

## 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.

## Esempio.

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 nella Tabella 1.

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

Table 1: Coefficienti di interazione tra spin.

Energia di interazione col campo magnetico esterno è descritta dai coefficienti in Tabella 2. Il contributo all’energia è positivo per le particelle con spin “su”

e negativo per quelle con spin “giù”.

Particella	Coefficiente
1	1
2	8
3	2
4	9
5	1
6	9
7	1
8	8
9	2
10	7

Table 2: Coefficienti di interazione tra particelle e campo esterno.

### Soluzione.

Dato l'insieme  $N$  delle particelle, il problema si formula associando ad ogni particella  $i \in N$  una variabile binaria  $x_i$ , che indica l'orientamento (spin). Poiché non ci sono vincoli, tutte le configurazioni degli spin sono ammissibili.

La matrice dei coefficienti si ricava per simmetria dai coefficienti dati nel file SPIN.TXT, inserendo elementi nulli sulla diagonale principale (poiché ogni particella ha interazione nulla con sè stessa).

Ogni dato coefficiente  $e_{ij}$  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  $2x_i - 1$  e  $2x_j - 1$ . Tali grandezze valgono  $-1$  o  $+1$  a seconda che le variabili binarie valgano 0 o 1 ed il loro prodotto può essere uguale solo a  $+1$  o  $-1$ .

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.

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, perchè i contributi positivi devono corrispondere a particelle con orientamento opposto.

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

La soluzione prevede le particelle 1, 2, 5, 6, 8, 10 orientate in un modo e le particelle 3, 4, 7, 9 orientate nell'altro ed il valore minimo dell'energia risulta pari a  $-93$ . Il solutore garantisce che si tratta della soluzione ottima, ottenuta con enumerazione implicita di tutte le soluzioni discrete.

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, poichè ogni particella interagisce con il campo magnetico esterno indipendentemente dalle altre.

Tra i dati bisogna inserire anche il vettore dei coefficienti  $c_i$  di interazione col campo esterno.

Alla funzione obiettivo viene aggiunta la somma dei contributi dati dal prodotto tra il coefficiente  $c_i$  e la grandezza  $2x_i - 1$ , che vale  $-1$  o  $+1$  a seconda che  $x_i$  valga  $0$  o  $1$ .

La soluzione ottima prevede che le particelle  $1, 3, 7, 9$  siano orientate in “su” e le altre in “giù”.