LABORATÓRIO DE COMPUTAÇÃO E VISUALIZAÇÃO CIENTÍFICA

2021-2022

Módulo 1: Visualização da amostragem Monte-Carlo do espaço de fase do modelo Ising

Neste projeto, deverá:

- 1) Representar as duas configurações de uma rede Ising 4x4, com interações de primeiros vizinhos, e condições fronteira periódicas, com magnetização nula e energia = +32*J [1 valor]
- 2) Representar uma das oito configurações de uma rede Ising 4x4, com interações de primeiros vizinhos, e condições fronteira periódicas, com magnetização nula e energia = -16*J [1 valor]
- 3) mostrar graficamente o histograma Energia-Magnetização de um estudo Monte-Carlo por geração de configurações magnéticas aleatórias do sistema Ising 8x8, com interações de primeiros vizinhos e condições fronteira periódicas; [4 valores]
- 4) comparar o gráfico anterior com o equivalente usando o método Random Path Sampling; [4 valores]
- 5) fazer vídeos representativos da amostragem do espaço de fase Energia-Magnetização dos dois estudos anteriores; [4 valores]
- 6) mostrar visualmente que, para o caso do sistema Ising 4x4, com interações de primeiros vizinhos e condições fronteira periódicas, ambos os métodos anteriormente usados convergem para a solução exata. A solução exata da densidade de estados desse sistema está disponível no e-learning, no ficheiro JDOS_L4_2D_SS_exact.mat; [3 valores]
- 7) mostrar visualmente que, no uso do método Wang-Landau para o estudo do sistema Ising 6x6, com interações de primeiros vizinhos e condições fronteira periódicas, a amostragem do espaço de fase Energia-Magnetização é diferente durante a criação do primeiro histograma e a do último. [2 valores]

Sugestão: use os seguintes parâmetros de simulação:

```
L = 6; % linear system size
f_start = exp(1);
f_end = 1 + 1E-3;
max_rw_steps = 1E10; % maximum number of random walk steps per f value update
min_rw_steps = 1E4; % minimum random walk steps before checking flatness
p = 0.75; % flatness criteria
```

8) Pode-se obter uma estimativa da densidade de estados conjunta (Joint Density of States), a partir do histograma Energia-Magnetização usando amostragem de configurações aleatórias, dividindo cada elemento do histograma pelo valor 2^N, em que N é o número de spins do sistema. Justifique a validade deste cálculo. [1 valor]

O relatório deverá descrever a metodologia usada para a execução dos pontos anteriores, assim como uma interpretação dos resultados obtidos.

O relatório, assim como todos os ficheiros MATLAB utilizados e ficheiros vídeo gerados, devem ser enviados para <u>jamaral@ua.pt</u> até 28 de março às 15h. No caso de ficheiros volumosos, estes deverão ser enviados pelo serviço filesender (https://filesender.fccn.pt/).

21/3/2022 João Amaral