

Esercizio 2: Atomi

Il problema si formula come problema di ottimizzazione non lineare nel continuo, con tre variabili (le coordinate della sonda) e una funzione obiettivo che è la somma dei contributi dati all'energia da tutte le interazioni con gli atomi. Il valore della distanza elevato alla sesta e alla dodicesima potenza si ottiene con vincoli di uguaglianza sulle coordinate della sonda (variabili) e degli atomi (dati).

Il modello del problema è nel file ATOMI.LG4; la sua soluzione è nel file ATOMI.LGR.

Non c'è garanzia che la soluzione sia un ottimo globale. In effetti la funzione obiettivo non è convessa e quindi può avere numerosi minimi locali.