

### **Assignment n.1 - Algebra lineare**

#### 1.1

- Utilizzate la tecnica SVD per risolvere un sistema lineare a vostra scelta per ognuna di queste tipologie: a)  $N \times N$  non singolare, b)  $N \times N$  singolare, c)  $M \times N$  ( $M > N$ ), d)  $M \times N$  ( $M < N$ )
- Per ognuno dei quattro casi, date una interpretazione geometrica delle soluzioni ottenute.

#### 1.2

- Utilizzate la tecnica SVD e quella LU per determinare i coefficienti del fit lineare di un set di funzioni (di vostra scelta) a un set di dati sperimentali o di simulazione (di vostra scelta).
- Determinate tramite i coefficienti della matrice delle covarianze gli errori associati ai parametri del fit e la loro mutua correlazione.

**NB:** sono *esclusi* dalla scelta dei dati da fittare quelli (come il famoso polinomio di quarto grado) relativi a precedenti esercizi sul mio sito.

### **Assignment n.2 - Equazioni a derivate parziali**

#### 2.1

- Dimostrate che il metodo FTCS per l'equazione di diffusione è convergente solo per certi valori del time step e del passo della griglia spaziale, sia a) calcolando il raggio spettrale (massimo autovalore) della matrice di iterazione, che b) risolvendo l'equazione direttamente.
- Verificate l'effetto dell'inclusione di un termine 'pozzo' nell'equazione, ovvero di un termine aggiuntivo proporzionale alla funzione integranda.

#### 2.2

- Calcolate, integrando iterativamente l'equazione di Poisson, il potenziale su una griglia quadrata contenente una gabbia di Faraday, per diverse condizioni al contorno, e/o per diverse configurazioni di densità di carica.
- Verificate le prestazioni relative dei metodi Jacobi, Seidel, e SOR in funzione delle dimensioni della griglia (p.es. esaminando il numero di iterazioni necessarie ai tre metodi per giungere a convergenza).
- Stimate le prestazioni di SOR rispetto a Seidel, e il valore ottimale del parametro SOR,  $\omega$ , risolvendo direttamente l'equazione per diversi valori di  $\omega$ .

### **Assignment n.3 - Molecular simulations**

#### 3.1

Calcolate mediante simulazioni di dinamica molecolare microcanonica le funzioni  $g(r)$ , cammino quadratico medio, e velocity autocorrelation (e da queste ultime il coefficiente di autodiffusione) per fluidi Lennard-Jones di diversa densità e a diverse temperature.

#### 3.2

Usate il metodo Montecarlo Metropolis canonico per calcolare le isoterme di un fluido e/o un gas a diverse temperature. Per entrambi i punti 3.1 e 3.2 usate i codici di Frenkel e Smit.