

main

May 1, 2023

1 Exercício avaliativo 2

1.1 Introdução a Física Estatística e Computacional

Luís Felipe Ramos Ferreira - 2019022553

Observação: O código foi feito feio em conjunto com os colegas Igor Lacerda e Gabriel Rocha. No entanto, é claro, as análises, testes e comentários foram feitos individualmente por cada um.

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

```
[2]: @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
```

```
[3]: @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 / T)

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

    viz = vizinhos(N)

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

    return energia, magnetização

```

```

[56]: def plot_execucoes(N: int, comprimento: int, temperatura: float) -> None:
    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
        )

    fig, (ax1, ax2) = plt.subplots(1, 2, figsize=(10, 4))

    ax1.set_title(f"Rede: {comprimento} Temperatura: {temperatura}")
    ax1.set_xlabel("Número de passos de Monte Carlo")
    ax1.set_ylabel("Energia")
    for e in energias:
        ax1.plot(e)

    ax2.set_title(f"Rede: {comprimento} Temperatura: {temperatura}")
    ax2.set_xlabel("Número de passos de Monte Carlo")
    ax2.set_ylabel("Magnetização")
    for m in magnetizações:
        ax2.plot(m)
    plt.tight_layout()
    plt.show()

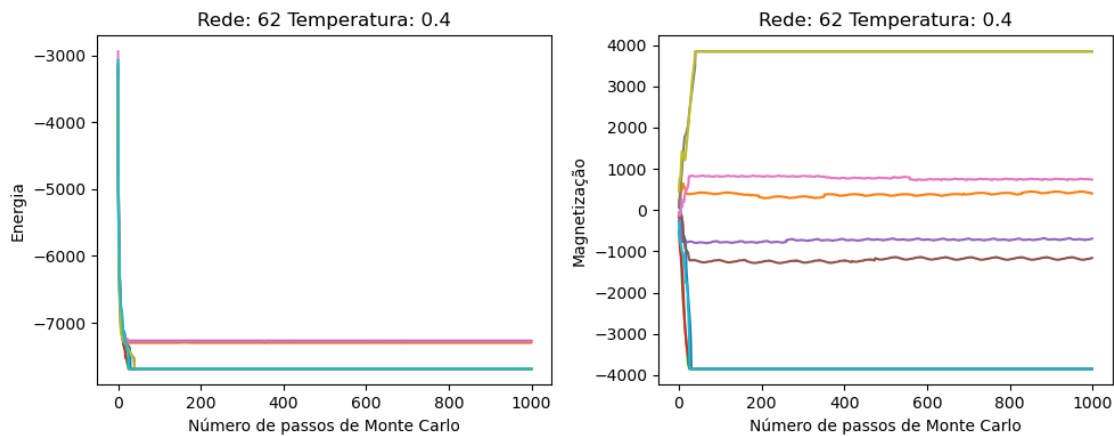
```

2 Análise

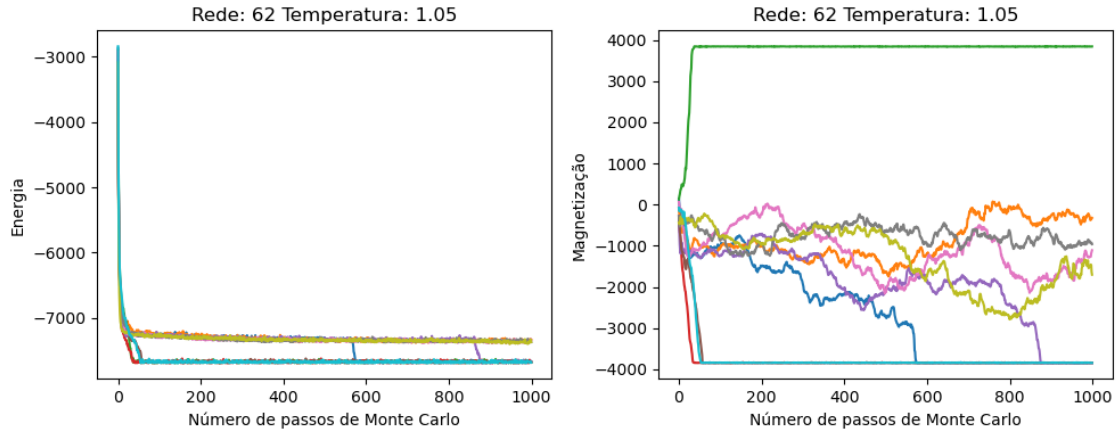
Para uma análise concisa dos experimentos, decidiu-se realizar experimentos com um tamanho de sistema fixo e 5 temperaturas uniformemente separadas, assim como com uma temperatura fixa e 5 tamanhos de sistema uniformemente separados. Essa distribuição uniforme foi dada de acordo com os limites propostos pelo professor. Dessa maneira, 10 configurações de teste/análise são propostas:

- Tamanho: 62, Temperatura: 0.4
- Tamanho: 62, Temperatura: 1.05
- Tamanho: 62, Temperatura: 1.7
- Tamanho: 62, Temperatura: 2.35
- Tamanho: 62, Temperatura: 3.0
- Tamanho: 24, Temperatura: 1.7
- Tamanho: 43, Temperatura: 1.7
- Tamanho: 62, Temperatura: 1.7 (repetida)
- Tamanho: 81, Temperatura: 1.7
- Tamanho: 100, Temperatura: 1.7

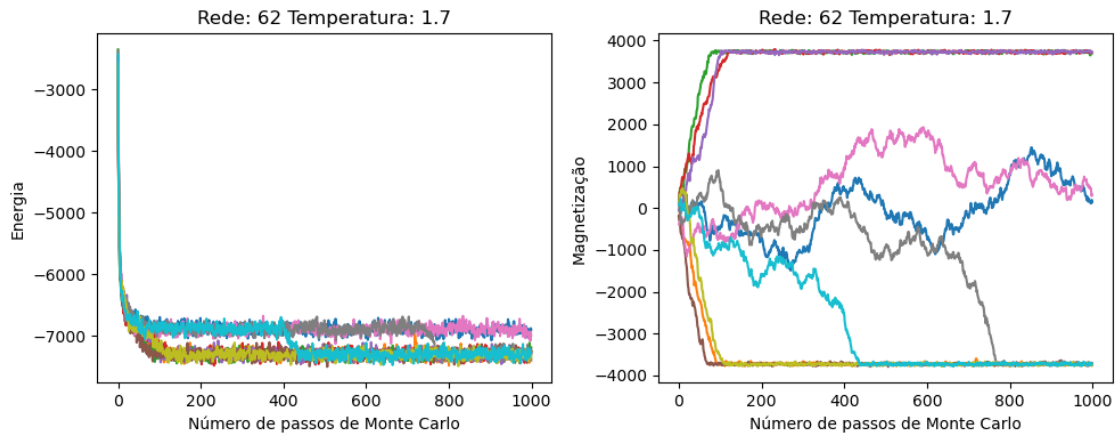
```
[57]: plot_execucoes(N=10, comprimento=62, temperatura=0.4)
```



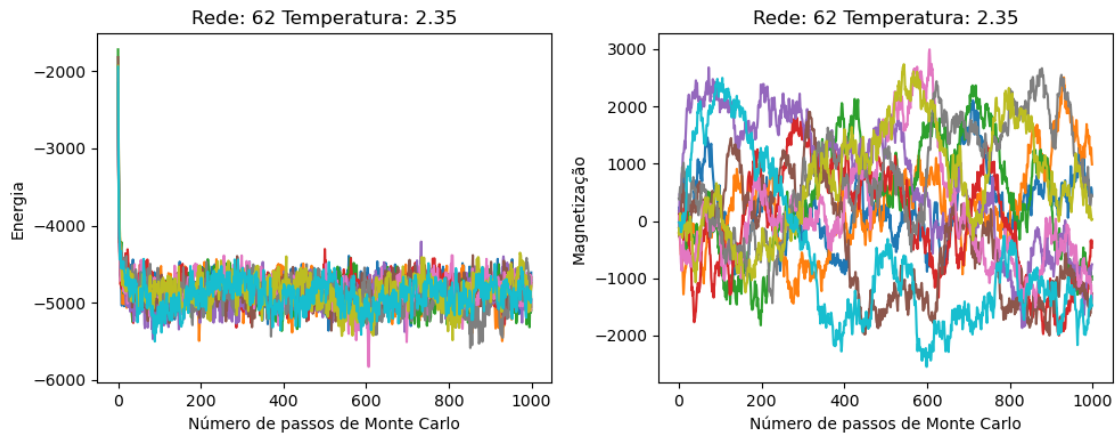
```
[58]: plot_execucoes(N=10, comprimento=62, temperatura=1.05)
```



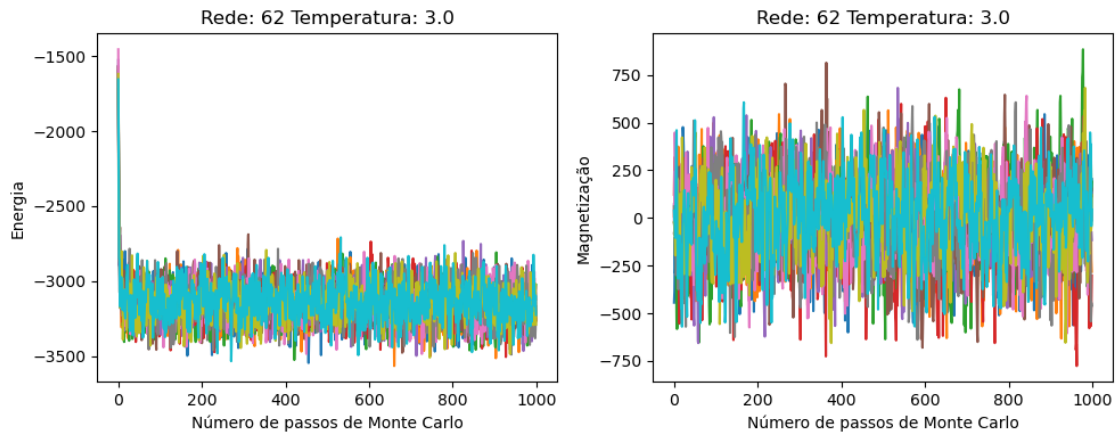
[59]: `plot_execucoes(N=10, comprimento=62, temperatura=1.7)`



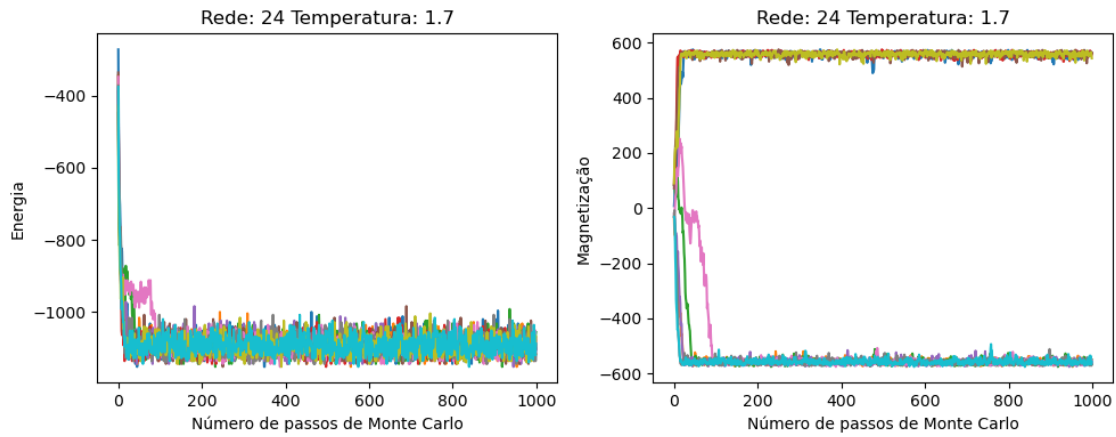
[60]: `plot_execucoes(N=10, comprimento=62, temperatura=2.35)`



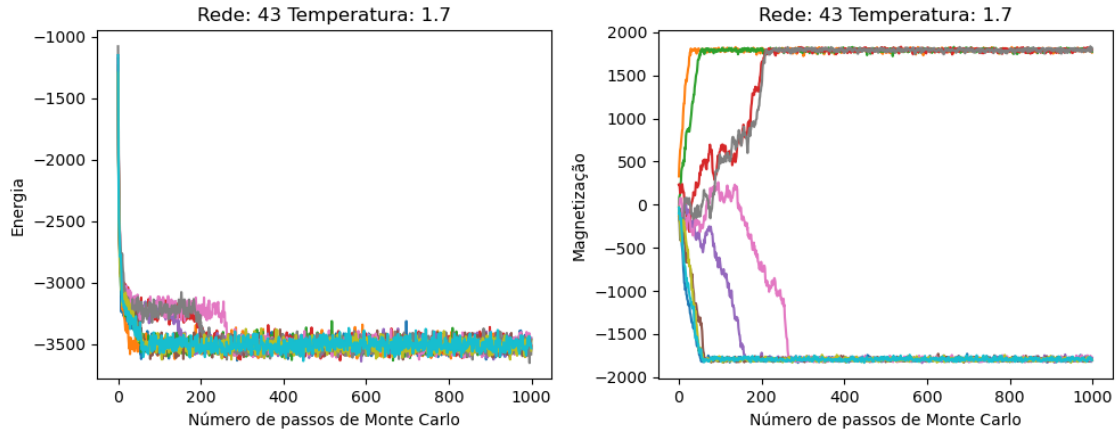
```
[61]: plot_execucoes(N=10, comprimento=62, temperatura=3.0)
```



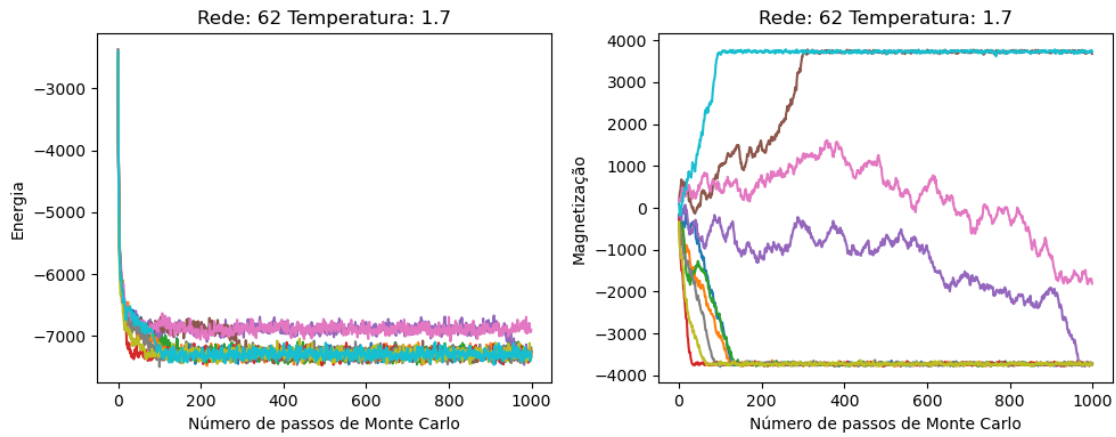
```
[62]: plot_execucoes(N=10, comprimento=24, temperatura=1.7)
```



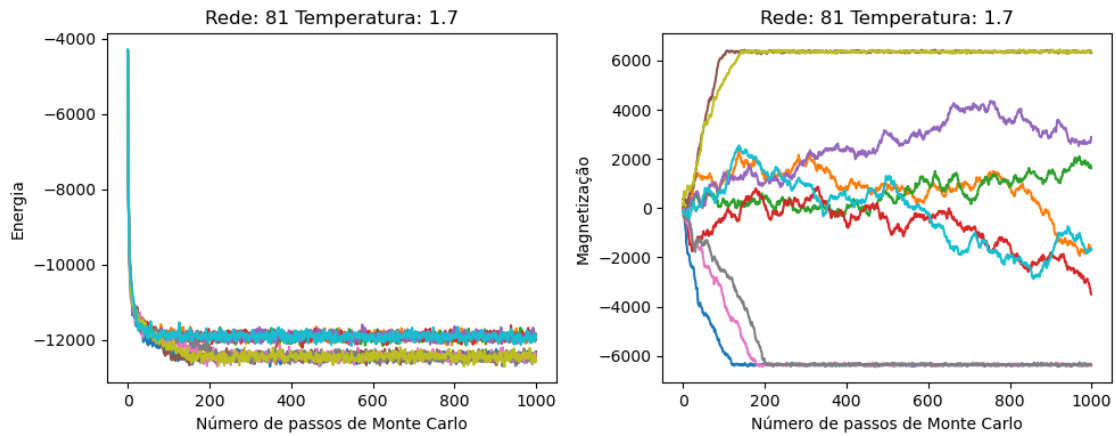
```
[63]: plot_execucoes(N=10, comprimento=43, temperatura=1.7)
```



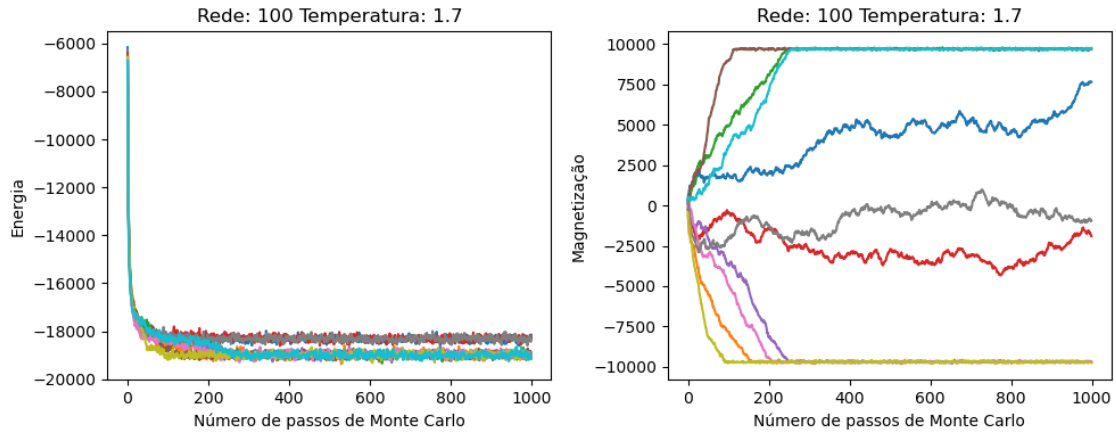
```
[64]: plot_execucoes(N=10, comprimento=62, temperatura=1.7)
```



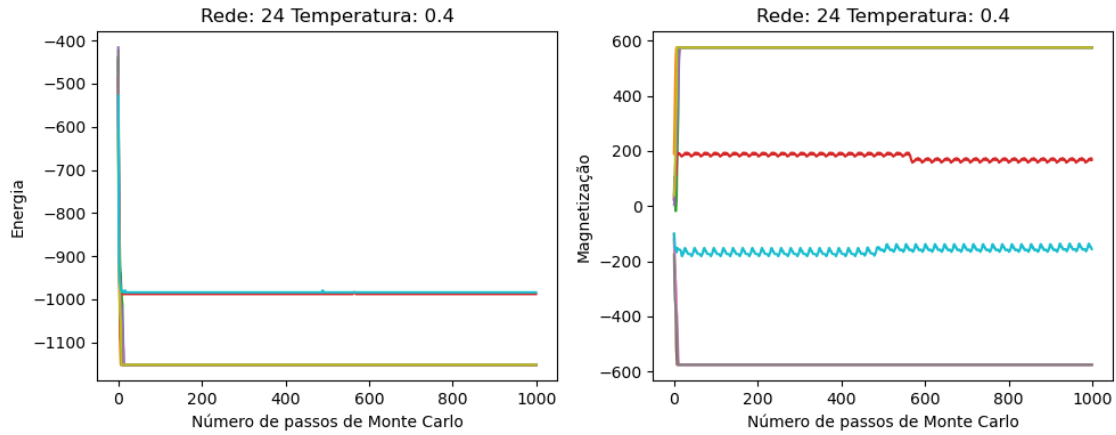
```
[65]: plot_execucoes(N=10, comprimento=81, temperatura=1.7)
```



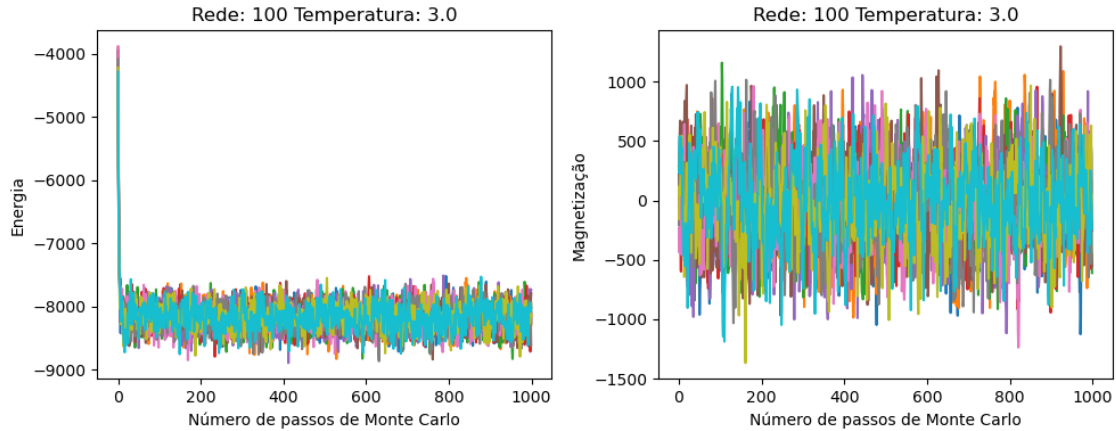
```
[72]: plot_execucoes(N=10, comprimento=100, temperatura=1.7)
```



```
[71]: plot_execucoes(N=10, comprimento=24, temperatura=0.4)
```



```
[68]: plot_execucoes(N=10, comprimento=100, temperatura=3.0)
```



3 Descrição das configurações de análise

Para uma análise concisa dos experimentos, decidiu-se realizar experimentos com um tamanho de sistema fixo e 5 temperaturas uniformemente separadas, assim como com uma temperatura fixa e 5 tamanhos de sistema uniformemente separados. Essa distribuição uniforme foi dada de acordo com os limites propostos pelo professor. Dessa maneira, 10 configurações de teste/análise são propostas:

- Tamanho: 62, Temperatura: 0.4
- Tamanho: 62, Temperatura: 1.05
- Tamanho: 62, Temperatura: 1.7
- Tamanho: 62, Temperatura: 2.35
- Tamanho: 62, Temperatura: 3.0
- Tamanho: 24, Temperatura: 1.7
- Tamanho: 43, Temperatura: 1.7
- Tamanho: 62, Temperatura: 1.7 (repetida)
- Tamanho: 81, Temperatura: 1.7
- Tamanho: 100, Temperatura: 1.7

Além dessas configurações, após conversar com os colegas notamos que seria interessante analisar como o sistema se comportaria para as combinações com os valores mínimos e máximos de configurações porposta. Por isso, as seguintes duas configurações de teste/análise foram utilizadas:

- Tamanho: 24, Temperatura: 0.4
- Tamanho: 100, Temperatura: 3.0

3.1 Análise sobre a energia do sistema

3.1.1 Variação de Temperatura

O aumento da temperatura do sistema faz com que a convergência de energia seja muito mais lenta, além de que seus valores sejam mais próximo de valores maiores de energia. Em outras palavras, é possível que o aumento da temperatura faça com que a energia fique cada vez maior. No entanto, para tal análise, mais passos de Monte Carlo devem ser utilizados, o que aumentaria a complexidade de execução e não necessariamente geraria interpretações conclusivas.

3.1.2 Variação de Comprimento

Com o aumento da rede, a energia do sistema convergiu cada vez mais para valores menores. Com uma rede de tamanho 24, a energia convergiu para valores próximos de -1000, enquanto para uma rede de tamanho 100 a energia convergiu para valores próximos de -18000. Diferentemente da variação da temperatura, a variação do tamanho da rede não parece aumentar o tempo de convergência da energia. Ou seja, não é alterado o número de passos de Monte Carlo necessários, em geral, para que o sistema se estabilize.

3.1.3 Mínimo e Máximo

Os casos extremos analisados mostram que com os valores mínimos, a energia do sistema parece ter um grau de convergência simples e rápido, enquanto para valores máximos, a convergência não seja nítida. Estes gráficos ajudam a corroborar com interpretações prévias dos resultados, onde nota-se que o aumento da temperatura faz com que a convergência da energia seja muito mais lenta. Com o aumento da rede para o caso máximo, por sua vez, nota-se que a energia tende a valores cada vez menores conforme aumenta o número de passos de Monte Carlo.

3.2 Magnetização

3.2.1 Variação de Temperatura

Considerando 1000 passos de Monte Carlo analisados, para as temperaturas mais baixas, algumas poucas instâncias convergiram, enquanto outras não, embora elas pudessem convergir com o aumento do número de passos de Monte Carlo. Com temperaturas mais medianas, por assim dizer, a magnetização começou a ter um padrão maior, com algumas instâncias convergindo, mas para temperaturas maiores, os gráficos não apreceram seguir qualquer padrão, o que mostra que, assim como para a energia, o aumento da temperatura apreça aumentar o caos do sistema, e a convergência se torna muito mais lenta.

3.2.2 Variação de Comprimento

O aumento do comprimento da rede claramente aumenta o valor para o qual a magnetização converge. Pode-se notar também que, com o aumento do tamanho da rede, a convergência da magnetização se torna muito mais lenta, assim como o caso da variação de energia. Para exemplificar, com um tamanho de rede de 24, foram necessários menos que 200 passos de Monte Carlo para cada uma das instâncias convergir para algum valor, enquanto para a rede de tamanho 10, além de nem todas as instâncias convergirem para os passos gerados, as que convergiram tomaram mais do que 200 passos de Monte Carlo.

3.2.3 Mínimo e Máximo

Neste cenário, pode-se notar que para o caso de valores mínimos algumas instâncias convergiram e outras parecem terem ficado “presas” a alguns valores não convergentes, embora o aumento do número de Passos de Monte Carlo pudesse resolver essa problema. No caso de valores máximos, o gráfico ficou completamente caótico, e os valores de magnetização não parecem terem convergido para nenhuma instância.

4 Variação do número de passos de Monte Carlo

Alguns testes foram feitos testando a variação do número de passos de Monte Carlo para uma quantidade maior do que a utilizada nas análises (1000). No entanto, mesmo com um aumento desses valores, os casos em que a energia e a magnetização do sistema não convergem, isto é, casos em que a temperatura do sistema é muito alta, não chegaram a apresentar convergência. Provavelmente o número de passos necessário para chegar na convergência nesses casos tem que ser extremamente alto, isto se for possível chegar a ela. Por esse motivo, e também para evitar poluição visual, os gráficos gerados e mostrados são apenas aqueles que consideram um número de passos de Monte Carlo igual a 1000.