

main

April 28, 2023

```
[ ]: import numpy as np
      from numba import jit
      import matplotlib.pyplot as plt
```

```
[ ]: @jit(nopython=True)
      def vizinhos(N: int):
          # Define a tabela de vizinhos
          L = int(np.sqrt(N))
          viz = np.zeros((N, 4), dtype=np.int16)
          for k in range(N):
              viz[k, 0] = k + 1
              if (k + 1) % L == 0:
                  viz[k, 0] = k + 1 - L
              viz[k, 1] = k + L
              if k > (N - L - 1):
                  viz[k, 1] = k + L - N
              viz[k, 2] = k - 1
              if k % L == 0:
                  viz[k, 2] = k + L - 1
              viz[k, 3] = k - L
              if k < L:
                  viz[k, 3] = k + N - L
          return viz
```

```
[ ]: @jit(nopython=True)
      def algoritmo_de_metropolis(L: int, T: float, passos: int):
          energia: np.ndarray = np.zeros(passos, dtype=np.int32)
          magnetização: np.ndarray = np.zeros(passos, dtype=np.int32)

          spins: np.ndarray = np.array([-1, 1], dtype=np.int8)

          variações_de_energia = np.array([8.0, 4.0, 0.0, -4.0, -8.0], dtype=np.
↪float64)
          expoentes = np.exp(variações_de_energia * 1 / T)

          N = L * L
          S = np.random.choice(spins, N)
```

```

viz = vizinhos(N)

for i in range(passos):
    for k in np.arange(N):
        índice = int(S[k] * np.sum(S[viz[k]]) * 0.5 + 2)
        if np.random.rand() < expoentes[índice]:
            S[k] = -1 * S[k]
        energia[i] = -np.sum(S * (S[viz[:, 0]] + S[viz[:, 1]]))
        magnetização[i] = np.sum(S)

return energia, magnetização

```

```

[ ]: N = 0
comprimento = 100
temperatura = 3
PASSOS_DE_MONTECARLO = 1000
energias = np.zeros((N, PASSOS_DE_MONTECARLO))
magnetizações = np.zeros((N, PASSOS_DE_MONTECARLO))

for i in range(N):
    energias[i], magnetizações[i] = algoritmo_de_metropolis(
        comprimento, temperatura, PASSOS_DE_MONTECARLO
    )

for e in energias:
    plt.title(f"Rede: {comprimento} Temperatura: {temperatura}")
    plt.xlabel("Número de passos de Monte Carlo")
    plt.ylabel("Energia")
    plt.plot(e)

# plt.savefig(f"energias{comprimento}T{temperatura}.png")
# plt.show()

for m in magnetizações:
    plt.title(f"Rede: {comprimento} Temperatura: {temperatura}")
    plt.xlabel("Número de passos de Monte Carlo")
    plt.ylabel("Magnetização")
    plt.plot(m)

# plt.savefig(f"magnetos{comprimento}T{temperatura}.png")
# plt.show()

```

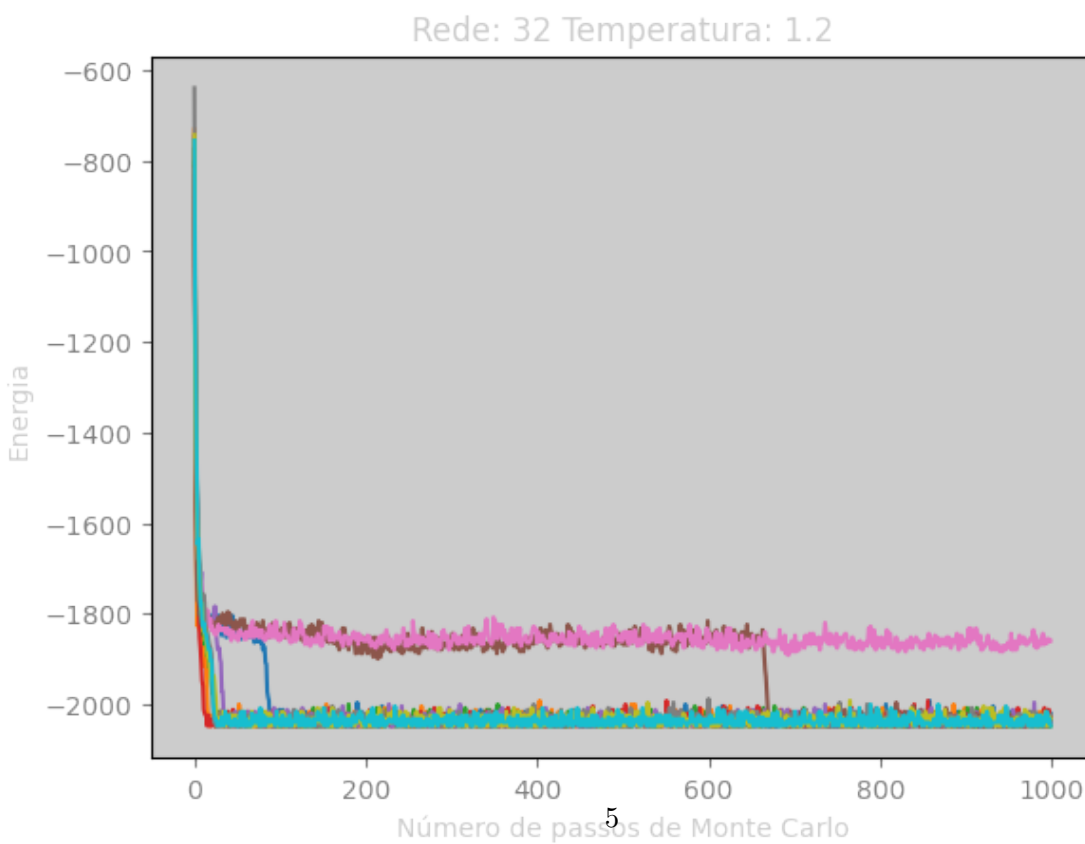
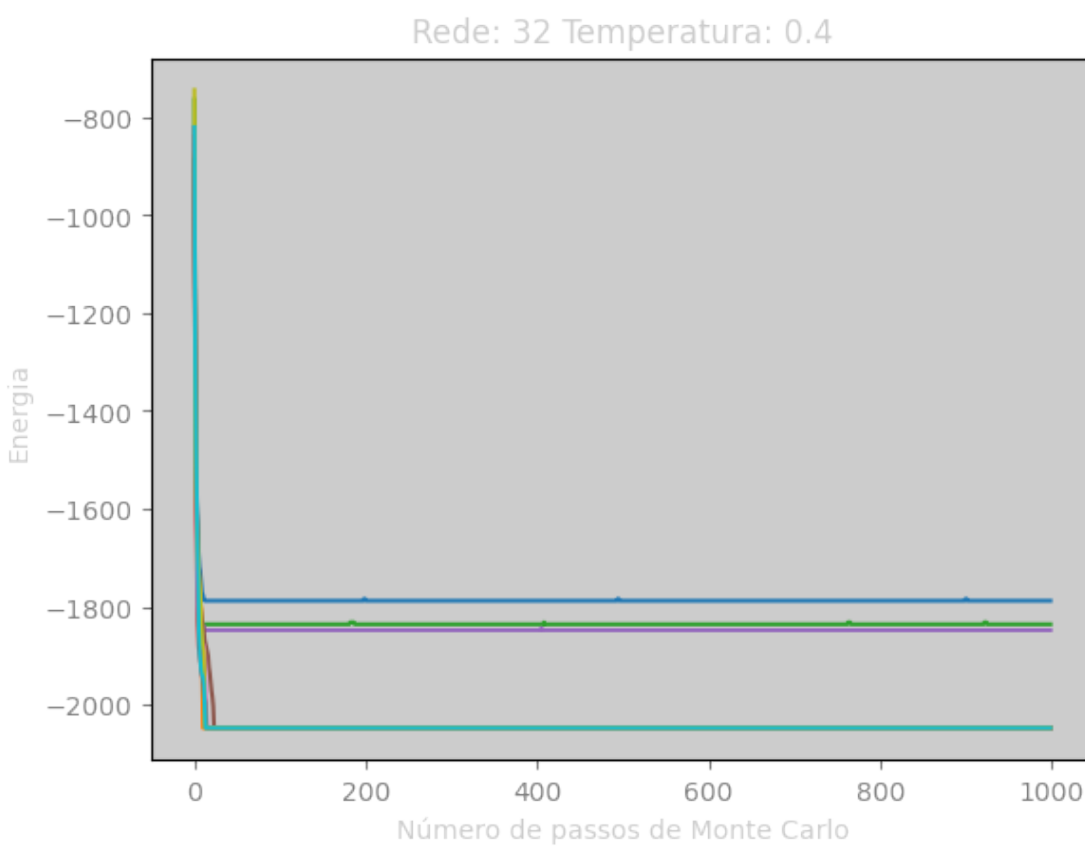
1 Análise

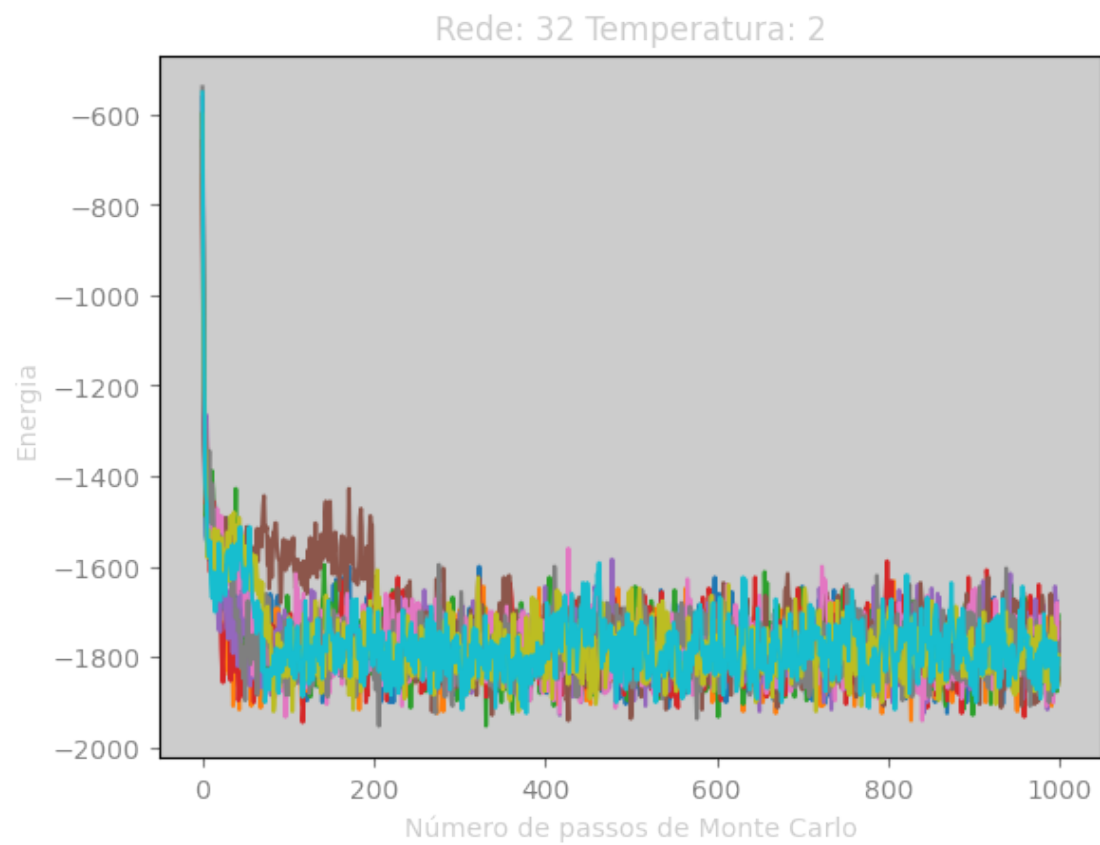
1.1 Geração das Instâncias

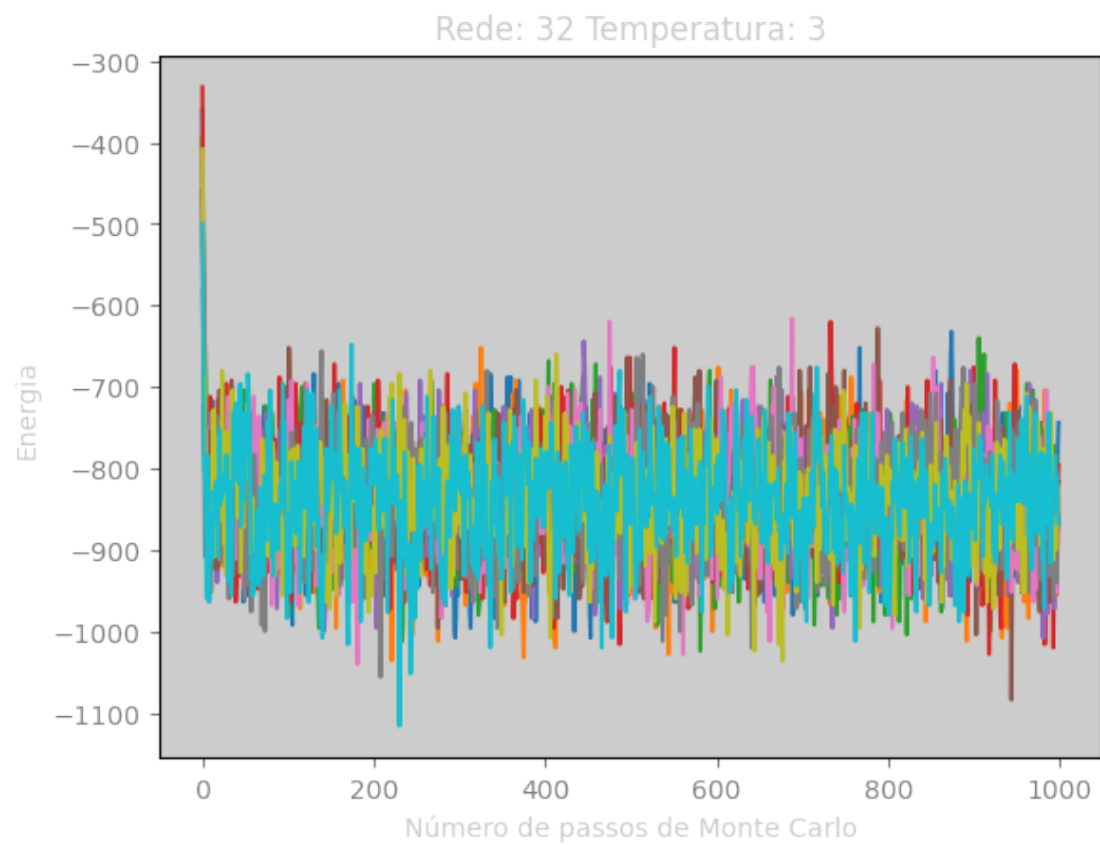
Foram fixadas 10 repetições em todos os experimentos gerados ($N=10$). Inicialmente, o comprimento da rede foi fixado, $C=32$ e variou-se a temperatura: 0.4, 1.2, 2.1, 3. Depois, a temperatura foi fixada, $T=1.7$ e o comprimento da rede foi modificado: 24, 48, 72, 100. Também foi gerado um caso “mínimo”, que combina o mínimo de comprimento ($C=24$) e temperatura ($T=0.4$) propostos, assim como um caso “máximo”, que combina o comprimento máximo da rede ($C=100$) e temperatura ($T=3$).

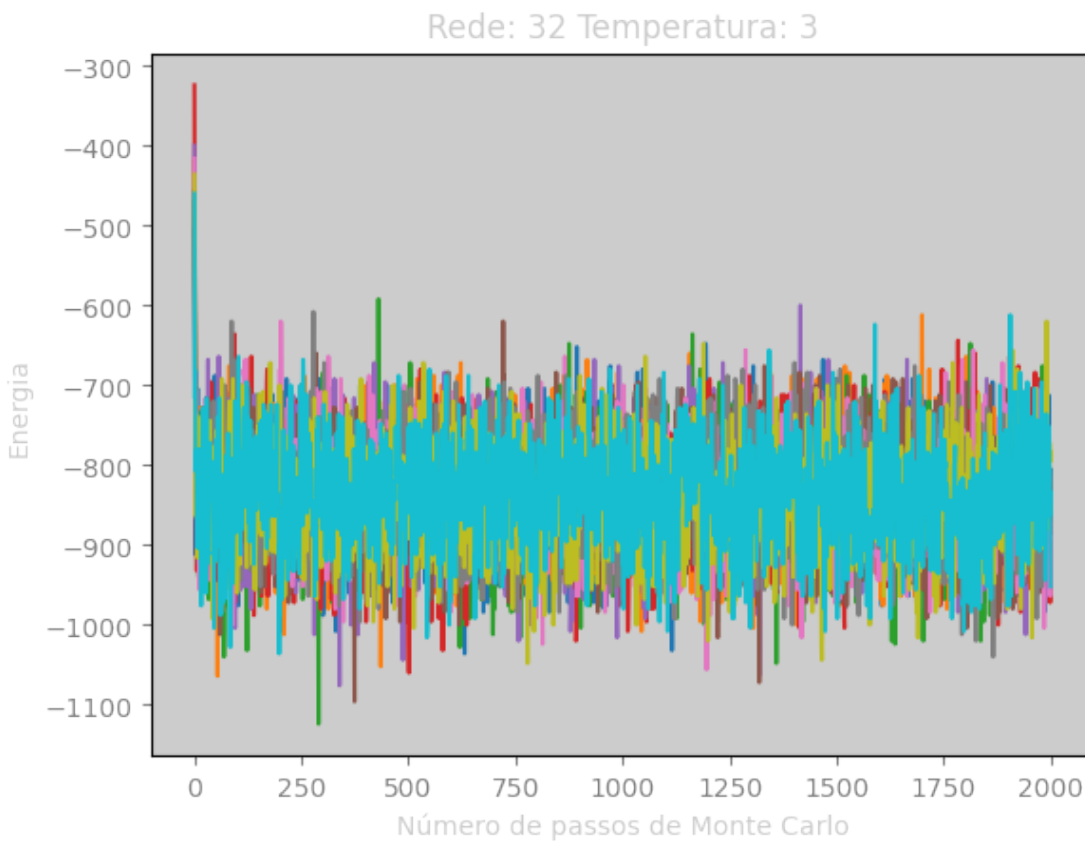
1.2 Energia

1.2.1 Variação de Temperatura



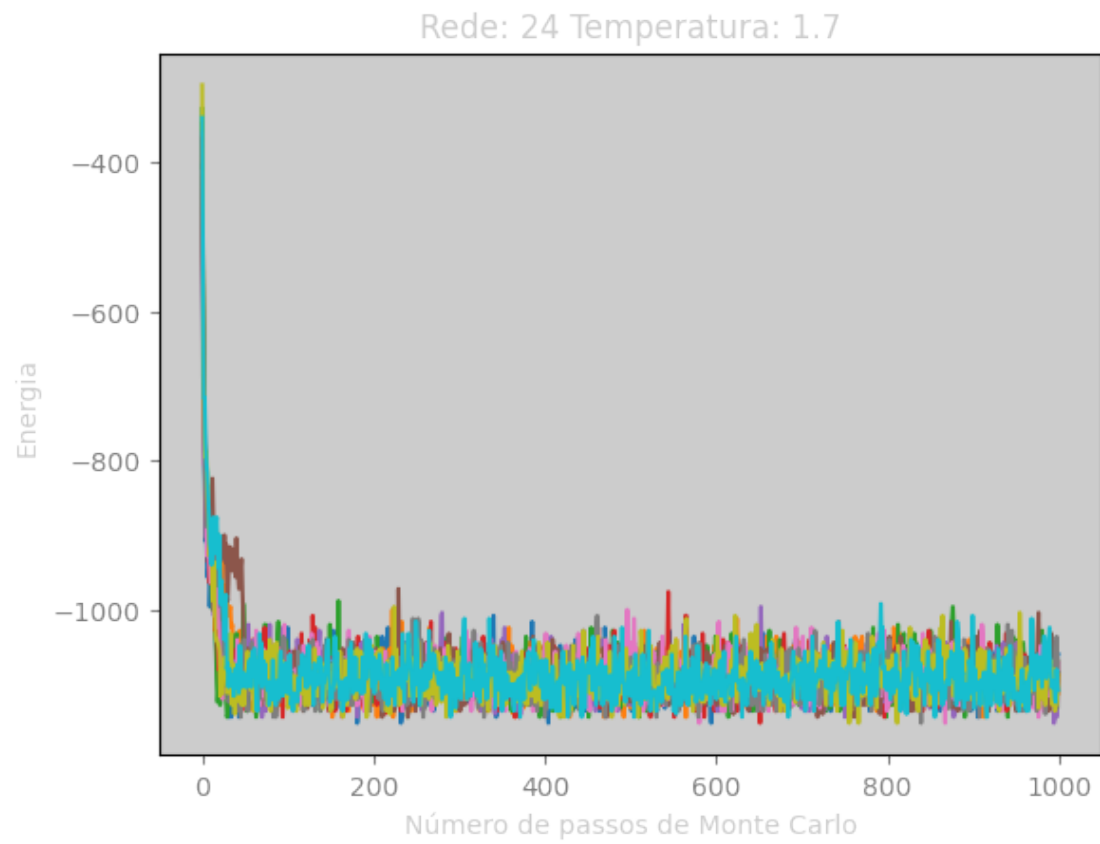


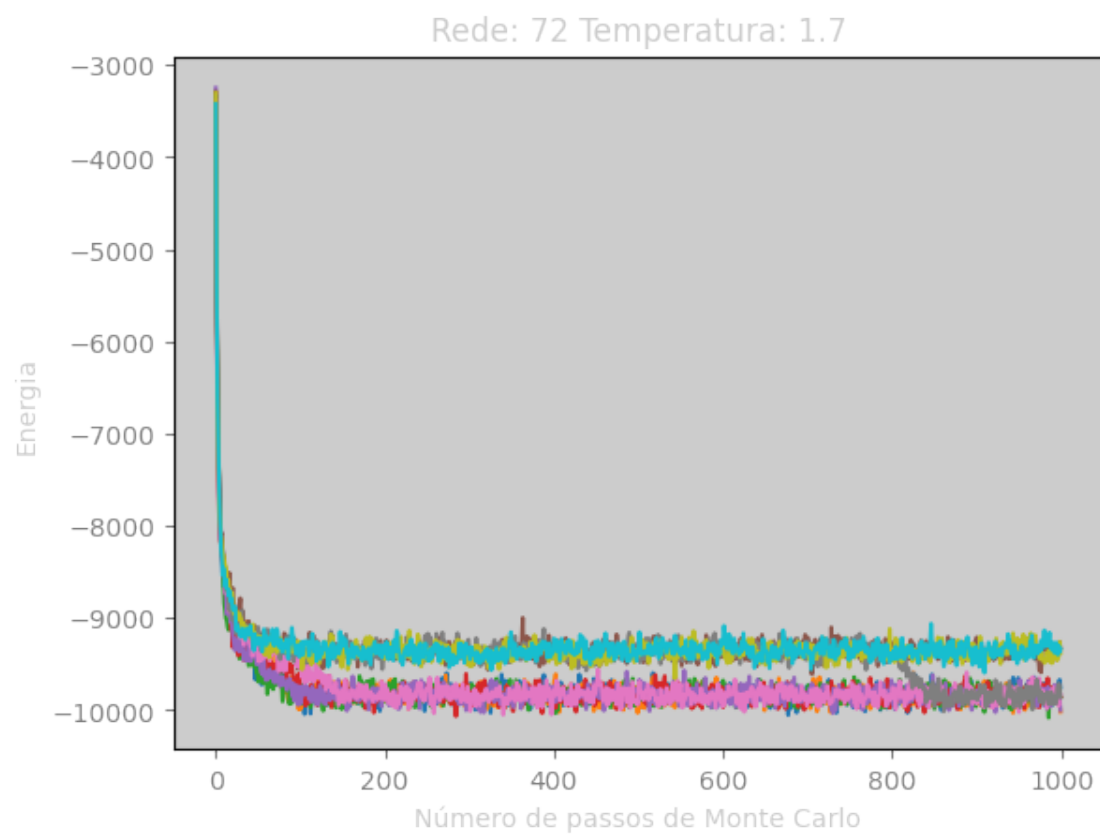
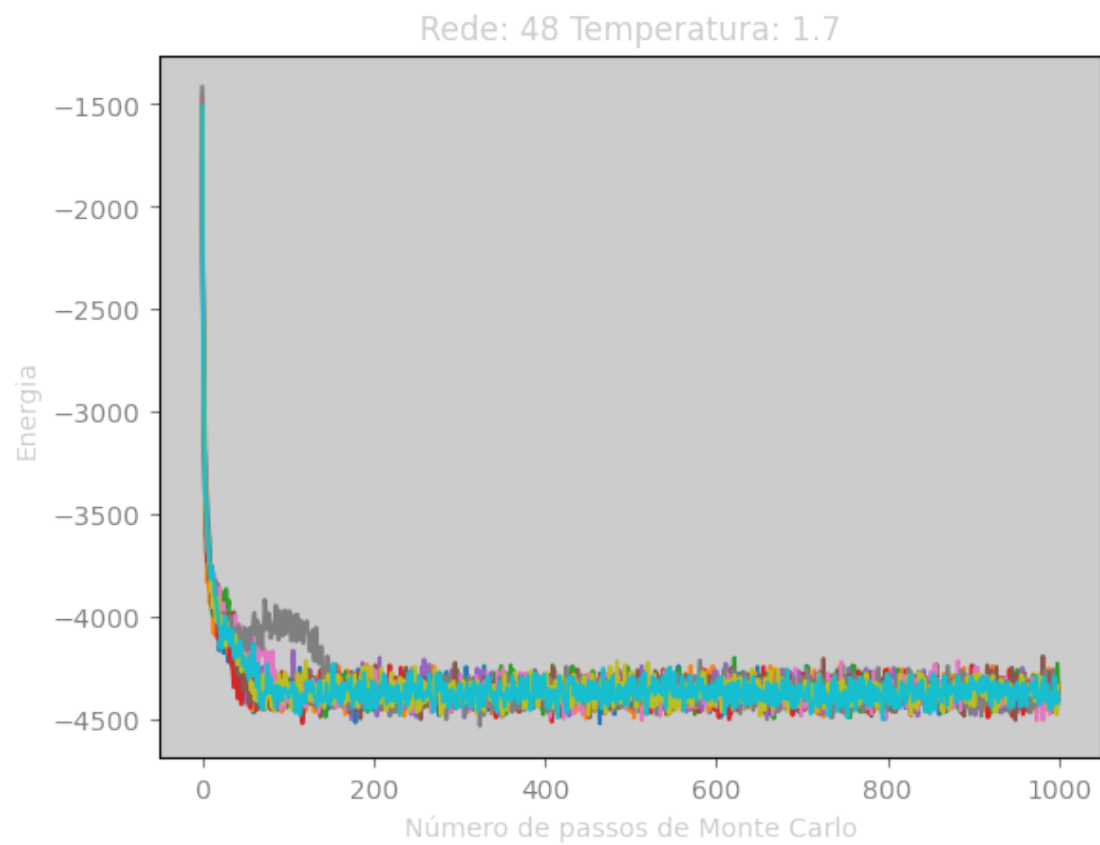


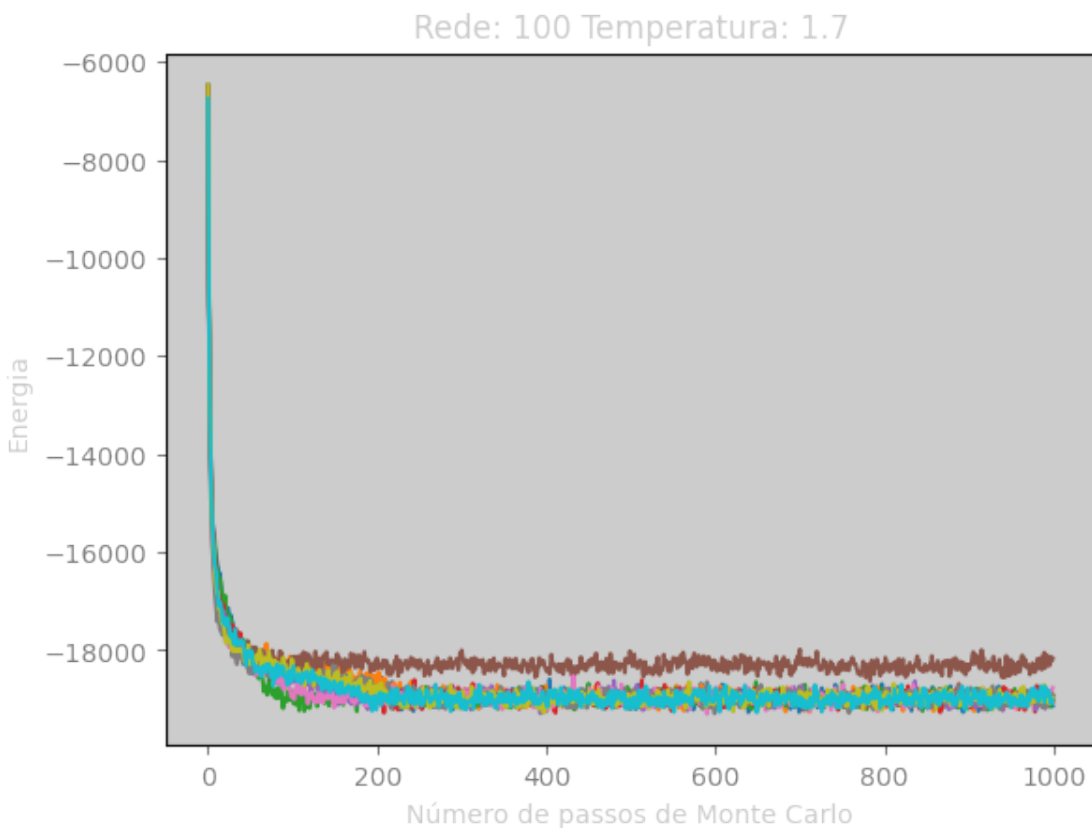


O aumento de temperatura torna a convergência muito mais lenta. Quando a temperatura é muito baixa, é possível que a energia converga para um valor mais baixo. Tentou-se fazer mais passos de Monte Carlo para averiguar se a convergência estava próxima, mas não houve diferença em relação à divergência entre 1000 e 2000 passos.

1.2.2 Variação de Comprimento

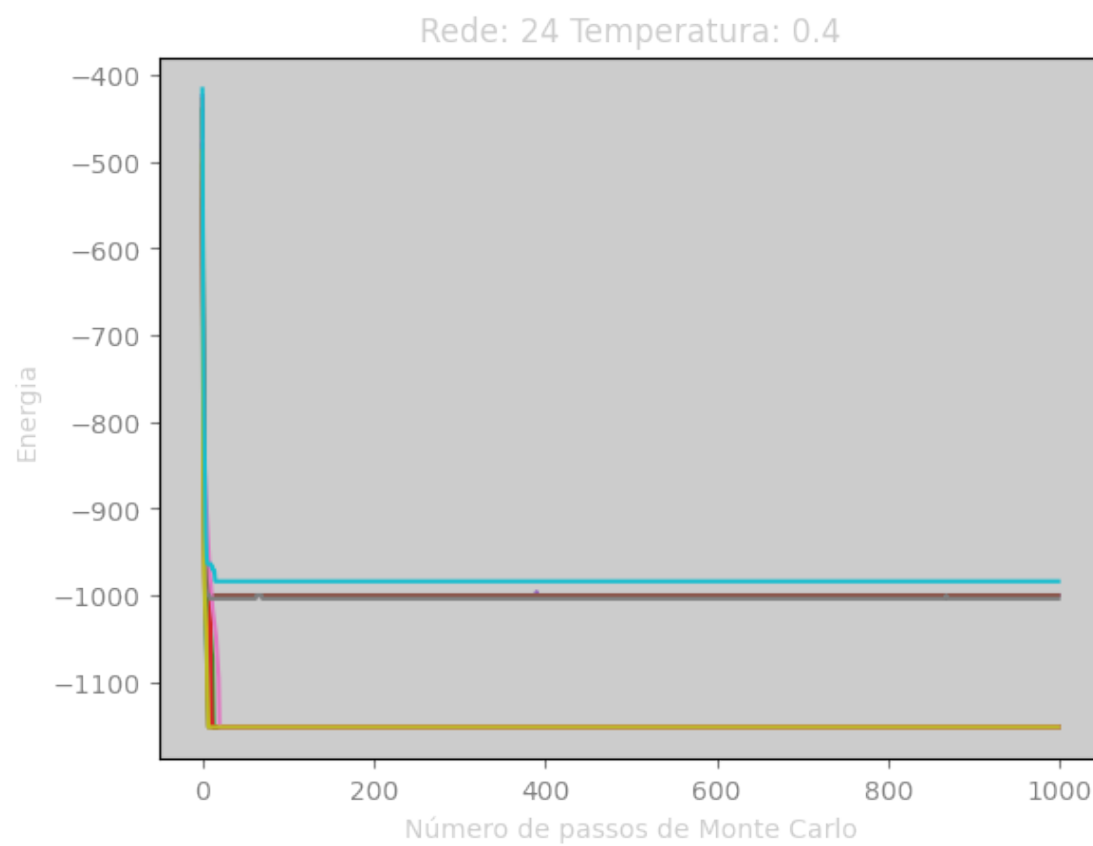


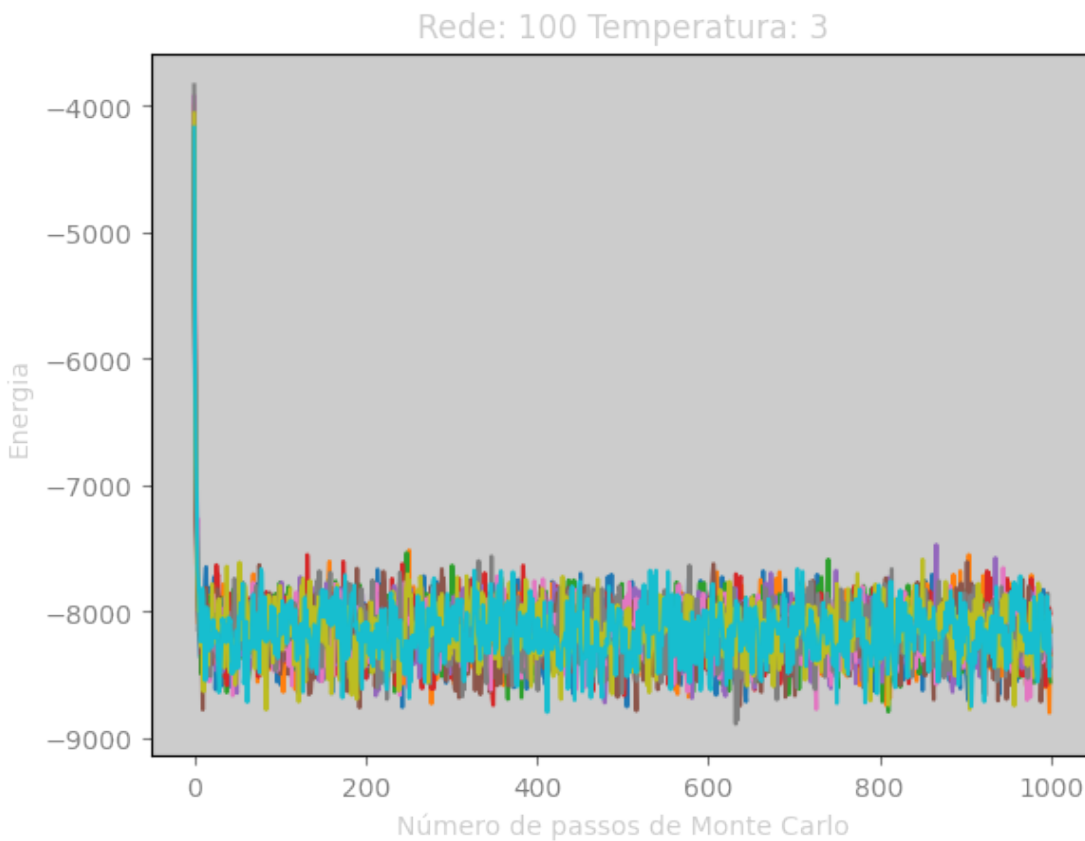




O tamanho da rede não possui tanta influência como a temperatura, na convergência. E energia total do sistema diminui conforme se aumenta o tamanho, o que faz parecer que a variação entre os picos e vales próximos da convergência é menor (eu diria que parece ser aproximadamente a mesma, mas não calculei isso). Não é possível afirmar se é mais comum que a convergência não ocorra com o aumento do tamanho da rede, com base nas imagens. Apesar de ser possível existir um viés.

1.2.3 Mínimo e Máximo

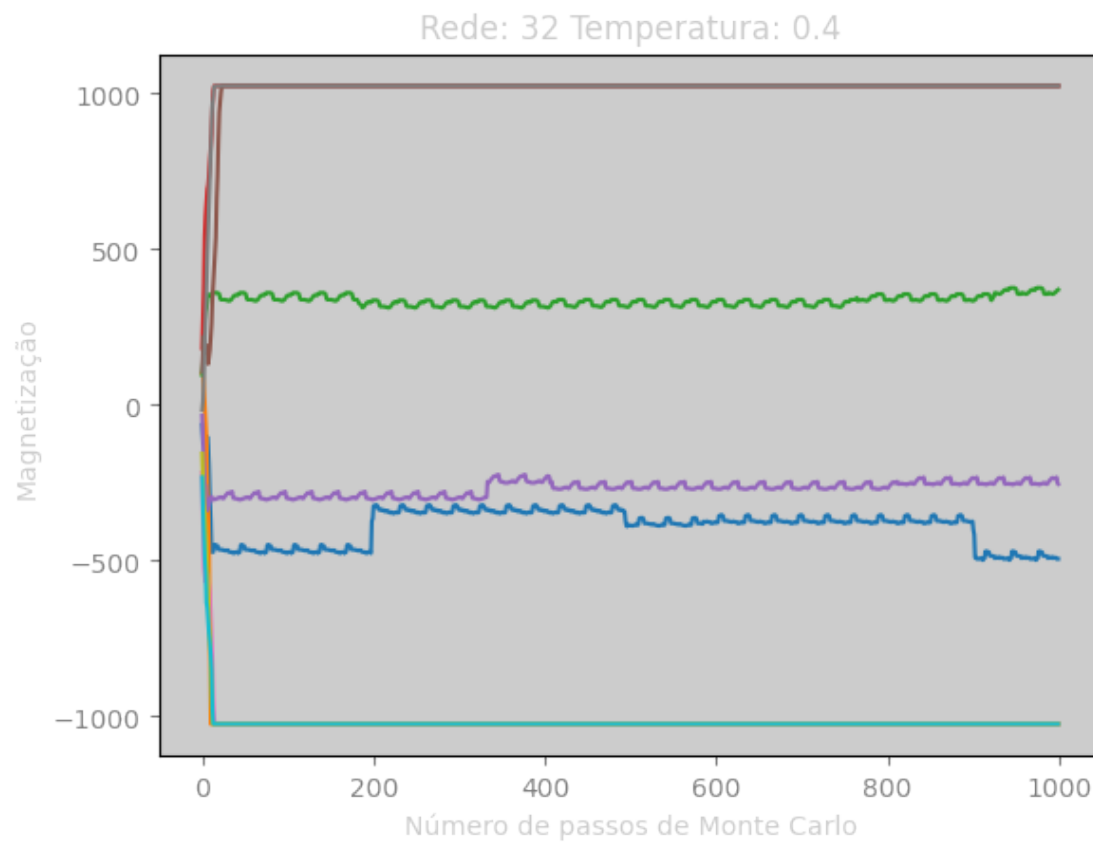


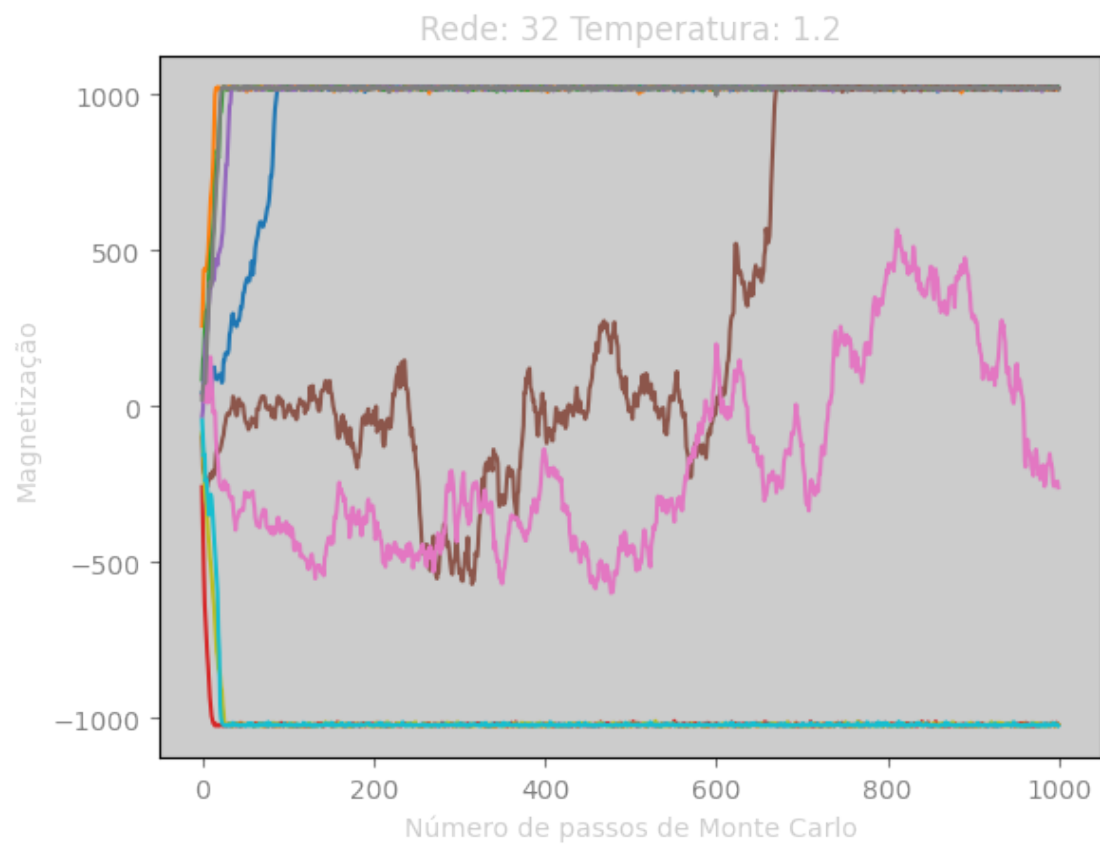


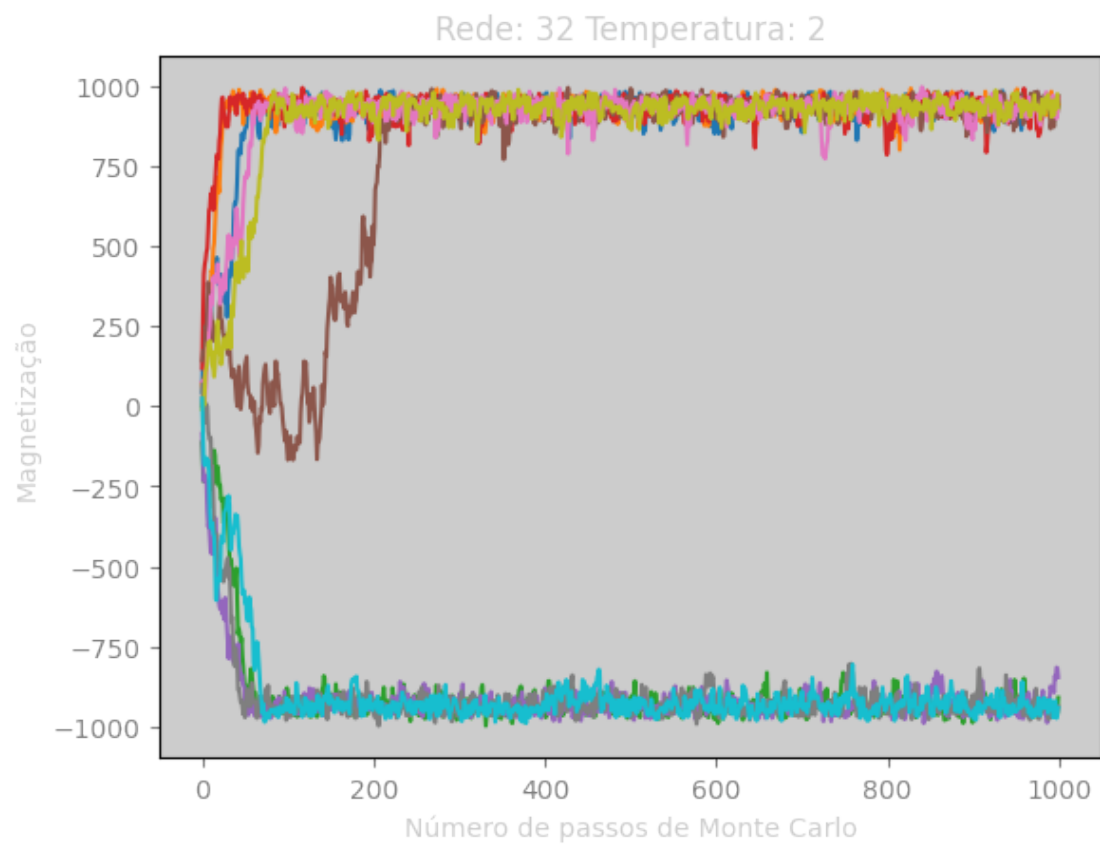
Analisando os casos extremos, e com base nas análises anteriores, é possível supor que o aumento da temperatura é o principal fator que contribui para a não convergência da energia.

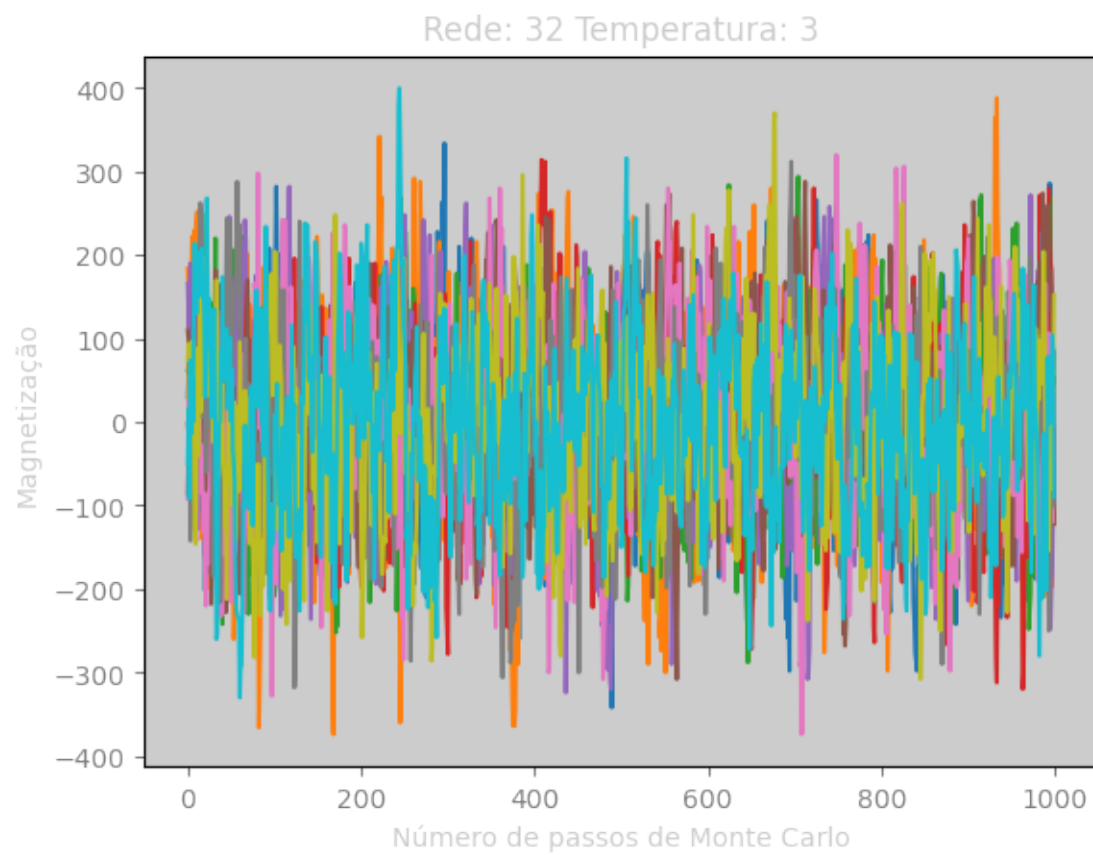
1.3 Magnetização

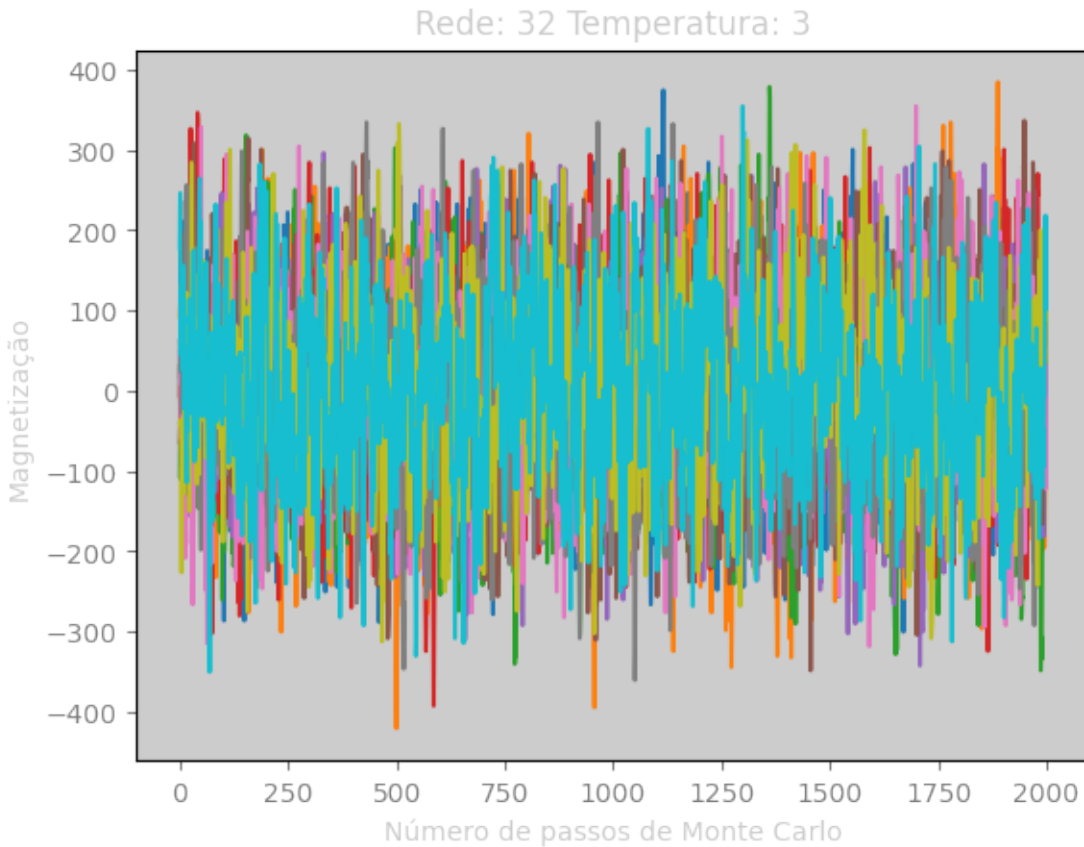
1.3.1 Variação de Temperatura





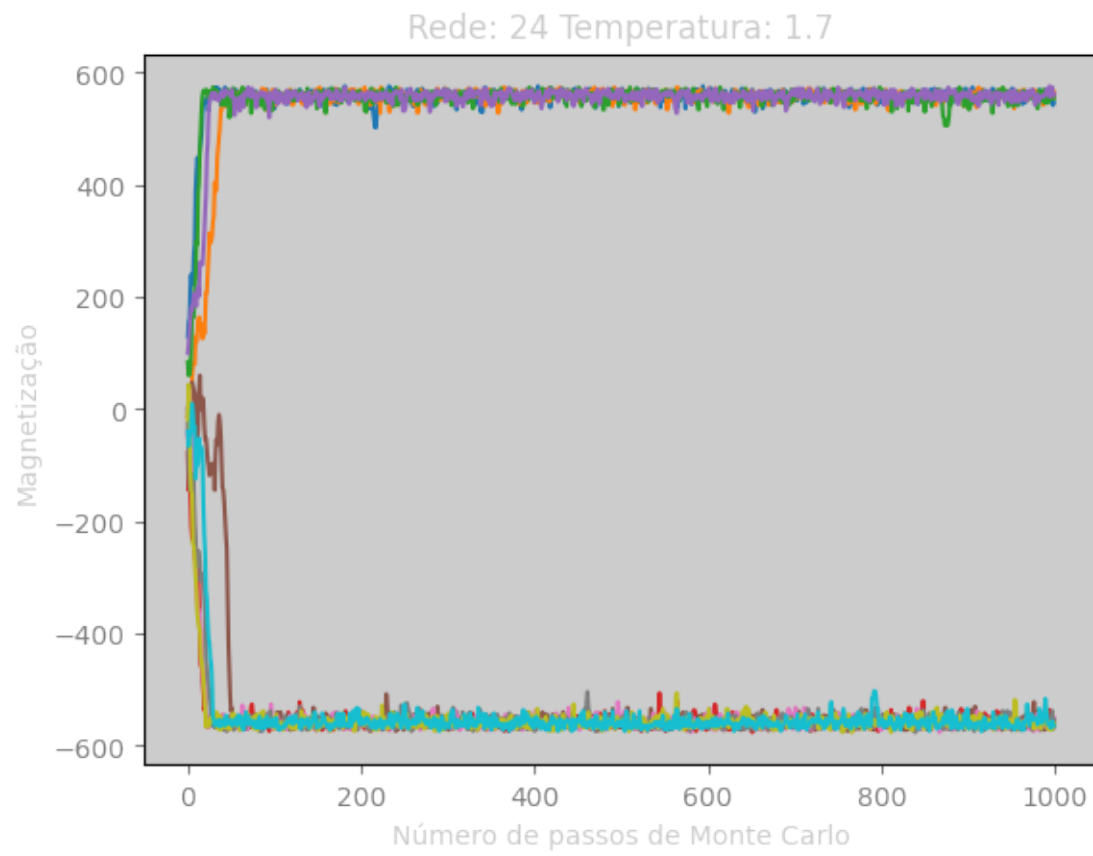


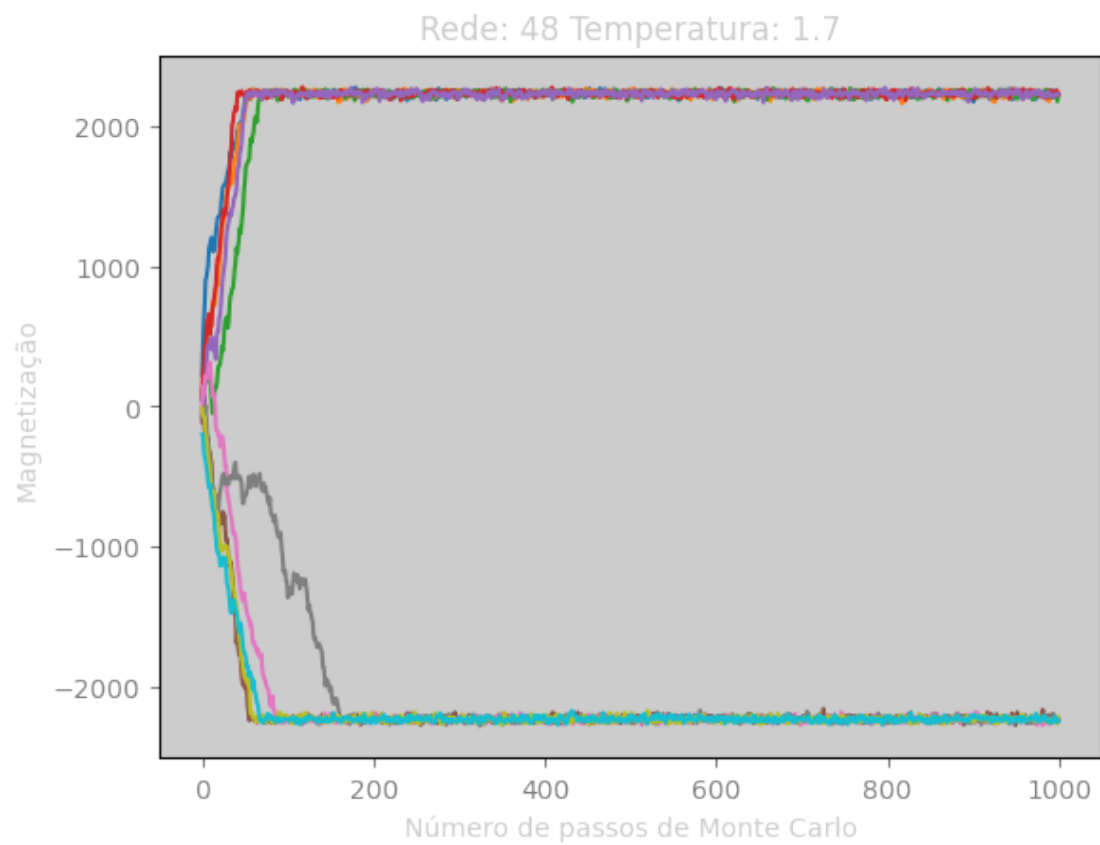


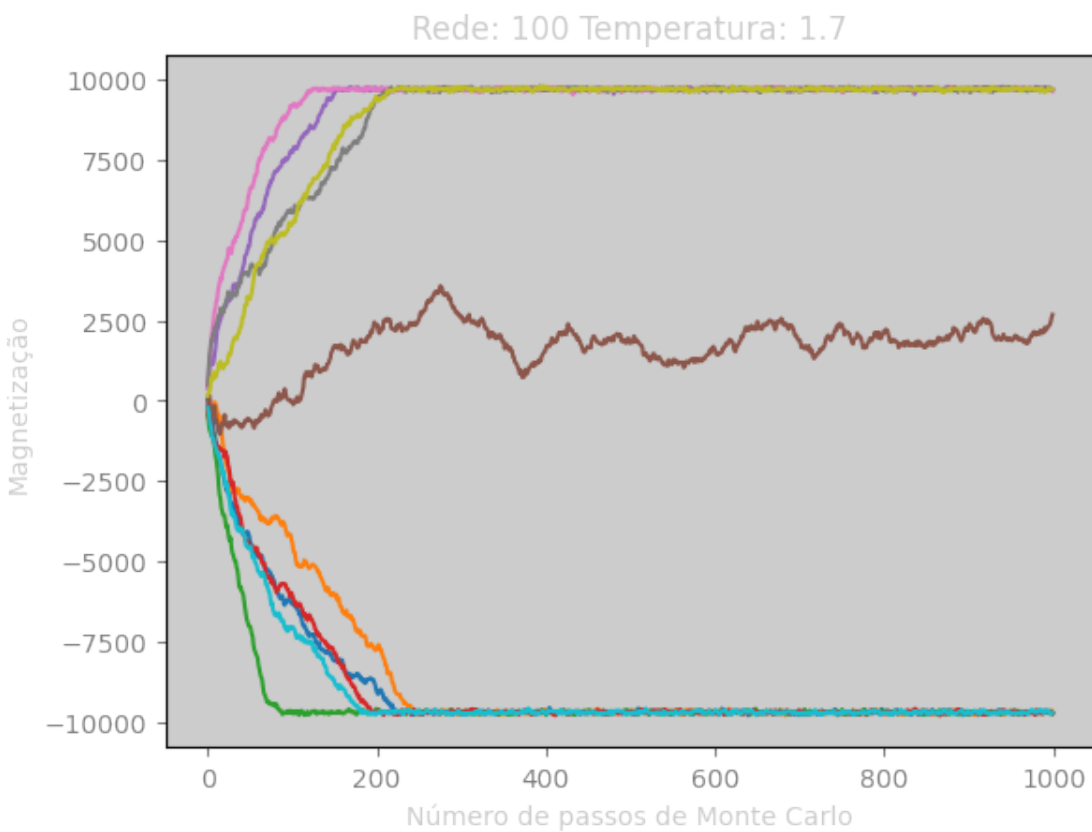
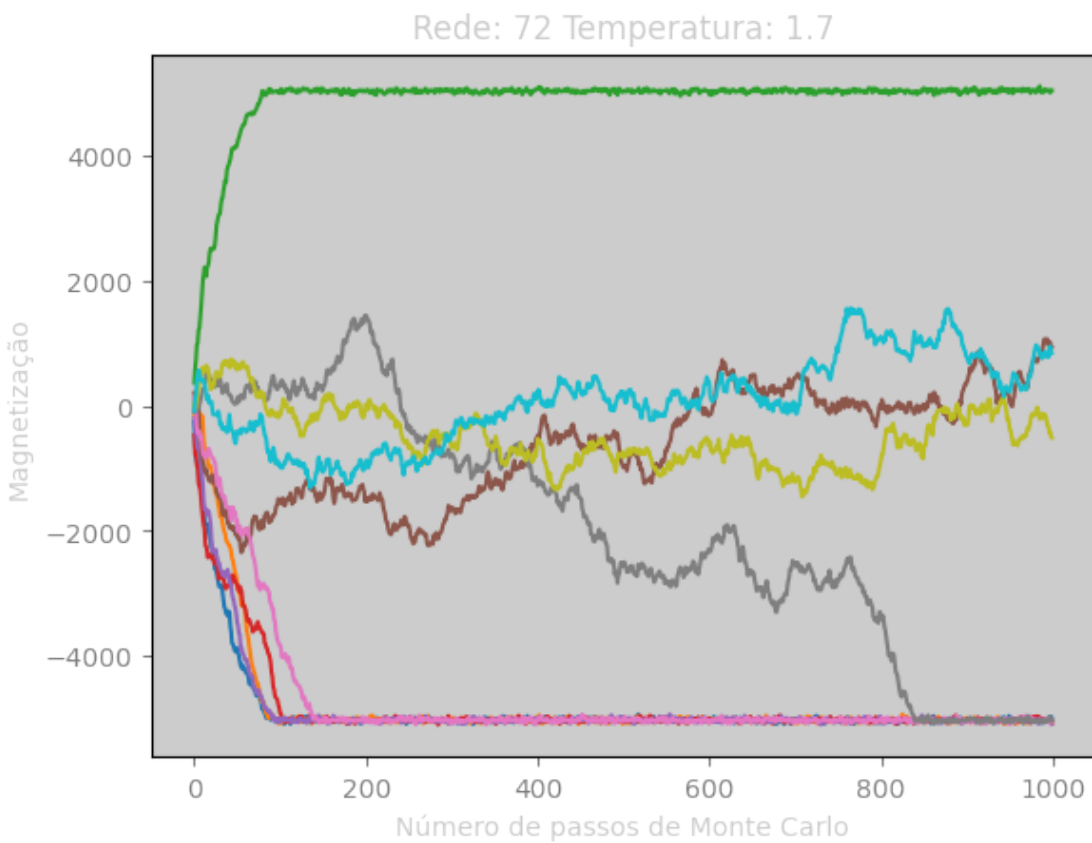


Para a temperatura mais baixa, 3 instâncias não convergiram, ficaram repetindo em padrões. Com o aumento da temperatura ($T=2$), houve uma tendência maior a convergir, mas com um aumento ainda maior ($T=3$), o gráfico voltou a ficar uma completa bagunça. Tal como para a energia, um aumento do número de passos de Monte Carlo não ajudou.

1.3.2 Variação de Comprimento

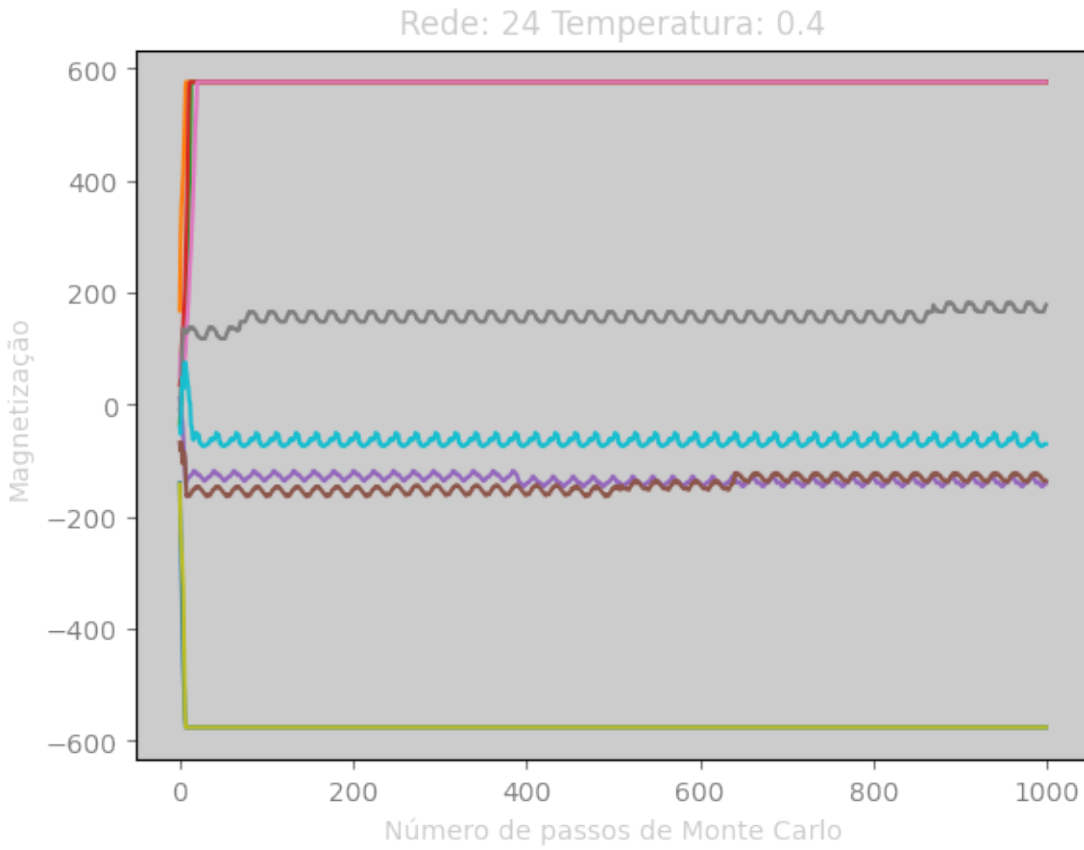


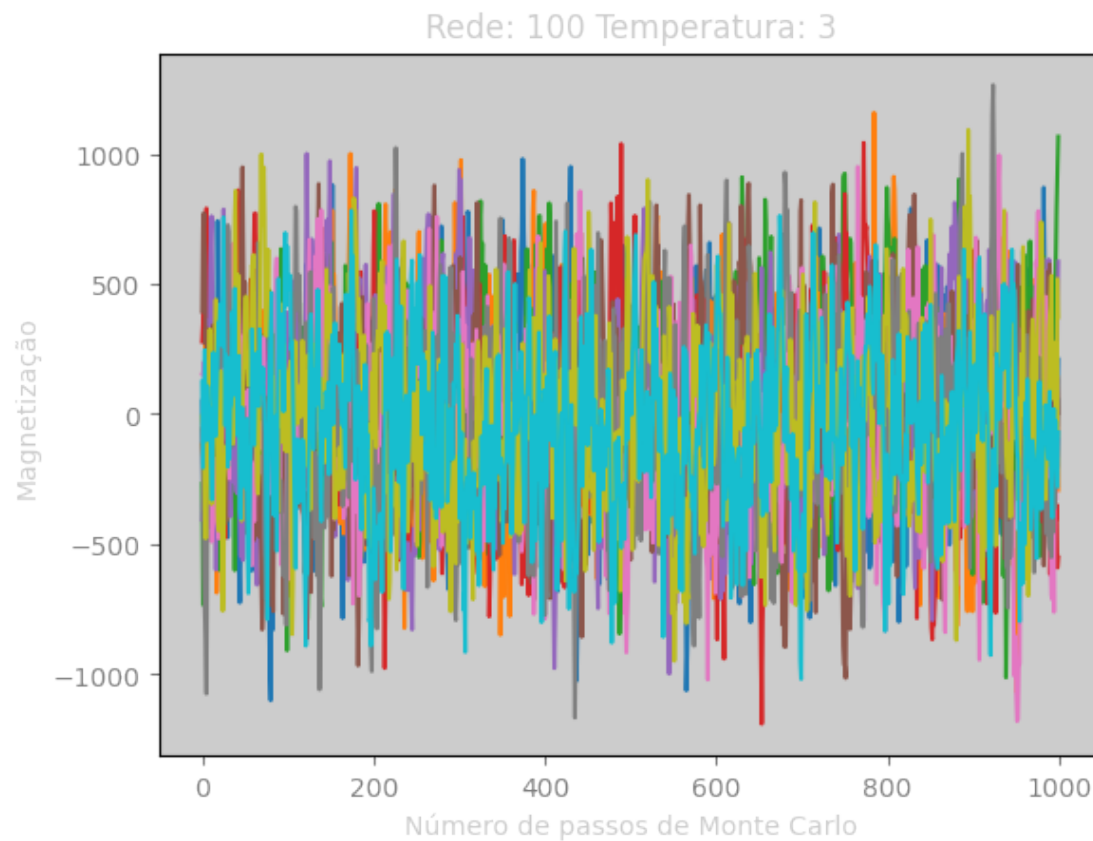




Como no caso da energia, o aumento da rede aumentou os valores para os quais a magnetização converge e, também similarmente ao caso energético, não é possível afirmar que um aumento do tamanho da rede dificulta a convergência.

1.3.3 Mínimo e Máximo





Novamente, o caso “exagerado” ficou não inteligível. Não houve convergência em nenhuma instância. Já o caso “básico” teve algumas instâncias que também não convergiram, mas no geral é bem comportado, convergindo rapidamente.