UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO
FIZIKA II. STOPNJA, FIZIKA KONDENZIRANE SNOVI

Tina Klobas

ORIENTACIJSKO ZAGOZDENJE DVODIMENZIOALNIH ELIPS V RAVNINI

Magistrsko delo

MENTOR: dr. Anže Božič
SOMENTOR: doc. dr. Simon Čopar

Ljubljana, 2023

1. Metodologija

Okviren potek zagozdenja sistema:

1. Generiranje dvdimenzionalne mreže N točk z Mitchellovim algoritmom [1].
2. Postavitev N elips z ekscentričnostjo e in naključnimi začetnimi orientacijami.
3. Implementacija prekrivalne funkcije [2] za zaznavanje trkov med elipsami.
4. Postopno večanje elips in relaksacija vrtenja (Monte Carlo).
5. Analiza konfiguracij.

Dvodimenzionalnemu prostoru dodamo še periodične robne pogoje, ki jih vključimo na naslednji način:

```
dx = point2 - point1
if dx > 0.5*width:
    dx = dx - width
elif dx < -0.5*width:
    dx = dx + width
```

1.1 Mitchellov algoritem

Okviren potek algoritma:

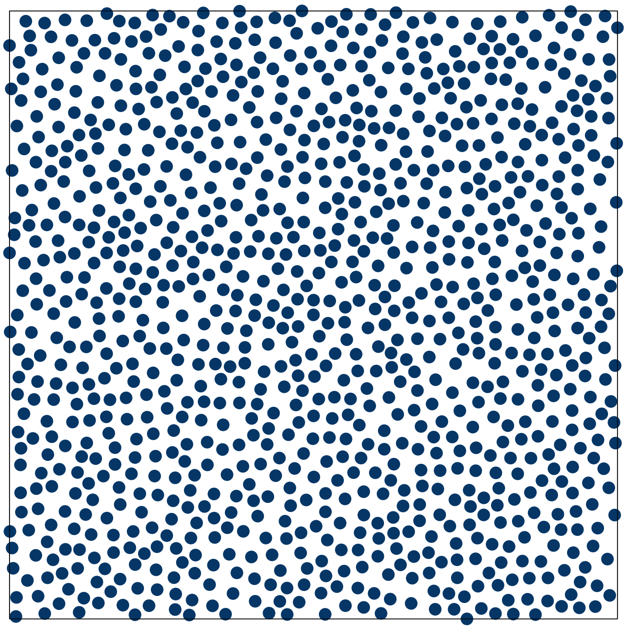
1. za začetni točki zgeneriramo naključni poziciji,
2. zgeneriramo naključne pozicije kandidatov za naslednjo točko,
3. izberemo tistega kandidata, ki je najdlje od vseh točk porazdelitve (ima največjo minimalno oddaljenost),
4. ponovimo korak 2 dokler ne dobimo željeno število točk.

Med algoritmom število kandidatov povečujemo sorazmerno s številom že obstoječih točk N. Pri nalogi smo tako na vsakem koraku generirali $\lfloor N/2 \rfloor + 1$ kandidatov.

1.2 Eliptična kontaktna funkcija

Kontaktna funkcija je dober kriterij za prekrivanje med dvema elipsama.[1]

[1] V nalogi uporabljamo dvodimenzionalni ekvivalent tridimenzionalne funkcije povzete po [2].



Slika 1.1: Porazdelitev 1024 točk.

1.2.1 Ena elipsa

Elipso A definiramo s funkcijo E_a, ki zadošča naslednjemu pogoju

$$E_a(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_a, \theta_a) \begin{cases} < 1 & \text{znotraj A} \\ = 1 & \text{na površini A} \\ > 1 & \text{zunaj A} \end{cases} . \tag{1.1}$$

Izberemo

$$E_a = (\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_a)^\top \mathbf{A}^{-1} (\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_a), \tag{1.2}$$

kjer je $\boldsymbol{r}_a$ center elipse. Matriko $\mathbf{A}$ lahko zapišemo kot

$$\mathbf{A}(\theta_a) = \mathbf{R}(\theta_a) \hat{\mathbf{A}} \mathbf{R}^\top(\theta_a), \tag{1.3}$$

kjer je $R(\theta)$ rotacijska matrika, $\hat{\mathbf{A}}$ pa je definirana z velikostjo polosi elipse a_1 in a_2 ter enotskih vektorjev $\boldsymbol{e}_i$

$$\hat{\mathbf{A}} = \sum_{i=1}^{2} a_i^2 \boldsymbol{e}_i \boldsymbol{e}_i^\top . \tag{1.4}$$

Matriki $\mathbf{A}$ in $\mathbf{A}^{-1}$ sta simetrični in pozitivno definitni.

1.2.2 Prekrivanje dveh elips

Definiramo funkcijo

$$F(\boldsymbol{r}, \lambda) = \lambda E_a(\boldsymbol{r}) + (1 - \lambda) E_a(\boldsymbol{r}), \tag{1.5}$$

ki je odvisna od pozicij $\boldsymbol{r}_a$, $\boldsymbol{r}_b$ in orientacij θ_a, θ_b dveh elips A ter B. Parameter λ omejimo na interval $[0, 1]$, tako, da je $F(\boldsymbol{r}, \lambda) \geq 0$. Pri fiksni vrednosti λ ima $F(\boldsymbol{r}, \lambda)$ enolični minimum. Pri $\lambda = 0$ je minimum $F = 0$ pri $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_b$, pri $\lambda = 1$

pa je minimum $F = 0$ pri $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_a$. Za vse vmesne vrednosti λ, je vrednost $\boldsymbol{r}$ pri minimumu $F(\boldsymbol{r}, \lambda)$ določena z

$$\nabla F(\boldsymbol{r}, \lambda) = 0, \tag{1.6}$$

oziroma

$$\lambda \mathbf{A}^{-1}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_a) + (1-\lambda)\mathbf{B}^{-1}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_b) = 0. \tag{1.7}$$

To lahko napišemo tudi kot

$$\begin{aligned} \boldsymbol{r}(\lambda) - \boldsymbol{r}_a &= (1-\lambda)\mathbf{A}\mathbf{C}^{-1}\boldsymbol{r}_{a\,b}, \\ \boldsymbol{r}(\lambda) - \boldsymbol{r}_b &= -\lambda \mathbf{B}\mathbf{C}^{-1}\boldsymbol{r}_{a\,b}, \end{aligned} \tag{1.8}$$

kjer je $\boldsymbol{r}_{a\,b} = \boldsymbol{r}_b - \boldsymbol{r}_a$ in $\mathbf{C}$ matrika

$$\mathbf{C} = (1-\lambda)\mathbf{A} + \lambda \mathbf{B}. \tag{1.9}$$

Rešitev 1.8 ustavimo v 1.5, pri čemer upoštevamo tudi 1.9 in definiramo funkcijo f kot

$$f(\lambda) = F(\boldsymbol{r}(\lambda), \lambda) = \lambda(1-\lambda)\boldsymbol{r}_{a\,b}^{\top} C^{-1}\boldsymbol{r}_{a\,b}. \tag{1.10}$$

2. Literatura

[1] A. Wolfe, *Ray Tracing Gems II: Next Generation Real-Time Rendering with DXR, Vulkan, and OptiX"* (Apress, Berkeley, CA, 2021) str. 367–394.

[2] J. W. Perram in M. Wertheim, *Statistical mechanics of hard ellipsoids. I. Overlap algorithm and the contact function*, Journal of Computational Physics **58**, 409 (1985).