

СИБИРСКИЙ ЖУРНАЛ ИНДУСТРИАЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор	В. Л. Береснев
Зам. главного редактора	А. Л. Карчевский
Отв. секретарь	В. А. Дедок

ЧЛЕНЫ РЕДКОЛЛЕГИИ

Г. В. Алексеев	С. Б. Медведев
Б. Д. Аннин	Р. Г. Новиков
В. С. Белоносов	Д. Е. Пальчунов
В. Н. Белых	П. И. Плотников
Ю. С. Волков	В. Г. Романов
В. П. Ильин	Е. М. Рудой
С. И. Кабанихин	В. М. Садовский
А. Н. Карапетянц	Д. И. Свириденко
М. В. Клибанов	А. С. Терсенов
С. С. Кутателадзе	В. С. Тимофеев
В. А. Левин	В. В. Шайдуров
Н. И. Макаренко	

Журнал основан в 1998 году
Выходит 4 раза в год

Том 25, № 2(90)

Апрель – июнь, 2022 г.

СОДЕРЖАНИЕ

Андреев В. К., Вахрамеев И. В., Магденко Е. П. Тепловая конвекция во вращающейся трубе	5
Васюткин С. А., Чупахин А. П. Построение минимального базиса инвариантов для дифференциальной алгебры (2×2) -матриц	21
Воронин А. Ф. К методу факторизации матриц-функций в алгебре Винера порядка 2	32
Наумов В. В., Шамаев И. И., Местников С. В., Лазарев Н. П. Максимизация валового дохода для макроэкономической системы с потреблением, пропорциональным трудовым ресурсам	46
Прокудин А. Н., Фирсов С. В. Упругопластические деформации во вращающемся полом цилиндре с жёстким внешним покрытием при условии максимальных приведённых напряжений	58
Романов В. Г., Бугуева Т. В. Обратная задача для нелинейного волнового уравнения	83
Сенашов С. И., Савостьянова И. Л. Использование законов сохранения для решения краевых задач системы Моисила — Теодореску	101
• Фадеев С. А., Дедок В. А., Бондаренко А. Н. Полиномиальный алгоритм классификации решений задачи Томсона	110
Хасанов А. Б., Хасанов Т. Г. Интегрирование нелинейного уравнения Кортевега — де Фриза с нагруженным членом и источником	127

НОВОСИБИРСК

ИЗДАТЕЛЬСТВО ИНСТИТУТА МАТЕМАТИКИ

УДК 519.168

ПОЛИНОМИАЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ КЛАССИФИКАЦИИ РЕШЕНИЙ
ЗАДАЧИ ТОМСОНА© 2022 С. А. Фадеев^{2a}, В. А. Дедок^{1,2b}, А. Н. Бондаренко¹*Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН,
просп. Акад. Коптюга, 4, г. Новосибирск 630090, Россия,*²*Новосибирский государственный университет,
ул. Пирогова, 1, г. Новосибирск 630090, Россия*E-mails: ^astepan-fadeev@g.nsu.ru, ^bdedok@math.nsc.ruПоступила в редакцию 17.11.2021 г.; после доработки 10.01.2022 г.;
принята к публикации 13.01.2022 г.

Исследуется вопрос определения эквивалентности решений задачи Томсона на основе их геометрической структуры. Разработан алгоритм классификации решений, показана полиномиальная трудоёмкость. Представлены результаты численных экспериментов.

Ключевые слова: задача Томсона, равновесные конфигурации, изоморфизм взвешенных графов.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2022.25.208

ВВЕДЕНИЕ

Работа посвящена анализу численных решений задачи Томсона на единичной сфере. Рассмотрим единичную сферу $S^2 = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mid |\mathbf{x}| = 1\}$ в \mathbb{R}^3 . Предположим, что на сфере расположены N одинаковых точечных электрических зарядов, взаимодействие между которыми описывается законом Кулона. Задача Томсона состоит в поиске конфигурации отталкивающихся зарядов на сфере S^2 , обладающей минимальной потенциальной энергией. Основным интересом для исследователей представляют минимальные энергетические значения конфигураций, а также свойства симметрии. Получение аналитического решения задачи Томсона, особенно в случае большого количества зарядов, — крайне сложная задача, поэтому большинство исследователей в этой области развивают численные алгоритмы поиска минимальной энергии. Однако предлагаемые ими алгоритмы дают лишь численное значение минимума энергии и не позволяют классифицировать конфигурации, соответствующие этим энергиям. Данный вопрос, как правило, не исследуется. Более того, остаётся открытым вопрос о наличии нескольких геометрически различных конфигураций, соответствующих одному и тому же минимальному уровню энергии. В данной работе авторы уделяют основное внимание не вопросу поиска минимума энергии, а изучению геометрической структуры конфигураций, соответствующих этим минимумам. Основным результатом статьи сформулирован в виде полиномиального алгоритма, позволяющего ответить на вопрос, являются ли найденные конфигурации зарядов, соответствующие минимуму энергии, эквивалентными (т. е. их можно совместить с помощью отражений и/или поворотов) или они являются принципиально различными. Таким образом, этот алгоритм качественно дополняет существующие численные методы. Задача Томсона имеет много приложений. Так, физики-экспериментаторы сталкиваются с задачей вычисления координат оптимальных наноструктур. Известный пример такой задачи — задача покрытия

углеродных нанотрубок подходящим фуллереном. Нетривиальный характер задачи обеспечивается экспоненциально возрастающим числом подходящих крышек, среди которых оптимальную конфигурацию следует выбирать, руководствуясь устойчивостью химических связей между атомами углерода [1]. Общеизвестная задача Томсона получила неожиданное развитие применительно к данной проблеме. Было замечено, что при переходе к так называемой двойственной решётке задача поиска подходящего фуллерена сводится к решению задачи, аналогичной задаче Томсона на полусферической поверхности [2]. Также задача Томсона занимает седьмое место в известном списке «18 нерешённых математических задач, которые должны быть решены в XXI веке» [3]. Задача была названа в честь английского физика Томсона, который впервые сформулировал её в 1904 году в рамках развития модели атомного ядра «пудинг с изюмом» [4]. В его модели в качестве отталкивающихся точечных зарядов рассматривались электроны, которые, образуя сферические оболочки, отталкивались друг от друга с силой, определяемой законом Кулона. В конце XIX и начале XX веков он проводил эксперименты по поиску наилучшего распределения небольшого числа равных зарядов между всевозможными конфигурациями для заданного числа зарядов, ограниченных сферой. Решения задачи Томсона важны в приложениях по многим причинам.

1. Они имеют решающее значение для сильно коррелированных кулоновских систем и применяются в таких областях, как квантовые точки, пылевая плазма и коллоидные кристаллы [5, 6].

2. В теории телекоммуникаций решения задачи Томсона используются для разработки конфигураций спутниковой группировки, для определения местоположений радиоретранслируемых точек доступа для мобильных телефонов [7, 8].

3. Помимо физических приложений, задача Томсона (как в классических, так и в более общих формулировках) возникает и в других областях знаний. Изучение задачи Томсона с математической точки зрения приводит к новым идеям о роли геометрии и топологии в теории упорядоченных систем и применяется в теории кодирования. С точки зрения оптимизационной теории задача Томсона представляет большой интерес для вычислительной математики из-за экспоненциального роста числа конфигураций, имеющих локальные энергетические минимумы при фиксированном числе точечных зарядов; также служит отличной тестовой задачей для оптимизационных алгоритмов. Задача Томсона может быть использована в биологии для определения меры субъединиц белка, образующих оболочки сферических вирусов (таких, как аденовирусы), в структурной химии для нахождения регулярной меры для белков S -слоёв. Решения задачи Томсона также используются в экономике, социологии и прочих областях знаний [9, 10].

В настоящее время собрано достаточно большое количество информации о численных решениях задачи Томсона [11], предложена процедура нахождения минимума функционала потенциальной энергии для числа N точечных зарядов специального вида [12]. В работах [1, 13] исследованы свойства локальных минимумов функционала энергии, показано применение задачи Томсона к моделированию колпачков углеродных нанотрубок [2].

1. АНАЛИТИЧЕСКИЕ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ТОМСОНА

1.1. Математическая формулировка задачи Томсона

Пусть $x^{(i)} \in S^2$, $i = 1, \dots, N$, — множество N точек на сфере $S^2 = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mid |\mathbf{x}| = 1\}$, W — функционал потенциальной энергии системы N точечных зарядов:

$$W = \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \frac{1}{|x^{(i)} - x^{(j)}|}. \quad (1)$$

Тогда задача Томсона [3, 4] состоит в поиске конфигурации точек $(x^{(1)}, \dots, x^{(N)})$, при которых функционал энергии (1) достигает минимума:

$$W_N = \inf_{x^{(1)}, \dots, x^{(N)} \in S^2} W(x^{(1)}, \dots, x^{(N)}).$$

1.2. Аналитические подходы к решению задачи Томсона

В работе [4] при помощи описания траекторий движения зарядов предприняты попытки обоснования оптимальности некоторых конфигураций. В настоящее время из работ [14–17] известны точные решения для $N = 2, 3, 4, 5, 6, 12$ (см. табл. 1).

Таблица 1

Точные решения задачи Томсона

N	Потенциальная энергия	Экстремальная конструкция
2	0,5	диаметрально противоположные точки
3	$\sqrt{3}$	правильный треугольник
4	3,6742	правильный тетраэдр
5	6,4747	правильная треугольная бипирамида
6	9,9853	правильный октаэдр
12	49,1653	икосаэдр

Стоит отметить, что доказательство экстремальности конфигурации системы из пяти зарядов появилось только в 2013 году и было получено с использованием средств компьютерного доказательства [14]. В силу существенной нелинейности функционала энергии доказательства очень сложны и не реализуемы за относительно небольшое количество времени. Более приемлемый путь решения задачи Томсона — численные методы.

1.3. Численные методы решения задачи Томсона

В работе [2] для решения проблемы минимизации энергии системы был предложен алгоритм Particle Swarm Optimization (PSO), разработанный на основе техники популяционной стохастической оптимизации и подсказанный социальным поведением птичьего роя.

Также возможно использование алгоритма Бroyдена — Флетчера — Гольдфарба — Шанно (BFGS), описанного в [18]. Алгоритм предназначен для поиска экстремума нелинейного функционала без ограничений.

В 2015 году был предложен гибридный метод решения задачи Томсона [1]. Он совместил в себе метод оттаивания связей и динамический метод моделирования Монте-Карло. Схематично алгоритм заключается в следующем.

1. Генерируется шаблон из $M \in \mathbb{N}$ наборов из N начальных точек, равномерно распределённых на сфере.
2. Для каждого набора в шаблоне подсчитываются силы Кулона между всевозможными парами зарядов.
3. Для каждого заряда считается результирующая сила Кулона, действующая на данный заряд со стороны всех остальных.
4. Среди всех зарядов выбирается тот, модуль силы которого наибольший.
5. Этот заряд сдвигается на небольшое расстояние в направлении действия силы.
6. Пересчитываются результирующие силы.
7. Если не выполнен критерий остановки, повторяется шаг 4.
8. Если для каждого набора в шаблоне выполнен критерий остановки, то среди всех конфигураций выбирается конфигурация с наименьшей потенциальной энергией.

В данной работе использовался гибридный метод, так как он оптимизирован для решения задачи Томсона.

Использование численных методов позволило расширить табл. 1.

2. ПРОБЛЕМА РАЗЛИЧНЫХ КОНФИГУРАЦИЙ ПРИ ПОИСКЕ РЕШЕНИЯ

Основной сложностью при решении задачи Томсона является не поиск решений, а их классификация (определение эквивалентности конфигураций). Многие алгоритмы нахождения конфигураций, соответствующих минимуму функционала энергии (1), могут давать несколько решений (в общем случае задача не имеет единственного решения), имеющих различную геометрическую структуру. Похожие решения будем называть эквивалентными, непохожие — неэквивалентными (более точно определение будет дано ниже). Ясно, что разные конфигурации соответствуют разным минимумам, но одному и тому же минимуму может соответствовать несколько конфигураций. Количество локальных минимумов возрастает экспоненциально с ростом N , что затрудняет классификацию полученных конфигураций.

Ещё больше сложностей добавляют численные алгоритмы, вычисляющие координаты точечных зарядов и, следовательно, искомый минимум потенциальной энергии с некоторой погрешностью.

Общепринятый подход классификации заключается в том, что конфигурации считаются эквивалентными, если их потенциальные энергии совпадают с некоторой точностью. Однако в табл. 2 показаны конфигурации, обладающие близкими потенциальными энергиями, но различной геометрической структурой.

В рамках данной работы будем считать эквивалентными те конфигурации, которые накладываются друг на друга при помощи некоторого конечного количества поворотов и отражений.

Мы считаем, что данный способ определения эквивалентности более корректный. Очевидно, что потенциальная энергия инвариантна относительно преобразований поворота и отражений. Построим полный взвешенный граф, взяв в качестве вершин точечные заряды, в качестве рёбер — отрезки, попарно соединяющие вершины. Таким образом, задача совмещения решений при помощи поворотов и отражений сведена к задаче изоморфизма полных взвешенных графов [19].

С алгебраической точки зрения задача изоморфизма взвешенных графов — задача подобия матриц смежности. Задача подобия матриц решается просто: требуется совпадение жордановых форм матриц с точностью до перестановки клеток. Известно, что жорданова форма матрицы не является устойчивой относительно возмущений матрицы, поэтому не годится в качестве инструмента для решения задачи совместимости.

Для проверки изоморфности графов можно использовать различные инварианты графа: характеристический многочлен матрицы смежности, упорядоченный спектр графа, потенциальная энергия, упорядоченный список длин рёбер и другие. Однако инварианты — лишь необходимое условие изоморфности графов, но недостаточное. Поэтому инварианты графа — удобный инструмент для доказательства неизоморфности графов.

3. ПРЯМОЙ АЛГОРИТМ ПРОВЕРКИ ИЗОМОРФИЗМА ВЗВЕШЕННЫХ ГРАФОВ

Основным результатом данной работы стал прямой алгоритм проверки изоморфизма взвешенных графов. Алгоритм является прямым в том смысле, что в ходе решения задачи искомое соответствие строится без перебора вариантов в соответствии с некоторым деревом поиска, неконтролируемый рост которого мог бы стать причиной экспоненциальной трудоёмкости. В дальнейшем будет показано, что алгоритм является полиномиально трудоёмким.

В работе использованы следующие классические определения.

Таблица 2

Численные решения задачи Томсона

N	Потенциальная энергия	Экстремальная конструкция
7	14,4530	два заряда на полюсах, оставшиеся образуют правильный пятиугольник на экваторе
8	19,6753	антипризма
9	25,7600	заряды образуют три пирамиды с прямоугольниками в основаниях, которые образуют правильную треугольную призму друг с другом
10	32,7170	два заряда на полюсах, оставшиеся образуют антипризму, равноудалённую от полюсов
11	40,5965	отличается от предыдущего случая асимметрией, связанной с добавлением 11-го заряда между основанием и зарядом на одном из полюсов
13	58,8532	предположительно деформированный икосаэдр
14	69,3063	два заряда на полюсах, оставшиеся образуют шестиугольную призму с основаниями, равноудалёнными от полюсов
15	80,6702	предыдущая конфигурация деформируется из-за 15-го заряда вблизи одного из полюсов
15	80,6539	конфигурация не изучена
16	92,9115	конфигурация с $N = 14$, предположительно деформированная двумя зарядами
16	92,9207	равновесная конфигурация с антипризматическими основаниями на полюсах
16	92,9756	конфигурация не изучена
17	106,0506	две правильные пирамиды с пятиугольным основанием, вершинами на полюсах, а также квадраты, повернутые на 45° , соединённые друг с другом на экваторе
19	135,0895	правильная пирамида с равносторонним шестиугольником у основания, расположенного на одном полюсе, параллельного квадрату на другом полюсе
20	150,8815	более стабильная, чем додекаэдр, конфигурация
32	412,2606	конфигурация, образованная 12 равными правильными пирамидами, основаниями которых являются равные правильные пятиугольники, образующие додекаэдр

Определение 1. Взвешенный граф — это тройка вида $G = (V, E, w)$, где V — множество вершин, E — множество рёбер, $w: E \rightarrow \mathbb{R}_+$ — весовая функция.

Определение 2. Изоморфизм взвешенных графов $G_1 = (V_1, E_1, w_1)$ и $G_2 = (V_2, E_2, w_2)$ — это биективное отображение Φ множеств $V_1 = \{v_1, v_2, \dots, v_N\}$ и $V_2 = \{v'_1, v'_2, \dots, v'_N\}$ друг в друга, сохраняющее смежность и длины рёбер: для любых вершин u, v графа V_1 их образы $\Phi(u)$ и $\Phi(v)$ смежны в V_2 тогда и только тогда, когда u и v смежны в V_1 , причём $w_1(\{u, v\}) = w_2(\{\Phi(u), \Phi(v)\})$. Обозначать изоморфизм будем следующим образом: $G_1 \simeq G_2$.

Также для упрощения повествования нам понадобятся некоторые технические определения.

Определение 3. Сферический граф — это взвешенный граф, вершины которого отождествляются с точками из пространства \mathbb{R}^3 , расположенными на единичной сфере с центром

в нуле.

Определение 4. Пусть $G = (V, E, w)$ — полный сферический граф, $v \in V$ — некоторая вершина. Пучком $S(v)$ полного сферического графа G будем называть подграф $S(v) = (V, D, w)$, где $D \subset E$ — множество всех рёбер, инцидентных v .

В дальнейшем при использовании пучков разных графов G_1 и G_2 нам будет удобно указывать нижний индекс для обозначения того, какому графу принадлежит тот или иной пучок, например $S_1(u)$ и $S_2(v)$.

Заметим, что полный сферический граф разбивается на N пучков, состоящих из $(N - 1)$ ребра. Кроме того, по каждому пучку можно однозначно восстановить исходный полный сферический граф.

Для дальнейшего изложения потребуется следующее утверждение.

Теорема 1. Пусть G_1, G_2 — полные сферические графы, $S_1(u), S_2(u')$ — пучки графов G_1, G_2 соответственно, построенные для произвольных вершин u, u' . Тогда если $G_1 \simeq G_2$, то найдутся рёбра $\{u, v\} \in D_1, \{u', v'\} \in D_2$ такие, что $w_1(\{u, v\}) = w_2(\{u', v'\})$.

Доказательство. Обозначим имеющийся изоморфизм через Φ . Если $\Phi(u) = u'$, то пучки можно наложить друг на друга, следовательно, для любого $v \in V_1 \setminus \{u\}$ существует $v' \in V_2 \setminus \{u'\}$ такое, что $w_1(\{u, v\}) = w_2(\{u', v'\})$.

Иначе существуют $v \neq u, v' \neq u'$, для которых $\Phi(u) = v', \Phi(v) = u'$. Известно, что в пучке $S_1(u)$ содержится ребро $\{u, v\} \in D_1$, а в пучке $S_2\{u'\}$ содержится ребро $\{u', v'\} \in D_2$. По определению изоморфизма графов G_1, G_2 имеем $w_1(\{u, v\}) = w_2(\{u', v'\})$. \square

Благодаря этому утверждению искомый алгоритм можно разбить на несколько блоков:

- проверка необходимого условия существования изоморфизма — совпадение инвариантов;
- поиск рёбер $\{u, v\} \in D_1, \{u', v'\} \in D_2$ одинаковой длины;
- наложение в \mathbb{R}^3 пучков $S_1(u), S_2(u')$ таким образом, чтобы совместились рёбра $\{u, v\} \in D_1, \{u', v'\} \in D_2$;
- вращение пучка $S_2(u')$ относительно оси $\{u', v'\}$ с целью совмещения всех вершин пучков $S_1(u), S_2(u')$;
- поиск совпавших пар вершин.

Опишем более детально блоки алгоритма проверки эквивалентности.

3.1. Проверка инвариантов

Пусть $(x^{(1)}, \dots, x^{(N)})$ и $(x'^{(1)}, \dots, x'^{(N)})$ — два найденных решения задачи Томсона (две равновесные конфигурации точек), соответствующих одному минимуму энергии.

Построим по ним полные сферические графы следующим образом:

$$\begin{aligned} G_1 &= (V_1, E_1, w_1), & V_1 &= \{v_1, v_2, \dots, v_N\}, \text{ причём } v_1 = x^{(1)}, \dots, v_N = x^{(N)}, \\ G_2 &= (V_2, E_2, w_2), & V_2 &= \{v'_1, v'_2, \dots, v'_N\}, \text{ причём } v'_1 = x'^{(1)}, \dots, v'_N = x'^{(N)}, \\ & & w_1(\{v_1, v_2\}) &= |v_1 - v_2|, \\ & & w_2(\{v'_1, v'_2\}) &= |v'_1 - v'_2|. \end{aligned} \tag{2}$$

Перед построением изоморфизма предлагается проверить необходимое условие изоморфности взвешенных графов — совпадение упорядоченных наборов длин рёбер. Пусть

$$K = N(N - 1)/2, \quad E_1 = \{l_1, l_2, \dots, l_K\}, \quad E_2 = \{l'_1, l'_2, \dots, l'_K\}.$$

Отсортируем длины рёбер в порядке возрастания, получим векторы $\text{sort}(E_1) = (e_1, e_2, \dots, e_K)$, $\text{sort}(E_2) = (e'_1, e'_2, \dots, e'_K)$.

Искомое условие имеет вид

$$\text{sort}(E_1) = \text{sort}(E_2). \quad (3)$$

Если условие не выполнено, то, очевидным образом графы G_1 и G_2 будут неизоморфны, т. е. равновесные конфигурации $(x^{(1)}, \dots, x^{(N)})$ и $(x'^{(1)}, \dots, x'^{(N)})$ нельзя совместить при помощи поворотов и/или отражений.

Таким образом, мы получим первый экспресс-тест на эквивалентность конфигураций.

Отметим, что в численных экспериментах всегда присутствует определённый уровень вычислительной ошибки, поэтому совпадение упорядоченных наборов длин рёбер нужно проверять в интервальном смысле.

3.2. Поиск и совмещение рёбер одинаковой длины

Если предыдущий этап завершился неудачно, находим пару рёбер $\{u, v\} \in D_1$, $\{u', v'\} \in D_2$ одинаковой длины. Такие рёбра обязательно найдутся, так как на данном этапе уже проверено совпадение инвариантов.

Пусть графы G_1 , G_2 построены по решениям задачи Томсона для N точечных зарядов (2), т. е. $V_1 = \{v_1, \dots, v_N\}$, $V_2 = \{v'_1, \dots, v'_N\}$. Построим пучки $S_1(u)$, $S_2(u')$, $u \in V_1$, $u' \in V_2$, полных сферических графов G_1 , G_2 . Добавим в имеющиеся пучки вершины, соответствующие началу координат: $v_0 \in V_1$, $v'_0 \in V_2$, а также рёбра $\{u, v_0\} \in D_1$, $\{u', v'_0\} \in D_2$ единичной длины. Пример построенных пучков показан на рис. 1.

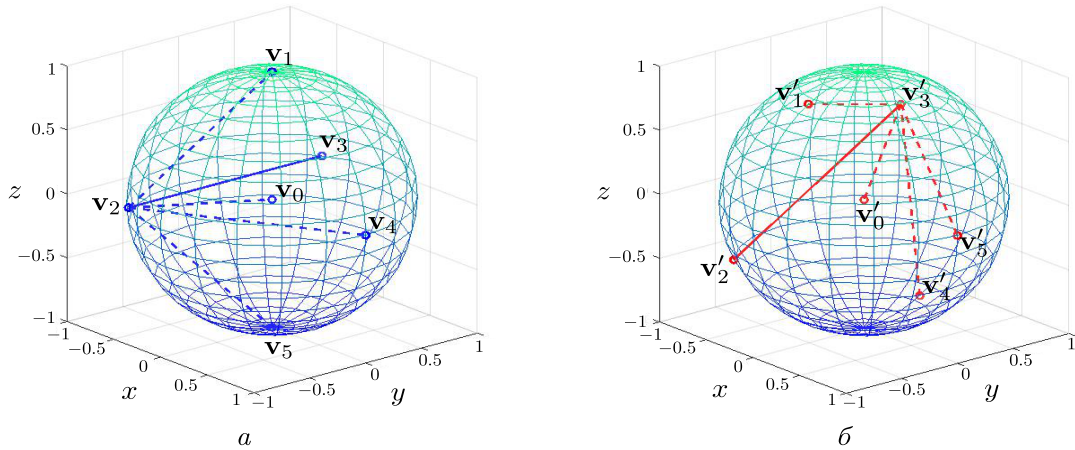


Рис. 1. Пучки $S_1(v_2)$ (а) и $S_2(v'_3)$ (б), построенные по решению задачи Томсона для $N = 5$. Сплошной линией обозначена пара рёбер одинаковой длины

Предположим, что уже найдена пара рёбер $\{u, v\} \in D_1$, $\{u', v'\} \in D_2$ одинаковой длины. Если изоморфизм Φ существует, то возможны следующие варианты наложения рёбер.

1. $\Phi(u) = u'$, $\Phi(v) = v'$ — наложение в прямом порядке.
2. $\Phi(u) = v'$, $\Phi(v) = u'$ — наложение в обратном порядке.
3. $\Phi(u) = u'$, $\Phi(v) = v'$ — наложение в прямом порядке с отражением.
4. $\Phi(u) = v'$, $\Phi(v) = u'$ — наложение в обратном порядке с отражением.

На данном этапе требуется совместить в \mathbb{R}^3 пучки $S_1(u)$, $S_2(u')$ таким образом, чтобы совпали рёбра $\{u, v\}$, $\{u', v'\}$ в любом из указанных выше порядков.

Так как сферический граф отождествляется с точками из \mathbb{R}^3 , то для любых $i = 0, \dots, N$ имеем $\mathbf{v}_i = x^{(i)} = (x_i, y_i, z_i)$, $\mathbf{v}'_i = x'^{(i)} = (x'_i, y'_i, z'_i)$. Также обозначим координаты точек, соответствующих вершинам u, v, u', v' , через $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)$, $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$, $\mathbf{u}' = (u'_x, u'_y, u'_z)$, $\mathbf{v}' = (v'_x, v'_y, v'_z)$. Обозначим через ρ длину рёбер $\{u, v\}$ или $\{u', v'\}$.

Рассмотрим по отдельности каждый из случаев.

СЛУЧАЙ 1: сдвинем пучок $S_2(u')$ так, чтобы точки \mathbf{u} , \mathbf{u}' совпали. Для этого используем формулу

$$\mathbf{v}'_i := \mathbf{v}'_i - \mathbf{u}' + \mathbf{u}, \quad i = 0, \dots, N. \quad (4)$$

Для совмещения точек \mathbf{v} , \mathbf{v}' необходимо повернуть вектор $\mathbf{v}' - \mathbf{u}$ на некоторый угол θ .

Выясним, попадают ли точки \mathbf{u} , \mathbf{v} , \mathbf{v}' , на одну прямую. Для этого достаточно проверить условия

$$\frac{v_x - u_x}{v'_x - u_x} = \frac{v_y - u_y}{v'_y - u_y} = \frac{v_z - u_z}{v'_z - u_z}. \quad (5)$$

Если указанные точки не лежат на одной прямой, то по ним можно построить плоскость, описываемую уравнением

$$\begin{vmatrix} x - u_x & y - u_y & z - u_z \\ v_x - u_x & v_y - u_y & v_z - u_z \\ v'_x - u_x & v'_y - u_y & v'_z - u_z \end{vmatrix} = 0.$$

Коэффициенты при x , y , z в общем уравнении плоскости — компоненты вектора нормали, который будет служить осью вращения. Пусть $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$, тогда

$$\begin{aligned} \hat{n}_x &= (v_y - u_y)(v'_z - u_z) - (v'_y - u_y)(v_z - u_z), \\ \hat{n}_y &= (v'_x - u_x)(v_z - u_z) - (v_x - u_x)(v'_z - u_z), \\ \hat{n}_z &= (v_x - u_x)(v'_y - u_y) - (v'_x - u_x)(v_y - u_y), \end{aligned} \quad (6)$$

$$n_x = \frac{\hat{n}_x}{\sqrt{\hat{n}_x^2 + \hat{n}_y^2 + \hat{n}_z^2}}, \quad n_y = \frac{\hat{n}_y}{\sqrt{\hat{n}_x^2 + \hat{n}_y^2 + \hat{n}_z^2}}, \quad n_z = \frac{\hat{n}_z}{\sqrt{\hat{n}_x^2 + \hat{n}_y^2 + \hat{n}_z^2}}.$$

Определим угол поворота θ следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{v} - \mathbf{u}, \mathbf{v}' - \mathbf{u} \rangle &= \rho^2 \cos \theta, \\ \theta &= \arccos \frac{\langle \mathbf{v} - \mathbf{u}, \mathbf{v}' - \mathbf{u} \rangle}{\rho^2}. \end{aligned} \quad (7)$$

Известно, что матрица поворота относительно произвольного радиус-вектора единичной длины $\mathbf{r} = (x, y, z) \mid |\mathbf{r}| = 1$ на угол θ имеет вид

$$\begin{pmatrix} \cos \theta + (1 - \cos \theta)x^2 & (1 - \cos \theta)xy - (\sin \theta)z & (1 - \cos \theta)xz + (\sin \theta)y \\ (1 - \cos \theta)yx + (\sin \theta)z & \cos \theta + (1 - \cos \theta)y^2 & (1 - \cos \theta)yz - (\sin \theta)x \\ (1 - \cos \theta)zx - (\sin \theta)y & (1 - \cos \theta)zy + (\sin \theta)x & \cos \theta + (1 - \cos \theta)z^2 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Подставляя в (8) найденное значение θ и вектор $\mathbf{r} = (n_x, n_y, n_z)$, получим матрицу поворота, совмещающую вершины \mathbf{v} и \mathbf{v}' .

Если же точки \mathbf{u} , \mathbf{v} , \mathbf{v}' , лежат на одной прямой (не выполнено условие (5)), то либо векторы $\mathbf{v} - \mathbf{u}$, $\mathbf{v}' - \mathbf{u}$ сонаправлены (точки \mathbf{v} , \mathbf{v}' уже совмещены), либо противоположно направлены.

Чтобы совместить вторую пару вершин, по аналогии с (6)–(8) построим плоскость по точкам \mathbf{u} , \mathbf{v} , \mathbf{v}_0 . Так как \mathbf{u} , \mathbf{v} — различные точки с единичной сферы, то точки \mathbf{u} , \mathbf{v} , \mathbf{v}_0 не лежат на одной прямой. Вектор нормали $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$, который будет служить осью вращения, можно вычислить из соотношений

$$\begin{aligned} \hat{n}_x &= -u_z(v_y - u_y) + u_y(v_z - u_z), \\ \hat{n}_y &= -u_x(v_z - u_z) + u_z(v_x - u_x), \\ \hat{n}_z &= -u_y(v_x - u_x) + u_x(v_y - u_y), \end{aligned} \quad (9)$$

$$n_x = \frac{\hat{n}_x}{\sqrt{\hat{n}_x^2 + \hat{n}_y^2 + \hat{n}_z^2}}, \quad n_y = \frac{\hat{n}_y}{\sqrt{\hat{n}_x^2 + \hat{n}_y^2 + \hat{n}_z^2}}, \quad n_z = \frac{\hat{n}_z}{\sqrt{\hat{n}_x^2 + \hat{n}_y^2 + \hat{n}_z^2}}.$$

Подставляя $\theta = \pi$ и систему (9) в (8), получим матрицу, совмещающую вершины \mathbf{v} , \mathbf{v}' . Пример совмещения пары рёбер одинаковой длины показан на рис. 2.

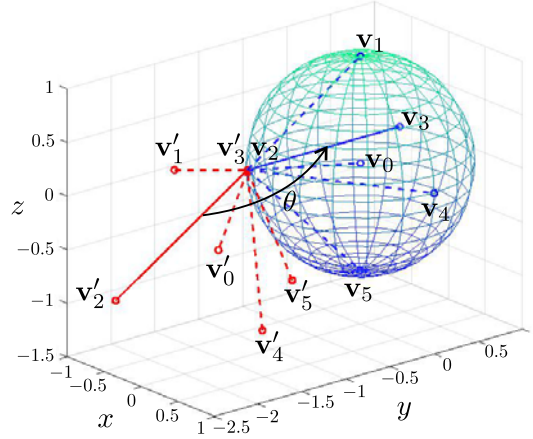


Рис. 2. Совмещение рёбер $\{v_2, v_3\}$, $\{v'_2, v'_3\}$ при помощи поворота на угол θ

СЛУЧАЙ 2: сдвинем пучок $S_2(u')$ так, чтобы точки \mathbf{u} , \mathbf{v}' совпали. Для этого используем формулу

$$\mathbf{v}'_i := \mathbf{v}'_i - \mathbf{v}' + \mathbf{u}, \quad i = 0, \dots, N. \quad (10)$$

Для совмещения точек \mathbf{v} , \mathbf{u}' необходимо повернуть вектор $\mathbf{u}' - \mathbf{u}$ на некоторый угол θ . Выясним, попадают ли точки \mathbf{u} , \mathbf{v} , \mathbf{u}' на одну прямую. Для этого достаточно проверить условия

$$\frac{v_x - u_x}{u'_x - u_x} = \frac{v_y - u_y}{u'_y - u_y} = \frac{v_z - u_z}{u'_z - u_z}. \quad (11)$$

Если указанные точки не лежат на одной прямой, то по ним можно построить плоскость, описываемую уравнением

$$\begin{vmatrix} x - u_x & y - u_y & z - u_z \\ v_x - u_x & v_y - u_y & v_z - u_z \\ u'_x - u_x & u'_y - u_y & u'_z - u_z \end{vmatrix} = 0.$$

Коэффициенты при x , y , z в общем уравнении плоскости — компоненты вектора нормали, который будет служить осью вращения. Пусть $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$, тогда

$$\begin{aligned} \hat{n}_x &= (v_y - u_y)(u'_z - u_z) - (u'_y - u_y)(v_z - u_z), \\ \hat{n}_y &= (u'_x - u_x)(v_z - u_z) - (v_x - u_x)(u'_z - u_z), \\ \hat{n}_z &= (v_x - u_x)(u'_y - u_y) - (u'_x - u_x)(v_y - u_y), \end{aligned} \quad (12)$$

$$n_x = \frac{\hat{n}_x}{\sqrt{\hat{n}_x^2 + \hat{n}_y^2 + \hat{n}_z^2}}, \quad n_y = \frac{\hat{n}_y}{\sqrt{\hat{n}_x^2 + \hat{n}_y^2 + \hat{n}_z^2}}, \quad n_z = \frac{\hat{n}_z}{\sqrt{\hat{n}_x^2 + \hat{n}_y^2 + \hat{n}_z^2}}.$$

Определим угол поворота θ следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{v} - \mathbf{u}, \mathbf{u}' - \mathbf{u} \rangle &= \rho^2 \cos \theta, \\ \theta &= \arccos \frac{\langle \mathbf{v} - \mathbf{u}, \mathbf{u}' - \mathbf{u} \rangle}{\rho^2}. \end{aligned} \quad (13)$$

Подставляя в (8) найденное значение θ и вектор $\mathbf{r} = (n_x, n_y, n_z)$, получим матрицу поворота, совмещающую вершины \mathbf{v} и \mathbf{u}' .

Если же точки \mathbf{u} , \mathbf{v} , \mathbf{u}' , лежат на одной прямой (не выполнено условие (11)), то либо векторы $\mathbf{v} - \mathbf{u}$, $\mathbf{u}' - \mathbf{u}$ сонаправлены (точки \mathbf{v} , \mathbf{u}' уже совмещены), либо противоположно направлены.

Чтобы совместить вторую пару вершин, воспользуемся формулами (9), подставим полученный вектор нормали и $\theta = \pi$ в (8).

Построим плоскость по точкам \mathbf{u} , \mathbf{v} , \mathbf{v}_0 . Так как \mathbf{u} , \mathbf{v} — различные точки на единичной сфере, то точки \mathbf{u} , \mathbf{v} , \mathbf{v}_0 не лежат на одной прямой. Вектор нормали $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$, который будет служить осью вращения, вычисляется по формулам (9). Подставляя $\theta = \pi$ и \mathbf{n} в (8), получим матрицу, совмещающую вершины \mathbf{v} , \mathbf{v}' .

СЛУЧАЙ 3 и СЛУЧАЙ 4: отразим зеркально пучок $S_2(u')$ путём домножения на матрицу

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Дальнейшие действия аналогичны случаям 1, 2 соответственно.

3.3. Совмещение оставшихся вершин

Для совмещения оставшихся вершин попробуем повернуть пучок $S_2(u')$ на угол η так, чтобы совместились вершины v_0 , v'_0 . В качестве оси вращения возьмём прямую, содержащую вектор $\mathbf{v} - \mathbf{u}$. Такое вращение существует только в том случае, когда точки \mathbf{v}_0 , \mathbf{v}'_0 лежат в одной плоскости, ортогональной оси вращения, причём расстояния от оси вращения до \mathbf{v}_0 , \mathbf{v}'_0 совпадают.

Напомним: $\mathbf{v}'_0 = (x'_0, y'_0, z'_0)$. Уравнение плоскости, содержащей точку $\mathbf{v}_0 = (0, 0, 0)$ и ортогональной $\mathbf{v} - \mathbf{u}$, имеет вид

$$(u_x - v_x)x + (u_y - v_y)y + (u_z - v_z)z = 0. \quad (15)$$

Тогда условие принадлежности точек \mathbf{v}_0 , \mathbf{v}'_0 общей плоскости имеет вид

$$(u_x - v_x)x'_0 + (u_y - v_y)y'_0 + (u_z - v_z)z'_0 = 0. \quad (16)$$

Выведем условие равенства расстояний от центров сфер до оси вращения. Для этого запишем параметрическое уравнение прямой, на которой лежит ребро — ось вращения:

$$x = u_x + (v_x - u_x)t, \quad y = u_y + (v_y - u_y)t, \quad z = u_z + (v_z - u_z)t, \quad t \in \mathbb{R}. \quad (17)$$

Подставляя x , y , z в уравнение плоскости, получим значение параметра:

$$t = \frac{(u_x - v_x)u_x + (u_y - v_y)u_y + (u_z - v_z)u_z}{(u_x - v_x)^2 + (u_y - v_y)^2 + (u_z - v_z)^2}. \quad (18)$$

Подставляя (17) в (18), получим координаты точки (x_t, y_t, z_t) пересечения оси вращения и ортогональной плоскости. Следовательно, векторы, исходящие из точки (x_t, y_t, z_t) в центры сфер, имеют координаты $\mathbf{v}_1 = (x'_0 - x_t, y'_0 - y_t, z'_0 - z_t)$, $\mathbf{v}_2 = (-x_t, -y_t, -z_t)$. Таким образом, условие совпадения расстояний от центров сфер до оси вращения имеет вид

$$|\mathbf{v}_1| = |\mathbf{v}_2|. \quad (19)$$

Если совмещение центров сфер возможно, то искомый угол η определяется из соотношения

$$\eta = \arccos \frac{\langle \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \rangle}{|\mathbf{v}_1|^2}. \quad (20)$$

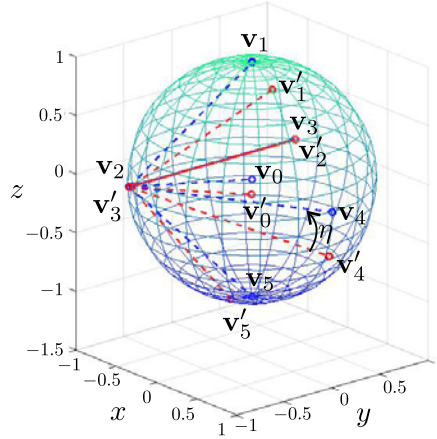


Рис. 3. Совмещение оставшихся вершин пучков $S_1(v_2)$, $S_2(v'_3)$ поворотом на угол η

Подставляя (20) и $\mathbf{r} = \mathbf{v} - \mathbf{u}$ в (8), получим преобразование, совмещающее вершины \mathbf{v}_0 , \mathbf{v}'_0 . Пример совмещения оставшихся вершин показан на рис. 3.

Проверим, попадают ли оставшиеся вершины пучка $S_2(u')$ на единичную сферу:

$$|\mathbf{v}'_i| = 1, \quad i = 1, \dots, N. \quad (21)$$

Если все вершины \mathbf{v}'_i , $i = 1, \dots, N$, попали на единичную сферу, то остаётся найти соответствие между вершинами пучков $S_1(u)$, $S_2(u')$. Для этого вычислим матрицу расстояний

$$D = (d_{ij}) = |\mathbf{v}_i - \mathbf{v}'_j|, \quad i, j = 1, \dots, N. \quad (22)$$

Для поиска соответствия вершин требуется найти все такие внедиагональные элементы, для которых выполнено условие

$$|d_{ij}| = 0, \quad i \neq j. \quad (23)$$

Если найдено ровно N внедиагональных элементов, для которых выполнено (23), то графы G_1 , G_2 признаются изоморфными.

Трудоёмкость такого поиска составит $O(N^2)$, однако поиск можно оптимизировать: если в строке найден элемент d_{ij} , для которого выполнено (23), то можно не считать оставшиеся в строке элементы d_{ij+1}, \dots, d_{iN} . Также из подсчёта элементов можно исключить все оставшиеся элементы j -го столбца: d_{i+1j}, \dots, d_{Nj} .

3.4. Неизоморфность графов

Если в процессе построения изоморфизма нарушено хотя бы одно из условий (16), (19), (21) или найдено меньше, чем N элементов с условием (23), то считается, что пучки $S_1(u)$, $S_2(u')$ нельзя совместить указанным способом и следует рассмотреть другой вариант соответствия.

Если все четыре варианта соответствия не привели к успеху, тогда исходные сферические графы G_1 , G_2 будут являться неизоморфными.

3.5. Особенности реализации численной версии алгоритма

Для использования алгоритма в численных экспериментах необходимо учесть интервальные особенности.

1. Условие совпадения инвариантов (3) с учётом допустимой погрешности ε примет вид

$$|\text{sort}(E_1) - \text{sort}(E_2)| < \varepsilon. \quad (24)$$

2. При поиске пары рёбер одинаковой длины необходимо сравнивать длины с некоторой точностью:

$$|w_1(\{u, v\}) - w_2(\{u', v'\})| < \varepsilon. \quad (25)$$

3. При наложении рёбер одинаковой длины в прямом порядке условия (5) принадлежности точек \mathbf{u} , \mathbf{v} , \mathbf{v}' общей прямой примет вид

$$\begin{aligned} |(v_x - u_x)(v'_y - u_y) - (v'_x - u_x)(v_y - u_y)| < \varepsilon, \\ |(v_x - u_x)(v'_z - u_z) - (v'_x - u_x)(v_z - u_z)| < \varepsilon. \end{aligned} \quad (26)$$

4. Аналогично предыдущему пункту условия (5) примут вид

$$\begin{aligned} |(v_x - u_x)(u'_y - u_y) - (u'_x - u_x)(v_y - u_y)| < \varepsilon, \\ |(v_x - u_x)(u'_z - u_z) - (u'_x - u_x)(v_z - u_z)| < \varepsilon. \end{aligned} \quad (27)$$

5. При совмещении оставшихся вершин условие (16) принадлежности точек \mathbf{v}_0 , \mathbf{v}'_0 общей плоскости примет вид

$$|(u_x - v_x)x'_0 + (u_y - v_y)y'_0 + (u_z - v_z)z'_0| < \varepsilon. \quad (28)$$

6. Условие (19) совпадения расстояний от центров сфер до оси вращения примет вид

$$\|\mathbf{v}_1\| - \|\mathbf{v}_2\| < \varepsilon. \quad (29)$$

7. Условие (21) принадлежности вершин сфере примет вид

$$\|\mathbf{v}'_i\| - 1 < \varepsilon, \quad i = 1, \dots, N. \quad (30)$$

8. Условие (23) поиска соответствующих вершин примет вид

$$|d_{ij}| < \varepsilon, \quad i \neq j. \quad (31)$$

3.6. Итоговое описание полиномиального алгоритма

Объединив вышеперечисленное, получим следующий алгоритм классификации.

1. Проверяем совпадения упорядоченных наборов длин рёбер по формулам (2), (24). Если наборы не совпадают, то графы G_1 , G_2 не изоморфны.

2. В цикле по всевозможным парам рёбер одинаковой длины (25) выполняем следующие действия:

2.1. Наложение в прямом порядке:

2.1.1. Сдвиг вершины пучка $S_2(u')$ по формуле (4).

2.1.2. Поворот пучка $S_2(u')$ по формулам (6)–(9), (26).

2.1.3. Совмещение оставшихся вершин по формулам (8), (15)–(20), (30).

2.1.4. Поиск соответствия вершин по формулам (22), (31). Если соответствие найдено, то графы G_1 , G_2 изоморфны.

2.2. Наложение в обратном порядке:

2.2.1. Сдвиг вершины пучка $S_2(u')$ по формуле (10).

2.2.2. Поворот пучка $S_2(u')$ по формулам (8), (12), (13), (27).

2.2.3. Совмещение оставшихся вершин по формулам (8), (15)–(20), (30).

2.2.4. Поиск соответствия вершин по формулам (22), (31). Если соответствие найдено, то графы G_1 , G_2 изоморфны.

2.3. Наложение в прямом порядке с отражением:

2.3.1. Отражение пучка $S_2(u')$ по формуле (14).

2.3.2. Сдвиг вершины пучка $S_2(u')$ по формуле (4).

2.3.3. Поворот пучка $S_2(u')$ по формулам (6)–(9), (26).

2.3.4. Совмещение оставшихся вершин по формулам (8), (15)–(20), (30).

2.3.5. Поиск соответствия вершин по формулам (22), (31). Если соответствие найдено, то графы G_1, G_2 изоморфны.

2.4. Наложение в обратном порядке с отражением:

2.4.1. Отражение пучка $S_2(u')$ по формуле (14).

2.4.2. Сдвиг вершины пучка $S_2(u')$ по формуле (10).

2.4.3. Поворот пучка $S_2(u')$ по формулам (8), (12), (13), (27).

2.4.4. Совмещение оставшихся вершин по формулам (8), (15)–(20), (30).

2.4.5. Поиск соответствия вершин по формулам (22), (31). Если соответствие найдено, то графы G_1, G_2 изоморфны.

3. Все пары рёбер одинаковой длины уже рассмотрены и изоморфизм не был найден, графы G_1 и G_2 не являются изоморфными.

Из алгоритма следует

Замечание 1. Сложность в среднем предложенного алгоритма составляет $O(N^4)$, где N — количество точечных зарядов в равновесной конфигурации точек.

Доказательство. Оценим трудоёмкость каждого этапа.

Проверка совпадения упорядоченных наборов длин рёбер имеет сложность $O\left(\left(\frac{N(N-1)}{2}\right)^2\right) = O(N^4)$.

В цикле ($O(N^2)$): сдвиг вершины пучка $S_2(u')$ имеет сложность $O(N)$; поворот пучка $S_2(u')$ — $O(N)$; совмещение оставшихся вершин — $O(N)$; поиск соответствия вершин — $O(N^2)$.

Таким образом, общая сложность алгоритма составляет $O(N^4)$. Причём она будет одинаковой как в самом лучшем, так и в самом худшем случае.

Сложность в лучшем: $O(N^4)$ (из-за проверки инвариантов).

Сложность в худшем: $O(N^4)$ (из-за проверки инвариантов, поиска соответствия вершин в цикле). \square

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

При помощи гибридного метода [1] были получены численные решения задачи Томсона для $N = 2, \dots, 16$. Проведена классификация полученных равновесных конфигураций предложенным алгоритмом. Результаты показаны в табл. 3.

Очевидным образом энергетические конфигурации для $N = 16$, потенциальная энергия которых отличается в третьем знаке после запятой, являются хорошим тестом корректности алгоритма. Применяв предложенный алгоритм к данным конфигурациям, мы получим, что конфигурации, соответствующие этим минимумам энергии, являются геометрически различными и неэквивалентными. В данном случае разница в третьем знаке минимумов энергии является существенным фактом, а не вычислительной ошибкой.

Для конфигураций с $N < 16$ найденные решения соответствуют известным аналитическим конфигурациям.

Этот результат согласуется с известным описанием решений, соответствующим минимумам потенциальной энергии. Таким образом, можно делать вывод о корректности численной реализации алгоритма.

Таблица 3

Результаты численного моделирования

N	Потенциальная энергия	Экстремальная конструкция
2	0,5	1
3	$\sqrt{3}$	1
4	3,6742	1
5	6,4747	1
6	9,9853	1
7	14,4530	1
8	19,6753	1
9	25,7600	1
10	32,7170	1
11	40,5965	1
12	49,1653	1
13	58,8532	1
14	69,3063	1
15	80,6703	1
16	92,9106 / 92,9131	2

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследована задача классификации равновесных состояний задачи Томсона. Основным результатом является разработанный алгоритм определения эквивалентности равновесных состояний на основе их геометрической структуры. Показана полиномиальная трудоёмкость метода. Алгоритм проверки эквивалентности протестирован на численных решениях для $N \leq 16$, найдены неэквивалентные конфигурации, в точности совпадающие с известными аналитическими результатами.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Bondarenko A.N., Karchevskiy M.N., Kozinkin L.A.* The structure of metastable states in the Thomson problem // *J. Phys. Conf. Ser.* 2015. V. 643.
2. *Robinson M., Suarez-Martinez I., Marks N.A.* Generalized method for constructing the atomic coordinates of nanotube caps // *Phys. Rev. B.* 2013. V. 87. 155430.
3. *Smale S.* Mathematical problems for the next century // *Math. Intelligencer.* 1998. V. 20, Issue 2. P. 7–15.
4. *Thomson J.J.* On the structure of the atom: an investigation of the stability and periods of oscillation of a number of corpuscles arranged at equal intervals around the circumference of a circle: with application of the results to the theory of atomic structure // *Philos. Mag.* 1904. Ser. 6. P. 237–265.
5. *Wigner E.P.* On the interaction of electrons in metals // *Phys. Rev. B.* 1934. V. 46. 1002.
6. *Voogd J. M., Sloot P. M. A., van Dantzig R.* Crystallization on a sphere // *Future Gener. Comput. Syst.* 1994. V. 10. P. 359–361.
7. *Bauer R.* Distribution of points on a sphere with application to Star Catalogs // *J. Guid. Control Dyn.* 2000. V. 23, N 1. P. 130–137; DOI: 10.2514/2.4497
8. *King III C., Brown W. R., Geller M. J., Kenyon S. J.* Identifying star streams in the Milky Way Halo // *Astrophys. J.* 2012. V. 750, Issue 1; DOI: 10.1088/0004-637X/750/1/81

9. *Băutu A., Băutu E.* Energy minimization of point charges on a sphere with particle swarms // *Romanian J. Phys.* 2009. V. 54, N 1. P. 29–36.
10. *Caspar D.L.D., Klug A.* Physical principles in the construction of regular viruses // *Cold Spring Harb. Symp. Quant. Biol.* 1962. V. 27. P. 1–24; DOI: 10.1101/sqb.1962.027.001.005
11. *Erber T., Hockney G. M.* Equilibrium configurations of N equals charges on a sphere // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1991, V. 24, N 23.
12. *Altschuler E., Williams T., Ratner E., Tipton R., Stong R., Dowla F., Wooten F.* Possible global minimum lattice configurations for Thomson’s problem of charges on a sphere // *Phys. Rev. Lett.* 1997. V. 78. 2861.
13. *Bondarenko A.N., Bugueva T.V., Kozinkin L.A.* Numerical study of the structure of metastable configurations for the Thomson problem // *Russ. Phys. J.* 2016. V. 59. P. 121–129.
14. *Schwarz R.E.* The 5-electron case of Thomson’s problem // *Experiment Math.* 2013. V. 22. P. 157–186.
15. *Foppl L.* Stabile anordnungen von elektronen im atom // *J. Reine Angew. Math.* 1912. V. 141. P. 251–301.
16. *Yudin V.A.* The minimum of potential energy of a system of point charges // *Discrete Math. Appl.* 1993. V. 3, Issue 1. P. 75–82.
17. *Andreev N. N.* An extremal property of the icosahedron // *East J. Approx.* 1996. V. 2. P. 459–462.
18. *Fletcher R.* *Practical Methods of Optimization.* N. Y.: John Wiley & Sons, 1987.
19. *Jiang X.Y., Bunke H.* Including geometry in graph representations: A quadratic-time graph isomorphism algorithm and its applications // *Adv. Structural and Syntactical Pattern Recognition.* 1996. P. 110–119; https://doi.org/10.1007/3-540-61577-6_12

UDC 519.168

**POLYNOMIAL CLASSIFICATION ALGORITHM OF THE THOMSON
PROBLEM SOLUTIONS**© 2022 S. A. Fadeev^{2a}, V. A. Dedok^{1,2b}, A. N. Bondarenko¹*Sobolev Institute of Mathematics SB RAS,
pr. Acad. Koptyuga 4, Novosibirsk 630090, Russia,*²*Novosibirsk State University,
ul. Pirogova 1, Novosibirsk 630090, Russia*E-mails: ^astepan-fadeev@g.nsu.ru, ^bdedok@math.nsc.ru

Received 17.11.2021, revised 10.01.2022, accepted 13.01.2022

Abstract. This paper is devoted to the question of determining the equivalence of solutions of the Thomson problem using their geometric structure. The algorithm for classifying solutions with polynomial complexity was developed. The results of numerical experiments are presented.

Keywords: Thomson problem, equilibrium configurations, weighted graphs isomorphism.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2022.25.208

REFERENCES

1. Bondarenko A.N., Karchevskiy M.N., Kozinkin L.A. The structure of metastable states in the Thomson problem. *J. Phys. Conf. Ser.*, 2015, Vol. 643.
2. Robinson M., Suarez-Martinez I., Marks N.A. Generalized method for constructing the atomic coordinates of nanotube caps. *Phys. Rev. B*, 2013, Vol. 87, Article Number 155430.
3. Smale S. Mathematical problems for the next century. *Math. Intelligencer*, 1998, Vol. 20, No. 2, pp. 7–15.
4. Thomson J.J. On the structure of the atom: an investigation of the stability and periods of oscillation of a number of corpuscles arranged at equal intervals around the circumference of a circle: with application of the results to the theory of atomic structure. *Philos. Mag.*, 1904, Ser. 6, pp. 237–265.
5. Wigner E.P. On the interaction of electrons in metals. *Phys. Rev. B*, 1934, Vol. 46, Article Number 1002.
6. Voogd J.M., Sloot P. M.A., van Dantzig R. Crystallization on a sphere. *Future Gener. Comput. Syst.*, 1994, Vol. 10, pp. 359–361.
7. Bauer R. Distribution of points on a sphere with application to Star Catalogs. *J. Guid. Control Dyn.*, 2000, Vol. 23, No. 1, pp. 130–137; DOI: 10.2514/2.4497
8. King III C., Brown W.R., Geller M.J., Kenyon S.J. Identifying star streams in the Milky Way Halo. *Astrophys. J.*, 2012, Vol. 750, No. 1; DOI: 10.1088/0004-637X/750/1/81
9. Băutu A., Băutu E. Energy minimization of point charges on a sphere with particle swarms. *Romanian J. Phys.*, 2009, Vol. 54, No. 1, pp. 29–36.
10. Caspar D.L.D., Klug A. Physical principles in the construction of regular viruses. *Cold Spring Harb. Symp. Quant. Biol.*, 1962, Vol. 27, pp. 1–24; DOI: 10.1101/sqb.1962.027.001.005
11. Erber T., Hockney G.M. Equilibrium configurations of N equal charges on a sphere. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 1991, Vol. 24, No. 23.

12. Altschuler E., Williams T., Ratner E., Tipton R., Stong R., Dowla F., Wooten F. Possible global minimum lattice configurations for Thomson's problem of charges on a sphere. *Phys. Rev. Lett.*, 1997, Vol. 78, Article Number 2861.
13. Bondarenko A.N., Bugueva T.V., Kozinkin L.A. Numerical study of the structure of metastable configurations for the Thomson problem. *Russ. Phys. J.*, 2016, Vol. 59, pp. 121–129.
14. Schwarz R.E. The 5-electron case of Thomson's problem. *Experiment Math.*, 2013, Vol. 22, pp. 157–186.
15. Foppl L. Stabile anordnungen von elektronen im atom. *J. Reine Angew. Math.*, 1912, Vol. 141, pp. 251–301.
16. Yudin V.A. The minimum of potential energy of a system of point charges. *Discrete Math. Appl.*, 1993, Vol. 3, No. 1, pp. 75–82.
17. Andreev N. N. An extremal property of the icosahedron. *East J. Approx.*, 1996, Vol. 2, pp. 459–462.
18. Fletcher R. *Practical Methods of Optimization*. N. Y.: John Wiley & Sons, 1987.
19. Jiang X.Y., Bunke H. Including geometry in graph representations: A quadratic-time graph isomorphism algorithm and its applications. *Adv. Structural and Syntactical Pattern Recognition*, 1996, pp. 110–119; https://doi.org/10.1007/3-540-61577-6_12