

Docente: Dr. Carlos Barrón Romero

Estimación de la complejidad para la determinación de los clusters óptimos del potencial de Lennard Jones para 38 y 98 partículas.

Objetivo: El proyecto consiste en explorar la complejidad de los cambios necesarios para pasar de un cluster óptimo de Lennard Jones (LJ) anterior o posterior a los cluster óptimos de LJ 38 o 98 dentro de una región apropiada de una latice Cúbica (CB), sobre los clusters óptimos conocidos de 37,39, 97 y 99 partículas. Note que la interacción entre partículas es bajo el potencial de Lennard Jones normalizado (LJ):

$$LJ(r) = \frac{1}{r^{12}} - \frac{2}{r^6}$$

donde $r = \sqrt{(x-a)^2 + (y-b)^2 + (z-c)^2}$ es la distancia Euclidiana entre dos partículas en \mathbb{R}^3 en las posiciones (x, y, z) y (a, b, c) .

Es decir el proyecto es para responder las 4 preguntas:

¿Cuántos cambios hay que realizar para pasar de $cb37$ a un $cb38$ tal converga a LJ_{38}^* ?

¿Cuántos cambios hay que realizar para pasar del $cb39$ a un $cb38$ tal converga a LJ_{38}^* ?

¿Cuántos cambios hay que realizar para pasar del $cb97$ a un $cb98$ tal converga a LJ_{98}^* ?

¿Cuántos cambios hay que realizar para pasar del $cb99$ a un $cb98$ tal converga a LJ_{98}^* ?

Definición y marco teórico del problema.

La latice $CB = \{p_i = (x_i, y_i, z_i) \in \mathbb{R}^3 | x_i = i * 0.5, y_i = i * 0.5, z_i = i * 0.5, i \in \mathbb{Z}\}$

Una selección de puntos de CB es un cluster de inicio y se ha encontrado que existe un cluster en CB que converge al correspondiente cluster óptimo de LJ. Se denota como cbn al cluster de CB de inicio del cluster óptimo de n partículas, el cual se denota como LJ_n^* .

Se sugiere indexar los puntos de CB del $p1 = (0, 0, 0)$ al primer cubo, de la tapa superior de la partícula esquina en el primer cuadrante y girando en el sentido inverso a las manecillas del reloj hacia las capas inferiores.

Un cuboide esférico $CB_n(r) = \{p \in CB | d(p, 0) < r\}$ donde $d(x, y)$ es la distancia Euclidiana.

Por fuerza bruta la selección de un cluster de n partículas de $CB_n(r) \subset CB$ (sea $N = |CB_n(r)|$) es $\binom{N}{n}$. Los índices de las partículas $(p_{i_k} \in CB_n(r), k = 1, \dots, n)$ seleccionadas deben cumplir la condición: $1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_n \leq N$.

Nota: La complejidad de seleccionar n partículas del cuboide esférico $CB_n(r)$ es $\binom{N}{n}$ y la probabilidad en encontrar el LJ_n^* es el número de clusters iniciales de $CB_n(r)$ que convergen al óptimo dividido por $\binom{N}{n}$.

Hay que considerar que por simetría y por cambios de pocas partículas por otras pueden existir más de un cluster inicial que converga por minimización a LJ_n^* . Esto se debe considerar para un análisis más detallado. De momento se parte de los clusters fijos ($cb37, cb38, cb39, cb97, cb98, cb99$) en los archivos "dan.015" para $n = 37, 38, 39, 97, 98, 99$.

Los archivos $acb251b1_38.b10$ ($CB_{38}(2)$) y $acba691b1_98.b10$ ($CB_{98}(2.7)$) contienen los puntos de los cuboides esféricos LJ_{38}^* y LJ_{98}^* . En particular los radios 2 y 2.7 se determinaron experimentalmente para cubrir los casos de sus respectivos clusters.

Se considera que una partícula encendida es una partícula seleccionada de $CB_n(r)$ y apagada si no es seleccionada.

Partiendo de un cluster cbn determinar cuantos cambios de encender o apagar se requieren para obtener LJ_n^* .

O sea se busca determinar la complejidad en terminos de prender o apagar partículas de $CB_n(r)$ para pasar del cluster $n-1$ al n o bien del $n+1$ al n verificando que el cluster cbn converga por minimización al LJ_n^* .

Para responder las preguntas se tiene dos etapas

1) Encontrar una distancia mínima entre los índices de los puntos de los clusters cbn (dados en los archivos "dan.015").

Es decir dentro de un cuboide esférico acomodar por rotación y traslación una posición tal que la distancia discreta entre los índices de las partículas sea mínima.

$$d_{CB_n(r)}(cb1, cb2) = |cb1 \Delta cb2|$$

donde $|cb1 \Delta cb2|$ es la cardinalidad de la diferencia simétrica de los conjuntos.

Note que es cero si se los subconjuntos de $CB_n(r)$ $cb1$ y $cb2$ son iguales, sino es el número de puntos en que difieren.

Esto significa que al menos se tiene que $d_{CB_{38}(2)}(cb37, cb38) \geq 1, d_{CB_{38}(2)}(cb39, cb38) \geq 1, d_{CB_{98}(2.7)}(cb97, cb98) \geq 1$ y $d_{CB_{98}(2.7)}(cb99, cb98) \geq 1$.

Nota: En clase se menciono que con 2 cambios se pasa de $cb37$ a $cb39$ lo que significa que $d_{CB_{38}(2)}(cb37, cb39) = 2$. Este puede ser una restricción que se debe cumplir antes de proceder con 38.

2) Para un análisis detallado, buscar si hay más cluster iniciales cbn' tales que convergan LJ_n^* y repetir el paso anterior.

Metodología.

Deben desarrollar programas en Matlab para ordenar y calcular la distancia.

Todos los archivos de datos que necesitan están en el directorio: $CBb1_38_98$.

Los programas Matlab que se les dan son:

FunLj.m: codificación del potencial normalizado de LJ para n partículas
leerdatos.m: para leer archivos de cluster de partículas
Pgm_LJ.m: Lee un cluster, lo minimiza y lo visualiza
Pgm_plot_Cl_LJ.m: Lee un cluster y lo visualiza
S_plot_geCl_LJ_cl.m: subrutina que grafica un cluster (More information of this subroutine is in the article: Discrete Optimal Global Congergence of a Novel Evolutionary Algorithm for Clusters under Lennard Jones Potential).
El programa de ayuda para visualizacion y minimización es:
El programa particles_Menu1_v01.exe:
Se maneja por comandos de una la letra (sin return).
Los comandos que pueden usar son
para visualizar un cluster usar "o",
para minimizarlo usar "u" (se requiere en programa Mb1F32.exe),
para visualizar los números de partículas "B" (mayúscula "b"),
para salir usar "q" o "Esc".