115841 Análisis y Diseño de Algoritmos Maestría en Ciencias de la Computación TRIMESTRE 19I
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 $olj37$, $olj38$ y $olj39$ dentro de una región apropiada de una latice Cúbica (CB), sobre los clusters óptimos conocidos de 37,38 y 39 partículas. La interacción entre partículas es bajo el potencial de Lennard Jones normalizado (LJ):

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

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

Es decir el proyecto es para responder las 4 preguntas:

¿Cuantos cambios hay que realizar para pasar del $pcb37$ a un $pcb38$?

¿Cuantos cambios hay que realizar para pasar del $pcb39$ a un $pcb38$?

¿Cuantos cambios hay que realizar para pasar del $pcb39$ a un $pcb37$?

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 $pcbn$ al cluster de CB de inicio del cluster óptimo de n partículas, el cual se denota como LJ_n^* (archivos $oljn$).

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.

De momento, los clusters ($olj37, olj38, olj39$) son fijos y solo deben comparar los archivos "$pcbn$" para $n = 37, 38, 39$.

Partiendo de un cluster $pcbn$ determinar cuantas partículas coinciden y cuantas no, o sea cuantos cambios de encender o apagar se requieren para obtener $pcb(n + 1)$.

O sea se busca determinar la similaridad para pasar del cluster $n - 1$ al n o bien del $n + 1$ al n verificando que el cluster $pcbn$ converga por minimización al $oljn$ (paso final).

Para responder las preguntas se tienen dos etapas

1) Encontrar una distancia mínima entre los indices de los puntos de los clusters $pcbn$. Es decir dentro de un cuboide esferico acomodar por rotación y traslación a una posición tal que la distancia discreta entre los coordenadas de las partículas sea mínima.

$D\left(pcb1, pcb2\right) = \min_{p_i^1 \in pcb1, p_j^2 \in pcb2} \sum_{1 \leq i < j \leq \min(npcb1, npcb2)} \left\lfloor \left\|p_i^1 - p_j^2\right\| \right\rfloor + K$

donde D es la distancia entre los dos clusters $pcb1$ y $pcb2$; p_i^1, p_j^2 son las partículas más cercanas entre los clusters; $npcb1$ y $npcb2$ es la cardinalidad de los clusters $pcb1$ y $pcb2$; y K es el número de indices de partículas que no coinciden o que no son cercanas con $\left\|p_i^1 - p_j^2\right\| \leq 0.01$, como se considera la parte entera $\left\lfloor \left\|p_i^1 - p_j^2\right\| \right\rfloor$ de partículas coincidentes, se tiene que $\left\lfloor \left\|p_i^1 - p_j^2\right\| \right\rfloor = 0$. Por eso $D\left(pcb1, pcb2\right)$ es el número de índices de partículas que no coinciden o que no son cercanas. Note que es cero si se los subconjuntos de $pcb1$ y $pcb2$ son iguales, sino es el número de puntos en que difieren.

Esto significa que al menos se tiene que $D\left(pcb37, pcb38\right) \geq 1, D\left(pcb39, pcb38\right) \geq 1 = 1$ y $D\left(pcb39, pcb37\right) \geq 2$.

Nota: En clase se menciono que posiblemente haya solo 2 partículas que no coinciden entre $pcb37$ y $pcb39$ lo que significa que $D\left(cb37, cb39\right) \geq 2$ porqué pueden coincidir 37 de 39 partículas entre los clusters $pcb37$ y $pcb39$.