

Laboratorio di Calcolo, Esercitazione Valutata del 16/12/2025

Anno accademico 2025-26

Nome: _____ Cognome: _____
Matricola: _____ ☐ Ritirata/o

Lo scopo di questa prova d'esame è di scrivere un programma in C e uno script in python seguendo la traccia riportata di seguito. Si tenga presente che:

1. Il tempo a disposizione è di 3 ore. Sono ammessi i proutuari e il libro di testo o gli appunti. Non si può parlare con nessuno, né utilizzare cellulari/tablet/laptop, pena l'annullamento del compito.
2. Il programma va scritto e salvato esclusivamente sul computer del laboratorio, a cui si deve accedere utilizzando come username **studente** e come password **informatica**
3. **Tutti i file vanno salvati in una cartella chiamata EVDIC25_NOME_COGNOME nella home directory**, dove NOME e COGNOME indicano rispettivamente il tuo nome e cognome. Ad esempio lo studente *Nicolò Maria De Rossi Salò* deve creare una cartella chiamata EVDIC25_NICOLOMARIA_DEROSSISALO contenente tutti i file specificati nel testo. **Tutto ciò che non si trova all'interno della cartella suddetta non verrà valutato.**
4. **È necessario consegnare il presente foglio indicando nome, cognome e numero di matricola** (vedi sopra), barrando la casella **“Ritirato/a”** se ci si vuole ritirare, ovvero se non si vuole che la presente prova venga valutata.

Particelle di forma cilindrica (vedi figura), quando presenti ad alte concentrazioni, possono dar luogo a fasi note come *cristalli liquidi*. Una di queste è la fase nematica, caratterizzata dal fatto che gli assi dei cilindri tendono ad allinearsi, in media, lungo una direzione privilegiata chiamata asse nematico. La probabilità di formare un certo angolo θ rispetto all'asse nematico è data dalla seguente distribuzione di Onsager:

$$f_{\text{ons}}(\theta, \alpha) = \sin \theta \frac{\alpha}{2 \sinh \alpha} \cosh(\alpha \cos \theta) \quad (1)$$

dove $\alpha \in (0, \infty)$ è un parametro legato al grado di allineamento delle particelle: tanto più α è grande, tanto più le particelle saranno allineate lungo l'asse nematico.

Suggerimento: \cosh e \sinh sono il coseno ed il seno iperbolico, e le corrispondenti funzioni C sono proprio \cosh e \sinh .

Il grado d'ordine del sistema si può quantificare tramite un cosiddetto parametro d'ordine $S(\alpha)$, che può assumere valori compresi tra 0 (particelle non allineate) e 1 (particelle perfettamente allineate), ed è una funzione monotona crescente di α . Dato un valore di α , S può essere stimato tramite il metodo Monte Carlo generando N_t valori θ_i estratti con probabilità $f_{\text{ons}}(\theta, \alpha)$ e calcolando

$$S(\alpha) \approx \frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^{N_t} P_2(\theta_i), \quad (2)$$

dove

$$P_2(\theta) = \frac{3 \cos(\theta) \cos(\theta) - 1}{2}. \quad (3)$$

Per generare θ_i con la giusta probabilità (data da f_{ons}) ad α fissato si può usare il seguente algoritmo:

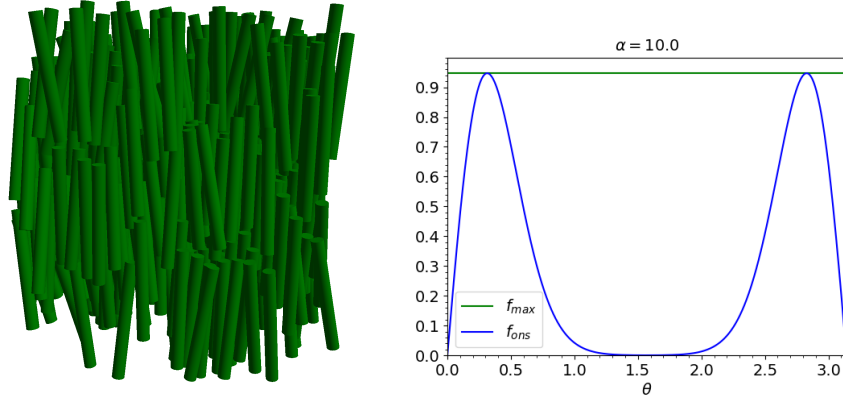


Figura 1: Particelle a forma di bastoncino in fase nematica (sinistra) e distribuzione angolare delle loro orientazioni (destra).

1. Calcolare il valore massimo della distribuzione di Onsager $f_{\max}(\alpha)$, ovvero

$$f_{\max}(\alpha) = \max_{0 < \theta < \pi} \{f_{\text{ons}}(\theta, \alpha)\}. \quad (4)$$

Per calcolare il massimo può aiutare notare che, essendo una distribuzione di probabilità, $f_{\text{ons}}(\theta, \alpha)$ non è mai negativa.

2. Generare in maniera casuale e uniforme due punti $x \in [0, \pi)$ e $y \in [0, f_{\max}(\alpha))$.
3. Se x è tale che $y < f_{\text{ons}}(x, \alpha)$, allora $\theta_i = x$ è un valore generato con la probabilità richiesta, altrimenti si torna al punto 2.

► **Esercizio in C:** Scrivere un programma `NOME.COGNOME.c` che implementi il metodo Monte Carlo suddetto per calcolare il valore del parametro d'ordine nematico $S(\alpha)$ per valori di α interi compresi tra `ALPHAMIN` e `ALPHAMAX`, e salvi su di un file chiamato `S.alpha.dat` tali valori. In particolare, il programma dovrà:

1. Definire, tramite opportune direttive `define`, il numero di punti `NPTS = 5000` su cui calcolare la funzione f_{ons} per determinarne il valore massimo per un dato valore di α ; il numero di valori di θ_i generati per stimare $S(\alpha)$, `NTRIALS = 200000` (cioè N_t nell'Eq. (2)); il minimo e il massimo valore di α `ALPHAMIN=5` e `ALPHAMAX=15`.
2. Dichiarare un array di tipo e dimensioni opportune chiamato `Sarr[]` che memorizzi i valori di S ottenuti per i valori di α considerati.
3. Calcolare, per ogni valore di α , il parametro d'ordine nematico $S(\alpha)$, generando `NTRIALS` valori di θ_i con probabilità $f_{\text{ons}}(\theta, \alpha)$ utilizzando l'Eq. (2).
4. Stampare su schermo con 3 cifre dopo la virgola il valore massimo di f_{ons} per $\alpha = \text{ALPHAMAX}$, e il corrispondente valore di θ , θ_{\max} .

Suggerimento: Conviene calcolare $f_{\max}(\alpha)$ all'interno del ciclo sui valori di α , prima del ciclo con cui generate gli `NTRIALS` valori di θ_i necessari per stimare $S(\alpha)$.

Nello scrivere il programma si dovranno definire almeno le seguenti funzioni:

1. Una funzione chiamata `onsager`, che prenda come argomenti θ e α , calcoli $f_{\text{ons}}(\theta, \alpha)$ e ne restituisca il valore.
2. Una funzione chiamata `findmax` che prenda come argomenti α e due puntatori tramite i quali “restituirà” (tramite passaggio *by reference*) il valore massimo della funzione f_{ons} e il corrispondente valore di θ_{\max} .
3. Una funzione chiamata `onsager_prob` che prenda come argomenti α e $f_{\max}(\alpha)$ e restituisca un valore di θ generato con probabilità $f_{\text{ons}}(\theta, \alpha)$, come discusso in precedenza.
4. Una funzione `salva_Sarr` che salvi su di un file chiamato `S_alpha.dat` i valori di S calcolati per i diversi valori di α considerati. Tale funzione dovrà prendere come argomento l'array `Sarr` e stampare, su due colonne, α e $S(\alpha)$, quest'ultimo con 3 cifre dopo la virgola.

► **Esercizio in Python:**

Dopo aver verificato che il programma funzioni correttamente, creare uno script python `NOME_COGNOME.py` che legga i dati contenuti nel file `S_alpha.dat` e riporti su un unico grafico in maniera leggibile i valori di S e in funzione di α , salvandolo sul file `NOME_COGNOME.png`. Il grafico deve essere completo di titolo e di opportune etichette per i dati e gli assi.