

# Projektpraktikum Computational Physics

Michael Kenn

14. März 2013

## Zusammenfassung

Zusammenfassung der in der Lehrveranstaltung *260022 PR Praktikum Computational Physics* erzielten Ergebnisse. Es werden energetisch günstige Verteilungen von  $N$  gleichen Ladungen auf der Kugeloberfläche studiert. Als Potential wird das Kugeloberflächenpotential, also ein logarithmisches Potential verwendet. Besonders wird das Problem der langsamen Konvergenz in flachen Potentialregionen behandelt.

## 1 Einleitung

Eine Definition von Mathematik bezeichnet diese als die Suche nach abstrakten Mustern. So ist es nicht weiter verwunderlich, dass über kurz oder lang fast jeder Mathematiker auf das Problem der homogenen Verteilungen von Objekten in euklidischen Räumen stößt. Besonders berühmt sind dabei das Keplerproblem der dichtesten Packung von Kugeln [3] oder diverse Parkettierungsprobleme. Es ist beispielsweise schon lange bekannt, dass es genau 17 Symmetriegruppen von periodischen Mustern in der euklidischen Ebene gibt [4].

Mit zunehmender Dimension werden die Fragestellungen naturgemäß komplexer. Man muss aber nicht unbedingt in den unanschaulichen Bereich der 11-dimensionalen String-Theorie vordringen um interessante Problemstellungen zu finden. Mit einer der naheliegendsten Fragestellungen haben sich bereits die Griechen beschäftigt, nämlich mit der maßstabgetreuen Abbildung der Kugeloberfläche auf eine ebene Landkarte. Heute weiß man, dass dies nicht möglich ist. Als unmittelbare Konsequenz können deshalb auch bei Kristallisation auf der Oberfläche der Kugel keine periodischen Strukturen entstehen.

Hier setzen meine Untersuchungen an. Wie sind auf der Kugeloberfläche  $N$  Punkte zu plazieren, sodass diese möglichst gleichmässig verteilt sind. Es stellt sich sofort die Frage, was unter Gleichmässigkeit zu verstehen ist. Man könnte z.B. fordern, dass jeder Punkt Mittelpunkt von identen, paarweise disjunkten Kreisen mit maximalem Radius ist. Dieses Problem kommt aus der Biologie (um 1930) und wird nach seinem Erfinder Tammes-Problem [5] genannt.

Mein Ansatz ist mehr physikalischer Natur. Ich interpretiere die  $N$  Punkte als  $N$  gleiche Ladungen und plaziere sie so, dass das gesamte Kugeloberflächenpotential minimal wird. Verwendet man statt des Kugeloberflächenpotentials ein klassisches Potential im dreidimensionalen euklidischen Raum so handelt es sich dabei um das Thomson-Problem [6][7]. Diese Fragestellung wurde bereits 1906 im Zusammenhang mit möglichen Atommodellen formuliert.

## 2 Kugeloberflächenpotential

Der Laplace-Operator auf der Oberfläche der Einheitskugel in sphärischen Koordinaten ist

$$\Delta u(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2}$$

und die Lösung der zugehörigen Laplace-Gleichung

$$\Delta(u(\theta, \varphi | \theta_0, \varphi_0)) = -\frac{1}{4\pi} \delta(\phi - \phi_0) \delta(\cos \theta - \cos \theta_0)$$

lautet

$$u(\theta, \varphi | \theta_0, \varphi_0) = -\frac{1}{2\pi} \log \left( 2 \sin \frac{\hat{d}}{2} \right) = -\frac{1}{2\pi} \log(|\vec{r} - \vec{r}_0|)$$

Hier bezeichnet  $\hat{d}$  die kürzeste Distanz zwischen den beiden Punkten  $P(\theta, \varphi)$  und  $P_0(\theta_0, \varphi_0)$  auf der Kugeloberfläche, also entlang eines Großkreises. Es gilt<sup>1</sup>

$$\cos \hat{d} = \cos \theta \cos \theta_0 + \sin \theta \sin \theta_0 \cos(\varphi - \varphi_0)$$

Man interpretiert die  $N$  Punkte auf der Kugeloberfläche als  $N$  gleiche Ladungen und definiert das Gesamtpotential als ein Mass für die Gleichmässigkeit einer Konstellation. Um die  $N$  Punkte in diesem Sinne möglichst gleichmässig auf der Kugeloberfläche zu verteilen muss demnach die Funktion

$$V_{1,1}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) = - \sum_{1 \leq i < j \leq n} \log(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|)$$

minimiert werden. Das ist äquivalent mit der Minimierung von

$$\begin{aligned} V_{\alpha,\beta}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) &= - \sum_{1 \leq i < j \leq N} \log(\alpha d_{ij}^\beta) \\ &= - \binom{N}{2} \log \alpha + \beta V_{1,1}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) \end{aligned}$$

für beliebige  $\alpha, \beta > 0$  und  $d_{ij}$  die euklidische Distanz zwischen zwei Punkten. Für die Suche nach dem energetischen Minimum haben sich  $\alpha = 1$  und  $\beta = 2$  als rechentechnisch vorteilhaft herausgestellt.

Ein großer Vorteil dieses Kugeloberflächenpotentials ist, dass der Ladungsschwerpunkt stets im Mittelpunkt der Kugel liegt. Der Beweis dafür ist nicht sonderlich schwierig und geht recht elegant über Lagrange-Multiplikatoren.

**Satz:** Der Ladungsschwerpunkt des Kugeloberflächenpotentials liegt für ein energetisches Minimum im Kugelmittelpunkt.

---

<sup>1</sup>Im Gegensatz dazu ist  $|\vec{r} - \vec{r}_0|$  der Abstand der Sehne von  $\vec{r}_0$  nach  $\vec{r}$ .

**Beweis:** Es gilt zu zeigen, dass aus

$$- \sum_{1 \leq i < j \leq N} \log(d_{ij}^2) + \sum_{i=1}^N \lambda_i (x_i^2 + y_i^2 + z_i^2 - 1) \rightarrow \min \quad (1)$$

mit

$$d_{ij}^2 = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 = 2 - 2(x_i x_j + y_i y_j + z_i z_j) \quad (2)$$

folgt, dass der Ladungsschwerpunkt im Zentrum der Kugel sitzt, d.h.

$$\sum_{i=1}^N x_i = \sum_{i=1}^N y_i = \sum_{i=1}^N z_i = 0$$

Differenzieren von (1) nach jeweils  $x_i$ ,  $y_i$  und  $z_i$  und gleichsetzen mit 0 liefert

$$- \sum_{j \neq i} \frac{2(x_i - x_j)}{d_{ij}^2} + 2\lambda_i x_i = 0 \quad (3)$$

$$\lambda_i x_i = \sum_{j \neq i} \frac{(x_i - x_j)}{d_{ij}^2} \quad y_i, z_i \text{ analog} \quad (4)$$

Multipliziert man die Gleichung (4) mit  $x_i$  (resp.  $y_i$ ,  $z_i$ ), verwendet (2) und nützt aus, dass  $(x_i, y_i, z_i)$  auf der Kugeloberfläche liegt

$$\lambda_i = \lambda_i (x_i^2 + y_i^2 + z_i^2) = \sum_{j \neq i} \frac{x_i^2 - x_i x_j + y_i^2 - y_i y_j + z_i^2 - z_i z_j}{d_{ij}^2} = \sum_{j \neq i} \frac{\frac{1}{2} d_{ij}^2}{d_{ij}^2} = \frac{N-1}{2}$$

so folgt daraus, dass alle  $\lambda_i$  gleich sind.

$$\lambda = \lambda_1 = \dots = \lambda_N = \frac{N-1}{2}$$

Summiert man abschließend die Gleichung (4) über alle  $i$  auf, so ergibt das

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \lambda_i x_i &= \sum_{i=1}^n \sum_{j \neq i} \frac{x_i - x_j}{d_{ij}^2} \\ \lambda \sum_{i=1}^N x_i &= 0 \end{aligned}$$

und folglich  $\bar{x} = \bar{y} = \bar{z} = 0$ , was zu zeigen war.

Bei räumlichen  $\frac{1}{r}$ -Potentialen ist diese Eigenschaft im Allgemeinen nicht gegeben. Gegenbeispiele sind die Dipole bei den Grundzuständen für  $N = 11, 13, 19, 21, \dots$  Ladungen.

Problematisch bei der Suche nach energetischen Minima sind die für wachsendes  $N$  immer flacher werdende Potentiale. Dadurch entstehen auch immer mehr lokale Nebenminima. Erschwerend kommen vereinzelt Potentialbereiche dazu, die so flach sind, dass mit gängiger numerischer Auflösung praktisch kein Gradient mehr gefunden werden kann. Deshalb ist es notwendig bei der Suche nach energetischen Minima zwischen vielen verschiedenen Methoden zu variieren. Einige Strategien werden im Folgenden besprochen.

### 3 Begriffe und Konventionen

Um die Suchalgorithmen gut beschreiben zu können ist es erforderlich einige Begriffe einzuführen und Konventionen festzulegen.

#### Polarkoordinaten auf der Oberfläche der Einheitskugel

Diese sind, wie üblich, gegeben durch

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix}$$

#### Verschiebung eines Punktes

Die Verschiebung eines einzelnen Punktes auf der Kugeloberfläche ist eine 2-parametrische Operation. Für die Parameter  $\psi \in [0, 2\pi)$  und  $\hat{d} \in [0, \pi)$  erfolgt die Verschiebung um eine Distanz  $\hat{d}$  entlang des Großkreises mit Tangentialvektor

$$\vec{t} = \begin{pmatrix} \sin \varphi \cos \psi + \cos \theta \cos \varphi \sin \psi \\ -\cos \varphi \cos \psi + \cos \theta \sin \varphi \sin \psi \\ -\sin \theta \sin \psi \end{pmatrix}$$

#### Abstand zweier Konstellationen

Ein wichtiges Konzept ist auch der Abstand zwischen zwei Anordnungen von jeweils  $N$  Punkten auf der Kugeloberfläche. Dabei werden die Konstellationen solange gedreht und die Punkte permutiert, bis die Summe der Betragsabstände entlang von Großkreisen minimal wird. Dieser Wert bezeichnet den Abstand zwischen zwei Konstellationen.

Diese Definition ist natürlich nur eine mögliche, erfüllt aber die notwendigen Anforderungen. Die Berechnung ist jedoch nicht ganz einfach, da zumindest eine Konstellation gedreht und die Punkte geeignet permutiert werden müssen.

## 4 Suchalgorithmen zum Auffinden energetischer Minima

### 4.1 Die Strategien im Überblick

#### Naive Monte-Carlo Suche

Diese Methode bezeichne ich als *naive* Monte-Carlo Suche da keinerlei a-priori Information über die Richtung des Gradienten verwendet wird. Die Punkte werden zufällig auf der Kugeloberfläche verschoben, wobei die Distanz der Verschiebung kontinuierlich reduziert wird. Eine Verschiebung wird akzeptiert, wenn die neue Konstellation gegenüber der alten Konstellation ein niedrigeres energetisches Niveau aufweist.

Diese Methode ist bestenfalls dafür geeignet einen groben Überblick zu gewinnen. Die zu akzeptierenden Züge werden sehr schnell selten und es ist deshalb kaum möglich eine Rechengenauigkeit zu erzielen, die es erlaubt zwischen einzelnen Energieniveaus zu unterscheiden.

## Gradient über Kraftvektor

Wie bereits gezeigt hat das Kugeloberflächenpotential die angenehme Eigenschaft, dass energetische Minimalkonfigurationen kein Dipolmoment besitzen, dass also der Ladungsschwerpunkt immer im Koordinatenursprung liegt. Bildet man den (negativen) Summenvektor über alle Ladungskoodinaten, so erhält man eine Raumrichtung, in welche die Punkte bevorzugte verschoben werden sollten. Allerdings muss berücksichtigt werden, dass die Ladungen nach einer Verschiebung in diese Richtung wieder auf die Kugeloberfläche zurückprojiziert werden müssen. Steht die bevorzugte Raumrichtung annähernd normal auf die Tangentialebene der Ladung, so findet kaum eine Verschiebung statt. Diese Methode ist deshalb nur geeignet, zufällige Startpositionen in die Nähe von potentiellen Minima zu bringen. Große Genauigkeiten sind damit nicht erreichbar.

## Downhill-Simplex-Verfahren

Das Downhill-Simplex-Verfahren beruht auf der Idee, den Lösungsraum systematisch einzugrenzen. Es ist kein Gradientenverfahren und konvergiert deshalb entsprechend langsam. Dafür landet man aber (zumindest theoretisch) immer in einem lokalen Minimum.

Ein Nachteil ist der nicht ganz unerhebliche Implementierungsaufwand. Da jeder Punkt auf der Kugeloberfläche durch die beiden Parameter  $\theta$  und  $\varphi$  gegeben ist, hat das zugrundeliegende Simplex zumindest die Dimension  $2N + 1$ . Dazu kommt, dass bei großem  $N$  und daher flachen Potentialen die Konvergenz extrem langsam wird. Für  $N \leq 15$  ist das Downhill-Simplex-Verfahren gut geeignet, für  $N \geq 16$  wird es sehr schnell unbrauchbar.

## Approximierte Gradienten

Mit diesem Ansatz wurden die besten Erfolge erzielt und ein Großteil der Berechnungen beruht demnach darauf. Da der exakte Gradient für einen einzelnen Punkt wegen der Kugelgeometrie nicht leicht berechenbar ist, wählt man drei Punkte in seiner Umgebung<sup>2</sup>, interpoliert die zugehörigen Potentialwerte mit einer Ebene und bestimmt den Gradienten dieser Ebene. Dieser approximierte Gradient ist nur deshalb eine gute Näherung, da das Potential um die meisten Punkte sehr glatt ist. Abbildung 1 zeigt so eine Potentiallandschaft für einen von  $N = 21$  Punkten.

Die Verschiebung eines Punktes geschieht in der  $k$ -ten Iteration um eine bestimmte Distanz  $d^{(k)}$ . Diese Distanz wird im Laufe der Suche systematisch reduziert, also  $d^{(k+1)} = \lambda d^{(k)}$  mit  $\lambda < 1$ . Eine gute Parameterisierung ist beispielsweise  $d^{(0)} = 0.1$  und  $\lambda = 0.8$ . Je nach gewünschter Genauigkeit wurden 60 bis 180 Iterationen durchgeführt. Für den Zeitpunkt des Wechsels von der  $k$ -ten Iteration zur  $k + 1$ -ten Iteration wurden zwei Strategien angewendet:

- Die schnelle Suche: Es wird der Reihe nach jeweils einer der  $N$  Ladungspunkte zufällig gewählt. Bringt eine Verschiebung um die Distanz  $d^{(k)}$  in Richtung des approximierten Gradienten eine Verbesserung, so wird diese durchgeführt. Bringen  $\sqrt{N}$  aufeinanderfolgende Versuche keinen Treffer, so geht man zum  $k + 1$ -ten Iterationsschritt, reduziert also die Verschiebungsdistanz gemäß  $d^{(k+1)} = \lambda d^{(k)}$  und beginnt die Suche von Neuem.
- Die genaue Suche: Die  $N$  Punkte werden zyklisch durchprobiert. Erst sobald  $N$  aufeinanderfolgende Fehlversuche beim Verschieben vorliegen, also sobald keiner der  $N$  Punkte mehr bei der Verschiebung um die Distanz  $d^{(k)}$  in Richtung des approximierten Gradienten eine Verbesserung bringt, geht man zum  $k + 1$ -ten Iterationsschritt über, reduziert also wieder  $d^{(k+1)} = \lambda d^{(k)}$ .

---

<sup>2</sup>Diese bilden idealerweise ein gleichseitiges Dreieck dessen Schwerpunkt der Punkt ist.

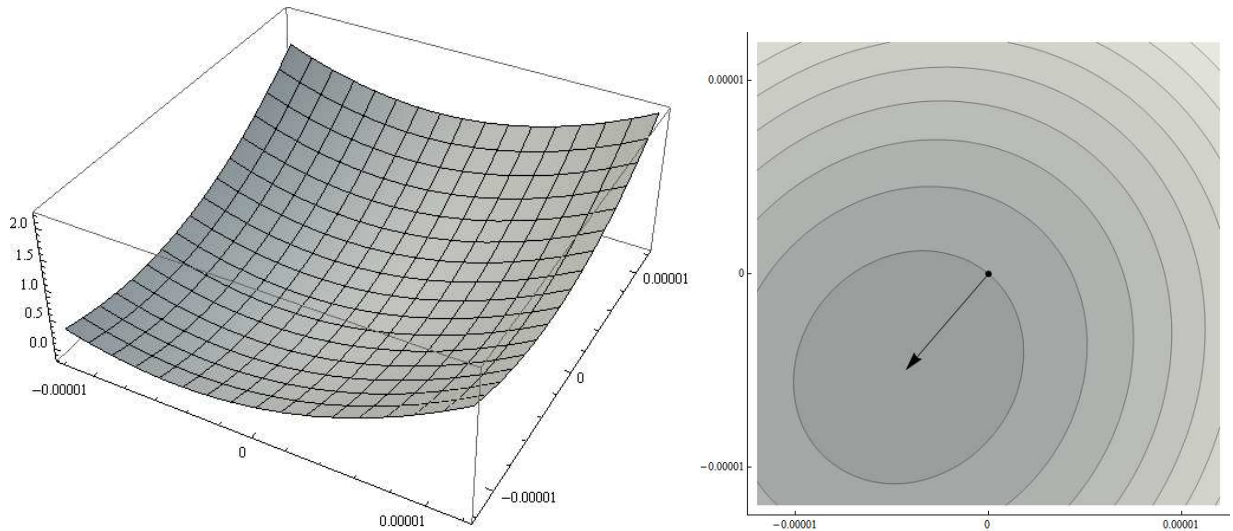


Abbildung 1: Potentiellandschaft für einen von  $N = 21$  Punkten während der Berechnung. Der Punkt liegt aktuell noch ca.  $5 \cdot 10^{-6}$  (Einheitsradien) vom energetischen Minimum entfernt. Es ist aber keinesfalls sicher, dass unter Einbeziehung aller anderen Punkte das Minimum so direkt, wie eingezeichnet, erreicht werden kann. Die Energien (links) sind mit dem Faktor  $10^9$  skaliert.

Die schnelle Suche wurde bei den Berechnungen mit niedriger Genauigkeit und großer Anzahl von verschiedenen Startpositionen gewählt. So ist es möglich, verhältnismässig schnell viele Kandidaten von energetischen Minima zu lokalisieren. Die genaue Suche ist dann notwendig, wenn der Weg durch die hochdimensionale Potentiellandschaft verschlungen ist. Der Gesamtaufwand ist aber um mehrere Größenordnungen höher. Dafür ist es bei der genauen Suche möglich, den Algorithmus auch aus sehr flachen Potentialregionen herauszuführen. Das ist insofern wichtig, da nur so echte lokale Energieminima von Rechenartefakten unterschieden werden können.

### Adaptiertes Metropolis-Verfahren

Das Metropolis-Verfahren wird gewöhnlich verwendet um nicht in lokalen Minima hängen-zubleiben. Um das zu erreichen werden nicht nur notwendigerweise Züge akzeptiert die eine Verbesserung bringen sondern auch solche, die den Gesamtwert des Potentials nicht allzuviel erhöhen. Dieses Verfahren ist hier ungeeignet, da es die schon langsame Konvergenz noch weiter beeinträchtigt.

Eine Adaption des Metropolis-Verfahrens kann dagegen sehr hilfreich sein, wenn der Suchalgorithmus in flache Potentialgegenden kommt. Hier kann es passieren, dass numerisch kaum mehr ein signifikanter Gradient feststellbar ist. Tritt dieser Fall ein, wird das System ein wenig manipuliert. Das geschieht entweder durch eine Erhöhung der erlaubten Schrittweite oder auch durch Addition einer zufälligen zusätzlichen Verschiebung<sup>3</sup>.

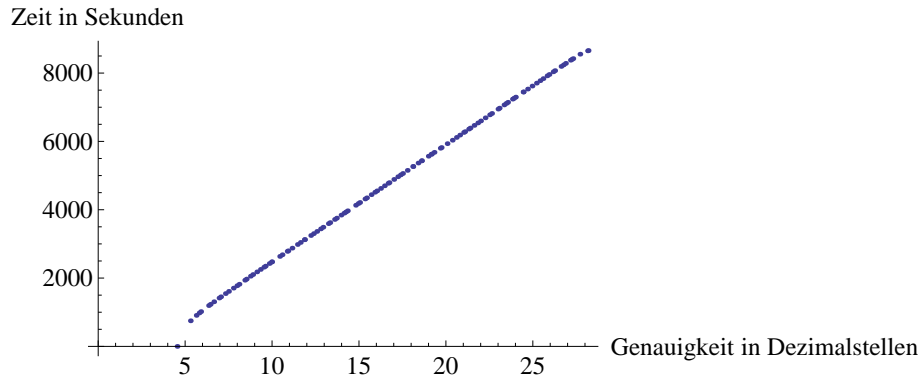


Abbildung 2: Linearer Zusammenhang zwischen Rechenzeit (y-Achse) und Rechengenauigkeit (x-Achse) für eine (schwierige) Suche mit  $N = 29$  Punkten. Der Algorithmus muss sich erst mühsam seinen Weg durch die Potentiallandschaft suchen.

## 4.2 Systematisierte Vorgehensweise

Leider werden für wachsendes  $N$  die Potentiale in den Umgebungen der meisten energetischen Minimalkonfigurationen immer flacher. Zudem sind die Schwankungen im Potential um viele Größenordnungen kleiner als die Verschiebungsdistanzen der einzelnen Punkte. Mit gewöhnlicher 128-Bit-Double-Precision Arithmetik stößt man schnell an die Grenzen der Auflösbarkeit. Es entstehen Gruppen von Energieniveaus die an Feinstrukturen erinnern, aber größtenteils nur Artefakte der unzureichenden Rechengenauigkeit sind. Eine 128-Bit-Quadruple-Precision Arithmetik behebt diese Probleme. Der Aufwand ist jedoch deutlich größer und es ist nicht mehr möglich im großen Umfang Startpositionen durchzutesten. Es muß deshalb eine Kombination der beiden Arithmetiken angewandt werden.

### Double-Precision Berechnungen

Im ersten Durchgang wird für alle  $N \leq 100$  und für jeweils zumindest 100000 verschiedene, zufällige Startkonstellationen das approximierte Gradientenverfahren mit der schnellen Suche durchgeführt. Alle potentiellen Kandidaten für lokale Energieminima werden mitprotokolliert. Wegen der oben besprochenen Problematik sind jedoch einige dieser Kandidaten nur Artefakte. Zusätzlich werden auch auffällige Konstellationen vermerkt, also z.B. Konstellationen mit stark abweichender Rechenzeit. Da es sich hier um über 10 Millionen Berechnungen handelt wird auf einen Cluster mit 48 CPUs zurückgegriffen.

Bereits für  $N = 7$  reicht die Double-Precision Rechengenauigkeit nicht mehr aus um das Problem auf 9 Stellen Genauigkeit zu lösen. Ab  $N \geq 21$  erhält man zahlreiche Formen von Rechenartefakten, insbesondere das Auffächern von Energieniveaus wegen der zu geringen Auflösung.

### Quadruple-Precision

Der Rechenaufwand für Quadruple-Precision Berechnungen ist um einige Größenordnungen höher

---

<sup>3</sup>Das ist beispielsweise vergleichbar mit einem leichten Stoß beim Tischfußball, wenn der Ball sich nicht mehr mit den Figuren bewegen läßt.

als für Double-Precision Berechnungen. Es können deshalb nur noch ausgewählte Versuche wiederholt werden. Das sind insbesondere jene Konstellationen, wo die Double-Precision Genauigkeit die Energieniveaus splittet. Mit 128-Bit-Quadruple-Precision können diese Effekt aufgehoben werden. Berechnungen auf 24 Dezimalen Genauigkeit sind in den meisten Fällen problemlos durchzuführen, wobei im Normalfall ein linearer Zusammenhang zwischen Rechengenauigkeit und Zeitaufwand besteht. Es gibt vereinzelt Problemfälle, in denen der Algorithmus mit Double-Precision Genauigkeit in einem sehr flachen Potentialgebiet hängenbleibt und von dort erst mühsam mit Quadruple-Precision herausgeführt werden muss. Solche Berechnungen können um den Faktor 100-1000 länger dauern, landen dafür aber immer in einem echten energetischen Minimum<sup>4</sup>.

## 5 Results

Ziel ist es, nicht nur die energetischen Grundzustände zu finden, sondern auch so viele wie mögliche lokale Minima zu klassifizieren.

### 5.1 Energetische Minimalkonfigurationen

Tabelle 1 zeigt die Anzahl der gefundenen energetischen Minimalkonfigurationen für die einzelnen  $N$ , die Energiewerte dieser Konfigurationen mit bis zu 24-stelliger Genauigkeit, sowie die Differenz zum Grundniveau (skaliert mit dem Faktor  $10^3$ ). Die vorletzte Spalte gibt an, wie groß ungefähr die Wahrscheinlichkeit ist, für eine zufällige Startkonstellation bei der Suche entlang approximierter Gradienten in diesem Minimum zu landen. In der letzten Spalte ist ein Index für die Komplexität der Suche angeführt. Dieser Komplexitätsindex ist in etwa von der Größenordnung des dekadischen Logarithmus der Rechenzeit in Sekunden bei einer normal günstigen Ausgangskonstellation. Es gibt allerdings einige Fälle, wo die Suche auch um mehrere Zehnerpotenzen länger dauern kann.

Mit Ausnahme von  $N = 46$  stimmen diese Werte mit [1] überein<sup>5</sup>. Für  $N = 46$  ist der in [1] angegebene Wert nur das drittniedrigste Energieniveau. Warum das Grundniveau übersehen wurde liegt wahrscheinlich daran, dass bei nur 14% aller Startkonstellationen das globale Energieminimum erreicht wird.

### 5.2 Exakte Resultate

Für kleine  $N$  ist es möglich die exakten Werte der energetisch günstigsten Konstellation als geschlossenen Ausdruck anzuschreiben. In Tabelle 5 ist eine Auswahl angeführt.

## A One-Component Plasma

Die hier behandelte Problemstellung findet sich wieder in der Theorie des One-Component Plasmas in zwei Dimensionen. Dabei handelt es sich um ein insgesamt ladungsneutrales Fluid mit  $N$  gleichen Punktladungen und einer entgegengesetzten, kompensierenden Hintergrundladung in einem zweidimensionalen Gebiet. In [2] wird so ein Plasma auf der Kugeloberfläche studiert. Es wird von

---

<sup>4</sup>Die Wege, wie aus so einer Gegend herausgeführt wird, sind interessant zu studieren. Zunächst werden die Punkte eher zufällig hin- und hergeschoben. Irgendwann erkennt der Algorithmus das Ziel und bewegt sich ab dann langsam, aber zielstrebig auf das energetische Minimum zu.

<sup>5</sup>einen offensichtlichen Druckfehler für  $N = 19$  ausgenommen



einer durchschnittlichen Ladungsdichte  $\rho = \frac{1}{a^2\pi}$  ausgegangen, was einen Kugelradius  $R = a\sqrt{\frac{N}{4}}$  erfordert. Wegen des neutralisierenden Hintergrunds muss zum Potential noch ein konstanter Term addiert werden. Die Gesamtenergie ist dann

$$E = V_R + \frac{1}{4}N^2(2\log(2R) - 1),$$

wobei sich  $V_R$  jetzt auf eine Kugel mit Radius  $R$  bezieht, also  $V_R = V + \binom{N}{2} \log R$ . Setzt man oBdA  $a = 1$  ergibt sich so ein durchschnittlicher Energiewert pro Ladung von

$$E/N = \frac{V}{N} + \frac{2\log 2 - 1}{4}N + \frac{1}{4}\log N - \frac{1}{2}\log 2$$

Dieser Wert liegt nach [2] für wachsendes  $N$  bei

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{E}{N} = E^* \approx -0.372$$

Tabelle 6 zeigt die Übereinstimmung mit den Ergebnissen dieser Arbeit. Eine unmittelbare Konsequenz ist das asymptotische Verhalten von  $V$  für  $N \rightarrow \infty$ :

$$V \sim -\frac{2\log 2 - 1}{4}N^2 - \frac{1}{4}N \log N + (E^* + \frac{1}{2}\log 2)N$$

## B Weitere Aktivitäten

Dieser Bericht dient als Grundlage für eine mögliche spätere Diplomarbeit. Folgende Punkte wurden bereits erarbeitet, aber hier noch nicht aufgenommen.

- Distanzen und Energiebarrieren zwischen Minimalkonstellationen
- Symmetrien und geometrische Eigenschaften von Minimalkonstellationen
- Energieminima für  $N > 65$
- Konvergenzanalyse, Eigenschaften des Suchwegs
- Ein Beweis für die Ladungsneutralität von Minimalkonstellationen
- Eine Einführung in die Theorie der Greenschen Funktionen
- Detailanalyse des Downhill-Simplex-Verfahrens
- Verrauschen von Minimalkonstellationen, wie schaut die Umgebung aus?
- GNU-MP Multiple Precision Arithmetic Library Implementierung in C
- Alternatives  $\frac{1}{r}$ -Potential (Thomson-Problem)
- Zufügen von kinetischer Energie zur Beschleunigung der Algorithmen (in Arbeit)
- Erweiterung auf höhere Dimensionen (in Arbeit)

## C Nachtrag

### C.1 Reproduzierbarkeit und Genauigkeit

Sämtliche energetischen Minima wurden reproduziert, d.h. sie wurden mit zumindest zwei verschiedenen Startpositionen erreicht. In der Regel unterscheiden sich die originalen von den reproduzierten Werten nicht vor der 30. Dezimalstelle. Ausnahme bilden die extrem flache Potentiale für  $N = 54$ , wo auch nach über einem Tag Rechenzeit eine Diskrepanz von bis zu  $\Delta E = 1.07 \cdot 10^{-27}$  auftritt. Das ist jedoch noch immer deutlich weniger als die hier angegebene Genauigkeit von 24 Stellen.

### C.2 Falsifizieren und Filtern

Nicht jedes irrtümlich wegen der unzureichenden Rechengenauigkeit der Double-Precision Arithmetik gefundene Plateau kann bis zu seinem tatsächlichen Minimum geführt werden. Es reicht aber natürlich aus, solange zu rechnen, bis der vermeindliche, minimale Potentialwert signifikant unterschritten wird. Damit steht fest, dass es sich nicht um ein echtes Minimum handeln kann sondern lediglich um ein Gebiet mit Gradient kleiner als der Rechengenauigkeit der Double-Precision Arithmetik. Zwei solche Rechenverläufe sind in Abbildung 2 dargestellt. Bei der ersten Darstellung wurde bis knapp zum tatsächlichen Minimum weitergerechnet.

## Literatur

- [1] B. Bergersen, D. Boal, P. Palffy-Muhoray  
Equilibrium configurations of particles on a sphere: the case of logarithmic interactions  
J. Phys. A: Math. Gen. 27 (1994) 2579-2586
- [2] J. M. Cailloi, D. Levesque, J. J. Weis, J. P. Hansen  
A Monte Carlo Study of the Classical Two-Dimensional One-Component Plasma  
Journal of Statistical Physics, Vol 28, No. 2, 1982
- [3] George G. Szpiro  
Kepler's Conjecture  
John Wiley & Sons, 2003
- [4] Clare E. Horne  
Geometric Symmetry in Patterns and Tilings  
Woodhead Publishing Limited in association with The Textile Institute
- [5] Aste T. Weaire  
The Pursuit of Perfect Packing  
Taylor & Francis, 2008
- [6] E. L. Altschuler, A. Perez-Garrido  
Global minimum for Thomson's problem of charges on a sphere  
PHYSICAL REVIEW E 71, 047703 s2005d
- [7] E. L. Altschuler, A. Perez-Garrido  
New Global Minima for Thomson's Problem of Charges on a Sphere  
eprint arXiv:cond-mat/0408355, 2004

$N$	#	$V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$	$\Delta V [10^3]$	Prop.	Kompl.
2	1	-0.693147180559945309417232			-
3	1	-1.647918433002164537092868			-
4	1	-2.942487759035178710569353			-
5	1	-4.420507155241945774761796			-
6	1	-6.238324625039507784755089			-
7	1	-8.182477864444922793005291			-
8	1	-10.428017781460197672127012			-
9	1	-12.887752725759278961702759			-
10	1	-15.563123389021939110326128			-
11	1	-18.420479720831001776440247			I
12	1	-21.606145230444884802525930			-
13	1	-24.866721875506090842746504			II
14	1	-28.407813009242460570065484			I
15	1	-32.147876283841662283388990			I
16	2	-36.106152161950606872584958		74%	I
		-36.102794729944074383933090	3.357432	26%	I
17	1	-40.273066961181163268822204			II
18	1	-44.650287259230725355501570			II
19	1	-49.199891565786514012464541			III
20	1	-54.011129974584163618027211			II
21	1	-59.000912135142384793373630			III
22	2	-64.206007761660547302849362		95%	II
		-64.198879005420061087063475	7.128756	5%	II
23	1	-69.578382592525104904586159			II
24	1	-75.213984788628516935899124			II
25	1	-80.997509990196780510026924			IV
26	1	-87.009423057047187019147110			III
27	1	-93.251986400004520668772142			II
28	1	-99.658609384124815233924561			II
29	2	-106.254571170834637823388115		> 98%	IV
		-106.254460512952294147572163	0.110658	< 2%	IV
30	1	-113.089255496513995150660137			III
31	1	-120.110346639522301447435425			II
32	2	-127.378867614780262187143140		> 98%	II
		-127.305333254714196170896164	73.534360	< 2%	II
33	1	-134.747820824333405159397449			IV+
34	1	-142.375852270901584056549823			III
35	2	-150.192058510738103068725224		62%	III
		-150.191609899939444642561983	0.448611	38%	III
36	1	-158.224068425587975294284242			IV+

Tabelle 1: Energetische Minimalkonfigurationen

$N$	#	$V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$	$\Delta V [10^3]$	Prop.	Kompl.
37	2	-166.450697523997694266187040		23%	III
		-166.447306185633048048202300	3.391338	77%	IV-
38	2	-174.880197151815063945176164		46%	III
		-174.876145747430877263981698	4.051404	54%	III
39	2	-183.509225711855253091246470		68%	III
		-183.493437252451759217507710	15.788459	32%	IV-
40	3	-192.337689917348233233456043		67%	III
		-192.323572281137480608216672	14.117636	27%	IV
		-192.316850670389418766353479	20.839247	6%	III
41	2	-201.359206648663410088223775		93%	III
		-201.342739256251255369383929	16.467392	7%	III
42	3	-210.584511557633906971876019		> 98%	II
		-210.564871426301608787578219	19.640131	1.6%	III
		-210.522629516475870163260514	61.882041	0.01%	II
43	1	-220.003477051850697380159335			IV
44	1	-229.641801487596826253741492			IV-
45	1	-239.453698253452560360309466			IV-
46	4	-249.455847900857093315696538		14%	III
		-249.454650351476959057128964	1.197549	68%	III
		-249.452540703749584831761999	3.307197	17%	III
		-249.431405438103380291144449	24.442463	0.6%	IV
47	5	-259.661759853265078668736875		58%	III
		-259.660827816124632230953890	0.932037	27%	IV
		-259.657239411436534802026589	4.520442	8%	IV
		-259.654525655095100040340003	7.234198	6%	III
		-259.638965539039440256481239	22.794314	0.1%	IV
48	1	-270.117949959282691538022245			III
49	1	-280.701903118256133715559420			III
50	1	-291.528600657734369027546039			III
51	3	-302.533673455433193188400178		98%	III
		-302.502027136808846345555836	31.646319	1.6%	III
		-302.501865234253724788365021	31.808221	0.3%	III
52	4	-313.732371935326947670648980		60%	III
		-313.731571370943957373603126	0.800564	31%	III
		-313.728177334782326702094141	4.194601	9%	III
		-313.726448866582644624321526	5.923069	0.02%	IV
53	2	-325.138234695020675060643834		65%	IV+
		-325.136167902028578304005723	2.066793	35%	III
54	4	-336.745464397110085009016689		85%	III
		-336.743951670552445025670468	1.512727	2%	IV
		-336.742985739284352328716004	2.478658	10%	III
		-336.742886809574962696880176	2.577588	3%	V

Tabelle 2: Energetische Minimalkonfigurationen

$N$	#	$V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$	$\Delta V[10^3]$	Prop.	Kompl.
55	5	-348.541796281072543009240512		30%	III
		-348.540538391710449091525553	1.257889	15%	IV-
		-348.540002350405569200501377	1.793931	16%	III
		-348.537997531488504070092261	3.798750	17%	IV
		-348.537977798446881177708034	3.818483	22%	IV-
56	2	-360.545899244254547093300025		91%	IV-
		-360.545682932106261848354803	0.216312	9%	IV-
57	4	-372.741200618372017213526166		95%	III
		-372.730720406196544709848738	10.480212	2%	IV
		-372.726575943201927359601246	14.624675	2%	IV
58	9	-372.717456313666652224781485	23.744305	0.5%	III
		-385.132829791923816566395948		30%	III
		-385.130638118204411447563604	2.191674	15%	V-
		-385.130474635657114837795978	2.355156	12%	IV-
		-385.129717151064468433314558	3.112641	19%	IV
		-385.126958759233485820518963	5.871033	21%	III
		-385.126518134992958184029160	6.311657	2.3%	IV
		-385.125227779603135994071204	7.602012	0.4%	IV
		-385.115461479843491741200602	17.368312	0.04%	IV
59	4	-385.101721038178292108838304	31.108754	0.3%	V-
		-397.728149660792660521158459		30%	IV-
		-397.727483393283793240885495	0.666268	53%	IV-
		-397.726127768267378487566238	2.021893	8%	IV
60	4	-397.724215424785985394480140	3.934236	9%	IV-
		-410.533162793207791007898379		27%	III
		-410.532256639300096978734107	0.906154	71%	III
		-410.531177980893345358764451	1.984812	2%	IV
61	5	-410.494468823916932327206784	38.693969	0.06%	IV
		-423.507635991003527192674350		72%	IV-
		-423.505197420151252807975106	2.438571	12%	III
		-423.504830265359120461433616	2.805726	14%	V
		-423.500032526531365102108442	5.164894	0.03%	V
62	2	-423.497908580916306435947855	9.727410	2%	IV
		-436.703979238394815617891996		89%	III
		-436.695212749716558432284129	8.766489	11%	IV-
63	2	-450.081239176912703459351278		99.8%	IV-
		-450.044923045800490682200973	36.316131	0.2%	III

Tabelle 3: Energetische Minimalkonfigurationen

$N$	#	$V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$	$\Delta V[10^3]$	Prop.	Kompl.
64	7	-463.654432988608045994794459		87%	IV
		-463.651351252488792533162245	3.081736	3%	IV-
		-463.650424606878857307081874	4.008382	6%	IV
		-463.636549536006547248913948	17.883453	1%	III
		-463.632958439385264778546886	21.474549	1%	V
		-463.632819611281688247174437	21.613377	1%	IV
		-463.627293149336046958493613	27.139839	1%	IV-
65	4	-477.426426068803474578214538		95%	IV
		-477.419704092720387927013335	6.721976	1%	IV+
		-477.415018683045974486905809	11.407386	5%	IV
		-477.375371508560434266589342	51.054560	0.01%	IV+

Tabelle 4: Energetische Minimalkonfigurationen

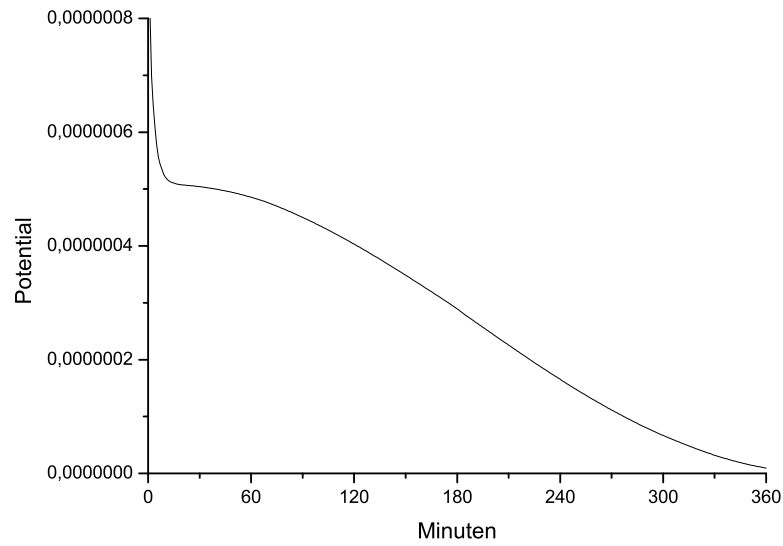


Abbildung 3: Vermeidliches Minimum ( $N = 64$ ). Das erste Niveau nach etwa 10 Minuten Rechenzeit ist so flach, dass nur mit Quadruple-Precision ein Gradient auftritt. Die Umgebung des echten energetischen Minimums wird nach 6 Stunden Suche erreicht.

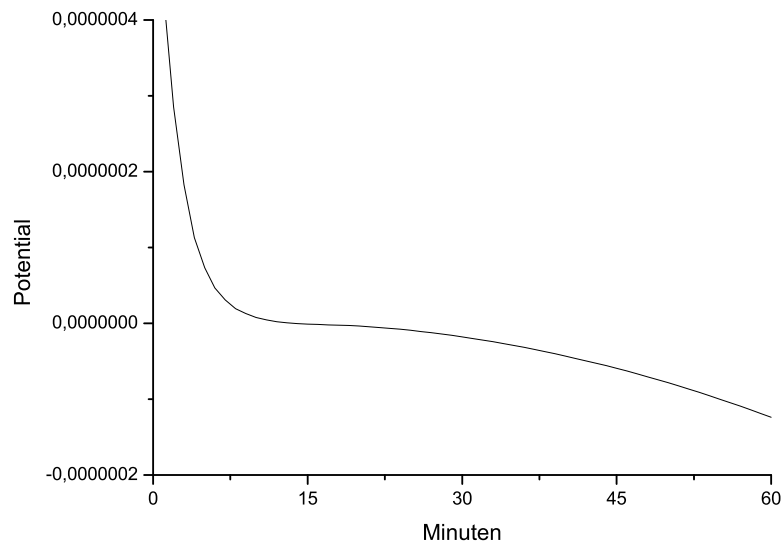


Abbildung 4: Vermeidliches Minimum ( $N = 65$ ). Sobald der Potentialwert signifikant unter das Plateau gefallen ist (hier nach etwa 30 Minuten) kann die Konstellation als energetische Minimalconfiguration verworfen werden.

$N$	$\min V_{1,1}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$	Value
2	$-\log 2$	-0.69314718055994530941723212145817656807550013436026
3	$-\frac{3}{2} \log 3$	-1.6479184330021645370928678553837885569712358367341
4	$-9 \log 2 + 3 \log 3$	-2.9424877590351787105693533823560119987370295357740
5	$-4 \log 2 - \frac{3}{2} \log 3$	-4.4205071552419457747617963412164948292732363741751
6	$-9 \log 2$	-6.2383246250395077847550890931235891126795012092423
7	$-6 \log 2 - \frac{5}{2} \log 5$	-8.1824778644449227930052910618145285072670041918328
8	$-41 \log 2 + 14 \log 7 - 2 \log(77041\sqrt{2} - 20213\sqrt{29})$	-10.428017781460197672127012239911170084875491071178
9	$\frac{105}{2} \log 2 - 6 \log 3$ $-\frac{3}{2} \log(39207447525697x^3 - 58746441424850x^2 - 11692670043712x + 26207116880600)$ mit $x \approx 0.711080$ Lösung von $8x^4 + 3x^3 - 22x^2 + 8 = 0$	-12.887752725759278961702759389089338309949131021613
10	$-56 \log 2 + 36 \log 3 - 2 \log(123782683\sqrt{2} - 24045199\sqrt{53})$	-15.563123389021939110326127865548062616962578999275
12	$-66 \log 2 + 15 \log 5$	-21.606145230444884802525930017846838900098988553749
14	$-25 \log 2 - 12 \log 3 + 33 \log 13$ $-3 \log(55859353679577905750016x^2 - 139920709496231296106496x + 75633163837178455130112)$ mit $x \approx 0.789181$ Lösung von $13x^3 - 198x^2 + 432x - 224 = 0$	-28.407813009242460570065484141844433309633752371831

Tabelle 5: Exakte Werte für die Minimalenergien für verschiedene  $N$ . Für  $N = 9$  und  $N = 14$  ist es möglich  $x$  ebenfalls exakt anzugeben. Darauf wurde aber wegen der hohen Komplexität der Formeln verzichtet.



$N$	$E/N$	$N$	$E/N$	$N$	$E/N$	$N$	$E/N$
2	-0.32671	11	-0.35938	20	-0.36673	120	-0.3718
3	-0.33151	12	-0.36698	30	-0.36871	140	-0.3719
4	-0.34933	13	-0.36270	40	-0.36985	160	-0.3722
5	-0.34545	14	-0.36391	50	-0.37046	180	-0.3723
6	-0.35891	15	-0.36415	60	-0.37079	200	-0.3723
7	-0.35301	16	-0.36488	70	-0.37108	250	-0.3724
8	-0.35763	17	-0.36552	80	-0.37147	300	-0.3725
9	-0.36008	18	-0.36623	90	-0.37146	350	-0.3726
10	-0.36150	19	-0.36503	100	-0.37169	400	-0.3726

Tabelle 6: Durchschnittlicher Energiewert pro Ladung im Grundzustand falls die Ladungsverteilung auf der Kugeloberfläche als ein One-Component Plasma interpretiert wird.

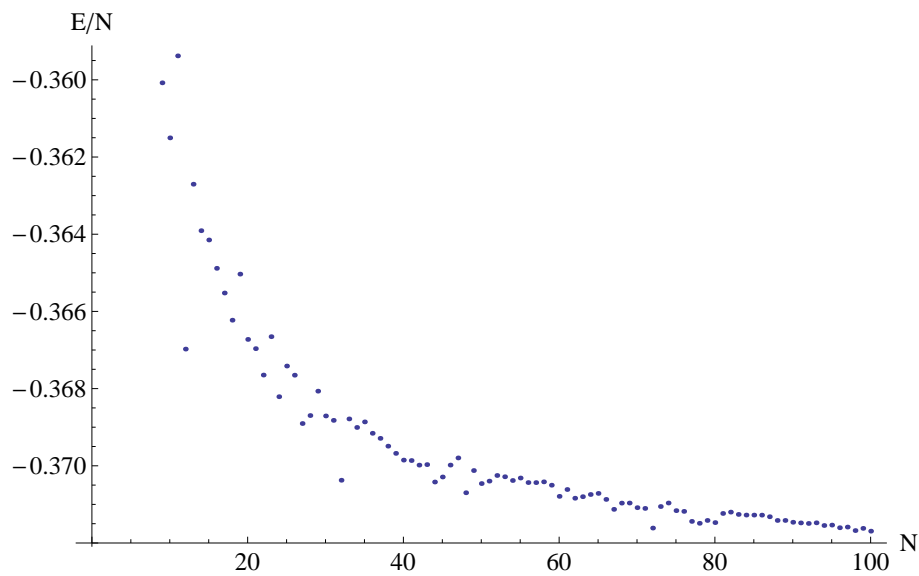


Abbildung 5: Graphische Darstellung der durchschnittlichen Energiewerte pro Ladung für  $10 \leq N \leq 100$  bei der Interpretation als One-Component Plasma.