

# Laboratorio di Calcolo: Prova d'esame del 1 Marzo 2012

Scrivere un programma, chiamato `<cognome>_<nome>.c` (avendo eliminato caratteri speciali da nome e cognome, esempio: Marco D'Alì si scrive `dali_marco.c`), che calcoli il valore medio e la varianza della posizione di una particella in equilibrio termico con un ambiente a temperatura  $T = 2$ . e soggetta ad un potenziale della forma  $V(X) = 0.5 * (X - 2.)^2$  utilizzando il metodo Monte Carlo. Naturalmente, per lo svolgimento del compito non si richiede la conoscenza del metodo ma di implementare correttamente le indicazioni qui sotto che lo realizzano. Il programma utilizza unità di misura arbitrarie.

Il programma deve:

1. Descrivere brevemente cosa fa.
2. Chiedere in input il valore (tipo intero) di  $N_{Mosse}$ , verificare che sia strettamente positivo e minore di  $10^6$  e, in caso contrario, stampare un messaggio di errore e chiedere un nuovo valore. Questo valore corrisponde al numero di mosse Monte Carlo utilizzate per il calcolo.
3. Chiedere in input il valore  $\Delta x \in [2., 6.]$ , verificare che sia compreso nell'intervallo richiesto e, in caso contrario, stampare un messaggio di errore e chiedere un nuovo valore.
4. Chiedere in input il valore  $X_0$  (tipo double e pari alla posizione iniziale della particella), verificare che sia compreso fra 1. e 3. (estremi esclusi) e, in caso contrario, stampare un messaggio di errore e chiedere un nuovo valore.
5. Generare un insieme di possibili valori della posizione mediante un ciclo sul numero di mosse Monte Carlo che

- (a) Generi una posizione di prova per la particella secondo la legge

$$X_{k+1} = X_k + \xi_{k+1} \quad (1)$$

dove  $X_k$  è la posizione della particella alla mossa  $k$  e  $\xi_{k+1}$  è un numero pseudoaleatorio razionale  $\in [-\Delta x, \Delta x]$ ;

- (b) Calcoli il potenziale nelle posizioni  $X_k$  e  $X_{k+1}$ ;
    - Se  $V(X_{k+1}) \leq V(X_k)$ , la particella assume la posizione  $X_{k+1}$ ;
    - Se  $V(X_{k+1}) > V(X_k)$  si chiami un'apposita funzione, *Accettanza*, in cui
      - (i) si calcola  $PRatio = e^{-\frac{\Delta V}{T}}$ , dove  $\Delta V = V(X_{k+1}) - V(X_k)$
      - (ii) si estrae un numero pseudoaleatorio razionale,  $\nu$ , in  $[0., 1.]$
      - (iii) se  $PRatio \geq \nu$ , la particella assume la posizione  $X_{k+1}$ , in caso contrario si assegna  $X_{k+1} = X_k$
  - (c) Salvi, alla fine di ogni mossa, la posizione della particella in un array unidimensionale (di opportuna lunghezza) chiamato *Posizioni*
6. Calcolare e stampare, con un messaggio chiaro, sullo schermo la frazione di volte in cui una mossa Monte Carlo ha prodotto una posizione diversa da quella del passo precedente, chiamando tale frazione *Accept*

7. Calcolare mediante un' apposita funzione il valore medio della posizione

$$X_{Medio} = \frac{1}{NMosse} \sum_{k=0}^{NMosse-1} X_k \quad (2)$$

e la deviazione standard  $\sigma$  dove

$$\sigma^2 = \frac{1}{(NMosse - 1)} \sum_{k=0}^{NMosse-1} (X_k - X_{Medio})^2 \quad (3)$$

e stamparli sullo schermo con un messaggio chiaro dopo aver restituito entrambe i valori al Main.

*La scelta delle funzioni utilizzate nel programma sarà criterio di valutazione particolarmente rilevante. Oltre alla funzione indicata nel testo si richiede di utilizzare un'apposita funzione (almeno) per*

- *generare i numeri pseudoaleatori razionali mediante un'apposita funzione che riceve in argomento gli estremi dell'intervallo di campionamento;*

*Verrà premiata la capacità di minimizzare il numero di calcoli effettuati ad ogni ciclo. Saranno oggetto di valutazione anche la presenza di commenti e la leggibilità del programma (indentazione).*