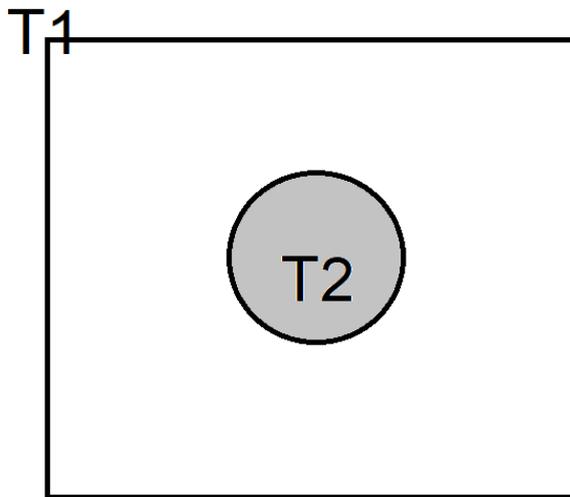


TEMI D'ESAME AA2324

1. Viaggio della sonda Voyager I. Si trova dal database NASA le posizioni iniziali di pianeti e sonda e ricalcola la traiettoria confrontandola con quella riportata.
2. Viaggio della sonda Voyager II. Si trova dal database NASA le posizioni iniziali di pianeti e sonda e ricalcola la traiettoria confrontandola con quella riportata.
3. Evoluzione del sistema solare su grandi tempi (milioni di anni). Valutiamo l'affidabilità dei propagatori Verlet e Runge-Kutta
4. Dinamica molecolare di Ar liquido e solido con il potenziale LJ. Calcolo delle funzioni di autocorrelazione delle velocità come riportato nell'articolo disponibile su moodle.
5. Calcolo della funzione pair-correlation function $g(r)$ in Ar liquido e potenziale di LJ a T data usando l'algoritmo di Metropolis.
6. Equazione di diffusione del calore in 2D. Condizioni al bordo cella di simulazione quadrata T1, e al centro della cella cerchi di temperatura T2. Condizioni iniziali temperatura T1. Si usa Eulero implicito. Poi si considerano anche le condizioni al contorno di Neumann imponendo che il flusso di calore sia proporzionale a T^4

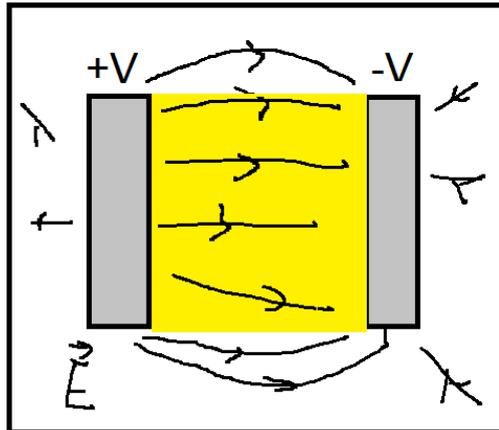


7. Equazione di Schroedinger tempo-indipendente 1D e uso degli algoritmo di minimizzazione come CG (gradiente coniugato) implementati in scipy per trovare lo stato fondamentale e i primi stati eccitati della buca di potenziale infinita, con al suo interno un potenziale a gradino.
8. Equazione di Schroedinger tempo-indipendente 1D uso dell'algoritmo di minimizzazione come CG (gradiente coniugato) implementati in scipy per trovare lo stato fondamentale e i primi stati eccitati. Consideriamo un potenziale a gradino e condizioni al contorno periodiche.

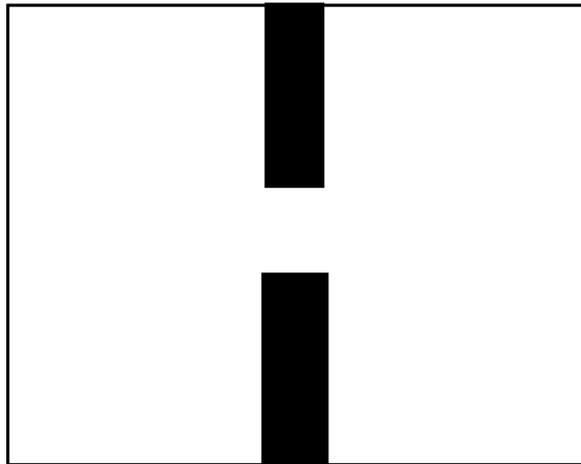
9. Equazione di Schroedinger 1-D per la parte radiale del potenziale sferico di Coulomb. Uso di formule per derivate con differenze finite su griglie non equispaziate. Uso di inversione di matrice tramite software di libreria numpy o scipy .
10. Equazione di Schroedinger 3-D tempo indipendente per potenziale Coulombiano (atomo idrogeno) con griglia equispaziata. Uso minimizzazione SD (steepest descent) o altro tipo CG da scipy per trovare le energie e gli orbitali dello stato fondamentale e dei primi stati eccitati. Confronto con soluzioni analitiche e dipendenza degli scarti dalla densità della griglia. Uso di condizioni al contorno pari a buca di potenziale infinita.
11. Equazione di Schroedinger 3-D tempo indipendente per potenziale Coulombiano (atomo idrogeno) con griglia equispaziata. Uso minimizzazione SD (steepest descent) o CG per trovare le energie e gli orbitali dello stato fondamentale e dei primi stati eccitati. Confronto con soluzioni analitiche e dipendenza degli scarti dalla densità della griglia. Uso di condizioni al contorno periodiche o di buca infinita.
12. Uso del metodo di minimizzazione SD (steepest descent) o CG per trovare l' autofunzione e l' autoenergia dello stato fondamentale di un condensato di Bose-Einstein descritto dall'equazione di Gross-Pitaevski in 2D:

$$\mu\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) + g|\psi(r)|^2 \right) \psi(r)$$
 con la funzione d'onda normalizzata a N numero di particelle. Con buca di potenziale infinita più potenziale armonico.
13. Condensatore reale a piastre piate in 2D. Il potenziale della armature viene fissato a +V e -V sui bordi della cella di simulazione il potenziale è nullo. Tra le piastre del condensatore è messo un materiale dielettrico Si calcola anche la CAPACITA' determinando numericamente la carica sulle piastre integrando il flusso del campo

elettrico. Confronto con formula senza effetti di bordo.



14. Equazione delle onde di pressione (suono): fenomeno della diffrazione in 2D.
Consideriamo la geometria:



sulle pareti vale la condizioni al contorno che il gradiente della pressione è perpendicolare alla superficie delle pareti: $\nabla p \cdot u_{\perp} = 0$. Come condizioni iniziali consideriamo in impulso gaussiano o semplicemente un sovrappressione in un punto nella parte di destra.

15. Equazione di Schroedinger Tempo dipendente 1-D con condizioni al contorno periodiche e potenziale a gradino. Confronto di propagatori: Eulero esplicito, Crank-Nicolson, Verlet, con e senza rinormalizzazione della funzione d'onda durante la dinamica.

16. Equazione di Schroedinger tempo dipendente 1-D in buca di potenziale infinita e potenziale esterno tempo dipendente $V = xE_0 \sin(\omega t)$. Usiamo Crank-Nicolson o Verlet. Partiamo dallo stato fondamentale e 'accendiamo' la perturbazione. Al variare di ω si passa da un regime adiabatico ad un regime non-adiabatico.
17. Determinazione dell'energia del gas di elettroni omogeneo (HEG) in 2D composto da N elettroni. Si riempiono gli orbitali di singola particella di una buca di potenziale infinita (quadrata, lato L) e poi si calcola l'energia Hartree-Fock (termine di scambio) integrando con Monte Carlo. Confronto con risultato analitico.
18. Determinazione dell'energia del gas di elettroni omogeneo (HEG) in 3D composto da N elettroni. Si riempiono gli orbitali di singola particella di una buca di potenziale infinita (cubica, lato L) e poi si calcola l'energia Hartree-Fock (termine di scambio)
19. Uso di vari classificatori: (perceptron, logistic regression, support vector machine con kernel lineare e kernel gaussiano, rete neurale) per il riconoscimento di caratteri del data set di sci-kit
- 20.