

Rapport de TIPE 2006

Résolution du "problème de Thomson"

Mise en place du problème

Définition du problème

Dans le but de rechercher une "meilleure" configuration de points à la surface d'une sphère, nous définissons d'abord ce que l'on cherche : dans \mathbb{R}^3 on définit la sphère unité par $S^2 = \{x \in \mathbb{R}^3 / |x| = 1\}$ et on appelle l'ensemble des configurations de N points sur la sphère l'ensemble $P_N = \{p \subset S^2 / |p| = N\}$.

Meilleure configuration

Définition

On qualifie alors la qualité d'une configuration à l'aide d'une fonction $V : P_N \rightarrow \mathbb{R}$ définie par :

$V(p) = \sum_{\substack{(a,b) \in p^2 \\ a \neq b}} \frac{1}{|a-b|^\alpha}$ où α est un réel non nul. Dans le cadre de ce TIPE nous nous intéresserons aux

deux cas $\alpha=1$ et $\alpha \rightarrow +\infty$ (dans ce dernier cas, on considérera que $V(p) = \inf_{\substack{(a,b) \in p^2 \\ a \neq b}} |a-b|$) qui se prêtent

particulièrement à la modélisation que nous allons envisager. La meilleure configuration sera celle qui minimise la fonction V dans le cas $\alpha=1$, ou celle qui la maximise dans l'autre cas.

Existence

On justifie rapidement de l'existence de ces meilleures configurations par le fait que S^2 et donc P_N sont compacts. La fonction V étant minorée dans le cas $\alpha=1$ (par exemple par 0) et majorée dans l'autre cas (par exemple par 2), l'existence d'une meilleure configuration est assurée.

Evaluation

Dans la suite, toutes les notations seront données pour le cas $\alpha=1$ afin d'alléger le texte. Les modifications dans l'autre cas sont minimales pour le formalisme.

On note $r(N)$ le minimum de la fonction V sur P_N . Puis pour $p \in P_N$ on note $q(p) = \frac{V(p) - r(N)}{r(N)}$. Dans un premier temps, on peut trouver des valeurs de $r(N)$ dans [1] ou [4].

Mais dans la suite, j'utiliserai uniquement des valeurs générées par mon programme.

Objet du TIPE

L'objet de ce TIPE est, par la modélisation informatique du problème ainsi que de méthodes empiriques pour le résoudre, de déterminer les meilleures méthodes de recherche de solutions. Pour cela, le seul critère que l'on retiendra est le temps de calcul nécessaire pour obtenir pour un N et un $\varepsilon > 0$ donnés, une configuration p avec $q(p) < \varepsilon$.

On remarque pour l'instant – c'est ce qui justifiera une partie du TIPE – que dans le cas $\alpha=1$, V(p) représente l'énergie potentielle d'interaction électrique d'un système où les points de p sur S^2 seraient des particules chargées (portant une charge formelle de 1). Ceci explique qu'on utilisera les termes d'énergie potentielle du système pour qualifier V(p).

Utilité

Outre le fait qu'il s'agit d'un problème d'esthétique, la recherche de ces configurations trouve de nombreuses applications industrielles (par exemple dans la fabrication des balles de golf – les petits trous à leur surface servant à améliorer la qualité de la trajectoire –, ou la recherche de fullerènes) et mathématiques (par exemple pour calculer avec précision des intégrales sphériques).

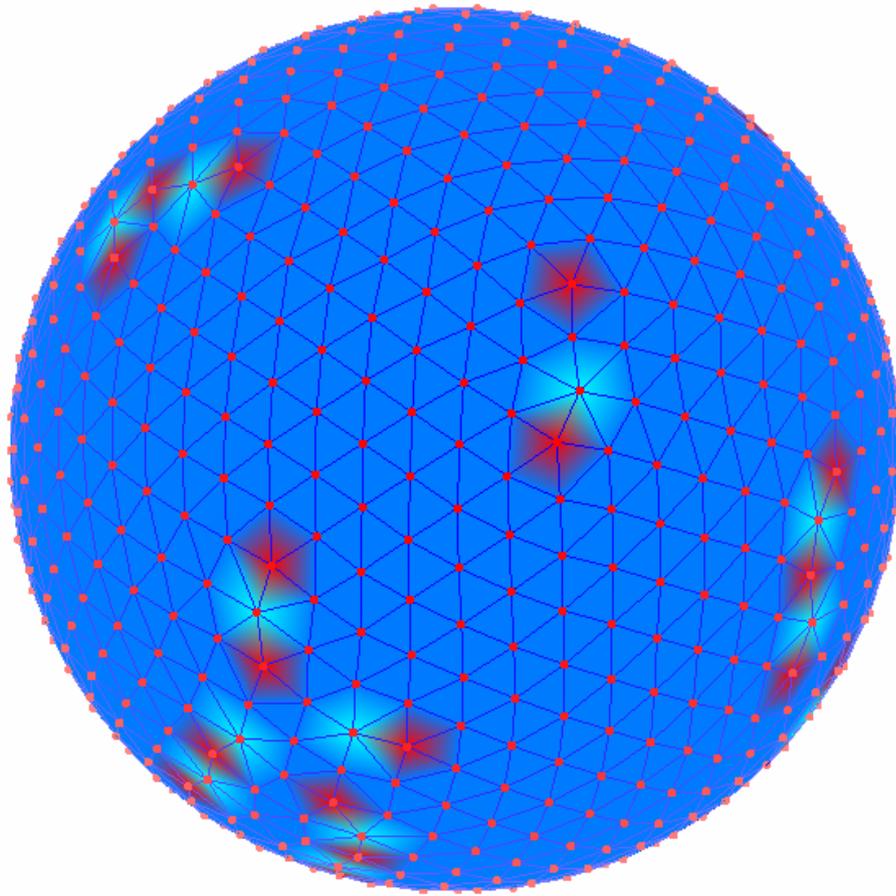


FIG 1 : CONFIGURATION A 800 POINTS REPRESENTEE AVEC SON ENVELOPPE CONVEXE (EN CLAIR LES POINTS POUR LESQUELS LE POTENTIEL D'INTERACTION EST LE PLUS FAIBLE ET EN ROUGE CEUX POUR LESQUELS IL EST ELEVE).

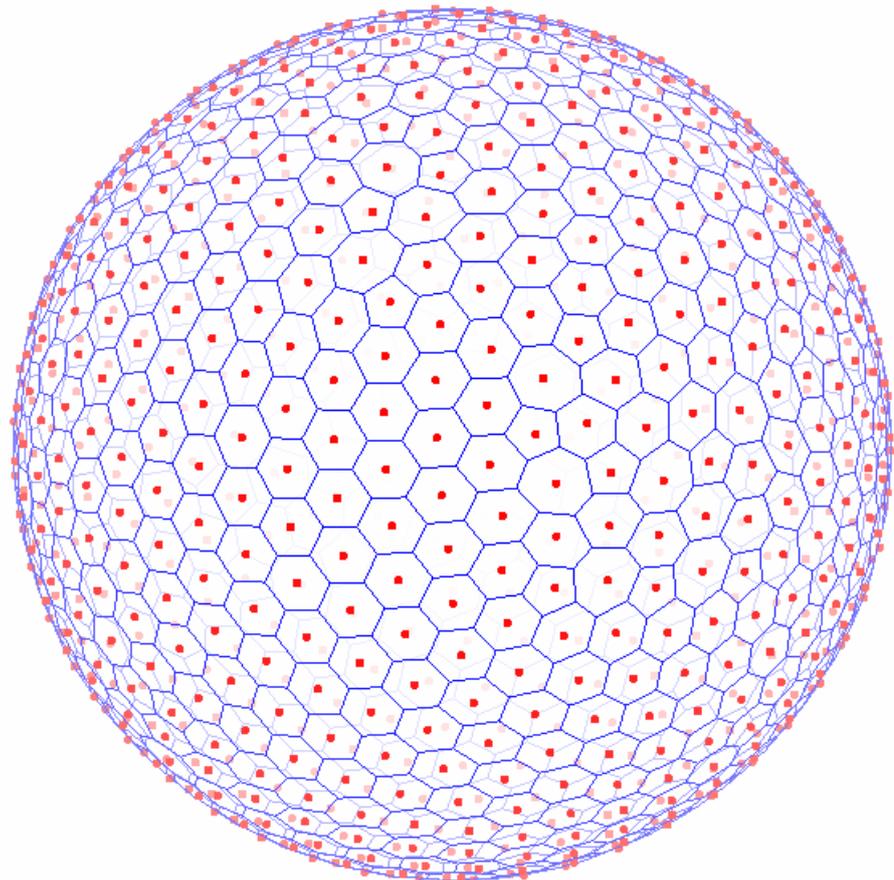


FIG 2 : LA REPRESENTATION DUALE DE LA MEME CONFIGURATION : LES POINTS ET UNE APPROXIMATION DE LEURS CELLULES DE DIRICHLET.

Première approche

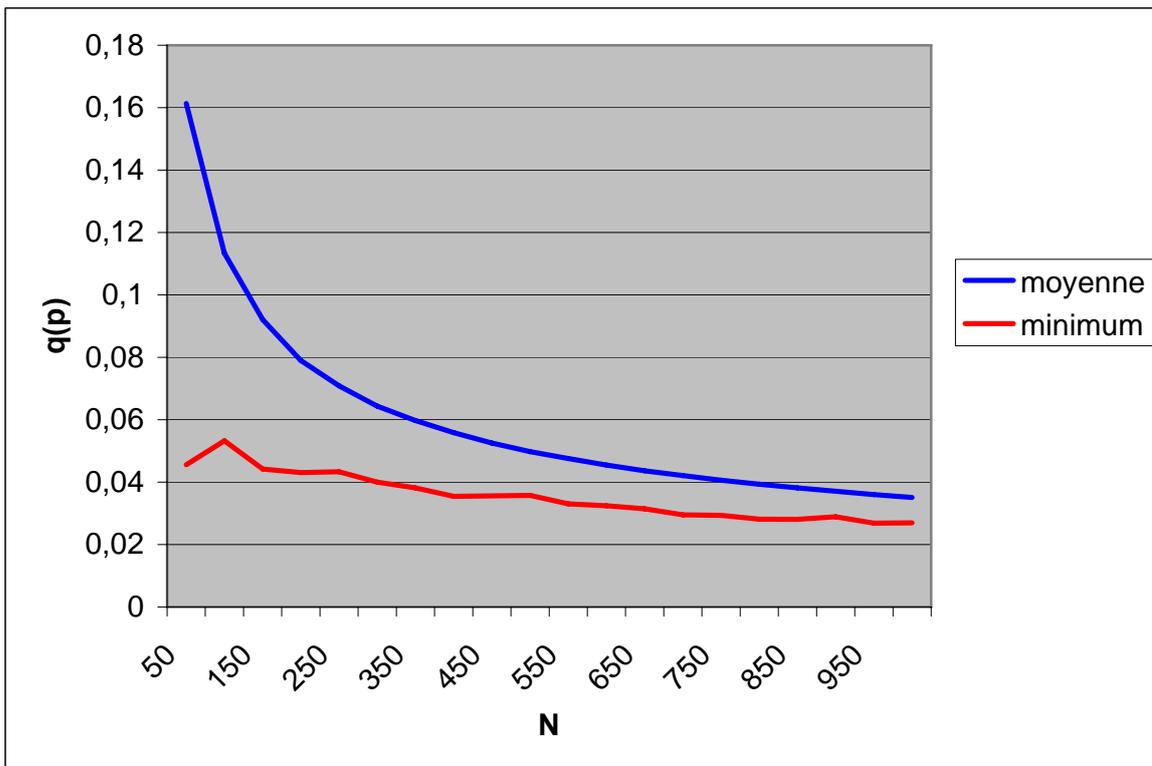
Dans cette partie nous allons considérer des méthodes "naïves" permettant en un temps linéaire en N d'obtenir des configurations présentant un $q(p)$ petit.

Au hasard

En premier lieu, vient la nécessité de placer les points sur la sphère. Mais déjà là, des considérations sont à prendre en compte pour que l'espérance du tirage d'un point sur la sphère soit bien homogène : le plus simple est de tirer "au hasard" des points dans $[-1; 1]^3$ et de ne retenir que les points dont la norme est inférieure à 1 (ceci afin de ne pas obtenir plus de points dans les "coins").

Comme on peut s'y attendre, plus le nombre de points est important plus on est proche en moyenne des meilleures valeurs de $q(p)$. Mais même avec des valeurs basses de $q(p)$, ces configurations n'ont pas la régularité que l'on attend.

FIG 3 : RESULTATS OBTENUS POUR DES SERIES DE 10 000 TIRAGES ALEATOIRES POUR DIFFERENTES VALEURS DE N.



Spirale

Une idée intuitive, soutenue par le fait que la surface de la couronne située sur la sphère entre les abscisses x et $x+h$ vaut : $S(\theta_1 = \arccos(x), \theta_2 = \arccos(x+h)) = 2\pi(\cos(\theta_2) - \cos(\theta_1)) = 2\pi h$ et ne dépend pas de x . Donc en répartissant les points dans N couronnes de hauteur $2/N$ chaque point peut "contrôler" une même aire. Le plus simple est de les placer en spirale ; mais une recherche préalable est nécessaire pour déterminer une constante permettant de construire cette spirale tout en minimisant $q(p)$. Je suis ici [1] et [6] en prenant une distance de $3,6/\sqrt{N}$ mesurée le long des parallèles entre chaque point. On trouvera à l'annexe 4 des graphiques représentant $V(p)$ en fonction de ce paramètre (la constante au dessus de la racine).

Cette méthode se révèle particulièrement efficace : on obtient en temps constant une très bonne configuration, d'autant meilleure que N est grand comme on peut le lire sur le graphique ci-dessous.

FIG 4 : VALEUR DE $q(p)$ APRES PLACEMENT SELON UNE SPIRALE POUR DIFFERENTES VALEURS DE N.

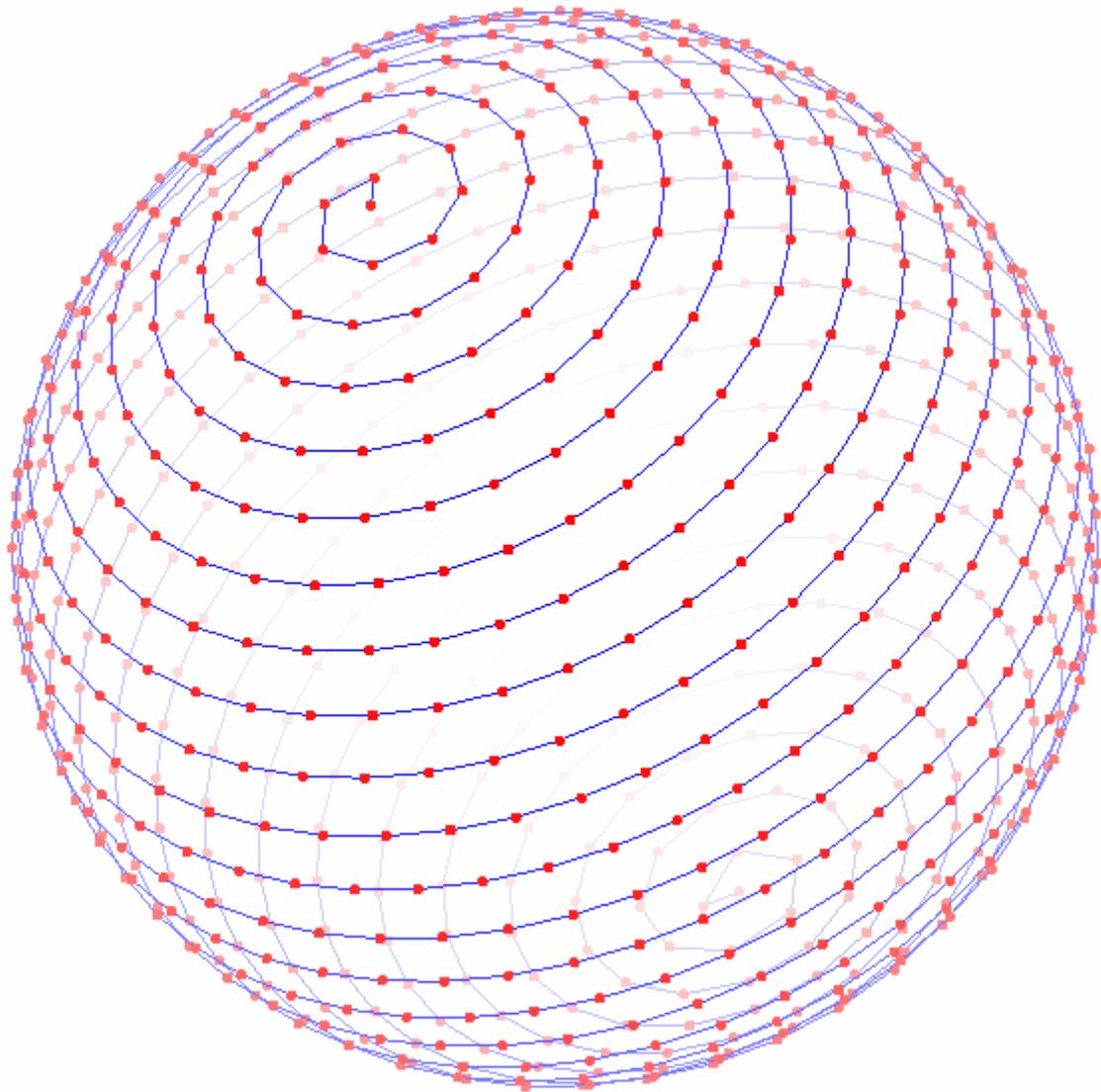
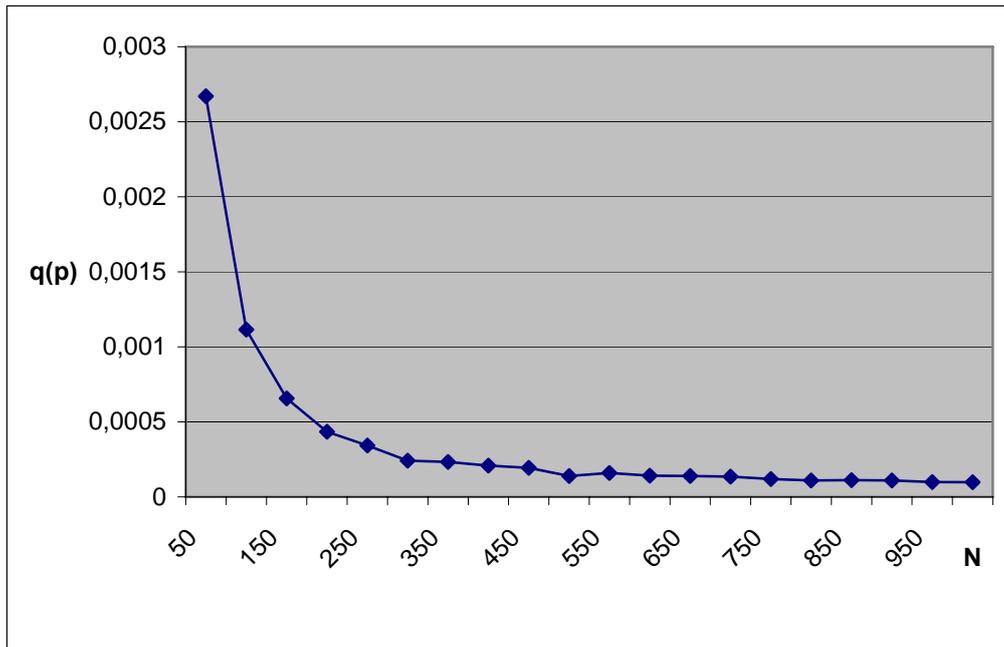


FIG 5 : REPARTITION DE 800 POINTS SUR UNE SPIRALE, AVEC VISUALISATION DE CETTE SPIRALE.

Méthodes physiques

Comme annoncé, on peut donner un sens physique à ce problème : il s'agit de minimiser un potentiel de Coulomb pour un ensemble de N particules chargées.

Avec de la mécanique ...

Ayant donné un sens physique au problème, on peut tenter de le résoudre par des méthodes physiques. On résout alors avec la méthode d'Euler le système $\frac{d^\beta x_i}{dt^\beta} = K \sum_{j < N, j \neq i} f_{j \rightarrow i}$ (ce système étant

stable et peu sensible aux conditions initiales, des raffinements, tel que l'utilisation de la méthode de Runge-Kutta, sont inutiles). En premier lieu, on utilise $\beta=2$ pour suivre le modèle physique, mais le système est alors "trop" stable et son évolution est stoppée dans des minimums locaux de $V(p)$. L'utilisation de $\beta=1$ permet d'éviter dans une certaine mesure ce phénomène.

Bien que de complexité temporelle proportionnelle à N^2 , cette méthode est celle qui fournit les meilleurs résultats pour le cas $\alpha=1$ et c'est celle avec laquelle j'ai construit les plupart des valeurs fournies en annexe. En effet, la convergence de $q(p)$ est d'autant plus rapide avec cette méthode que N est grand. Ce qui s'explique par le fait que l'état initial est "plus proche" de l'état final dans ce cas.

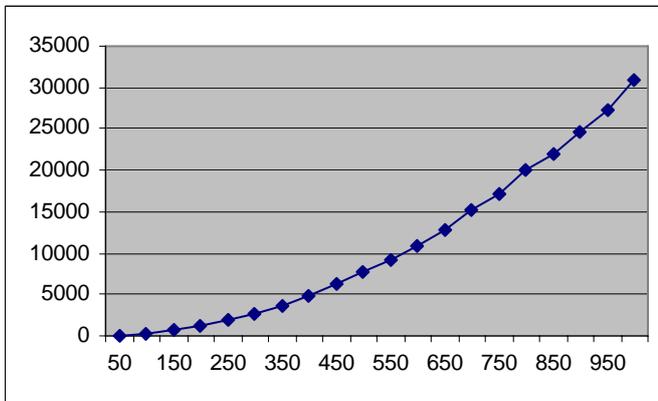


FIG 6 : TEMPS EN MILLISECONDES, EN FONCTION DE N, POUR EFFECTUER 1000 ITERATIONS DE L'ALGORITHME.

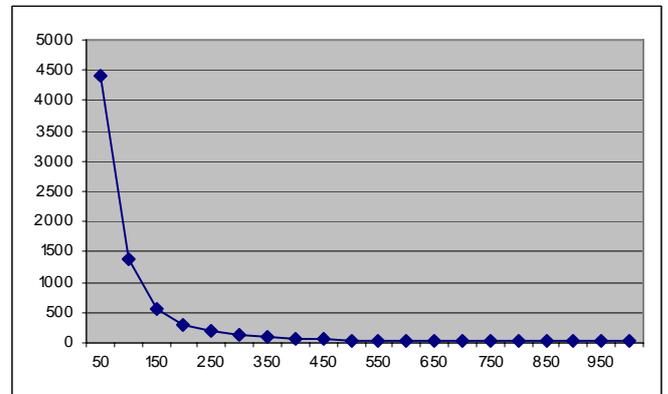


FIG 7 : NOMBRE MOYEN D'ITERATIONS NECESSAIRES, EN FONCTION DE N, POUR ATTEINDRE $Q(P)=0.0005$.

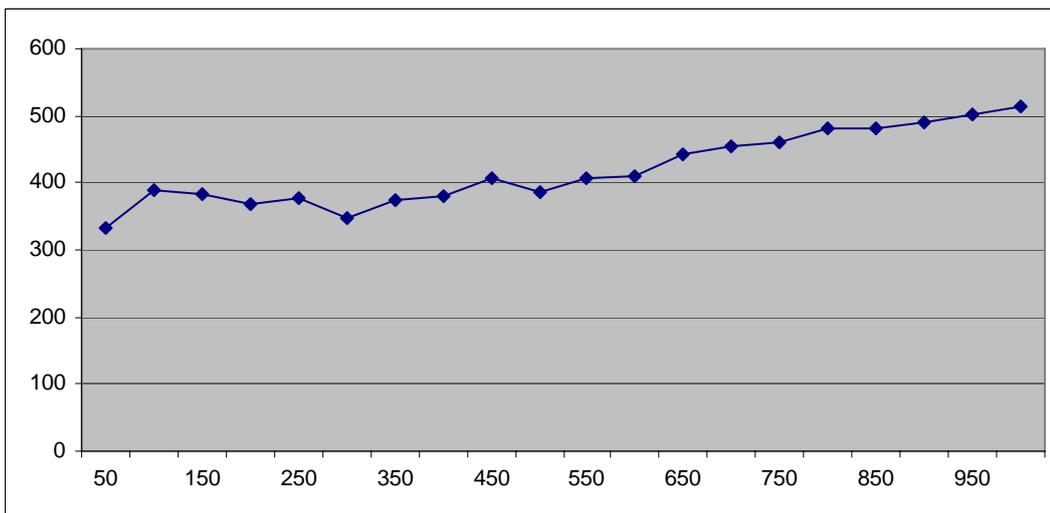


FIG 8 : TEMPS MOYEN EN MILLISECONDES, EN FONCTION DE N, POUR OBTENIR $Q(P)=0.0005$ AVEC CET ALGORITHME EN PARTANT D'UNE CONFIGURATION ALEATOIRE.

... et de la thermodynamique

En reprenant l'idée de modification aléatoire, on peut essayer de résoudre le problème avec une loi de Monte-Carlo où la configuration est modifiée aléatoirement, et où la modification est conservée suivant une probabilité en $\exp\left(\frac{-\Delta V(p)}{K}\right)$ analogue à la loi d'Arrhenius. Mais la probabilité d'apparition d'une meilleure configuration lorsque $q(p)$ est déjà petit est trop faible pour que cette méthode soit utilisable.

Méthodes mathématiques

Après ces premières méthodes, on peut regarder le problème sous un angle plus géométrique pour construire de nouvelles approximations des solutions.

En jouant sur les distance

Dans le cas $\alpha \rightarrow +\infty$, pour tenter de maximiser le minimum des distances entre les points, une autre méthode consiste à éloigner légèrement les deux points les plus proches. Cette méthode est particulièrement efficace pour obtenir de bonnes valeurs de $V(p)$. Ce résultat repose sur le fait que, comme on le voit sur la figure 1, des points dont l'énergie potentielle est élevée jouxtent souvent des points dont l'énergie est plus faible que la moyenne. L'éloignement d'un point ne contribue donc pas tout de suite à augmenter l'énergie potentielle des points en direction desquels il se déplace.

La convergence peu satisfaisante de $V(p)$ vers $r(p)$ avec cet algorithme et le fait que celui-ci soit en temps proportionnel à N^2 (la recherche des points les plus proches) en font une mauvaise méthode. Mais, comme nous allons le voir, ceci peut être grandement amélioré.

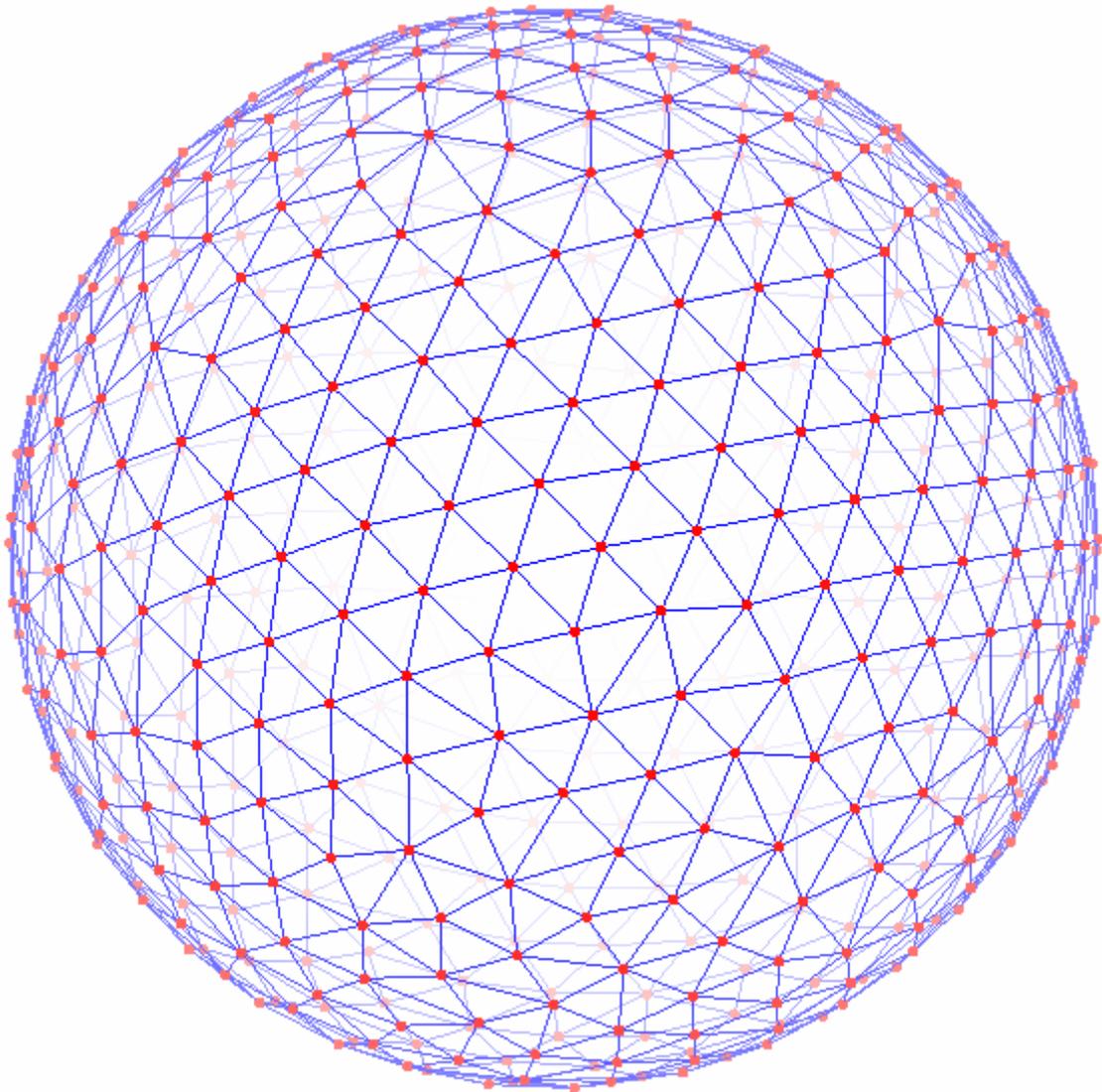


FIG 9 : APRES L'APPLICATION DE CETTE METHODE, ON REMARQUE QUE DES RESEAUX COMME CEUX D'UN TISSU QUE L'ON AURAIT ETIRE SE FORMENT SUR LA SPHERE. MAIS, PAR ENDROIT, L'ALGORITHME N'EST PAS CAPABLE DE CREER UNE REPARTITION HARMONIEUSE DES POINTS.

Stabilité du problème

L'une des limites à la méthode physique est que la fonction $V(p)$ possède un grand nombre de minimums locaux (il a été conjecturé que ce nombre était en exponentiel de N). Par exemple, la

configuration à 8 points optimal n'est pas le cube pour lequel $q(p)=3.10^{-3}$ mais une figure où l'on aurait tourné l'une des faces du cube de 45° avant de la rapprocher légèrement de l'autre face en maintenant ses quatre sommets sur la sphère.

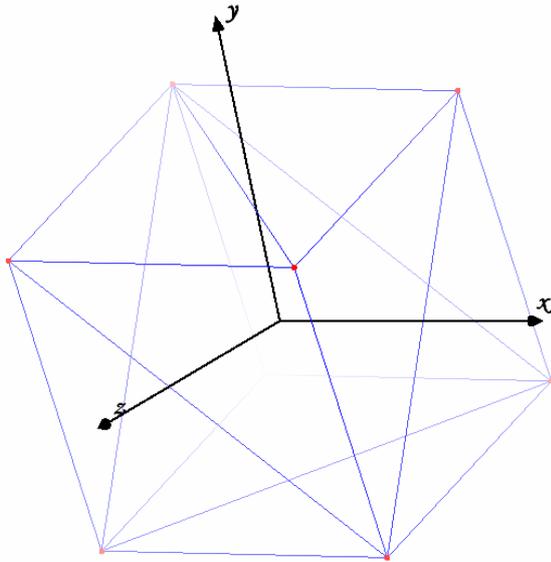


FIG 10 : CUBE : $Q(P)=3.10^{-3}$

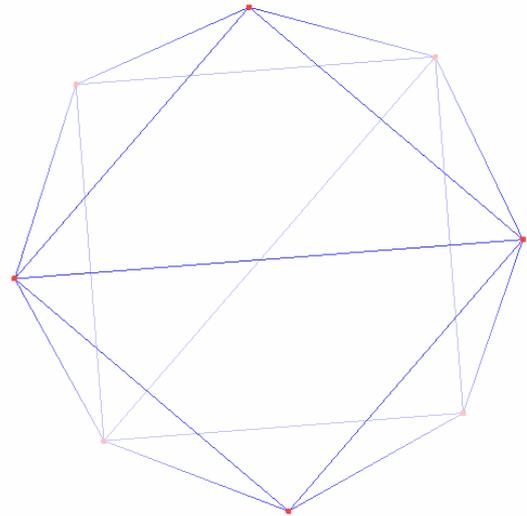


FIG 11 : CONFIGURATION OPTIMALE POUR N=8 : $V(P)=19.675$

Or, le cube est une configuration extrêmement stable d'où la seule façon de sortir est de déplacer aléatoirement un point. Mais, dans la plupart des cas où la méthode physique est bloquée dans un minimum local de $V(p)$, l'éloignement des points les plus proches peut servir à sortir du minimum et à relancer le calcul.

De l'utilité des graphismes

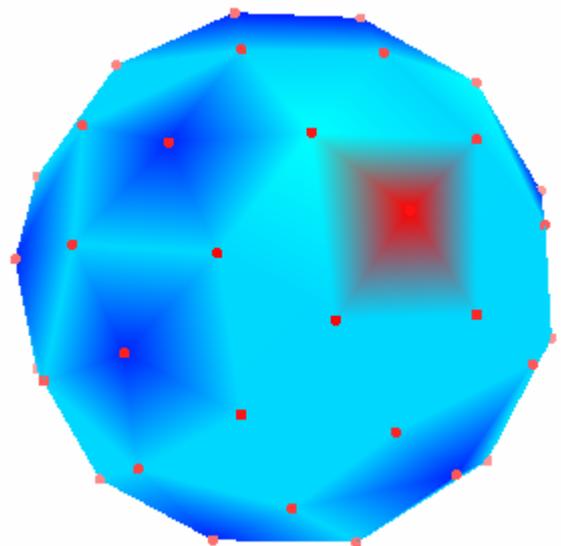
Enveloppe convexe

Parti d'une nécessité graphique d'afficher convenablement la configuration p (autrement que par des points flottants à l'écran), la recherche de l'enveloppe convexe de ces points, algorithme qui fournit donc une liste de faces triangulaires et une liste d'arêtes, permet d'une part un affichage convivial, mais, et surtout, de nombreuses optimisations.

L'algorithme de recherche de cette enveloppe a une complexité temporelle proportionnelle à N^2 dans le pire cas (dans le cas de mon algorithme, il fait exactement $2*N-5$ itérations mais avec des opérations de recherche de complexité temporelle proportionnelle à N).

Optimisations diverses

Le fait que les points de p soient tous sur la sphère assure qu'ils sont tous des sommets de l'enveloppe convexe. On en déduit que, dans le cas de l'algorithme présenté ci-dessus, les deux points les plus proches sont reliés par une arête de l'enveloppe convexe (sans quoi cette arête serait sous une face de l'enveloppe, ce qui est impossible, sauf dans le cas improbable avec des coordonnées en virgule flottante où 4 points au moins seraient répartis sur un cercle). Ceci réduit donc la complexité temporelle de l'algorithme en question à une fonction proportionnelle à N. Mais le problème a été reporté sur le calcul de l'enveloppe convexe qui lui est proportionnel en temps à N^2 . Seulement, ce calcul n'a pas besoin d'être fait à chaque itération de l'algorithme de déplacement.



Le même principe peut être appliqué à d'autres algorithmes. Par exemple, on peut ne prendre en compte dans le modèle physique que les points les plus proches les uns des autres. Mais, si dans le cas précédent le résultat était le même, là on obtient seulement une approximation de l'algorithme initial.

Il y a aussi la possibilité d'utiliser la géométrie du problème : une fois l'enveloppe convexe connue, si la configuration est bonne, toutes les arêtes doivent avoir à peu près la même longueur et les faces de l'enveloppe à peu près la même surface. On peut utiliser cela pour créer simplement de nouvelles configurations avec un nombre plus élevé de points et avec des $q(p)$ très petits, en rajoutant des points au centre des faces ou au milieu des arêtes.

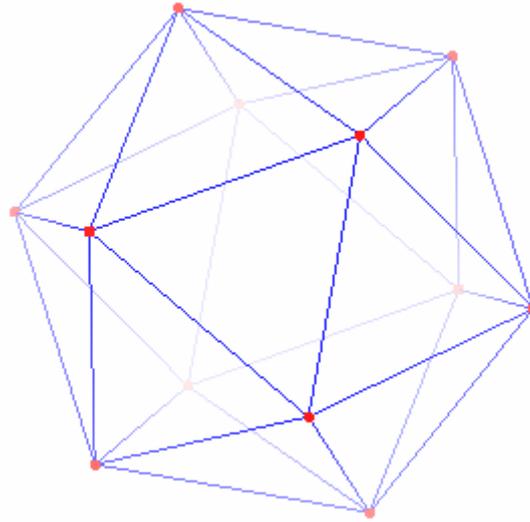


FIG 12 : CONFIGURATION OPIMALE A 12 POINTS

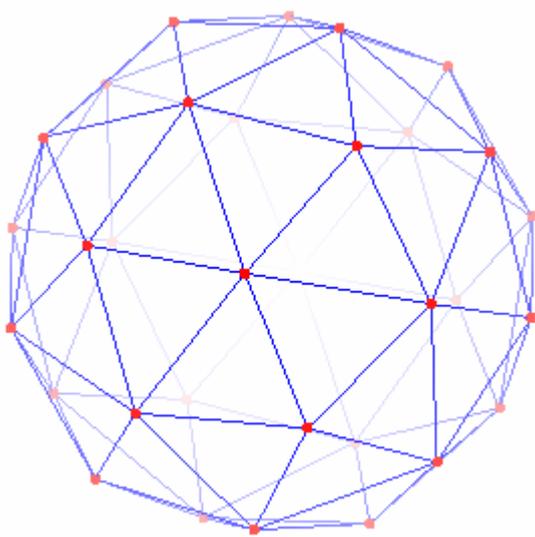


FIG 13 : LA MEME CONFIGURATION APRES AJOUT DE POINTS AU CENTRE DES FACES. POUR $N=32$, $q(p)=6 \cdot 10^{-9}$.

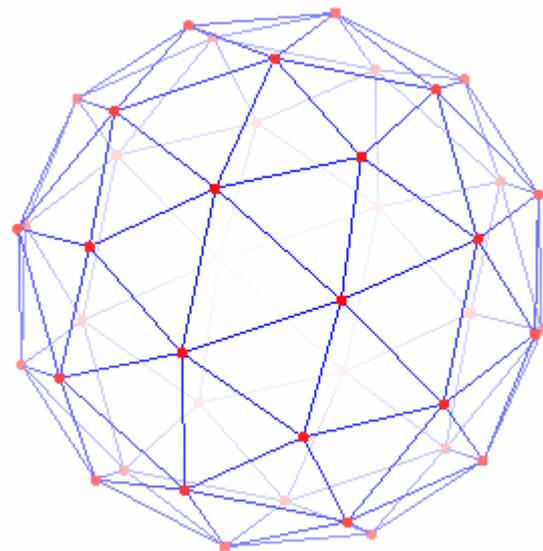


FIG 14 : LA MEME CONFIGURATION APRES AJOUT DE POINTS AU MILIEU DES ARETES. POUR $N=42$, $q(p)=4 \cdot 10^{-9}$.

Modélisation informatique

J'ai écrit le programme exploitant ces algorithmes (ainsi que plusieurs autres que je n'ai pas décrits ici) en C++. Le but était de mettre en œuvre de la façon la plus simple et la plus efficaces possible ces algorithmes ; ce qui a conduit à une structure modulaire du programme.

Le but de ce TIPE étant de déterminer les méthodes les plus efficaces pour obtenir des solutions à notre problème, l'optimisation des algorithmes est donc le point crucial.

Optimisation

Le travail principal fait sur l'écriture des algorithmes consistait à choisir les structures de données adaptées au problème. Après cela, la transcription des algorithmes utilisés était généralement simple, sauf peut-être pour le calcul de l'enveloppe convexe.

Compilateur

En raison des données utilisées (principalement des vecteurs de nombres en virgule flottante), l'exécution du programme peut être grandement améliorée par l'utilisation des capacités des processeurs et des compilateurs moderne : ainsi, avec quelques précautions sur le code, certains compilateurs sont capables de "vectoriser" les instructions, c'est-à-dire, en effectuant les calculs sur plusieurs éléments à la fois, de multiplier les performances par 2 ou 3.

OpenMP

Mais le compilateur ne peut pas optimiser les grandes boucles contenant les algorithmes que j'utilise parce que certaines suppositions sont nécessaires pour cela (que des constantes le soient tout le temps, que les fonctions appelées ne fassent pas d'effet de bords, etc.). Pour améliorer ce point là sur les machines modernes qui possèdent couramment plusieurs cœurs de calculs, j'ai utilisé l'API OpenMP qui permet de paralléliser les calculs en ne modifiant que très peu le code existant (qui continue donc de fonctionner même en l'absence de cette API).

Avec une perte de performance très faible dans le cas où un seul cœur de calcul serait présent, on obtient des performances presque doublées sur les systèmes à deux cœurs car la plupart des algorithmes peuvent être exécutés en parallèle.

Conclusion

Parmi les différentes méthodes énumérées, nous avons donc trouvé, selon la précision voulue, des algorithmes efficaces en temps constant (la méthode de la spirale), proportionnel à N (l'éloignement progressif des points) et proportionnel à N^2 (le modèle physique des forces coulombienne).

Ces méthodes ne donnant pas forcément les mêmes résultats, nous avons bien déterminé un panel de manières d'aboutir à des solutions approchées du problème. La méthode effectivement utilisée doit ensuite dépendre du contexte et des propriétés voulues pour la configuration.

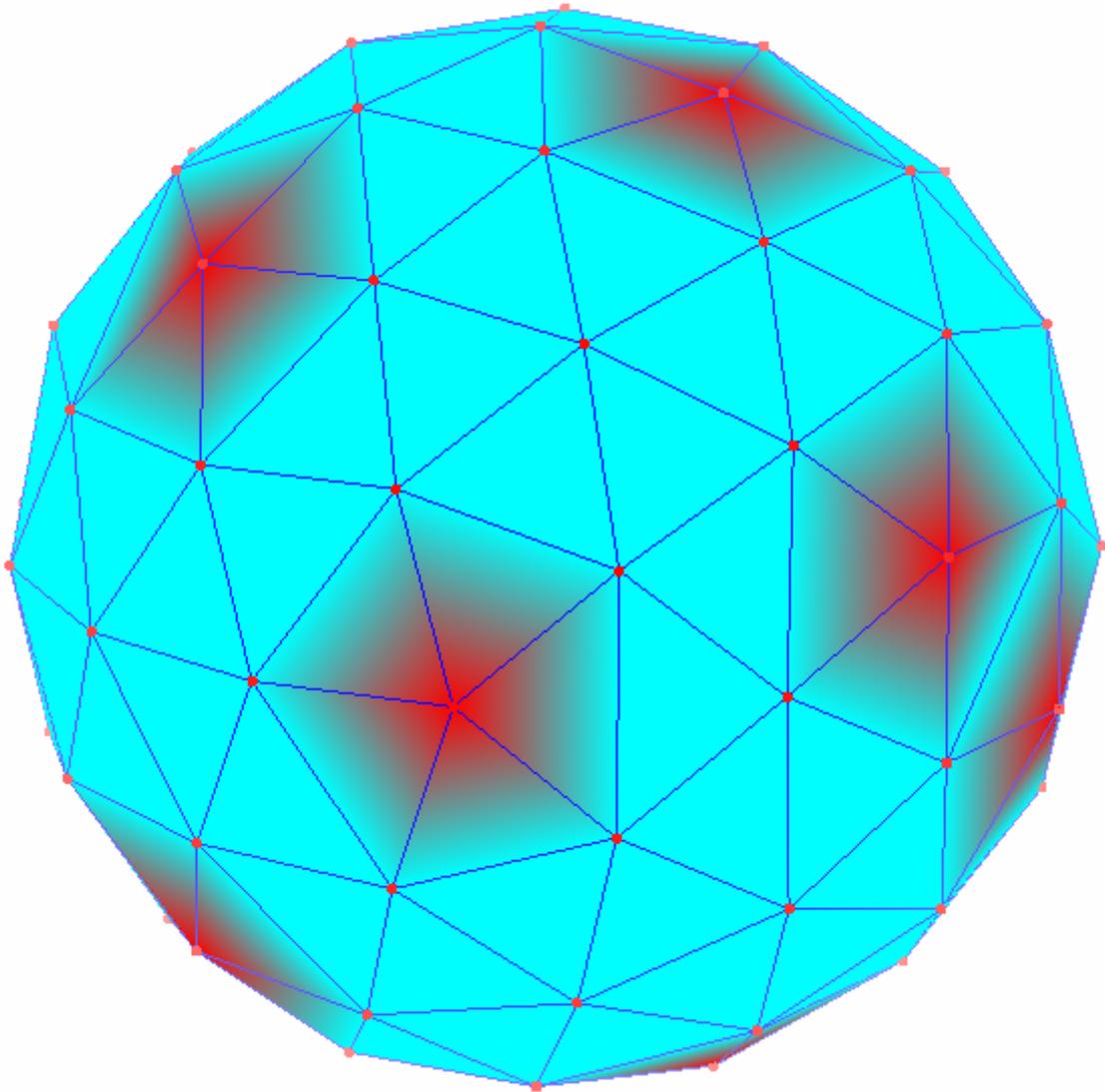


FIG 15 : UNE CONFIGURATION OPTIMISEE POUR 80 POINTS. ON PEUT VISUALISER UN PHENOMENE QUE JE N'AI PAS MENTIONNE : DANS UNE "BONNE" CONFIGURATION, TOUT POINT A SIX PLUS PROCHES VOISINS, SAUF DOUZE POINTS QUI EN ONT CINQ. CELA DECOULE DE LA RELATION D'EULER POUR LES POLYEDRES CONVEXES. CES DOUZE POINTS SONT ALORS PLUS PROCHES DE LEURS VOISINS ET CONSTITUENT LES POINTS FAIBLES DE LA CONFIGURATION.

Annexes

Annexe 1 – Bibliographies

Des analyses mathématiques du problème ou des tables de données :

- [1] *Electrons on the Sphere*, E.A. Rakhmanov, E.B. Saff et Y.M. Zhou.
- [2] *Minimal Discrete Energy on the Sphere*, E.A. Rakhmanov, E.B. Saff et Y.M. Zhou.
- [3] *Le Problème des dictateurs ennemis*, M. Berger.
- [4] <http://physics.syr.edu/condensedmatter/thomson/shells/>, M. Bowick, C. Cecka, et A. Middleton.
- [5] *Recouvrements de la sphère par des cercles et des dômes géodésiques*, T. Tarnai.
- [6] *Distributing many points on the sphere*, E.B. Saff et A.B.J. Kuijlaars.
- [7] *A Partition of the unit sphere into regions of equal area and small diameter*, Paul Leopardi.

Quelques sites internet présentant le problème et des approches possibles à sa résolution :

- [8] <http://www.maths.unsw.edu.au/school/articles/me100.html> : *Distributing points on the sphere*.
- [9] <http://www.ogre.nu/sphere.htm> : *Sphere distribution problems*.
- [10] <http://www.cse.unsw.edu.au/~lambert/java/3d/delaunay.html>: *Delaunay Triangulation Algorithms*
- [11] <http://www.research.att.com/~njas/packings/index.html> : *Spherical Codes*.
- [12] *wikipedia, article Géode*.

Annexe 2 – Table de valeurs

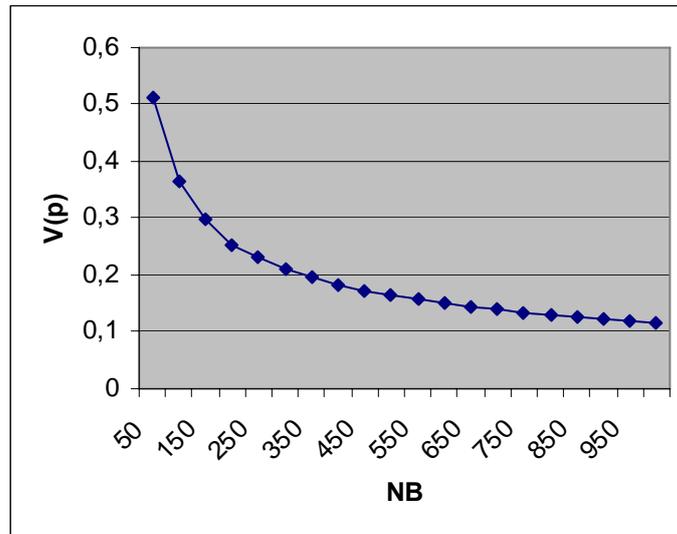
Ci-dessous, une table de valeurs obtenues avec mon logiciel. Certaines sont légèrement au dessous des valeurs que l'on peut trouver sur [4], d'autre sont légèrement meilleures.

Il est à noter que les valeurs dans le cas $\alpha \rightarrow \infty$ ne sont pas comparables à quoi que ce soit, car il n'existe pas à ma connaissance de tables de ces valeurs (sauf pour quelques configurations précises, particulièrement pour celles qui correspondent à des polyèdres réguliers ou semi réguliers).

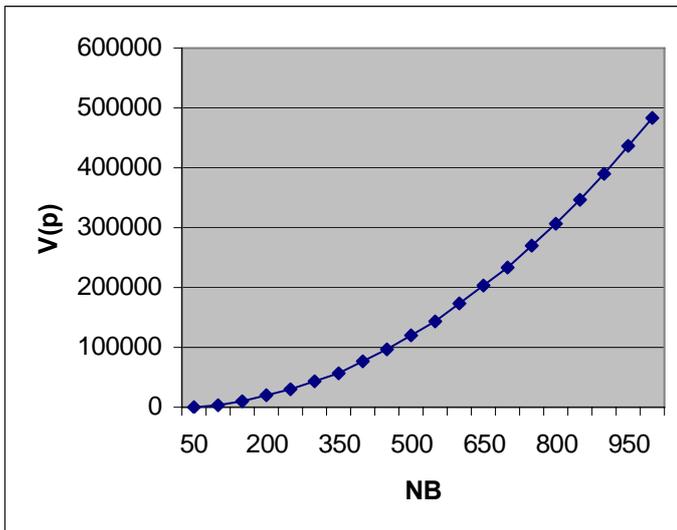
N	V(p), $\alpha \rightarrow \infty$	V(p), $\alpha=1$
3	1,732	1,732
4	1,632	3,674
5	1,412	6,475
6	1,412	9,985
7	1,254	14,453
10	1,091	32,740
12	1,051	49,165
15	0,903	80,678
20	0,802	150,882
30	0,659	359,609
40	0,568	661,128
50	0,511	1055,351
60	0,465	1544,652
70	0,431	2128,033
80	0,405	2806,847
90	0,382	3579,525
100	0,363	4448,351
150	0,297	10236,374
200	0,252	18439,079
250	0,232	29068,140
300	0,209	42134,227
350	0,196	57635,250
400	0,183	75583,519
450	0,173	95979,774
500	0,163	118831,540
550	0,157	144127,741
600	0,150	171884,319
650	0,144	202098,127
700	0,139	234773,255
750	0,135	269906,871
800	0,130	307507,028
850	0,126	347563,738
900	0,123	390088,516
950	0,119	435078,632
1000	0,115	482538,039

Annexe 3 – Graphe de V(p)

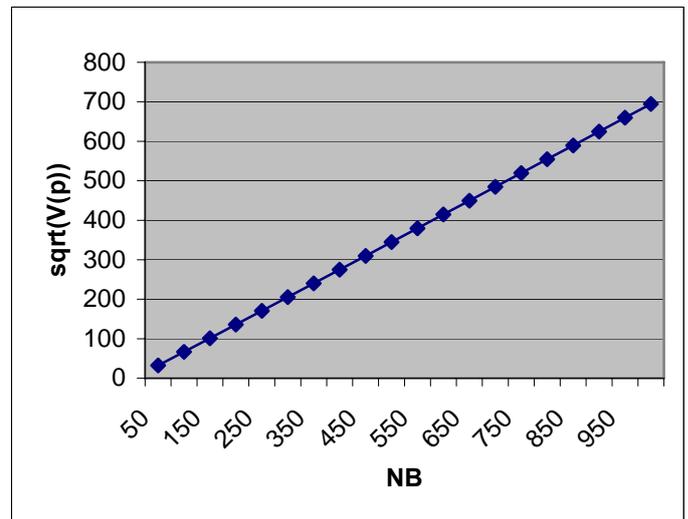
On trouve ci-dessous des graphes des meilleures valeurs connues de V(p) en fonction de N.



Tracé de V(p) dans le cas $\alpha \rightarrow +\infty$



TRACE DE V(P) DANS LE CAS $\alpha = 1$



DE MEME, MAIS ON AFFICHE $\sqrt{V(p)}$

On lit un résultat auquel on pouvait s'attendre, car lorsque N tend vers l'infini, en supposant une répartition uniforme des "charges" sur la sphère (avec une charge surfacique $\sigma = N/4\pi$) on a :

$$V(p) = \int_{S^2} \left(\int_{S^2} \frac{\sigma^2}{|PP'|} \right) = \sigma^2 \cdot K$$

Annexe 4 – Spirale

Ci-dessous des tracés de courbes représentant $V(p)$ en fonction du paramètre de la spirale, avec une indication du minimum.

