

# Spezialisierungsmodul Computational Physics 260093 PR

Michael Kenn

30. September 2013

## Zusammenfassung

Protokoll über ein Gradientenverfahren zur Suche nach energetischen Minimalkonfigurationen von  $N$  gleichen Ladungen auf der Kugeloberfläche. Es wird sowohl das zweidimensionale (logarithmische) Kugeloberflächenpotential als auch das dreidimensionale  $\frac{1}{r}$  Potential behandelt. Die gefundenen Minimalkonstellationen werden auf ihre Eigenschaften untersucht.

## 1 Einleitung

Im Praktikum Computational Physics [1] wurde die Frage gestellt, wie  $N$  Punkte möglichst gleichmäßig auf einer Kugeloberfläche verteilt werden können. Die Resultate waren sehr zufriedenstellend, doch hat sich gezeigt, dass diese Aufgabenstellung ziemlich komplex ist und noch weitere Betrachtung verdient. Im Rahmen des Spezialisierungsmoduls Computational Physics wurde deshalb eine Methodik entwickelt, wesentlich effizienter zu gleichmäßigen Punktverteilungen zu kommen. Diese ermöglichte eine umfassende Analyse deren Eigenschaften und Verteilungen.

Zunächst ist es notwendig zu definieren, was "gleichmäßig" überhaupt bedeuten soll. Dabei gibt es naturgemäß mehrere verschiedene Ideen. Ein biologischer Ansatz beispielsweise wäre,  $N$  Kreise von maximaler Größe auf einer Kugeloberfläche zu platzieren (Tammes Problem). Man stelle sich dazu die kreisförmigen Poren an der Oberfläche einer Koralle vor. Die Evolution gebietet der Koralle maximal viel Porenfläche an ihrer Oberfläche auszubilden. Dieses Problem gehört zu einer Klasse, die fallweise auch als Min-Max-Probleme bezeichnet wird. Es geht nämlich darum, eine Lösung zu finden, bei der der Minimalabstand zwischen zwei beliebigen Kreismittelpunkten maximal wird. Allerdings könnte man alternativ auch fragen, wie viele Kreise (Poren) von gegebener Größe maximal auf der Kugeloberfläche Platz haben. Diese Problemstellung gehört dann in die Klasse der Paketierungsprobleme.

Freilich ist das nur eine von vielen Ideen und für weitere Lösungsvorschläge zum gleichmäßigen Platzieren von Punkten auf einer Kugel sei deshalb auf die Einleitung von [1] verwiesen.

Der hier verwendete Ansatz ist jener, dass die  $N$  Punkte als gleiche Ladungen auf der Kugeloberfläche betrachtet werden. Diese Ladungen beeinflussen sich gegenseitig und streben ein energetisches Minimum an. Die Wechselwirkung erfolgt entweder entlang der Kugeloberfläche (zweidimensionales,

logarithmisches Potential  $\Phi_2$ ) oder quer durch die Kugel durch (dreidimensionales  $\frac{1}{r}$  Potential  $\Phi_3$ ).

$$\Phi_2(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n | \alpha, \beta) = - \sum_{1 \leq i < j \leq N} \log(\alpha d_{ij}^\beta) = - \binom{N}{2} \log \alpha + \beta \Phi_2(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n | 1, 1)$$

$$\Phi_3(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) = \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{1}{d_{ij}}$$

Die Gründe dafür liegen in der Lösung der Laplace-Gleichung  $\Delta\Phi = 0$  und wurden in [1] bereits ausgiebig erörtert. Die Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  sind beliebig wählbare Skalierungsfaktoren und rein technischer Natur.

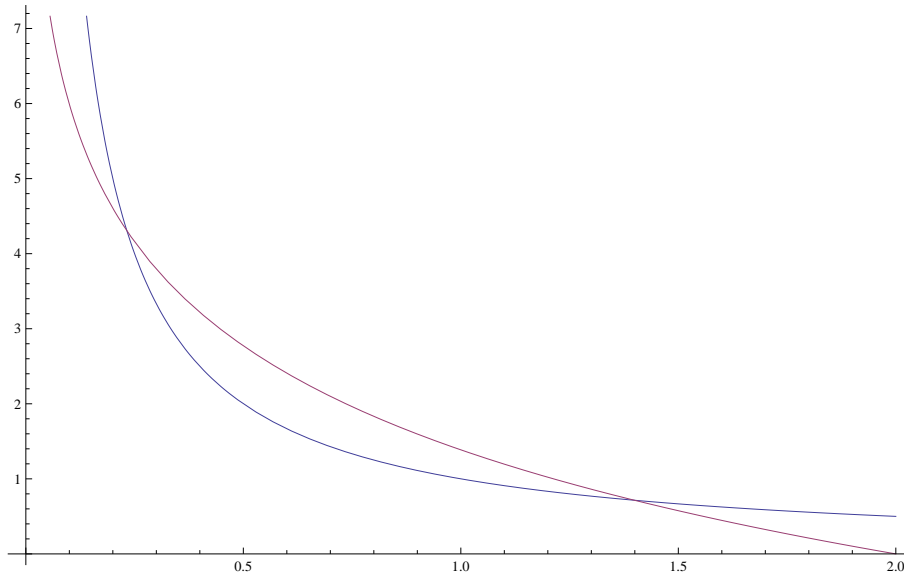


Abbildung 1: Die beiden Potentiale  $\Phi_2$  und  $\Phi_3$  für ein Punktepaar

## 2 Methoden der Minimumsuche

Die Suche nach Minima von  $\Phi(\vec{r})$  ist, unabhängig von der Wahl des Potentials, ein herausforderndes Problem. Im Vorfeld zur eigentlichen Lösung, einem adaptierten Gradientenverfahren, wurde eine Anzahl von Algorithmen untersucht, die hier kurz zusammengefasst werden:

**Naive Suche durch Punktverschiebungen:** es wird jeweils eine Ladung in eine günstigeren Lage verschoben. Die entsprechende Ladung wird dabei situationsbedingt entweder zufällig oder systematisch gewählt. Es ist stets eine sehr große Anzahl von Iterationsschritten notwendig und die Laufzeiten werden bei großem  $N$  entsprechend schnell groß. Allerdings ist diese Vorgehensweise sehr robust gegenüber numerischen Artefakten und man erhält in den meisten Fällen ein echtes Minimum als Resultat.

**Simplex-Methode:** eine Methode, die den  $2N$ -dimensionalen Suchraum der  $N$  Punkte auf der Kugeloberfläche nach und nach reduziert. Man wählt zunächst  $2N + 1$  zufällige Startkonstellationen. Diese spannen ein  $2N$ -dimensionales Simplex auf. Nach und nach werden die Ecken geschickt nach innen verschoben bis nur noch die punktförmige Lösung übrig bleibt. Dieses Verfahren ist weit weg von einem Gradientenverfahren, sehr langsam, und nur für  $N \leq 15$  anwendbar. Der Vorteil liegt in der Robustheit.

**Monte Carlo/Metropolis Methode:** durch ständiges Verrauschen wird eine Anfangskonstellation kontinuierlich verbessert. Der Algorithmus bricht ab, sobald für eine festgelegte Zeitspanne keine Verbesserung mehr erzielt werden kann. Bei großen  $N$  ist das jedoch sehr ineffizient. Das Verrauschen geschieht in einem hochdimensionalen Raum und die Wahrscheinlichkeit eine mögliche Verbesserung zufällig zu finden wird schnell kleiner.

Bei der Metropolis Variante werden Züge auch dann akzeptiert, wenn sie eine beschränkte (mit der Laufzeit kleiner werdende) Verschlechterung aufweisen. Das hilft zwar aus flachen Potentialgebieten herauszukommen, verlangsamt den Algorithmus aber nochmals deutlich.

**Genetische Algorithmen:** Wie der Name schon sagt wird pro Iteration ein Teil der aktuellen Konstellation mutiert, während der überwiegende Teil unverändert bleibt. Eine Beschreibung des Algorithmus findet sich bei [2]. Es ist nicht sehr verwunderlich, dass auch hier nur sehr ineffizient ein energetisches Minimum angenähert wird und des öfteren längere Irrwege eingeschlagen werden. Zumindest birgt aber ein genetischer Algorithmus auf Grund der großen Anzahl von möglichen Parametrisierungen ein breites Forschungsfeld.

Alle diese Verfahren können die Problematik der Konvergenz in den teilweise sehr flachen Potentialregionen nicht lösen. Die unmittelbare Konsequenz sind rasch wachsenden Laufzeiten für größer werdende  $N$  und unzulängliche Rechengenauigkeiten.

## 2.1 Gradientenverfahren

Die naheliegendste Vorgehensweise das Konvergenzverhalten zu beschleunigen sind Gradientenverfahren. Es liegt nämlich in der Natur des Gradienten den Weg des steilsten Abstiegs zu folgen. Das ist jedoch mit Problemen verbunden, die im Folgenden erörtert werden:

**Topologie der Kugeloberfläche:** Es gibt keine Bijektion zwischen der Kugeloberfläche und einer Teilmenge des  $\mathbb{R}^2$ . Beispielsweise ist die Funktion  $\vec{r} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$  an den Polen nicht invertierbar. Ich werde später zeigen, dass bei dieser Parametrisierung der Kugeloberfläche die Pole tatsächlich ein Problem für das Gradientenverfahren darstellen.

Befindet sich nämlich ein Punkt in einer genügend kleinen  $\varepsilon$ -Umgebung eines Pols, so kann er diese nicht wieder verlassen. Eine Konsequenz daraus ist, dass die mit dem Gradientenverfahren gefundenen Minima nicht notwendigerweise echte Minima sind, sondern nur Minimalkonstellationen unter der Bedingung, dass sich genau dieser Punkt im entsprechenden Pol befindet. Das Argument, dass sich ja o.B.d.A. immer ein Punkt in einem Pol befinden kann ist falsch, da es sich hier um einen bestimmten Punkt im Bezug auf die anderen Punkte handelt. Im Allgemeinen sind die einzelnen Punkte in einer Minimalkonstellation aber natürlich nicht symmetrisch zueinander.

Weiters kann es auch vorkommen, dass zwei Punkte in die beiden entgegengesetzten Pole wandern, die Minimalkonfiguration aber eigentlich gar keine Diagonale aufweist.

Diese Singularitätsprobleme können gelöst werden, indem man ständig die Parametrisierung der Kugeloberfläche ändert, d.h. die Singularitäten verschiebt. Das geht am einfachsten durch zufälliges Drehen der Punkte nach jeder Iteration.

**Nichteindeutigkeit einer Minimalkonfiguration:** Bei Gradientenverfahren ist es notwendig eine Funktionalmatrix zu invertieren. Da die Minimalkonstellationen aber zumindest die drei Freiheiten der Raumdrehung haben wird diese Funktionalmatrix stets singulär sein. Es ist daher erforderlich bei jedem Iterationsschritt einige Punkte auszulassen. In der Praxis hat es sich bewährt mit etwa der Hälfte der Punkte zu beginnen und gegen Ende hin die Anzahl moderat zu erhöhen.

**Numerische Probleme:** Auch ein Gradientenverfahren ist nicht vollständig gefeit gegen flache Potentiallandschaften. Das Problem ist insoweit entschärft, als dass ein vermeintliches, falsches Minimum zumindest in der Regel als solches identifiziert wird sofern die Rechengenauigkeit dies überhaupt zulässt. Es ist jedoch auch hier unumgänglich jedes Minimum mit Quadruple-Präzision zu bestätigen.

**Implementierung:** Der Aufwand für die Implementierung eines Gradientenverfahrens ist ungleich höher als für anderen Verfahren. Die Berechnung der Funktionalmatrix und des Gradienten erfordert auch zusätzlichen Hauptspeicher. Da zahlreiche Matrixoperationen auf mittelgroßen Matrizen angewandt werden müssen ist es in der Regel empfehlenswert auf entsprechende Bibliotheken zurückzugreifen.

## 3 Mathematik des Gradientenverfahrens

### 3.1 Newtonsches Näherungsverfahren auf der Kugeloberfläche

Sei  $f : \mathbb{R}^{2N} \rightarrow \mathbb{R}^{2N}$  eine stetig differenzierbare, reelle Funktion. In der einfachsten Form ist das Newtonsche Näherungsverfahren in  $2N$  Dimensionen zur Lösung der Gleichung  $f(\mathbf{x}) = 0$  durch die Iteration

$$\mathbf{x}^{(n+1)} = \mathbf{x}^{(n)} - J^{-1}(\mathbf{x}^{(n)})f(\mathbf{x}^{(n)}) \quad (1)$$

gegeben.  $J^{-1}(\mathbf{x})$  bezeichnet die Inverse der Jacobi-Matrix  $J(\mathbf{x}) = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x})$ .

In diesem speziellen Fall ist ein Minimum eines Potentials  $\Phi(\theta_1, \varphi_1, \dots, \theta_N, \varphi_N)$  gesucht. Das heißt, sämtliche partielle Ableitungen  $\frac{\partial \Phi}{\partial \theta_i}$  und  $\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi_i}$  müssen verschwinden<sup>1</sup> und die zu lösende Gleichung lautet demnach

$$f = \nabla \Phi = 0$$

Die Jacobi-Matrix  $J(\mathbf{x})$  entspricht hier der  $2N \times 2N$  Hesse-Matrix  $H$  der zweiten partiellen Ableitungen

$$J(\mathbf{x}) \longleftrightarrow H(\omega) = \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \omega_i \partial \omega_j} \right)_{1 \leq i, j \leq 2N}$$

---

<sup>1</sup>Die Problematik, dass es sich bei der dann gefundenen Nullstelle des Gradienten tatsächlich um ein Extremum nicht nur um einen Sattelpunkt des Potential  $\Phi$  handelt wird später noch behandelt.

mit  $\omega_i \in \{\theta_i, \varphi_i\}$ . Mit euklidischen Koordinaten im  $3N$ -dimensionalen Raum ( $N$  Punkte im  $\mathbb{R}^3$ ) ist diese Vorgehensweise zielführend. Im hier besprochenen Fall wird das Newtonsche Näherungsverfahren allerdings für Polarkoordinaten auf der Kugeloberfläche angewandt, die Lösungen haben also zumindest noch die drei Freiheiten der räumlichen Drehung. Das manifestiert sich darin, dass die einzelnen Komponenten der Iteration (1) linear abhängig sind. Weiters gibt es das bereits in 2.1 angesprochene Problem der Koordinatensingularitäten in den Polen.

Deshalb muss das Gradientenverfahren angepasst werden. Das geschieht, grob gesprochen, so, dass pro Iterationsschritt nicht alle sondern immer nur eine zufällige Auswahl von Komponenten verarbeitet werden. Die Koordinatensingularitäten werden durch ständiges Drehen der Punktkonstellationen behoben.

Bei der Implementierung empfiehlt es sich im logarithmischen Fall das Abstandsquadrat zu verwenden:

$$\Phi(\theta_1, \varphi_1, \dots, \theta_N, \varphi_N) = \begin{cases} - \sum_{1 \leq i < j \leq N} \log d_{ij}^2 & \text{Kugeloberflächenpotential } \Phi_2 \\ \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{1}{d_{ij}} & \text{Kugelpotential } \Phi_3 \end{cases}$$

mit

$$\begin{aligned} d_{ij} &= \sqrt{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2 + (z_j - z_i)^2} \\ (x_i, y_i, z_i) &= (\sin \theta_i \cos \varphi_i, \sin \theta_i \sin \varphi_i, \cos \theta_i) \end{aligned}$$

Die Wurzelberechnung bei der Distanz  $d_{ij}$  kann mit der Substitution  $h_{ij} = \frac{d_{ij}^2}{2}$  ein wenig erleichtert werden:

$$\begin{aligned} h_{ij} = h_{ji} &= 1 - \cos \theta_i \cos \theta_j - \sin \theta_i \sin \theta_j \cos(\varphi_j - \varphi_i) \\ \frac{\partial h_{ij}}{\partial \theta_i} &= \sin \theta_i \cos \theta_j - \cos \theta_i \sin \theta_j \cos(\varphi_j - \varphi_i) \\ \frac{\partial h_{ij}}{\partial \varphi_i} &= -\sin \theta_i \sin \theta_j \sin(\varphi_j - \varphi_i) \\ \frac{\partial^2 h_{ij}}{\partial \theta_i^2} &= 1 - h_{ij} = \cos \theta_i \cos \theta_j + \sin \theta_i \sin \theta_j \cos(\varphi_j - \varphi_i) \\ \frac{\partial^2 h_{ij}}{\partial \theta_i \partial \theta_j} &= -\sin \theta_i \sin \theta_j - \cos \theta_i \cos \theta_j \cos(\varphi_j - \varphi_i) \\ \frac{\partial^2 h_{ij}}{\partial \varphi_i^2} &= \sin \theta_i \sin \theta_j \cos(\varphi_j - \varphi_i) \\ \frac{\partial^2 h_{ij}}{\partial \varphi_i \partial \varphi_j} &= -\sin \theta_i \sin \theta_j \cos(\varphi_j - \varphi_i) \\ \frac{\partial^2 h_{ij}}{\partial \theta_i \partial \varphi_i} &= -\cos \theta_i \sin \theta_j \sin(\varphi_j - \varphi_i) \\ \frac{\partial^2 h_{ij}}{\partial \theta_i \partial \varphi_j} &= \cos \theta_i \sin \theta_j \sin(\varphi_j - \varphi_i) \end{aligned}$$

Sei wieder  $\omega_i \in \{\theta_i, \varphi_i\}$ . Dann lassen sich mit diesen Vorberechnungen die ersten Ableitungen des logarithmischen Potentials  $\Phi_2$  und des räumlichen Potentials  $\Phi_3$  ziemlich übersichtlich anschreiben.

$$\frac{\partial \Phi_2}{\partial \omega_i} = - \sum_{j \neq i} \frac{1}{h_{ij}} \frac{\partial h_{ij}}{\partial \omega_i} \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial \Phi_3}{\partial \omega_i} = - \sum_{j \neq i} \frac{1}{d_{ij}^3} \frac{\partial h_{ij}}{\partial \omega_i}$$

Auch die zu invertierende Hesse-Matrix der zweiten Ableitungen ist in dieser Parameterisierung verhältnismäßig einfach:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Phi_2}{\partial \omega_i^2} &= \sum_{j \neq i} \frac{1}{h_{ij}^2} \left( \frac{\partial h_{ij}}{\partial \omega_i} \right)^2 - \frac{1}{h_{ij}} \frac{\partial^2 h_{ij}}{\partial \omega_i^2} & \text{bzw.} & \quad \frac{\partial^2 \Phi_3}{\partial \omega_i^2} = \sum_{j \neq i} \frac{3}{d_{ij}^5} \left( \frac{\partial h_{ij}}{\partial \omega_i} \right)^2 - \frac{1}{d_{ij}^3} \frac{\partial^2 h_{ij}}{\partial \omega_i^2} \\ \frac{\partial^2 \Phi_2}{\partial \omega_i \partial \omega_j} &= \frac{1}{h_{ij}^2} \frac{\partial h_{ij}}{\partial \omega_i} \frac{\partial h_{ij}}{\partial \omega_j} - \frac{1}{h_{ij}} \frac{\partial^2 h_{ij}}{\partial \omega_i \partial \omega_j} & \text{bzw.} & \quad \frac{\partial^2 \Phi_3}{\partial \omega_i \partial \omega_j} = \frac{3}{d_{ij}^5} \frac{\partial h_{ij}}{\partial \omega_i} \frac{\partial h_{ij}}{\partial \omega_j} - \frac{1}{d_{ij}^3} \frac{\partial^2 h_{ij}}{\partial \omega_i \partial \omega_j} \end{aligned}$$

### 3.2 Koordinatensingularitäten in den Polen

Wie schon angesprochen scheitert das Gradientenverfahren sobald ein Punkt zu nahe an einen Pol kommt. Das liegt daran, dass die Funktion

$$f : [0, \pi] \times [0, 2\pi] \rightarrow S_2 : \begin{pmatrix} \theta \\ \varphi \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix}$$

an den Polen nicht invertierbar ist. Sei o.b.d.A. der Punkt  $(\theta_1, \varphi_1)$  in einer  $\varepsilon$ -Umgebung des N-Pols, also  $0 \leq \sin \theta_1 \leq \theta_1 < \varepsilon$  und sei  $k \geq 2$ . Wir betrachten hier nur den Fall des logarithmischen Potentials, der andere Fall lässt sich aber sehr ähnlich behandeln.

Zunächst benötigt man eine Abschätzung für die Minimaldistanz  $d_{\min}$  zweier Punkte nahe einer Minimalkonstellation. Die Gesamtoberfläche der Einheitskugel beträgt  $4\pi$ . Damit steht durchschnittlich jedem Punkt eine Umgebung der Fläche  $\frac{4\pi}{N}$  zu Verfügung, was einem Kreis mit Radius  $r = \frac{2}{\sqrt{N}}$  entspricht. Der minimale Abstand zweier Punkte nahe einer Minimalkonfiguration ist daher von der Größenordnung  $O(N^{-\frac{1}{2}})$  zu erwarten<sup>2</sup>. Man setzt  $d_{\min} = \frac{\alpha}{\sqrt{N}}$  mit  $\alpha$  einer festen und von  $N$  unabhängigen Zahl<sup>3</sup>. Da auch  $N$  eine feste Zahl ist ergeben sich für genügend kleines  $\varepsilon$  folgende Abschätzungen:

$$\begin{aligned} \left| \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi_1 \partial \varphi_k} \right| &= \left| \frac{1}{h_{1k}^2} \frac{\partial h_{1k}}{\partial \varphi_1} \frac{\partial h_{1k}}{\partial \varphi_k} - \frac{1}{h_{1k}} \frac{\partial^2 h_{1k}}{\partial \varphi_1 \partial \varphi_k} \right| \leq \left| \frac{4}{d_{\min}^4} \varepsilon^2 + \frac{2}{d_{\min}^2} \varepsilon \right| < \varepsilon' \\ \left| \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi_1 \partial \theta_k} \right| &= \left| \frac{1}{h_{1k}^2} \frac{\partial h_{1k}}{\partial \varphi_1} \frac{\partial h_{1k}}{\partial \theta_k} - \frac{1}{h_{1k}} \frac{\partial^2 h_{1k}}{\partial \varphi_1 \partial \theta_k} \right| \leq \left| \frac{4}{d_{\min}^4} \varepsilon(1 + \varepsilon) + \frac{2}{d_{\min}^2} \varepsilon \right| < \varepsilon' \\ \left| \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi_1^2} \right| &= \left| \sum_{j \neq 1} \frac{1}{h_{1j}^2} \left( \frac{\partial h_{1j}}{\partial \varphi_1} \right)^2 - \frac{1}{h_{1j}} \frac{\partial^2 h_{1j}}{\partial \varphi_1^2} \right| \leq \left| (N-1) \left( \frac{4}{d_{\min}^4} \varepsilon^2 + \frac{2}{d_{\min}^2} \varepsilon \right) \right| < \varepsilon' \end{aligned}$$

Das heißt, mit Ausnahme von  $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi_1 \partial \theta_1}$  sind sämtliche Einträge in den Zeilen und Spalten, in denen  $\frac{\partial}{\partial \varphi_1}$  vorkommt beliebig klein, vorausgesetzt der Punkt  $(\theta_1, \varphi_1)$  befindet sich nur Nahe genug am N-Pol.

<sup>2</sup>Das ist freilich kein mathematischer Beweis, ein Gegenbeispiel ist aber äußerst unwahrscheinlich.

<sup>3</sup> $\alpha = 1$  sollte (o.Bew.) auf alle Fälle reichen.



2. Drehe einen zufälligen Punkt entlang des Großkreises in den N-Pol
3. Wähle aus den restlichen  $N - 1$  Punkten etwa die Hälfte aus.
4. Bestimme für diese Auswahl Gradienten und inverse Hesse-Matrix und führe einen Iterationsschritt wie in Kapitel 3 beschrieben durch.
5. Teste, ob der Iterationsschritt eine Verbesserung gebracht hat und verwirfe diesen, falls nicht.
6. Gehe zurück zu 2. bis genügend lang keine Verbesserung mehr stattfindet.

Im Laufe des Algorithmus kann die unter 3. zu wählende Zahl an Punkten moderat angehoben werden. Das ist dann von Vorteil, wenn man sich bereits in unmittelbarer Nähe einer Minimalkonfiguration befindet, diese aber wegen des flachen Potentials nur langsam angenähert wird.

Sämtliche gefundenen Minimalkonfigurationen müssen anschließend mit Quadruple-Präzision bestätigt werden. Es kommt nämlich in einigen seltenen Fällen vor, dass eine gewöhnliche Double-Präzision-Arithmetik von der Rechengenauigkeit nicht ausreicht, um einen Sattelpunkt von einem Minimum zu unterscheiden.

Nach einer turbulenten Startphase (was für Gradientenverfahren in höherdimensionalen Räumen nicht ungewöhnlich ist) wird der Algorithmus systematisch entlang des steilsten Abstiegs zu einem Minimum führen. Das bedeutet aber, der Algorithmus endet nicht notwendigerweise im Grundniveau. Bei geeigneter Startposition kann jede andere energetische Minimalkonfiguration ebenfalls gefunden werden.

Je energetisch höher allerdings so eine Minimalkonfiguration liegt, desto tendenziell unwahrscheinlicher wird es, sie mit einer zufälligen Startposition zu erreichen. Es ist mit der hier beschriebenen Vorgehensweise zu keinem Zeitpunkt sichergestellt, tatsächlich sämtliche Minimalkonfigurationen gefunden zu haben, und ein Beweis, dass es neben den gefundenen nicht noch weitere Konstellationen gibt ist wahrscheinlich sehr kompliziert.

## 5 Resultate

Abbildung 2 zeigt zwei energetische Minimalkonfigurationen. Die eingezeichneten Kanten sind dabei willkürlich gewählt und nicht eindeutig bestimmt. Die Anzahl der (gefundenen) Minimalkonfigurationen nimmt erwartungsgemäß mit wachsendem  $N$  schnell zu. Interessant ist, dass das  $\frac{1}{r}$ -Potential tendenziell mehr Minima aufweist als das logarithmische Potential. Abbildung 3 und Tabelle 1 zeigen die Entwicklung der Anzahl der Minimalkonfigurationen mit wachsendem  $N$ .

### 5.1 Verteilung der Minimalkonfigurationen

Welche Minimalkonfiguration bei einem Testlauf letztendlich gefunden wird hängt natürlich von der Startkonstellation ab. Von dort aus folgt der Algorithmus dem steilsten Abstieg. Deterministisch ist das Ergebnis aber dennoch nicht, da ja für die Berechnung des Gradienten wegen der Kugeloberflächentopologie eine zufällige Auswahl von Punkten genommen wird. Man kann allerdings davon ausgehen, dass diese Einschränkung nach einer großen Anzahl von Versuchsläufen nicht allzuviel Auswirkung auf die Verteilung der Ergebnisse hat.



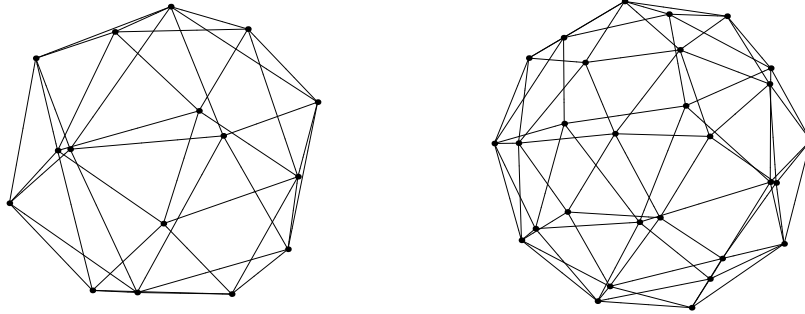


Abbildung 2: Energetisch günstigste Anordnungen von  $n = 16$  bzw.  $n = 23$  Ladungen auf der Kugeloberfläche

Ein augenscheinliches Resultat ist, dass das Grundniveau in der Regel ziemlich bald einmal gefunden wird. Ausnahmen bestätigen die Regel, wie in Abbildung 4 ersichtlich. Für  $\Phi_3$  liefern im Fall  $N = 77$  nur weniger als 1% aller Testläufe das Grundniveau. Interessant ist das sehr ähnliche Verhalten der beiden Potentiale.

Dafür wird es zunehmend unwahrscheinlicher, höher gelegene Minimalkonstellationen zu finden. In den Abbildungen 5 und 6 ist dieser Umstand für  $N = 94$  und  $N = 95$  illustriert. Energetisch höher gelegene Minimalkonstellationen sind demnach tendenziell unwahrscheinlicher zu erreichen.

## 5.2 Grundniveaus

Die exakte Lage aller Minimalkonfigurationen ist vorrangig akademischer Natur<sup>4</sup>. Das Grundniveau hat aber sehr wohl auch praktische Bedeutung. Ich verweise hier auf das Praktikum [1], wo u.a. das One-Component-Plasma erklärt wurde. In den Tabellen 4-5 sind die Grundniveaus für  $\Phi_2 = -\sum \log d^2$  und  $\Phi_3 = \sum \frac{1}{d}$  auf 24 Stellen Genauigkeit angeführt. Im logarithmischen Fall ist das asymptotische Verhalten bekannt [1]:

$$\min(\Phi_2) \sim -\frac{2 \log 2 - 1}{2} N^2 - \frac{1}{2} N \log N + (2E^* + \log 2)N$$

## 5.3 Versuchsumfang

Die Anzahl der getesteten Startkonstellationen sind in Tabelle 2 angeführt. Der Grund für die größere Anzahl von Versuchen für  $\Phi_3$  ist die größere Anzahl von Minimalkonstellationen. Für  $\Phi_2$  wurden im Praktikum bereits 100000 Versuche pro  $N$  mit einer wesentlich ineffizienteren Methode durchgeführt. Sämtliche damals gefundenen Minima wurden übernommen und verifiziert.

---

<sup>4</sup>Die Hauptmotivation des Autors sich mit dieser Thematik zu beschäftigen war der Wunsch Erfahrung in der Suche in hochdimensionalen Räumen zu sammeln.



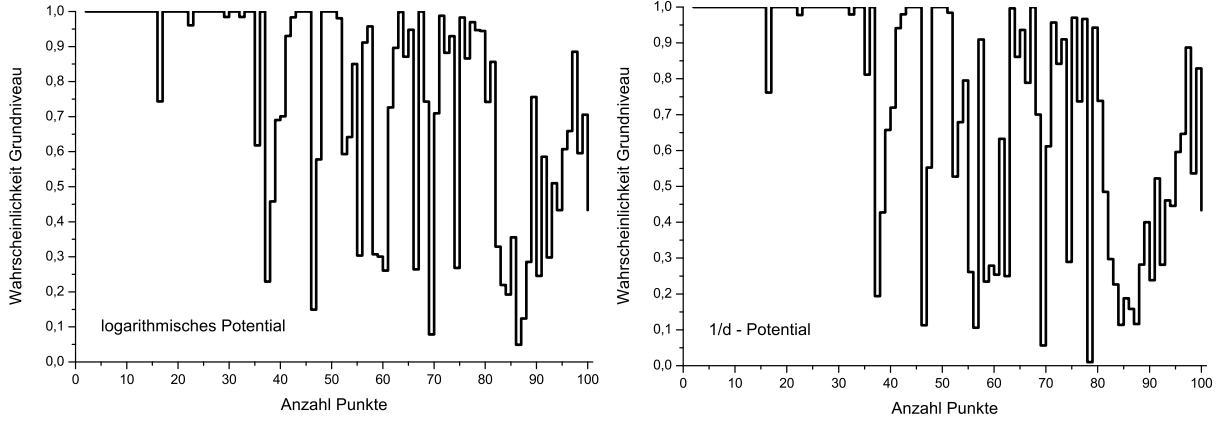


Abbildung 4: Wahrscheinlichkeiten bei zufälliger Startkonstellation das Grundniveau zu erreichen.

$N$	$\Phi$	Anzahl Versuche
-59	$\Phi_2$	81000
60-89	$\Phi_2$	220000
90-100	$\Phi_2$	320000
-49	$\Phi_3$	360000
50-89	$\Phi_3$	400000
90-100	$\Phi_3$	460000

Tabelle 2: Anzahl der Versuchsdurchführungen

nige Minima nur einmal gefunden wurden spricht dafür, dass die eine oder andere Konstellation in der Aufstellung fehlt. Um größtmögliche Sicherheit zu gewährleisten ist geplant, die Berechnungen noch einige Zeit lang fortzusetzen. Neu gefundene Konstellationen werden gegebenenfalls auf <http://kenn.at/Thomson> publiziert.

## A Software

Die Software zur Suche gibt es in zwei Ausführungen:

- Double-Präzision, läuft in der Regel maximal einige wenige Sekunden
- Quadruple-Präzisionsberechnung im Anschluss an die Double-Präzisionsberechnung inklusive Ausgabe der Endkonstellation, läuft zwischen einigen Minuten und wenigen Stunden.

**Parameter:** Die zu übergebenden Parameter sind die Anzahl der zu platzierenden Ladungen  $N$  und der Seed für den Zufallszahlengenerator. Optional kann angegeben werden, wieviele Punkte zur Berechnung des Gradienten herangezogen werden sollen, wobei der Standardwert  $\lfloor \frac{N+1}{2} \rfloor$  ist. Ferner muss natürlich angegeben werden, welches Potential verwendet werden soll.

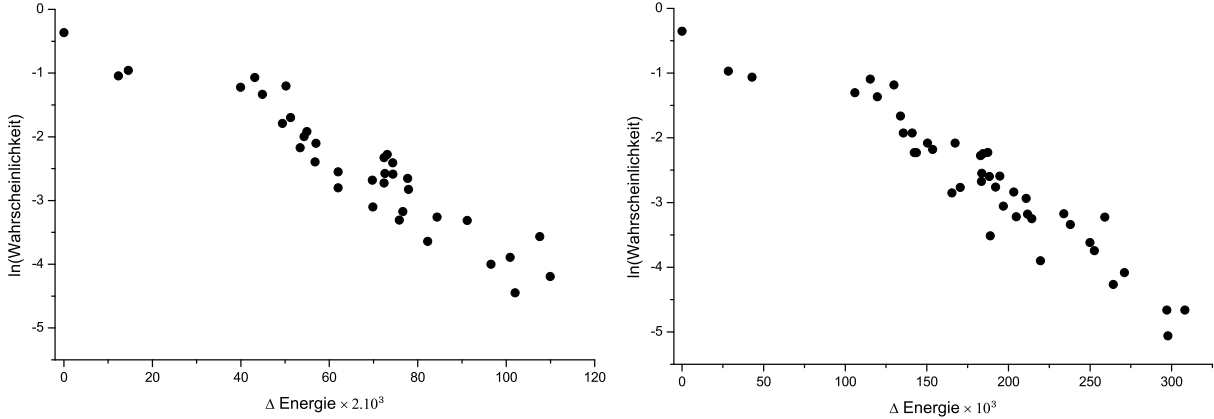


Abbildung 5: Fall  $N = 94$ : es gibt 36 Minimalkonfigurationen für  $\Phi_2$  (links) und 44 Minimalkonfigurationen für  $\Phi_3$  (rechts). Die x-Achse bezeichnet die (skalierten) Differenzen zum Grundniveau, die y-Achse die logarithmierten Wahrscheinlichkeiten bei zufälliger Anfangskonstellation entlang des Gradienten bei der entsprechenden Minimalkonfiguration zu landen.

**Versionen:** Die aktuelle Version für  $N \leq 100$  ist V14h. Für  $101 \leq N \leq 200$  gibt es die Version V14i, diese ist allerdings weder speicher- noch geschwindigkeitsoptimiert. Ergebnisse haben sich seit Version V13k nicht mehr geändert.

**Libraries:** Die aktuellen Version greift nicht auf Softwarebibliotheken zurück. Die Matrixinversion ist vom Autor implementiert und für  $N \leq 100$  sehr effizient, allerdings nicht für Spezialfälle wie schlecht konditionierte oder sehr dünn besetzte Matrizen optimiert.

**Zufallszahlen:** Die Untersuchungen wurden auf drei verschiedenen Systemen durchgeführt. Um mit den Seeds der Zufallszahlen nicht zu kollidieren wurde jeweils Bereiche für die einzelnen Systeme reserviert. Diese sind in Tabelle 3 aufgelistet.

Compiler	Entwicklungsumgebung	Seeds	Quadr.-Präz.	Rechner/CPU
gcc version 4.7.0	CYGWIN_NT-6.1-WOW64	1-100000	Ja	1/4
gcc version 4.6.3	Linux 3.2.0-36-generic	100001-200000	Ja	1/4
gcc version 4.4.3	Linux 2.6.38-16-generic-pae	200001-500000	Nein	11/44

Tabelle 3: Für jede Entwicklungsumgebung wurde ein Bereich von Seeds für den Zufallszahlengenerator reserviert.

Leider war es auf dem letzten System nicht möglich Quadruple-Präzisionsrechnungen durchzuführen. Einige seltene Konstellationen wurden zwischengespeichert und für die Berechnung mit Quadruple-Präzision auf das erste System portiert.

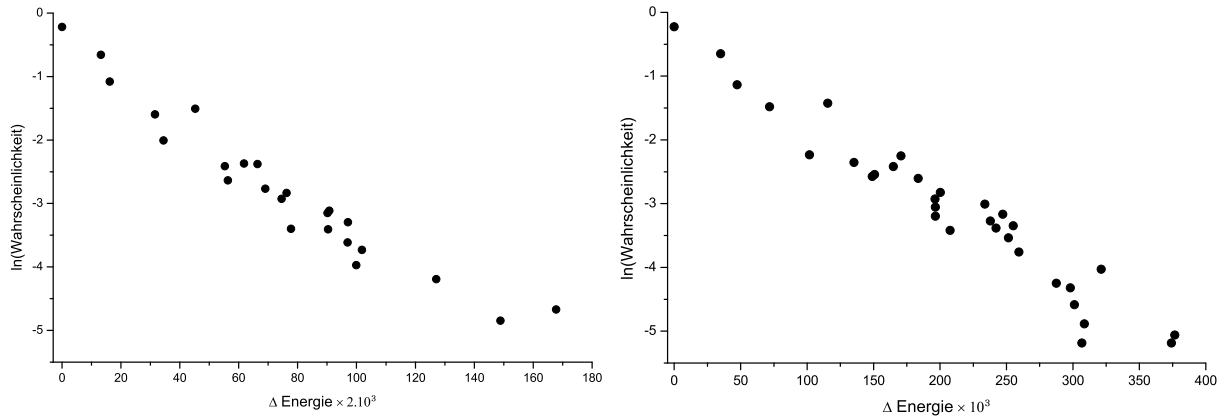


Abbildung 6: Fall  $N = 95$ : es gibt 24 Minimalkonfigurationen für  $\Phi_2$  (links) und 32 Minimalkonfigurationen für  $\Phi_3$  (rechts). x-Achse und y-Achse wie in Abbildung 5. Ähnlichkeiten in der Verteilung tieferliegender Energieniveaus sind sowohl für  $N = 94$  als auch für  $N = 95$  erkennbar.

## B Weitere Aktivitäten

Eine Anzahl von weiteren Fragestellungen wurde im Rahmen des Spezialisierungsmoduls behandelt, wird aber in diesem Protokoll nicht ausführlich diskutiert. Der interessierte Leser ist eingeladen mit dem Autor diese Punkte persönlich zu erörtern.

**Performance-Analyse:** Wieviele Punkte sollen für die Berechnung des Gradienten optimalerweise herangezogen werden? - Abbildung 7

**Paarverteilung:** Verteilung der Punktdistanzen für Minimalkonfigurationen - Abbildung 8

**Symmetrien in Minimalkonfigurationen:** Höher gelegene energetische Minimalkonfigurationen weisen fallweise einen überraschend hohen Grad an Symmetrie auf.

**Erweiterter Test zur Prüfung von Minimalkonfigurationen durch Verrauschen:** Durch Verrauschen einer Minimalkonstellatation kann sichergestellt werden, dass kein Sattelpunkt vorliegt - Abbildung 9

**Der Fall N=200:** Sehr zeitintensive Berechnungen laufen. Das Spektrum der Energieniveaus geht in eine kontinuierliche Verteilung über.

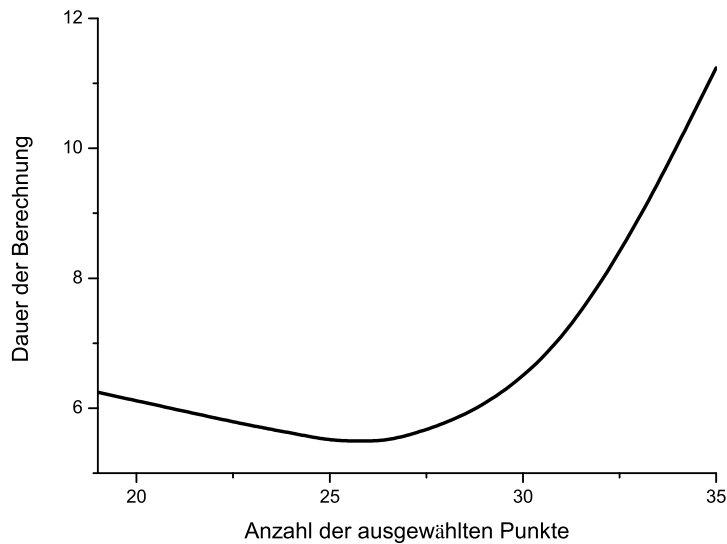


Abbildung 7: Laufzeiten (in sec.) in Abhängigkeit der Anzahl der Punkte die für die Gradientenberechnung herangezogen werden für  $N = 49$

## Literatur

- [1] M. Kenn  
Praktikum Computational Physics  
[http://www.kenn.at/Thomson/CP\\_Praktikum.pdf](http://www.kenn.at/Thomson/CP_Praktikum.pdf)
- [2] T. Pang  
An Introduction to Computational Physics  
<http://www.cambridge.org/9780521825696>
- [3] 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  
<http://iopscience.iop.org/0305-4470/27/7/032>
- [4] E. L. Altschuler, A. Perez-Garrido  
Global minimum for Thomson's problem of charges on a sphere  
PHYSICAL REVIEW E 71, 047703 s2005d
- [5] E. L. Altschuler, A. Perez-Garrido  
New Global Minima for Thomson's Problem of Charges on a Sphere  
eprint arXiv:cond-mat/0408355, 2004

$N$	$\Phi_2$	$\Phi_3$
2	-1.386294361119890618834464	0.500000000000000000000000
3	-3.295836866004329074185736	1.732050807568877293527446
4	-5.884975518070357421138707	3.674234614174767147295926
5	-8.841014310483891549523593	6.474691494688162439932513
6	-12.476649250079015569510178	9.985281374238570292810132
7	-16.364955728889845586010582	14.452977414221342935044492
8	-20.856035562920395344254024	19.675287861232762264406518
9	-25.775505451518557923405519	25.759986531269831564075702
10	-31.126246778043878220652256	32.716949460147588154557058
11	-36.840959441662003552880494	40.596450508190605386635531
12	-43.212290460889769605051860	49.165253057628801038554359
13	-49.733443751012181685493007	58.853230611702448163663916
14	-56.815626018484921140130968	69.306363296626421258489991
15	-64.295752567683324566777980	80.670244114293900795665615
16	-72.212304323901213745169917	92.911655302544943690723692
17	-80.546133922362326537644409	106.050404828618704769723959
18	-89.300574518461450711003139	120.084467447492318643087986
19	-98.399783131573028024929081	135.089467556679342023586902
20	-108.02259949168327236054422	150.881568333756503388401398
21	-118.001824270284769586747260	167.641622399270441007391589
22	-128.412015523321094605698723	185.287536149307582043997207
23	-139.156765185050209809172318	203.930190662878536162571175
24	-150.427969577257033871798249	223.347074051805105217600082
25	-161.995019980393561020053848	243.812760298765736868438436
26	-174.018846114094374038294220	265.133326317356539233571579
27	-186.503972800009041337544285	287.302615033039163091394187
28	-199.317218768249630467849122	310.491542358201849041277835
29	-212.509142341669275646776230	334.634439920415690608559896
30	-226.178510993027990301320274	359.603945903763458979431047
31	-240.220693279044602894870851	385.530838063299425204924828
32	-254.757735229560524374286281	412.261274650529310075450456
33	-269.495641648666810318794898	440.204057447647357485491267
34	-284.751704541803168113099647	468.904853281343261501637046
35	-300.384117021476206137450448	498.569872490645406797776105
36	-316.448136851175950588568484	529.122408375413805230731091
37	-332.901395047995388532374081	560.618887731043677569269937
38	-349.760394303630127890352327	593.038503566451401444520400
39	-367.018451423710506182492941	626.389009016823011272765849
40	-384.675379834696466466912086	660.675278834622413832149884
41	-402.718413297326820176447551	695.916744341887026998844434
42	-421.169023115267813943752038	732.078107543673375849167585
43	-440.006954103701394760318670	769.190846459158437637885415
44	-459.283602975193652507482983	807.174263084628075795736259
45	-478.907396506905120720618932	846.188401061078135932942994
46	-498.911695801714186631393075	886.167113639191339732495173
47	-519.323519706530157337473750	927.059270679709755183555520
48	-540.235899918565383076044489	968.713455343787632554981979
49	-561.403806236512267431118841	1011.557182653571970520046690
50	-583.057201315468738055092078	1055.182314726296098688478510

Tabelle 4: Grundniveaus

$N$	$\Phi_2$	$\Phi_3$
51	-605.067346910866386376800357	1099.819290318898223210937647
52	-627.464743870653895341297959	1145.418964319278930971887557
53	-650.276469390041350121287668	1191.922290416224368733571579
54	-673.490928794220170018033378	1239.361474729158935156853368
55	-697.083592562145086018481024	1287.772720782708749356014821
56	-721.091798488509094186600050	1337.094945275657076639651327
57	-745.482401236744034427052331	1387.383229252841733530865187
58	-770.265659583847633132791896	1438.618250640401145530026350
59	-795.456299321585321042316918	1490.773335278696756319739258
60	-821.066325586415582015796757	1543.830400976378802731806259
61	-847.015271982007054385348701	1597.941830198989007205147352
62	-873.407958476789631235783993	1652.909409898300851812190178
63	-900.162478353825406918702557	1708.879681503249983648533069
64	-927.308865977216091989588919	1765.802577927303189678658666
65	-954.852852137606949156429076	1823.667960263850183309037343
66	-982.814940066921082908670753	1882.441525304238329452254647
67	-1011.185225005835466483439361	1942.122700405507250100431599
68	-1039.893284571282481471349953	2002.874701748728449104369014
69	-1069.016372360955038649299113	2064.533483234761725049219431
70	-1098.550111692509554167644560	2127.100901550646119425017535
71	-1128.463389468367204831083687	2190.649906425766231591868476
72	-1158.840691546146617734728311	2255.001190974959902820010576
73	-1189.457396858550219673039421	2320.633883745366527004837176
74	-1220.534142820451433677466157	2387.072981838302817322169352
75	-1252.046925369203995999196626	2454.369689039641899618096952
76	-1283.926301036766464074713974	2522.674871841374482306679457
77	-1316.235619678962014090898591	2591.850152353884971339107198
78	-1348.905988380855373587070762	2662.046474566306303112397522
79	-1381.949801871424855756775864	2733.248357478772797495808946
80	-1415.406692358921083741001419	2805.355875981203972437163246
81	-1449.208938673627890453604104	2878.522829664124948761492231
82	-1483.435844911287079446281947	2952.569675286465733677116319
83	-1518.070709509229389686565681	3027.528488921087572627972008
84	-1553.090863128751587158260137	3103.465124430784004634441918
85	-1588.500624568233719710687510	3180.361442938600584362822175
86	-1624.302643731362487883492743	3258.211605712807041898392195
87	-1660.503830306499505155761578	3337.000750014479156442315764
88	-1697.106853835147910612058673	3416.720196758359898950429601
89	-1734.085032807134659655248039	3497.439018624671668837840604
90	-1771.463643530925524912601369	3579.091222722823126946160951
91	-1809.228824878921122424782206	3661.713699320022629238668895
92	-1847.385272659137450219626468	3745.291636240726975928881520
93	-1885.927916145564587129220796	3829.844338421427176590082579
94	-1924.878264292005429732659308	3915.309269620366797598227329
95	-1964.205356640300260556453424	4001.771675565012084056404834
96	-2003.939067931259511462422079	4089.154010055593459251584301
97	-2044.047955513313216619172756	4177.533599622169453512600938
98	-2084.569380798240103335432807	4266.822464156250664582381222
99	-2125.453339878216250339890440	4357.139163131829091563440626
100	-2166.754281077441072385370909	4448.350634331272873393097235

Tabelle 5: Grundniveaus



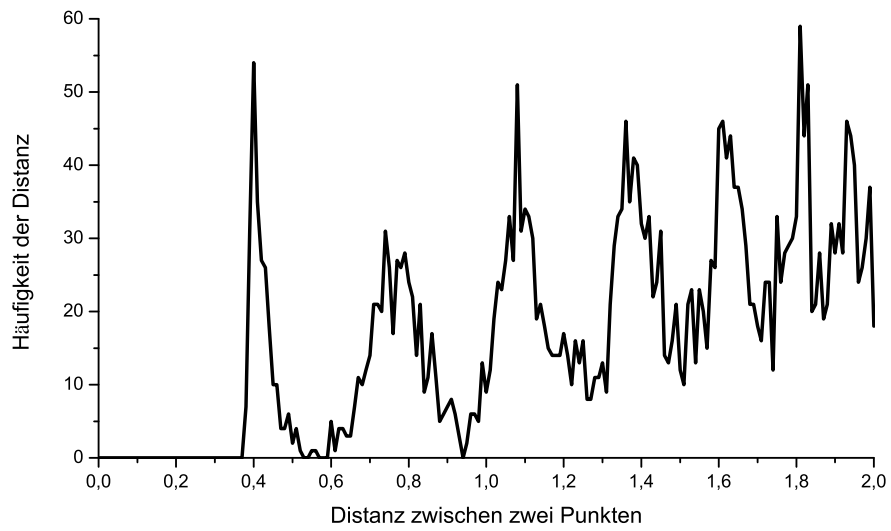


Abbildung 8: Typische Distanzen zwischen zwei Punkten in einer Minimalkonfiguration für  $N = 82$

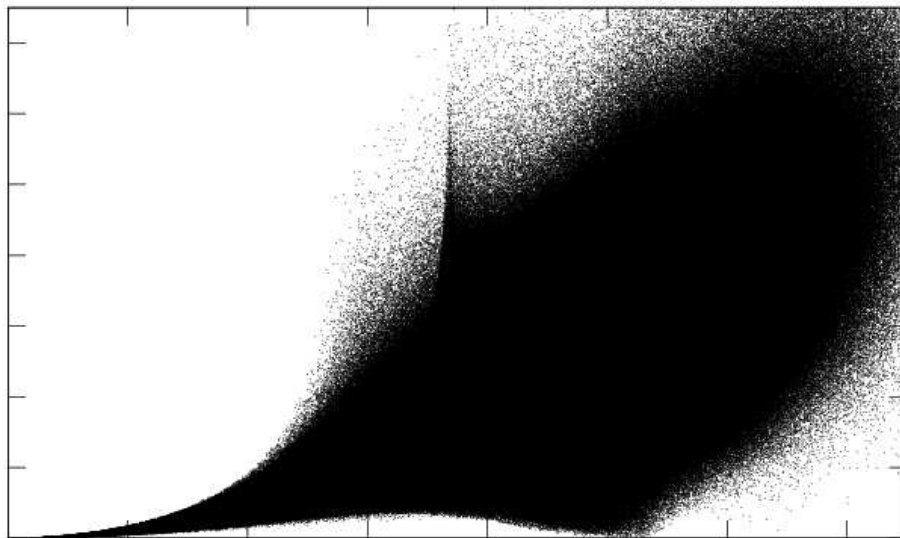


Abbildung 9: Testen des Grundzustandes für  $N = 22$  durch Verrauschen