

Laboratorio di Calcolo per Fisici,
Esame del 22/01/2025
A.A. 2024/2025

Nome _____ Cognome _____
Matricola _____ ☐ Ritirato/a

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

1. Per svolgere il compito si hanno a disposizione 3 ore.
2. Si possono usare libri di testo, prontuari e gli appunti ma non è ammesso parlare con nessuno né utilizzare cellulari, tablet o laptop, pena l'annullamento del compito.
3. Il programma va scritto e salvato esclusivamente sul computer del laboratorio, a cui si deve accedere utilizzando come username **studente** e come password **informatica**
4. **Tutti i file vanno salvati in una cartella chiamata `ELCGEN_NOME_COGNOME` nella home directory**, dove `NOME` e `COGNOME` indicano rispettivamente il tuo nome e cognome. Ad esempio lo studente *Marco Rossi* deve creare una cartella chiamata `ELCGEN_MARCO_ROSSI` contenente tutti i file specificati nel testo. **Tutto ciò che non si trova all'interno della cartella suddetta non verrà valutato.** In tutti i programmi e script inserisci all'inizio un commento con il tuo nome, cognome e numero di matricola.
5. **Dovete consegnare il presente testo 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.
6. **Per consegnare il compito** dovreste eseguire, all'interno della cartella creata in precedenza (come spiegato al punto 4), il seguente comando da terminale: `cp * /media/sf_esame/`

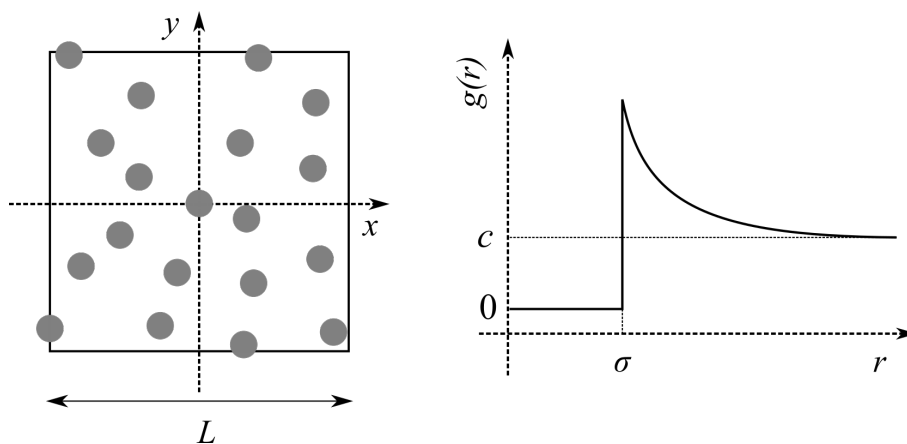


Figura 1: Un sistema composto da dischetti in un quadrato di lato L (sinistra), e una $g(r)$ di esempio (destra).

Si consideri un sistema costituito da N dischetti di diametro σ . I centri dei dischetti si trovano all'interno di un quadrato di lato L (e area $A = L^2$) centrato sull'origine, come mostrato in figura. Considerando uno specifico dischetto i , definiamo $N_i(r)$ come il numero di dischetti che si trovano compresi tra una distanza r e $r + \Delta r$ da i . Si definisce allora *funzione di distribuzione radiale* $g(r)$ la quantità:

$$g(r) = \frac{N_i(r)}{2\pi r \Delta r \rho}, \quad (1)$$

dove ρ è la densità di dischetti. Si noti che per $r < \sigma$ la $g(r)$ deve essere sempre 0, mentre per $r \gg \sigma$ la $g(r)$ tende a una costante c che, per i parametri di questa prova, vale $c \approx 0.94$. Un tipico andamento della $g(r)$ è mostrato in figura.

Lo scopo di questo esame è quello di scrivere un programma C che calcoli la $g(r)$ mediata su tante configurazioni di dischetti generate casualmente. Per semplificare il problema, l'istogramma $N_i(r)$ che

serve per calcolare la $g(r)$ richiesta va calcolato solamente rispetto al dischetto $i = 0$, che andrà sempre posto al centro del quadrato (cioè avrà sempre coordinate $(0,0)$). Per immagazzinare l'istogramma si userà un array chiamato `isto` di $N_{\text{bins}} = 50$ interi, che verrà aggiornato dopo aver generato ogni configurazione.

Più nello specifico, il programma dovrà generare N_{confs} volte una configurazione casuale di N dischetti. Ogni configurazione generata andrà memorizzata in un array 2D chiamato `parts` costituito da N righe e 2 colonne, dove la riga i -esima (con $0 \leq i < N$) conterrà le coordinate x_i e y_i dell' i -esimo dischetto. Per generare una configurazione si porrà il dischetto 0 nel centro del box, e poi tramite un ciclo si posizioneranno casualmente gli altri $N - 1$ dischetti, assicurandosi che i dischetti non siano mai sovrapposti, cioè che, per ogni coppia $i \neq j$, $r_{ij} = \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\| = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} > \sigma$. Per fare ciò si può usare la seguente procedura per inserire il dischetto i -esimo (con $i > 0$):

1. si estraggono due coordinate casuali all'interno del box, cioè tra $-L/2$ e $L/2$;
2. tramite una funzione si controlla che la distanza tra i e ognuno dei dischetti già inseriti sia sempre maggiore di σ , cioè che $r_{ij} > \sigma$ per ogni $j < i$;
3. se la condizione è verificata il dischetto i è inserito: si salvano le sue coordinate in `parts` e si procede a inserire il dischetto $(i + 1)$ -esimo, altrimenti si scartano le due coordinate e si ricomincia dal passo 1.

Generata la configurazione si dovrà aggiornare l'istogramma `isto` delle distanze tra ogni dischetto $i > 0$ e il dischetto 0, che si trova nell'origine degli assi. Per fare ciò, per ogni dischetto $i > 0$ si calcola la distanza r e si incrementa di 1 il bin $\alpha = \lfloor r/\Delta r \rfloor$ di `isto` (per bin α si intende l'elemento di indice α dell'array `isto`), **se e solo se** $\alpha < 50$, dove $\lfloor \dots \rfloor$ rappresenta la parte intera di un numero in virgola mobile (esempio: $\lfloor 4.2 \rfloor = 4$). Il programma ripeterà la generazione della configurazione e l'aggiornamento dell'istogramma N_{confs} volte.

► Prima parte:

Si realizzi un programma in C, chiamato `nome_cognome.c` (tutto minuscolo, senza eventuali spazi, accenti o apostrofi), per calcolare la funzione di distribuzione radiale di un fluido di $N = 100$ dischetti di diametro $\sigma = 1$ in un quadrato di lato $L = 13.0$, generando $N_{\text{confs}} = 10000$ configurazioni di dischetti e considerando $\Delta r = L/200$.

In particolare il programma dovrà:

1. Posizionare gli N dischetti in modo che non ci siano sovrapposizioni, ponendo al centro del quadrato il dischetto di indice 0.
2. Per ogni configurazione generata aggiornare l'istogramma `isto` come spiegato in precedenza.
3. Dopo aver generato e analizzato tutte le configurazioni (cioè aggiornato l'istogramma per ogni configurazione generata), salvare su di un file chiamato `gr.dat` la funzione di distribuzione radiale, che si ottiene a partire dagli elementi dell'array `isto` tramite la seguente relazione:

$$g(r_\alpha) = \text{isto}[\alpha] / (2\pi r_\alpha \Delta r \rho N_{\text{confs}}) \quad (2)$$

dove $\rho = (N - 1)/A$, $r_\alpha = (\alpha + 0.5)\Delta r$ e $0 \leq \alpha < N_{\text{bins}}$. Il file dovrà contenere due colonne, r_α e $g(r_\alpha)$, stampate con quattro cifre decimali dopo la virgola.

4. Definire i valori N , N_{bins} , N_{confs} , L e σ con delle opportune macro.

Nello scrivere il programma si richiede che vengano implementate almeno le seguenti funzioni:

- `sovrapposizione()`, che prende come argomento l'array `parts` e l'indice i del dischetto da controllare; la funzione restituisce 1 o 0 a seconda che il dischetto i -esimo si sovrapponga o meno ad almeno un altro dischetto con indice $0 \leq j < i$.
- `aggiorna_istogramma()`, che prende come argomento gli array `parts` e `isto` e aggiorna l'istogramma calcolando le distanze di tutti dischetti con indice $0 < j < N$.
- `salva_gr()`, che salva su di un file chiamato `gr.dat` la funzione $g(r)$ prendendo come argomento l'array `isto`. Si veda sopra per il formato del file e delle colonne.

► **Seconda parte:** Utilizzando il file `gr.dat` generato eseguendo il programma scritto nella prima parte, creare con `python` un grafico che mostri la $g(r)$ con delle opportune etichette sugli assi. Salvare un'immagine di tale grafico su di un file chiamato `gr.png`.