

Cariche elettriche. All'estremità di n bastoncini di uguale lunghezza sono poste cariche elettriche uguali e dello stesso segno, che quindi si respingono tra loro con una forza proporzionale al quadrato della loro distanza. All'altra estremità i bastoncini sono uniti: i loro estremi sono nello stesso punto. I bastoncini possono orientarsi liberamente in qualunque direzione nello spazio in tre dimensioni.

Si vuole trovare la configurazione di equilibrio per diversi valori di n . In particolare, sono di interesse i casi $n = 5$ e $n = 7$, dove la soluzione ottima non può essere ricavata facilmente con semplici considerazioni geometriche basate sulla simmetria (come invece è possibile per i casi $n = 2, 3, 4$ e 6).

N.B. La configurazione di equilibrio è quella di minima energia e l'energia dovuta all'interazione tra due cariche è inversamente proporzionale alla loro distanza.

Classificare il problema, risolverlo e discutere ottimalità e unicità della soluzione ottenuta.

Soluzione. Il problema richiede di determinare la posizione nello spazio in tre dimensioni delle estremità libere dei bastoncini. Ovviamente è comodo fissare come origine degli assi il punto comune a tutti i bastoncini. Inoltre si può fissare arbitrariamente la lunghezza dei bastoncini, ponendola ad esempio pari a 1.

Le variabili quindi possono essere una terna di coordinate (x_i, y_i, z_i) per ogni punto da fissare, col vincolo $x_i^2 + y_i^2 + z_i^2 = 1$. Si possono anche usare le coordinate polari (due angoli anziché tre lunghezze per ogni punto) oppure i coseni direttori (tre angoli per ogni punto), ma non sembra che questo possa semplificare il modello.

Detta d_{ij} la distanza euclidea tra due punti distinti, la funzione obiettivo da minimizzare (energia del sistema) è data da

$$\sum_{i,j:i < j} \frac{1}{d_{ij}}$$

oppure

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j:i \neq j} \frac{1}{d_{ij}}.$$

L'importante è evitare che nella somma compaiano gli addendi corrispondenti alle coppie $i = j$.

Nel solutore può essere utile introdurre i vincoli

$$d_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}$$

direttamente nella dichiarazione delle variabili d , in modo che il solutore esegua la sostituzione immediata.

Inoltre, per evitare problemi di inizializzazione dovuti a valori nulli delle distanze, è opportuno inizializzare le posizioni dei punti con valori distinti.

Il problema è ovviamente non-lineare. Dato che contiene un vincolo di uguaglianza non-lineare, il modello è non-convesso ed i solutori garantiscono solo l'ottimalità locale, non quella globale.

Se le lunghezze dei bastoncini e le cariche elettriche sono tutte uguali, allora tutti i minimi locali potrebbero essere copie simmetriche della stessa configurazione, ottenibili permutando gli indici dei punti o ruotando la loro configurazione intorno all'origine, e quindi avrebbero tutti lo stesso valore: in tal caso, uno qualsiasi di essi fornirebbe il valore ottimo globale. Non abbiamo però garanzia che sia davvero così.

Se invece le lunghezze dei bastoncini o le cariche elettriche fossero diverse, questa proprietà non varrebbe più e quindi in generale si avrebbero minimi locali effettivamente diversi l'uno dall'altro.

Per $n = 2, 3, 4$ e 6 si può verificare che i punti si dispongono in modo equidistante tra loro, cioè ai vertici di figure regolari.

Per $n = 5$ e $n = 7$ (e a maggior ragione per valori ancora più grandi) si ottengono soluzioni che ben difficilmente sarebbe stato possibile costruire per via geometrica (fanno eccezione naturalmente i valori $8, 12$ e 20 che, come 4 e 6 , corrispondono ai solidi platonici).