

Fisica Computazionale: Esercitazione 6

- implementa l'algoritmo di Velocity-Verlet e applicalo al problema dell'oscillatore armonico visto nell'esercitazione 3. Confronta l'errore sulla posizione e sulla conservazione dell'energia con i metodi usati in precedenza.
- considera quindi un sistema con N particelle in 3 dimensioni e scrivi un codice per fare dinamica molecolare usando l'algoritmo di Velocity-Verlet per un fluido di Lennard-Jones. Il potenziale é dato da

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

– per il calcolo delle forze ricorda che

$$\begin{aligned} \vec{F}_i &= -\nabla_i V(r) = - \left(\frac{\partial V(r)}{\partial x}, \frac{\partial V(r)}{\partial y}, \frac{\partial V(r)}{\partial z} \right) \\ &= - \left(\frac{\partial r}{\partial x}, \frac{\partial r}{\partial y}, \frac{\partial r}{\partial z} \right) \frac{dV(r)}{dr} = - \frac{\vec{r}}{r} \frac{dV(r)}{dr} \end{aligned}$$

dove abbiamo usato la definizione $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.

- usa variabili adimensionali in tutto il codice usando ϵ come scala delle energie e σ per le lunghezze. Con questa scelta, le variabili adimensionali corrispondenti a tempo, densità, pressione e temperatura diventano

$$\hat{t} = t \sqrt{\frac{\epsilon}{m\sigma^2}} \quad \hat{\rho} = \rho\sigma^3 \quad \hat{P} = P\sigma^3/\epsilon \quad \hat{T} = k_B T/\epsilon.$$

- Inizializza le velocità usando la distribuzione di Maxwell-Boltzmann usando le formule di Box-Muller e le posizioni in un reticolo cubico o BCC.
- per il calcolo delle forze dovrai implementare due accorgimenti
 1. calcola le distanze usando i primi vicini
 2. modifica il potenziale in modo che energie vadano a zero in modo continuo sul bordo della scatola a $L/2$. Se volete potete anche imporre che le forze vadano a zero in modo continuo.
- calcola energia, temperatura e pressione in funzione del tempo per $\hat{T} = 1.1$ e densità $\hat{\rho} = (0.01, 0.8, 1.2)$