

Simulações de Wang-Landau para um polímero com solução exata

Lucas de Souza Ferreira, Álvaro de Almeida Caparica

Instituto de Física, Universidade Federal de Goiás

74.001-970, Goiânia (GO), Brazil

hotwister@hotmail.com, caparica@if.ufg.br

PALAVRAS-CHAVE: Polímero, Wang-Landau.

1 INTRODUÇÃO

Com o advento e a larga disponibilidade de computadores, as simulações computacionais têm se tornado um método essencial e poderoso no estudo de sistemas de muitos corpos, fazendo um papel intermediário entre modelos teóricos e experimentos. A ideia básica é que, com um computador pode-se seguir explicitamente a trajetória de um sistema que envolve um grande número de graus de liberdade e com isso, obter um prognóstico significativo de suas propriedades.

Como simular variáveis aleatórias manualmente é um processo árduo, os trabalhos envolvendo números aleatórios deixaram de ser pontuais a partir de 1945, com o uso de computadores e geradores de números aleatórios de alta qualidade. O método Monte Carlo passou então a ser considerado como uma técnica numérica universal, sendo por exemplo essencial nas simulações exigidas para o projeto Manhattan, que levou à construção da bomba atômica. O seu surgimento data de 1949 quando Metropolis e Ulam publicaram o artigo intitulado *The Monte Carlo Method*.

Recentemente Fugao Wang e D. P. Landau elaboraram um eficiente algoritmo de Monte Carlo usando um passeio aleatório no espaço de energia para estimar a densidade de estados para modelos clássicos. Nesse algoritmo a densidade de estados é alterada através de um fator modificador sempre que o nível de energia é visitado e um histograma é produzido. Controlando cuidadosamente a evolução do fator sempre que o histograma fica suficientemente nivelado, verifica-se que a densidade de estados converge para o seu valor real. Com a densidade de estados no final do passeio aleatório, podemos estimar quantidades termodinâmicas, tais como energia interna e calor específico, enfim podemos calcular as médias canônicas em qualquer variável a qualquer temperatura.

Em 2007 Belardinelli propôs um algoritmo para calcular a densidade de estados baseado no método de Wang-Landau que é, basicamente, um passeio aleatório pelo espaço de energia onde a densidade de estados é modificada por uma função do tempo t , $F(t) = 1/t$. Consequentemente o cálculo da densidade de estados $g_m(E, t)$ se aproxima assintoticamente para o valor exato $g_{ext}(E, t) \propto t^{-1/t}$, evitando saturação de erro.

Neste trabalho aplicamos o algoritmo de Wang-Landau para um modelo simples de polímero altamente idealizado descrito na ref. [4]. A vantagem deste modelo é que o formalismo canonico apresenta uma solução exata. A simulação de WL resultante

pode então ser comparada diretamente com a solução exata. Realizamos duas simulações distintas : (a) usando WL convencional parando quando $\ln f \sim 10^{-4}$, atualizando a densidade de estados somente depois que cada monômero teve a chance de se mover e exigindo nivelamentos do histograma de 80% e 90% realizando dezenas de rodadas independentes e depois tomando a média e (b) aplicamos o algoritmo 1/t, terminando em $\ln f$ desde 10^{-6} até 5×10^{-7} e também tomando a média sobre um grande número de amostras independentes. Comparamos os nossos resultados com os da solução exata e a eficiência de cada um dos métodos.

2 METODOLOGIA

O algoritmo proposto por Wang-Landau (WLS) é baseado na observação de que se realizarmos um passeio aleatório pelo espaço de fase com uma probabilidade proporcional ao inverso da densidade de estados $\frac{1}{g(E)}$, então é gerado um histograma nivelado para a distribuição de energia. Assim, o histograma de energia serve como teste de convergência para a densidade de estados para o seu valor verdadeiro. No início do passeio aleatório a densidade de estados não é conhecida a priori, de modo que basta definir $g(E) = 1$ para todas as energias. Começando nosso passeio temos E_1 e E_2 a energia antes e a energia depois onde a probabilidade de transição de uma energia E_1 para E_2 é

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

Cada vez que a energia E é visitada atualizamos a densidade de estados correspondente, multiplicando o valor existente por um fator modificador $f > 1$, $g(E) \rightarrow g(E)f$. Inicialmente o fator modificador é dado por $f = f_0 = e^1 = 2.71828\dots$. A medida que ocorre o passeio aleatório acumulamos um histograma $H(E)$ e visitação dos níveis de energia. Quando todas as colunas do histograma estão acima de 80% ou 90% da média das colunas reduzimos o fator modificador por um mais refinado pela regra $f_{i+1} = \sqrt{f_i}$ e zeramos o histograma $H(E)$. A simulação termina quando o fator modificador fica menor que um valor predeterminado, em geral, $f_{final} = \exp(10^{-8})$. No algoritmo convencional a mudança de um elemento do seu sistema gera uma nova configuração, para cada mudança falamos que o sistema realizou um passo de Monte Carlo (MC).

O algoritmo 1/t [2] é dividido em dois passos, inicialmente o convencional WL é seguido, começando de $S(E) \equiv \ln g(E) = 0$ e construindo $S(E)$ usando um histograma para atualizar todas as novas configurações aceitas. $S(E)$ é atualizado como no WLS, $S(E) = S(E) + F_i$, com valor inicial $F_0 = 1$. Depois de um certo número de movimentos (e.g. 1000 MCS), utilizamos $H(E)$ para verificar se todos os níveis foram visitados por um caminho aleatório pelo menos uma vez, atualizamos $F_{i+1} = F_i/2$ e zeramos $H(E) = 0$. (O nivelamento não é requerido, nem mesmo nessa primeira fase). A simulação é realizada enquanto $F_i \geq 1/t = N/j$, onde j é o número de tentativas de mover e N é o número de estados de energia. No restante da simulação F_i é atualizado para toda nova configuração com $F_i = 1/t$ até uma precisão final escolhida F_{final} .

Uma estratégia diferente [3] que ajuda a aprimorar a precisão do WLS é atualizar a densidade de estados periodicamente, isto é, a cada p tentativas de nova configuração, em vez de atualizar $S(E)$ para cada troca de monômero. Neste novo método para simulação:

- WLS deve ser realizado somente até $\ln f \sim 10^{-4}$

- Em vez de atualizar a densidade de estados a cada mudança, atualizamos a cada N tentativas, onde N é o número de monômeros no polímero.

Nosso modelo de polímero guarda muito pouca relação com um polímero verdadeiro, entretanto ele serve como calibrador para trabalhos posteriores, uma vez que possui solução exata. Nesse modelo cada monômero unitário têm a possibilidade de se mover no eixo paralelo ou antiparalelo de x , esse movimento é representado por um trabalho unitário $+\tau$ ou $-\tau$ que está associado com essas duas orientações, onde τ é a tensão. Além disso, cada monômero têm ainda a possibilidade de movimento perpendicular ao eixo x , ou seja, $+y$ ou $-y$. Para esses movimentos atribuímos uma energia positiva ε em ambos os casos. A energia total é dada por

$$E = (N_x^+ - N_x^-)\tau + (N_y^+ + N_y^-)\varepsilon \quad (2)$$

onde N_x^+ , N_x^- , N_y^+ e N_y^- são os números de monômeros nas quatro possibilidades. Então a quantidade total de monômeros é dada por

$$N = N_x^+ + N_x^- + N_y^+ + N_y^- \quad (3)$$

A densidade de estados exata é dada por

$$\Omega(E) = \sum_{i=0}^{\frac{N+E}{2}} \sum_{j=0}^i \frac{N!}{\frac{1}{2}(N-E)! \frac{1}{2}(N-2i+E)! j!(i-j)!} \quad (4)$$

Para esse modelo foram realizadas a simulação WL convencional com nivelamento de 80% e 90%, $1/t$ com $\ln f$ até 5×10^{-7} e o novo procedimento (atualização periódica da densidade de estados) com nivelamento de 80% e 90% e $\ln f \sim 10^{-4}$. Simulamos 100 amostras independentes. Utilizando um procedimento de mínimos quadrados trouxemos todas as densidades de estado simuladas à máxima aproximação da densidade de estado exata. A comparação dos resultados foi feita através da observação do erro relativo

$$\varepsilon = \frac{|x_{sim.} - x_{exato}|}{x_{exato}} \quad (5)$$

3 RESULTADOS

Na Fig. 1 mostramos $\ln g(E)$ em função da energia. É impossível distinguir qualquer diferença entre as curvas simuladas e a exata. Na Fig. 2 mostramos o erro relativo em função do número de amostras que participa da média, com o objetivo de estimar qual o número adequado de rodadas independentes que deve ser adotado. É visível a grande melhora dos resultados quando se adota o procedimento de atualizar $\ln g(E)$ a cada N tentativas de movimento. Na Fig. 3(a) mostramos o erro relativo da média de 100 rodadas para cada nível de energia. Novamente é notável a melhor precisão com o novo procedimento.

Acreditamos que a razão da melhora na precisão está no fato de que atualizando a cada N tentativas, há uma maior variação entre a energia antiga e a nova energia, facilitando o processo de nivelamento e diminuindo o erro relativo.

Na Fig. 3(a) podemos observar o erro relativo para cada nível de energia com nivelamento de 90% para a simulação convencional e o novo procedimento. Percebemos que para o novo procedimento o erro é menor e melhor distribuído nos níveis de energia.

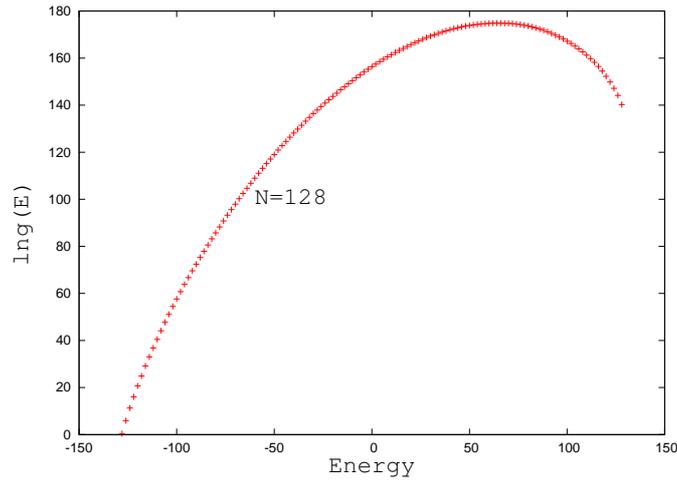


Figura 1: Gráfico do logaritmo da densidade de estados pela energia.

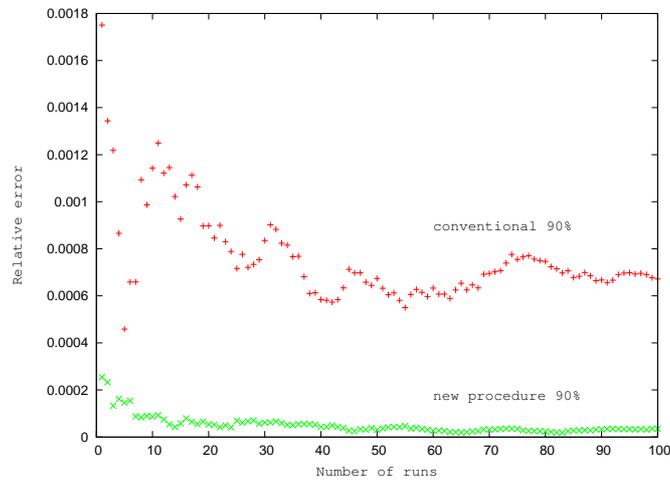


Figura 2: Gráfico do erro relativo pelo número de rodadas.

Notamos que o erro relativo para energias baixas são elevados, fato já observado em outros modelos [1]. Entretanto observa-se que para o novo procedimento os níveis de energia que apresentam essa distorção são em número bem menor.

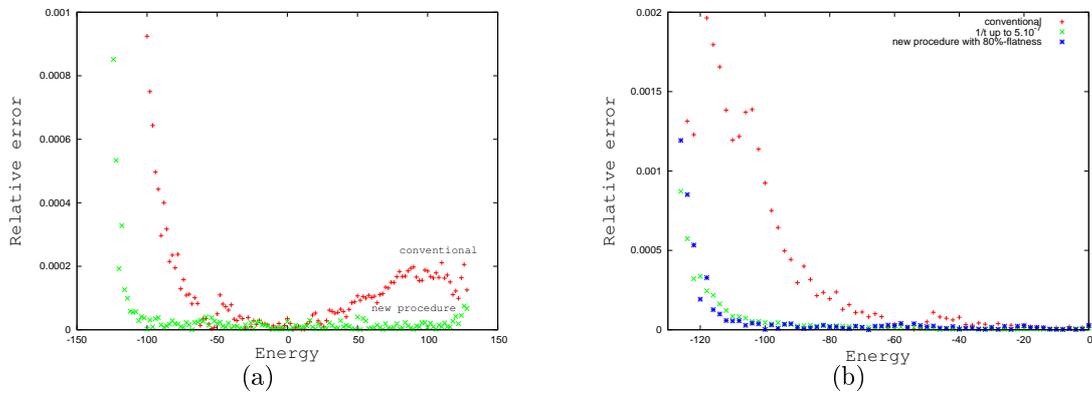


Figura 3: Gráfico do erro relativo pelos níveis de energia.

Na Fig. 3(b) comparamos os erros relativos das simulações convencional, $1/t$

e as atuais na faixa de energias mais baixas (-128 à 0). Vemos que a simulação usando o novo procedimento e a do $1/t$ apresentaram resultados semelhantes, porém ocorre que o tempo de CPU na simulação $1/t$ é muito maior.

Tabela 1. Comparação dos tempos de CPU.

Caso	Tempo de CPU
Convencional WLS	
80%	1.00
90%	1.93
$1/t$	
5.10^{-7}	13.32
Novo procedimento	
80%	0.59
90%	1.64

Na tabela 1 temos os tempos de CPU para cada caso. Eles estão expressos em termos do tempo gasto na simulação com WLS 80% convencional. Vemos que, embora o $1/t$ apresente resultados confiáveis, o seu tempo de CPU é proibitivamente maior. Já o novo procedimento, surpreendentemente exhibe tempos ainda inferiores que aqueles da simulação convencional.

4 CONCLUSÕES

Analisando os resultados obtidos para os três casos percebe-se que alterar a forma de atualizar a densidade de estados, retorna resultados muito mais precisos para a simulação WL. O algoritmo $1/t$ forneceu bons resultados, entretanto o tempo de CPU foi muito maior. Já o novo procedimento demonstrou-se mais eficiente nos dois métodos de comparação. No modelo de Ising 2D [3] os tempos gastos com o novo procedimento são bem maiores que no WL convencional, enquanto que no modelo de polímero que estudamos essa situação se inverte, um comportamento muito bem-vindo.

REFERÊNCIAS

Referências

- [1] F. Wang, D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
- [2] R. E. Belardinelli and V. D. Pereyra, Phys. Rev. E **75**, 046701 (2007).
- [3] A.A.Caparica and A. G. Cunha-Netto, *Wang-Landau sampling: A new paradigm for simulations*, (in preparation).
- [4] H. B. Callen, Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics Second Edition. New York: John Wiley & Sons Inc., (1985).