

Esercizio 1: Spin glass

Un vetro di spin (*spin glass*) è costituito da particelle magnetiche che possono avere un orientamento (*spin*) in una tra due possibili direzioni ("su" e "giù"). Ad ogni coppia di particelle è associata un'energia di interazione, che ha segno negativo se le due particelle hanno lo stesso spin, positivo se hanno spin opposti. Ad esempio, se alla coppia (i,j) è associata un'energia di interazione pari a 4, la coppia (i,j) contribuisce per -4 unità all'energia complessiva se lo spin di i è uguale allo spin di j , mentre dà contributo +4 all'energia complessiva se lo spin di i e lo spin di j sono opposti. Si vuole studiare qual è la configurazione di minima energia del vetro di spin.

In un successivo esperimento viene applicato al vetro di spin un campo magnetico esterno, che interagisce con le particelle contribuendo all'energia totale del sistema con termini positivi o negativi a seconda dell'orientamento di ogni singola particella. Anche in questo secondo caso si vuole trovare la configurazione di minima energia.

Formulare il problema, risolverlo con i dati del file SPIN.TXT e discutere l'ottimalità e l'unicità della soluzione ottenuta.

Le particelle sono 10.

Ogni particella interagisce solo con le altre, non con sè stessa.

L'energia di interazione tra i e j è uguale a quella tra j e i e va contata una volta sola.

L'energia di interazione tra spin opposti è descritta dalla matrice dei coefficienti seguente:

3	-1	-4	5	-8	4	-2	-3	-1	
-1	-2	2	-4	7	-1	2	-2	2	
-4	2	-3	-3	-3	5	-2	-1	-3	
5	-4	-3	2	-1	-2	-2	-2	-7	
-8	7	-3	-1	3	-7	7	-2	8	
4	-1	5	-2	-7	-5	3	-3	-1	
-2	2	-2	-2	7	3	-1	9	-5	
-3	-2	-1	-2	-2	-3	9	1	9	
-1	2	-3	-7	8	-1	-5	9	-6	

L'energia di interazione col campo magnetico esterno è descritta dai coefficienti seguenti.

Il contributo all'energia è positivo per le particelle con spin "su" e negativo per quelle con spin "giù".

1 8 2 9 1 9 1 8 2 7

Il problema si formula associando una variabile binaria ad ogni particella, indicante l'orientamento (spin) della stessa. Poiché non ci sono vincoli, tutte le configurazioni degli spin sono ammissibili. La funzione obiettivo è quadratica, poiché contiene tanti addendi quante le coppie di particelle, ciascuna delle quali dà un contributo positivo o negativo alla somma complessiva a seconda dell'orientamento.

Si tratta quindi di un problema di programmazione quadratica, caso particolare della programmazione non lineare.

La formulazione contiene 10 variabili binarie x e 100 coefficienti e di interazione (matrice 10×10). La matrice dei coefficienti si ricava per simmetria dai coefficienti dati nel file SPIN.TXT, aggiungendo elementi nulli sulla diagonale principale (poiché ogni particella ha interazione nulla con sé stessa). Ogni coefficiente $e(i,j)$ deve esser moltiplicato per 1 o -1 a seconda che sia $x(i)=x(j)$ o $x(i) \neq x(j)$. Un modo per ottenere tale effetto è di moltiplicare tra loro le quantità $x(i)-0.5$ e $x(j)-0.5$. Il prodotto può essere uguale solo a +0.25 o -0.25 e quindi moltiplicandolo per 4 si ottiene il coefficiente +1 o -1 per cui moltiplicare $e(i,j)$. La funzione obiettivo così calcolata, va poi dimezzata perché altrimenti la stessa interazione sarebbe calcolata due volte, una per la coppia (i,j) e una per la coppia (j,i) . Inoltre va cambiata di segno, perché i contributi positivi devono corrispondere a particelle con orientamento opposto.

Tutte e 10 le variabili sono dichiarate binarie.

La soluzione calcolata da LINGO (file SPIN1.LGR) prevede le particelle 1, 2, 5, 6, 8, 10 orientate in un modo e le particelle 3, 4, 7, 9 orientate nell'altro. Il programma garantisce che si tratta della soluzione ottima.

La seconda parte dell'esercizio non cambia le variabili, né introduce vincoli, ma aggiunge un ulteriore termine alla funzione obiettivo. Questo secondo termine è lineare, poiché ogni particella interagisce con il campo magnetico esterno indipendentemente dalle altre. La nuova formulazione è nel file SPIN2.LG4. Ai dati viene aggiunto il vettore dei coefficienti c di interazione col campo esterno. Alla funzione obiettivo viene aggiunta la somma dei 10 contributi dati dal prodotto tra il coefficiente dato e la grandezza $2 \cdot (x(i)-0.5)$, che vale +1 o -1 a seconda che $x(i)$ valga 0 o 1.

La soluzione ottima calcolata da LINGO (file SPIN2.LGR) prevede che le particelle 1, 3, 5, 7, 8, 9, 10 siano orientate in un senso e le particelle 2, 4, 6 nell'altro.