

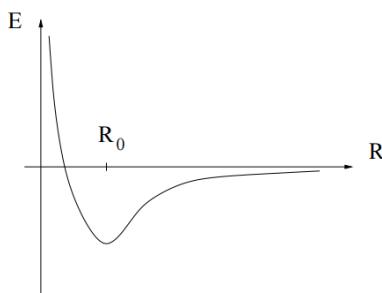
Fleksible biopolymerer – og grovere kabler

Alex Hansen, Jon Andreas Støvneng
Jonas Blomberg Ghini, Rita Dias

Februar 2017

1 Introduksjon

Tenk dere en polymer som har klebet seg fast til en overflate. Det er selvfølgelig molekylære krefter som står bak. Anta at polymerens bestanddeler inneholder elektriske ladninger eller dipolmoment. Ved hjelp av et sterkt nok elektrisk felt kan vi da dra polymeren løs fra overflaten.¹ Vi ønsker å modellere denne løsrivelsen. Hvis polymeren er bundet til en overflate, betyr det at det med jevne (eller ujevne!) mellomrom langs polymeren befinner seg “funksjonelle grupper” som kan danne mer eller mindre sterke bindinger til atomer i overflaten. En slik binding kan beskrives med en potensialfunksjon $E(R)$ som typisk kan se ut som i Fig. 1. Omkring likevekt kan potensialet med brukbar tilnærming betraktes som harmonisk, $E(R) = E_0 + \frac{1}{2}k(R - R_0)^2$, og man kan anslå hvor stor kraft som må til for å bryte den aktuelle bindingen mellom overflaten og polymeren.



Figur 1: Typisk potensial $E(R)$ som beskriver en kjemisk binding. Nær likevekt er potensialet tilnærmet harmonisk.

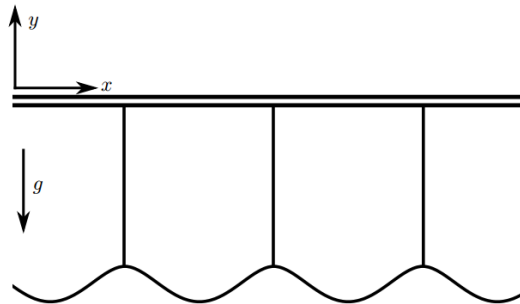
Denne problemstillingen, en polymer som rives løs fra en overflate ved hjelp av et elektrisk felt, er fullstendig analog til en makroskopisk kabel som er festet til taket med kroker, der krokene kan betraktes som ideelle

¹Vannmolekyler har også dipolmoment, og man kan bøye en vannstråle fra springen med en kam ladet med statisk elektrisitet. Dette er samme effekt.

fjærer: Kabelen representerer polymeren, gravitasjonsfeltet representerer det elektriske feltet, og fjærene representerer bindingene som holder polymeren festet til overflaten. Kabelmodellen gir et klassisk, makroskopisk bilde av problemet og er for de fleste enklere å ha en intuisjon om. Et elektrisk felt som gjøres gradvis sterkere, og som til slutt river polymeren løs fra overflaten, vil for eksempel være analogt til at en stålkabel rustet, noe som gradvis øker kabelens tyngde, slik at denne til slutt løsner fra taket og faller ned.

2 Hengende kabel

Fiberbuntmodellen² er perfekt til dette bruk. Den varianten som beskrives her, “bromodellen”, ble først studert av Nygård.³ Tenk dere en kabel som er hengt opp i taket. Kabelen løper parallelt med taket og er festet i kroker som er plassert i lik avstand fra hverandre (Fig. 2).



Figur 2: Kabel hengt opp i taket i kroker med lik innbyrdes avstand.

La oss videre anta at kabelens endepunkter er sveiset sammen slik at den er som en ring — og slik er den hengt opp. Den henger som en ring parallelt med taket. La oss anta at kabelen er lang slik at ringen er stor. Hva vi mener med “stor” vil bli klart senere i teksten.

La oss nå beskrive selve kabelen. La oss anta at den er jevnt tykk og har en masse λ per lengdeenhet. Kraften på kabelen fra gravitasjonsfeltet er da

$$f_g = -\lambda g \quad (1)$$

per lengdeenhet. Minustegnet tilsier at vi har valgt “oppover” som positiv retning. Vi innfører et koordinatsystem med en x -retning langs kabelen parallelt med taket og en vertikal y -retning. Vi antar i utgangspunktet at taket er plassert i høyden $y = 0$. Kabelen kan da beskrives ved funksjonen $y(x)$.

²Se A. Hansen, P. C. Hemmer og S. Pradhan, *The Fiber Bundle Model* (Wiley-VCH, Berlin, 2015) for en generell introduksjon til fiberbuntmodellen.

³H. Nygård, *The Fiber Bundle Bridge Model*, Project Thesis, NTNU, 2016.

Vi antar at kabelen har en stivhet slik at når kabelen bøyes, vil den generere indre krefter som motsetter seg dette (både normalspenning og skjærspenning). Med elastisitetsteori kan en vise at så lenge bøyningen ikke er stor, vil nettokraften per lengdeenhet som bøyningen genererer være gitt ved

$$f_b = -B \frac{d^4 y}{dx^4}. \quad (2)$$

Her er $B = EI$ kabelens bøyingsstivhet, gitt ved produktet av materialets elastisitetsmodul (Youngs modul) E og det såkalte “andre arealmomentet” I , en geometrisk faktor som for en kabel med sirkulært tverrsnitt er omtrent lik kabelens radius i fjerde potens ($I = \pi r^4/4$).⁴

For stål er $E \simeq 200$ GPa, for DNA-molekylet er $E \simeq 300$ MPa.

På grunn av at kabelen er plassert i en ring parallelt med taket, vil den også være bøyd i et plan parallelt med taket. Vi antar at ringen er så stor at vi kan se bort fra denne bøyningen i forhold til den som beskrives i ligning (2).

Vi har nå kommet til beskrivelsen av krokene. De er plassert langs ringen i avstand (målt langs ringen) l fra hverandre. Det er til sammen N kroker, og vi nummererer dem fra $k = 0$ til $k = N - 1$. Vi plasserer origo for x slik at posisjonen til krok k er $x_k = lk$. Krok k er da nabo til krokene $k - 1$ og $k + 1$, unntatt når $k = N - 1$ eller $k = 0$. Når $k = N - 1$, er naboen $k = N - 2$ og $k = 0$. Når $k = 0$, er nabokrokene $k = N - 1$ og $k = 1$.

Med andre ord, vi har innført *periodiske grensebetingelser*.

Vi antar at krok nummer k oppfører seg som en ideell fjær med fjærkonstant κ_k . Grunnen til at vi spesifiserer kroken her er at krokene vil ryke etterhvert som vi belaster kabelen.

Fjærkonstanten kan derfor ta to verdier: $\kappa_k = \kappa > 0$ for intakt krok og $\kappa_k = 0$ for røket krok. Vi kommer tilbake til dette senere.

Kraften per lengdeenhet på kabelen fra krok k er

$$f_k = -\kappa_k(y(x) - y_0)\delta(x - lk) \quad (3)$$

hvor $|y_0|$ er den ustrukkede lengden av krokene. Husk at både $y(x) < 0$ og $y_0 < 0$ siden kabelen og krokene henger *under* taket. Kraften fra krok k peker derfor oppover. Funksjonen $\delta(x - lk)$ er Diracs deltafunksjon, karakterisert ved $\delta(x - lk) = 0$ når $x \neq lk$ og $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - lk) = 1$.

Vi kan nå summere opp kreftene som virker på kabelen i x . Disse må summere seg til null siden kabelen ikke beveger seg:

$$f_b + f_g + f_k = 0. \quad (4)$$

⁴En kabel som bøyes, presses sammen på “innsiden” og strekkes på “utsiden”. Derav sammenhengen mellom Youngs modul E og bøyingsstivheten B . En planke med rektangulært tverrsnitt svaier mye mer når den holdes i begge ender med flatsida opp enn når den holdes på høykant. Andre arealmoment I ivaretar dette!

Kombinerer vi dette med ligningene (1) – (3), finner vi

$$B \frac{d^4 y(x)}{dx^4} = -g\lambda - \sum_{k=0}^{N-1} \kappa_k (y(x) - y_0) \delta(x - lk). \quad (5)$$

Denne ligningen beskriver kabelens form $y(x)$.

3 Løsning av kabelligningen

Kabelligningen er ligning (5). Én forenkling er opplagt: Vi flytter origo for y -aksen til y_0 . Ligning (5) blir da

$$B \frac{d^4 y(x)}{dx^4} = -g\lambda - \sum_{k=0}^{N-1} \kappa_k y(x) \delta(x - lk). \quad (6)$$

Neste skritt er å gjøre ligningen dimensjonsløs. La oss derfor innføre de nye dimensjonsløse variablene ξ og η definert ved

$$\begin{aligned} x &= l\xi, \\ y &= l\eta. \end{aligned} \quad (7)$$

Ligning (6) blir da

$$\frac{d^4 \eta(\xi)}{d\xi^4} = -\alpha - \sum_{k=0}^{N-1} \beta_k \eta(\xi) \delta(\xi - k) \quad (8)$$

hvor

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{g\lambda l^3}{B}, \\ \beta_k &= \frac{\kappa_k l^3}{B}, \end{aligned} \quad (9)$$

er to dimensjonsløse parametre som tilsvarende henholdsvis $g\lambda$ (kabelens tyngde per lengdeenhet) og κ_k (krokenes fjærkonstant). Vi har her benyttet oss av at $\delta(l\xi) = \delta(\xi)/l$.

La oss nå se på intervallet $k < \xi < k + 1$. I dette intervallet reduserer ligning (8) seg til

$$\frac{d^4 \eta(\xi)}{d\xi^4} = -\alpha. \quad (10)$$

Denne ligningen er enkel å løse. Vi finner

$$\eta_k(\xi) = -\frac{\alpha}{24} (\xi - k)^4 + a_k (\xi - k)^3 + b_k (\xi - k)^2 + c_k (\xi - k) + d_k \quad (11)$$

hvor $\eta_k(\xi)$ er løsningen til (10) – og derved ligning (8) – på intervallet $k < \xi < k + 1$. Koeffisientene a_k , b_k , c_k og d_k er så langt ubestemte integrasjonskonstanter. De må bestemmes.

La oss nå se hva som skjer i punktet $\xi = k$. Til “høyre” for $\xi = k$ har vi løsningen $\eta_k(\xi)$. Til “venstre” har vi løsningen $\eta_{k-1}(\xi)$. Vi integrerer nå ligning (8) over intervallet $k - \epsilon \leq \xi \leq k + \epsilon$ hvor $\epsilon \ll 1$. Dette gir

$$\frac{d^3\eta_k(k + \epsilon)}{d\xi^3} - \frac{d^3\eta_{k-1}(k - \epsilon)}{d\xi^3} = -2\epsilon\alpha - \beta_k\eta_k(k). \quad (12)$$

Vi lar nå $\epsilon \rightarrow 0$, og ligning (12) reduseres til

$$\frac{d^3\eta_k(k)}{d\xi^3} - \frac{d^3\eta_{k-1}(k)}{d\xi^3} = -\beta_k\eta_k(k). \quad (13)$$

I denne ligningen settes løsningen (11) inn, og man får med dette den første grensebetingelsen.

Ligning (13) forteller oss at den tredjederiverte av η (m.h.p. ξ) opplever et endelig sprang ved $\xi = k$. Det betyr at den andrederiverte er kontinuerlig i $\xi = k$.⁵ Når den andrederiverte er kontinuerlig, er den førstederiverte og funksjonen selv også kontinuerlige. Dette gir de tre resterende grensebetingelsene:

$$\frac{d^2\eta_k(k)}{d\xi^2} - \frac{d^2\eta_{k-1}(k)}{d\xi^2} = 0, \quad (14)$$

$$\frac{d\eta_k(k)}{d\xi} - \frac{d\eta_{k-1}(k)}{d\xi} = 0, \quad (15)$$

$$\eta_k(k) - \eta_{k-1}(k) = 0. \quad (16)$$

Hvis vi nå kombinerer grensebetingelsene (13) — (16) med løsningen (11), blir resultatet fire ligninger som kobler integrasjonskonstantene a_k , b_k , c_k , d_k til a_{k-1} , b_{k-1} , c_{k-1} , d_{k-1} , ett ligningssett for hver k fra $k = 0$ til $k = N - 1$.

Oppgave 1

Med en vektor \vec{x} definert som,

$$\vec{x} = [a_0, b_0, c_0, d_0 \dots a_k, b_k, c_k, d_k \dots a_{N-1}, b_{N-1}, c_{N-1}, d_{N-1}]^T, \quad (17)$$

formuler ligningssettet på formen,

$$A\vec{x} = \vec{u}. \quad (18)$$

Skriv ut matrisen A og vektoren \vec{u} , eksplisitt, for $N = 4$ kroker. Beskriv kort strukturen til matrisen, og identifiser effekten av de periodiske grensebetingelsene.

⁵Dersom $d^2\eta(\xi)/d\xi^2$ ikke er kontinuerlig i $\xi = k$, vil den tredjederiverte inneholde en deltafunksjon i $\xi = k$.

Det er enkelt å finne løsningen til dette ligningssettet når alle krokene er like, med like store fjærkonstanter slik at $\beta_k = \beta$. Av symmetri grunner må vi nå ha at alle $a_k = a$, $b_k = b$, $c_k = c$ og $d_k = d$, og ligningene (13) — (16) har løsningen (sjekk dette!)

$$\begin{aligned} a &= \frac{\alpha}{12}, \\ b &= -\frac{\alpha}{24}, \\ c &= 0, \\ d &= -\frac{\alpha}{\beta}. \end{aligned} \tag{19}$$

Oppgave 2a

Lag et program som løser (18), $A\vec{x} = \vec{u}$, for en kabel som er hengt opp i N identiske kroker. La “krokene” være elastiske stenger med lengde L , sirkulært tverrsnitt med radius r , og elastisitetsmodul E_1 (en materialkonstant). Kabelen kan også ha et sirkulært tverrsnitt, med radius R , og elastisitetsmodul E_2 . Avstanden mellom krokene er l . Plott kabelen — det vil si $\eta(\xi)$ — for noen forskjellige valg av parametre, dvs for noen forskjellige verdier av α og β , basert på den numeriske løsningen av (18). Bruk for eksempel `linalg.solve()` i `numpy`. Sammenlign med den analytiske løsningen (19). Vurder om løsningene er realistiske. Plott også $d\eta/d\xi$, $d^2\eta/d\xi^2$ og $d^3\eta/d\xi^3$, og kontroller på den måten at programmet gir resultater i samsvar med grensebetingelsene.

Oppgave 2b

Regn ut en rimelig tallverdi for β for et DNA-molekyl, med utgangspunkt i følgende antagelser: Molekylet er bundet til en overflate (for eksempel gull) med en binding for hver 5. nanometer (nm). Hver binding kan betraktes som en ideell fjær med likevektslengde (bindingslengde) 0.5 nm og fjærkonstant 0.1 N/m. Molekylet har et tilnærmet sirkulært tverrsnitt med radius 1 nm. Molekylet er typisk negativt ladet, i sine “naturlige omgivelser”, med ca to elementærladninger på en lengde 0.34 nm. Anta at denne ladningen er jevnt og kontinuerlig fordelt langs molekylet. Anta videre at en gitt binding mellom molekylet og overflaten tåler å strekkes ca 0.1 nm før den brytes. Med disse opplysningene kan du nå beregne omtrent hvor stor elektrisk feltstyrke E_0 som skal til for å bryte molekylets bindinger med overflaten, og den tilsvarende verdien av $\alpha = \lambda E_0 l^3 / B$. Her er λ molekylets ladning per lengdeenhet. Kjør programmet som løser (18) for et DNA-molekyl bundet med N bindinger til en overflate. Sett α lik den utregnede terskelverdien. Er modellen brukbar for dette systemet?

4 Løsrivelse

Nå vil vi anta at hver krok (eventuelt kjemisk binding) har et gitt maksimalt strekk den tåler før den ryker. Det vil si, vi gjør følgende antagelse:

$$\beta_k = \begin{cases} \beta & \text{hvis } |\eta(k)| < t_k, \\ 0 & \text{hvis } |\eta(k)| \geq t_k. \end{cases} \quad (20)$$

Her er t_k en bruddterskel for krok k .

Hver krok k , hvor $0 \leq k \leq N-1$, gis altså en terskelverdi t_k . Dette gjøres ved å sette t_k lik tilfeldig genererte tall mellom 0 og en valgt maksimalverdi t_{\max} .⁶

Vi ser nå for oss at vi øker verdien på α gradvis. Fysisk kan dette skje ved at kabelen ruster. En mer dramatisk situasjon ville tilsvare et overrissingsanlegg med hule rør som plutselig fylles med vann når brannalarmen går! Uansett scenario: En stadig tyngre kabel gjør at krokene begynner å ryke. Så snart en krok k har røket, setter man β_k lik null. Dette endrer A -matrisen, og man må løse systemet (18) på nytt for å finne den korrekte \vec{x} (som gir koeffisientene i (11), og dermed kabelens nye form $\eta(\xi)$). En åpenbar – men ikke spesielt gjennomtenkt – realisering av denne “algoritmen” er da å bare øke α steg for steg, og se hva som skjer med kabelen og krokene etter hvert enkelt steg.

Det finnes imidlertid en mye smartere måte å gjøre dette på: Man kan utnytte at problemet er lineært. Fra Oppgave 1 er det klart at høyresiden av (18), \vec{u} , kan skrives som $\alpha \vec{u}_{\text{ref}}$, der \vec{u}_{ref} er en referanse-last med $\alpha = 1$, med tilhørende løsning \vec{x}_{ref} . Dette betyr at

$$\begin{aligned} A\vec{x} &= \vec{u}, \\ A\vec{x} &= \alpha \vec{u}_{\text{ref}}, \\ A\vec{x} &= \alpha \cdot A\vec{x}_{\text{ref}}, \\ \vec{x} &= \alpha \vec{x}_{\text{ref}}. \end{aligned} \quad (21)$$

La oss nå anta at “neste krok som ryker” er krok nummer j . Dette betyr at vi evaluerer løsningen (11) i krokens posisjon $\xi = j$ rett før kroken ryker. Fra (11) er det klart at $\eta_j(j) = d_j$. Videre betyr dette at d_j akkurat nå må være lik det negative terskelstrekket, $-t_j$ (husk at “oppover” er definert som positiv retning). Lineariteten (i α) beskrevet ovenfor betyr at $d_j = \alpha d_{\text{ref},j}$, slik at

$$\frac{1}{\alpha} = -\frac{d_{\text{ref},j}}{t_j}. \quad (22)$$

Vi innfører nå forholdstallet

$$r_k = \left(-\frac{\beta_k \eta(k)}{t_k} \right)_{\alpha=1} \quad (23)$$

⁶Dette vil gi en uniform terskelfordeling, og tilsvarer at kvaliteten på takfestene varierer mellom “elendig” ($t_k \simeq 0$) og “bra” ($t_k \simeq t_{\max}$). Vi kunne selvsagt ha valgt andre fordelinger.

for alle krokene $k \in [0, N - 1]$. Hvilken krok ryker først? Jo, den kroken som har den største r_k -verdien! Hvorfor? Fordi r_k essensielt er forholdet mellom faktisk strekk og terskelstrekk. Hvorfor inkluderte vi β_k i r_k ? For å unngå å velge en krok som allerede har røket; en slik krok vil jo ha $\beta_k = 0$.

Når vi nå har identifisert krok nr j som den neste som ryker, kan vi i neste omgang regne ut den tilhørende verdien av α . Ved å kombinere (22) og (23) finner vi at

$$\alpha = \frac{\beta}{r_j}. \quad (24)$$

La oss oppsummere: Vi starter med alle krokene intakte. Vi finner k for den kroken som ryker først og den tilhørende verdien av α fra ligningene (23) og (24). La oss kalle denne verdien av α for α_1 . Nå settes β_k lik null, og matriseligning (18) løses på nytt. Deretter brukes (23) og (24) om igjen, og vi finner α_2 — verdien for α som gjør at krok nummer 2 ryker. Dette gjentas, slik at vi finner hele sekvensen α_n hvor $1 \leq n \leq N$.

Oppgave 3

Implementer denne algoritmen og plott α_n som funksjon av n/N for forskjellige verdier av parameteren β . Sørg for å midle over mange realiseringer, for hver verdi av β^7 . Finn sekvensen α_n for hver kabel og ta gjennomsnittet over alle simuleringer.

Hva skjer med $\max_n \alpha_n$ — altså den kraften som skal til for å få kablen løs fra taket — eller ekvivalent, det elektriske feltet som skal til for å løsne polymeren — som funksjon av verdien til β ?

Hvordan ser kurven for den midlere α_n ut for store og små verdier av β ? Her kan det være snakk om et spenn på flere størrelsesordner, men husk at modellen forutsetter en forholdsvis liten bøyning av kablen.

Sammenlign antallet kroker som typisk må ryke før hele kablen faller ned, for en stor og en liten verdi av β . Hvordan vil dere forklare forskjellen?

Studer rekkefølgen på krokene som ryker. Er rekkefølgen tilfeldig, eller vil plasseringen av neste krok som ryker påvirkes av plasseringen til siste krok som røk? Er svaret avhengig av verdien på β ?

Når antallet kroker og simuleringer nærmer seg noen hundre, vil en vanlig laptop allerede begynne å bruke mer tid enn en kunne ønske på å generere kurven for α_n . Om systemet en ønsker å løse er av størrelsesorden $N > 1000$, er det ikke formålstjenlig å forsøke å løse det med en *tett*⁸ ma-

⁷“Mange realiseringer” i denne sammenheng vil variere med antallet kroker i systemet, og med andre valgte parametre. Et rimelig valg kan være å simulere systemet like mange ganger som man har kroker. Tanken er altså å kjøre mange simuleringer av det samme systemet, med tilfeldig valgte terskelverdier i hver enkelt simulering.

⁸Engelsk: dense.



trise/ligningsløser (en matrise der alle nuller er tatt med), og man må formulere problemet på en slik måte at man kan bruke en *glissen*⁹ matrise, og en løsningsalgoritme som er optimalisert for et slikt problem.

Oppgave 4

Omformuler matriseligningen (18) så matrisens glisne struktur kan utnyttes. Bruk algoritmen fra Oppgave 3, men med flere kroker, og se hvilken effekt det har å løse systemet slik, med hensyn på tiden det tar¹⁰.

⁹Engelsk: sparse.

¹⁰I Python er den optimaliserte funksjonen `scipy.sparse.linalg.spsolve()` et godt sted å starte for løsning av glisne systemer.