

ASSEGNAMENTO 1: GAS RETICOLARI

Informatica, Corso di Laurea in Fisica, Università di Pisa

AA 2017/18

1 Un semplice modello

Utilizzeremo il modello proposto in [1] per un *gas reticolare di particelle libere* costituito da un reticolo quadrato di due dimensioni, $D = 2$. Il reticolo ha un numero totale di siti V dato dal quadrato del numero di siti per dimensione ($V = L^2$).

I siti del reticolo sono occupati da N particelle che vengono collocate casualmente sul reticolo all'inizio della simulazione. Ogni particella è numerata (da 0 a $N - 1$) e mantiene la sua identità. Ad ogni passo della simulazione viene selezionata casualmente una delle particelle che sceglie ancora casualmente uno dei 4 siti adiacenti su cui spostarsi. Se il sito scelto è vuoto, la particella si sposta nel nuovo sito liberando quello in cui si trova altrimenti la situazione rimane invariata. Il reticolo che utilizziamo ha *condizioni periodiche di bordo*, ovvero una particella che esce dal lato destro rientra dal lato sinistro, e lo stesso accade per il bordo superiore e inferiore. In particolare, la simulazione inizia all'istante $t = 0$ e per passare dall'istante t all'istante $t + 1$ si effettuano i seguenti passi:

1. si sceglie uniformemente a caso una particella α di coordinate $(x_1(t), x_2(t))$;
2. si sceglie uniformemente a caso uno dei siti *primi vicini* di α (uno dei 4 siti che si ottengono aggiungendo o sottraendo 1a $x_1(t)$ o a $x_2(t)$ tenendo conto delle condizioni periodiche di bordo);
3. se il sito scelto è vuoto spostiamo α nel sito scelto liberando la posizione originaria;
4. incrementiamo il tempo trascorso di una unità (notare che questo accade indipendentemente dal fatto che ci spostiamo oppure no al passo precedente).

Notate che la distanza quadratica percorsa dalla particella α -esima può essere rappresentata come il quadrato della somma degli spostamenti da lei compiuti lungo i due assi a partire dal tempo 0. Ovvero:

$$\Delta R_\alpha^{(2)}(t) = \left(\sum_{i=0}^{t-1} s_1(i) \right)^2 + \left(\sum_{i=0}^{t-1} s_2(i) \right)^2, \quad (1)$$

dove $s_1(i)$ e $s_2(i)$ sono rispettivamente gli spostamenti (+1 o -1) sull'asse x e y effettuati al tempo i da α .

Definiamo lo *spostamento quadratico medio* del sistema a partire dalle medie rispetto alle N particelle come:

$$\Delta R^{(2)}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=0}^{N-1} \Delta R_\alpha^{(2)}(t) \quad (2)$$

La grandezza che ci interessa stimare, data una certa densità $\rho = N/V$, è il coefficiente di diffusione, che è definito da:

$$\mathcal{D}(\rho) = \lim_{t \rightarrow \infty} \mathcal{D}(\rho, t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2Dt} \left(\Delta R^{(2)}(t) \right). \quad (3)$$

Questo si può fare simulando l'andamento per un tempo T abbastanza grande da approssimare l'andamento al limite.

Si può studiare l'andamento del coefficiente di diffusione attraverso simulazioni del sistema con un diverso numero di particelle. Al crescere della densità, il coefficiente di diffusione diminuisce poiché per le particelle diventa sempre più difficile muoversi. In particolare, un reticolo pieno risulta completamente bloccato.

2 L'implementazione

Utilizziamo una matrice globale S , di dimensioni $L \times L$ che rappresenta i siti del reticolo che possono essere occupati. Ogni particella è rappresentata da un intero (il suo numero) mentre i siti liberi vengono rappresentati da EMPTY (la costante -1). Inoltre utilizziamo due array globali, $X1$ e $X2$, lunghi $L \times L$, che contengono in posizione i -esima rispettivamente gli spostamenti effettuati sull'asse x ed y dalla particella i -esima (solo i primi N valori di $X1$ e $X2$ sono significativi).

Per ogni simulazione, fissati N e T (tempo totale della simulazione) si procede come segue.

- S viene inizializzata scegliendo casualmente i siti per le N particelle con distribuzione uniforme. I vettori $X1$ e $X2$ sono inizializzati a 0.
- Dopodiché si eseguono T passi della simulazione come descritti nel modello, aggiornando opportunamente S , $X1$ e $X2$.
- Al tempo T viene calcolato lo spostamento quadratico medio (Eq. 2) e questo valore viene utilizzato per calcolare l'approssimazione del valore del coefficiente di diffusione (Eq. 3).

Si noti che i vettori $X1$ e $X2$ servono a calcolare, per ogni particella α , gli spostamenti relativi nell'Eq. 1.

Cosa deve essere realizzato

Lo studente deve realizzare le funzioni i cui prototipi si trovano nel file `gasret.h`. Nel file sono anche definite le matrici ed i vettori globali e sono presenti dei commenti che specificano dettagliatamente il comportamento di ciascuna funzione.

I file `*test.c` contengono dei `main` che usano queste funzioni ed effettuano dei test sul loro funzionamento. Tali test possono essere attivati automaticamente utilizzando il `Makefile` come specificato nel file `README`. Solo il codice che supera con successo questi test può essere consegnato.

Tuttavia, è bene ricordare che il superamento dei test non garantisce la correttezza completa della soluzione, quindi invitiamo gli studenti ad analizzare attentamente i risultati ottenuti e le stampe effettuate prima della consegna.

Opzionalmente, lo studente può realizzare parti aggiuntive e consegnare una breve discussione su quanto realizzato e come utilizzarlo sotto forma di file PDF.

References

- [1] L. M. Barone, E. Marinari, and G. Organitini F. Ricci-Tersenghi. *Programmazione Scientifica. Linguaggio c, algoritmi e modelli nella scienza*. Pearson Education, 2006.