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. Z Mitchellovim algoritmom [1] ustvarimo dvodimenzionalno mrežo z N točkami.
2. Točke postanejo središča 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.

Periodične robne pogoje v kodi implementiramo 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. Postavimo začetni točki na naključna položaja.
2. Zgeneriramo naključne položaje kandidatov za naslednjo točko.
3. Izberemo kandidata, ki je najdlje od vseh točk porazdelitve (ima največjo minimalno oddaljenost).
4. Ponavljamo prejšnje korake dokler ne dosežemo izbranega števila točk.

Na vsaki ponovitvi število kandidatov povečamo sorazmerno s številom že obstoječih točk n. Pri nalogi smo tako vsakič generirali $\lfloor n/2 \rfloor + 1$ kandidatov.
Primer za porazdelitev 1024 točk je prikazana na sliki 1.1. Zdaj v točke postavimo elipse enakih velikosti (a, b in e) in naključnih orientacij θ_i. Potrebujemo še kriterij za zaznavanje prekritih elips, kar je predstavljeno v naslednjem razdelku.

1.2 Eliptična kontaktna funkcija

Za zaznavanje prekrivanja para elips implementiramo kontaktno funkcijo, povzeto po [2].

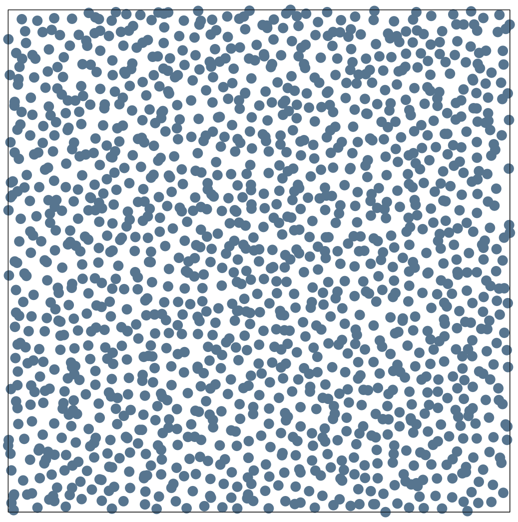

Figure 1.1: Porazdelitev 1024 točk.

1.2.1 Ena elipsa

Elipsa A je definirana s centrom $\boldsymbol{r}_A$, orientacijo θ_A in pozitivno definitno kvadratično formo $\mathbf{A}$ kot množica točk, za katero velja

$$E_A(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_A,\theta_A) = (\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_A)^\top \mathbf{A}^{-1}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_A) \begin{cases} <1 & \text{znotraj A,} \\ =1 & \text{na površini A,} \\ >1 & \text{zunaj A.} \end{cases} \tag{1.1}$$

Z uporabo rotacijske matrike $R(\theta)$ lahko $\mathbf{A}$ zapišemo kot

$$\mathbf{A}(\theta_A) = \mathbf{R}(\theta_A)\hat{\mathbf{A}}\mathbf{R}^\top(\theta_A). \tag{1.2}$$

Kjer je $\hat{\mathbf{A}}$ določena z velikostjo polosi elipse a_1 in a_2 ter enotskih vektorjev $\boldsymbol{e}_i$

$$\hat{\mathbf{A}} = \sum_{i=1}^{2} a_i^2 \boldsymbol{e}_i \boldsymbol{e}_i^\top. \tag{1.3}$$

1.2.2 Prekrivanje dveh elips

Definiramo funkcijo

$$F(\boldsymbol{r},\lambda) = \lambda E_A(\boldsymbol{r}) + (1-\lambda)E_B(\boldsymbol{r}), \tag{1.4}$$

kot vsoto dveh elips A in B, ter izbranega parametra λ. Tega 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. Za skrajni vrednosti lahko trivialno zaključimo, da je minimum $F=0$ pri $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_B$ za $\lambda=0$ oziroma pri $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_A$ za $\lambda=1$. Za vse vmesne vrednosti λ lego minimuma $\boldsymbol{r}$ dobimo z minimizacijo. Sledi

$$\nabla F(\boldsymbol{r},\lambda) = 0, \tag{1.5}$$

oziroma

$$\lambda\mathbf{A}^{-1}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_A) + (1-\lambda)\mathbf{B}^{-1}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_B) = 0. \tag{1.6}$$

Rešitev minimizacije je pot $\boldsymbol{r}(\lambda)$ med centroma elips, ki jo lahko izrazimo iz enačbe 1.6 kot sistem

$$\begin{aligned} \boldsymbol{r}(\lambda) - \boldsymbol{r}_A &= (1-\lambda)\mathbf{A}\mathbf{C}^{-1}\boldsymbol{r}_{AB}, \\ \boldsymbol{r}(\lambda) - \boldsymbol{r}_B &= -\lambda\mathbf{B}\mathbf{C}^{-1}\boldsymbol{r}_{AB}, \end{aligned} \tag{1.7}$$

kjer sta $\boldsymbol{r}_{AB} = \boldsymbol{r}_B - \boldsymbol{r}_A$ in $\mathbf{C}$ vsota

$$\mathbf{C} = (1-\lambda)\mathbf{A} + \lambda\mathbf{B}. \tag{1.8}$$

saj sta matriki $\mathbf{A}$ in $\mathbf{B}$ pozitivno definitni. Rešitev 1.7 uporabimo v enačbi 1.4, pri čemer upoštevamo tudi enačbo 1.8 in definiramo funkcijo f, ki ni več eksplicitno odvisna od $\boldsymbol{r}(\lambda)$

$$f(\lambda) = F(\boldsymbol{r}(\lambda), \lambda) = \lambda(1-\lambda)\boldsymbol{r}_{AB}^{\top}\mathbf{C}^{-1}\boldsymbol{r}_{AB}. \tag{1.9}$$

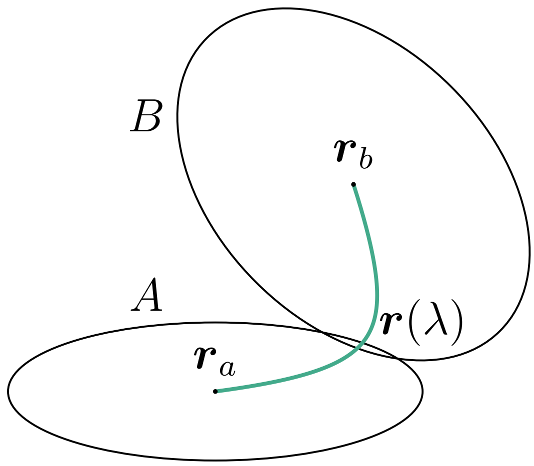

Figure 1.2: Minimalna pot $\boldsymbol{r}(\lambda)$ gre skozi presek elips A in B.

Poglejmo kako se obnaša pot $\boldsymbol{r}(\lambda)$, $\lambda \in [0,1]$, ki povezuje centra elips med seboj – kar lahko vidimo na sliki 1.2. Iz enačbe 1.1 sledi, da je vrednost $F(\boldsymbol{r}, \lambda)$ na območju izven obeh elips $F(\boldsymbol{r}, \lambda) > 1$. Če se A in B ne sekata, potem mora imeti pot minimuma $F(\boldsymbol{r}, \lambda) > 1$ vrednost večjo od 1. Če se A in B prekrivata potem je vrednost $F(\boldsymbol{r}, \lambda) < 1$ na preseku $A \cap B$ za katerokoli vrednost $\lambda \in [0,1]$. Sledi, da je vrednost minimuma $F(\boldsymbol{r}, \lambda) < 1$ zagotovo manjša od 1. To pomeni, da pot $\boldsymbol{r}(\lambda)$ zagotovo ne bo šla izven območij A in B. Zaključimo, da za vrednosti $F(\boldsymbol{r}(\lambda), \lambda) = f(\lambda)$ velja

$$\max_{0<\lambda<1} f(\lambda) \begin{cases} < 1 & A \text{ in } B \text{ se prekrivata,} \\ = 1 & A \text{ in } B \text{ sta tangentni,} \\ > 1 & A \text{ in } B \text{ se ne dotikata.} \end{cases} \tag{1.10}$$

Te lastnosti izkoristimo pri definiciji kontaktne funkcije med dvema elipsama, tako da velja

$$F_{AB}(\boldsymbol{r}_{AB}, \theta_A, \theta_B) = \max_{0<\lambda<1} f(\lambda) = \mu^2. \tag{1.11}$$

Vrednost μ je linearni faktor s katerim moramo množiti elipsi A in B, da postaneta tangentni.

1.2.3 Zaznavanje prekrivanj s kontaktno funkcijo

Vpeljano kontaktno funkcijo uporabimo na porazdelitvi elips, ki smo jo zgenerirali z Mitchellovim algoritmom. Za primer poglejmo sliko 1.3, ki prikazuje porazdelitev 128 elips. Izberemo naključno elipso in pogledamo njeno okolico polmera $2a$. S tem zmanjšamo število parov elips na katerih moramo računati kontaktno funkcijo.

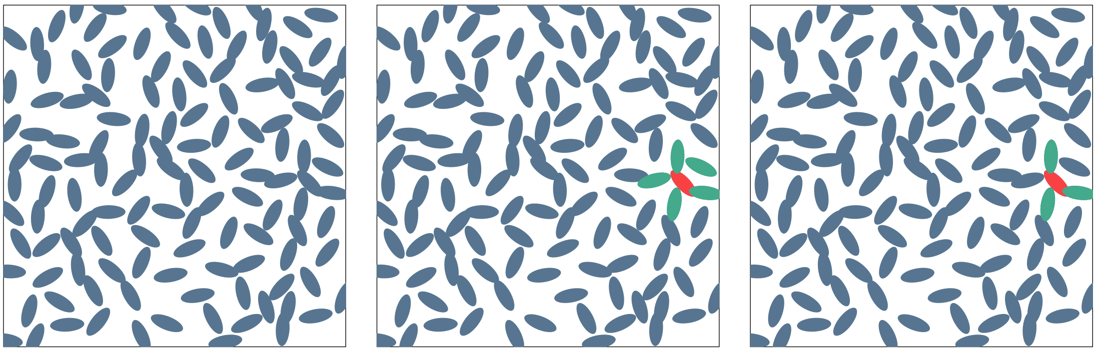

Figure 1.3: Prikaz porazdelitve 128 elips. Na sredinski sliki izberemo naključno elipso in pogledamo njeno okolico polmera $2a$. Na zadnji sliki so označene samo še tiste elipse iz okolice s katerimi se izbrana elipsa prekriva.

1.3 Numerika

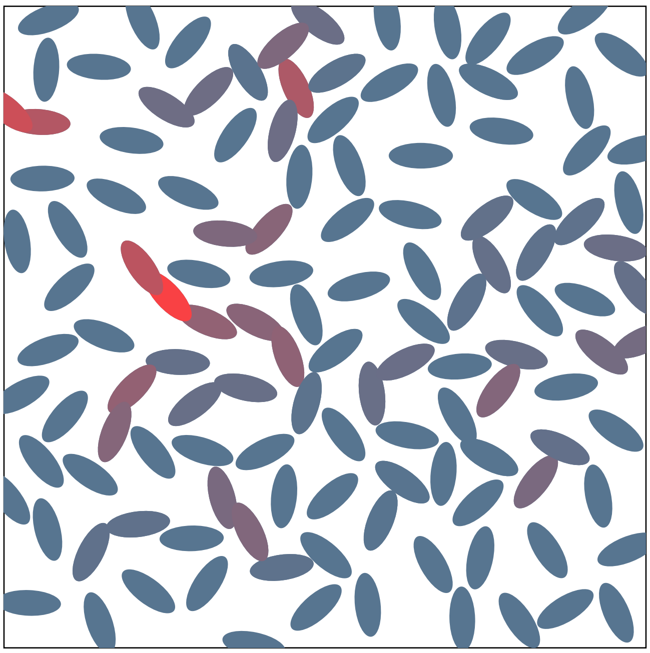

Figure 1.4: Barva prekritih elips je odvisna od njihove energije.

1.3.1 Različni koraki rasti

Pri isti začetni porazdelitvi točk, večkrat zgeneriramo porazdelitve elips z različnimi začetnimi naključnimi orientacijami. Na sliki 1.5 je prikazan tak primer pri koraku rasti $\Delta a = 0,1$ pri začetni velikosti $a_0 = 5$ in končni $a = 8$. Razmerje med polosmi

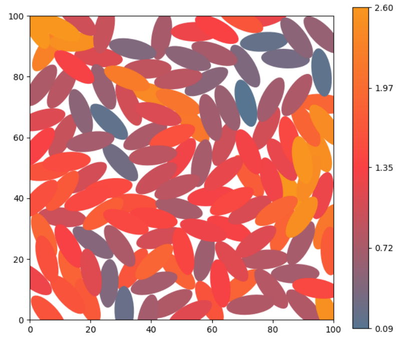

Figure 1.5: Končno zagozdenje sistema iz začetne porazdelitve 128 elips in naključnih začetnih orientacijah. Velikost koraka je $\Delta a = 0,1$.

je $a/b = 5/2$. Spodaj so prikazani grafi energije, povprečnega števila kontaktov na elipso, orientacijske korelacijske funkcije in števila sprejetih in zavrnjenih rotacij med računanjem. *!popravi graf napake rotacij!*

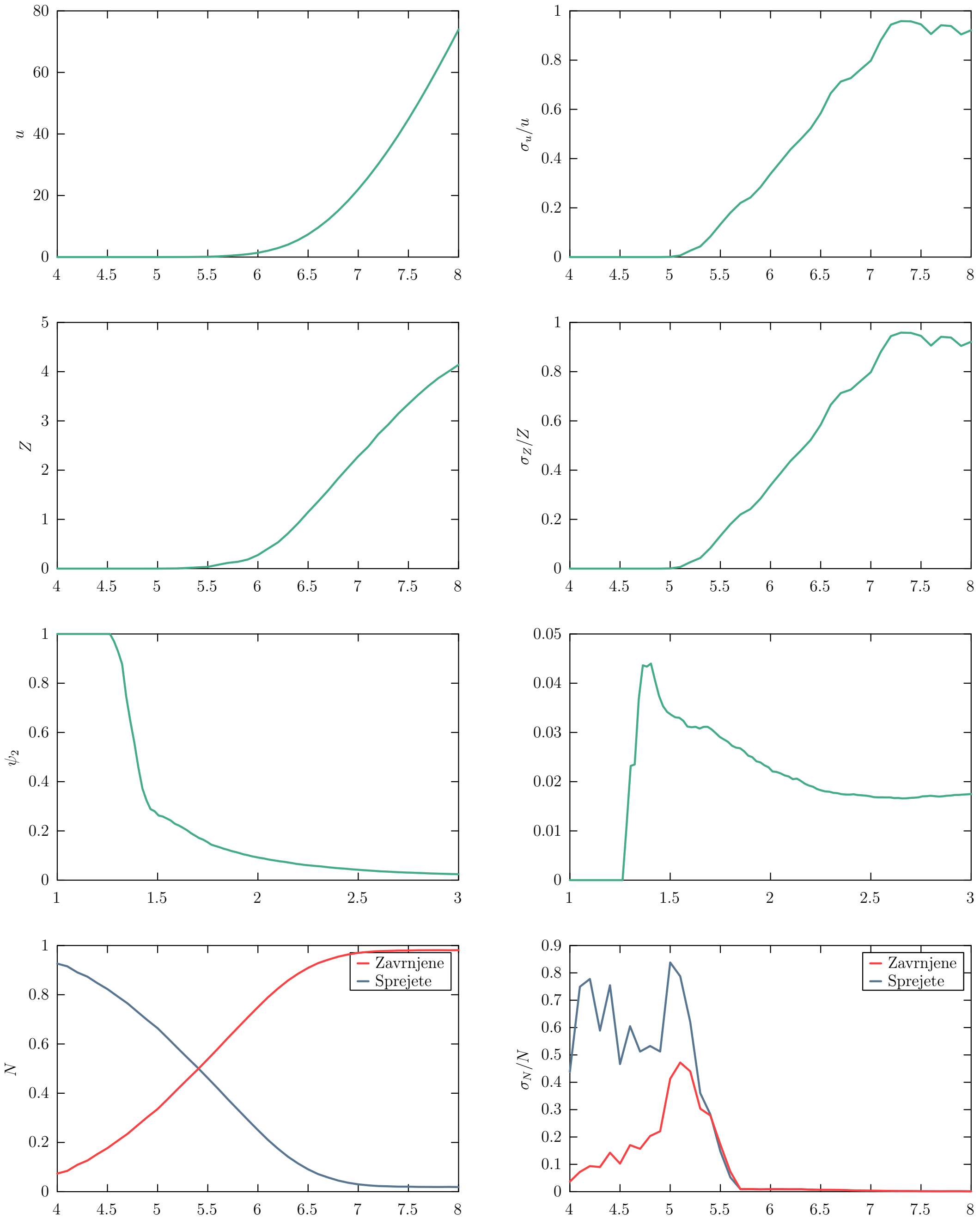

Figure 1.6: Spreminjanje energije, povprečnega števila kontaktov s sosednjimi elipsami, korelacijske orientacijske funkcije in števila sprejetih ter zavrnjenih rotacij tekom relaksacije sistema. Povprečeno po 100 poskusih relaksacije in 10.000 poskusih rotacije z metodo Monte Carlo.

2. Literatura

[1] A. Wolfe, *Ray Tracing Gems II: Next Generation Real-Time Rendering with DXR, Vulkan, and OptiXˇ* (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).