



Universidade Estadual de Campinas
IFGW – Física Estatística Computacional

Solução Lista 4

Problema (5.6)

Utilizando o algoritmo Isin_5.6a.py obtemos os seguintes resultados:

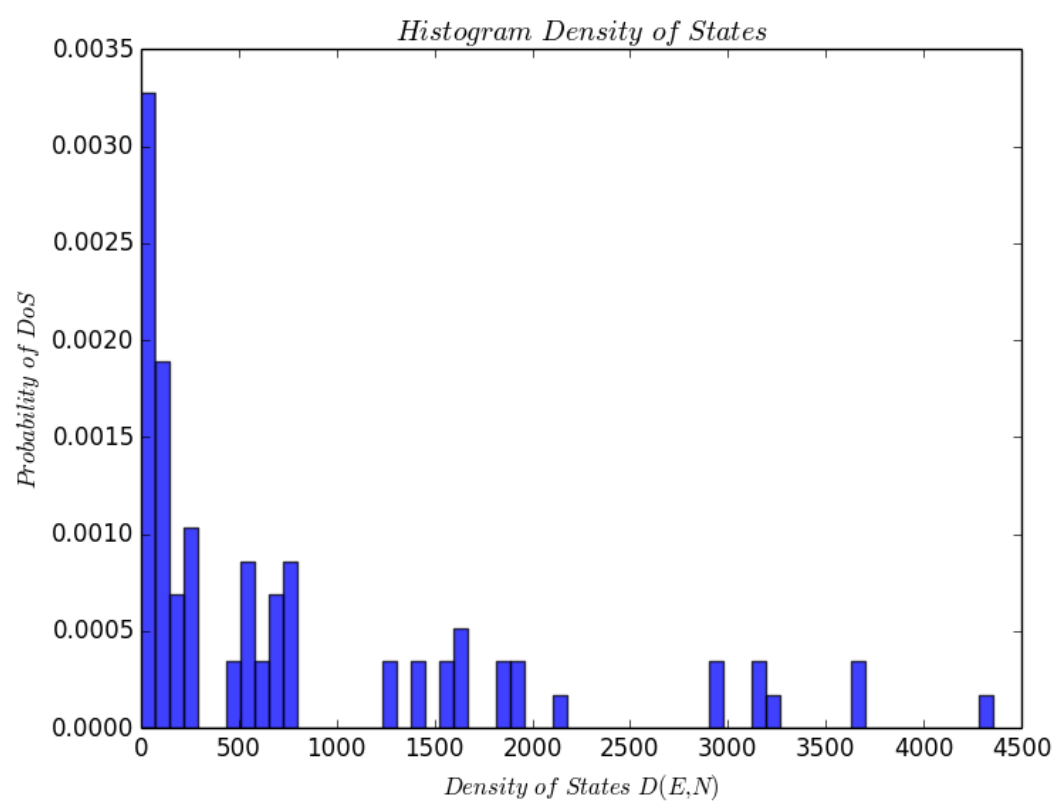


Figure 1

-----Density of States 2 X 2-----

Energy	DoS
0	12
4	0
8	2

-----Density of States 4 X 4-----

Energy	DoS
0	20524
4	13568
8	6688
12	1728
16	424
20	64
24	32
28	0
32	2

-----Density of States 6 X 6-----

Energy	DoS
0	13172279424
4	11674988208
8	8196905106
12	4616013408
16	2122173684
20	808871328
24	260434986
28	71789328
32	17569080
36	3846576
40	804078
44	159840
48	35148
52	6048
56	1620
60	144
64	72
72	2

Com os dados acima recuperamos a tabela 5.2 do livro texto, para o caso de 6x6 utilizamos o código Ising_5.6b.py.

Para a segunda parte do problema utilizamos o algoritmo Ising_5.6b.py que nos forneceu os seguintes resultados:

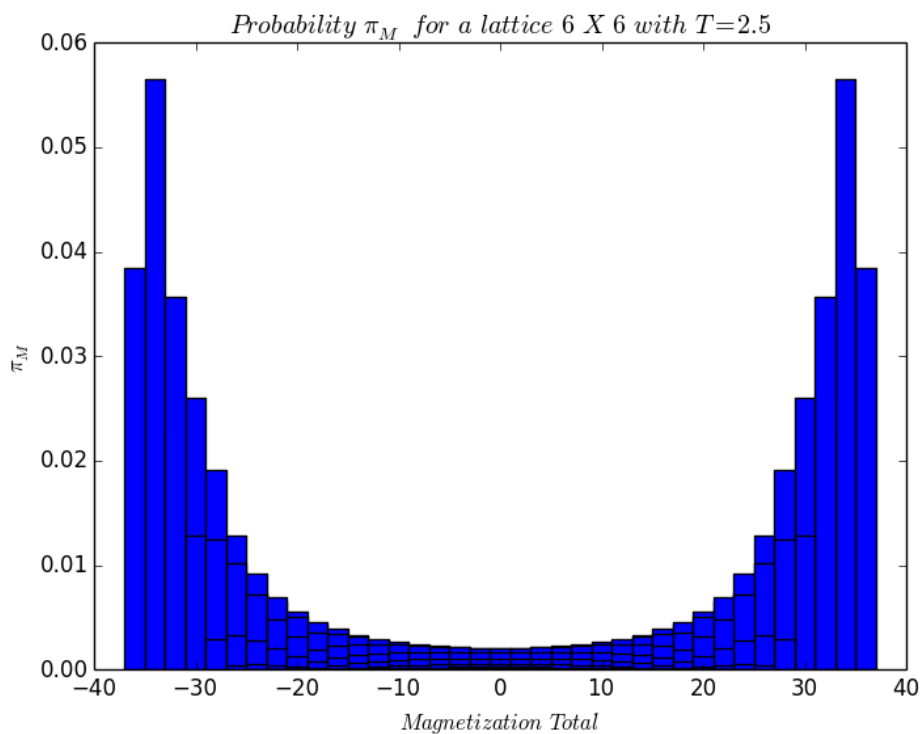


Figura 2

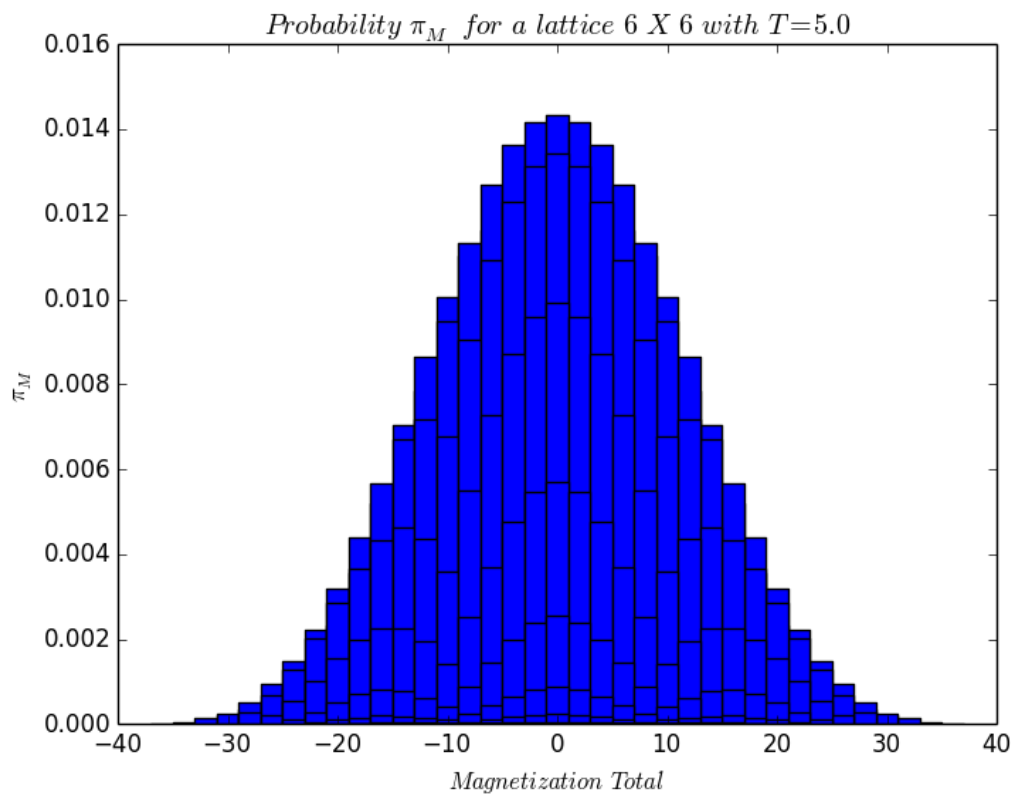
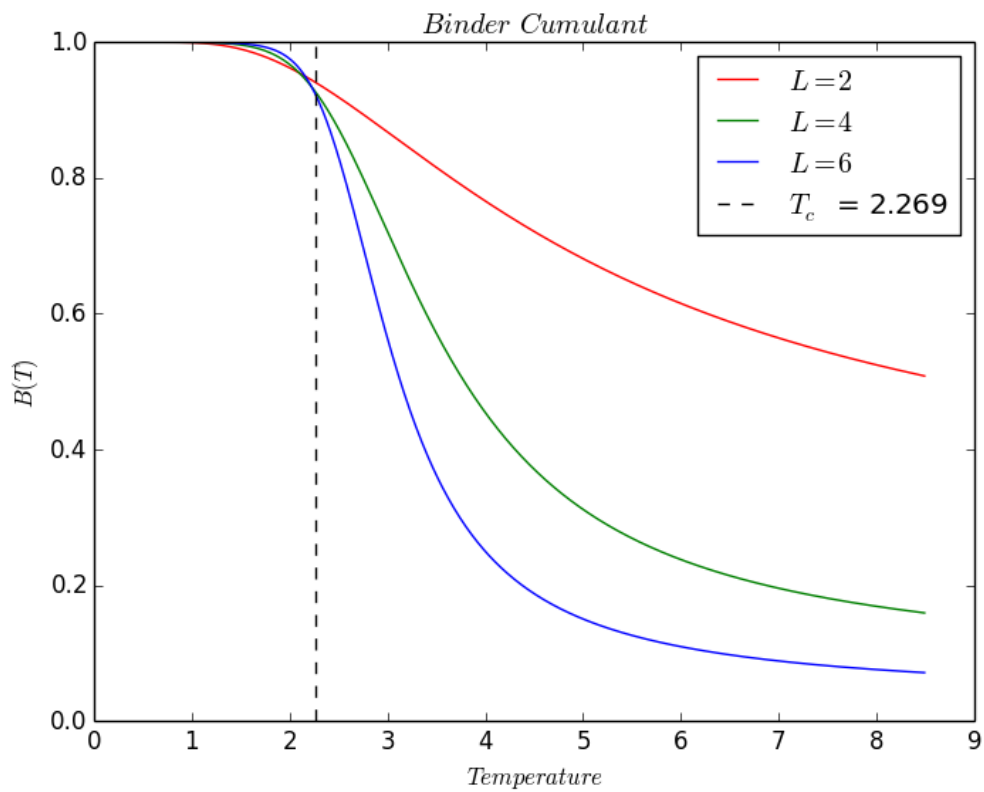


Figura 3

A partir das figuras 2 e 3 podemos observar o comportamento da magnetização para valores diferentes de temperatura, para temperaturas baixas o sistema está em sua maioria ordenado com spin para cima ou spin para baixo, já no caso de temperaturas altas, o sistema passa por uma transição de fase ordem-desordem, onde a magnetização do sistema tem uma maior probabilidade de ser nula devido a aleatoriedade dos spins. Observando a figura 1 e 2 podemos ver uma clara transição do estado ferromagnético (spins em sua maioria alinhados) para o estado paramagnético (spins desalinhados, alta probabilidade da magnetização ser zero) em função da temperatura, então existe uma certa temperatura em que ocorre essa transição que é conhecida como temperatura de Curie T_c

Para mostrarmos que a transição de fase ocorre em uma determinada temperatura T e essa temperatura é a mesma para qualquer rede, utilizaremos o cumulante de Binder que é dado pela formula $B(T) = \frac{1}{2} (3 - \frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2})$, para isso executamos o algoritmo `Ising_5.6b.py`, para as redes 2x2, 3x3 e 6x6 e obtemos o seguinte resultado:



Como podemos ver pela figura 4 nossa temperatura crítica não é exatamente a esperada, mas temos um resultado bem satisfatório, também podemos observar que para todas as redes possuímos a mesma temperatura, visto que todas as curvas do gráfico se cortam no mesmo ponto. Para limites de altas temperaturas $B(T)$ vai a zero, e para limites de baixas temperaturas $B(T)$ vai a 1.

Problema (5.11)

Neste problema realizaremos uma implementação no algoritmo, chamado de algoritmo cluster, no qual ao invés de flipar um spin por vez iremos flipar conjuntos de spins. Utilizando o algoritmo `ising_cluster_5.11.py` obtivemos os seguintes resultados:

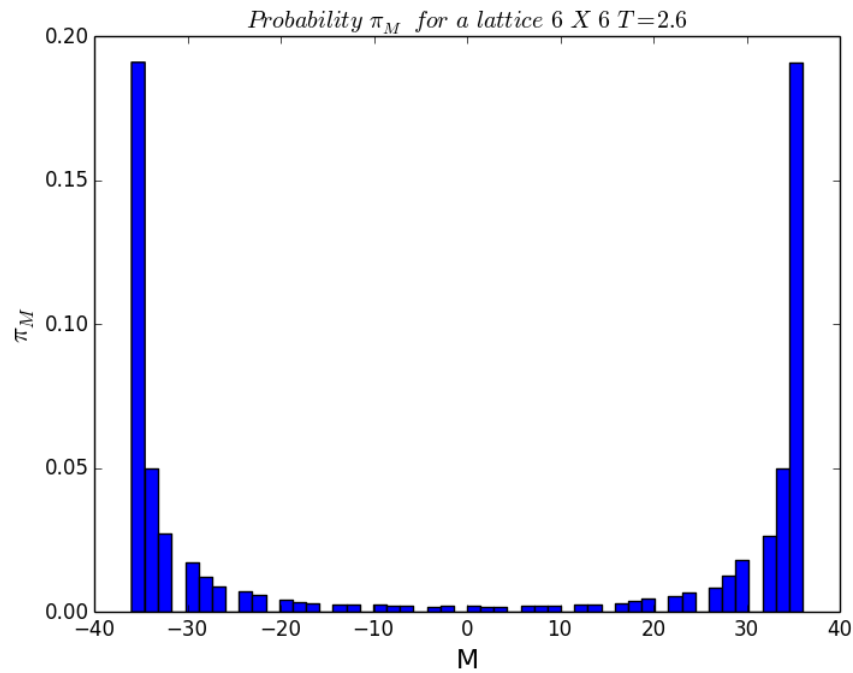


Figura 5

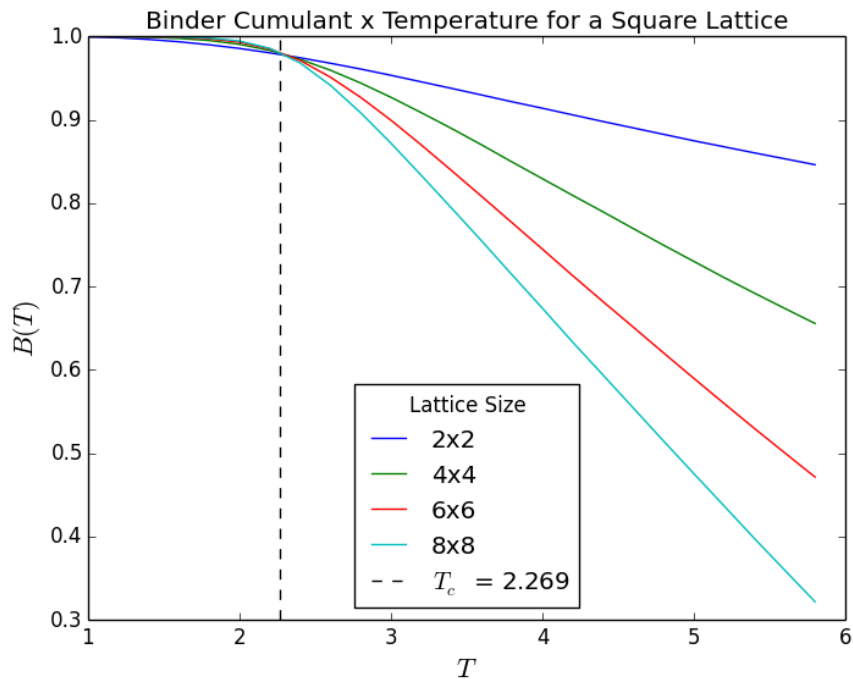


Figura 6

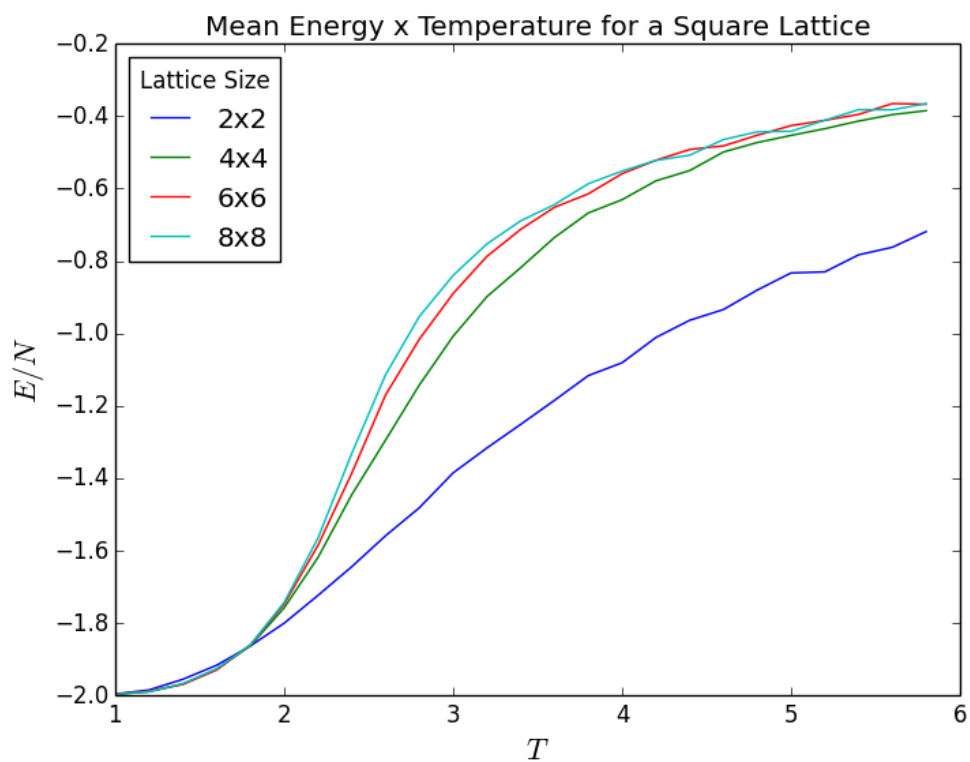


Figura 7 – Energia média em função da temperatura para diferentes dimensões de redes.

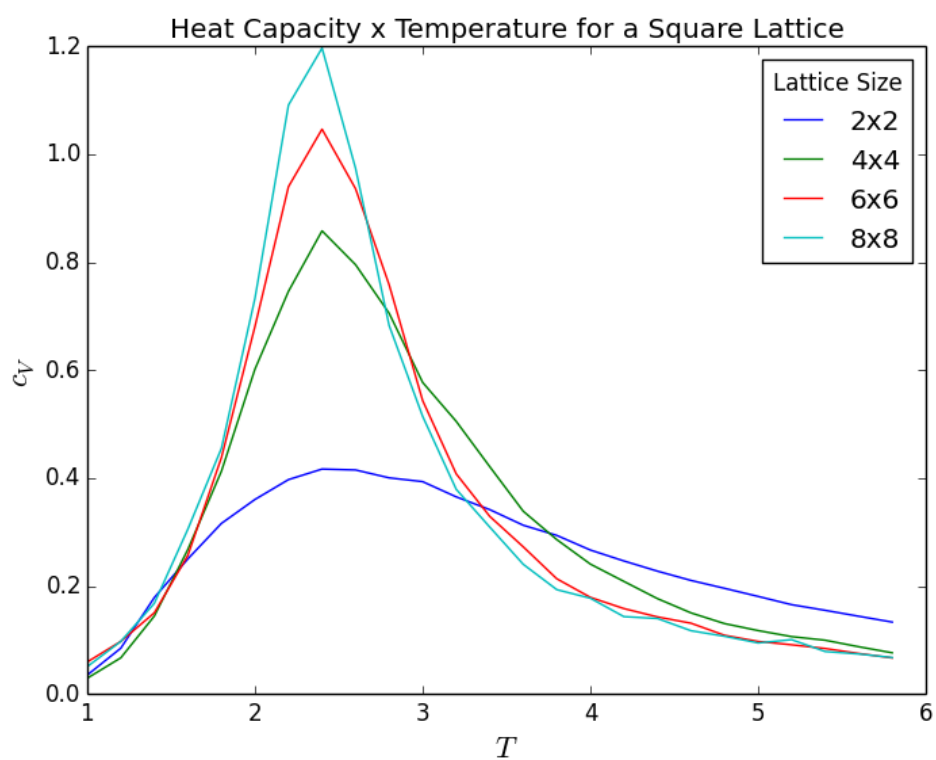


Figura 8 – Capacidade Térmica em função da temperatura para diferentes dimensões de redes.

Observando a figura 5 e a figura 2 podemos fazer uma comparação entre o algoritmo de cálculo explícito (figura 2) onde “flipamos” um spin por vez e o algoritmo Wolff-Cluster (figura 5) onde “flipamos” blocos de spins, podemos ver que o algoritmo de Cluster recupera os resultados do exercício anterior, com uma pequena diferença em que no Wolff-Cluster utilizamos $T = 2.6$.

Também podemos realizar a comparação entre a figura 6 (Wolff-Cluster) e a figura 4 (Cálculo Explícito) que nos fornece o Cumulante de Binder, e vemos que o algoritmo de Wolff-Cluster também recupera os resultados do problema anterior porém este com mais precisão, já que para diferentes tipos de rede sempre se encontram em um mesmo ponto que é aproximadamente o mesmo que o do valor exato de $T_c = 2.269$

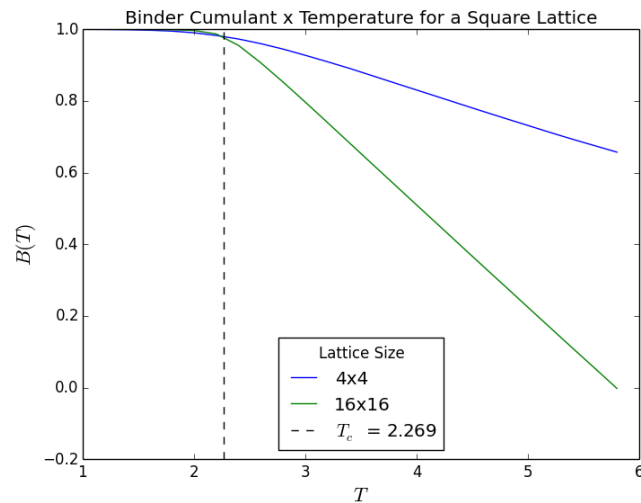


Figura 9

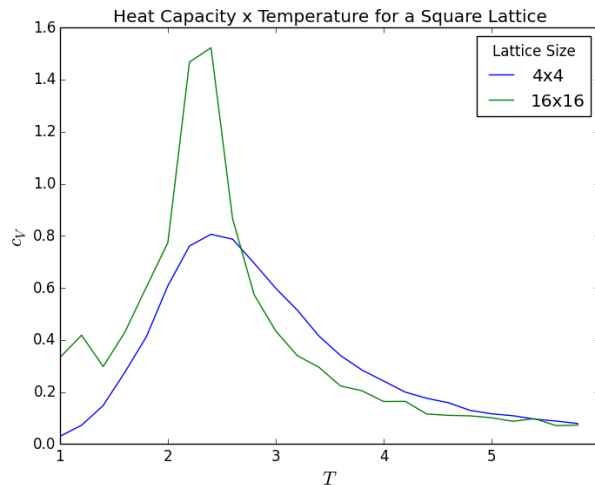


Figura 10

Como podemos ver pela figura 9 e figura 6 todas as redes testadas se cruzam aproximadamente na temperatura $T_c = 2.269$, ao compararmos a figura 10 com a figura 5.24 do livro texto, vemos que possuímos um resultado bem satisfatório levando em consideração que utilizei um baixo número de iterações (10^4) e Krauth utiliza 10^6 . Desta forma o algoritmo de Wolff-Cluster se mostra uma ferramenta muito poderosa, já que obtemos resultados muito satisfatórios e não estamos limitados pela dimensão da nossa rede.

Problema (7.9)

Utilizando o algoritmo *annealing_7.9.py* com $N = 12$, $\sigma_{inicial} = 0.25$, $\Upsilon = 0.01$ e *acc_rate* em torno de 0.5 obtemos a figura X, a condição de parada do programa foi de que se $\sigma < e^{-7}$

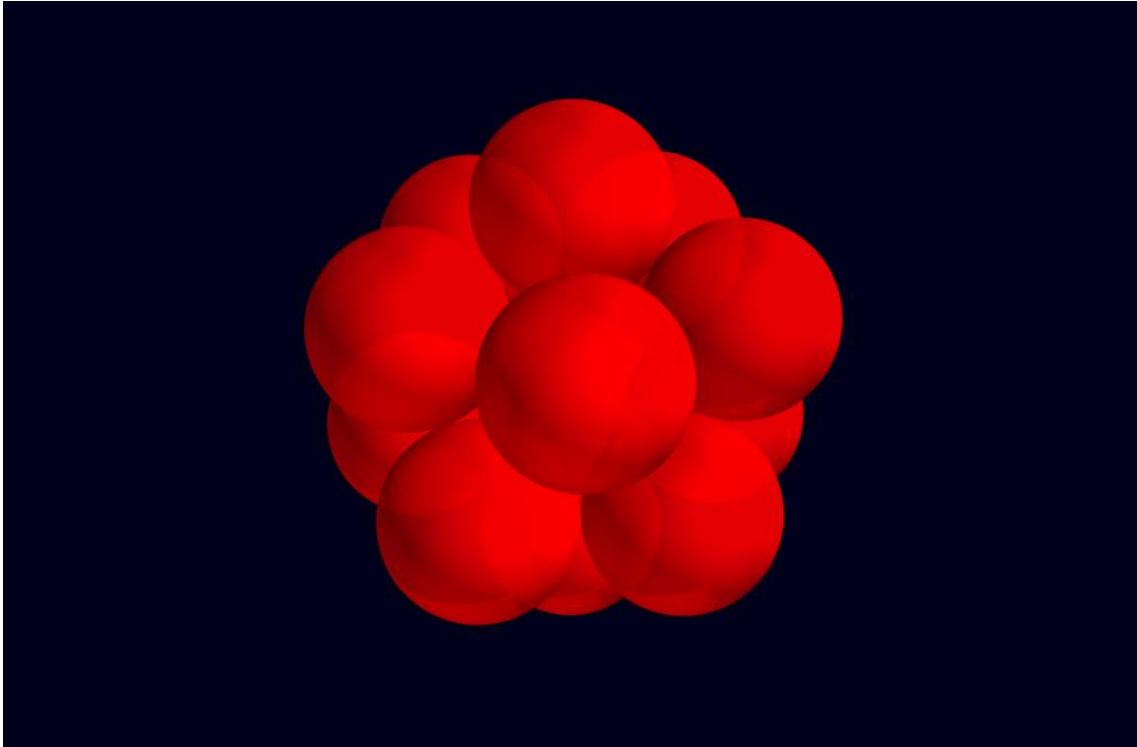


Figura 11 - Representação 3D do arranjo dodecaédrico por simulação annealing para 12 esferas idênticas sobre uma esfera unitária para $\Upsilon = 0.01$.

Como podemos ver pela figura 11 nosso programa converge para um arranjo dodecaédrico, com valores finais:

$r = 0.525731043846$ | $\eta = 0.896094896715$ | $R = 1.10850823572$ | *acc_rate* = 0.19 | $\sigma = 5.96046447754e-08$

Utilizando o mesmo algoritmo porem mudando apenas o valor do número de esferas para $N = 13$ e utilizando valores diferentes de Υ obtemos as figuras listadas abaixo

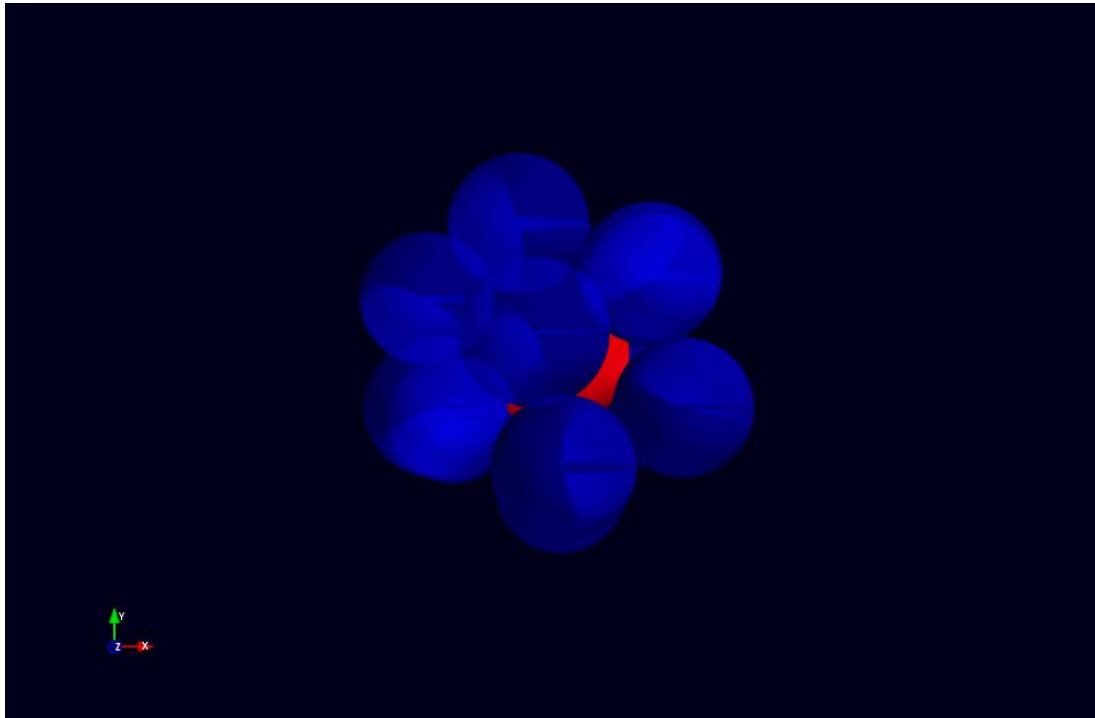


Figura 12 - Representação 3D do arranjo maximizado por simulação annealing para 13 esferas idênticas sobre uma esfera unitária para $\gamma = 0.01$

Para $\gamma = 0.01$ e $N = 13$ podemos observar a convergência para o valor de otimizado R

r = 0.276472916392	eta = 0.253358886993	R = 0.382118268487	acc rate = 0.34	sigma = 0.5
r = 0.362144715193	eta = 0.441207758791	R = 0.567753726934	acc rate = 0.49	sigma = 0.25
r = 0.40834076833	eta = 0.566607819733	R = 0.690162083972	acc rate = 0.44	sigma = 0.125
r = 0.43569692179	eta = 0.649392670289	R = 0.77209736862	acc rate = 0.44	sigma = 0.0625
r = 0.45161184677	eta = 0.700605655851	R = 0.823525898782	acc rate = 0.51	sigma = 0.03125
r = 0.460197714335	eta = 0.729193020712	R = 0.852530132896	acc rate = 0.44	sigma = 0.03125
r = 0.465478558079	eta = 0.747115477372	R = 0.870832340056	acc rate = 0.47	sigma = 0.015625
r = 0.469310305405	eta = 0.760283445726	R = 0.884340340853	acc rate = 0.41	sigma = 0.015625
r = 0.47185182779	eta = 0.769093896002	R = 0.893408048379	acc rate = 0.62	sigma = 0.0078125
r = 0.473851945216	eta = 0.776070570655	R = 0.900605715269	acc rate = 0.65	sigma = 0.00390625
r = 0.475326109466	eta = 0.781237018537	R = 0.905945803747	acc rate = 0.61	sigma = 0.00390625
r = 0.476310797949	eta = 0.784699570125	R = 0.90952953791	acc rate = 0.54	sigma = 0.001953125
r = 0.476962571542	eta = 0.786996560393	R = 0.911909063464	acc rate = 0.42	sigma = 0.001953125
r = 0.477401276162	eta = 0.788544939406	R = 0.913514048897	acc rate = 0.49	sigma = 0.0009765625
r = 0.477678422888	eta = 0.789524060817	R = 0.914529370065	acc rate = 0.42	sigma = 0.0009765625
r = 0.477849152495	eta = 0.790127591603	R = 0.915155370864	acc rate = 0.48	sigma = 0.00048828125
r = 0.477974182562	eta = 0.79056975137	R = 0.915614068491	acc rate = 0.6	sigma = 0.000244140625
r = 0.478051491932	eta = 0.790843225364	R = 0.915897803216	acc rate = 0.53	sigma = 0.000244140625
r = 0.478107057785	eta = 0.791039819305	R = 0.916101788532	acc rate = 0.53	sigma = 0.0001220703125
r = 0.47816372631	eta = 0.791240345044	R = 0.916309866557	acc rate = 0.52	sigma = 6.103515625e-05
r = 0.478178679657	eta = 0.791293263699	R = 0.916364780463	acc rate = 0.55	sigma = 3.0517578125e-05
r = 0.478188149507	eta = 0.791326777822	R = 0.916399558681	acc rate = 0.56	sigma = 3.0517578125e-05
r = 0.478194439731	eta = 0.791349039615	R = 0.916422660356	acc rate = 0.48	sigma = 1.52587890625e-05
r = 0.478198436556	eta = 0.791363185016	R = 0.916437339512	acc rate = 0.43	sigma = 1.52587890625e-05
r = 0.478201298609	eta = 0.791373314371	R = 0.916467402917	acc rate = 0.48	sigma = 7.62939453125e-06
r = 0.47820319303	eta = 0.791380019135	R = 0.916454808926	acc rate = 0.55	sigma = 3.81469726562e-06
r = 0.47820448002	eta = 0.791384574087	R = 0.916459535792	acc rate = 0.42	sigma = 3.81469726562e-06
r = 0.478205276811	eta = 0.791387394124	R = 0.916462462266	acc rate = 0.41	sigma = 1.90734863281e-06
r = 0.478205806166	eta = 0.791389267642	R = 0.916464406498	acc rate = 0.36	sigma = 1.90734863281e-06
r = 0.478206150711	eta = 0.791390487071	R = 0.916465671954	acc rate = 0.48	sigma = 9.53674316406e-07
r = 0.478206383598	eta = 0.791391311319	R = 0.916466527313	acc rate = 0.45	sigma = 4.76837158203e-07
r = 0.478206621997	eta = 0.791392155075	R = 0.916467402917	acc rate = 0.45	sigma = 2.38418579102e-07
r = 0.478206686464	eta = 0.791392383238	R = 0.916467639692	acc rate = 0.21	sigma = 2.38418579102e-07
r = 0.478206730967	eta = 0.791392540746	R = 0.916467803145	acc rate = 0.59	sigma = 1.19209289551e-07
r = 0.478206752793	eta = 0.791392617994	R = 0.916467883309	acc rate = 0.19	sigma = 5.96046447754e-08

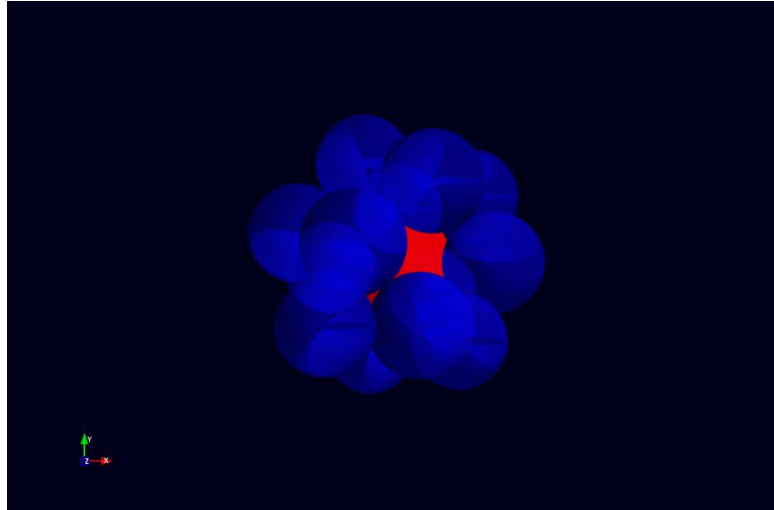


Figura 13 - Representação 3D do arranjo maximizado por simulação annealing para 13 esferas idênticas sobre uma esfera unitária para $\gamma = 0.05$

Para $\gamma = 0.05$ e $N = 13$ podemos observar a convergência para o valor otimizado de R

r = 0.452646199392	eta = 0.704013680318	R = 0.826971876123	acc rate = 0.37	sigma = 0.0625
r = 0.47315343101	eta = 0.773629740571	R = 0.898085816363	acc rate = 0.41	sigma = 0.00390625
r = 0.47617634834	eta = 0.78422624633	R = 0.909039419719	acc rate = 0.6	sigma = 0.0009765625
r = 0.476701595312	eta = 0.786076336144	R = 0.910955567688	acc rate = 0.49	sigma = 0.0001220703125
r = 0.476777262182	eta = 0.786343076824	R = 0.911231924228	acc rate = 0.53	sigma = 1.52587890625e-05
r = 0.476787798226	eta = 0.786380222809	R = 0.911270411143	acc rate = 0.32	sigma = 3.81469726562e-06
r = 0.476789222878	eta = 0.786385245658	R = 0.911275615347	acc rate = 0.51	sigma = 4.76837158203e-07
r = 0.476789407081	eta = 0.7863858951	R = 0.911276288237	acc rate = 0.18	sigma = 5.96046447754e-08

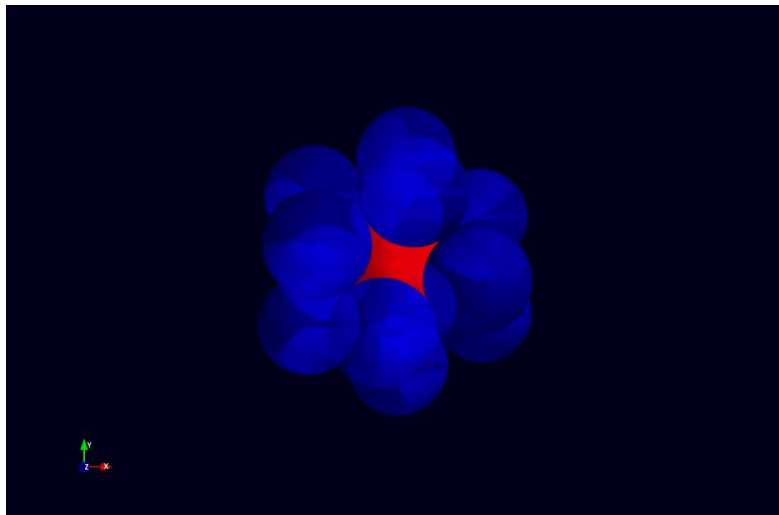


Figura 14 - Representação 3D do arranjo maximizado por simulação annealing para 13 esferas idênticas sobre uma esfera unitária para $\gamma = 0.01$

Para $\gamma = 0.1$ e $N = 13$ podemos observar a convergência para o valor de otimizado R

r = 0.472663296537	eta = 0.771919824889	R = 0.896321635558	acc rate = 0.55	sigma = 0.00390625
r = 0.476151070079	eta = 0.78413727465	R = 0.908947299274	acc rate = 0.37	sigma = 0.000244140625
r = 0.476286687326	eta = 0.784614677043	R = 0.909441627317	acc rate = 0.45	sigma = 3.81469726562e-06
r = 0.476289223256	eta = 0.784623605747	R = 0.90945087328	acc rate = 0.3	sigma = 1.19209289551e-07
r = 0.476289227205	eta = 0.78462361965	R = 0.909450887677	acc rate = 0.19	sigma = 5.96046447754e-08

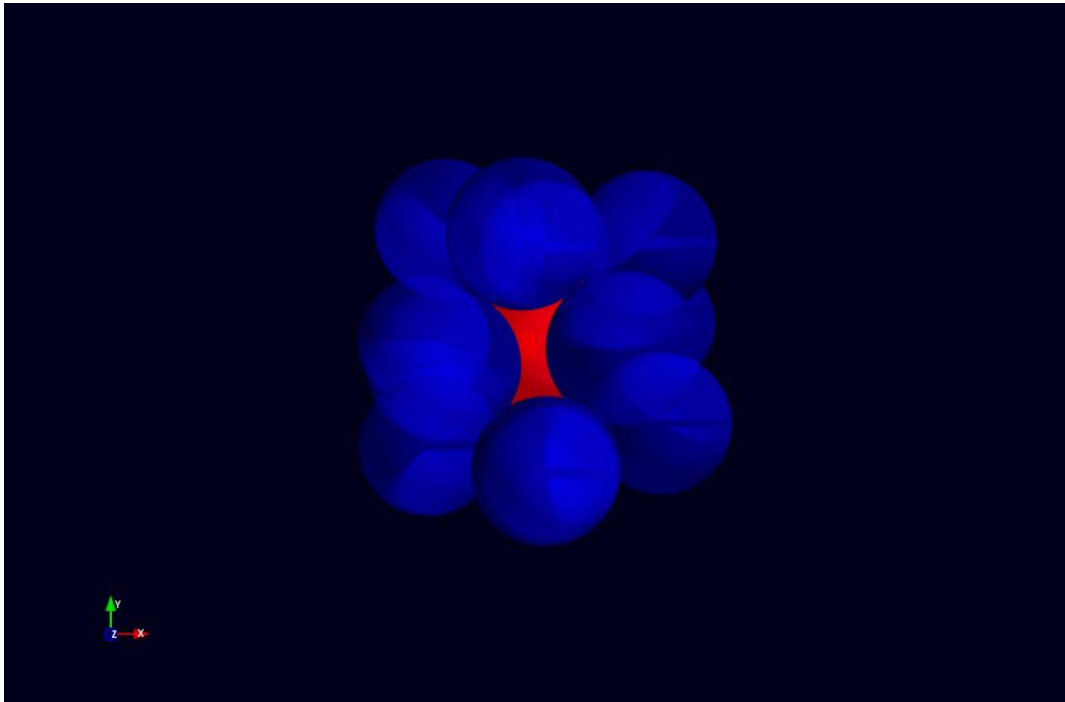


Figura 15 - Representação 3D do arranjo maximizado por simulação annealing para 13 esferas idênticas sobre uma esfera unitária para $\gamma = 0.01$

Para $\gamma = 0.5$ e $N = 13$ podemos observar a convergência para o melhor valor de R

$r = 0.475584915462$ | $\eta = 0.782146184903$ | $R = 0.906886413996$ | $\text{acc rate} = 0.42$ | $\sigma = 1.90734863281e-06$
 $r = 0.475586997826$ | $\eta = 0.782153502688$ | $R = 0.906893985952$ | $\text{acc rate} = 0.19$ | $\sigma = 5.96046447754e-08$

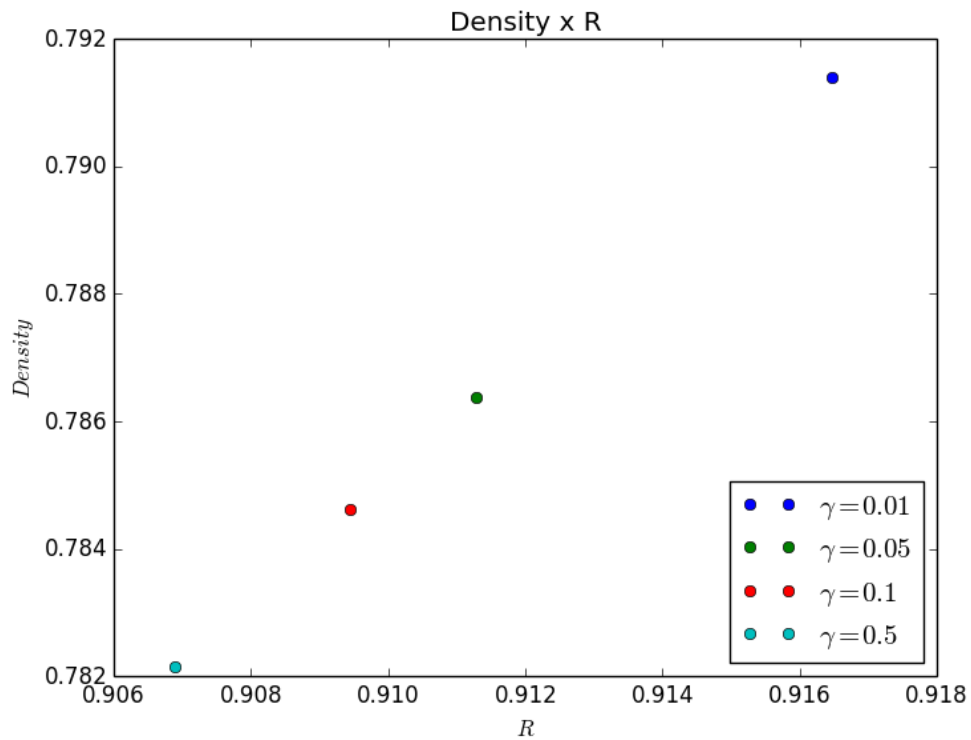


Figura 16 – Gráfico Densidade em função de R para diferentes valores de γ , onde R é o raio ao final do processo de simulação annealing

Como podemos observar para valores maiores de Υ temos uma convergência mais rápida, porém não temos um valor maximizado do Raio das esferas, ou seja quanto menor nosso Υ melhor será a qualidade da nossa simulação, porem também devemos levar em conta que quando Υ é muito pequeno nossa simulação também levará muito tempo para terminar, pois nossa convergência será extremamente lenta.

Problema (7.10)

Utilizando o algoritmo annealing_7.10.py, que nada mais é que o mesmo algoritmo do problema anterior porem com algumas implementações, onde $\sigma_{\text{inicial}} = 0.25$, $\Upsilon = 0.01$ e restrição de parada do programa sendo $\sigma_{\text{final}} = 1.0 \times e^{-7}$, podemos observar a convergência para o melhor valor de η para $N = 19$

Primeiro realizaremos a análise para $N = 19$, ao executar o programa obtemos seguinte saída:

$N = 19$

r = 0.352497606245	eta = 0.609779207319	R = 0.544395834896	acc rate = 0.56	sigma = 0.0625
r = 0.391814216958	eta = 0.759578605701	R = 0.644234422906	acc rate = 0.43	sigma = 0.015625
r = 0.401426728415	eta = 0.799034162825	R = 0.670639247476	acc rate = 0.61	sigma = 0.00390625
r = 0.403633250192	eta = 0.808251729925	R = 0.676820514092	acc rate = 0.33	sigma = 0.0009765625
r = 0.404126942228	eta = 0.810322349792	R = 0.678209791427	acc rate = 0.5	sigma = 0.000244140625
r = 0.404244232904	eta = 0.810814729517	R = 0.678540192527	acc rate = 0.38	sigma = 6.103515625e-05
r = 0.404270564065	eta = 0.810925289738	R = 0.678614383777	acc rate = 0.33	sigma = 1.52587890625e-05
r = 0.404277046001	eta = 0.810952507645	R = 0.678632648428	acc rate = 0.38	sigma = 3.81469726562e-06
r = 0.404278575589	eta = 0.810958930519	R = 0.678636958522	acc rate = 0.35	sigma = 9.53674316406e-07
r = 0.404278945512	eta = 0.810960483863	R = 0.678638000899	acc rate = 0.59	sigma = 1.19209289551e-07
r = 0.404279004275	eta = 0.810960730616	R = 0.678638166484	acc rate = 0.18	sigma = 5.96046447754e-08

disk 0 [connectivity 4] is connected with 2, 9, 15, 16,
 disk 1 [connectivity 4] is connected with 5, 6, 8, 15,
 disk 2 [connectivity 3] is connected with 0, 8, 9,
 disk 3 [connectivity 3] is connected with 9, 13, 18,
 disk 4 [connectivity 4] is connected with 7, 9, 13, 16,
 disk 5 [connectivity 4] is connected with 1, 6, 10, 17,
 disk 6 [connectivity 5] is connected with 1, 5, 8, 14, 18,
 disk 7 [connectivity 4] is connected with 4, 10, 16, 17,
 disk 8 [connectivity 4] is connected with 1, 2, 6, 18,
 disk 9 [connectivity 5] is connected with 0, 2, 3, 4, 13,
 disk 10 [connectivity 3] is connected with 5, 7, 14,
 disk 11 [connectivity 3] is connected with 13, 14, 18,
 disk 12 [connectivity 0] is connected with
 disk 13 [connectivity 4] is connected with 3, 4, 9, 11,
 disk 14 [connectivity 3] is connected with 6, 10, 11,
 disk 15 [connectivity 3] is connected with 0, 1, 16,
 disk 16 [connectivity 5] is connected with 0, 4, 7, 15, 17,
 disk 17 [connectivity 3] is connected with 5, 7, 16,
 disk 18 [connectivity 4] is connected with 3, 6, 8, 11.

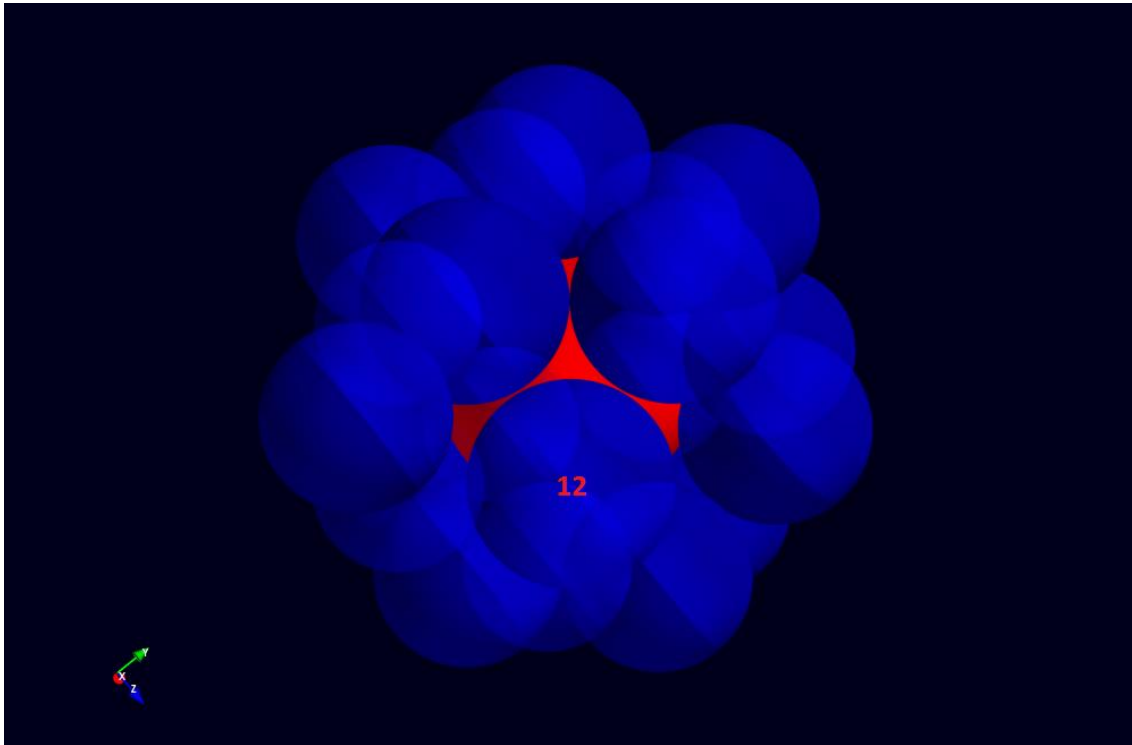


Figura 17 - Representação 3D do arranjo maximizado por simulação annealing para 19 esferas idênticas sobre uma esfera unitária com $\gamma = 0.01$

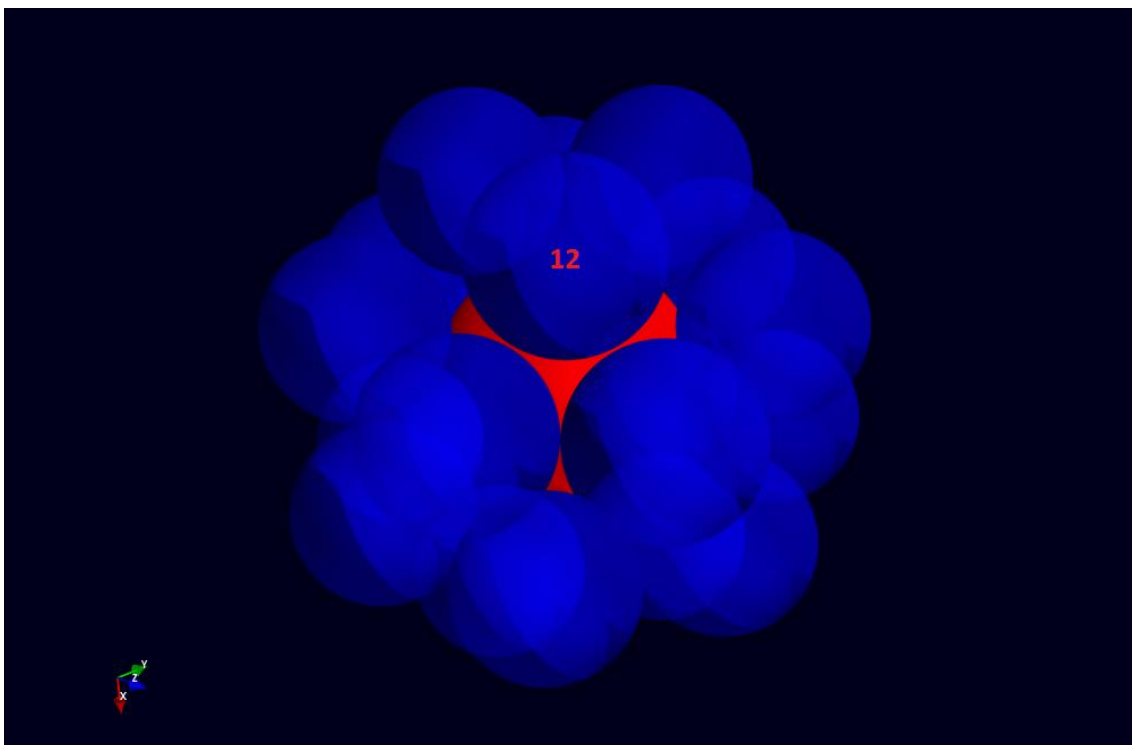


Figura 18 - Representação 3D do arranjo maximizado por simulação annealing para 13 esferas idênticas sobre uma esfera unitária para $\gamma = 0.01$

Como podemos ver pela saída desta simulação o valor de η converge para 0.810960730616, que é exatamente o valor que esperávamos de $\eta = 0.81096$, também podemos ver que a esfera 12 esta desconectada das demais tanto para na nossa saída numérica quanto na saída da imagem 3D, que podemos ver claramente na figura X e na figura X+1 que é apenas uma pequena rotação da figura X. Essa simulação foi realizada diversas vezes e sempre convergimos para o mesmo valor de $\eta = 0.81096$ e temos uma esfera desconectada das demais, ou seja esse representa o estado otimizado para $N = 19$.

Agora realizaremos a análise para $N = 15$, onde $\sigma_{\text{inicial}} = 0.25$, $\Upsilon = 0.05$ e restrição de parada do programa sendo $\sigma_{\text{final}} = 1.0 \times e^{-12}$ ao executarmos o programa obtemos a seguinte saída:

$N = 15$

r = 0.424431266648	eta = 0.709048806027	R = 0.737411958039	acc rate = 0.27	sigma = 0.0625
r = 0.447807327292	eta = 0.794024409804	R = 0.810962096068	acc rate = 0.28	sigma = 0.0078125
r = 0.450669692752	eta = 0.804819152783	R = 0.820398377454	acc rate = 0.47	sigma = 0.0009765625
r = 0.451216005541	eta = 0.806889247567	R = 0.822210578473	acc rate = 0.52	sigma = 0.0001220703125
r = 0.451307862914	eta = 0.807237623817	R = 0.822515637477	acc rate = 0.49	sigma = 3.0517578125e-05
r = 0.451324565725	eta = 0.807300980099	R = 0.82257111861	acc rate = 0.34	sigma = 7.62939453125e-06
r = 0.451327493453	eta = 0.807312085718	R = 0.822580843889	acc rate = 0.41	sigma = 9.53674316406e-07
r = 0.4513279796	eta = 0.807313929805	R = 0.822582458773	acc rate = 0.5	sigma = 2.38418579102e-07
r = 0.451328071309	eta = 0.807314277682	R = 0.822582763413	acc rate = 0.44	sigma = 2.98023223877e-08
r = 0.451328090231	eta = 0.807314349458	R = 0.822582826267	acc rate = 0.35	sigma = 7.45058059692e-09
r = 0.451328093379	eta = 0.807314361398	R = 0.822582836723	acc rate = 0.39	sigma = 9.31322574615e-10
r = 0.451328093977	eta = 0.807314363667	R = 0.82258283871	acc rate = 0.41	sigma = 2.32830643654e-10
r = 0.451328094091	eta = 0.8073143641	R = 0.822582839089	acc rate = 0.41	sigma = 2.91038304567e-11
r = 0.451328094111	eta = 0.807314364175	R = 0.822582839155	acc rate = 0.44	sigma = 7.27595761418e-12
r = 0.451328094114	eta = 0.807314364188	R = 0.822582839166	acc rate = 0.54	sigma = 9.09494701773e-13
r = 0.451328094115	eta = 0.80731436419	R = 0.822582839168	acc rate = 0.48	sigma = 2.27373675443e-13
r = 0.451328094115	eta = 0.807314364191	R = 0.822582839169	acc rate = 0.18	sigma = 5.68434188608e-14

disk 0 [connectivity 3] is connected with 1, 6, 8,
 disk 1 [connectivity 4] is connected with 0, 2, 7, 14,
 disk 2 [connectivity 4] is connected with 1, 6, 9, 13,
 disk 3 [connectivity 4] is connected with 5, 10, 11, 13,
 disk 4 [connectivity 4] is connected with 5, 7, 12, 14,
 disk 5 [connectivity 4] is connected with 3, 4, 9, 14,
 disk 6 [connectivity 5] is connected with 0, 2, 8, 11, 13,
 disk 7 [connectivity 4] is connected with 1, 4, 12, 14,
 disk 8 [connectivity 4] is connected with 0, 6, 11, 12,
 disk 9 [connectivity 3] is connected with 2, 5, 13,
 disk 10 [connectivity 3] is connected with 3, 11, 12,
 disk 11 [connectivity 5] is connected with 3, 6, 8, 10, 13,
 disk 12 [connectivity 4] is connected with 4, 7, 8, 10,
 disk 13 [connectivity 5] is connected with 2, 3, 6, 9, 11,
 disk 14 [connectivity 4] is connected with 1, 4, 5, 7,

3 – disks make 3 connectivity, 3 - disks make 5 connectivity , 9 - disks make 4 connectivity

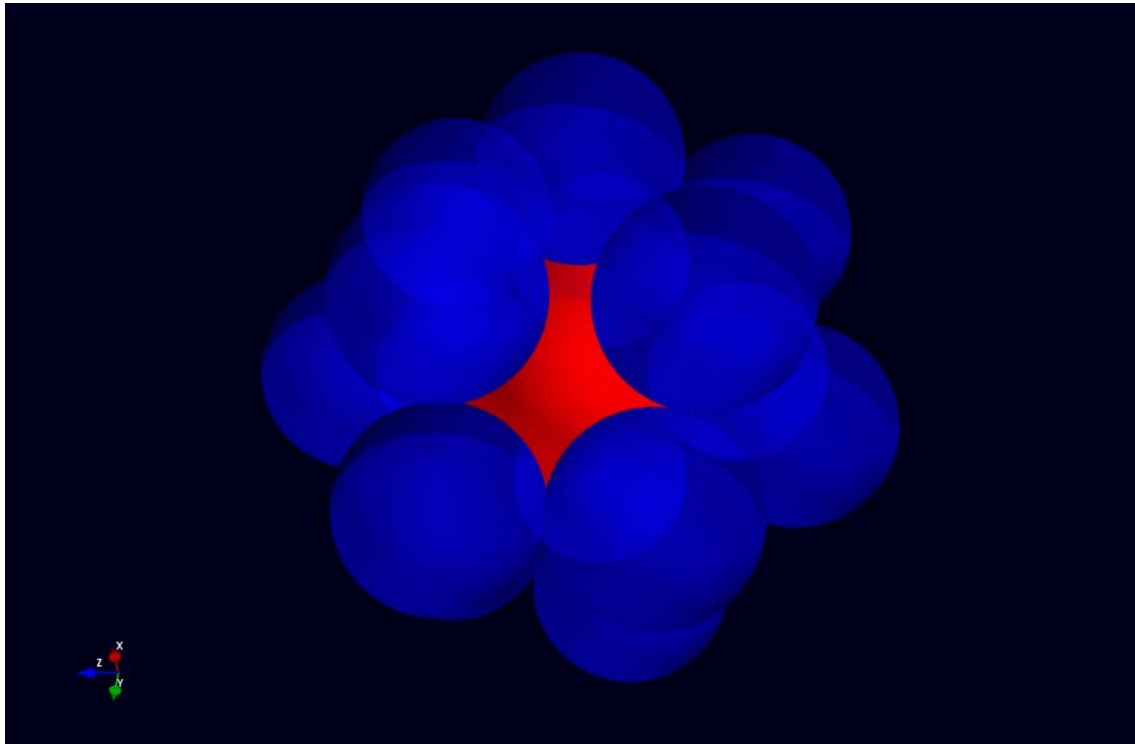


Figure 19 - Representação 3D do arranjo maximizado por simulação annealing para 15 esferas idênticas sobre uma esfera unitária para $\gamma = 0.05$

O programa foi executado diversas vezes para $N = 15$, e sempre que atingimos o estado otimizado chegamos a $\eta = 0.807314364191$, que é exatamente o valor esperado de $\eta = 0.807314$, apesar de não conseguir observar a diferença entre os 2 tipos de empacotamento para o estado otimizado observamos que os discos sempre seguem um mesmo padrão de conexão onde 3 discos fazem 3 conexões, 9 discos fazem 4 conexões e 3 discos fazem 5 conexões