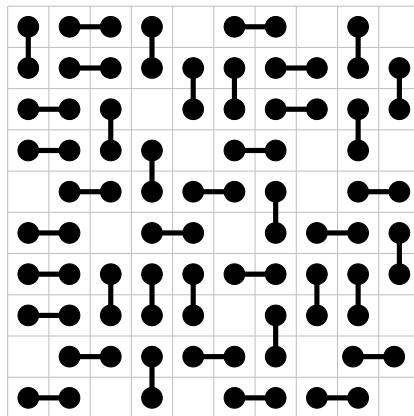


FÍSICA COMPUTACIONAL II

QUESTÃO 5 DA SEGUNDA AVALIAÇÃO - VALOR: 1,5 PT - PRAZO: 31/03

Problema 1: O problema da cobertura de dímero

Um problema bem estudado em matéria condensada é o *problema da cobertura de dímero*, no qual dímeros (polímeros com apenas dois monômeros) se depositam na superfície de um sólido, caindo em espaços entre os átomos na superfície e formando uma grade, como a seguinte:



Não se permite que dois dímeros se sobreponham. A questão é quantos dímeros podem ser encaixados no quadrado inteiro de área $L \times L$. A resposta, neste caso simples, é claramente $\frac{1}{2}L \times L$, mas suponha que não saibamos disto. (existem versões mais complicadas deste problema em redes diferentes, ou com elementos de forma diferente, para os quais a melhor solução está longe de ser óbvia, ou em alguns casos nem sequer é conhecida.)

- a) (1.0 pt) Escreva um programa para resolver o problema usando recozimento simulado em uma rede 50×50 . A função “energia” para o sistema é *menos* o número de dímeros, de modo que é minimizada quando o número de dímero é máximo. Os movimentos para uma cadeia de Markov são os seguintes:
- Escolha dois sítios adjacentes da rede aleatoriamente.
 - Se ambos estão vazios, adicione um dímero.
 - Se estes dois sítios são atualmente ocupados por um único dímero, remova este dímero da rede com a probabilidade apropriada (que você vai ter que calcular).
 - Em outros casos, não faça nada.

Faça um gráfico mostrando como a “energia” do sistema varia em função do número de passos. (Cuidado: certifique-se que os dois sítios escolhidos estão dentro da região de interesse).

- b) (0.3 pt) Faça uma animação do estado do sistema sobre o tempo a medida que a simulação roda (ou então faça o programa mostrar seu estado em intervalos regulares). Você pode usar comandos do programa ‘ising.py’ que está no SIGAA, para ajudar a fazer a animação.

Você pode só desenhar esferas em sítios ocupados, ou pode usar a cor da esfera para indicar se um sítio está ocupado ou vazio. (Dica: use cores diferentes para dímeros horizontais e verticais) (Dica: Se a atualização da grade estiver demorando muito tempo no vpython, use $L = 20$ neste item).

- c) (0.2 pt) Tente cronogramas de resfriamento exponencial com diferentes constantes de tempo. Um valor inicial razoável para tentar é $\tau = 10\,000$ passos. Para cronogramas de resfriamento mais rápidos você deve ver que as soluções encontradas são piores—uma fração menor da rede está coberta com dímeros e há buracos maiores entre eles—mas para cronogramas mais lentos o cálculo pode encontrar soluções bastante boas, mas geralmente não perfeitas, para a cobertura da rede (Quando enviar a solução, envie alguns gráficos obtidos com diferentes valores de τ).