

Derivate ed integrali numerici

Indice

1 Qual è l'output di questo programma?	1
2 Derivazione numerica	1
3 Secondo coefficiente del viriale	2
4 Potenziale elettrostatico di una distribuzione radiale	2

1 Qual è l'output di questo programma?

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>

int main(int argc, char *argv[])
{
    double x = 3/2;
    printf("3 / 2 = %lf\n",x);
}
```

2 Derivazione numerica

Scrivere un programma che calcoli in maniera numerica la derivata della funzione gaussiana $f(x) = e^{-x^2}$ usando l'equazione

$$f'(x) \simeq \frac{f(x+dx) - f(x-dx)}{2\,dx},$$

confrontandola col suo valore analitico.

Per quale valore di dx si riesce a stimare la derivata di una gaussiana nell'intervallo $x \in [0, 5]$ con una precisione relativa migliore di una parte su 10^5 ?

3 Secondo coefficiente del viriale

Calcolare numericamente il secondo coefficiente del viriale

$$B(T) = -2\pi \int_0^\infty dr \, r^2 [\exp(-\beta v(r)) - 1],$$

dove $\beta = 1/(k_B T)$, per un gas le cui particelle interagiscono tramite il potenziale

$$v(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

utilizzando opportune unità ridotte, e riportando i valori ottenuti in una tabella che contenga almeno l'intervallo $1 < T^* < 50$, dove $T^* = k_B T / \varepsilon$ è la temperatura ridotta.

Confrontare i risultati ottenuti con i valori sperimentali per $B(T)$, con particolare riguardo per i gas Elio, Argon e Metano.

4 Potenziale elettrostatico di una distribuzione radiale

Si consideri una distribuzione di carica a simmetria sferica della forma

$$\varrho(r) = \alpha \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right),$$

la costante α , di cui viene richiesto il valore, è fissata dall'avere carica totale unitaria. Si calcolino e si disegnino:

1. La carica $Q(r)$ contenuta in una sfera di raggio r .
2. Il campo elettrostatico $E(r)$, discutendo in particolare il limite $r \rightarrow 0$.
3. Il potenziale elettrostatico $V(r)$, con la convenzione $V(r \rightarrow \infty) = 0$.
Quanto vale il potenziale elettrostatico nell'origine?