

# Fisica Computazionale I

## Seconda prova in itinere

Teresa Dalle Nogare - 201558

Ilaria Delbono - 201849

24 maggio 2021

### 1 Esercizio 1

EX1\_DALLENOGARE\_DELBONO.C

#### 1.1 Introduzione

L'interazione tra un atomo di deuterio  $^2\text{H}$  e un atomo di Argon  $^{40}\text{Ar}$  è descritta da un potenziale radiale di tipo Lennard-Jones avente la seguente espressione

$$v(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} + \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

e definito dai parametri

$$\frac{\varepsilon}{k_B} = 54.4 \text{ K} \quad \text{e} \quad \sigma = 3.075 \text{ \AA}. \quad (2)$$

Di conseguenza l'equazione di Schrödinger per la funzione complessiva  $\psi(\mathbf{r}) = \psi(r, \theta, \phi) = R_l(r) Y_{ml}(\theta, \phi)$  diviene un'equazione unidimensionale per la funzione  $u(r) = r R_l(r)$  (dipendente dal numero quantico  $l$ ) nella forma

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[ v(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] u(r) = E u(r), \quad (3)$$

dove con  $\mu$  si denota la massa ridotta del sistema.

Introducendo un parametro adimensionale  $\xi$  e utilizzando la sostituzione  $\tilde{r} = r/\sigma$  si ottiene

$$\xi \frac{d^2 u}{d\tilde{r}^2} = \left[ 4(\tilde{r}^{-12} - \tilde{r}^{-6}) + \xi \frac{l(l+1)}{\tilde{r}^2} - \frac{E}{\varepsilon} \right] u(\tilde{r}) \quad \text{con} \quad \xi = \frac{\hbar^2}{2\mu\varepsilon\sigma^2} \quad (4)$$

Utilizzando le masse di  $^2\text{H}$  e  $^{40}\text{Ar}$  e considerando i parametri (2) si ottiene  $\xi = 0.0246$ .

L'equazione (3) può essere integrata mediante il metodo di Numerov, come presentato nel paragrafo successivo. Una volta ricavato l'andamento di  $u(r)$  per diversi valori di  $l$  viene calcolata la sezione d'urto totale  $\Sigma_{\text{tot}}$  in funzione dell'energia  $E$  utilizzando la relazione

$$\Sigma_{\text{tot}}(E) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad \text{con} \quad k = \sqrt{\frac{E}{\varepsilon \xi}}. \quad (5)$$

I valori di  $\delta_l$  sono ricavabili dall'espressione

$$\tan \delta_l = \frac{j_l(k\tilde{r}_2) - K j_l(k\tilde{r}_1)}{n_l(k\tilde{r}_2) - K n_l(k\tilde{r}_1)}, \quad (6)$$

dove  $\tilde{r}_1$  e  $\tilde{r}_2$  sono due punti della regione in cui  $v(\tilde{r}) \simeq 0$ ,  $K$  è dato da

$$K = \frac{\psi(\tilde{r}_2)}{\psi(\tilde{r}_1)} = \frac{u(\tilde{r}_1)}{\tilde{r}_1} \frac{\tilde{r}_2}{u(\tilde{r}_2)} \quad (7)$$

e  $j_l$  e  $n_l$  rappresentano le funzioni sferiche di Bessel.

## 1.2 Svolgimento

Al fine di calcolare l'andamento di  $u(\tilde{r})$  e risolvere l'equazione (3) viene utilizzato il metodo di Numerov che permette di ricavare i valori di  $u(\tilde{r})$  in un intervallo compreso tra  $\tilde{r}_{\min}$  e  $\tilde{r}_{\max}$ . Per implementare l'algoritmo è necessario stimare l'andamento della funzione d'onda per  $\tilde{r} \rightarrow 0$ . Per tale limite,  $u(\tilde{r})$  è del tipo

$$u(\tilde{r}) \simeq \exp \left[ -\sqrt{\frac{4}{25\alpha}} \tilde{r}^{-5} \right]. \quad (8)$$

L'espressione (8) rappresenta il comportamento asintotico di  $u(\tilde{r})$  nell'origine e permette di stimare il suo valore anche in  $\tilde{r}_{\min} = 0.5$ . Viene fissato quindi  $\mathbf{r\_min} = 0.5$  come estremo iniziale per l'integrazione con il metodo di Numerov e si verifica che variazioni di tale quantità (scegliendo  $\mathbf{r\_min} = 0.4$  e  $\mathbf{r\_min} = 0.6$ ) non portano a una modifica del risultato finale. Viene scelto  $\mathbf{r\_max} = 8.0$  in modo tale da raggiungere con certezza la regione in cui  $v(\tilde{r}) \simeq 0$  e poter applicare la relazione (6). Inoltre, viene calcolato il valore di  $u(\tilde{r})$  per  $N = 20000$  valori di  $\mathbf{r}[\mathbf{ii}]$  equispaziati di

$$\mathbf{h} = \frac{\mathbf{r\_max} - \mathbf{r\_min}}{N-1.0}$$

in modo tale che l'algoritmo fornisca un corretto andamento della funzione. Quest'ultimo è implementato in

```
void Numerov (double r[N], double complex u[N], double E, int l)
```

che fa uso di una funzione

```
double F (double r, double E, int l)
```

la quale permette di calcolare la quantità

$$F(r) = \frac{1}{\xi} \left( v(r) - \frac{E}{\varepsilon} \right). \quad (9)$$

Mediante le relazioni (5) e (6) è possibile calcolare la sezione d'urto totale  $\Sigma_{\text{tot}}$  il cui andamento, per  $E \in [0.5; 5]$  meV, è riportato in figura 1.

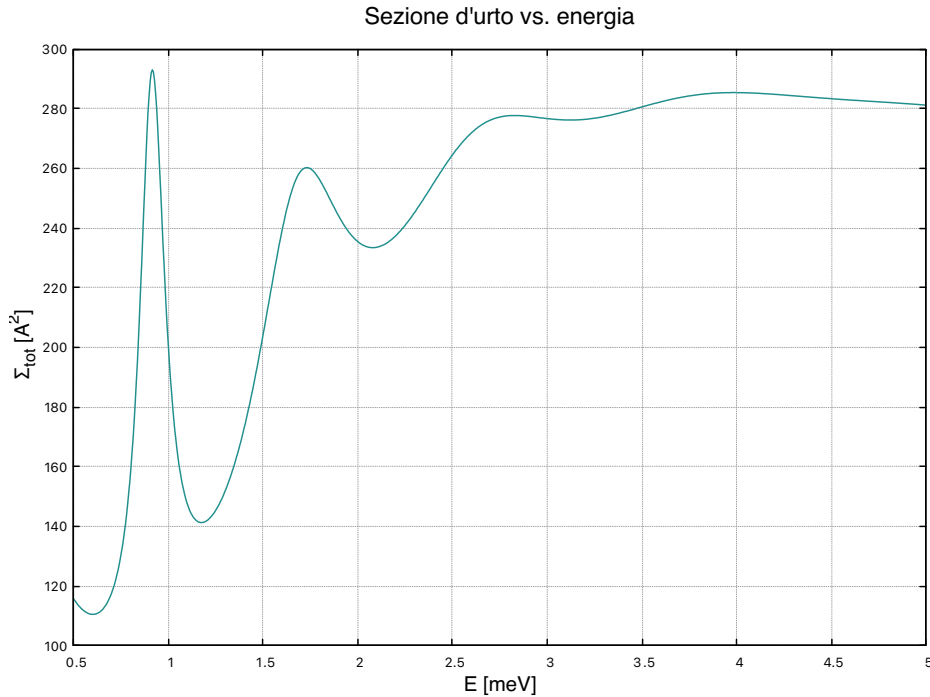


Figura 1: Andamento della sezione d'urto  $\Sigma_{\text{tot}}$  in funzione dell'energia  $E$ .

Si osserva che per ottenere un andamento preciso di  $\Sigma_{\text{tot}}(E)$ , soprattutto in prossimità dei picchi, viene calcolato il valore di  $u(\tilde{r})$  per  $M = 800$  valori di energia.

## 2 Esercizio 2

EX2-1\_NMRV\_DALLENOGARE\_DELBONO.C  
EX2-1\_DIAG\_DALLENOGARE\_DELBONO.C  
EX2-2\_DALLENOGARE\_DELBONO.C  
EX2-3\_DALLENOGARE\_DELBONO.C

### 2.1 Introduzione

Nella prima parte di questo esercizio si richiede di studiare lo stato fondamentale di una particella quantistica di massa  $m$  soggetta ad un potenziale unidimensionale del tipo

$$V_{\text{init}}(x) = \begin{cases} -V_0 x^2(x+a), & x \leq 0 \\ \infty, & x > 0 \end{cases} \quad (10)$$

Nella trattazione di questo problema sono state scelte come grandezze fondamentali  $\hbar$ ,  $V_0$  e  $a$ , tramite le quali sono state derivate le espressioni per l'unità di massa  $m_0 = \hbar^2/(V_0 a)$  e per l'unità di tempo  $t_0 = \hbar/V_0$ . Ne consegue che l'espressione del potenziale ridotto  $V_{\text{init}}^*(x^*)$  è data da

$$V_{\text{init}}^*(x^*) = \begin{cases} -x^{*2}(x^*+1), & x^* \leq 0 \\ \infty, & x^* > 0 \end{cases} \quad (11)$$

Introducendo quindi il parametro adimensionale  $\xi$  dato da

$$\xi = \frac{\hbar^2}{2m V_0 a^2} = \frac{1}{2m^*} = 0.015 \quad (12)$$

è possibile scrivere l'equazione di Schrödinger stazionaria in termini di unità ridotte

$$\frac{d^2}{dx^{*2}} \psi(x^*) = -\frac{1}{\xi} (E^* - V_{\text{init}}^*(x^*)) \psi(x^*), \quad (13)$$

Per ottenere l'autofunzione  $\phi_0(x^*)$  dello stato fondamentale e la corrispondente energia  $E_0$  vengono sviluppati due programmi e ne si confrontano i risultati. Il primo impiega il metodo di Numerov, mentre il secondo prevede la diagonalizzazione della matrice associata all'hamiltoniana scritta utilizzando la base dell'operatore posizione. Tali procedure vengono descritte più compiutamente nella sezione 2.2.1.

Nella seconda parte dell'esercizio viene studiata l'evoluzione temporale di una particella di massa  $m$  descritta da  $\psi(x, t)$  e soggetta prima al potenziale ridotto

$$V_1^*(x^*) = \begin{cases} -x^{*2}(x^*+1), & x^* \leq 0 \\ x^{*2}(x^*-1), & x^* > 0 \end{cases} \quad (14)$$

e poi a

$$V_2^*(x^*) = \begin{cases} -x^{*2}(x^*+1), & x^* \leq 0 \\ 2x^{*2}(x^*-1), & x^* > 0 \end{cases} \quad (15)$$

considerando come stato di partenza quello descritto dall'autofunzione  $\phi_0(x^*)$  del caso studiato in precedenza.

Successivamente viene calcolata la quantità

$$p(t) = \int_0^\infty |\psi(x, t)|^2 dx \quad (16)$$

per entrambe le situazioni, ottenendo le funzioni  $p_1(t)$  e  $p_2(t)$  di cui viene stimato il periodo.

### 2.2 Svolgimento

#### 2.2.1 Stato fondamentale

In questa prima parte dell'esercizio sono stati sviluppati due programmi che permettono di confrontare i risultati ottenuti sia per la forma dell'autofunzione  $\phi_0(x)$  sia il valore di energia  $E_0$  corrispondente allo stato fondamentale di una particella soggetta al potenziale  $V_{\text{init}}^*(x^*)$ .

Nel programma `EX2-1_NMRV_DALLENOGAREDELBONO.C` è stato implementato l'algoritmo di Numerov, introducendo due vettori `phi_F[N]` e `phi_B[N]` corrispondenti alle funzioni d'onda che evolvono da sinistra e da destra rispettivamente, di cui è stata fissata una dimensione pari a  $N = 2048$ . Queste sono state fatte evolvere nella finestra spaziale  $[-2.5; 0.0]$  con un passo di

$$dx = \frac{x[N-1] - x[0]}{N-1}$$

La scelta di porre come  $-\infty$  il valore  $x[0] = -2.5$  è legata al fatto che il potenziale cresce proporzionalmente a  $x^3$  e può dunque essere approssimato ad una barriera infinita. Conseguentemente il valore della funzione d'onda si annulla molto velocemente quando incontra il potenziale.

La forma del potenziale (11) dunque suggerisce di porre le seguenti condizioni iniziali:

- Per la funzione forward: `phi_F[0] = 10-7`, `phi_F[1] = 10-4`;
- Per la funzione backwards: `phi_B[0] = 0.0`, `phi_B[1] = 10-4`;

Successivamente è stato fissato il valore del punto di incontro tra le due funzioni a  $x_0 = -0.78$  che corrisponde ad un generico valore dell'ascissa all'interno della buca di potenziale. Quindi è stata implementata l'evoluzione del sistema attraverso le funzioni:

```
void NumerovF( double E)
void NumerovB( double E)
```

per diversi valori di energia. Sfruttando la linearità dell'equazione di Schrödinger, è stata generata una funzione continua introducendo i vettori `phi_L[N]` e `phi_R[N]` in modo che le corrispondenti funzioni d'onda siano tali che:

$$\begin{cases} \phi_L(x) = \phi_F(x), & x \leq x_0 \\ \phi_R(x) = \phi_B(x) \frac{\phi_F(x_0)}{\phi_B(x_0)}, & x > x_0 \end{cases} \quad (17)$$

Infine è stato inizializzato il vettore di energie `E[ $DIM\_E$ ]` la cui dimensione  $DIM\_E = 2048$  è stata scelta in modo da essere abbastanza fitto da poter ottenere un valore il più preciso possibile dell'autovalore  $E_0$ . Poiché lo stato fondamentale corrisponde ad uno stato legato, i valori di energia spaziano da `E[0] = -4.0/27.0` che corrisponde al minimo del potenziale, calcolato analiticamente, a `E[ $DIM\_E$ -1] = 0.0`.

È stata quindi calcolata la funzione  $\Delta(E)$  definita come

$$\Delta(E) = \frac{\phi_L(x_0 + dx) + \phi_R(x_0 - dx) - [2 + dx^2 F(x_0)] \phi(x_0)}{dx} \quad (18)$$

e utilizzando il metodo di bisezione, implementato nella funzione

```
double bisectionMethod (double delta[ $DIM\_E$ ], double E[ $DIM\_E$ ])
```

è stato ricavato il valore di energia corrispondente a  $\Delta(E) = 0$ .

L'autovalore corrispondente al valore di energia dello stato fondamentale ottenuto è  $E_0 = -0.018$ . L'autofunzione corrispondente a tale valore di energia è stata ricavata facendo evolvere nuovamente il sistema seguendo la procedura sopra descritta, per il valore di energia  $E_0$ . La forma dell'autofunzione  $\phi_0(x)$  ottenuta dopo aver effettuato la procedura di normalizzazione è stata riportata in figura 2.

Nel programma `EX2-1_DIAG_DALLENOGAREDELBONO.C` è stata implementata la procedura di diagonalizzazione della matrice hamiltoniana, espressa sulla base dell'operatore posizione. Per farlo è stata utilizzata la funzione

```
int diagonalize_triangular_lapack(double *d, double *e, int n, double *vec)
```

che permette di diagonalizzare matrici tridiagonali.

Mediante questa procedura si è ottenuto come valore di energia corrispondente allo stato fondamentale è  $E_0 = -0.018$ . La forma dell'autofunzione restituita dalla funzione è stata normalizzata, ottenendo così la forma di  $\phi_0(x)$  che è riportata in figura 2.

Si nota che, come atteso, i risultati ottenuti tramite i due metodi sono equivalenti.

## 2.2.2 Evoluzione temporale

La particella quantistica è ora soggetta al potenziale riportato in eq.14; poiché  $\phi_0(x)$  non è più un autostato dell'hamiltoniana, la funzione d'onda evolve nel tempo. Per studiare l'evoluzione temporale

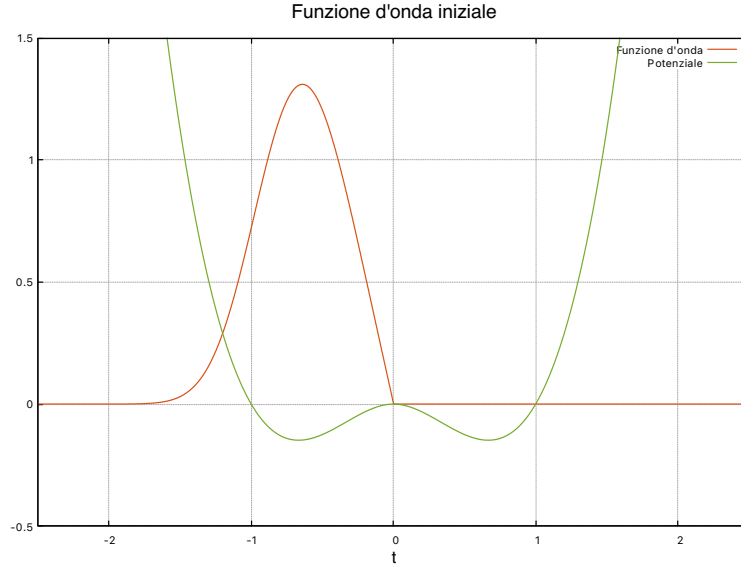


Figura 2: Funzione d'onda iniziale  $\phi_0(x)$  e raffigurazione del potenziale  $V_1^*$  a cui è soggetta.

$\psi_0(x, t)$  si è utilizzato il metodo numerico dello *split-operator*, basato sull'impiego delle trasformate di Fourier.

In primo luogo è stata definita la finestra spaziale  $[-2.5, 2.5]$  corrispondente ad  $M = 2N$  punti nella quale è stata ridefinita la funzione d'onda iniziale come riportato in figura 2. Quindi è stata implementata l'evoluzione temporale scegliendo un intervallo temporale pari a  $\Delta t = 0.1$ . L'algoritmo che effettua l'evoluzione temporale della funzione d'onda si compone nel modo seguente:

1. Sono state definiti i vettori `rho_n[M]` e `xi_k[M]` corrispondenti alle fasi rispettivamente nello spazio diretto e reciproco
2. Si è calcolato `rho_n[ii] * phi[ii]`
3. È stata effettuata la trasformata di Fourier di `rho_n[ii] * phi[ii]` passando allo spazio reciproco
4. Si è calcolato `xi_k[ii] * phi[ii]`
5. Si è effettuata l'antitrasformata di Fourier di `xi_k[ii] * phi[ii]` tornando allo spazio reale
6. È stato valutato l'integrale riportato nell'equazione (16) implementando la funzione

```
double integrate_data ( int pos_c )
```

Si è scelto di effettuare tale procedura per un numero  $\text{DIM}_t = 75000$  di volte al fine apprezzare un andamento di  $p_1(t)$  tale da raccogliere un sufficiente numero di dati su cui poter effettuare una media e stimarne il periodo. Come si nota nella figura 3 la funzione  $p_1(t)$  presenta un andamento oscillante con un periodo definito  $P_{\text{small}}$ . Dalla figura 4 inoltre si nota un'ulteriore modulazione in ampiezza, dovuta a una funzione con andamento sinusoidale di periodo maggiore, chiamato  $P_{\text{large}}$ . Sono stati dunque stimati entrambi questi periodi utilizzando una procedura basata sulla ricerca della posizione dei massimi locali, implementata dalla funzione

```
void pos_MaxMin ( int dim, double f[dim], int pos_max[dim],
                 int pos_min[dim], int n[2] )
```

ai quali è stato associato il valore corrispondente al tempo in quel punto che viene poi inserito nei vettori `t_max[ii]` e `t_min[ii]`. È stata quindi stimata la distanza temporale `dist_t[ii]` che intercorre tra due generici massimi e ne è stato calcolato il valor medio. I risultati ottenuti sono riportati in tabella 1. Per stimare  $P_{\text{large}}$  vengono utilizzate anche le funzioni

```
int minimum ( int dim, double f[dim], int pos_min[dim] )
int maximum ( int dim, double f[dim], int pos_max[dim] )
```

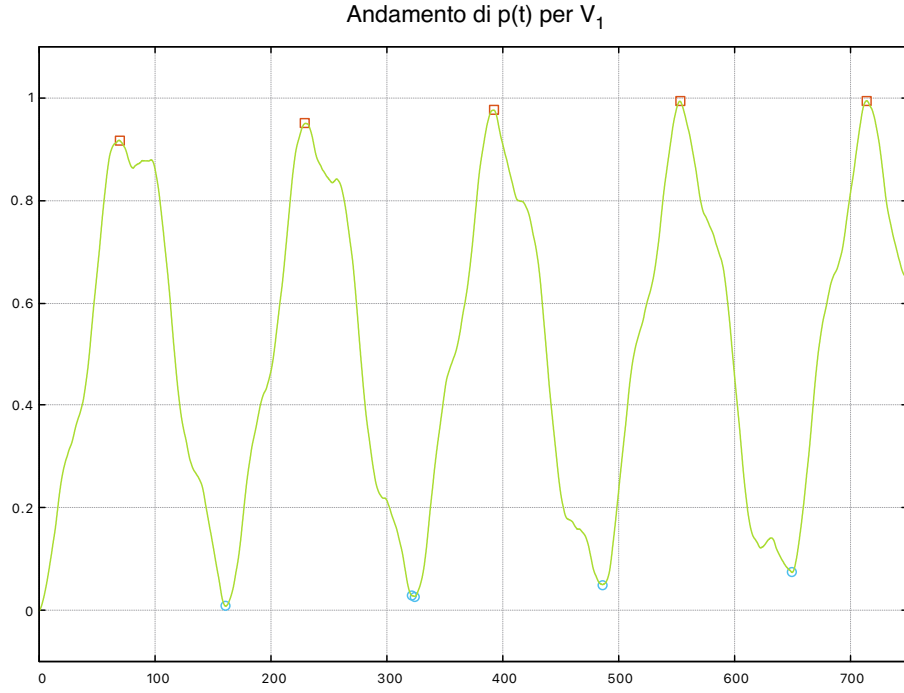


Figura 3: Zoom dell'andamento di  $p_1(t)$ ; in ascissa sono riportati i tempi ridotti  $t^*$ . I punti vuoti sono quelli utilizzati per stimare  $P_{\text{small}}$

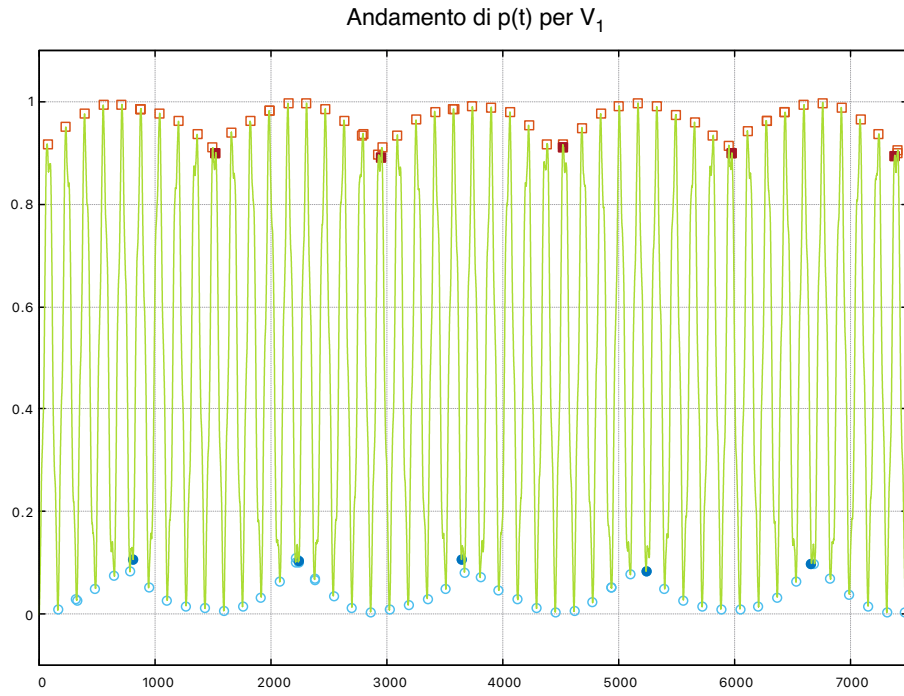


Figura 4: Andamento di  $p_1(t)$ ; in ascissa sono riportati i tempi ridotti  $t^*$ . I punti pieni sono quelli utilizzati per stimare il periodo  $P_{\text{large}}$

per la ricerca dei massimi e dei minimi locali.

Un ragionamento analogo è stato realizzato considerando la particella soggetta al potenziale riportato in (15). Considerando nuovamente come condizione iniziale  $\phi_0(x)$ , è stata determinata l'evoluzione temporale  $\psi_1(x, t)$  implementando l'algoritmo riportato in precedenza.

Anche in questo caso si è deciso di far evolvere il sistema per un tempo abbastanza lungo al fine di poter fare un minimo di statistica sui dati per poter stimare il periodo di oscillazione della funzione  $p_2(x)$ .

Come si nota dalla figura 5 la funzione presenta un andamento oscillante con periodo  $P_{small}$  ma risulta essere anche modulata in ampiezza da altre funzioni sinusoidali di periodo  $P_{large}$ . I risultati ottenuti sono riportati in tabella 1.

Potenziale	$P_{small}$	$P_{large}$
$V_1^*$	161.64 s	1464.38 s
$V_2^*$	45.09 s	1617.62 s

Tabella 1: Tabella con i risultati dei periodi ottenuti per le funzioni  $p_1(t)$  e  $p_2(t)$

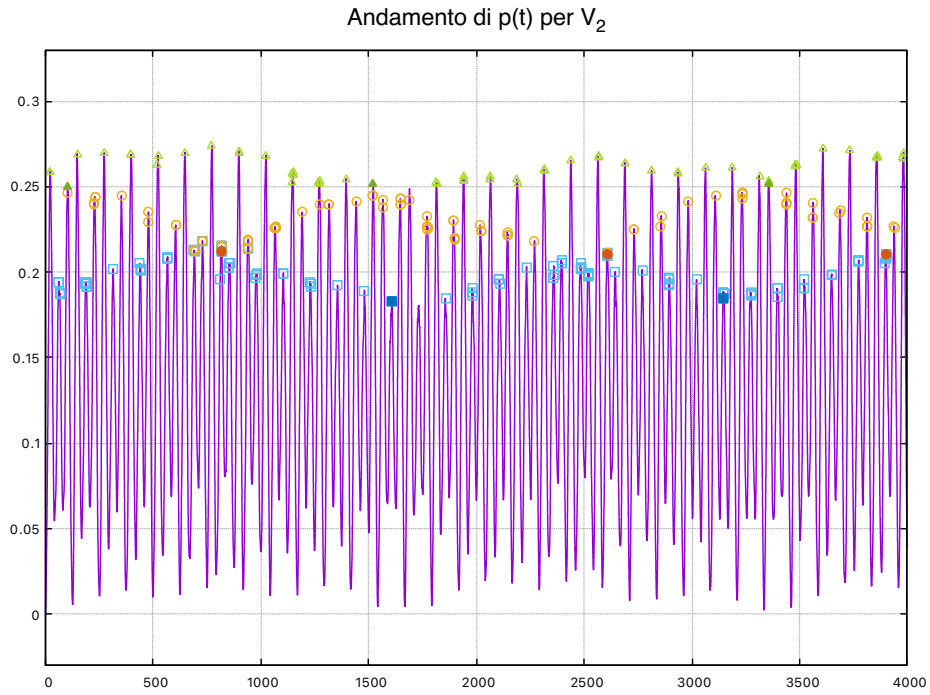


Figura 5: Andamento di  $p_2(t)$ ; in ascissa sono riportati i tempi ridotti  $t^*$ .

### 3 Esercizio 3

Ex3\_DALLENOGARE\_DELBONO.C

#### 3.1 Introduzione

Il modello SIR descrive la genesi e l'evoluzione di un fenomeno di interesse sanitario, come una pandemia, mediante l'introduzione di tre compartimenti:

1.  $s(t)$  indica il numero di persone suscettibili;
2.  $i(t)$  indica il numero di persone infette;
3.  $r(t)$  indica il numero di persone resistenti che non partecipano al processo epidemico poiché immuni, isolati o deceduti.

L'andamento nel tempo di queste tre funzioni è descritto dal seguente sistema di equazioni:

$$\frac{\partial s}{\partial t} = -\beta i(t) s(t) \quad (19)$$

$$\frac{\partial i}{\partial t} = \beta i(t) s(t) - \gamma i(t) \quad (20)$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} = \gamma i(t) \quad (21)$$

$$(22)$$

Introducendo un tempo tipico  $\tau$  e effettuando la sostituzione  $t = t^* \tau$ , esse possono essere riscritte come

$$\frac{1}{\tau} \frac{\partial s}{\partial t^*} = -\beta i(t^*) s(t^*) \quad (23)$$

$$\frac{1}{\tau} \frac{\partial i}{\partial t^*} = \beta i(t^*) s(t^*) - \gamma i(t^*) \quad (24)$$

$$\frac{1}{\tau} \frac{\partial r}{\partial t^*} = \gamma i(t^*) \quad (25)$$

da cui si evince che le costanti  $\beta$  e  $\gamma$  hanno le dimensioni di  $s^{-1}$ . Al fine di avere un sistema di equazioni dipendente da un unico parametro adimensionale, indicato con  $\mathcal{R}_0$ , è possibile prendere  $\tau = \gamma^{-1}$ . In questo modo si ottiene

$$\frac{\partial s}{\partial t^*} = -\mathcal{R}_0 i(t^*) s(t^*) \quad (26)$$

$$\frac{\partial i}{\partial t^*} = \mathcal{R}_0 i(t^*) s(t^*) - i(t^*) \quad (27)$$

$$\frac{\partial r}{\partial t^*} = i(t^*) \quad (28)$$

$$(29)$$

con  $\mathcal{R}_0 \equiv \beta/\gamma$ . Se invece si considera  $\tau = \beta^{-1}$  il sistema di equazioni differenziali risulta differente, ma ovviamente restituisce le medesime soluzioni.

In ogni caso, si nota che in esse compare un unico parametro adimensionale  $\mathcal{R}_0$  che in questo esercizio si assume uguale a 2.

#### 3.2 Svolgimento

Per la risoluzione del sistema formato dalle equazioni (26), (27) e (28) si utilizza il metodo di Runge-Kutta di ordine 4 che viene implementato nella funzione

```
void RK4()
```

Questa calcola gli incrementi  $K_1$ ,  $K_2$ ,  $K_3$  e  $K_4$  per ciascuna delle tre funzioni  $s(t)$ ,  $i(t)$  e  $r(t)$  restituisce il valore di esse al tempo  $t + h$ . A titolo di esempio, viene riportata la parte di algoritmo utilizzata per



ottenere l'andamento di  $i(t)$ , ossia ottenere il valore  $i_{n+1}$  conoscendo quello al tempo precedente (indicato con  $i_n$ ):

$$K_1^i = F^i(i_n, s_n) \quad (30)$$

$$K_2^i = F^i\left(i_n + \frac{h}{2} K_1^i, s_n + \frac{h}{2} K_1^s\right) \quad (31)$$

$$K_3^i = F^i\left(i_n + \frac{h}{2} K_2^i, s_n + \frac{h}{2} K_2^s\right) \quad (32)$$

$$K_4^i = F^i\left(i_n + h K_3^i, s_n + h K_3^s\right) \quad (33)$$

$$i_{n+1} = i_n + \frac{h}{6} (K_1^i + 2 K_2^i + 2 K_3^i + K_4^i) \quad (34)$$

con

$$F^i(i_n, s_n) = \mathcal{R}_0 i_n s_n - i_n. \quad (35)$$

Con una simile implementazione, si ricavano gli andamenti di  $r(t)$  e  $s(t)$ ; essi sono riportati in figura 6.

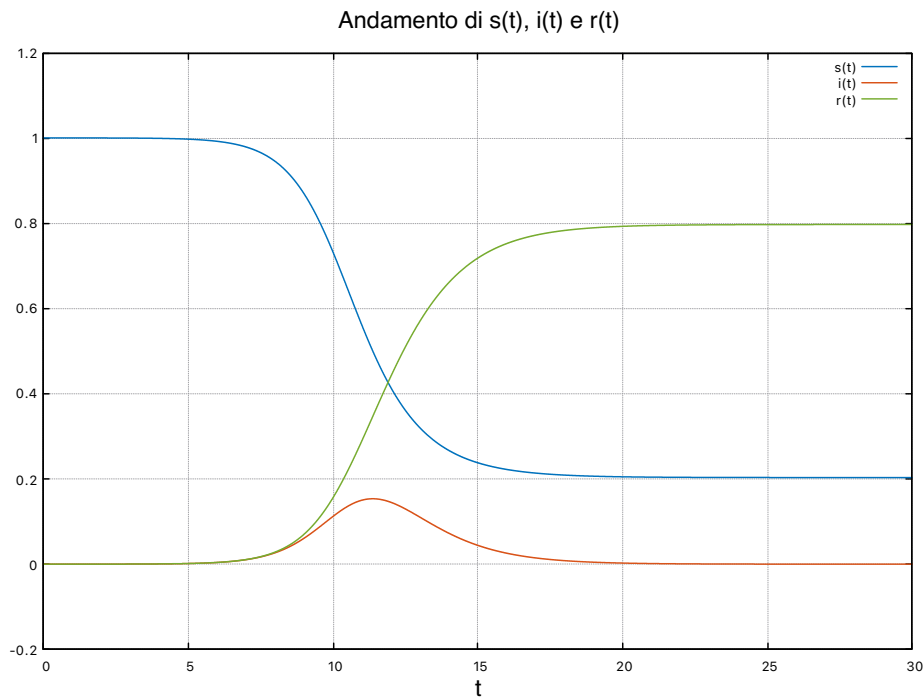


Figura 6: Soluzioni delle equazioni differenziali presentate.

Si è scelto di ripetere il metodo di Runge-Kutta per  $N = 5000$ , fino a un tempo  $t_{\max} = 30.0$  poiché da questo istante in poi le funzioni sono costanti. Ciò implica che l'incremento temporale  $h$  risulta pari a

$$h = \frac{t_{\max}}{N-1} \quad (36)$$

e permette di ottenere un andamento pressoché continuo delle funzioni considerate.

## 4 Esercizio 4

EX4\_DALLENOGARE\_DELBONO.C

### 4.1 Introduzione

Le proprietà termodinamiche e strutturali di un liquido costituito da particelle interagenti con un potenziale radiale  $v(r)$  sono contenute nella *funzione di distribuzione radiale*  $g(r)$ . Per esprimere la relazione che lega le molecole all'interno di un fluido, si introduce la funzione  $h(r)$  detta *funzione di correlazione a coppie*, la quale può essere determinata dall'equazione di Ornstein-Zernike

$$h(0, 1) = c(0, 1) + \rho \int c(0, 2)h(2, 1) d2. \quad (37)$$

Quest'ultima fornisce una relazione che lega  $h(r)$  alla funzione  $c(r)$ , nota come *funzione di correlazione diretta*.

Introducendo la seguente espressione dell'*hypernetted chain closure*

$$c(r) = (\exp(-\beta v) - 1) \exp(h - c) + [\exp(h - c) - 1 - (h - c)] \quad (38)$$

si vuole determinare l'andamento di  $g(r)$  per diversi valori di densità  $\rho$ . Da questo risultato si può valutare il valor medio dell'energia potenziale per particella  $\langle u \rangle$  tramite la relazione

$$\langle u \rangle = \frac{\rho}{2} \int_0^\infty v(r) 4\pi r^2 g(r) dr \quad (39)$$

e la pressione  $P_{ex}$  esercitata da un fluido utilizzando

$$P_{ex} = -\frac{2\pi\rho^2}{3} \int_0^\infty r^3 \frac{dv(r)}{dr} g(r) dr. \quad (40)$$

Nella risoluzione del problema sono state scelte come fondamentali le unità di lunghezza  $\sigma$ , di energia  $\epsilon$  e di entropia  $k_B$ . Da queste si sono ottenute le relazioni per la temperatura ridotta  $T^* = k_B T / \epsilon$  e per la densità ridotta  $\rho^* = \rho \sigma^3$ .

Successivamente sono state ricavate le espressioni in termini di unità ridotte per il potenziale:

$$v^*(r^*) = \begin{cases} f(0.5, \alpha), & r^* < 0.5 \\ f(r^*, \alpha), & r^* > 0.5 \end{cases} \quad (41)$$

in cui

$$f(r^*, \alpha) = \frac{1}{1 - 6\alpha^{-1}} \left[ \frac{6}{\alpha} \exp[(\alpha - r^* \alpha) - (r^*)^{-6}] \right], \quad \alpha = 20 \quad (42)$$

e per la funzione di distribuzione radiale, valida nel limite di bassa densità:

$$g(r^*) = \begin{cases} \exp\left[-\frac{1}{T^*} f(0.5, \alpha)\right], & r^* < 0.5 \\ \exp\left[-\frac{1}{T^*} f(r^*, \alpha)\right], & r^* > 0.5 \end{cases} \quad (43)$$

### 4.2 Svolgimento

In questo esercizio è richiesto di calcolare  $\langle u \rangle$  e  $P_{ex}$  fissando un valore di temperatura  $T^* = 1.35$  per i seguenti valori di densità:  $\rho^* = \{0.1, 0.3, 0.5, 0.7\}$ .

È stata fissata una discretizzazione dello spazio pari a  $N = 4096$  punti ed è stato fissato un cutoff sulla lunghezza pari a  $L = 5.0$ . Questa scelta è motivata dal fatto che il potenziale è approssimativamente nullo a tale distanza il che corrisponde al fatto che l'effetto di interazione reciproca tra particelle risulta essere trascurabile.

L'andamento di  $g(r)$  è stato determinato implementando un algoritmo autoconsistente basato sull'*iterazione di punto fisso* applicato alla coppia di funzioni  $(h_i, c_i)$ .

Per poter avere una migliore stima della soluzione, si è scelto di effettuare la procedura partendo da un valore di bassa densità e salendo progressivamente sino al valore desiderato.

È stato dunque introdotto un vettore di densità `rho`[`DIM_rho`] scegliendo `DIM_rho = 10` in quanto a posteriori i risultati ottenuti di pressione ed energia rimanevano inalterati almeno sino alla terza cifra

decimale. Per essere consistenti con il limite di bassa densità è stato scelto  $\text{rho}[0] = 0.05$  mentre  $\text{rho}[\text{DIM\_rho}-1]$  è pari ad uno dei valori di densità per i quali si vogliono ricavare i risultati.

Le stime iniziali ( $h_0, c_0$ ) per attuare tale procedura sono state stabilite considerando che nel limite di bassa densità

$$g(r^*) \rightarrow \exp \left[ -\frac{1}{T^*} v^*(r^*) \right] \quad (44)$$

e che, con riferimento all'equazione (37),  $h(r) \approx c(r)$ , nel limite di  $\rho \rightarrow 0$ .

Pertanto, introducendo i vettori  $\text{h0}[N]$  e  $\text{c0}[N]$ , le condizioni iniziali sono:  $\text{h0}[\text{ii}] = \text{g\_function}(\text{r}[\text{ii}]) - 1.0$  e  $\text{c0}[\text{ii}] = \text{h0}[\text{ii}]$ , dove  $\text{g\_function}$  è l'implementazione della  $g(r^*)$ .

È stato quindi implementato l'algoritmo che consente di passare dalla coppia ( $\text{h}[\text{ii}], \text{c}[\text{ii}]$ ) a ( $\text{h}[\text{ii}+1], \text{c}[\text{ii}+1]$ ):

1. È stato calcolato l'integrale di convoluzione che compare nell'equazione di OZ (37) tramite:

$$F_i(r) = \left( \frac{2\pi L}{N} \right) \mathcal{R}^{-1} [\mathcal{R}[c_i] \mathcal{R}[h_i]] \quad (45)$$

dove le trasformate radiali di Fourier sono state implementate nelle funzioni

```
void radial_FFT_forward( int dim, double fun[dim], double c_n[dim])
```

```
void radial_FFT_inverse( int dim, double fun[dim], double c_n[dim])
```

2. È stato ricavato  $\text{c}[\text{ii}+1]$  utilizzando la forma della chiusura (38) e notando che  $F_i(r) = h(r) - c(r)$
3. Si è ricavato  $\text{h}[\text{ii}+1]$  tramite la relazione

$$\text{h}[\text{ii}+1] = \text{c}[\text{ii}] + F[\text{ii}] \quad (46)$$

4. È stata calcolata  $g(r)$ , la cui espressione è stata ricavata sfruttando il fatto che  $g(r) = c(r) + [1 + h(r) - c(r)]$ . Inserendo la chiusura (38) si ottiene

$$g(r^*) = \exp \left[ -\frac{1}{T^*} v^*(r^*) \right] \exp [F_i(r^*)] \quad (47)$$

5. Al fine di arrivare in maniera più "gentile" alla soluzione, le stime ( $h_{i+1}, c_{i+1}$ ) sono state sostituite dalle equazioni:

$$\text{c}[\text{ii}+1] = \text{a} \text{c}[\text{ii}+1] + (1.0 - \text{a}) \text{c}[\text{ii}] \quad (48)$$

$$\text{h}[\text{ii}+1] = \text{a} \text{h}[\text{ii}+1] + (1.0 - \text{a}) \text{h}[\text{ii}] \quad (49)$$

nel quale è stato fissato  $\text{a} = 0.1$ . Anche in questo caso la scelta è motivata dal fatto che si è osservato che il risultato finale rimane quantomeno invariato anche considerando  $\text{a}$  dell'ordine di  $10^{-3}$ .

Tale procedura è stata iterata fintanto che

$$\int_0^L |h_{i+1}(r) - h_i(r)| d^3r < 10^6 \quad (50)$$

e per ciascuno dei valori di densità intermedi contenuti nel vettore  $\text{rho}[\text{DIM\_rho}]$  sopra descritto.

I valori di  $P_{ex}$  e di  $\langle u \rangle$  sono stati ottenuti implementando rispettivamente le relazioni (40) e (39). I risultati sono riportati in tabella 2.

In figura 7 è riportato l'andamento della funzione  $g(r)$  che è stata ottenuta per i diversi valori di densità richiesti. Come è possibile osservare, la funzione tende ad 1 al crescere della distanza tra le particelle  $r$ . Inoltre si osserva che, al crescere della densità essa presenta maggiori fluttuazioni attorno a questo valore.

$\rho$	$\langle u \rangle$	$P_{ex}$
0.1	-0.444	-0.017
0.3	-1.282	-0.111
0.5	-2.067	-0.161
0.7	-2.857	0.186

Tabella 2: Tabella con i risultati ottenuti corrispondenti al valor medio dell'energia potenziale per particella e di pressione esercitata dal fluido.

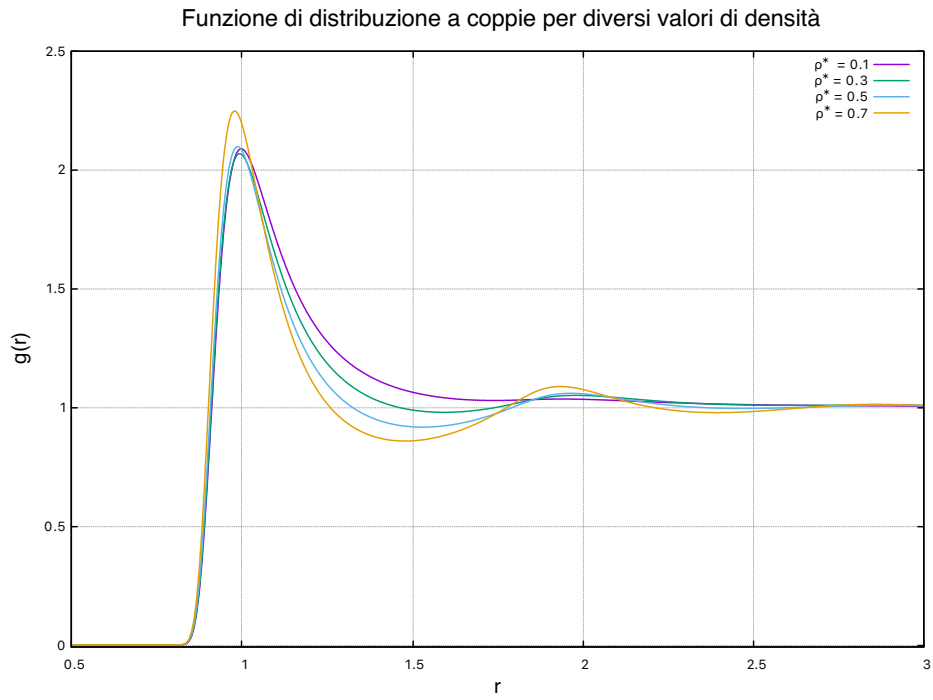


Figura 7: Funzione di distribuzione radiale  $g(r)$  valutata per i diversi valori di densità richiesti.