

# Fisica Computazionale I

## Prima prova in itinere

Teresa Dalle Nogare - 201558  
Ilaria Delbono - 201849

12 aprile 2021

### 1 Esercizio 1

#### *Stati legati e scattering da potenziale unidimensionale*

EX1\_DALLENOGARE\_DELBONO.C

#### 1.1 Introduzione

La prima parte dell'esercizio richiede lo studio degli stati legati presenti in una buca di potenziale data dall'espressione:

$$V(x) = \frac{V_0}{\cosh^4\left(\frac{x}{x_0}\right)} = -\frac{|V_0|}{\cosh^4\left(\frac{x}{x_0}\right)} \quad (1)$$

con  $V_0 < 0$  e  $x_0$  larghezza tipica del potenziale. Inizialmente si utilizza un approccio semiclassico basato sulla regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld:

$$h\left(n + \frac{1}{2}\right) = 2 \int_a^b \sqrt{2m(E_n - V(x))} dx \quad (2)$$

con  $n = 0, 1, \dots$  e con  $a$  e  $b$  corrispondenti ai punti classici in cui l'energia  $E_n$  risulta uguale unicamente al contributo potenziale.

La relazione (2) permette sia di ricavare il numero di stati legati e sia di calcolare i corrispondenti valori di energia. Per trovare i parametri caratteristici e lavorare con le unità ridotte, si osserva che è possibile scrivere:

$$\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right) = \sqrt{2m|V_0|x_0} \int_{a^*}^{b^*} \sqrt{E_n^* + \frac{1}{\cosh(x^*)}} dx^*. \quad (3)$$

Gli estremi di integrazione sono dati da  $\pm \cosh^{-1}\left(E_n^{*-1/4}\right)$ .

Si ottiene dunque:

$$\sqrt{\xi}\pi\left(n + \frac{1}{2}\right) = \int_{a^*}^{b^*} \sqrt{E_n^* + \frac{1}{\cosh(x^*)}} dx^*, \quad (4)$$

con  $\xi$  dato da:

$$\xi = \frac{\hbar^2}{2m|V_0|x_0^2}. \quad (5)$$

Si osserva che la definizione di quest'ultimo parametro adimensionale risulta diversa da quella definita nella consegna dell'esercizio in quanto compare un fattore 2 a denominatore; per questo motivo i valori di  $\xi$  utilizzati sono:  $\xi \in [0.025, 0.005, 0.0025]$ .

Successivamente vengono stimati i valori di energia per gli stati fondamentali, ottenuti per  $n = 0$  e per i diversi valori di  $\xi$  appena presentati, mediante il metodo variazionale. Esso fornisce un limite superiore a  $E_0$  e afferma che:

$$E_0 = \langle \psi | H | \psi \rangle, \quad (6)$$

con  $H$  hamiltoniana del sistema e  $\psi(x)$  funzione d'onda normalizzata dello stato fondamentale. Tale relazione dunque può essere utilizzata per stimare  $E_0$  ricavando il valore del parametro  $\alpha$  che minimizza il valore di aspettazione (6) calcolato sulla famiglia di funzioni d'onda  $\psi_\alpha(x)$  tali che:

$$\psi_\alpha(x) \propto e^{-\left(\frac{x}{\alpha}\right)^2}. \quad (7)$$

Come prima cosa, si ricava il modulo  $A$  di  $\psi_\alpha(x)$  imponendo la solita condizione di normalizzazione e trovando:

$$A = \left(\frac{2}{\pi\alpha^2}\right)^{\frac{1}{4}} \implies \psi_\alpha(x) = \left(\frac{2}{\pi\alpha^2}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\left(\frac{x}{\alpha}\right)^2}. \quad (8)$$

Anche in questo caso, si lavora con unità ridotte osservando che, dopo alcun passaggi algebrici, è possibile scrivere:

$$E_\alpha = \left(\frac{2}{\pi\alpha^2}\right)^{\frac{1}{2}} \int e^{-\left(\frac{x}{\alpha}\right)^2} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{|V_0|}{\cosh^4\left(\frac{x}{x_0}\right)} \right] e^{-\left(\frac{x}{\alpha}\right)^2} dx = \quad (9)$$

$$= -\left(\frac{2}{\pi\alpha^2}\right)^{\frac{1}{2}} |V_0| \int e^{-2\left(\frac{x}{\alpha^*}\right)^2} \left[ \xi x_0^2 \left( -\frac{2}{\alpha^{*2}} + \frac{4x^{*2}}{\alpha^{*4}} \right) + \frac{1}{\cosh^4(x^*)} \right] dx^*, \quad (10)$$

dove gli integrali scritti coprono tutto l'asse  $x$ . Si ottiene quindi:

$$E_\alpha^* = -\left(\frac{2}{\pi\alpha^2}\right)^{\frac{1}{2}} \int e^{-2\left(\frac{x}{\alpha^*}\right)^2} \left[ \xi x_0^2 \left( -\frac{2}{\alpha^{*2}} + \frac{4x^{*2}}{\alpha^{*4}} \right) + \frac{1}{\cosh^4(x^*)} \right] dx^*, \quad (11)$$

dove  $\alpha^*$  indica il valore in unità ridotte del parametro variazionale scelto.

Infine viene studiato il caso dello scattering unidimensionale, utilizzando un potenziale analogo a quello descritto da (1), ma con  $V_0 > 0$ . A partire dall'equazione di Schrödinger in unità ridotte:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{1}{\xi} V^*(x^*) \psi(x^*) = \frac{1}{\xi} E^* \psi(x^*), \quad (12)$$

con  $\xi$  data dalla relazione (5). Ponendo  $k^* = \sqrt{E^* \xi}$ , si giunge ad un'espressione per i coefficienti di trasmissione  $T$  e riflessione  $R$ ; gli andamenti dei moduli quadri di questi ultimi sono studiati per  $\xi \in [10, 40, 200]$ .

## 1.2 Svolgimento

### 1.2.1 Stima degli stati legati mediante la regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld

Per il calcolo del numero di stati legati e dei corrispondenti valori di energia sono stati ricercati gli zeri della funzione:

$$f_\xi(E_n) = \int_{a^*}^{b^*} \sqrt{E_n^* + \frac{1}{\cosh(x^*)}} dx^* - \sqrt{\xi} \pi \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad (13)$$

che dipende dai diversi valori del parametro  $\xi$  presentati in precedenza e per  $n$  compresi tra 0 e 15. Come prima cosa, è necessario valutare l'integrale mediante la formula di Newton-Cotes. Dunque si è scelto di suddividere l'intervallo di integrazione in 10000 punti equispaziati in cui è stata calcolata la funzione integranda. Si osserva che variando tale parametro e prendendo un valore più piccolo si ottengono risultati diversi per l'integrale (anche di ordini di grandezza); tale comportamento è dovuto all'andamento non troppo regolare della funzione da integrare. Lo svolgimento di tale calcolo è implementato mediante la funzione:

```
double integrate_BS (double (*f)(const double, const double),
                    const double a, const double b, const int n,
                    const double E)
```

Successivamente viene ricercato lo zero della funzione  $f_\xi(E_n)$ , dopo aver stabilito i valori di energia a cui corrisponde un cambio di segno. Si osserva che la ricerca di questi ultimi non dà esito positivo da un certo  $n$  in poi; ciò corrisponde all'assenza di uno stato legato. Dunque, il valore più grande di  $n$  per cui

la funzione (13) si annulla corrisponde allo stato legato con energia maggiore. Da queste considerazioni è possibile trovare il numero di stati legati  $N$  per ogni valore del parametro  $\xi$ ; in particolare per  $\xi = 0.025$  si ha  $N = 4$ , per  $\xi = 0.005$  si ha  $N = 8$  e per  $\xi = 0.0025$  si ha  $N = 12$ .

Applicando il metodo di bisezione più volte è possibile ottenere con un'accuratezza sempre maggiore il valore di energia del corrispondente stato legato. Fermandosi alla terza cifra dopo la virgola, si ottengono i risultati presentati in tabella 1.

	$\xi = 0.025$	$\xi = 0.005$	$\xi = 0.0025$
$n = 0$	-0.785	-0.900	-0.930
$n = 1$	-0.430	-0.715	-0.795
$n = 2$	-0.170	-0.555	-0.670
$n = 3$	-0.020	-0.410	-0.555
$n = 4$		-0.285	-0.450
$n = 5$		-0.180	-0.355
$n = 6$		-0.095	-0.270
$n = 7$		-0.035	-0.195
$n = 8$			-0.130
$n = 9$			-0.080
$n = 10$			-0.040
$n = 11$			-0.010

Tabella 1: Energie degli stati legati calcolate con la regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld per diversi valori di  $n$ .

L'implementazione del metodo di bisezione è contenuta nella funzione:

```
void bisectionMethod (double f_E[dim_E][dim_n], double E[dim_E],
                    int n[dim_n], double csi, double E_bm[dim_n]);
```

che esegue tale procedura per dati valori di  $E_n$ ,  $n$  e  $\xi$  e inserisce il risultato nella relativa cella del vettore che costituisce l'ultimo input richiesto.

### 1.2.2 Stima dell'energia della stato fondamentale con il principio variazionale

Utilizzando la relazione (11) per ciascuno dei valori di  $\xi$  è possibile trovare un limite superiore alle energie dello stato fondamentale e confrontarle con i risultati ricavati precedentemente. Per valutare l'integrale si è scelto di suddividere l'intervallo di integrazione in 50000 punti equispaziati in cui è stata calcolata la funzione integranda; tale numero risulta maggiore rispetto a quello scelto nella procedura di integrazione precedente poiché l'integrazione è svolta su tutto l'asse  $x$ . Avendo utilizzato unità ridotte, si è scelto -5.0 come primo estremo e 5.0 come secondo estremo. Per svolgere tale calcolo è stata usata la funzione:

```
double integrate_VP (double (*f)(const double, const double,
                                const double), const double a, const double b,
                    const int n, const double alpha, const double csi)
```

I risultati ottenuti sono presentati in tabella 2.

	$\xi = 0.025$	$\xi = 0.005$	$\xi = 0.0025$
$E_\alpha^*$	-0.797	-0.904	-0.927
$\alpha^*$	0.523	0.331	0.300

Tabella 2: Stime delle energie degli stati fondamentali calcolate con il metodo variazionale.

Inoltre si osserva che, variando le quantità appena presentate, non si riscontrano particolare modifiche ai valori delle stime, se non delle fluttuazioni relative alla terza cifra decimale.

In tabella viene riportato anche il valore del parametro variazionale ridotto a cui corrisponde la stima. Questo è ottenuto ricercando il minimo della funzione  $E_\alpha^*$  calcolata per valori molto ravvicinati di  $\alpha^*$  (viene scelto un passo di 0.0001) che viene ricavato mediante la funzione:

```
void minimum (int pos[3])
```

Confrontando i risultati riportati nelle tabelle 1 e 2 e le procedure con cui sono stati ricavati, è possibile affermare che l'approccio semiclassico di Bohr-Sommerfeld, a livello computazionale, offre una miglior

stima dell'energia dello stato fondamentale in quanto il metodo di bisezione permette di raggiungere un'accuratezza maggiore rispetto alla procedura di ricerca del minimo di una funzione impiegato nel caso variazionale. Si nota inoltre che i risultati derivanti quest'ultimo dipendono dalla famiglia di funzioni d'onda che viene scelta.

### 1.2.3 Scattering unidimensionale

Considerando il potenziale (1) con  $V_0$  è possibile studiare il comportamento di una particella quantistica che interagisce con esso e proviene da  $x = -\infty$ . La probabilità che la particella attraversi o meno la barriera è data da dai coefficienti di trasmissione  $T$  e riflessione  $R$ ; questi possono essere ricavati conoscendo l'andamento della funzione d'onda a grandi distanze dal potenziale stesso (avendo definito delle unità ridotte, è sufficiente considerare  $x$  circa uguale a 5 volte la distanza tipica del problema, data dalla larghezza  $x_0$  della barriera). Per trovare i valori della funzione d'onda in vari punto dell'asse  $x$  viene utilizzato il metodo di Numerov, implementato nella funzione:

```
void Numerov (double X[N], double complex Phi[N], double E, double csi)
```

L'intervallo spaziale scelto per studiare l'andamento della funzione d'onda è pari a un millesimo della lunghezza tipica del problema.

Da tali risultati è possibile calcolare il coefficiente di trasmissione  $T$ , come mostrato nella funzione:

```
double complex transmissionCoefficient (double const X[N], double  
complex const Phi[N], double k)
```

Il coefficiente di riflessione  $R$  è ricavato di conseguenza.

L'andamento di  $|T|^2$  è riportato in figura 1, mentre i valori esatti dei coefficienti di trasmissione sono riportati nel file "**dataT.txt**".

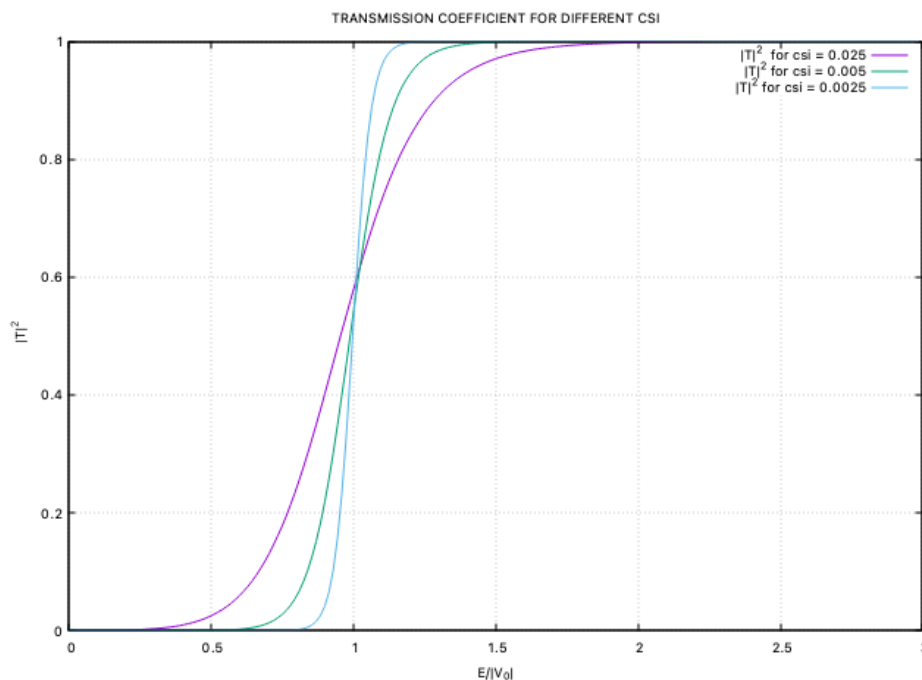


Figura 1: Andamento del modulo quadro del coefficiente di trasmissione  $T$  per diversi valori di  $\xi$  in funzione dell'energia  $E/|V_0| = E^*$ .

## 2 Esercizio 2

### *Moto in campo elettrico di dipolo*

Ex2\_DALLENOGARE\_DELBONO.C

#### 2.1 Introduzione

Si consideri un dipolo puntiforme posto nell'origine di un sistema di riferimento e avente modulo  $p = eR$ ; esso si trova nel piano  $xz$  e forma un angolo  $\theta \in [0^\circ, 45^\circ]$  con l'asse  $z$ . Inoltre, sia dato un fascio uniforme di particelle di massa  $m$  ed energia  $E$  che giunge da  $x = -\infty$ , la cui traiettoria viene modificata dalla presenza del dipolo. L'obiettivo dell'esercizio è studiare la distribuzione di probabilità di trovare particelle su uno schermo posto in  $x = 5R$  per valori di energia ridotta  $E^* \in [0.1, 0.3, 0.5, 1, 2, 5]$ . Dai dati presentati, si osserva che la lunghezza tipica del problema è  $R$ .

Per fare ciò è necessario, in primo luogo, conoscere il potenziale generato dal dipolo puntiforme, che in termini dell'angolo  $\theta$  viene scritto come  $\mathbf{p} = eR(-\sin \theta \hat{\mathbf{x}} + \cos \theta \hat{\mathbf{z}})$ :

$$V = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{4\pi\epsilon_0 r^3} \quad (14)$$

In unità ridotte si ottiene:

$$V^*(x^*, z^*, \theta) = \frac{1}{4\pi} \left( \frac{z^* \cos \theta - x^* \sin \theta}{x^{*2} + z^{*2}^{\frac{3}{2}}} \right), \quad (15)$$

mentre le due componenti del campo elettrico risultano:

$$E_x^*(x^*, z^*) = -\frac{1}{4\pi} \left[ 3x^* \frac{x^* \sin \theta - z^* \cos \theta}{(x^{*2} + z^{*2})^{\frac{5}{2}}} - \frac{\sin \theta}{(x^{*2} + z^{*2})^{\frac{3}{2}}} \right], \quad (16)$$

$$E_z^*(x^*, z^*) = -\frac{1}{4\pi} \left[ 3z^* \frac{x^* \sin \theta - z^* \cos \theta}{(x^{*2} + z^{*2})^{\frac{5}{2}}} - \frac{\cos \theta}{(x^{*2} + z^{*2})^{\frac{3}{2}}} \right]. \quad (17)$$

Tali espressioni vengono utilizzate per studiare l'evoluzione del fascio una volta note le condizioni iniziali. L'energia delle particelle fissa la velocità iniziale lungo  $x$ , mentre quella lungo  $z$  è considerata nulla; le particelle vengono lanciate da  $x = -5.0$ . La coordinata  $z^*$  iniziale, di seguito indicata con  $b$ , viene variata da  $-5.0$  a  $5.0$  con un passo di  $0.001$  in modo da disporre di un fascio composto da un elevato numero di particelle, ciascuna con un parametro d'impatto differente, e di avere una distribuzione statistica dei valori finali di  $z$  sullo schermo posto in  $x^* = 5.0$ .

Per determinare l'evoluzione di una particella per un dato parametro d'impatto  $b$  e una data energia  $E^*$  viene realizzata la funzione:

```
double evolVerlet (double E, double b, double theta)
```

che utilizza l'algoritmo di Verlet con un passo d'integrazione temporale di  $0.01$ . L'evoluzione del sistema viene interrotta quando la particella raggiunge lo schermo e la funzione citata restituisce il valore della coordinata  $z^*$  corrispondente.

#### 2.2 Svolgimento

##### 2.2.1 Distribuzione di probabilità

Per ottenere la distribuzione di probabilità viene realizzato un istogramma, con *bin* di larghezza  $dz = 0.02$ , che tiene conto del numero di particelle che impattano lo schermo in posizione  $(z^*, z^* + dz)$ . Per determinare in quale *bin* inserire la particella di cui si sta studiando l'evoluzione viene realizzata la funzione:

```
void counter (double z_pos, double ist [dimZ])
```

Infine, tale distribuzione viene normalizzata sul numero di particelle che compongono il fascio, pari al numero di parametri d'impatto testati, per ottenere una distribuzione di probabilità. Si osserva però che quest'ultima non risulta normalizzata a 1 in quanto non tutte le particelle raggiungono lo schermo.

In figura 2 viene mostrato l'andamento di tale distribuzione per un dato valore di energia e per entrambi i valori di  $\theta$ .

Si nota la presenza di un gradino in corrispondenza di  $z^*$  pari ai valori estremali scelti per il parametro d'impatto; infatti ponendosi a distanze grandi rispetto alla lunghezza tipica con energie prossime a 1 (in unità ridotte) si osserva che la particella non risente del potenziale generato dal dipolo e impatta sullo schermo senza che la sua traiettoria subisca sostanziali modifiche.

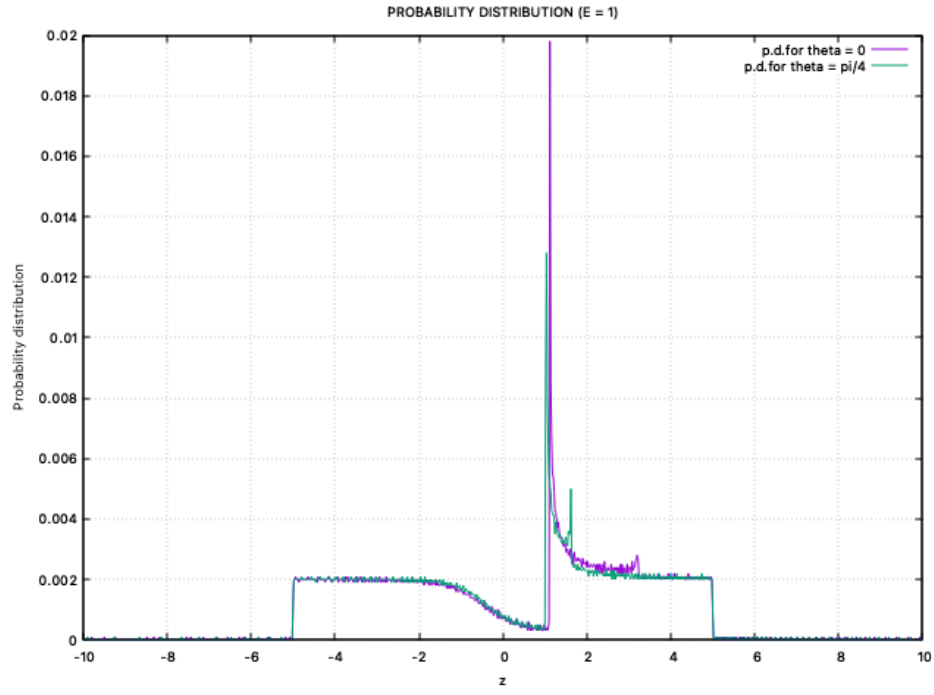


Figura 2: Distribuzione di probabilità per  $E^* = 1$  e per entrambi i valori dell'angolo di orientazione del dipolo.

### 3 Esercizio 3

#### *Fluido di particelle repulsive*

Ex3\_DALLENOGARE\_DELBONO.C

#### 3.1 Introduzione

In questo esercizio si vuole studiare il comportamento di un fluido costituito da particelle che interagiscono tra loro tramite la parte repulsiva del potenziale di Lennard-Jones. Considerando  $\epsilon$  come unità di energia e  $\sigma$  come unità di lunghezza, l'espressione ridotta del potenziale è:

$$v(r) = 4r^{-12} \quad (18)$$

Si richiede di calcolare il valor medio dell'energia potenziale  $\langle U \rangle$  e la funzione di distribuzione radiale  $g(r)$  per diversi valori ridotti di densità  $\rho$  e di temperatura  $T$ . I valori di densità e temperatura utilizzati sono:  $\rho \in [0.5, 0.6, 0.7]$  e  $T \in [0.5, 0.8]$ .

Si considerano particelle di massa  $m = 1$  e, a partire da queste grandezze ridotte, è possibile ricavare l'espressione del tempo tipico che in seguito si indica con  $\tau$ .

Successivamente si vuole determinare il valore della pressione  $P_{ex}$  esercitata dal fluido, sempre al variare dei parametri  $\rho$  e  $T$ . Il calcolo si effettua dapprima considerando l'espressione di pressione che deriva dal teorema del viriale, poi implementando un integrale della funzione  $g(r)$ . L'obiettivo è quello di mostrare l'equivalenza dei due metodi, ottenendo risultati compatibili entro lo 0.01%.

#### 3.2 Svolgimento

##### 3.2.1 Condizioni iniziali

Per creare un modello del fluido si considerano  $N = 108$  particelle che inizialmente sono disposte in un reticolo, generato dalla funzione:

```
void generate_FCC( unsigned int numPart, double L, double X[N][3] );
```

e con velocità iniziale nulla.

Nota la densità del fluido  $\rho$  è possibile determinare la lunghezza della scatola  $L$  entro cui sono confinate le particelle tramite la relazione  $L = (N/\rho)^{1/3}$ . Al fine di limitare la distanza di interazione tra due particelle è stato fissato un *cutoff* pari a  $L/2$ ; in questo modo ciascuna particella può interagire solamente con altre particelle che distano da essa non più di tale valore.

##### 3.2.2 Calcolo delle forze ed evoluzione del sistema

Nota la forma (18) del potenziale repulsivo  $v(r)$ , le forze d'interazione tra due generiche particelle si determinano sfruttando la relazione  $\mathbf{F} = \mathbf{a} = -\nabla v$ . Anche in questo caso si considerano significative le interazioni tra particelle la cui distanza è minore del *cutoff*. Quindi è stata valutata l'evoluzione del sistema mediante la funzione:

```
void velocity_Verlet( double X[N][3] ,  
                     double V[N][3] , double F[N][3] , double L, double cutoff );
```

la quale implementa un passo dell'algoritmo di Verlet corrispondente ad un intervallo di integrazione di  $dt = 0.005$ .

##### 3.2.3 Fase di equilibrizzazione

L'evoluzione del fluido che viene implementa mediante l'algoritmo di Verlet comporta una variazione della velocità delle particelle, con una conseguente variazione della temperatura del sistema. Tramite la fase di equilibrizzazione, che corrisponde fisicamente ad avere il sistema a contatto con un termostato a temperatura fissata  $T$  (temperatura obiettivo), è possibile mantenere il valore di energia cinetica prossimo a quello desiderato,  $K \rightarrow \frac{3}{2}NT$ . Definendo la temperatura istantanea del sistema a partire dalla sua energia cinetica come  $T_{ist} = \frac{2K}{3N}$ , tramite la funzione

```
void rescale_velocities( double V[N][3] , double T );
```

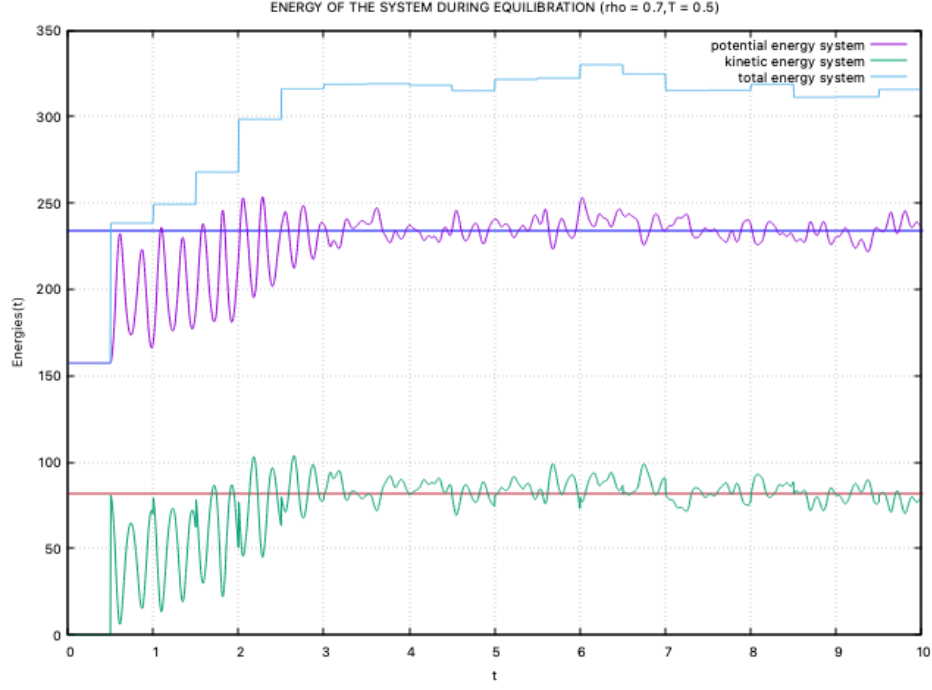


Figura 3: Energie del sistema corrispondenti a  $\rho = 0.7$  e  $T = 0.5$ ; in blu è riportato  $\langle U \rangle = 233.9$  mentre in rosso  $\langle K \rangle = 81.64$  ottenuti dalla simulazione.

è possibile riscaldare le velocità delle particelle di un fattore  $\alpha = \sqrt{T/T_{ist.}}$ .

In figura 3 sono riportate le energie del sistema durante questa prima fase. È stato scelto il parametro  $NUM\_EV = 2000$  che corrisponde a fissare un tempo di equilibrizzazione pari a  $10\tau$ . Come si può osservare dalla figura (3) tale scelta è giustificabile dal fatto che il sistema inizia ad oscillare attorno al suo valor medio di energia potenziale già a partire da  $4\tau$ .

### 3.2.4 Fase di produzione

In questa fase si procede con il campionamento dei dati raccolti, al fine di ottenere il valore medio dell'energia potenziale del sistema  $\langle U \rangle$ . Per determinare il valore medio di energia potenziale e di energia cinetica sono stati utilizzati un numero di campionamenti pari a  $NUM\_SAMP = 100$ . Al fine di avere un dei campioni rappresentativi nella determinazione di tali valori, il sistema è stato fatto evolvere per un intervallo  $Dt = \tau$ , ottenendo in questo modo  $NUM\_SAMP$  configurazioni tra loro indipendenti. I risultati ottenuti per il valore medio  $\langle U \rangle$  sono riportati in tabella 3. Inoltre sapendo che  $K \rightarrow \frac{3}{2}NT$  si può stimare che il valor medio di energia cinetica atteso per  $T = 0.5$  è  $K = 81$  mentre per  $T = 0.8$  è  $K \approx 130$ . Tali stime sono state verificate per entrambi i valori di temperatura e in figura (3) è stato riportato il valore ottenuto per valori di  $\rho = 0.7$  e  $T = 0.5$ .

### 3.2.5 Funzione di distribuzione radiale $g(r)$

Per determinare come varia la densità in funzione della distanza radiale da una particella scelta come riferimento, è stata calcolata la funzione di distribuzione radiale  $g(r)$  tramite

```
void gFunction(double X[N][3], double g[NUM_SLOT], double L, double cutoff);
```

Il vettore  $g[NUM\_SLOT]$  rappresenta la funzione di distribuzione radiale di cui è stata fissata una lunghezza pari a  $NUM\_SLOT = 1000$ . La lunghezza degli intervallini su cui si conta il numero di particelle è pari a  $dr = cutoff/NUM\_SLOT$ . Il conteggio del numero di particelle corrispondenti a ciascuno slot del vettore  $g$  è stato effettuato considerando una calotta sferica di raggio  $r$  variabile e spessore  $dr$  centrata in ciascuna particella. Prendendo in considerazione solamente quelle particelle che distano meno del  $cutoff$  dal centro della sfera, si è estesa questa procedura a tutte le  $NUM\_SAMP$  configurazioni indipendenti utilizzate in precedenza. Infine è stata applicata una normalizzazione ottenendo l'espressione finale

$$g[s] = g[s] / (4 * M\_PI * N * NUM\_SAMP * rho[POS\_L] * r[s] * r[s]);$$



In figura (4) è riportato l'andamento della funzione  $g(r)$  per uno specifico valore di densità e per i valori di temperatura assegnati.

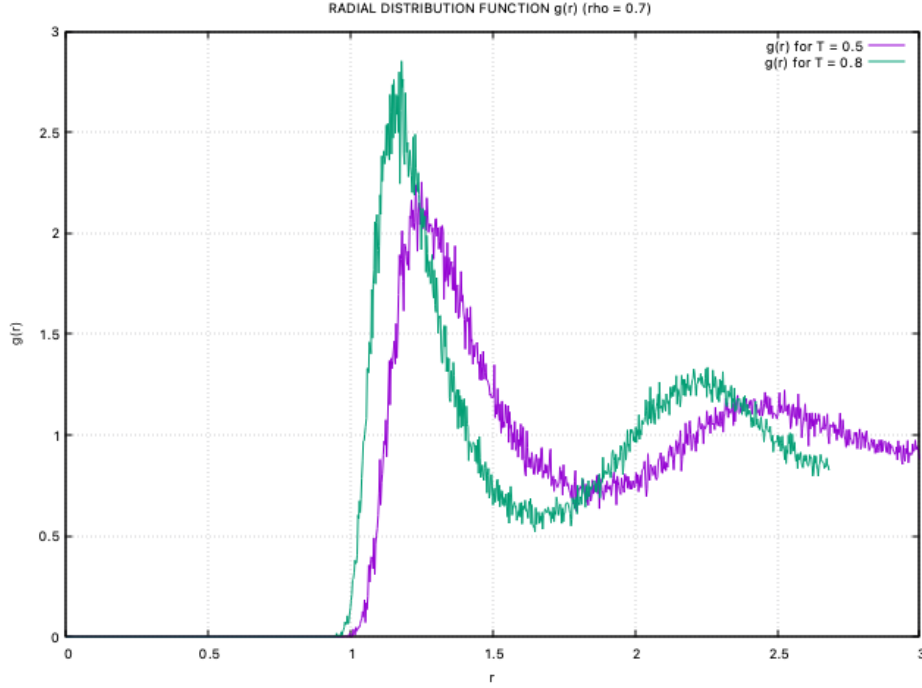


Figura 4: Funzione di distribuzione radiale corrispondente a  $\rho = 0.7$  per i due diversi valori di  $T$ .

### 3.2.6 Pressione $P_{ex}$

Infine è stata valutata la pressione esercitata da un fluido che interagisce con un potenziale repulsivo di tipo Lennard-Jones  $v(r)$ .

Dal teorema del viriale è possibile ricavare che la pressione esercitata da un fluido che si trova in un volume  $V$  è pari a:

$$P_{ex}^v = \frac{1}{6V} \left\langle \sum_i \sum_{j \neq i} \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{f}_{ij} \right\rangle, \quad (19)$$

dove con  $\mathbf{r}_{ij}$  si intende la distanza tra due generiche particelle mentre con  $\mathbf{f}_{ij}$  la forza di interazione tra queste. Il calcolo è stato effettuato nella funzione:

```
double pressureViral(double X[N][3], double L);
```

In particolare l'implementazione del valor medio è stata realizzata sommando il valore di pressione per ciascuna delle 100 configurazioni indipendenti ed è stato quindi normalizzato  $NUM\_SAMP$  e sul volume  $L^3$  occupato dal gas.

Successivamente il valore di  $P_{ex}$  è stato calcolato valutando numericamente l'equazione:

$$P_{ex}^i = -\frac{2\pi\rho^2}{3} \int_0^\infty r^3 \frac{dv}{dr} g(r) dr, \quad (20)$$

implementando la funzione:

```
double pressureIntegral(double g[NUM_SLOT], double a, double cutoff, double rho);
```

Si è scelta come procedura di integrazione il metodo dei trapezi, utilizzando come passo di integrazione  $1/100$  rispetto alla lunghezza dello slot della funzione  $g$ , in modo da avere una precisione maggiore sul valore dell'integrale. Inoltre si è ritenuto opportuno integrare fino a *cutoff* in quanto, anche nella valutazione della funzione  $g$ , è stata valutata conteggiata la presenza di particelle fino a tale distanza.

### 3.2.7 Risultati

I risultati riguardanti i valori della funzione di distribuzione  $g(r)$  sono riportati nel file "**dataG.txt**". Modificando i parametri  $POS\_L$  e  $POS\_T$  che indicano rispettivamente il valore di  $\rho$  e di  $T$  è possibile

ottenere tutte le funzioni richieste.

Inoltre nella seguente tabella sono stati riportati i risultati ottenuti, relativi al calcolo del valor medio dell'energia e ai valori di pressione calcolati con i due metodi illustrati in precedenza. Per valutare le incertezze relative ai valori  $\langle U \rangle$  sono stati modificati alcuni parametri quali, ad esempio, il numero di configurazioni  $NUM\_SLOT$  prese in esame e si sono confrontati i risultati.

Per quanto riguarda le pressioni, l'accuratezza è stata stimata facendo la differenza tra i due valori ottenuti.

$\rho$	$T$	$\langle U \rangle$	$P_{ex}^v$	$P_{ex}^i$
0.5	0.5	$112.031 \pm 0.001$	2.075	2.080
0.5	0.8	$137.8 \pm 0.4$	2.54	2.55
0.6	0.5	$177.84 \pm 0.08$	3.954	3.963
0.6	0.8	$213.4 \pm 0.4$	4.75	4.76
0.7	0.5	$233.9 \pm 0.2$	6.071	6.076
0.7	0.8	$304.0 \pm 0.2$	7.89	7.90

Tabella 3: Tabella con i risultati ottenuti corrispondenti al valor medio dell'energia potenziale del sistema e ai valori di pressione ottenuti tramite la procedura del teorema del viriale ( $P_{ex}^v$ ) e tramite l'integrale ( $P_{ex}^i$ ).

## 4 Esercizio 4

### *Un viaggio su Marte*

Ex4\_DALLENOGARE\_DELBONO.C

#### 4.1 Introduzione

L'obiettivo del problema è stabilire quale sia il periodo più conveniente per lanciare la prossima missione su Marte, ricercando delle condizioni iniziali di lancio opportune tali per cui la navicella spaziale possa raggiungere Marte e realizzando un modello quanto più realistico possibile. In particolare, si è stimato il giorno migliore per avviare il viaggio e la velocità iniziale, calcolata rispetto alla Terra, della navicella. Sono state prese in considerazione alcune missioni spaziali passate, per comprendere quali fossero le orbite migliori e le finestre di lancio disponibili. In particolare si è ritenuto opportuno far realizzare allo *spacecraft* un tragitto in grado di minimizzare l'energia necessaria per raggiungere il corpo celeste *target*, percorrendo così orbita di trasferimento di Hohmann. Quest'ultima non è l'unica orbita permessa, infatti è possibile realizzare altre orbite che permettano di arrivare sul pianeta Marte in un tempo inferiore, ma con un maggiore dispendio energetico.

#### 4.2 Svolgimento

##### 4.2.1 Approssimazione e condizioni iniziali

Nel modello utilizzato per la risoluzione del problema sono state introdotte le seguenti approssimazioni:

- i pianeti del sistema solare orbitano su un unico piano;
- l'istante in cui il razzo spegne i motori è considerato il punto iniziale dell'orbita.

Per poter descrivere opportunamente la situazione è stato scelto un sistema di riferimento con origine nel SSB (*Solar System Barycenter*) e con asse principale  $x$  che punta in direzione del punto vernale. Quindi sono state estratte le effemeridi relative al Sole, alla Terra e a Marte, facendo riferimento al sito [Horizons - NASA](#). Si è scelto di campionare la posizione dei corpi celesti e la velocità della Terra giornalmente, per un intervallo di tempo compreso tra aprile 2021 e maggio 2031. La posizione esatta dei corpi celesti è necessaria per determinare correttamente le forze agenti sulla navicella. In questo modello è stata inserita unicamente la forza di attrazione gravitazionale, trascurando sia le forze d'attrito dovute all'atmosfera dei pianeti sia un'eventuale accelerazione dovuta alla radiazione solare.

Per la determinazione delle condizioni iniziali da assegnare al razzo per inserirlo nell'orbita di trasferimento di Hohmann è stata fatta un'analisi delle missioni spaziali passate, dalle quali viene scelta una durata media della missione di 272 giorni. Inoltre è stata fissata l'altezza della navicella rispetto al suolo terrestre per stabilire la posizione iniziale da cui cominciare a valutare i contributi delle forze gravitazionali.

Inoltre si è osservato che il momento ottimale per il lancio di uno *spacecraft* si ha quando l'angolo Marte-Sole-Terra risulta di circa  $45^\circ$ , con Marte più avanti rispetto alla Terra. Sapendo che tale condizione si verifica all'incirca ogni 26 mesi e nota la data di lancio dell'ultima missione *Mars2020*, si è ristretto l'intervallo su cui effettuare la ricerca del giorno di lancio ottimale ai mesi di agosto e settembre 2022.

Un secondo dato da ricercare, oltre al giorno di lancio, è il modulo della velocità iniziale della navicella. Essa viene considerata tangente all'orbita di trasferimento di Hohmann che s'intende realizzare, mentre l'intervallo di valori tra cui ricercare il modulo viene dedotto dai dati sulle velocità presenti nella tabella alla pagina [Wikipedia](#) relativa alla manovra che s'intende effettuare. I moduli della velocità campionate sono dunque compresi tra 4.5 e 5.5  $km/s$ .

##### 4.2.2 Calcolo delle forze ed evoluzione del sistema

Com'è noto dalla legge di Gravitazione Universale, la forza di attrazione che un corpo di massa  $m_1$  esercita su un altro corpo di massa  $m_2$ , posto ad una distanza  $\mathbf{r}$  dal primo, è:

$$\mathbf{F} = \frac{Gm_1m_2}{r^2} \hat{\mathbf{r}} \quad (21)$$

In particolare, sullo *spacecraft* sono state considerate rilevanti le interazioni dovute al Sole, alla Terra e a Marte; il primo, essendo molto più massivo rispetto ai pianeti, ha l'effetto preponderante nel determinare l'orbita della navicella. Note le forze agenti e fissate le opportune condizioni di lancio, si è determinata l'orbita realizzata dal velivolo integrando numericamente l'equazione del moto di Newton mediante l'implementazione dell'algoritmo di Verlet nella funzione:

```
void evolutionVerlet();
```

In particolare è stato scelto un passo di integrazione di  $dt = 1 \text{ s}$  e un intervallo di evoluzione del sistema pari a 1 giorno.

#### 4.2.3 Traiettorie ottenute

Al fine di ottenere i parametri ottimali viene studiata la traiettoria della navicella per tutte le date di partenza ipotizzate, per i valori di velocità presentati nella sezione precedente e per la durata media indicata. Dunque per ciascuna coppia di dati relativi al giorno di partenza e al modulo della velocità iniziale viene calcolata la distanza tra Marte e la navicella dopo 272 giorni di viaggio. Tale risultato viene inserito in una tabella e successivamente viene ricercato il valore minimo mediante la funzione:

```
void minimum (int pos[2]);
```

L'output di tale funzione permette di individuare il giorno e il modulo della velocità ottimali per giungere su Marte.

Una volta noti questi parametri è possibile calcolare altre grandezze che possono poi essere confrontate con i dati delle recenti missioni sul pianeta Marte. Questi sono riportati in tabella 4.

Giorno di partenza	31 agosto 2022
Minima distanza navicella-Marte raggiunta	50 760 km
Distanza percorsa dalla navicella	603 393 542 km
Velocità di partenza relativa navicella-Terra	4.8 km/s
Velocità finale della navicella	20.05km/s
Velocità finale di Marte	22.98 km/s
Velocità di arrivo relativa Marte-navicella	1.93 km/s

Tabella 4: Tabella riassuntiva dei risultati ottenuti.

Inoltre in figura 5 viene mostrata la traiettoria realizzata dalla navicella e si osserva che essa è approssimativamente tangente all'orbita di Marte nel punto di arrivo, come atteso dalle ipotesi. Inoltre la velocità relativa tra lo *spacecraft* e il pianeta risulta tale da permettere l'atterraggio.

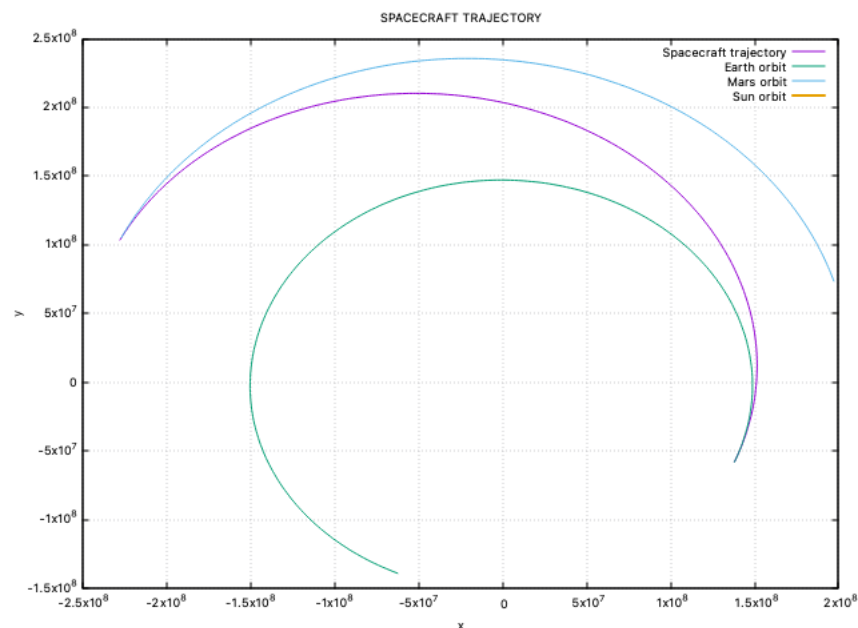


Figura 5: Traiettorie realizzate dalla navicella e orbite di Terra e Marte durante il periodo di volo.