积两个块是相等的, 即 $b_A = b_B = b, v_A = v_b = v_0$。共聚物链的特征长度可由旋转的无扰动半径定义,使所有空间长度都以单位表示 $Rg = b\sqrt{N}/6$。在不可压缩熔体假设下,平均段密度在空间上是均匀的,由 $v0 = 1/0 = V/(nN)$ 给出。

哈密顿量:

$$H\left[w_+, w_-\right] = \frac{1}{|S|}\int d\mathbf{x}\left\{-w_+(\mathbf{x}) + \frac{w_-^2(\mathbf{x})}{\chi N}\right\} - \log Q\left[w_+(\mathbf{x}), w_-(\mathbf{x})\right] \tag{1}$$

场 $w\pm$ 满足:

$$\begin{aligned} \tfrac{\partial}{\partial t} w_+(\mathbf{x}, t) = \tfrac{\delta H[w_+, w_-]}{\delta w_+(x,t)} \\ \tfrac{\partial}{\partial t} w_-(x, t) = -\tfrac{\delta H[w_+, w_-]}{\delta w_-(x,t)} \end{aligned} \tag{2}$$

Q 是受外加场 w+ 和 w -的作用单链配分泛函:

$$Q = \frac{1}{|\mathcal{S}|}\int \mathrm{d}\mathbf{x} q(\mathbf{x}, 1) = \frac{1}{|\mathcal{S}|}\int \mathrm{d}\mathbf{x} q(\mathbf{x}, s) q^\dagger(\mathbf{x}, s), \quad \forall s \in [0, 1] \tag{3}$$

ϕ_A, ϕ_B 为块 A,B 的单体密度:

$$\begin{aligned} \phi_A(\mathbf{x}) &= \frac{1}{Q}\int_0^f \mathrm{d}s q(\mathbf{x}, s) q^\dagger(\mathbf{x}, s) \\ \phi_B(\mathbf{x}) &= \frac{1}{Q}\int_f^1 \mathrm{d}s q(\mathbf{x}, s) q^\dagger(\mathbf{x}, s) \end{aligned} \tag{4}$$

1.2 SCFT 方程优化问题

为获得给定有序结构的最优表面尺寸,将 SCFT 的有效哈密顿量视为曲面大小函数,以及场函数的泛函。

此外,我们用 $\mathcal{S}_\Gamma = \{\Gamma \cdot \mathbf{x} : \mathbf{x} \in \mathcal{S}_0\}$ 代替曲面 S,故完整的求解 SCFT 方程的优化问题变为求:

$$\min_\Gamma \max_{w_+} \min_{w_-} H\left[w_+(\mathbf{x}), w_-(\mathbf{x}), \Gamma\right] \tag{5}$$

其中 Γ>0 是描述表面尺寸的尺度因子。例如,球体的 Γ 参数是它的半径。

1.2.1 问题求解:SCFT 迭代

1. 给参数 χN, f, 区域 S, 和合适的初始分布的场 w±。
2. 固定 S,通过 *FSP法* 找到 SCFT 的鞍点,得到有效的哈密顿量。
3. 固定 w±, 利用曲面自适应优化方法优化区域 S, 并评估有效哈密顿量的值。
4. 重复步骤 2-3,直到有效哈密顿量差异小于给定的收敛准则。

1.2.2 鞍点搜索:FSP 法

1. 初始化场 w±(x, 0)。
2. 计算一般曲面上的正向和反向传播算子 q(x, s) 和 q†(x, s)。
3. 得到 Q,φA(x) 和 φB(x) 的积分方程, 并评估有效哈密顿量 H 的值。
4. 通过 (2) 式使用鞍点搜索迭代方法,更新场 w+(x,t) 和 w-(x,t)。
5. 重复步骤 2-4,直到满足收敛准则。

1.2.3 获得传播子: 表面有限元离散方法

给出如下方程,q(x,s) 为正向传播子:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial s} q(\mathbf{x}, s)=\left[\Delta_{\mathcal{S}}-w(\mathbf{x}, s)\right] q(\mathbf{x}, s) \\
&q(\mathbf{x}, 0)=1 \\
&w(\mathbf{x}, s)=\begin{cases} w_{+}(\mathbf{x})-w_{-}(\mathbf{x}), & 0 \leq s \leq f \\ w_{+}(\mathbf{x})+w_{-}(\mathbf{x}), & f \leq s \leq 1\end{cases}
\end{aligned} \tag{6}$$

同样,有反向传播子 q†(x,s),求解与 q(x,s) 类似。

q(x,s) 求解过程:

1. 将 (4) 式改写为变分问题

$$\left(\frac{\partial}{\partial s} q, v\right)_s=-\left(\nabla_s q, \nabla_s v\right)_s-(w q, v)_s, \text{ for all } v \in H^1(\mathcal{S}) \tag{7}$$

2. 用有限维空间 V_h 代替无限维空间 $H^1(S)$,得到线性有限元离散化,

$$\left(\frac{\partial}{\partial s} q_k, v_h\right)_{S_h}=-\left(\nabla_{S_h} q_h, \nabla_{S_h} v_h\right)_{S_h}-\left(w_h q_h, v_h\right)_{S_h}, \quad \text{for all } v_h \in \mathcal{V}_h \tag{8}$$

其中 $q_t=\sum_{t=1}^N q_i(s) \varphi_i(x)$,$w_A(x, s)=\sum_{b=1}^N w\left(x_i, s\right) \varphi_i(x)$ 为 $w(x, s)$ 的线性插值。

得到:

$$M \frac{\partial}{\partial s} q(s)=-(A+F) q(s) \tag{9}$$

其中

$$q(s) = (q_1(s), q_2(s), \cdots, q_N(s))^t$$

$$M_{i,j} = (\varphi_i, \varphi_j), A_{i,j} = (\nabla_S \varphi_i, \nabla_S \varphi_j), F_{i,j} = (w_h \varphi_i, \varphi_j)$$

3. 使用 $Crank\_Nicolson$ 方法离散 (7) 式，得：

$$M \frac{q^{n+1} - q^n}{\Delta s} = -\frac{1}{2}(A + F) \left[q^{n+1} + q^n \right] \tag{10}$$

整理得到迭代格式：

$$\left[M + \frac{\Delta s}{2}(A + F) \right] q^{n+1} = \left[M - \frac{\Delta s}{2}(A + F) \right] q^n \tag{11}$$

2 计算结果

表 1: 计算参数值设定

Test	L	l	h	node	fa	chiAB
1	10	2	0.2	11215	0.5	0.25
2	15	2	0.2	25190	0.5	0.25
3	10	2	0.2	11215	0.4	0.25
4	10	2	0.2	11215	0.3	0.25

下面是以上不同参数条件下的计算结果图像

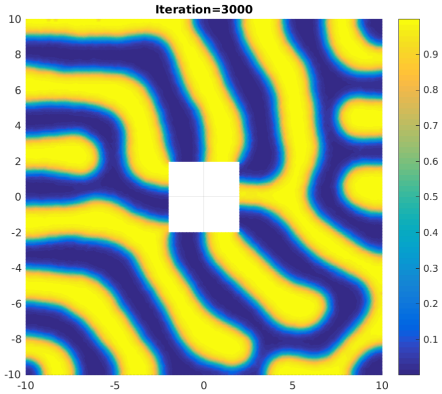

图 1: Test1 第 3000 步迭代图像.

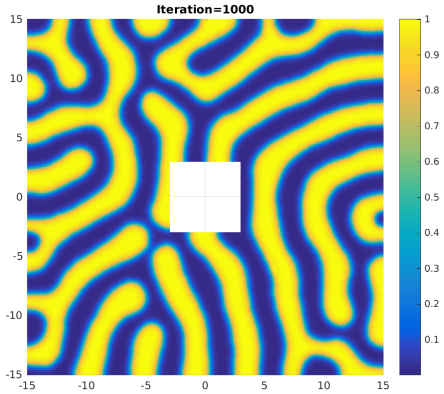

图 2: Test2 第 1000 步迭代图像.

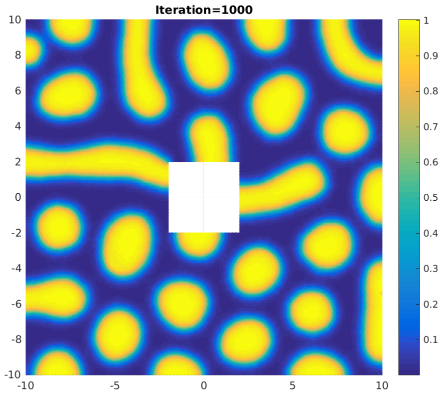

图 3: Test3 第 1000 步迭代图像.

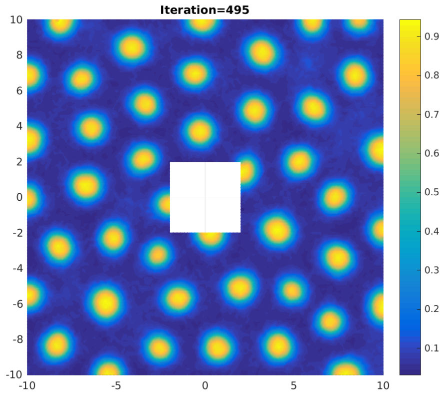

图 4: Test4 第 495 步迭代图像.

3　待解决的问题

1. 如何自适应地改变区域，从而重新网格剖分？

如下图所示，首先我们可以手动的改变控制顶点坐标，从而达到目的，但是，当区域复杂或者控制顶点更多时，手动操作则不便于处理，于是我们希望能够自适应地改变区域形状，以达到预期目的。

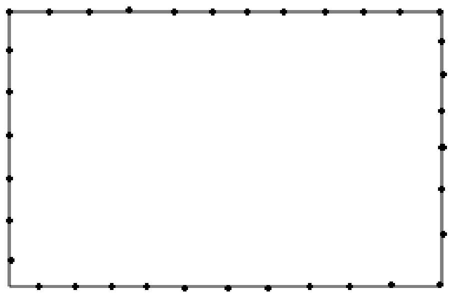

图 5: 原始区域.

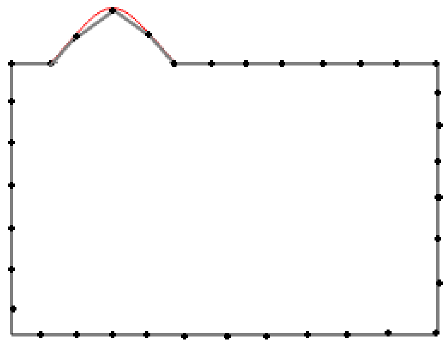

图 6: 调整后区域.

4　附录

4.1　网格剖分函数

外矩形边长: L

内矩形边长:l

获取区域函数 fd:ddiff(drectangle(p,-L,L,-L,L),drectangle(p,-l,l,-l,l))

网格剖分函数:[p,t]=distmesh2d(fd,fh,h,bbox,pfix]); %%fh 控制网格类型，h 控制网格大小，bbox 为最大边界，pfix 为控制顶点位置。

有限元网格剖分方法参见:http://persson.berkeley.edu/distmesh/index.html

4.2　FEniCS 使用

1.Docker 安装:

Sudo apt-get update

Sudo apt-get install docker-ce

2. 运行 FEniCS Docker 镜像:

Curl -s https://get.fenicsproject.org | bash

3. 检验:

Sudo docker run hello-world

4. 设置镜像：

Sudo docker pull quay.io/fenicsproject/stable:latest

5. 启动 fenics:

Sudo docker run -ti quay.io/fenicsproject/stable:latest

6. 主机与容器文件共享：

Sudo docker run -ti -v$(pwd):/home/fenics/shared quay.io/fenicsproject/stable:latest