

O método de Wang-Landau

Como vimos em nossa última tarefa, a determinação exata das propriedades termodinâmicas do modelo de Ising 2D pode ser desafiante. Em especial, o cálculo exato da *densidade de estados*¹, $g(E)$, é particularmente desafiador por envolver um número de operações que cresce exponencialmente com o número de partículas. Dessa forma, a extrapolação dos resultados para o limite termodinâmico, passo essencial para recuperarmos a termodinâmica de sistemas macroscópicos, se torna inviável já que apenas sistemas muito pequenos podem ser amostrados. Devemos pensar então em métodos aproximados para estimar essa grandeza. Um dos principais métodos da atualidade para se estimar a densidade de estados, DOS, em simulações computacionais de sistemas físicos é o algoritmo de Wang-Landau. Essa é uma técnica relativamente recente, introduzida em 2001, baseada em ideias relativamente simples e elegantes. Apresenta, no entanto, algumas desvantagens, principalmente por ser um método de aproximação iterativa e que, portanto, não conseguimos prever de antemão o número de iterações necessárias para o algoritmo convergir e fornecer uma estimativa precisa da DOS.

A ideia geral

Para introduzirmos o algoritmo de Wang-Landau vamos fazer o seguinte exercício mental: Imagine que você escolha aleatoriamente estados do modelo de Ising. Qual seria a probabilidade de se obter um estado com energia E ? Bem, se os estados são escolhidos de forma completamente aleatória e não correlacionada essa probabilidade seria proporcional ao número de estados com essa energia, $g(E)$. De fato, numa escolha completamente aleatória de estados a probabilidade de um estado de energia E ser escolhido seria

$$\frac{g(E)}{\sum_E g(E)}.$$

Com isso, se fizermos um histograma do número de estados visitados para cada valor de energia, obteremos algo proporcional a $g(E)$. Imagine agora que conhecemos $g(E)$ e que os estados sejam escolhidos não de maneira completamente ao acaso, mas que a escolha seja feita com probabilidade proporcional a $1/g(E)$. Assim, quanto maior o número de estados com determinada energia, menor será a chance de um estado com essa energia ser escolhido. A escolha de estados passa a ser viesada! Ao compararmos essa situação com o caso onde os estados são escolhidos de forma completamente aleatória, podemos perceber que a tendência de escolher mais estados que apresentam maiores valores de $g(E)$ será anulada, de forma que um histograma do número de estados visitados para cada valor de energia deve ser próximo de um valor constante. Ou seja, todos estados de energia seriam igualmente prováveis ao fazermos essa amostragem tendenciosa.

O grande problema dessa discussão é que em geral não conhecemos $g(E)$. De fato, essa é a grandeza que desejamos obter! O truque introduzido por Wang e Landau foi perceber que mesmo sem conhecer $g(E)$ podemos estimar seus valores por esse procedimento. A proposta é iniciar um

¹ É extremamente comum na literatura encontramos referências a $g(E)$, o número de estados com energia E , como densidade de estados (DOS na sigla em inglês). Esse é um abuso de linguagem originado no fato de que no estudo de sistemas com espectro contínuo de energias a grandeza equivalente ao número de estados passa a ser uma densidade ao invés de um número. A partir deste momento iremos nos referir a $g(E)$ como densidade de estados ou DOS mesmo que de fato estejamos falando do número de estados.

processo iterativo supondo valores para $g(E)$, por exemplo, $g(E) = 1, \forall E$. De fato, a estimativa final não depende da escolha inicial pra $g(E)$ e vamos, para facilitar os argumentos, imaginar $g(E)$ constante de forma que teríamos no início do processo uma escolha completamente aleatória de estados, já que todos seriam igualmente prováveis. Para deixar bem claro, neste algoritmo estados são escolhidos com probabilidade proporcional a $1/g(E)$. Considerando, então, essa escolha aleatória de estados, quanto mais um estado com um determinado valor de energia for visitado, maior deveria ser o valor de $g(E)$ para essa energia específica, já que nessa amostragem ele está sendo muito visitado. Assim, aumentando o valor de $g(E)$ cada vez que um estado com essa energia for visitado, esperamos recuperar em algum momento um histograma de valores visitados que tenda a ser constante (*flat*), como o que obteríamos ao escolher estados usando a $g(E)$ exata que estamos procurando estimar. Essa é a essência do método. Talvez alguns já tenham percebido que esse processo é, de fato, uma caminhada aleatória no espaço de energias com probabilidade de transições entre estados variável.

O algoritmo de Wang-Landau

Vamos detalhar agora o algoritmo desse método considerando o modelo de Ising 2D.

- 1) Faça $g(E) = 1$ e $H(E) = 0$ para todos valores de energia.
- 2) Escolha um fator multiplicativo $f > 1$. Uma boa escolha é $f = e = 2.718 \dots$
- 3) Escolha um estado inicial para o sistema e calcule sua energia, E_1 .
- 4) Calcule a energia que o sistema teria, E_2 , se um spin escolhido aleatoriamente, i , fosse flipado, i.e., se fizéssemos $s_i = -s_i$.
- 5) Aceite ou recuse essa mudança com probabilidade

$$p(E_1 \rightarrow E_2) = \min\left(\frac{g(E_1)}{g(E_2)}, 1\right).$$

- 6) A cada passo deste algoritmo, independente do novo estado ter sido aceito ou não, multiplique $g(E)$, onde E é a energia do sistema neste passo, por f , i.e., faça a cada passo $g(E) \leftarrow g(E)f$ e atualize o histograma, i.e., faça $H(E) = H(E) + 1$.
- 7) Verifique se o histograma, $H(E)$, está *flat*
 - a. Se não estiver, volte ao passo 4.
 - b. Se estiver, reduza o parâmetro f , por exemplo, fazendo $f' = \sqrt{f}$, zere o histograma e repita o procedimento até f atingir um valor suficientemente próximo de 1.

Nesta caminhada aleatória, estamos usando uma sequência de números aleatórios para explorar o espaço de energias do sistema. Por isso, esse é um método de Monte Carlo. Por definição, os métodos de Monte Carlo são aqueles que usam uma sequência de números aleatórios para amostrar uma distribuição de probabilidades, para fazer integrações numéricas ou para fazer otimizações. Veremos nesse curso outros métodos de Monte Carlo.

Perceba que por esse procedimento $g(E)$ é determinado a menos de uma constante multiplicativa. Isso não faz diferença uma vez que as médias termodinâmicas são calculadas por expressões como

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_E \bar{A}(E) g(E) e^{-\beta E}}{\sum_E g(E) e^{-\beta E}},$$

onde $\bar{A}(E)$ é a média da grandeza A dentre os estados com energia E , de forma que o fator multiplicativo se anula. Além disso, em alguns casos especiais como o modelo de Ising que

conhecemos o valor de $g(E)$ para o estado fundamental, $g(E_{min}) = 2$, podemos normalizar $g(E)$ para obter estimativas reais dos valores.

A aceitação ou não do estado proposto (passo 5 do algoritmo) é feita escolhendo um número aleatório, r , uniformemente distribuído no intervalo $[0,1)$ e comparando com $p = g(E_1)/g(E_2)$. Se $r \leq p$ o novo estado é aceito, o spin deve então ser flipado e a energia atualizada. Caso contrário, o estado e a energia permanecem inalterados.

Uma pergunta muito relevante é o que consideramos como um histograma flat. Mesmo usando a densidades de estados exata para o modelo de Ising, nunca seremos capazes de obtermos numa amostragem um histograma perfeitamente plano, com todos os estados tendo sido visitados um mesmo número de vezes. Talvez, nesse ponto, vocês também já tenham percebido que este método possui vários parâmetros e escolhas diferentes que podem ser adotadas e levam basicamente ao mesmo resultado final. O que indicarei aqui são as práticas mais comuns na literatura sobre o tema. Voltando ao que consideramos como histograma flat, a prática mais comum é assumir que todas as entradas do histograma sejam maiores que uma porcentagem do valor médio de todas entradas. Matematicamente temos que exigir $H(i) > x\langle H \rangle, \forall i$, onde $0 < x < 1$ é a porcentagem que vamos escolher e

$$\langle H \rangle = \sum_{i=1}^{N_H} H(i),$$

onde N_H é o número de entradas do histograma, que equivale ao número de valores de energia acessíveis ao sistema. Valores comuns para x estão no entorno de $x = 0,8$. Perceba que usando valores muito grandes de x o histograma dificilmente ficará flat, deixando o algoritmo ineficiente. Por outro lado, valores pequenos também deixarão o algoritmo ineficiente por não requerer estimativas minimamente precisas de $g(E)$ para passar para próxima etapa.

Outro ponto relevante acerca da verificação se o histograma está flat ou não é o intervalo com o qual devemos fazer isso. Se a cada tentativa de flipar o spin verificarmos se o histograma já está flat, estaremos desperdiçando muitos recursos computacionais, já que a variação de energia tende a ser muito pequena e, além disso, apenas uma entrada do histograma terá sido alterada, fazendo com que a chance de que apenas nessa alteração ele tenha ficado flat é muito pequena. É comum neste tipo de simulação utilizarmos como medida de tempo o que chamamos de um passo de Monte Carlo (MCS), que constitui numa tentativa de se flipar todos os N spins da rede (em geral, um de cada vez). Uma prática comum é verificar se o histograma está flat a cada 1000 passos de Monte Carlo, dando oportunidades para que ocorram mudanças suficientes no sistema para que o histograma se torne flat. Vale ressaltar que a tendência é que se o histograma se tornou flat em determinado ponto da simulação que ele permaneça flat ou se torne cada vez mais flat à medida que o tempo passa.

A cada passo do algoritmo $g(E)$ é multiplicado por um fator, de forma que seu valor cresce exponencialmente. Obviamente isso gerará valores extremamente elevados para essa grandeza, sendo melhor, então, trabalhar com seu logaritmo. Assim, ao invés de multiplicar $g(E)$ por f , faremos uma soma, $\ln g(E) \leftarrow \ln g(E) + \ln f$. Escrevendo dessa forma, a probabilidade de que um spin flip que mude a energia de E_1 para E_2 seja aceito será $\exp(\ln(E_1) - \ln(E_2))$. Fica claro agora a origem dos valores sugeridos para $f = e$ e do fator de redução, $f' = \sqrt{f}$. Em termos do logaritmo, teremos $\ln f = 1$ no início e, cada vez que o histograma ficar flat, reduziremos seu valor à metade. Assim, no início da simulação faremos $\ln g(E) = 0$ para todas energias. Cada vez que um valor de

energia for visitado, somamos 1 a $\ln g(E)$ e ao histograma. Quando o histograma ficar flat pela primeira vez, $\ln g(E)$ será igual a $H(E)$. Após isso, o histograma será zerado e $\ln g(E)$ continuará a ser atualizado, porém numa taxa menor. Com isso, à medida que $\ln f$ é reduzido, as modificações em $\ln g(E)$ serão cada vez mais suaves. No limite em que $\ln f = 0$, $\ln g(E)$ não será mais alterado. Mas isso ocorre apenas no limite de infinitos passos, o que obviamente não faz sentido. Geralmente interrompemos a simulação quando $\ln f \approx 10^{-8}$.

Por fim, temos que ressaltar que a estimativa de $g(E)$ obtida por esse método está sujeita a flutuações estatísticas e ao valor final de f utilizado. Quanto às flutuações estatísticas, perceba que duas simulações que usem sementes diferentes para os geradores de números aleatórios fornecerão resultados distintos para $g(E)$. Esperamos, no entanto, que tais resultados sigam uma distribuição estatística e que consigamos estimar o valor esperado para $g(E)$ e o desvio padrão associado. Desta forma, para se obter resultados coerentes com esse método, assim como em qualquer outro método de Monte Carlo, devemos realizar várias simulações, obtendo assim várias estimativas de $g(E)$ que posteriormente devem ser compatibilizadas de forma a se estimar os erros estatísticos envolvidos. Nesse primeiro momento, e pelo fato de que abordaremos posteriormente outros métodos de Monte Carlo, não iremos nos preocupar em estimar esses erros estatísticos. Quanto ao valor final de f utilizados, temos que perceber que quanto menor for f , menor será o erro inerente à determinação de $g(E)$ e, conseqüentemente, maior será a acurácia de sua estimativa. Porém, como já discutido, as estimativas estão sujeitas a flutuações estatísticas que muitas vezes são maiores que os erros oriundos de escolhas não muito adequadas do valor final de f . Em suma, neste trabalho não nos preocuparemos tanto com essas questões devido ao objetivo final de apresentar e ilustrar aplicações de métodos de Monte Carlo aplicados ao modelo de Ising. No entanto, há de se deixar claro que em qualquer trabalho minimamente sério usando esse método tais questões tem que ser levadas a sério e tratadas com ferramentas adequadas.

Obtenção de médias termodinâmicas

Para se obter qualquer propriedade termodinâmica do sistema, utilizaremos os métodos já introduzidos no ensemble Canônico. Em especial, o valor esperado de uma grandeza A que dependa apenas da energia será

$$\langle A(E) \rangle = \frac{\sum_E A(E) g(E) e^{-\beta E}}{Z}.$$

Nesta tarefa, iremos também obter a magnetização do sistema. Uma forma mais simples de se obter essa grandeza no método de Wang-Landau é usando uma média microcanônica. Para tanto, iremos durante a simulação estimar

$$\bar{m}(E) = \frac{1}{g_s(E)} \sum_{\{\sigma\}} m_{\sigma} \delta_{E_{\sigma}, E}.$$

Nesta expressão, a soma é realizada sobre todas as configurações acessíveis ao sistema, $g_s(E) = \sum_{\{\sigma\}} \delta_{E_{\sigma}, E}$ é o número de estados com energia E e

$$\delta_{i,j} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j, \\ 0, & \text{se } i \neq j. \end{cases}$$

Ela representa a média da magnetização dentre todos os estados com uma dada energia. Numa simulação usando o algoritmo de Wang-Landau podemos estimar essa grandeza ao acumular os valores de magnetização para cada estado de energia visitado, similar ao que é feito no histograma, e dividir, ao final da simulação, pelo histograma cumulativo. Deve-se ter atenção ao fato de que na expressão acima estamos considerando a situação onde todos os estados são visitados e $g(E)$ é o

número de estados com uma dada energia, e não a estimativa que obtemos usando o método de Wang-Landau. Na simulação, não visitamos todos os estados possíveis e, inclusive, um mesmo estado pode ser visitado mais de uma vez. Por esse motivo devemos dividir a soma cumulativa de valores de magnetização pelo total de vezes que cada estado de energia foi visitado. De posse dessa média microcanônica, podemos obter a magnetização média através de

$$\langle m \rangle = \frac{\sum_E \bar{m}(E) g(E) e^{-\beta E}}{Z}.$$

Aplicação ao modelo de Ising 2D

Iremos agora passar para os detalhes de aplicação do método de Wang-Landau ao modelo de Ising 2D. Novamente, partiremos da definição da rede e do estado do sistema, aproveitando o que foi feito no trabalho de enumeração exata. Inclusive a definição de vizinhos da rede e cálculo da energia serão explicitamente utilizados. A parte relacionada à obtenção de médias termodinâmicas também será aproveitada, mas ao invés de utilizar a $g(E)$ exata, utilizaremos a estimativa obtida pelo método de Wang-Landau.

Ao realizar a enumeração exata do modelo de Ising 2D obtivemos o que chamamos de espectro de energias do modelo, que são todos os valores de energia possíveis. Assim, pensando numa rede com $N = L \times L$ sítios, a energia está no intervalo $-2N \leq E \leq 2N$, variando em passos de 4 e sendo os estados $-2N + 4$ e $2N - 4$ proibidos. Assim, as únicas entradas de $g(E)$ e do histograma $H(E)$ que devemos analisar são as que terão valores não nulos, $-2N, -2N + 8, -2N + 12, -2N + 16, \dots, 2N - 16, 2N - 12, 2N - 8, 2N$. Uma forma útil e mais simplificada de se tratar essa questão é reescalar as energias do sistema fazendo $E' = (E + 2N)/4$. Assim, as energias acessíveis ao sistema estarão no intervalo $[0, N]$ e poderão ser utilizadas diretamente como índices dos vetores. Há de se ressaltar, no entanto, que os valores 1 e $N - 1$ são inacessíveis. Especial cuidado a este respeito deve ser tomado ao verificar se o histograma está flat, já que nesta formulação $H(1)$ e $H(N - 1)$ serão sempre nulos e não devem ser considerados ao verificarmos o menor valor presente no histograma.

Passemos, então, à estrutura geral do programa:

- 1) Escolha um estado inicial para o sistema (atribuindo aleatoriamente os valores ± 1 à variável de spin relacionada a cada sítio ou completamente ordenado numa direção, por exemplo).
- 2) Determine os vizinhos de cada sítio.
- 3) Calcule a energia correspondente ao estado escolhido.
- 4) Escale a energia de forma adequada ($E' = (E + 2N)/4$).
- 5) Execute o procedimento do método de Wang-Landau.
- 6) Obtenha as médias termodinâmicas

Procedimento Wang_Landau

Entrada $N, E, \{s_1, \dots, s_N\} \leftarrow \{\pm 1, \dots, \pm 1\}$

$\{lnge(0), \dots, lnge(N)\} \leftarrow \{0, \dots, 0\}$

$\{H(0), \dots, H(N)\} \leftarrow \{0, \dots, 0\}$

$\{Hc(0), \dots, Hc(N)\} \leftarrow \{0, \dots, 0\}$

$\{mmicro(0), \dots, mmicro(N)\} \leftarrow \{0, \dots, 0\}$

$lnf \leftarrow 1.0$

$m \leftarrow soma(s_i)$ // Magnetização

Para $iter = 1, \dots, 10^7$ **faça** // Número máximo de passos

Para $imc = 1, \dots, N$ **faça** // Executa um passo de Monte Carlo

$k \leftarrow ran(1, N)$ // Escolha aleatória de um sítio pode ser feita sequencialmente

$h \leftarrow \sum_{(k,j)} s_j$ // Essa soma é sobre os vizinhos de k

$E_2 \leftarrow E + s_k \cdot h/2$

$P \leftarrow \exp(lnge(E) - lnge(E_2))$

Se $(ran(0,1) < P)$ **faça** // Aceita ou rejeita a troca

$s_k \leftarrow -s_k$

$E \leftarrow E_2$

$m \leftarrow m - 2s_k$

Fim se

$H(E) \leftarrow H(E) + 1$

$lnge(E) \leftarrow lnge(E) + lnf$

$mmicro(E) \leftarrow mmicro(E) + abs(m)$

Fim para

Se $(i \bmod 1000 = 0)$ **faça**

$hmed \leftarrow soma(H(E))/(N - 1)$ // Muita atenção pois dois termos não devem ser

$hmin \leftarrow minimo(H(E))$ // considerados nessa parte!

Se $(hmin > 0.8 * hmed)$ **faça** // Condição para histograma flat

$H_c \leftarrow H$ // Histograma cumulativo

$\{H(0), \dots, H(N)\} \leftarrow \{0, \dots, 0\}$

$lnf \leftarrow lnf/2$

Fim se

Fim se

Se $(lnf < 10^{-8})$ **saia**

Fim para

$mmicro \leftarrow mmicro/H_c$ // Tira a média da magnetização

$lnge(E) \leftarrow lnge(E) - lnge(0) + \ln 2$ // Normaliza a densidade de estados

Saída $lnge, mmicro$

Fim

Para se determinar as médias termodinâmicas devemos usar o procedimento delineado na atividade de enumeração exata para o modelo de Ising, devidamente modificado para lidar com o fato que agora obtivemos o logaritmo da densidade de estados. Uma ressalva importante é que para redes não muito pequenas os valores de $lnge(E)$ podem ser significativamente elevados, fazendo com que o cálculo da exponencial possa levar a overflows. Uma forma que encontramos de lidar com essa situação é usando um “truque” de subtrair no cálculo das exponenciais o maior valor de seu argumento. Como esse termo aparecerá tanto no numerado quanto no denominador dos valores esperados não afetará os resultados finais.

Um detalhe que devemos observar ao determinar a magnetização média é que o objetivo em se determinar essa grandeza, em geral, está relacionado ao grau de ordenamento do sistema. Assim, como tanto os estados com todos os spins para cima, $+1$, como o estado com todos os spins para baixo, -1 , estão “igualmente” ordenados, consideraremos apenas o módulo da magnetização no cálculo da magnetização média $\langle |m| \rangle$ da expressão acima.

Sugiro que durante as simulações vocês imprimam na tela informações para acompanhar o andamento da simulação.

Nesta tarefa, vocês devem realizar simulações pelo método de Wang-Landau para o modelo de Ising 2D para redes de tamanho linear $L = 6, 12, 18$ e 24 . Determinem, para cada tamanho, a densidade de estados e a média microcanônica da magnetização. Utilizando esses resultados, faça gráficos das seguintes grandezas em função da temperatura (no intervalo de 1 a 5) para os três tamanhos:

- i) Energia por spin, $\langle e \rangle$, como função da temperatura;
- ii) Calor específico, c_v , como função da temperatura;
- iii) Energia livre por spin, $f(T) = -\frac{1}{N\beta} \ln Z$;
- iv) Entropia por spin, $s(T) = \frac{\langle e \rangle - f(T)}{T}$;
- v) Magnetização média por spin, $\langle |m| \rangle / N$.

Vocês devem entregar um arquivo pdf (pode ser a impressão de um notebook, por exemplo) contendo o código usado, os gráficos e uma análise dos resultados obtidos. Um arquivo com o código em python e os resultados para $\ln g(E)$ para rede com $L = 24$ foram disponibilizados. Aproveitem e tentem adaptar o que julgarem necessário.

REFERÊNCIAS:

- F. Wang e D.P. Landau, Efficient, Multiple-Range Random-Walk Algorithm to Calculate the Density of States, Physical Review Letters, 86, 2050 (2001) DOI: 10.1103/PhysRevLett.86.2050
- D.P. Landau, Shan-Ho Tsai, M. Exler, A New Approach to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics: Wang-Landau Sampling, American Journal of Physics, 72, 1294 (2004) DOI: 10.1119/1.1707017