

# HOMEWORK 3

ALICE SCHIRINÀ

5 giugno 2018

Consideriamo un sistema di molecole monoatomiche che interagiscono tramite il potenziale

$$U(r) = A \frac{\sigma e^{-r/\sigma}}{r}$$

quando  $r < r_c$  e  $U(r) = 0$  per  $r > r_c$ . Scegliamo il lato della scatola cubica  $L/\sigma$  in maniera tale che sia  $\rho\sigma^3 = 0.5$  e utilizziamo unità ridotte, cioè

$Unità\ ridotte$
$r^* = r/\sigma$
$t^* = t/\sigma\sqrt{A/m}$
$v^* = v\sqrt{m/A}$
$E^* = E/A$
$p^* = p\sigma^3/A$
$T^* = k_B T/A$

## Configurazione iniziale

Generiamo una configurazione in cui le molecole sono distribuite casualmente nella scatola di lato  $L/\sigma$  e con velocità anch'esse casuali per cui usiamo il comando  $RNG(-0.5, 0.5)$ . In particolare, vogliamo che sia  $\sum v^* = 0$ . In generale, questo non accade per cui definiamo la quantità

$$P^* = \sum_{i=0}^N v_i^*$$

e ridefiniamo velocità ed energia cinetica come segue

$$v_i^{*'} = v_i^* - \frac{P^*}{N} \quad (1)$$

$$K^* = \sum_i \frac{1}{2} (v_i^{*'})^2 \quad (2)$$

$$(3)$$

e infine scaliamo le velocità

$$\hat{v}_i^* = \alpha v_i^{*'}$$

dove

$$\alpha = \sqrt{\frac{0.8N}{K^*}}$$

In questo modo otteniamo particelle disposte casualmente nella scatola con velocità tali che la somma totale sia nulla e con energia cinetica per particella  $K^* = 0.8$ .

Con questa configurazione eseguiamo una simulazione utilizzando lo schema di Verlet per le velocità con passo temporale  $\Delta t^* = 0.002$  e fermandoci a  $t^* = 1$ . Infine, scaliamo ancora una volta le velocità in maniera

tale che  $K^*/N = 1$ . Questa è la nostra configurazione iniziale.

Partendo dalla stessa configurazione eseguiamo sei simulazioni ciascuna delle quali con passo tempo diverso

<i>run</i>	$\Delta t$
1	0.001
2	0.003
3	0.009
4	0.027
5	0.081
6	0.243

e arrendandoci a  $t^* = 25$ . Dopo ogni iterazione calcoliamo l'energia potenziale  $U(t)$ , la pressione istantanea  $P(t)$ , l'energia totale  $E(t) = U(t) + K(t)$  e, infine, la temperatura istantanea  $T(t) = 2K(t)/3N$ , tutte in unità ridotte. Inoltre, a ogni passo Verlet è necessaria anche la forza. Per quest'ultima e per le altre osservabili usiamo le seguenti espressioni:

$$U(r) = \frac{e^{-r}}{r} \quad (4)$$

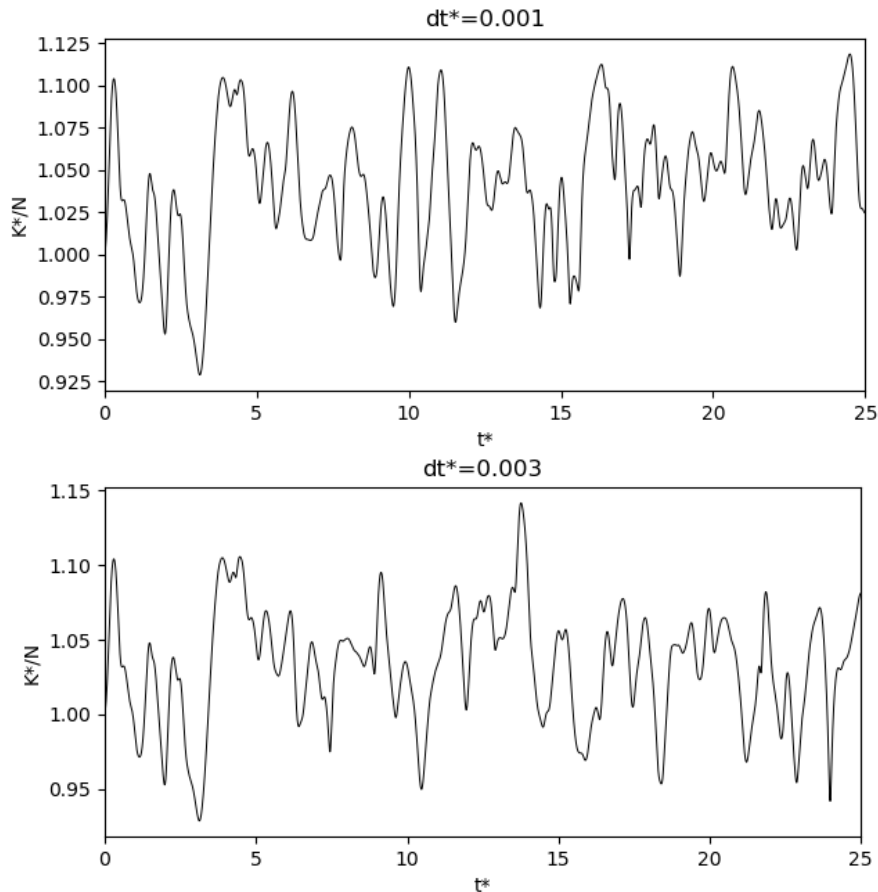
$$P(r) = \frac{NT}{L^3} - \frac{e^{-r}}{3L^3} \left( \frac{1}{r} + 1 \right) \quad (5)$$

$$K(t) = \frac{1}{2} v^2(t) \quad (6)$$

$$F_{x,i}(r) = \frac{x_i}{r^2} \left( 1 + \frac{1}{r} \right) \quad (7)$$

le componenti  $y$  e  $z$  della forza si calcolano analogamente. Per semplicità di scrittura abbiamo omesso i simboli \* ma ricordiamo ancora una volta che le osservabili in esame sono espresse in unità ridotte.

Vogliamo ora mostrare gli andamenti dell'energia cinetica per molecola nelle varie simulazioni per trovare quelle stabili.



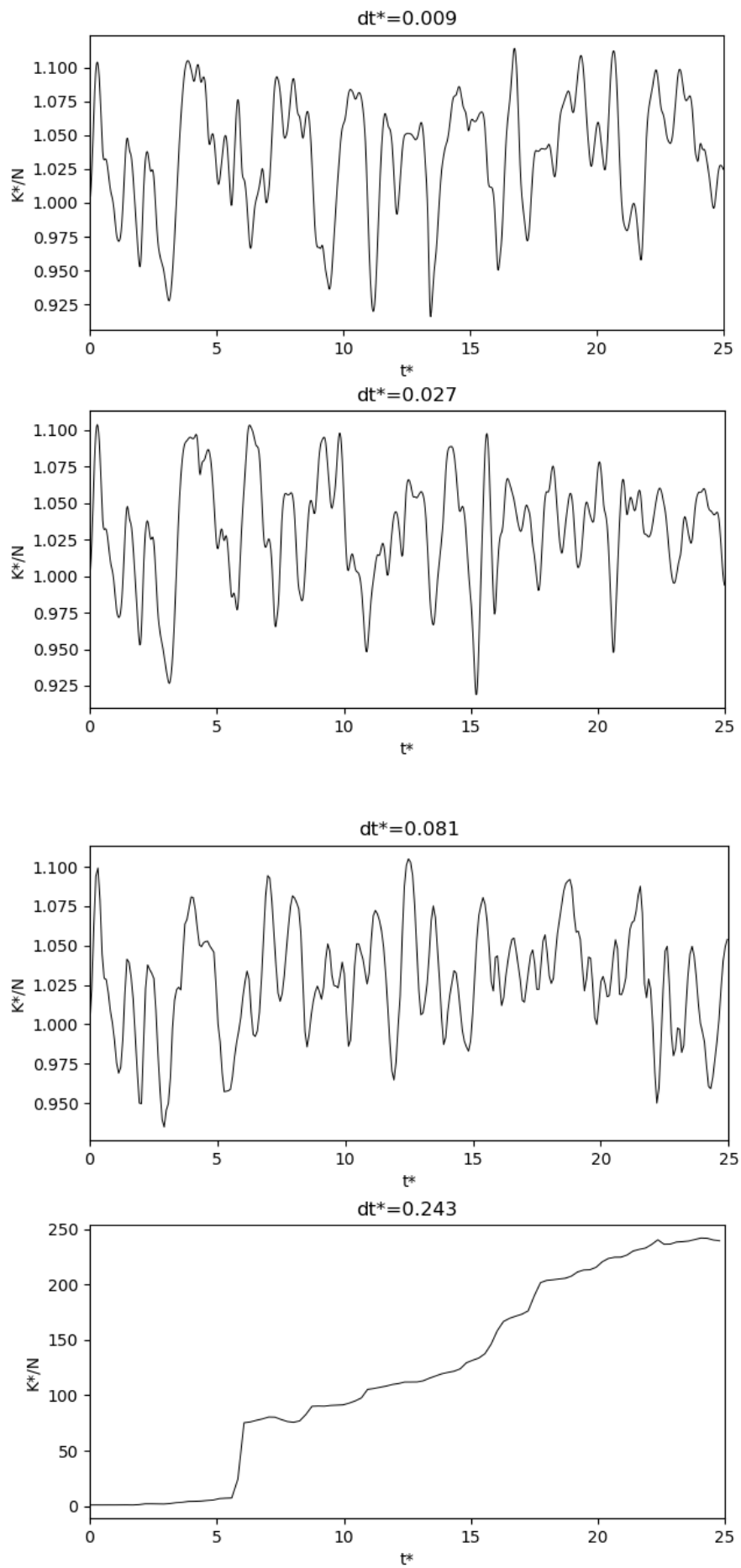


Figura 1: Andamento energia cinetica per molecola

Come possiamo osservare dal grafico, l'energia nella simulazione con  $\Delta t^* = 0.243$  risulta essere instabile per cui eseguiamo la nostra analisi su tutte le simulazioni eccetto questa.

## Divergenza della traiettoria

Osserviamo ora l'effetto del crescere di  $\Delta t^*$  sulle traiettorie delle osservabili. Riportiamo di seguito  $E^{(i)} - E^{(1)}$ ,  $P^{(i)} - P^{(1)}$  e  $T^{(i)} - T^{(1)}$  dove  $i = 2, 3, 4, 5$  indica la *run*.

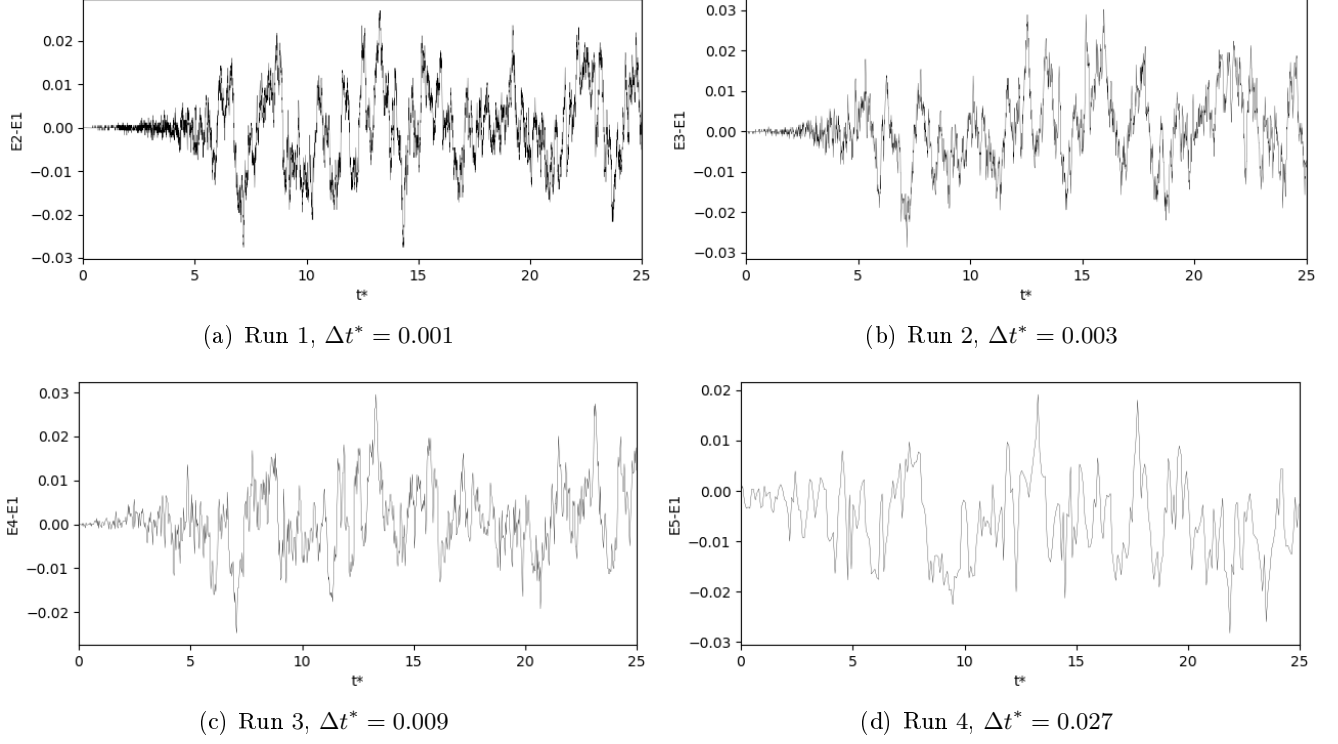
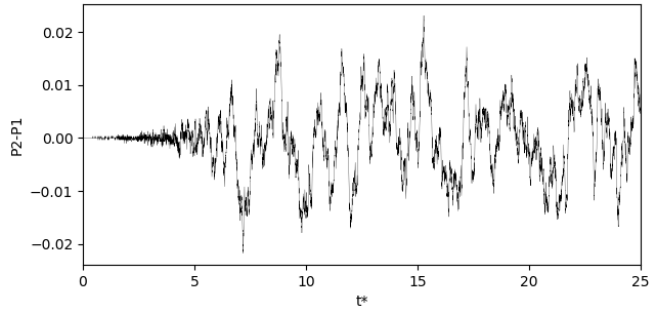
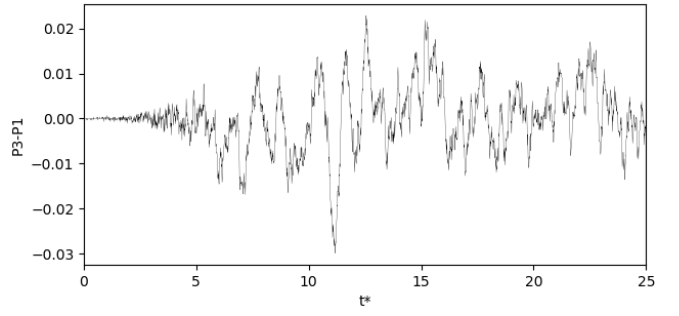


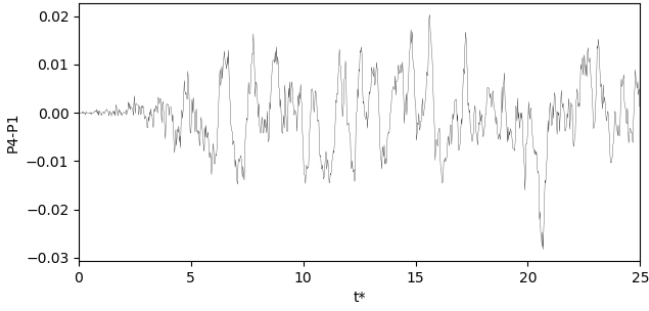
Figura 2: Divergenza delle traiettorie per l'energia totale



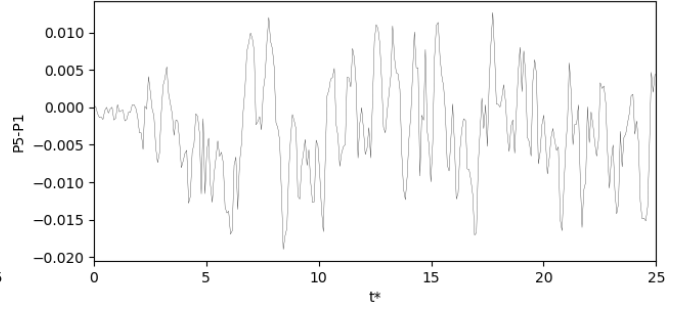
(a) Run 1,  $\Delta t^* = 0.001$



(b) Run 2,  $\Delta t^* = 0.003$

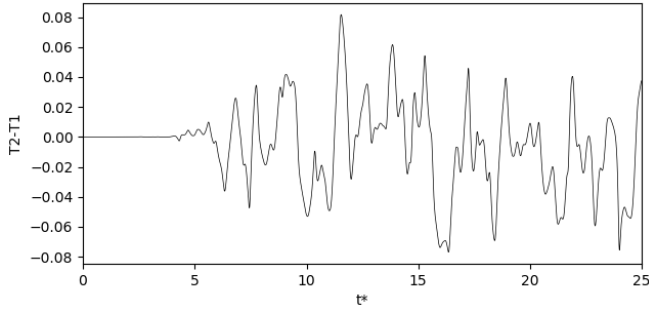


(c) Run 3,  $\Delta t^* = 0.009$

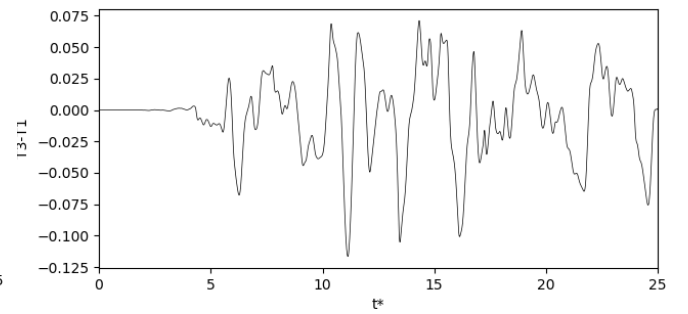


(d) Run 4,  $\Delta t^* = 0.027$

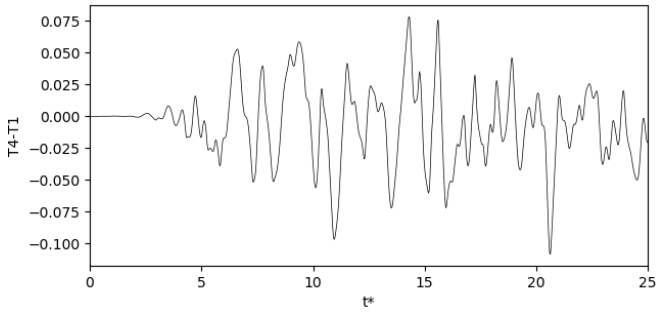
Figura 3: Divergenza delle traiettorie per la pressione



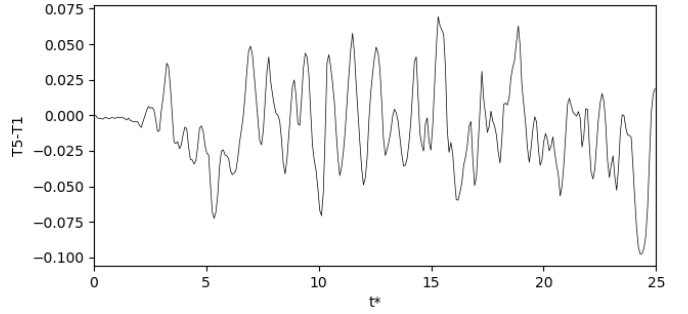
(a) Run 1,  $\Delta t^* = 0.001$



(b) Run 2,  $\Delta t^* = 0.003$



(c) Run 3,  $\Delta t^* = 0.009$

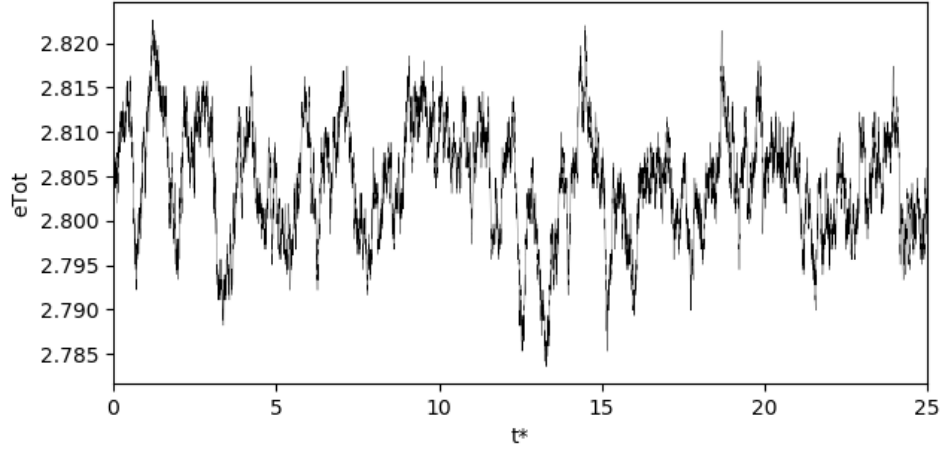


(d) Run 4,  $\Delta t^* = 0.027$

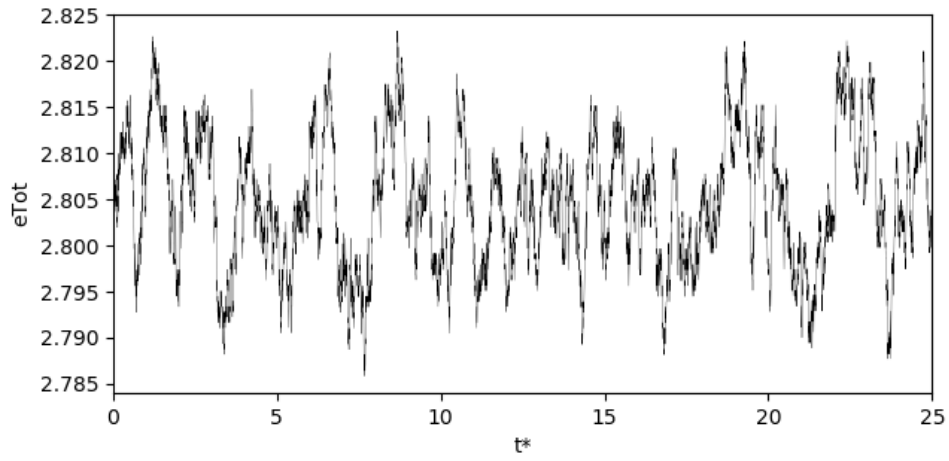
Figura 4: Divergenza delle traiettorie per la temperatura

## Conservazione dell'energia

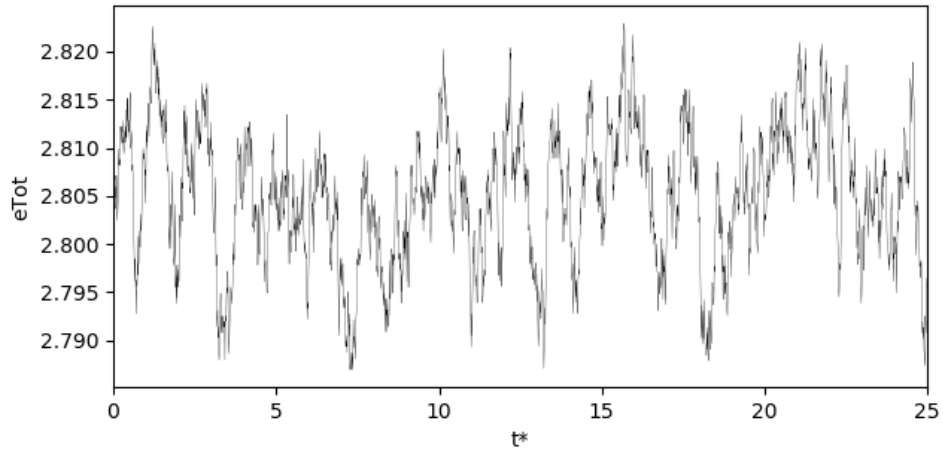
Osserviamo adesso la conservazione dell'energia riportando i grafici dell'energia totale per le diverse simulazioni.



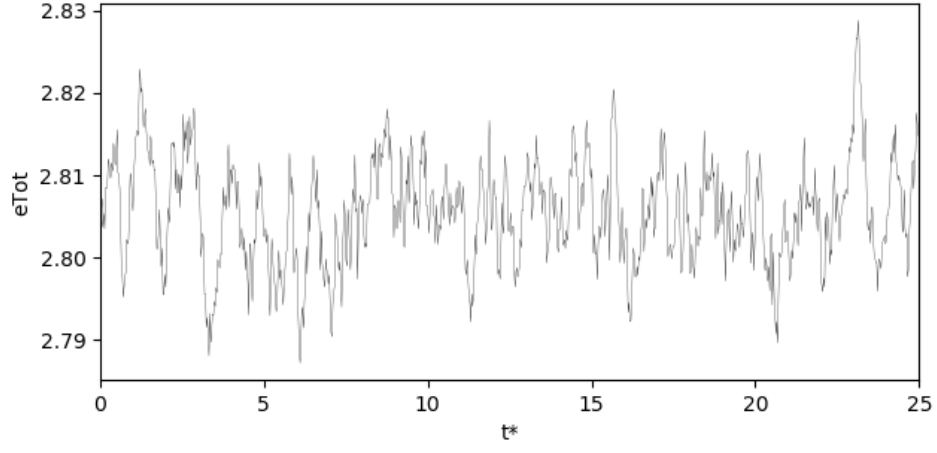
(a) Run 1,  $\Delta t^* = 0.001$



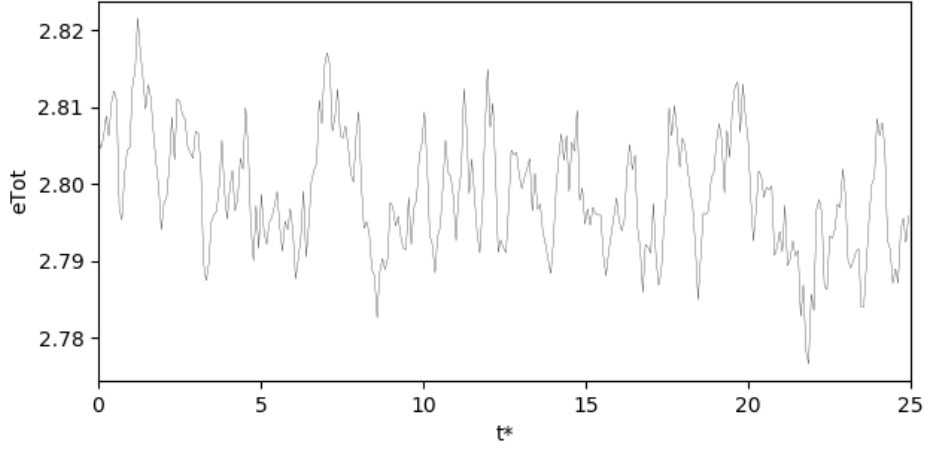
(b) Run 2,  $\Delta t^* = 0.003$



(c) Run 3,  $\Delta t^* = 0.009$



(d) Run 4,  $\Delta t^* = 0.027$



(e) Run 4,  $\Delta t^* = 0.027$

Figura 5: Andamento energia totale

Infatti dall'analisi dei dati otteniamo i seguenti valori per le energie totali medie (per molecola)

<i>run</i>	$\langle E \rangle / N$
1	2.8044
2	2.8049
3	2.8053
4	2.8057
5	2.8020

che confermano la consistenza dell'ipotesi di conservazione dell'energia nelle diverse simulazioni.

## Errori e correlazioni

Stimiamo ora i valori medi di energia potenziale, pressione e temperatura e calcoliamo i tempi di autocorrelazione e gli errori. Riportiamo i valori ottenuti nella seguente tabella.

<i>run</i>	$\langle U \rangle$	$\tau_U$	$\sigma_U$	$\langle P \rangle$	$\tau_P$	$\sigma_P$	$\langle T \rangle$	$\tau_T$	$\sigma_T$
1	1.7633	0.2642	0.0057	1.0710	0.1727	0.00063	0.6941	0.2534	0.0036
2	1.7719	0.2877	0.0059	1.0710	0.1956	0.00071	0.6886	0.2696	0.0037
3	1.7705	0.2685	0.0066	1.0712	0.2142	0.00078	0.6898	0.2675	0.0043
4	1.7738	0.2368	0.0052	1.0705	0.1690	0.00067	0.6879	0.2317	0.0034
5	1.7733	0.2252	0.0048	1.0693	0.2141	0.00078	0.6858	0.2274	0.0031