

Universidade Federal de Minas Gerais  
Instituto de Ciências Exatas  
Departamento de Física

# Fenômenos Críticos em Gases de Rede

Antônio Gonçalves da Cunha Netto

nm. 043 C972f TD

r: Cunha Netto, Antônio Gonçalves  
o: Fenômenos críticos em gases de r



51951306

Ac. 558120

Belo Horizonte  
2012

LEI DO DIREITO AUTORAL  
Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998.  
Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
transmitido sejam quais forem os meios  
empregados: eletrônicos, mecânicos,  
fotográficos ou quaisquer outros.

FENÔMENOS CRÍTICOS EM GASES DE  
REDE

Antônio Gonçalves da Cunha Netto

Março 2012

ANTÔNIO GONÇALVES DA CUNHA NETTO

LEI DO DIREITO AUTORAL  
Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998  
Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
transmitido sejam quais forem os meios  
empregados: eletrônicos, mecânicos,  
fotográficos ou quaisquer outros.

FENÔMENOS CRÍTICOS EM GASES DE  
REDE

U.F.M.G. - BIBLIOTECA UNIVERSITÁRIA



5 1951306

NÃO DANIFIQUE ESTA ETIQUETA

Tese submetida à UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS  
GERAIS como requisito parcial para a obtenção do grau de  
DOUTOR EM CIÊNCIAS.

Área de Concentração: FÍSICA

Orientador: Prof. Dr. Ronald Dickman (Física/UFMG)

Departamento de Física - ICEx - UFMG

2012

# Agradecimentos

Ao mestre e professor Ronald Dickman por todos os ensinamentos, incentivo, dedicação e orientação.

À minha família por todo amor e carinho concedido. Em especial minha mãe, com sua genial simplicidade e sabedoria, minha irmã, com sua força inigualável e minha vó com sua excepcional inteligência.

À minha linda Fernanda que tem me acompanhado e dedicado muito de seu tempo, carinho e atenção.

Aos professores do Departamento de Física da UFMG por esses anos de convívio e aprendizado. Em especial aos professores Jafferson, Plascak, José Guilherme, Waguinho e Mário Mazzoni pelas várias discussões.

A todos os amigos do departamento: Caio, Lucas Wardil, Jonas, Luciano, Ulisses, Thiago, Alexandre, Lucas Mol, Renato, Jenaína, Anna Lúcia, Daniele, José Eduardo, Fernando, João Filho, Eduardo, Luellerson, Luciana, Adriano, que contribuíram para que o doutorado fosse uma tarefa mais simples. Me desculpem os que por descuido esqueci de mencionar.

Ao grande amigo Júlio César Mansur Filho, por todas as discussões e diversões.

A todos os funcionários do departamento por permitirem que as coisas funcionem de forma eficiente.

Ao CNPq e a CAPES pelo apoio financeiro.



Universidade Federal de Minas Gerais  
Instituto de Ciências Exatas  
Programa de Pós-Graduação em Física  
Caixa Postal 702  
30.123-970 Belo Horizonte - MG - Brasil

Telefone (xx) (31) 3409 5637  
(xx) (31) 3409 5633  
Fax (xx) (31) 3409 5688  
(xx) (31) 3409 5600  
e-mail pggfisica@fisica.ufmg.br

A presente tese, intitulada **"FENÔMENOS CRÍTICOS EM GASES DE REDE"** de autoria de **ANTÔNIO GONÇALVES DA CUNHA NETTO** submetida à Comissão Examinadora, abaixo-assinada, foi aprovada para obtenção do grau de **DOUTOR EM CIÊNCIAS**, em seis de setembro de 2012.

Belo Horizonte, 06 de setembro de 2012.

Prof. Ronald Dickman

Orientador do estudante

Departamento de Física – UFMG

Prof. João Antônio Plascak

Departamento de Física – UFMG

Prof. Ricardo Schwartz Schor

Departamento de Física – UFMG

Prof. Jürgen Fritz Stilck

Instituto de Física – UFF

Prof.ª Márcia Cristina Bernardes Barbosa

Instituto de Física – UFRGS

**ATA DA SESSÃO DE ARGUIÇÃO DA TESE DE DOUTORADO DO MESTRE FERNANDO PEREIRA DE FARIA**, orientado pelo professor Ronald Dickman, para obtenção do grau de **DOUTOR EM CIÊNCIAS**. Às 9:00 horas do dia trinta de agosto de dois mil e doze, na sala 4128 do Departamento de Física da UFMG, reuniu-se a Comissão Examinadora, composta pelos

LEI DO DIREITO AUTORAL

Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998.

Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
transmitido sejam quais forem os meios  
empregados: eletrônicos, mecânicos,  
fotográficos ou quaisquer outros.

*À Maria S. G. Oliveira*

“O que prometi há sete meses, produzir um trabalho que, de acôrdo com o julgamento dos eruditos, seja elegante, impressionante e muito superior a todos os calendários anuais, eu agora apresento à Vossa Graciosa Companhia, meus nobres Lordes, um trabalho que, conquanto pequeno em âmbito e apenas o fruto de meus próprios modestos esforços, trata de um assunto maravilhoso. Se desejais maturidade – Pitágoras já tratou dêle há uns 2000 anos. Se desejais novidade – é a primeira vez que êsse assunto é apresentado a tôda a humanidade por mim. Se desejais alcance – nada é maior ou mais amplo do que o Universo. Se desejais venerabilidade – nada é mais precioso, nada é mais bonito em nosso magnífico templo de Deus. Se desejais conhecer os mistérios – nada na Natureza é, ou foi, mais recôndito. Apenas por uma única razão o meu assunto não agradará a todos, pois a sua utilidade não será aparente aos destituídos de imaginação.”

(Trecho do livro *Mysterium Cosmographicum* (1596), de Johannes Kepler)

# Sumário

---

LEI DO DIREITO AUTORAL  
Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998.  
Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
transmitido sejam quais forem os meios  
empregados: eletrônicos, mecânicos,  
fotográficos ou quaisquer outros.

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Método Monte Carlo</b>	<b>7</b>
2.1	Algoritmo de Metropolis . . . . .	8
2.2	Algoritmos entrópicos . . . . .	11
2.2.1	Algoritmo de Wang-Landau . . . . .	11
2.2.2	Algoritmo das janelas ajustáveis . . . . .	14
2.2.3	Nova proposta: Amostragem tomográfica . . . . .	17
<b>3</b>	<b>Gás de rede EPV</b>	<b>18</b>
3.1	Modelo . . . . .	18
3.2	Resultados . . . . .	21
3.2.1	Análise por matriz transferência . . . . .	22
3.2.2	Rede quadrada . . . . .	24
3.2.3	Rede cúbica simples . . . . .	31
3.2.4	Comportamento crítico de $g(\rho)$ . . . . .	35



3.3	Discussão dos resultados . . . . .	37
<b>4</b>	<b>Mistura binária</b>	<b>39</b>
4.1	Fundamentação do modelo . . . . .	39
4.2	Resultados . . . . .	44
4.2.1	Comparação com o EPV . . . . .	45
4.2.2	Mistura binária . . . . .	47
4.3	Ponto tricrítico . . . . .	53
<b>5</b>	<b>Amostragem tomográfica</b>	<b>57</b>
5.0.1	Método . . . . .	57
5.0.2	Implementação . . . . .	60
5.1	Resultados . . . . .	64
5.1.1	Modelo de Ising em uma rede quadrada . . . . .	64
5.1.2	Modelo de Ising na rede cúbica simples . . . . .	72
5.1.3	Gás de rede com exclusão de primeiros vizinhos . . . . .	74
5.1.4	Singularidade crítica na densidade de entropia . . . . .	77
5.1.5	Restringir a amostragem . . . . .	77
<b>6</b>	<b>Conclusão</b>	<b>82</b>
	<b>Artigos publicados</b>	<b>91</b>

LEIDO DIREITO AUTORAL  
 Todos os direitos reservados e protegidos  
 pela Lei 9.610/1998.  
 Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
 transmitido sejam quais forem os meios  
 empregados: eletrônicos, mecânicos,  
 fotográficos ou quaisquer outros.

# Lista de Figuras

LEI DO DIREITO AUTORAL  
Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998.  
Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
transmitido sejam quais forem os meios  
empregados: eletrônicos, mecânicos,  
fotográficos ou quaisquer outros.

2.1	Esquema das janelas adaptáveis; os valores de $\vartheta_{min}$ e $\vartheta_{max}$ dependem do modelo, enquanto $\vartheta^*$ e $\vartheta_1, \vartheta_2$ , etc, são determinados durante a simulação. . . . .	16
3.1	Representação esquemática das partículas na rede. As partículas estão hachuradas de maneira diferente para enfatizar a ocupação em subredes diferentes. . . . .	20
3.2	Rede quadrada: $\ln \Omega/L^2$ em função da densidade, os tamanhos do sistema estão indicados. Inserção: $N^*(L)$ em função do tamanho do sistema. Aqui fica evidente a dependência da posição do máximo de $\Omega$ com o tamanho do sistema. . . . .	26
3.3	Rede quadrada: densidade em função do potencial químico em uma rede quadrada. As barras de erros são menores que os símbolos. A inflexão perto do ponto de transição é fraca, sendo imperceptível para os tamanhos menores. Inserção: compressibilidade em função do potencial químico. . . . .	27
3.4	Rede quadrada, painel superior: parâmetro de ordem em função do potencial químico. Painel inferior: susceptibilidade como função do potencial químico. As inserções são o colapso da curvas. . . . .	28

3.5 Rede quadrada: cumulante de quarta ordem para os tamanhos de rede indicados na figura. . . . . 29

3.6 Máximo da susceptibilidade em função do tamanho do sistema para a rede quadrada (inserção) e rede cúbica simples. As linhas contínuas são ajustes lineares usados para estimar  $\gamma/\nu$ . . . . . 30

3.7 Rede quadrada: máximo da compressibilidade em função de  $\ln L$ . A inserção mostra a densidade como função de  $1/L^{1/\nu}$ . . . . . 31

3.8 Rede cúbica simples: Logaritmo de  $\Omega(N)$  em função da densidade, os tamanhos do sistema estão indicados. Inserção: cumulante de quarta ordem. 32

3.9 Rede cúbica simples: densidade como função do potencial químico. Inserção: Compressibilidade como função do potencial químico. . . . . 33

3.10 Rede cúbica simples: Parâmetro de ordem em função do potencial químico. Inserção: susceptibilidade em função do potencial químico. . . . . 34

3.11 Parâmetro de ordem crítico em função do tamanho do sistema para a rede quadrada (inserção) e rede cúbica simples. As linhas contínuas são ajustes lineares usados para obter  $\beta/\nu$ . . . . . 35

3.12 Segunda derivada de  $g(\rho)$  para uma rede cúbica simples,  $L = 12, 16, 24, 32$  e 48. A inserção mostra o comportamento similar para a rede quadrada, os tamanhos do sistema são  $L = 24, 48, 128$  e 196. . . . . 36

4.1 Representação esquemática das partículas na rede. As partículas grandes estão hachuradas de maneira diferente para enfatizar a ocupação em subredes diferentes. . . . . 42

4.2	Pares ordenados representando os níveis de $N, n$ em que a densidade de estados é diferente de zero, lembrando que $N$ é o número de partículas grandes e $n$ o número de sítios da rede disponíveis para partículas pequenas. A “falha” presente em $n \approx 0$ e $N \approx 50$ é uma falha real que persiste para os sistemas grandes. Ela surge devido a forma de ocupação dos sítios na rede: as duas subredes são preenchidas por partículas grandes de forma a não ser possível inserir partículas pequenas. . . . .	45
4.3	Logaritmo da densidade de estados em função de níveis $N, n$ para uma rede de $20 \times 20$ sítios. As duas figuras (superior e inferior) estão desenhadas com os mesmos dados, apenas em perspectivas diferentes. . . . .	46
4.4	Isofugacidades para $L = 48$ . As barras de erros são menores que os símbolos. Os asteriscos definem a curva bimodal. . . . .	48
4.5	Parâmetro de ordem (Fig. superior) e susceptibilidade (Fig. inferior) em função do potencial químico das partículas grandes $\mu_l$ , fixado o valor de $\mu_s$ como indicado. Tamanho do sistema: $48 \times 48$ . . . . .	49
4.6	Parâmetro de ordem (Fig. superior) e susceptibilidade (Fig. inferior) em função do potencial químico das partículas grandes $\mu_s$ , fixado o valor de $\mu_l$ . Tamanho do sistema: $48 \times 48$ . . . . .	50
4.7	Diagrama de fases ( $L = 48$ ) da mistura binária. Para $\mu_s < \mu_{s,t}$ , a linha de transições (sólida) é uma linha de transições de segunda ordem, enquanto que para $\mu_s > \mu_{s,t}$ (linha tracejada) corresponde a transições de primeira ordem. Inserção: detalhe da região $\mu_{s,c} < -0,5$ . . . . .	51

4.8	Diagrama de fases no plano $\rho_{l,c}-\rho_{s,c}$ . A linha sólida (tracejada) corresponde a transições contínuas (descontínuas). As linhas de ligação conectam pares de composições coexistentes. As barras de erros são menores que os símbolos. Os pontos são aproximantes de Padé para as séries de (Poland, 1984). . . . .	52
4.9	Distribuição de probabilidades ( $L = 24$ ) em função da densidade de partículas grandes em quatro pontos $(\mu_l, \mu_s)$ ao longo da linha de transições. . . . .	53
4.10	Quarto cumulante reduzido ao longo da linha dos máximos da susceptibilidade; tamanhos do sistema como indicado. As barras de erros não estão exibidas por serem menores que símbolos. Inserção: detalhe da região de cruzamento. . . . .	54
4.11	Densidade das partículas grandes em função de $1/L$ para os valores de $\mu_{l*}, \mu_{s*}$ . Como fica evidente na figura, a densidade não converge quando $L \rightarrow \infty$ . . . . .	55
4.12	Extrapolação de $\rho_{l,t}(L)$ e $\rho_{s,t}(L)$ em função de $1/L$ para obter o ponto tricrítico. Usamos nesta extrapolação $L = 24, 32, 40$ e $48$ . . . . .	56
5.1	Modelo de Ising, rede quadrada: desvio relativo do histograma, $h(\rho) \equiv [H(\rho) - \overline{H}]/\overline{H}$ , em função da densidade $\rho$ para $L = 10$ . A curva escura é o resultado da primeira iteração, enquanto que a linha horizontal corresponde as quatro iterações subseqüentes. . . . .	63
5.2	Detalhe da iterações 2 - 5 como na Fig. 5.1. . . . .	64
5.3	$s(\rho)$ em função de $\rho$ para $L = 10, 20, 40, 80$ , e $160$ (de cima para baixo). A inserção mostra uma imagem detalhada nas proximidades de $\rho = 2$ . . . . .	66

5.4	Calor específico em função da temperatura para $L = 80$ . Na figura são mostrados cinco simulações independentes. . . . .	67
5.5	Calor específico na temperatura crítica $c_c$ em função de $\ln L$ . A inclinação da reta é $0,498(2)$ . . . . .	68
5.6	Magnetização por sítio em função da temperatura para tamanhos de sistema $L = 10, 20, 40, 80$ , e $160$ . Incertezas estão mostradas na inserção. . . . .	70
5.7	Susceptibilidade em função da temperatura para tamanhos de sistema $L = 10, 20, 40, 80$ , e $160$ . Incertezas são mostradas na inserção. . . . .	71
5.8	Modelo de Ising, rede cúbica simples: calor específico em função da temperatura para os tamanhos $L = 8, 12, 16, 20, 24, 28, 32$ , e $36$ . . . . .	73
5.9	Gás de rede EPV: susceptibilidade em função do potencial químico. Inserção: parâmetro de ordem em função do potencial químico. Os tamanhos do sistema estão indicados na figura. As barras de erros são menores que os símbolos. . . . .	76
5.10	Modelo de Ising, rede quadrada: $s''(\rho)$ em função de $\rho$ para os tamanhos $L = 20, 40, 80, 120$ , e $160$ . O mínimo em $ s'' $ cresce e afina com o aumento do tamanho do sistema. . . . .	78
5.11	Modelo de Ising, rede cúbica simples: $s''(\rho)$ em função de $\rho = n/3L^3$ para os tamanhos $L = 16, 24$ , e $32$ . As três curvas são indistinguíveis nessa escala. . . . .	79
5.12	Gás de rede EPV, rede quadrada: $s''(\rho)$ em função de $\rho = N/L^2$ para os tamanhos $L = 20, 40, 80$ , e $120$ . . . . .	80

# Lista de Tabelas

LEI DO DIREITO AUTORAL  
Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998  
Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
transmitido sem que sejam os meios  
empregados: eletrônicos, mecânicos,  
fotográficos ou quaisquer outros.

- 3.1 Comparação com resultados numéricos ( $L = 8$ ) para a densidade de estados. O erro relativo é calculado com  $\varepsilon(N) = (\ln \Omega(N) - \ln \check{\Omega}(N)) / \ln \check{\Omega}(N)$ . 23
- 3.2 Valores críticos para a rede quadrada obtidos através de uma amostragem WL com janelas ajustáveis. Os resultados de (Nicolaidis; Bruce, 1988) foram obtidos usando simulações de Monte Carlo enquanto os de (Guo; Blöte, 2002; Burkhardt; Derrida, 1985; Kamieniarz; Blöte, 1993) usaram uma técnica de matriz transferência. . . . . 31
- 3.3 Valores críticos para a rede cúbica simples obtidos através do algoritmo das janelas ajustáveis. Os resultados de (Heringa; Blöte, 1996) foram obtidos usando um algoritmo de aglomerado (*cluster*) do gás de rede EPV. Os resultados de (García; Gonzalo, 2003) e (Blöte; Luijten; Heringa, 1995) são de simulações de alta precisão usando um algoritmo de aglomerados para o modelo de Ising. . . . . 35
- 5.1 Rede quadrada: comparação dos resultados teóricos e da simulação para a temperatura onde o calor específico exibe um máximo e para o calor específico em  $T_c$ . Note que as expressões teóricas para  $T(c_{max})$  e  $c(T_c)$  são sujeitas a correções de ordem  $1/L^2$  e  $1/L^4$ , respectivamente. . . . . 68

5.2	Rede quadrada: resultados simulacionais para a temperatura do máximo da susceptibilidade e para a susceptibilidade em $T_c$ . . . . .	69
5.3	Modelo de Ising, rede quadrada: resultados da simulação para a temperatura e valor do cumulante no cruzamento para os pares de tamanhos sucessivos. . . . .	71
5.4	Valores críticos para o gás de rede com exclusão de primeiros vizinhos obtido através da amostragem tomográfica e usando a amostragem de WL com janelas ajustáveis. Os resultados da Ref. (Nicolaidis; Bruce, 1988) foram obtidos através de simulações de Monte Carlo e nas Refs. (Guo; Blöte, 2002; Burkhardt; Derrida, 1985; Kamieniarz; Blöte, 1993) foi usando uma análise de matriz transferência. . . . .	76



## Resumo

Propriedades críticas de gases de rede com exclusões de primeiros vizinhos (EPV) são investigadas através da amostragem de Wang-Landau (AWL) com janelas ajustáveis na rede quadrada e cúbica simples, para as quais o modelo exhibe uma transição de fase tipo Ising. Estudamos a densidade de partículas, parâmetro de ordem, compressibilidade, cumulante de Binder e susceptibilidade, com o intuito de testar AWL, o qual tem sido amplamente utilizado nos últimos anos, no contexto de gases de rede. É de considerável interesse verificar a possibilidade de estimar expoentes críticos com segurança usando AWL com janelas ajustáveis. Observamos que o método leva a resultados em razoável acordo com valores exatos (em duas dimensões) e estimativas numéricas (em três dimensões). No próximo estudo usando AWL, investigamos uma separação entrópica em uma mistura binária de gás de rede em duas dimensões. O sistema consiste de partículas “grandes” que excluem a ocupação dos sítios primeiros vizinhos e partículas “pequenas” com apenas um sítio de exclusão. Estudamos as propriedades críticas do sistema e comparamos nossos resultados com enumerações exatas e com o caso quando  $z_s = 0$ , ou seja, o gás de rede EPV. O diagrama de fases do modelo é obtido através de simulações de Monte Carlo para tamanhos de rede até  $48 \times 48$ . O diagrama no plano das densidades é usado para obter as densidades no ponto tricrítico como  $\rho_{l,t} = 0,2029(1)$  e  $\rho_{s,t} = 0,318(2)$ . Reforçamos que AWL permite a avaliação do número de configurações, restrito a amostragem a uma única janela. Observamos que tentativas de restringir a amostragem a subconjuntos do intervalo de energias leva a distorções na densidade de estados. Isto limita a avaliação do número de configurações para sistemas grandes, necessário para contornar efeitos de tamanho finito. Para evitar essa desvantagem propomos uma nova técnica de Monte Carlo. Introduzimos uma amostragem entrópica tomográfica, um esquema que usa múltiplos estudos, começando de diferentes regiões do espaço de configurações, levando a estimativas precisas do número de configurações sobre o *intervalo completo* de energias, *sem* dividi-lo

em subintervalos ou janelas. Aplicado ao modelo de Ising na rede quadrada, o método leva a temperatura com uma precisão de aproximadamente 0,01%, e expoentes críticos com 0,5% ou melhor. Predições para tamanhos de sistema  $L = 10 - 160$ , para a temperatura do máximo do calor específico e para o calor específico na temperatura crítica, estão em ótima concordância com resultados exatos. Para o modelo de Ising na rede cúbica simples a temperatura crítica é obtida com precisão de 0,004% em relação a melhor estimativa disponível, usando resultados para tamanhos de sistema 8 - 32; as razões de expoentes  $\beta/\nu$  e  $\gamma/\nu$  estão dadas com precisão de aproximadamente 3% e 1%, respectivamente, com base nas melhores estimativas disponíveis. Em ambas duas e três dimensões, resultados para o ponto crítico *antiferromagnético* são completamente consistentes com aqueles da transição ferromagnética. Aplicações ao gás de rede com exclusão de primeiros vizinhos na rede quadrada novamente levam ao potencial químico crítico e razões de expoentes  $\beta/\nu$  e  $\gamma/\nu$  com boas precisões.

## Abstract

Critical properties of lattice gases with nearest-neighbor exclusion (NNE) are investigated via adaptive-window Wang-Landau sampling (WLS) on the square and simple cubic lattices, for which the model is known to exhibit an Ising-like phase transition. We study the particle density, order parameter, compressibility, Binder cumulant and susceptibility, in efforts to test WLS, which has been used quite widely in recent years, in the context of lattice gases. Of considerable interest is whether it is possible to estimate critical exponents reliably using WLS with adaptive windows. We find that the method yields results in fair agreement with exact values (in two dimensions) and numerical estimates (in three dimensions). In the next study using WLS, we investigate entropic demixing in a two-dimensional binary lattice-gas mixture. The system consists of “large” particles which exclude occupation of nearest neighbor-sites and “small” particles with on-site exclusion only. We study the critical properties of the system and compare our results with exact enumerations and with the case when  $z_s = 0$ , i.e., the NNE lattice gas. The phase diagram of the model is obtained through Monte Carlo simulation for lattice sizes up to  $48 \times 48$ . The diagram in the density-plane is used to obtain the densities at tri-critical point as  $\rho_{l,t} = 0,2029(1)$  and  $\rho_{s,t} = 0,318(2)$ . We stress that WLS permits the evaluation of the number of configurations, restricting the sample over *one* window. We observe that attempts to restrict the sampling to a subset of the full energy range lead to distortions in the density of states. It limits the evaluation of the density of states for larger system, necessary to contour finite size effects. To avoid this disadvantage we propose a new Monte Carlo technique. We introduce *tomographic* entropic sampling, a scheme which uses multiple studies, starting from different regions of configuration space, to yield precise estimates of the number of configurations over the *full range* of energies, *without* dividing the latter into subsets or windows. Applied to the Ising model on the square lattice, the method yields the critical temperature to an accuracy of about 0.01%,

and critical exponents to 0.5% or better. Predictions for systems sizes  $L = 10 - 160$ , for the temperature of the specific heat maximum, and of the specific heat at the critical temperature, are in very close agreement with exact results. For the Ising model on the simple cubic lattice the critical temperature is given to within 0.004% of the best available estimate, using results for system sizes 8 - 32; the exponent ratios  $\beta/\nu$  and  $\gamma/\nu$  are given to within about 3% and 1%, respectively, of the best available estimates. In both two and three dimensions, results for the *antiferromagnetic* critical point are fully consistent with those of the ferromagnetic transition. Application to the lattice gas with nearest-neighbor exclusion on the square lattice again yields the critical chemical potential and exponent ratios  $\beta/\nu$  and  $\gamma/\nu$  to good precision.

# Capítulo 1

---

## Introdução

LEI DO DIREITO AUTORAL  
Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998.  
Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
transmitido sejam quais forem os meios  
empregados: eletrônicos, mecânicos,  
fotográficos ou quaisquer outros.

Há séculos o homem vem tentando entender e até mesmo explicar o complicado comportamento dos fenômenos da natureza. Determinar a importância das variáveis que governam um determinado sistema, podendo assim prever seu comportamento futuro, sempre foi um empolgante estímulo para o ser humano. Saber, por exemplo, quais são os motivos das chuvas, como animais detectam suas presas ou predadores em seus ecossistemas, qual a trajetória de grãos de areia durante a movimentação das dunas, como o câncer se propaga, como os neurônios interagem no sistema nervoso, como o mercado financeiro reage à mudanças na economia, ou até desenvolver tecnologias magneto-eletrônicas capazes de transportar ou armazenar dados, são motivações mais que suficientes para colocar uma gama de cientistas atrás dessas e de outras respostas. Mas, na maioria das vezes é impossível estudar completamente sistemas reais, devido ao alto grau de complexidade das variáveis que influenciam direta ou indiretamente o meio.

Devido à enorme dificuldade em se estudar os sistemas reais analiticamente, foram desenvolvidas teorias capazes de explicar determinados fenômenos, seja através de modelos

ou por algum tipo de aproximação para os eventos. Essas teorias não necessariamente tornaram o trabalho dos cientistas simples, uma vez que estas aproximações ainda podem envolver uma série de análises muitas vezes difíceis de serem resolvidas. Ciências como por exemplo a física, a qual estuda, em essência, os fenômenos que ocorrem na natureza, ou de uma forma mais abrangente no universo, enfrentam dificuldades como essas.

O estudo dos fenômenos naturais teve uma grande ascensão com o advento de um terceiro ramo da ciência, uma “mistura” entre a teoria e o experimento: as simulações computacionais. A vantagem dessa nova modalidade de estudo é que fornece informações com bastante precisão sobre sistemas modelos, utilizados para a descrição e comparação com resultados analíticos e experimentais.

Um dos motivos do grande entusiasmo com a ciência computacional é o crescente aumento na velocidade de processamento dos computadores. As simulações numéricas vêm assim se tornando excelentes ferramentas para estudar sistemas com muitas variáveis e com muitos graus de liberdade, como por exemplo, redes neurais, sistemas de muitas partículas interagentes, misturas de fluidos, enovelamento de proteínas, colapso de polímeros e modelos de spins.

Uma técnica que faz uso dessa instrumentação e que vem sendo usada amplamente nas últimas décadas é o método *Monte Carlo* (*MC*), que consiste em dar estocasticidade aos modelos através de uma amostragem aleatória, podendo ser utilizado em várias áreas da física, química, biologia, matemática, finanças e outras. Nas últimas décadas o método ganhou o status de uma técnica numérica altamente eficiente e capaz de resolver questões altamente complexas. Uma outra importante técnica utilizada comumente na física e que não será abordada nesta tese é a chamada dinâmica molecular. Tal técnica se baseia na evolução das equações de movimento para reproduzir comportamentos da natureza, como por exemplo vibrações de partículas de um determinado sistema.

O nome Monte Carlo foi dado por Nicolas Metropolis (Newman; Barkema, 1999), inspirado pelo interesse de Stanislaw Ulam em problemas estocásticos durante o projeto Manhattan da Segunda Guerra Mundial, por causa da semelhança entre a simulação estatística e os jogos de azar e devido ao famoso cassino de Mônaco. O primeiro uso com sucesso do método *MC* através de computadores se deu em 1953, quando Metropolis e colaboradores estudaram um fluido de discos rígidos. Desde então essa técnica tem proporcionado fascinantes descobertas em várias áreas do conhecimento.

Na física estatística usamos o método Monte Carlo em geral para estudar modelos de sistemas termodinâmicos com muitos graus de liberdade através de simulações computacionais estocásticas (Landau; Binder, 2005). Essa técnica se baseia no uso de números aleatórios para simular flutuações estatísticas com o objetivo de gerar numericamente distribuições de probabilidades, como por exemplo a distribuição canônica ou a grande-canônica, e calcular as médias estatísticas de sistemas clássicos. As informações obtidas através dos sistemas modelos são em princípio bastante acuradas, uma vez que a precisão das grandezas medidas podem ser melhoradas com o aumento do número de ciclos (“passos de Monte Carlo”) realizados. Dessa forma, podemos fazer uma comparação direta entre simulação e experimento.

Na mecânica estatística, como em muitos outros campos da física, precisamos calcular integrais de alta dimensionalidade. O espaço de fase em uma simulação clássica de  $N$  corpos possui  $6N$  dimensões, sendo três coordenadas para localizar a posição e três para o momento de cada partícula. O método *MC* permite avaliar essas integrais com grande precisão, fazendo o uso basicamente de uma “máquina” que possa gerar números aleatórios independentes.

Podemos utilizar o método Monte Carlo em uma grande variedade de sistemas com propriedades estocásticas, logo se faz necessário um algoritmo de geração de números

aleatórios. Esse algoritmo consiste em pura manipulação aritmética de números, cujos resultados satisfazem tanto propriedades de aleatoriedade, como de uniformidade e ausência de correlação: estipulando-se um limite entre 0 e 1, por exemplo, todo número dentro desse intervalo deve ter a mesma probabilidade de ocorrência. Como, na verdade, o algoritmo é construído de forma determinística, todos os números produzidos por ele não são realmente aleatórios, mas sim, “pseudo-aleatórios” (sempre há algum tipo de correlação entre esses números).

Várias técnicas na classe do método MC foram sugeridas para estudar modelos, buscando sempre mais precisão e redução do tempo computacional. Uma classe de técnicas que vêm se tornando métodos numéricos com enorme aplicação à física são os algoritmos entrópicos. Esse nome deriva do fato da técnica permitir estimar de alguma maneira o número de configurações diferentes do sistema (energia fixa), lembrando que o número de configurações se relaciona com a entropia através da fórmula de Boltzmann,  $S = k \ln \Omega$ . Estudos que levam em consideração essa abordagem surgiram a algumas décadas e vem sendo cada vez mais aplicados. Trabalhos como os de (Lee, 1993; Oliveira; Penna; Herrmann, 1996; Leeb; Han, 1997; Wang, 2000; Wang; Landau, 2001a; Schulz; Binder; Müller, 2002; Wang; Swendsen, 2002; Malakis; Peratzakis; Fytas, 2004; Belardinelli; Pereyra, 2007a; Cunha-Netto et al., 2008; Dickman; Cunha-Netto, 2011) buscam obter o número de configurações  $\Omega$  (chamado comumente de “densidade de estados”) para posteriormente calcular as propriedades termodinâmicas do sistema.

Nesta tese usaremos o algoritmo de Wang-Landau afim de estudar o comportamento crítico de modelos de gás de rede, bem como propomos uma metodologia diferente para a obtenção do número de configurações e conseqüentemente as propriedades termodinâmicas do sistema de interesse. A técnica não fica limitada a modelos de gases de rede ou mesmo de spins mas se aplica a todos os modelos analisados utilizando algoritmos entrópicos.



Gases de rede tem sido usado extensivamente como modelos de fluidos simples, e juntamente com o modelo de Ising, tem recebido muita atenção em física estatística de equilíbrio como protótipos para transições de fase. O caso mais simples de gás de rede consiste em partículas que ocupam os vértices de uma dada rede onde cada sítio pode conter no máximo uma partícula, onde considera-se uma interação atrativa ou repulsiva entre partículas que ocupam sítios vizinhos. É fácil mostrar que esse modelo equivale ao modelo de Ising sob a ação de um campo magnético (Lee; Yang, 1952). Um sistema um pouco mais elaborado consiste em um gás de rede onde uma partícula em um determinado sítio não permite a ocupação dos sítios vizinhos mais próximos, conhecido como gás de rede EPV (*“Exclusão de Primeiros Vizinhos”*) (Gaunt; Fisher, 1965). Aqui estudaremos o modelo bem como estudaremos uma mistura com dois tipos diferentes de componentes: partículas tipo EPV e partículas simples (não permitem a ocupação de apenas um sítio). As propriedades termodinâmicas para os dois modelos serão estudadas, bem como o comportamento crítico e expoentes para o caso monocomponente. Para o caso da mistura binária estudaremos o diagrama de fases do modelo, bem como a determinação do ponto tricrítico.

Para o estudo de sistemas grandes os métodos acima citados necessitam de algum tipo de segmentação. No caso específico dos algoritmos que seguem as premissas de Wang-Landau é necessário criar “janelas” e exigir a convergência para cada subintervalo separadamente. Conforme será explicado posteriormente, o fato de limitar o espectro de energia (ou número de partículas para o caso do gás de rede) prejudica a estimativa do valor da densidade de estados. Finalizaremos essa tese propondo um novo algoritmo que evita os problemas aqui detalhados e permite a obtenção de propriedades críticas com ótima precisão. A técnica permite realizar uma amostragem completa do espectro de energia (número de partículas) através de configurações iniciais diferentes. Com um pouco de liberdade na nomenclatura chamaremos a técnica de amostragem tomográfica.

## Capítulo 2

---

# Método Monte Carlo

LEI DO DIREITO AUTORAL  
Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998.  
Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
transmitido sejam quais forem os meios  
empregados: eletrônicos, mecânicos,  
fotográficos ou quaisquer outros.

Métodos do tipo Monte Carlo são amplamente utilizados em muitas problemas numéricos, não só relacionados à Física mas em várias áreas do conhecimento. Neste contexto simulações computacionais tornaram-se ferramentas essenciais na Física da matéria condensada, particularmente no estudo de transições de fases e fenômenos críticos. Tal metodologia é utilizada afim de solucionar vários problemas, como por exemplo reduzir a dinâmica lenta próximo a região crítica (*“critical slowing down”*) em transições de segunda ordem, transpor barreiras de potencial entre fases coexistentes em transições de primeira ordem ou de maneira mais geral estimar o número de configurações diferentes de algum modelo afim de obter propriedades críticas do sistema.

Nesta tese damos enfoque às técnicas que utilizam uma amostragem estocástica para obter a densidade de estados. Tal método chamamos aqui de algoritmo entrópico, uma vez que buscam obter o número de configurações diferentes do sistema, lembrando que o número de configurações se relaciona com a entropia através da fórmula de Boltzmann,  $S = k \ln \Omega$ . Antes de descrever tais algoritmos faremos uma breve revisão de um dos

métodos mais tradicionais de Monte Carlo, o algoritmo de Metropolis.

## 2.1 Algoritmo de Metropolis

O algoritmo de Metropolis (Metropolis et al., 1953) proposto em 1953 por Nicholas Metropolis, Arianna Rosenbluth, Marshall Rosenbluth, Augusta Teller e Edward Teller é provavelmente o método Monte Carlo mais utilizado na Física, e tem como objetivo determinar valores médios de propriedades do sistema simulado, considerando um conjunto significativamente menor que o número real de configurações do sistema. Considere um sistema termodinâmico em equilíbrio com uma temperatura  $T$ . Uma média térmica de qualquer observável no equilíbrio é definida no ensemble canônico como (Callen, 1985):

$$\langle A(x)_T \rangle = \int A(x)p(x)dx, \quad (2.1)$$

onde  $x$  é a configuração no espaço de fase,

$$p(x) = \frac{1}{Z} \exp [-\mathcal{H}/k_B T] \quad (2.2)$$

é a densidade de probabilidade de que a configuração  $x$  ocorra em equilíbrio térmico e

$$Z = \int \exp [-\mathcal{H}/k_B T] dx \quad (2.3)$$

é a função de partição. [Mais a frente esta função será escrita estrategicamente de maneira diferente, afim de deixar explícito a densidade de estados de alguma variável que caracteriza as configurações, como por exemplo o número de partículas.]

Como a distribuição de probabilidades (2.2) não é uniforme em  $x$ , o uso da amostragem simples (“*simple sampling*”) é extremamente ineficiente, pois tal amostra-

gem utiliza números aleatórios com uma distribuição uniforme em  $X$ . Para contornar este problema Metropolis *et. al.* introduziram o que é hoje denominado Método de Monte Carlo com Amostragem por Importância<sup>1</sup>. Nesse método os pontos (finitos) do espaço de fase não são escolhidos aleatoriamente, mas são selecionados de acordo com uma probabilidade  $P(X)$ . Assim, a equação (2.1) pode ser aproximada como (Binder; Heermann, 1992)

$$\langle A(X) \rangle \simeq \bar{A} = \frac{\sum_{i=1}^M A(X_i) P^{-1}(X_i) \exp[-\mathcal{H}(X_i)/k_B T]}{\sum_{i=1}^M P^{-1}(X_i) \exp[-\mathcal{H}(X_i)/k_B T]}. \quad (2.4)$$

A mais simples e natural escolha para  $P(X)$  é  $P(X_i) \propto \exp[-\mathcal{H}(X_i)/k_B T]$  de forma que a equação (2.4) passa a ser simplesmente uma média aritmética

$$\overline{A(X)} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A(X_i). \quad (2.5)$$

Em 1953, Metropolis *et. al.* aperfeiçoaram a idéia da amostragem por importância escolhendo os sucessivos estados  $\{X_i\}$  não independentes um do outro, mas construindo um processo de Markov onde cada estado  $X_{i+1}$  é obtido a partir do estado anterior  $X_i$  via uma probabilidade de transição  $W(X_i \rightarrow X_{i+1})$ . Eles mostraram que é possível escolher a probabilidade de transição  $W$  tal que no limite  $M \rightarrow \infty$  a função de distribuição  $P(X_i)$  dos estados gerados por este processo tende para a distribuição de equilíbrio<sup>2</sup>

$$P_{eq}(X_i) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(X_i)}{k_B T}\right). \quad (2.6)$$

Para que o processo de Markov convirja, é suficiente que ele satisfaça à condição de

<sup>1</sup>(*Importance Sampling Monte Carlo Method*)

<sup>2</sup>Para  $M$  finito é de se esperar uma relaxação exponencial para a distribuição estacionária. A rapidez depende do tempo de relaxação do processo markoviano.

balanço detalhado

$$P_{eq}(X_i)W(X_i \rightarrow X_{i'}) = P_{eq}(X_{i'})W(X_{i'} \rightarrow X_i), \quad (2.7)$$

bem como necessário a hipótese de ergodicidade. Tal hipótese prevê que todas as configurações possíveis do sistema devem ser acessíveis. Como mostrado na Eq. (2.7), os diferentes estados não necessariamente terão a mesma probabilidade, mas devem ser atingíveis com uma probabilidade diferente de zero.

A Equação (2.7) implica que a razão das probabilidades de transição tanto para  $X_i \rightarrow X_{i'}$  quanto para  $X_{i'} \rightarrow X_i$  depende somente da diferença de energia  $\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(X_{i'}) - \mathcal{H}(X_i)$ ,

$$\frac{W(X_i \rightarrow X_{i'})}{W(X_{i'} \rightarrow X_i)} = \exp\left(-\frac{\Delta\mathcal{H}(X_i)}{k_B T}\right). \quad (2.8)$$

Metropolis e colaboradores propuseram que se  $\mathcal{H}(X_i) > \mathcal{H}(X_{i'})$  então a transição  $X_i \rightarrow X_{i'}$  se dará com certeza absoluta, ou seja, com probabilidade  $W(X_i \rightarrow X_{i'}) = 1$ . Com isso, temos

$$W(X_{i'} \rightarrow X_i) = \frac{P_{eq}(X_i)}{P_{eq}(X_{i'})} = \exp\left(\frac{\mathcal{H}(X_i) - \mathcal{H}(X_{i'})}{k_B T}\right). \quad (2.9)$$

Em resumo, temos

$$W(X_i \rightarrow X_{i'}) = \begin{cases} 1 & \text{se, } \Delta\mathcal{H} \leq 0 \\ \exp\left(-\frac{\Delta\mathcal{H}}{k_B T}\right) & \text{se, } \Delta\mathcal{H} > 0 \end{cases} \quad (2.10)$$

onde  $\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(X_{i'}) - \mathcal{H}(X_i)$ . Note que nesse algoritmo as médias são calculadas em uma temperatura  $T$ . Mudando  $T$ , outra simulação é necessária.

## 2.2 Algoritmos entrópicos

Considere um modelo estatístico com uma configuração espacial discreta, e seja  $\vartheta$  a variável (ou conjunto de variáveis) caracterizando cada configuração, tal como energia ou número de partículas. Para um determinado tamanho do sistema, conhecido o número  $\check{\Omega}(\vartheta)$  de configurações para todos os valores possíveis de  $\vartheta$ , podemos calcular a função de partição e médias termodinâmicas associadas para valores arbitrários de temperatura. Métodos como o de Wang-Landau fornecem estimativas do número de configurações  $\Omega(\vartheta)^3$ , realizando um passeio aleatório no espaço de configurações, com alguma probabilidade de aceitação dependente de  $\Omega(\vartheta')$ , onde  $\vartheta'$  denota os valores associados com a mais nova (ou tentativa) configuração gerada. Abaixo descrevemos algumas técnicas que seguem estes passos.

### 2.2.1 Algoritmo de Wang-Landau

Uma técnica pertencente à classe de métodos Monte Carlo e que vem demonstrando ser eficaz em uma enormidade de aplicações é a amostragem de Wang-Landau. Tal técnica permite a análise de sistemas complexos com vários graus de liberdade e com complicadas distribuições de energia. Como exemplo, este método tem sido usado em estudos do modelo de Potts antiferromagnético (Yamaguchi; Okabe, 2001), sistemas de spins aleatórios (Okabe; Tomita; Yamaguchi, 2002), modelo de Ising assimétrico (Tsai; Wang; Landau, 2006), sistemas quânticos (Troyer; Wessel; Alet, 2003), fluidos (Jain; de Pablo, 2003), modelos com o potencial de Lennard-Jones (Faller; de Pablo, 2003), cristais líquidos (Kim et al., 2002), polímeros (Cunha-Netto et al., 2006), proteínas (Rathore; Knotts; de Pablo, 2003), outros sistemas moleculares (Vlugt, 2002), aglomerado de átomos (Calvo; Parneix,

---

<sup>3</sup>O número de configurações aqui está denotado por  $\Omega(\vartheta)$ , reservando  $\check{\Omega}(\vartheta)$  para referir aos valores *exatos*, que são em geral desconhecidos.

2003), problemas de otimização (de Menezes; Lima, 2003) e até teoria de combinação de números (Mustonen; Rajesh, 2003), entre outros. Generalizações e melhorias do método foram implementadas por diferentes autores (Yamaguchi; Kawashima, 2002; Schulz; Binder; Müller, 2002; Huller; Pleimling, 2002; Shell; Debenedetti; Panagiotopoulos, 2002; Schulz et al., 2003; Yamaguchi, 2003; Cunha-Netto, 2008).

No início da simulação  $\check{\Omega}(\vartheta)$  não é conhecido, *a priori*, de forma que escolhemos o número de configurações de todos os níveis  $\vartheta$  iguais a 1. Geramos então configurações aleatoriamente definidas de acordo com cada modelo. A probabilidade de aceitação da nova configuração pode ser escrita como

$$p(\vartheta \rightarrow \vartheta') = \min \left[ \frac{\Omega(\vartheta')}{\Omega(\vartheta)}, 1 \right], \quad (2.11)$$

ou seja, movimentos para níveis menos visitados são sempre aceitos, enquanto que, no caso inverso, o aceite só ocorre se a razão entre as densidades de estados for maior que um número aleatório entre  $[0, 1)$ . (Para simplificar a notação não estamos escrevendo a dependência do tamanho do sistema  $L$  de  $\Omega$ .)

Em cada movimento bem sucedido, atualizamos a densidade de estados daquele nível  $\vartheta$  multiplicando o valor existente por um fator modificador  $f > 1$ , ou seja,  $\Omega(\vartheta) \rightarrow \Omega(\vartheta) \cdot f$ . O fator modificador é inicialmente escolhido como  $f = f_0 = e \simeq 2,71828\dots$ . A escolha de  $\Omega_0(\vartheta) = 1$  e  $f = e$  é bastante arbitrária não se limitando a esses valores.

O caminho aleatório no espaço de configurações com a concomitante modificação de  $\Omega$  persiste até que o histograma  $H(\vartheta)$  acumulado esteja plano. Quando se usa o termo histograma plano (*flat histogram*) entende-se que o histograma  $H(\vartheta)$  para todo  $\vartheta$  não é menor que 80% <sup>4</sup> da média do histograma  $\langle H(\vartheta) \rangle$  (Wang; Landau, 2004).

<sup>4</sup>Este parâmetro vem sendo utilizado com um certo grau de liberdade, podendo variar de acordo com com a complexidade e acessibilidade de estados dos modelos.

Na simulação de WL o histograma geralmente é checado a cada  $N_{MC} = 10000$  passos de Monte Carlo. Uma escolha razoável para esse valor é fazer  $(f_0)^{N_{MC}}$  ter a mesma ordem de magnitude do número total de estados do sistema. Essa escolha não interfere nos resultados da simulação, o critério só é utilizado pois checar o histograma a todo momento leva a uma grande perda de tempo computacional.

Uma vez que foi obtido o critério de nivelamento, reduzimos então o fator modificador  $f_1 = \sqrt{f_0}$  e reiniciamos o histograma  $H(\vartheta) = 0$  para todo  $\vartheta$ . Inicia-se um novo passeio aleatório no espaço de configurações com o novo fator modificador  $f = f_1$ , continuando até que o histograma esteja novamente plano, procedendo como anteriormente, ou seja,  $f_{i+1} = \sqrt{f_i}$ . A simulação é interrompida quando o fator modificador se aproximar da unidade por um valor predefinido, como por exemplo  $f_{final} = 1 + 10^{-8}$ .

Em resumo, o algoritmo pode ser descrito da seguinte forma:

- Inicie com  $\Omega(\vartheta) = 1$  e  $f = e$
- Repita
  - Zere o histograma  $H(\vartheta) = 0, \forall \vartheta$
  - Faça a simulação até que o histograma esteja plano
    - \* Gere uma nova configuração aleatoriamente
    - \* Escolha obedecendo a probabilidade  $p(\vartheta \rightarrow \vartheta') = \min \left[ \frac{\Omega(\vartheta)}{\Omega(\vartheta')}, 1 \right]$
    - \* Atualize  $H$  do nível resultante:  $H(\vartheta) = H(\vartheta) + 1$
    - \* Atualize  $\Omega$  daquele nível:  $\Omega(\vartheta) \longrightarrow \Omega(\vartheta).f$
  - Atualize  $f$ :  $f \longrightarrow \sqrt{f}$
- Pare quando  $f \approx 1 + 10^{-8}$ .



As grandezas termodinâmicas são obtidas através de uma exercício numérico simples. Para ilustrar, considere a energia  $E$  como a variável que caracteriza cada configuração. Conhecida a densidade de estados podemos estimar o valor esperado de uma grandeza termodinâmica  $A$  do sistema através da média canônica

$$\langle A \rangle_T = \frac{\sum_E \langle A \rangle_E \Omega(E) e^{-E/k_B T}}{Z}, \quad (2.12)$$

onde  $Z$  é a função de partição

$$Z = \sum_E \Omega(E) e^{-E/k_B T} \quad (2.13)$$

e  $\langle A \rangle_E$  é a média microcanônica da observável  $A$  do sistema, obtida na simulação para cada nível de energia  $E$  e  $k_B$  é a constante de Boltzmann. [Observe que aqui reescrevemos a função de partição em função da energia e não como função das configurações (Eq. 2.3) no espaço de fase.]

### 2.2.2 Algoritmo das janelas ajustáveis

Várias estratégias foram propostas na tentativa de corrigir o algoritmo de WL e otimizar sua convergência (Zhou; Bhatt, 2005; Cunha-Netto et al., 2008; Belardinelli; Pereyra, 2007a, 2007b; Zhou; Su, 2008). Nesta seção mostramos a aplicação de um desses algoritmos, o algoritmo das janelas ajustáveis (AW)<sup>5</sup>. Esse método estima a densidade de estados determinando o intervalo sobre o qual o histograma atingiu um determinado grau de uniformidade em vários estágios da simulação.

O procedimento AW fornece estimativas do número de configurações  $\Omega(\vartheta; L)$  em uma rede de  $L^d$  sítios, a menos de um fator multiplicativo (como na maioria dos algoritmos

---

<sup>5</sup>Do inglês “adaptive-window”

entrópicos) que é independente de  $\vartheta$ . Para cada configuração aceita, atualizamos o histograma  $H(\vartheta) \rightarrow H(\vartheta) + 1$ . Uma vez que a densidade de estados não é conhecida *a priori*, escolhemos  $\Omega(\vartheta) = 1$  para todo  $\vartheta$ , no começo da simulação. Durante o passeio aleatório reproduz-se o procedimento descrito na seção anterior, aceitando configurações segundo a probabilidade (Eq. 2.11) como no algoritmo de Wang-Landau.

Uma vez aceito a mudança de configuração para uma nova  $\vartheta \leftarrow \vartheta'$ , a densidade de estados é atualizada, multiplicando-a pelo fator modificador  $f > 1$ , então:  $\Omega(\vartheta) \rightarrow f \cdot \Omega(\vartheta)$ . Se a mudança de configuração é rejeitada, atualizamos  $\Omega(\vartheta)$ , bem como o histograma, da configuração anterior. Como o usual na amostragem de WL, o fator modificador é inicialmente escolhido como  $f_0 = e = 2,71828\dots$ . Depois de  $m = 10^4$  passos de Monte Carlo checamos se o histograma satisfaz o critério de nivelamento em uma *janela mínima*, de largura  $W = (\vartheta_{max} - \vartheta_{min})/n$ , começando de  $\vartheta_{min}$ <sup>6</sup>. O histograma é dito nivelado se, para todos os níveis da janela em questão,  $H(\vartheta) > 0,8\bar{H}$ , onde  $\bar{H}$  é uma média do histograma sobre níveis dentro da janela proposta. Se o histograma não estiver nivelado, realizamos um adicional  $m$  de passos de MC e verificamos novamente pela uniformidade, repetindo o procedimento até que o histograma esteja plano em uma janela mínima. No momento em que esta condição for satisfeita, checamos se o histograma está plano no maior intervalo possível. Isto é feito adicionando níveis um a um e verificando o nivelamento. Dessa maneira definimos uma janela e repetimos o procedimento no restante do intervalo de níveis possíveis, formando janelas para cada estágio da simulação. A posição das janelas depende da porção do histograma que satisfaz o critério de nivelamento; incluímos uma sobreposição adicional (“*overlap*”) de três níveis entre janelas adjacentes<sup>7</sup>. Este procedimento é repetido até que todos os  $\vartheta$  valores tenham sido incluídos em alguma janela com um histograma nivelado. Então uma nova etapa é iniciada: o fator modificador é

<sup>6</sup>Em geral  $n$  é escolhido de forma que  $W$  seja  $1/5 - 1/10$  do número de níveis da variável  $\vartheta$ .

<sup>7</sup>Estudos em sistemas diferentes como por exemplo modelos de spins e polímeros mostraram que este número pode variar entre 1 – 5 níveis.

reduzido,  $f \rightarrow \sqrt{f}$ , reiniciamos  $H(\vartheta) = 0$  para todo  $\vartheta$ , e impomos a continuidade da densidade de estados igualando  $\Omega(\vartheta)$  para a borda  $\vartheta_1, \vartheta_2, \dots$  das janelas. Esse procedimento é iterado e a simulação é finalizada quando  $f - 1 \approx 10^{-7}$ .

A figura 2.1 ilustra como as janelas são formadas.  $\vartheta_1$  e  $\vartheta_2$  são os níveis de junção de duas janelas consecutivas e  $\vartheta^*$  é a borda da terceira janela sendo formada. Aqui é importante ressaltar que as janelas são formadas de maneira dinâmica, ou seja, para cada fator modificador  $f$  as janelas estão em posições diferentes. Permitir que as janelas sejam criadas nos mesmos valores de  $\vartheta$  para  $f$ 's consecutivos podem levar a erros sistemáticos como descritos em (Cunha-Netto et al., 2008).

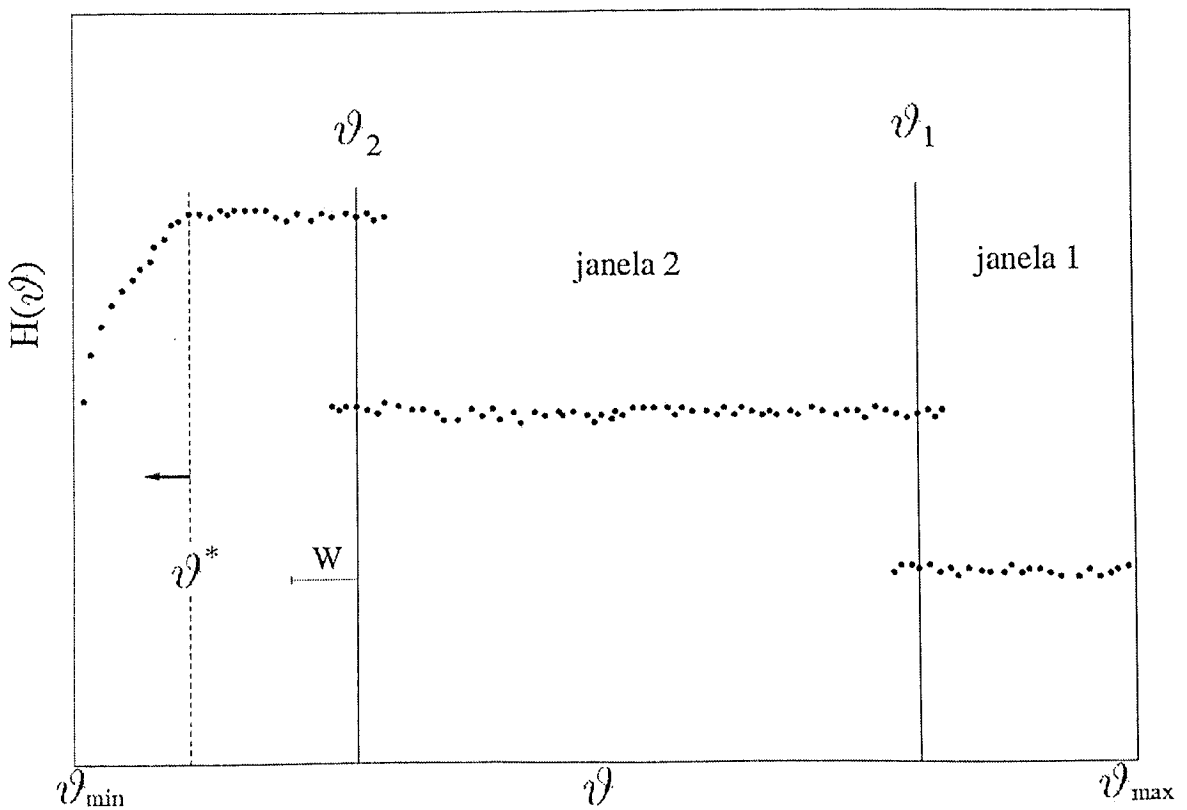


Figura 2.1: Esquema das janelas adaptáveis; os valores de  $\vartheta_{\min}$  e  $\vartheta_{\max}$  dependem do modelo, enquanto  $\vartheta^*$  e  $\vartheta_1, \vartheta_2$ , etc, são determinados durante a simulação.

Ressaltamos que a formação de janelas não deve ocorrer necessariamente da direita para a esquerda, mas sim da região onde o número de configurações é maior. Para  $\vartheta$  em

duas ou mais dimensões este procedimento pode ser feito de diferentes maneiras, formando janelas em duas ou mais dimensões (ver (Cunha-Netto, 2008)).

### 2.2.3 Nova proposta: Amostragem tomográfica

Neste trabalho descrevemos um método simulacional entrópico de alta precisão que amostra o espaço de configurações completo isento do uso de janelas (Dickman; Cunha-Netto, 2011), a amostragem tomográfica. Tal método será detalhadamente descrito no Capítulo 5 desta tese.

LEI DO DIREITO AUTORAL  
Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998.  
Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
transmitido sem que sejam os meios  
empregados: eletrônicos, mecânicos,  
fotográficos ou quaisquer outros.

## Capítulo 3

---

### Gás de rede EPV

LEI DO DIREITO AUTORAL  
Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998  
Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
transmitido sejam quais forem os meios  
empregados: eletrônicos, mecânicos,  
fotográficos ou quaisquer outros.

#### 3.1 Modelo

Modelos de gases de rede tem sido amplamente usados no estudo de transições de fases. Juntamente com o modelo de Ising eles tem auxiliado na validação de novos métodos. Um sistema interessante de partículas em rede consiste em um gás em que cada partícula em um determinado sítio não permite a ocupação dos sítios vizinhos mais próximos (EPV), correspondendo a um potencial entre partículas infinito para distâncias  $\leq 1$  (em unidades de constante de rede) e zero caso contrário. À parte do potencial infinito do tipo caroço duro, o sistema não inclui mais interações (ver Fig. 3.1). Uma vez que a interação do tipo caroço duro só permite energia zero ou infinito, a temperatura não é um parâmetro relevante, configurando assim um sistema atérmico. Como consequência, os únicos parâmetros independentes são o número  $N$  de partículas ou o potencial químico reduzido  $\mu \equiv \beta\hat{\mu}$  ( $\hat{\mu}$  representa o potencial químico e  $\beta \equiv 1/k_B T$ ).

É conhecido que em redes bipartidas esse sistema <sup>1</sup> sofre uma transição de fase contínua, havendo uma quebra de simetria devido a uma ocupação majoritária em uma das subredes. Essa transição ocorre em uma determinada densidade  $\rho_c$  e potencial químico<sup>2</sup> crítico  $\mu_c$  (Gaunt; Fisher, 1965; Runnels, 1965; Heringa; Blöte, 1996; Guo; Blöte, 2002). O parâmetro de ordem fica definido como a diferença de ocupação nas duas subredes

$$\phi = \frac{1}{N_{max}} \left\langle \left| \sum_{\mathbf{x} \in A} \sigma_{\mathbf{x}} - \sum_{\mathbf{x} \in B} \sigma_{\mathbf{x}} \right| \right\rangle, \quad (3.1)$$

onde  $\sigma_{\mathbf{x}} = 0; 1$  indica a ocupação do sítio  $\mathbf{x}$ .

A grande função partição do sistema pode ser escrita como

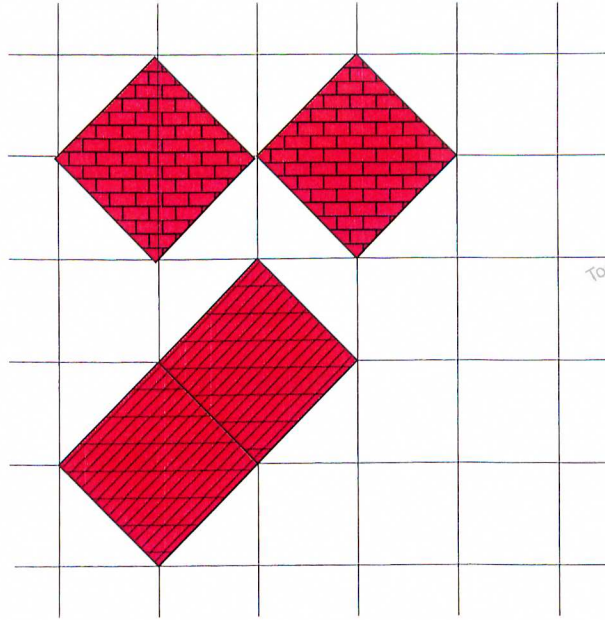
$$\Xi(z, L) = \sum_{N=0}^{N_{max}} z^N \check{\Omega}(N, L), \quad (3.2)$$

onde  $z = e^{\mu}$  é a fugacidade,  $N_{max}$  o número máximo de partículas na rede e  $\check{\Omega}(N, L)$  o número de configurações diferentes com  $N$  partículas satisfazendo a condição de exclusão de primeiros vizinhos. (Em uma rede hipercúbica de  $L^d$  sítios em  $d$  dimensões,  $N_{max} = L^d/2$  para todo  $L$  par).

O modelo de gás de rede tipo EPV foi estudado em vários tipos de rede: quadrada simples (Guo; Blöte, 2002; Fernandes; Arenzon; Levin, 2007), triangular (Zhang; Deng, 2008), cúbica simples (Heringa; Blöte, 1996), hexagonal (Runnels; Combs; Salvant, 1967), rede cúbica de corpo centrado (Gaunt, 1967), cúbica de face centrada (Burley, 1960) e em dimensões maiores que três (Heringa; Blöte; Luijten, 2000). O gás de rede onde a exclusão estende a segundos vizinhos ou além também foi estudado (Fernandes; Arenzon; Levin, 2007). Vários métodos foram aplicados para estudar a transição de fase do modelo,

<sup>1</sup>Redes as quais cada sítio de uma subrede tem todos os seus primeiros vizinhos na outra subrede. Como exemplos, uma rede quadrada ou uma rede cúbica simples. Redes com a geometria triangular são classificadas como rede não-bipartidas.

<sup>2</sup>Daqui para frente usaremos a nomenclatura “potencial químico” para designar  $\mu$ .



LEI DO DIREITO AUTORAL  
 Todos os direitos reservados e protegidos  
 pela Lei 9.610/1998.  
 Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
 transmitido sejam quais forem os meios  
 empregados: eletrônicos, mecânicos,  
 fotográficos ou quaisquer outros.

**Figura 3.1:** Representação esquemática das partículas na rede. As partículas estão hachuradas de maneira diferente para enfatizar a ocupação em subredes diferentes.

incluindo cálculos exatos (Runnels, 1965), expansão em série (Gaunt; Fisher, 1965) (expansão para alta e baixa densidade), métodos de aglomerado (“cluster”) (Zhang; Deng, 2008), matriz transferência (Guo; Blöte, 2002) e simulações de Monte Carlo (Heringa; Blöte, 1996; Ertel; Froböse; Jäckle, 1988). O modelo exibe uma universalidade tipo Ising na rede quadrada e hexagonal, enquanto na rede triangular (modelo de hexágonos duros de Baxter (Baxter, 1980, 1982)) pertence à classe de Universalidade do modelo de Potts com três estados.

Nesse capítulo apresentaremos as propriedades críticas do gás de rede EPV em uma rede quadrada e cúbica simples usando uma técnica que permite a estimativa do número de configurações  $\Omega(N)$ , o método descrito no capítulo 2 dessa tese, o algoritmo das janelas ajustáveis (Cunha-Netto et al., 2008; Cunha-Netto; Dickman; Caparica, 2009; Cunha-Netto; Dickman, 2011). O algoritmo consiste em uma melhoria do algoritmo de Wang-Landau (Wang; Landau, 2001a, 2001b) inicialmente aplicado a um modelo de polímero, mas é igualmente aplicável ao modelo aqui proposto. Expoentes críticos, densidade e potencial químico críticos, bem como o quarto cumulante reduzido foram estimados usando

uma análise de escala de tamanho finito (FSS)<sup>3</sup>.

Por simplicidade dois tipos de tentativa de movimento são explorados: inserção e remoção de partículas. Incluir movimentos de translação das partículas na rede, os quais  $N$  não muda, levam ao mesmo resultado considerando as barras de erros. (No Capítulo 4 veremos que os movimentos de translação são importantes no estudo de uma mistura de partículas em rede.) O tipo de movimento é escolhido aleatoriamente (inserção ou remoção com igual probabilidade), bem como o sítio da rede. Usamos em todas as nossas simulações de gás de rede o gerador de números aleatórios “*shift register*” R1279 (Landau; Binder, 2005).

## 3.2 Resultados

Estudamos o gás de rede EPV com interações apenas tipo caroço duro usando o método das janelas ajustáveis descrito no capítulo 2 (ver Apêndice 6). Os valores estimados de  $\Omega(N)$  são usados para calcular as médias termodinâmicas dadas por

$$\langle A \rangle_\mu = \frac{\sum_N \langle A \rangle_N \Omega(N) e^{\mu N}}{\Xi}. \quad (3.3)$$

Aqui  $\langle A \rangle_N$  é a média *microcanônica* da quantidade  $A$  sobre todas as configurações tendo exatamente  $N$  partículas, as quais precisam ser estimadas durante a simulação. O desenvolvimento de métodos confiáveis para estimar médias microcanônicas é um problema importante ainda em aberto (Oliveira, 2000). No procedimento WL, todas as configurações tendo o mesmo  $N$  ocorreria com mesma probabilidade, então, em princípio, as médias microcanônicas  $\langle A \rangle_N$  seriam tomadas sobre todas as configurações aceitas tendo exatamente  $N$  partículas, com pesos iguais. Entretanto obtivemos melhores resultados se restringimos

---

<sup>3</sup>Do inglês “*finite size scaling*”.



as médias microcanônicas aos últimos passos da amostragem. Na prática as médias  $\langle \phi \rangle_N$ ,  $\langle \phi^2 \rangle_N$  e  $\langle \phi^4 \rangle_N$  calculadas usando todas as configurações de  $N$  partículas aceitas durante a simulação levam a estimativas para os expoentes críticos que desviam significativamente dos valores esperados para a classe de modelos na universalidade de Ising (nos casos da rede quadrada e cúbica simples). Tais desvios não são observados em estudos usando sistemas com  $L \lesssim 100$ , mas se tornam evidentes quando usamos sistemas maiores. Resultados similares foram encontrados em estudos de modelos de spins usando a amostragem WL (Malakis et al., 2005). Os resultados para médias microcanônicas melhoram quando restringimos a amostragem para configurações aceitas em estágios posteriores, i.e., para  $f \lesssim 1 + 10^{-4}$  (Caparica; Cunha-Netto, 2012).

### 3.2.1 Análise por matriz transferência

Como um resultado preliminar do método, comparamos nossos valores estimados,  $\Omega(N)$ , com resultados de uma enumeração exata de  $\check{\Omega}(N)$ , obtido para uma rede de  $8 \times 8$  sítios. O último mencionado foi obtido através de uma análise por matriz transferência (Plichtske; Bergersen, 2008).

Inicialmente enumeramos as configurações permitidas  $\{c_1, \dots, c_{\mathcal{M}}\}$  em um anel de  $L$  sítios, armazenando o número  $n(c_j)$  de partículas em cada configuração. Uma matriz  $\mathcal{T}$  de dimensão  $\mathcal{M} \times \mathcal{M}$  é então construída, com  $\mathcal{T}(c_i, c_j) = 1$  se anéis adjacentes podem admitir configurações  $c_i$  e  $c_j$  sem violar a condição EPV, e  $\mathcal{T}(c_i, c_j) = 0$  caso a condição seja violada. Assim as configurações permitidas em uma rede  $L \times L$  com condições periódicas são aquelas sequências  $\{c_1, c_2, \dots, c_L\}$  de configurações de anel satisfazendo  $\mathcal{T}(c_1, c_2)\mathcal{T}(c_2, c_3) \cdots \mathcal{T}(c_{L-1}, c_L)\mathcal{T}(c_L, c_1) = 1$ . O número de configurações resultantes para  $L = 8$  é listado na Tabela 3.1.

Para comparar nossos resultados simulacionais com as enumerações exatas, a distri-

$N$	$\check{\Omega}(N)$	$\ln \check{\Omega}(N)$	$\ln \Omega(N)$	$10^3 \varepsilon(N)$
0	1	0,0	0,010(14)	—
1	64	4,15888	4,163(11)	0,9989
2	1888	7,54327	7,543(10)	-0,0481
3	34112	10,43740	10,436(11)	-0,1701
4	423152	12,95549	12,954(11)	-0,1295
5	3830016	15,15838	15,158(9)	-0,0301
6	26249184	17,08315	17,086(9)	0,1501
7	139580160	18,75415	18,754(8)	-0,0003
8	585632520	20,18820	20,187(7)	-0,0515
9	1962132800	21,39730	21,396(7)	-0,0643
10	5296005568	22,39022	22,392(8)	0,0576
11	11591943552	23,17358	23,175(7)	0,0447
12	20681906352	23,75253	23,755(8)	0,1189
13	30206108416	24,13131	24,135(8)	0,1510
14	36251041536	24,31373	24,316(8)	0,0881
15	35886874048	24,30364	24,306(7)	0,0815
16	29436488660	24,10550	24,109(6)	0,1273
17	20127048512	23,72533	23,728(6)	0,1330
18	11573937440	23,17202	23,174(7)	0,0997
19	5674532608	22,45925	22,462(6)	0,1247
20	2420605568	21,60728	21,612(5)	0,2128
21	922331136	20,64241	20,646(6)	0,1918
22	322239232	19,59080	19,586(7)	-0,2539
23	104747904	18,46707	18,459(8)	-0,4439
24	31534744	17,26660	17,253(11)	-0,7674
25	8617024	15,96925	15,956(12)	-0,7995
26	2080576	14,54816	14,539(12)	-0,6443
27	430848	12,97351	12,973(12)	-0,0571
28	73840	11,20966	11,215(13)	0,4370
29	9984	9,20874	9,214(15)	0,5301
30	992	6,89972	6,900(15)	0,0983
31	64	4,15888	4,160(17)	0,2085
32	2	0,69315	0,689(19)	-6,359

LEI DO DIREITO AUTUAL  
 Todos os direitos reservados e protegidos  
 Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
 transmitido em quaisquer meios eletrônicos,  
 mecânicos, fotográficos ou quaisquer outros.

**Tabela 3.1:** Comparação com resultados numéricos ( $L = 8$ ) para a densidade de estados. O erro relativo é calculado com  $\varepsilon(N) = (\ln \Omega(N) - \ln \check{\Omega}(N)) / \ln \check{\Omega}(N)$ .

buição de valores de  $\Omega(N)$  precisa ser normalizada. Como a simulação fornece  $\Gamma(N) \equiv \alpha \Omega(N)$ , com  $\alpha$  sendo uma constante desconhecida, independente de  $N$ , podemos eliminar  $\alpha$  multiplicando as estimativas simulacionais por um fator  $\lambda$ , variando  $\lambda$  afim de minimizar  $\sum_N [\lambda \Gamma(N) - \check{\Omega}(N)]^2$ . Este procedimento é aplicado em cada uma das quinze simulações independentes, levando aos valores médios e incertezas listados na Tabela 3.1. Os erros

relativos em estimar  $\ln \Omega$  são bem pequenos exceto próximo do número mínimo e máximo de ocupação. Mesmo no pior caso,  $N = N_{max} = 32$ , o erro relativo em  $\ln \Omega$  é  $\approx 0,6\%$ . Se os erros relativos forem restritos a esses regimes para sistemas grandes, o efeito na estimativa das propriedades críticas seria desprezível.

LEI DO DIREITO AUTORAL  
 Todos os direitos reservados e protegidos  
 pela Lei 9.610/1998.  
 Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
 transmitido sejam quais forem os meios  
 empregados: eletrônicos, mecânicos,  
 fotográficos ou quaisquer outros.

### 3.2.2 Rede quadrada

Nesta seção apresentaremos os resultados para o gás em uma rede quadrada, com condições de contorno periódicas, para simulações de Monte Carlo descritas anteriormente. Estudamos 18 tamanhos de sistema no intervalo  $16 \leq L \leq 256$  usando o algoritmo AW. Conforme descrito no capítulo 2, quando utilizamos as janelas ajustáveis define-se janelas partindo de uma janela mínima de largura  $W = (N_{max} - N_{min})/n$ , começando de  $N_{min}$ . Na rede quadrada usamos  $n = 4$  para  $L \leq 72$ ,  $n = 6$  para  $L = 96$ ,  $n = 8$  para  $L$  entre 100 e 196, e  $n = 10$  para  $L = 256$ . Para a rede cúbica simples usamos  $n = 2$  para  $L \leq 12$ ,  $n = 4$  para  $L = 16$ ,  $n = 6$  para  $L$  entre 24 e 32, e  $n = 8$  para  $L = 48$ .

Seja  $N^*(L)$  o valor de  $N$  que maximiza  $\Omega(N)$ , e seja  $N_c(L)$  o valor de  $N$  que maximiza a distribuição de probabilidade  $P(N) = \Omega(N) \exp[\mu_c N]$  no ponto crítico  $\mu_c$ . Estudos preliminares em redes com  $L \leq 200$  revelam que  $N^* \simeq 0,227L^2$  e  $N_c \simeq 0,369L^2$ , ou seja,  $N_c \gg N^*$ . Como resultado, configurações com  $N < N^*$  dariam uma contribuição desprezível para as médias termodinâmicas na vizinhança do ponto crítico. Afim de economizar tempo de processamento restringimos nosso intervalo de valores de  $N$  (os quais estendem até  $N_{max} = 256^2/2$ ), para valores entre  $N^*(L)$  e  $N_{max} = L^2/2$ . Para  $L = 8$ , um estudo com a amostragem restrita a  $N \geq N^* = 14$  levou a resultados com igual precisão a aqueles obtidos usando uma amostragem sem restrição, quando comparado com enumerações exatas.

A seguinte observação sugere que uma posterior economia de tempo de processa-

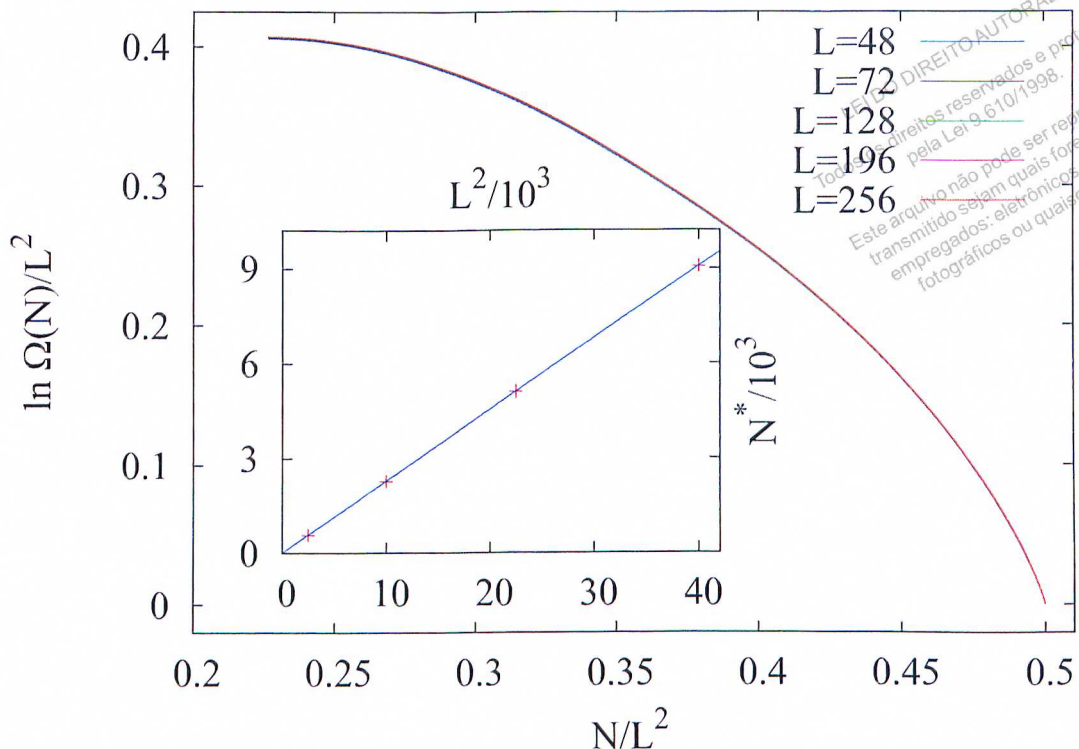
mento poderia ser realizada em estudos da região crítica. Seja  $P_c(N, L) = z_c^N \Omega(N, L)$  a contribuição a grande função de partição devido ao conjunto de configurações com  $N$  partículas no ponto crítico, e seja  $P^*(L) = \max_N [P_c(N, L)] = P(N_c)$ . Para  $N$  valores tais que  $P_c(N, L)/P^*(L) < 10^{-50}$ , a contribuição em  $\Xi$  e nas médias térmicas é desprezível. Parece então razoável restringir a amostragem ao intervalo  $[N_1, N_2]$  de  $N$  valores tal que  $P_c(N, L)/P^*(L) \geq 10^{-50}$ . Na prática usamos  $N_1 = [0, 315L^2 - 131]$  e  $N_2 = [0, 423L^2 + 129]$ , onde os colchetes representam o maior inteiro. Para  $L = 300$ , o maior tamanho considerado, o intervalo resultante é pequeno o suficiente (aproximadamente 20% do intervalo completo) para ser estudado usando a amostragem WL sem janelas. Surpreendentemente, restringindo a amostragem desta maneira leva a estimativas para os expoentes críticos que desviam significativamente dos seus valores esperados (expoentes do modelo de Ising). Por exemplo, encontramos  $\gamma/\nu = 2,02(5)$  para a rede quadrada, o que deveria ser  $\gamma/\nu = 7/4 = 1,75$ . Concluimos que restringir o intervalo de valores de  $N$  distorce a estimativa para o número de configurações  $\Omega(N)$ , e desfavoravelmente afeta as médias microcanônicas.

Vamos considerar agora os resultados obtidos usando o intervalo de simulação um pouco maior,  $[N^*(L), N_{max}(L)]$ . A Fig. 3.2 mostra o logaritmo do número de configurações em função da densidade  $\rho$ ; o bom colapso ilustrado na figura confirma a escala esperada

$$\Omega(N, L) \simeq \exp [L^d g(\rho)] \quad (3.4)$$

A inserção mostra  $N^*$  como função do tamanho do sistema. Para este resultado e para os demais todas as médias e incertezas estão calculadas usando quinze rodadas independentes.

Algumas das propriedades termodinâmicas usadas para caracterizar a transição em



**Figura 3.2:** Rede quadrada:  $\ln \Omega/L^2$  em função da densidade, os tamanhos do sistema estão indicados. Inserção:  $N^*(L)$  em função do tamanho do sistema. Aqui fica evidente a dependência da posição do máximo de  $\Omega$  com o tamanho do sistema.

gases de rede são a densidade de partículas  $\rho(\mu)$  e a compressibilidade,

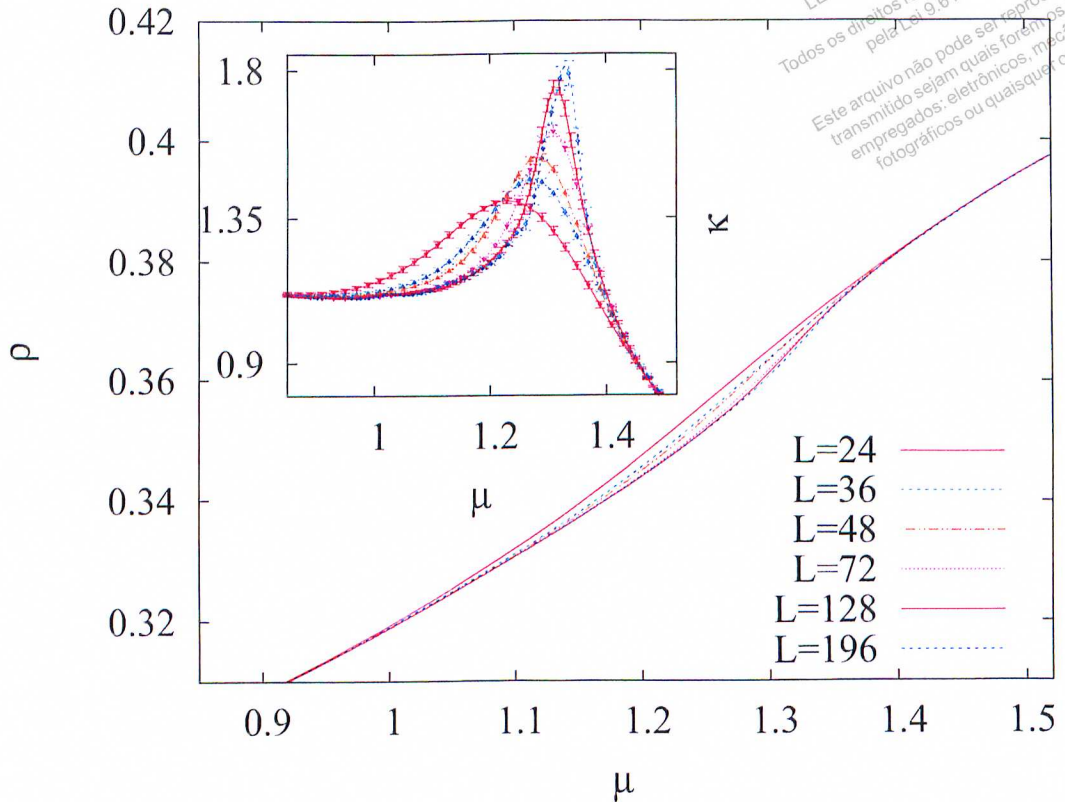
$$\kappa(\mu) = \frac{L^2}{N^2} \left( \frac{\partial N}{\partial \mu} \right) = \frac{L^2 (\langle \rho^2 \rangle_\mu - \langle \rho \rangle_\mu^2)}{\langle \rho \rangle_\mu^2}. \quad (3.5)$$

Na figura 3.3 mostramos os resultados simulacionais para a densidade  $\rho$  e compressibilidade  $\kappa$  como funções do potencial químico. Na figura 3.4 é mostrado o parâmetro de ordem (Eq. (3.1)) e sua variância, também chamado de susceptibilidade,

$$\chi(\mu) = L^2 (\langle \phi^2 \rangle_\mu - \langle \phi \rangle_\mu^2). \quad (3.6)$$

As inserções nas figuras 3.4 (superior e inferior) mostram o colapso obtido usando os expoentes críticos exatos,  $\gamma/\nu = 7/4$  e  $\beta/\nu = 1/8$ , e o resultado altamente pre-

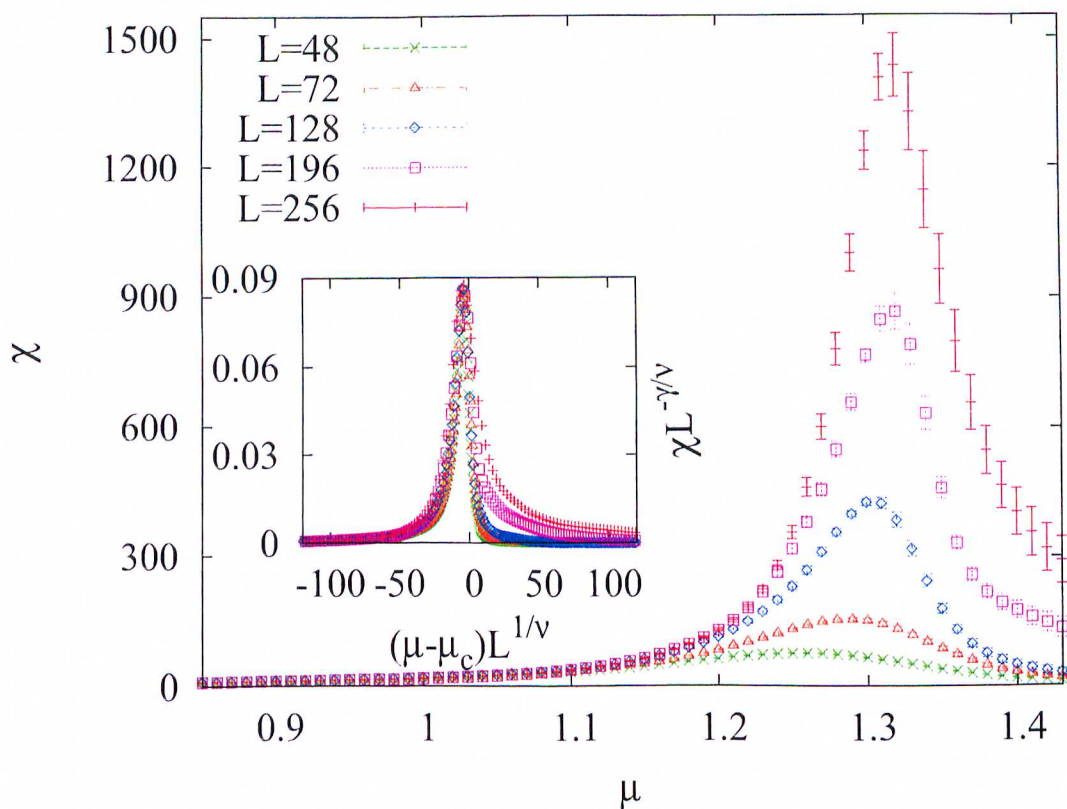
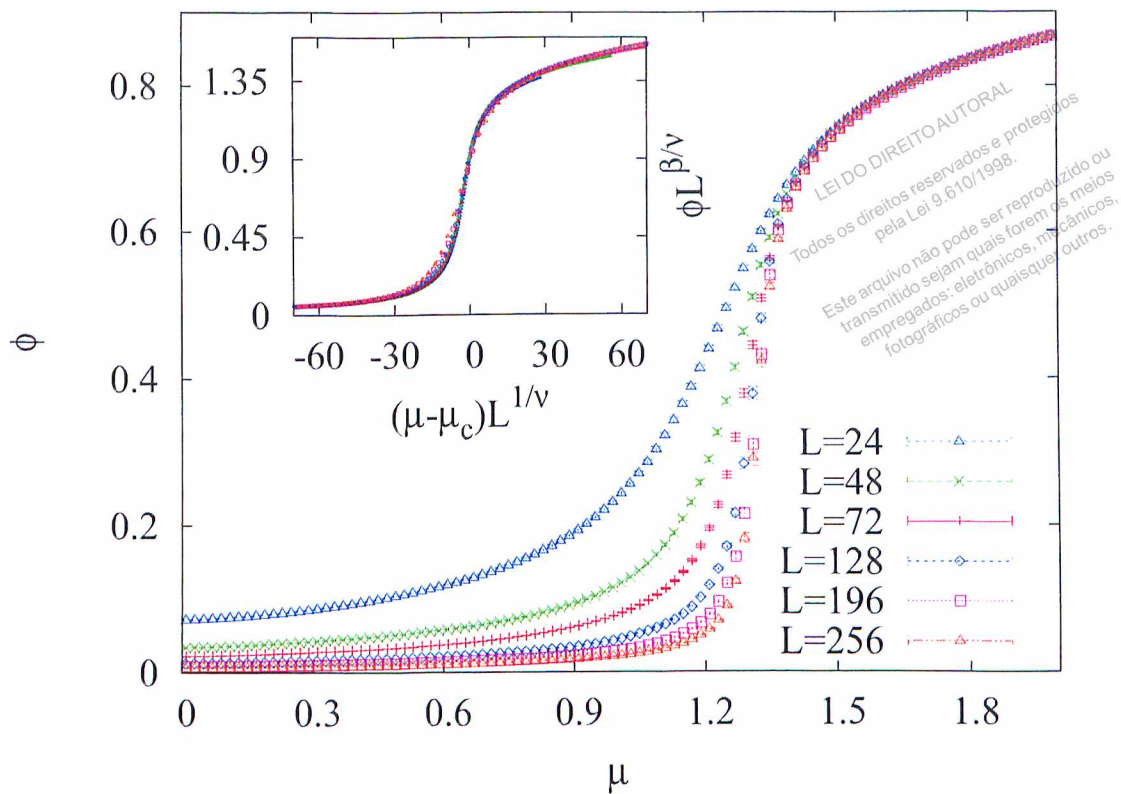
ciso para o potencial químico crítico obtido por Guo e Blöte (Guo; Blöte, 2002),  $\mu_c = 1,33401510027774(1)$ .



**Figura 3.3:** Rede quadrada: densidade em função do potencial químico em uma rede quadrada. As barras de erros são menores que os símbolos. A inflexão perto do ponto de transição é fraca, sendo imperceptível para os tamanhos menores. Inserção: compressibilidade em função do potencial químico.

Analisamos a razão adimensional  $Q_4 = \langle \phi^2 \rangle^2 / \langle \phi^4 \rangle$  (Fig. 3.5), relacionada ao cumulante de Binder (Binder, 1981; Tsai; Salinas, 1998), o qual é esperado ter um valor universal no ponto crítico. Seja  $\mu_{c,L_i}$  o potencial químico no qual  $Q_4(L_i) = Q_4(L_{i+1}) \equiv Q_{c,L_i}$ , i.e., o cruzamento entre cumulantes associados com um par de tamanhos sucessivos  $L_i$  e  $L_{i+1}$ , e seja  $\bar{L} \equiv \sqrt{L_i L_{i+1}}$  a média geométrica de dois tamanhos sucessivos.

É comum plotar  $\mu_{c,L}$  e  $Q_{c,L}$  em função de  $1/\bar{L}^{1/\nu}$  afim de estimar o potencial químico crítico e o cumulante, através de uma extrapolação  $L \rightarrow \infty$ . No presente caso, no entanto, não observamos tendência; todos os valores de  $Q_{c,L}$  e  $\mu_{c,L}$  concordam entre si, dentro da



**Figura 3.4:** Rede quadrada, painel superior: parâmetro de ordem em função do potencial químico. Painel inferior: susceptibilidade como função do potencial químico. As inserções são o colapso da curvas.

barra de erros. Fazendo uma média sobre todos os valores obtemos  $\mu_c = 1.335(3)$  e  $Q_c = 0.852(6)$ . Apesar de pouca precisão, esses resultados são consistentes com valores da literatura citados na Tabela 3.2.

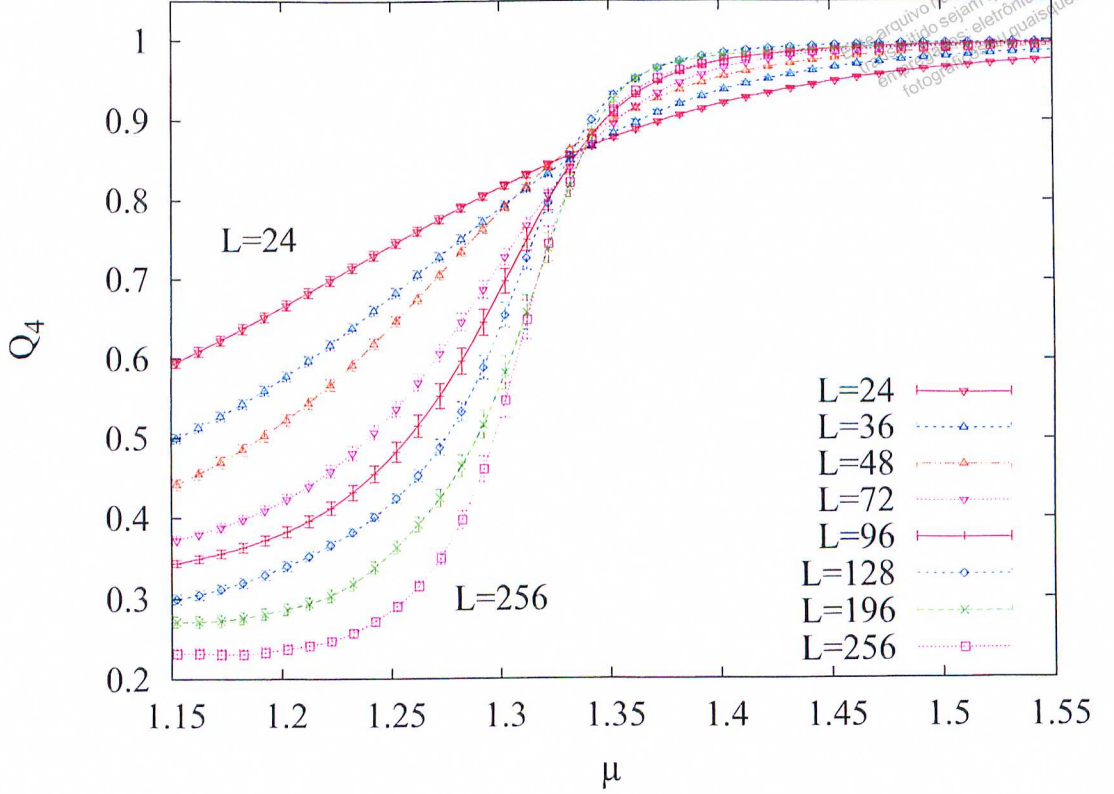


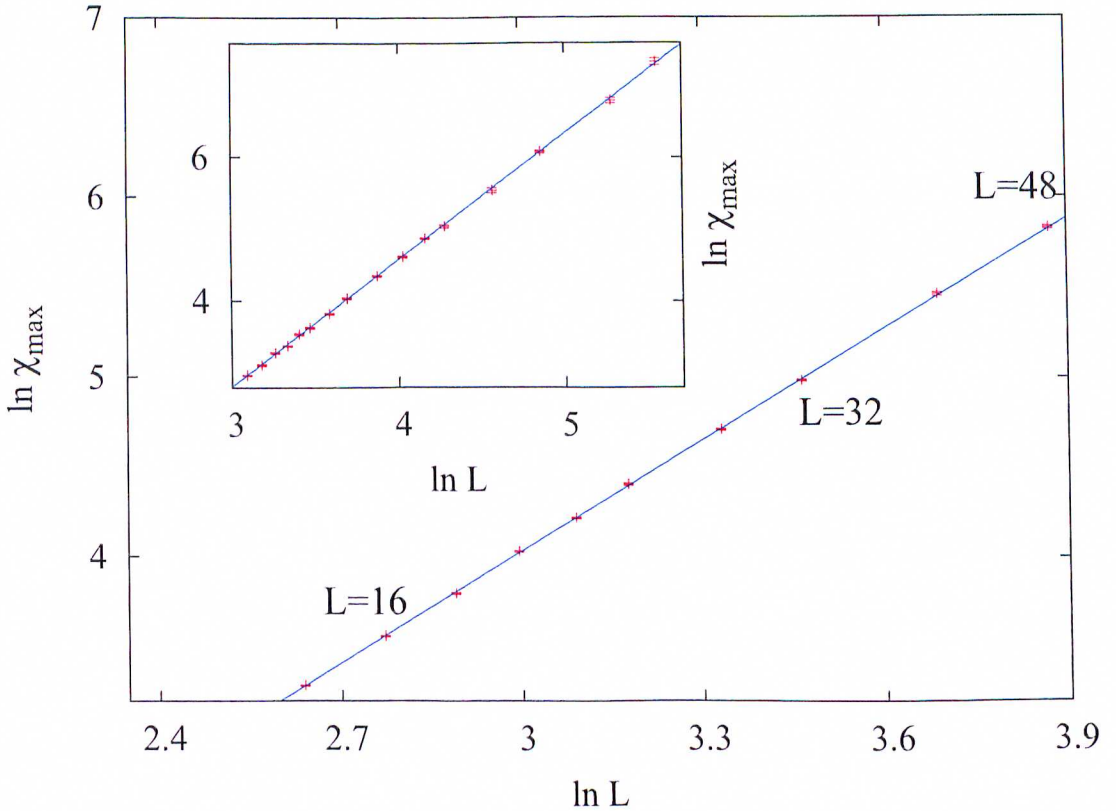
Figura 3.5: Rede quadrada: cumulante de quarta ordem para os tamanhos de rede indicados na figura.

Estimativas para o potencial químico crítico  $\mu_c$  são obtidas através da análise dos valores do potencial químico associados com os máximos da susceptibilidade e da compressibilidade para os tamanho do sistema estudados. Os valores extrapolados  $\mu_c = 1,330(1)$  usando a susceptibilidade  $\mu_c = 1,337(2)$  usando a compressibilidade estão obtidos usando os dados da susceptibilidade para  $L = 20 - 196$  e  $L = 26 - 196$  para a compressibilidade. Realizando uma média ponderada pela variância obtemos  $\mu_c = 1,332(2)$ . Uma extrapolação linear da densidade  $\rho(\mu_c, L)$  em função de  $1/L$  leva a  $\rho_c = 0,3675(5)$  (veja a inserção da Fig. 3.7)), consistente com a densidade crítica documentada em (Guo; Blöte, 2002),  $\rho_c = 0,3677429990410(3)$ . (Usando a estimativa precisa para  $\mu_c$  que consta em

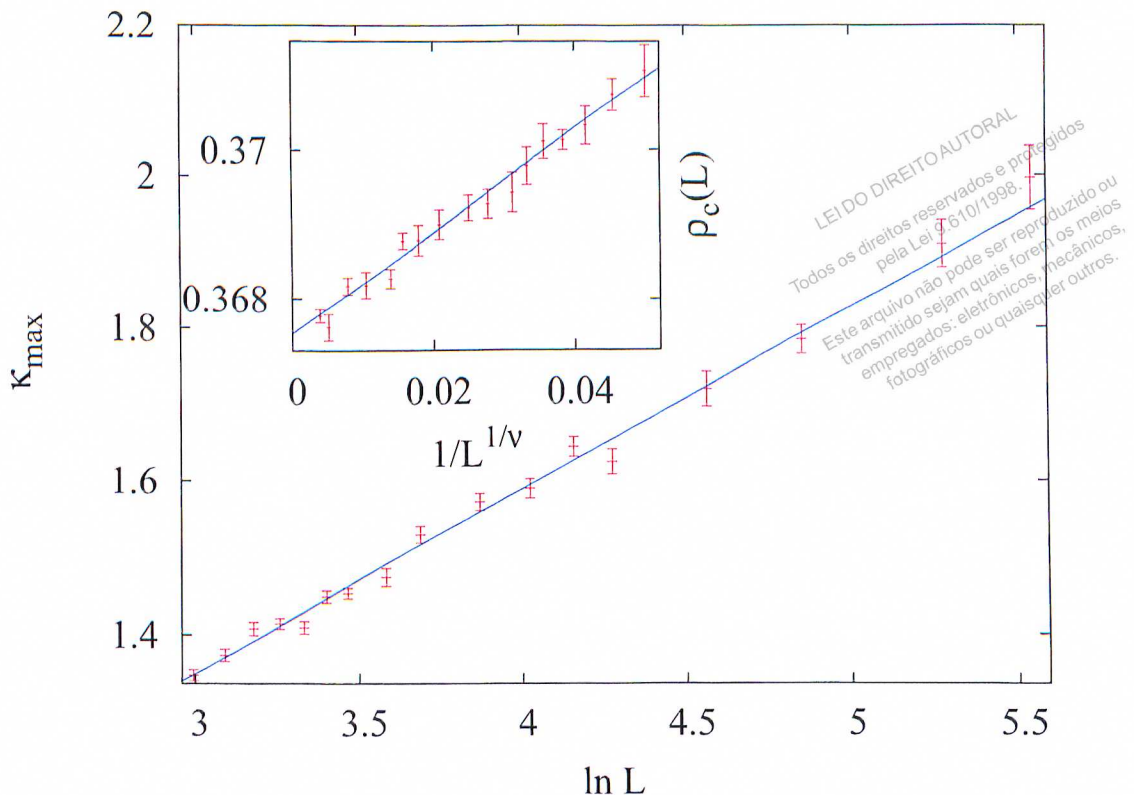


(Guo; Blöte, 2002) obtemos  $\rho_c = 0,36800(5)$ .)

Aplicando a análise de escala de tamanho finito nos resultados da susceptibilidade para  $L = 22 - 256$  obtemos  $\gamma/\nu = 1,764(7)$ . (Veja a inserção da Fig. 3.6). Afim de estimar  $\beta/\nu$  analisamos  $\phi_c(L)$  usando o valor de  $\mu_c$  citado acima (Guo; Blöte, 2002); através de nossos dados para  $L \leq 256$  obtemos  $\beta/\nu = 0,123(2)$ ; (veja inserção da Fig. 3.11). (Usando nossa estimativa menos precisa,  $\mu_c = 1,332(2)$ , obtemos  $\beta/\nu = 0,130(9)$ .) A Tabela 3.2 resume nossos principais resultados. É interessante notar que obtemos essencialmente os mesmos resultados,  $\gamma/\nu = 1,764(8)$  e  $\beta/\nu = 0,122(3)$ , se excluímos da análise os dados para os dois sistemas maiores. A Fig. 3.7 mostra o máximo da compressibilidade em função do tamanho do sistema; os resultados são consistentes com  $\kappa_{m,L} \sim \ln L$ , como o esperado para um modelo na classe de universalidade do modelo de Ising em duas dimensões.



**Figura 3.6:** Máximo da susceptibilidade em função do tamanho do sistema para a rede quadrada (inserção) e rede cúbica simples. As linhas contínuas são ajustes lineares usados para estimar  $\gamma/\nu$ .



**Figura 3.7:** Rede quadrada: máximo da compressibilidade em função de  $\ln L$ . A inserção mostra a densidade como função de  $1/L^{1/\nu}$ .

	Este trabalho	Valores da literatura
$\mu_c$	1,332(2)	1,33401510027774(1) <sup>1</sup>
$Q_c$	0,852(6)	0,856 <sup>2</sup> ; 0,855(1) <sup>3</sup> ; 0,85625(5) <sup>4</sup>
$\rho_c$	0,3675(5)	0,3677429990410(3) <sup>1</sup>
$\gamma/\nu$	1,762(8)	7/4 (exato)
$\beta/\nu$	0,123(2)	1/8 (exato)

**Tabela 3.2:** Valores críticos para a rede quadrada obtidos através de uma amostragem WL com janelas ajustáveis. Os resultados de (Nicolaidis; Bruce, 1988) foram obtidos usando simulações de Monte Carlo enquanto os de (Guo; Blöte, 2002; Burkhardt; Derrida, 1985; Kamieniarz; Blöte, 1993) usaram uma técnica de matriz transferência.

### 3.2.3 Rede cúbica simples

Aplicamos o algoritmo das janelas ajustáveis ao gás de rede EPV na rede cúbica simples, em sistemas de tamanho linear  $L = 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, 22, 24, 28, 32, 40$  e  $48$ . Para a

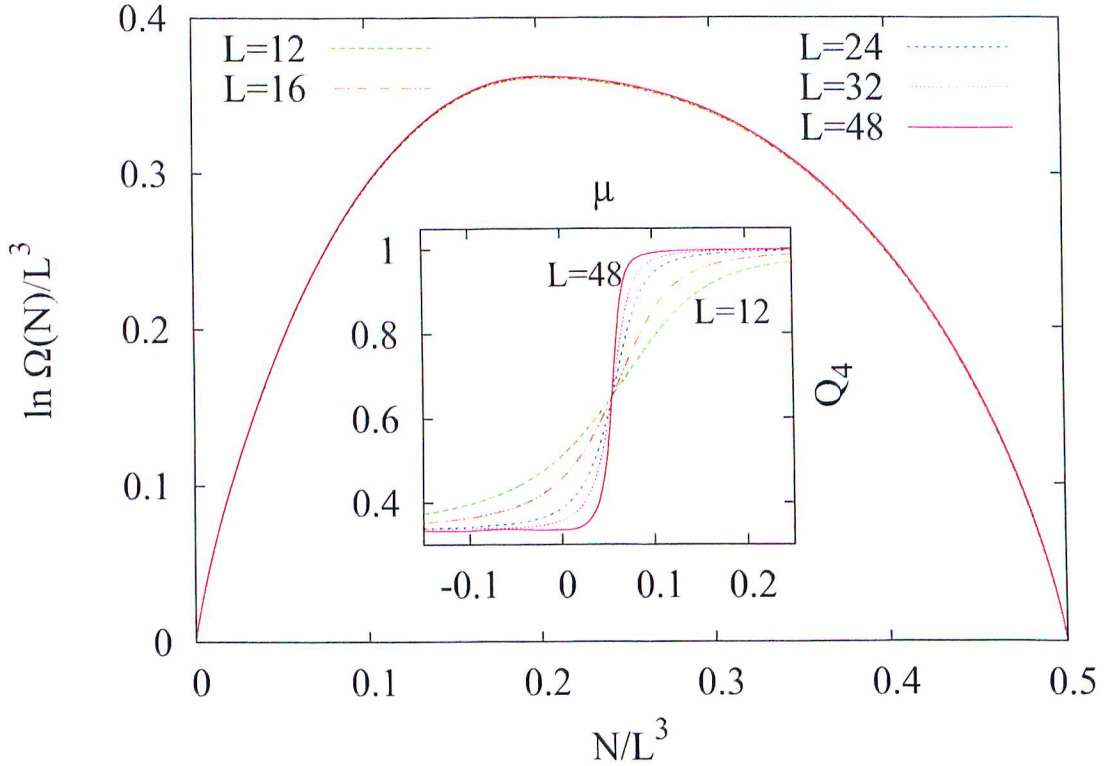
<sup>1</sup>(Guo; Blöte, 2002)

<sup>2</sup>(Burkhardt; Derrida, 1985)

<sup>3</sup>(Nicolaidis; Bruce, 1988)

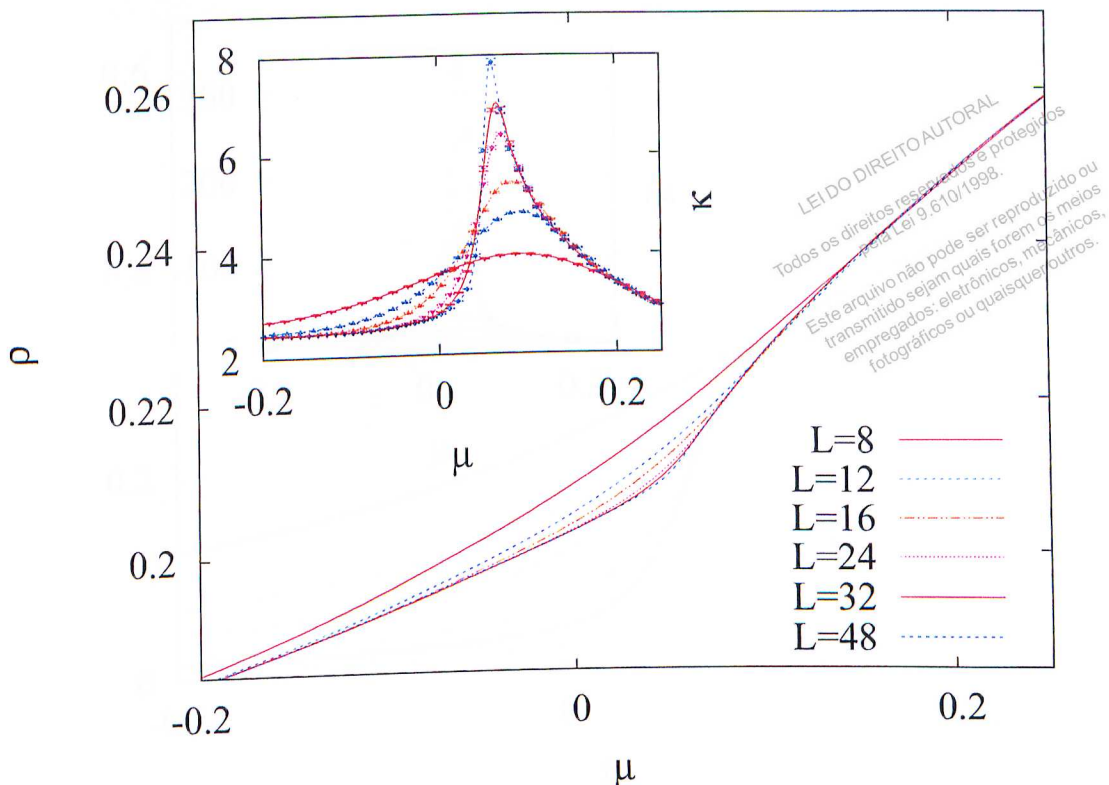
<sup>4</sup>(Kamieniarz; Blöte, 1993)

rede em três dimensões amostramos o intervalo de *todos* os possíveis valores de  $N$  para cada tamanho, usando o método descrito anteriormente. Para  $L = 48$ , usamos aproximadamente cinquenta janelas. A Fig. 3.8 mostra  $\Omega(N)$ , novamente verificando a Eq. (3.4). A inserção mostra o cumulante de quarta ordem. A densidade e a compressibilidade estão desenhadas como função do potencial químico na Fig. 3.9, enquanto a Fig. 3.10 mostra o parâmetro de ordem e susceptibilidade.



**Figura 3.8:** Rede cúbica simples: Logaritmo de  $\Omega(N)$  em função da densidade, os tamanhos do sistema estão indicados. Inserção: cumulante de quarta ordem.

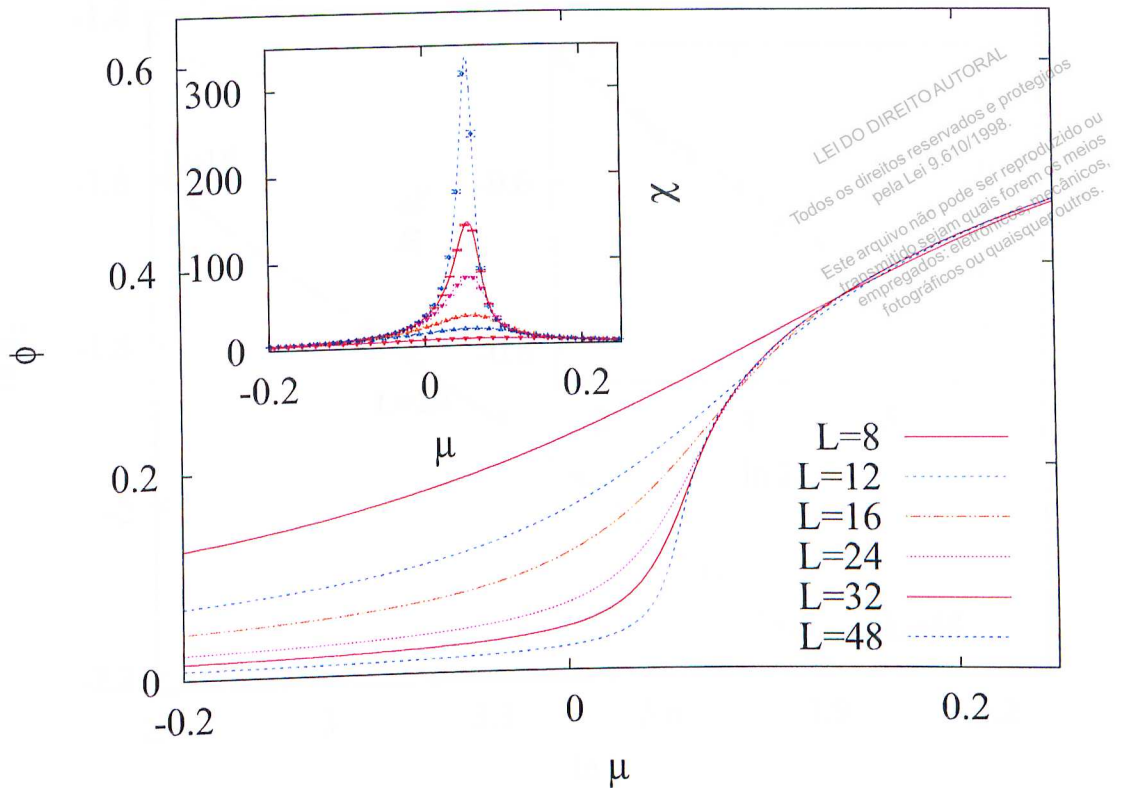
Usando o expoente crítico  $\nu = 0,6301(4)$  (Pelissetto; Vicari, 2002) plotamos os valores de  $\mu_c(L)$  (correspondendo aos máximos da susceptibilidade e compressibilidade) em função de  $1/L^{1/\nu}$ . A extrapolação dos dados para  $L > 14$  resulta em  $\mu_c = 0,05516(9)$  usando a susceptibilidade, enquanto os dados da compressibilidade (para  $L > 24$ ) levam a  $\mu_c = 0,0567(2)$ . (Não é surpreendente que a valor crítico obtido usando os dados



**Figura 3.9:** Rede cúbica simples: densidade como função do potencial químico. Inserção: Compressibilidade como função do potencial químico.

da compressibilidade é menos preciso que o encontrado para a susceptibilidade, uma vez que a curva exibe uma singularidade mais fraca.) Usando nossa melhor estimativa  $\mu_c = 0,05516(9)$  calculamos  $\rho(\mu_c, L)$ ; uma extrapolação linear (para  $L > 24$ ) em função de  $1/L^{1/\nu}$  leva a  $\rho_c = 0,21082(5)$ . (Se ao invés disso usarmos  $\mu_c = 0,05443(7)$  (Heringa; Blöte, 1996), encontramos  $\rho_c = 0.21058(5)$ .)

Fazendo uma análise similar a que usamos no caso do estudo do gás de rede EPV na rede quadrada, estimamos o potencial químico crítico  $\mu_c$  e a razão crítica  $Q_c$ . Plotando  $\mu_{c,L}$  em função de  $1/\bar{L}^{1/\nu}$  obtemos  $\mu_c = 0,0552(7)$  através de uma extrapolação linear. Este valor é consistente com resultados anteriores (Heringa; Blöte, 1996) os quais obtiveram  $\mu_c = 0,05443(7)$ . A extrapolação de  $Q_{c,L}$  em função de  $1/\bar{L}^{1/\nu}$  leva a  $Q_c = 0,652(5)$ , um pouco acima dos valores da literatura (veja Tab. 3.3). Se usarmos  $\mu_c = 0,05443(7)$  (Heringa; Blöte, 1996) para calcular  $Q_L(\mu_c)$ , não observamos dependência em  $L$ ; fazendo



**Figura 3.10:** Rede cúbica simples: Parâmetro de ordem em função do potencial químico. Inserção: susceptibilidade em função do potencial químico.

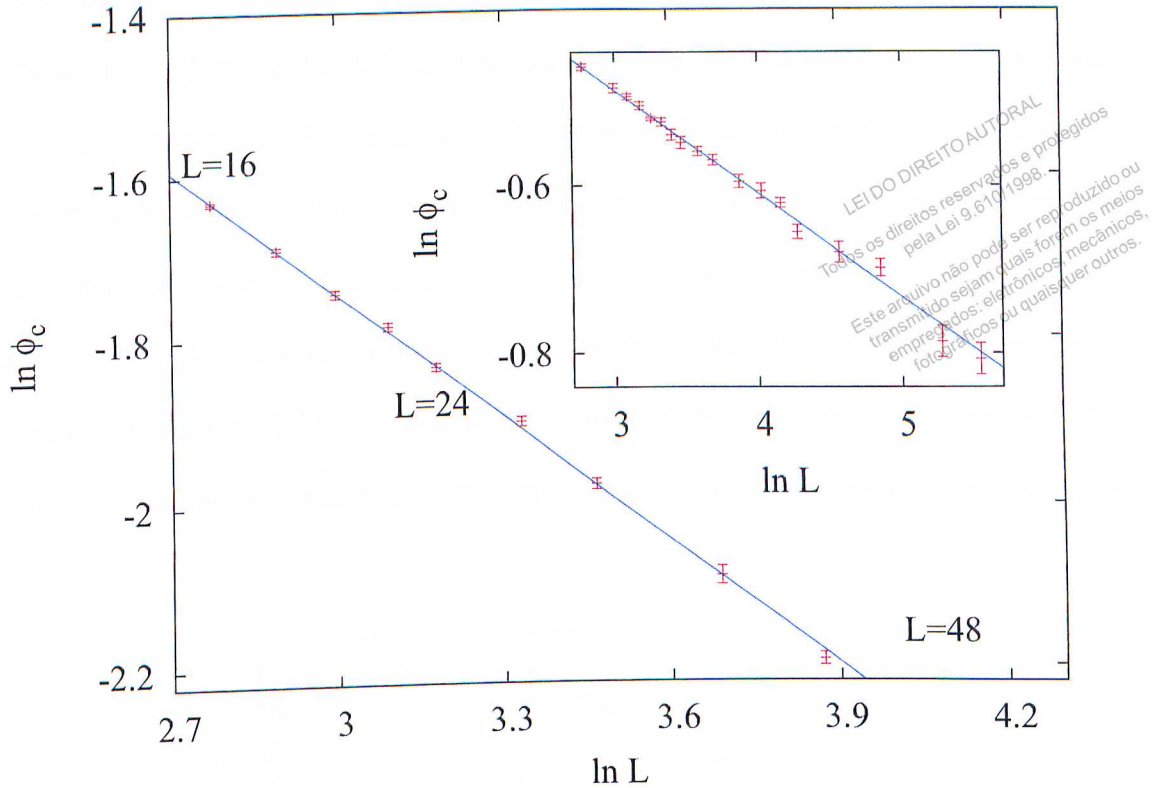
uma média sobre todos os valores obtemos  $Q_c = 0,636(3)$ .

Uma análise de FSS da susceptibilidade fornece  $\gamma/\nu = 2,056(6)$  (Fig. 3.6). Usando  $\mu_c$  de (Heringa; Blöte, 1996), a análise de FSS para o parâmetro de ordem em  $\mu = \mu_c$  leva a  $\beta/\nu = 0,504(8)$  (Fig. 3.11). (Usando nossa melhor estimativa,  $\mu_c = 0,05516(9)$ , encontramos  $\beta/\nu = 0,477(7)$ ). A Tab. 3.3 resume nossos principais resultados para a rede cúbica simples. Como no caso da rede quadrada, nossos resultados não mudam significativamente se excluimos da análise os dados dos dois sistemas maiores.

<sup>1</sup>(Heringa; Blöte, 1996)

<sup>2</sup>(García; Gonzalo, 2003)

<sup>3</sup>(Blöte; Luijten; Heringa, 1995)



**Figura 3.11:** Parâmetro de ordem crítico em função do tamanho do sistema para a rede quadrada (inserção) e rede cúbica simples. As linhas contínuas são ajustes lineares usados para obter  $\beta/\nu$ .

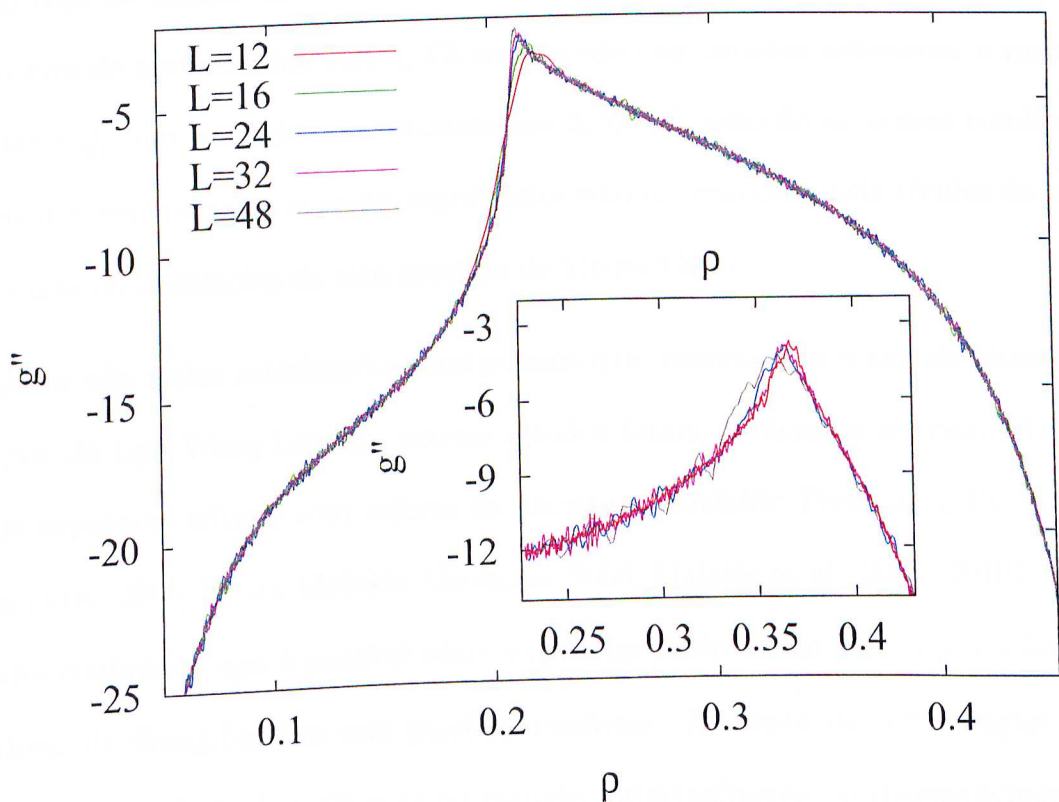
	Este trabalho		Valores da literatura	
$\mu_c$	0,05516(9)	0,05443(7) <sup>1</sup>	—	—
$Q_c$	0,636(3)	0,626(4) <sup>1</sup>	—	0,6233(4) <sup>3</sup>
$\rho_c$	0,21082(5)	—	—	—
$\gamma/\nu$	2,056(6)	1,94(2) <sup>1</sup>	2,005(6) <sup>2</sup>	1,963(3) <sup>3</sup>
$\beta/\nu$	0,504(8)	0,53(1) <sup>1</sup>	0,5002(6) <sup>2</sup>	0,519(2) <sup>3</sup>
$\alpha/\nu$	0,25(1)	0,20(4) <sup>1</sup>	—	0,174(4) <sup>3</sup>

**Tabela 3.3:** Valores críticos para a rede cúbica simples obtidos através do algoritmo das janelas ajustáveis. Os resultados de (Heringa; Blöte, 1996) foram obtidos usando um algoritmo de aglomerado (*cluster*) do gás de rede EPV. Os resultados de (García; Gonzalo, 2003) e (Blöte; Luijten; Heringa, 1995) são de simulações de alta precisão usando um algoritmo de aglomerados para o modelo de Ising.

### 3.2.4 Comportamento crítico de $g(\rho)$

Como é conhecido (Heringa; Blöte, 1996), a compressibilidade do gás de rede EPV diverge com  $\kappa \sim |\tilde{\mu}|^{-\alpha}$  nas vizinhanças do ponto crítico. (Aqui  $\tilde{\mu} = (\mu - \mu_c)/\mu_c$  é potencial químico relativo.) Por outro lado podemos ver que  $\kappa \propto 1/|g''(\rho)|$ , onde  $g''$  denota a segunda derivada de  $g$  (definido na Eq. (3.4) com respeito a  $\rho$ ). Assim a singularidade na

compressibilidade é refletida na singularidade em  $g$ . Enquanto o gráfico de  $g$  em função de  $\rho$  é bem suave (Figs. 3.2 e 3.8), a segunda derivada de fato exibe uma singularidade próximo a  $\rho_c$ . Para obter  $g''$  realizamos ajustes quadráticos em  $g(N)$  usando  $b$  agrupamentos para valores consecutivos de  $N$ . Escolhemos  $b$  grande o suficiente para eliminar flutuações dentro da escala, mas pequeno o suficiente para evidenciar o comportamento singular<sup>4</sup>. A Fig. 3.12 evidencia o desenvolvimento da singularidade. A figura também mostra que o mínimo de  $|g''|$  parece tender a zero quando  $L \rightarrow \infty$ . Nossos dados, entretanto, não são suficientes para determinar precisamente o singularidade crítica em  $g(\rho)$ .



**Figura 3.12:** Segunda derivada de  $g(\rho)$  para uma rede cúbica simples,  $L = 12, 16, 24, 32$  e  $48$ . A inserção mostra o comportamento similar para a rede quadrada, os tamanhos do sistema são  $L = 24, 48, 128$  e  $196$ .

<sup>4</sup>Para a rede quadrada usamos  $b = 3$  para  $L = 24$ ,  $b = 7$  para  $L = 48$ ,  $20$  para  $L = 128$  e  $50$  para  $L = 196$ ; para a rede cúbica simples,  $b = 10$  para  $L = 12$  e  $16$ ,  $b = 20$  para  $L = 24$ ,  $40$  para  $L = 32$  e  $70$  para  $L = 48$ .

### 3.3 Discussão dos resultados

Realizamos simulações de Wang-Landau usando o algoritmo das janelas ajustáveis em um gás de rede com exclusão de primeiros vizinhos em uma rede quadrada e rede cúbica simples. Na rede quadrada, comparações com uma enumeração exata para uma rede pequena ( $L = 8$ ) mostram excelente concordância. Usando uma análise de escala de tamanho finito dos dados para sistemas com até  $256^2$  sítios na rede quadrada e  $48^3$  sítios em uma rede cúbica, estimamos as razões de expoentes críticos  $\gamma/\nu$  e  $\beta/\nu$ , e os valores críticos do potencial químico, densidade e quarto cumulante. Em geral, razoável acordo é obtido com os valores da literatura. Em três dimensões, o ponto crítico foi obtido com um erro de aproximadamente 1,3% comparado com estudos anteriores, e razões de expoentes e  $Q_c$  com erros de aproximadamente 3,5%. A precisão de nossos resultados é consideravelmente pequena quando comparamos com os resultados pela técnica de matriz transferência ou simulações de alta precisão de Monte Carlo.

Embora não muito satisfatórios, destacamos que, mesmo com o grande interesse de simulações do tipo Wang-Landau, poucos estudos foram publicados comparando resultados de expoentes críticos com valores da literatura (Malakis; Peratzakis; Fytas, 2004; Malakis et al., 2005; Fytas; Malakis; Georgiou, 2008; Malakis et al., 2009, 2010). Nossos resultados confirmam que é possível obter expoentes críticos com precisão razoável com o algoritmo de Wang-Landau com janelas ajustáveis. Em vista das observações acima enfatizamos a utilidade de melhorias no método, principalmente no desenvolvimento de uma aproximação simples e versátil para o estudo de transições de fase através de simulações de Monte Carlo. Neste momento duas observações são pertinentes, a primeira é que restringir a amostragem a sub-intervalos de densidades pode piorar os resultados, mesmo quando o intervalo que está sendo desprezado apresenta uma contribuição insignificante às médias termodinâmicas. Aparentemente a imposição de barreiras refletoras



na caminhada aleatória no espaço de configurações distorce a amostragem. O segundo ponto é que a qualidade dos resultados fornecidos pelo procedimento de WL cai com o aumento do sistema, mesmo quando mantemos o mesmo critério de nivelamento e esquema de atualizações do fator  $f$ . Assim, incluindo os sistemas maiores na análise não necessariamente melhora os resultados; simulações mais exaustivas de sistemas pequenos e intermediários podem levar a resultados mais acurados. Uma alternativa metodológica que melhora significativamente os resultados é apresentada no capítulo 5.

# Capítulo 4

---

## Mistura binária

LEI DO DIREITO AUTORAL  
Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998.  
Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
transmitido sejam quais forem os meios  
empregados: eletrônicos, mecânicos,  
fotográficos ou quaisquer outros.

Neste capítulo apresentaremos a aplicação da amostragem WL no estudo de um sistema que apresenta separação de fases induzida puramente por efeitos entrópicos. Estudamos uma mistura em uma rede bidimensional consistindo de dois tipos de partículas: tipo EPV e com um único sítio de exclusão.

### 4.1 Fundamentação do modelo

Misturas de fluidos tipicamente separam em duas ou mais fases, cada uma com composição diferente, à medida que a temperatura ou o potencial químico das respectivas componentes são variados. Tais diagramas de fase são referidos como (*“demixing transition”*). Investigações experimentais e teóricas de misturas binárias mostram que esta separação pode ser induzida puramente por interações repulsivas (Kuijper et al., 1990; Kerley, 1989; Biben; Hansen, 1991). Quando não existem forças atrativas, ou elas são desprezíveis, a transição é dominada por efeitos entrópicos. Em essência, o volume acessível

às partículas pequenas aumenta quando as partículas grandes formam aglomerados. Se um dos componentes (um dos tipos de partícula) exibe uma transição ordem-desordem, a possibilidade de ponto tricrítico surge, na qual a mistura coexiste com duas fases ordenadas.

Muitos autores tem estudado separação de fases induzidas por efeitos entrópicos. Lebowitz e Rowlinson (Lebowitz; Rowlinson, 1964) mostraram que, dentro da aproximação de Percus-Yevick, uma mistura binária de esferas duras não apresenta separação, i.e., efeitos entrópicos não são suficientes para causar uma lacuna (“*gap*”) na mistura simples. Em contraste, usando a equação de Rogers-Young, Biben e Hansen (Biben; Hansen, 1991) apresentaram evidências da separação de fases em uma mistura de esferas duras altamente assimétrica (neste caso a razão entre o diâmetro das partículas pequenas e grandes era menor que  $\sigma_s/\sigma_l < 0, 2$ ). Uma instabilidade similar em uma mistura de esferas duras com raios diferentes foi publicado por Lekkerkerker e Stroobants (Lekkerkerker; Stroobants, 1993). Frenkel e Louis (Frenkel; Louis, 1992) demonstraram uma separação em uma mistura de gás de rede simples de partículas com interação tipo caroço duro mapeando o modelo no modelo de Ising. A “*demixing*” em uma mistura de gás de rede binário em três dimensões foi encontrada através de simulações por Dijkstra e Frenkel (Dijkstra; Frenkel, 1994; Dijkstra; D. Frenkel; Hansen, 1994). A separação de fases, com a obtenção de um ponto tricrítico induzido pela temperatura foi estudado por Wilding em simulações de um fluido binário (Wilding, 1996). Dijkstra e Roij (Dijkstra; Roij, 1997) observaram uma separação isotrópica-isotrópica induzida por efeitos entrópicos usando simulações de Monte Carlo de uma mistura binário de cilindros com diâmetros diferentes e comprimentos iguais. Buhot e Krauth (Buhot; Krauth, 1998) realizaram simulações numéricas precisas de esferas duras bem como simulações de cubos duros paralelos usando um algoritmo de aglomerado. Eles observaram uma separação de fases para os dois sistemas bidispersos.

Neste capítulo investigaremos uma transição de fases que apresenta segregação usando

um modelo que talvez seja o mais simples capaz de exibir tal comportamento. O sistema é um gás de rede com interações puramente repulsivas (volume excluído), consistindo de partículas “grandes” as quais excluem a ocupação dos sítios primeiros vizinhos e partículas “pequenas” com um único sítio de exclusão. O sistema puro de partículas pequenas é solucionado trivialmente notando que a função de partição canônica de  $N$  partículas em uma rede de  $L^d$  sítios é dada pelo coeficiente binomial  $\binom{L^d}{N}$ . O sistema puro de partículas grandes é também amplamente estudado, como mostrado no Cap. 3, onde o mesmo exibe uma transição de fase do tipo Ising envolvendo ordenamento de subredes em redes bipartidas.

A mistura não tem recebido muita atenção desde que foi introduzida por Poland, o qual estudou o diagrama de fases usando expansões em série da densidade (Poland, 1984). Ele notou a possibilidade de coexistência entre uma fase rica em partículas grandes e outra rica em partículas pequenas. A curva de coexistência associada termina na linha de transições de fase contínua, associada com o ordenamento de subredes. Nesse capítulo estudaremos o diagrama de fases da mistura para a rede quadrada, usando simulações de Monte Carlo com a amostragem de Wang-Landau <sup>1</sup>. Nosso método de simulação *abstém da representação explícita* das partículas pequenas. Encontramos que a linha de pontos críticos (associada com o ordenamento em subrede das partículas grandes) termina no ponto tricrítico, onde existe a junção entre os dois tipos de transição.

Consideramos uma mistura binária como definida acima em uma rede quadrada com condições periódicas de contorno. Cada partícula grande “bloqueia” outras partículas (pequenas ou grandes) de ocuparem seu sítio ou qualquer um de seus quatro vizinhos. Cada partícula pequena exclui outras partículas pequenas de ocuparem seu sítio. Assim as distâncias mínimas (em unidades de constante de rede) são  $\sigma_{ss} = 1$ , e  $\sigma_{ll} = \sigma_{ls} = \sqrt{2}$ ,

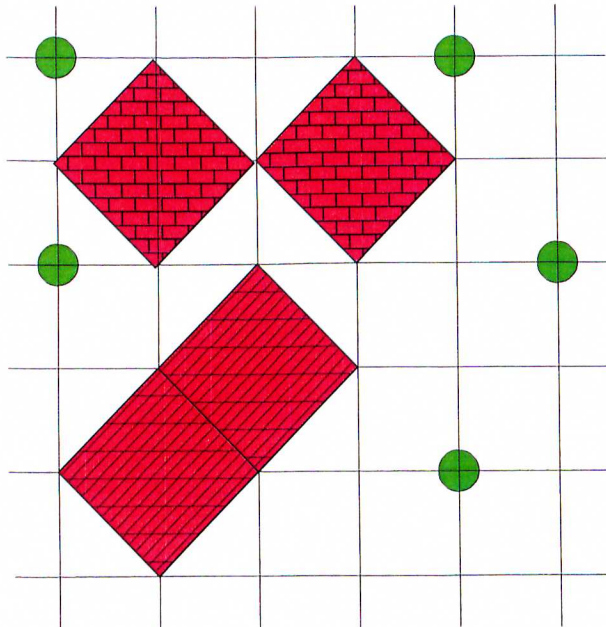
---

<sup>1</sup>Nesse estudo não estamos usando janelas ajustáveis ou mesmo fixas. Estamos fazendo a simulação de todo o espectro.

entre pares de partículas pequenas, pares de partículas grandes e pares com os dois tipos de partículas, respectivamente (ver Fig. 4.1). Essas exclusões de carço duro são a única interação entre as partículas. A grande função de partição do sistema em uma rede de  $L^d$  sítios é

$$\Xi(\mu_l, \mu_s, L^d) = \sum_{N=0}^{L^d/2} \sum_{\eta=0}^{L^d} z_l^N z_s^\eta \check{\Omega}(N, \eta, L^d) \quad (4.1)$$

onde  $z_i = e^{\beta\mu_i}$  é a fugacidade da espécie  $i$ ,  $N$  é o número de partículas grandes,  $\eta$  o número de partículas pequenas e  $\check{\Omega}(N, \eta, L^d)$  o número de configurações distintas com o especificado número de partículas.



**Figura 4.1:** Representação esquemática das partículas na rede. As partículas grandes estão hachuradas de maneira diferente para enfatizar a ocupação em subredes diferentes.

Para uma dada configuração de partículas *grandes*, seja  $n$  o número de sítios da rede disponíveis para partículas pequenas, ou seja, o número de sítios não-ocupados, ou vizinho de partículas grandes. Esse número depende da configuração detalhada das partículas grandes, e não somente do número de partículas. Uma vez que a ocupação de partículas

pequenas não depende de outras partículas pequenas, temos <sup>2</sup>

$$\check{\check{\Omega}}(N, \eta) = \sum_n \check{\check{\Omega}}(N, n) \binom{n}{\eta}, \quad (4.2)$$

onde o termo definido pelo parênteses  $\binom{n}{\eta}$  é o coeficiente binomial

$$\binom{n}{k} \equiv \frac{n!}{(n-k)!k!}. \quad (4.3)$$

Assim podemos reescrever a grande função de partição como

$$\Xi(\mu_l, \mu_s, L^d) = \sum_{N,n} \sum_{\eta} z_l^N z_s^n \binom{n}{\eta} \check{\check{\Omega}}(N, n, L^d), \quad (4.4)$$

$$\Xi(\mu_l, \mu_s, L^d) = \sum_{N,n} z_l^N (1 + z_s)^n \check{\check{\Omega}}(N, n). \quad (4.5)$$

(A partir daqui suprimimos a dependência em  $L$ ).

Dado o número de configurações  $\check{\check{\Omega}}(N, n)$  as médias termodinâmicas podem ser calculadas como

$$\langle A \rangle_{\mu_l, \mu_s} = \frac{1}{\Xi} \sum_{N,n} \langle A \rangle_{N,n} z_l^N (1 + z_s)^n \check{\check{\Omega}}(N, n). \quad (4.6)$$

Por exemplo, a densidade de partículas grandes e a densidade de partículas pequenas são dadas por

$$\rho_l(\mu_l, \mu_s) = \frac{1}{L^d} \frac{1}{\Xi} \sum_{N,n} N z_l^N (1 + z_s)^n \check{\check{\Omega}}(N, n), \quad (4.7)$$

$$\rho_s(\mu_s, \mu_l) = \frac{1}{L^d} \frac{1}{\Xi} \sum_{N,n} n z_l^N z_s (1 + z_s)^{n-1} \check{\check{\Omega}}(N, n). \quad (4.8)$$

As compressibilidades  $\kappa_l$  e  $\kappa_s$  são proporcionais as variâncias das respectivas densidades,

$$\kappa_i(\mu_s, \mu_l) = L^2 [\langle \rho_i^2 \rangle - \langle \rho_i \rangle^2] / \langle \rho_i \rangle^2.$$

<sup>2</sup>Com um pouco de liberdade na escolha dos símbolos, estamos usando a mesma letra  $\Omega$  para representar as funções  $\check{\check{\Omega}}(N, \eta)$  e  $\check{\check{\Omega}}(N, n)$ .

## 4.2 Resultados

Usando a amostragem de Wang-Landau (Cap. 2) estimamos o número de configurações<sup>3</sup>  $\Omega(N, n)$ , bem como as médias microcanônicas do parâmetro de ordem  $\langle \phi \rangle_{N, n}$  e seus segundo e quarto momentos. Restringimos a amostragem das médias microcanônicas às configurações aceitas nos últimos estágios da simulação, ou seja, para  $f \lesssim 1 + 10^{-4}$ , onde  $f$  é o fator modificador da amostragem de WL. É importante ressaltar que nesse estudo é necessário uma simulação bidimensional<sup>4</sup> para obter  $\Omega(N, n)$ , fazendo com que o estudo fique limitado a sistemas com  $L \leq 48$ .

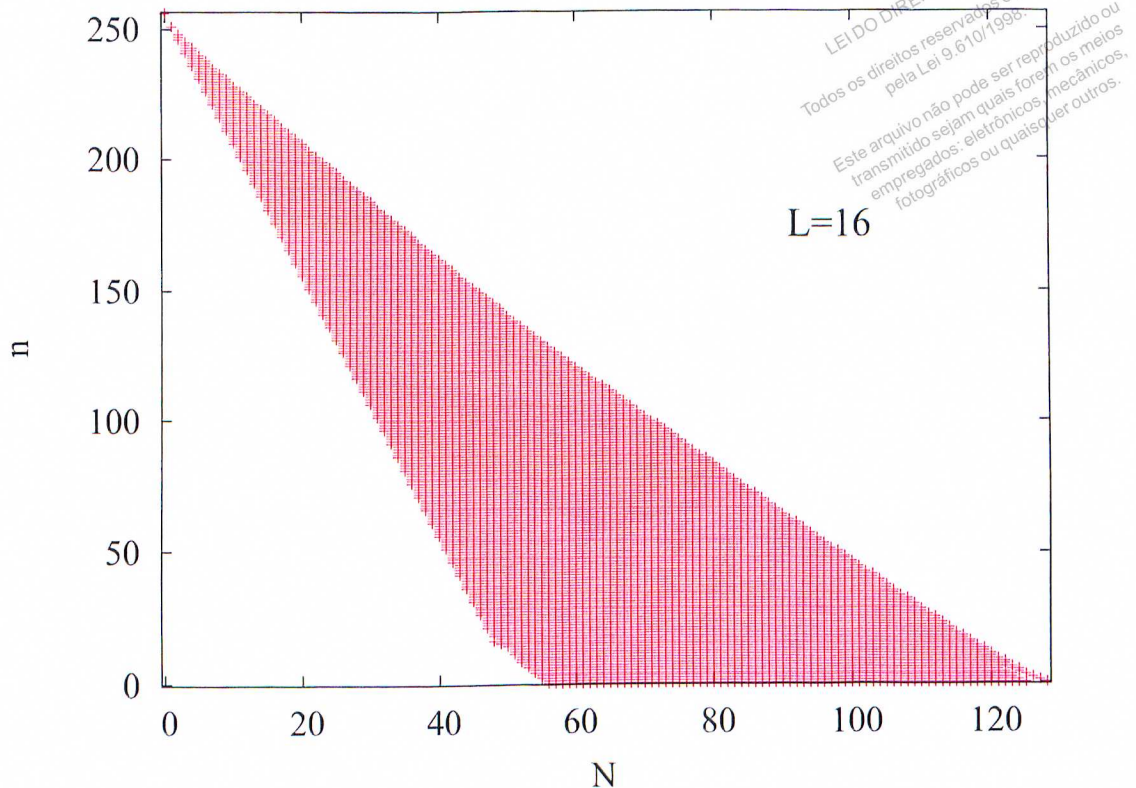
O parâmetro de ordem é definido como a diferença entre ocupações das subredes A e B,  $\phi = |\sum_{\mathbf{x} \in A} \sigma_{\mathbf{x}} - \sum_{\mathbf{x} \in B} \sigma_{\mathbf{x}}| / N_{max}$ , onde  $\sigma_{\mathbf{x}}$  é a variável indicadora do sítio de ocupação  $\mathbf{x}$ , e  $N_{max} = L^2/2$  é o número máximo de partículas. (Estaremos referindo a partículas grandes simplesmente como “partículas” quando descrevermos a simulação, uma vez que partículas pequenas não estão representadas.) A susceptibilidade é dada por  $\chi = L^2 \text{var}(\phi)$ .

Usamos para nossas simulações da mistura três tipos de tentativa de mudança de configuração (“*trial moves*”): deslocamento aleatório de uma partícula, remoção de uma partícula e inserção. Afim de acelerar a simulação, experimentamos diferentes taxas de inserção:remoção:deslocamento, 1:1:0, 1:1:1, 1:1:3, 1:1:8, 2:2:1 e 9:9:2, e obtivemos a convergência mais rápida para 1:1:3. Estudamos 11 tamanhos diferentes no intervalo  $8 \leq L \leq 48$  usando a amostragem de WL. A Fig. 4.2 mostra o espaço  $(N, n)$  de estados existentes para  $L = 16$ . Na Fig. 4.3 mostramos o logaritmo do número de configurações em função do número  $N$  de partículas grandes e do número  $n$  de sítios que podem ser

<sup>3</sup>Para identificar o número de configurações simulado usamos  $\Omega(N, n)$ , reservando  $\check{\Omega}(N, n)$  para representar o valor *exato*, o qual é em geral desconhecido.

<sup>4</sup>Aqui designamos por “simulação bidimensional” uma simulação onde duas variáveis estão sendo monitoradas,  $N, n$ , para obter a densidade de estados  $\Omega(N, n)$ . No capítulo anterior o histograma e  $\Omega$  dependiam apenas do parâmetro  $N$ .

ocupados por partículas pequenas.

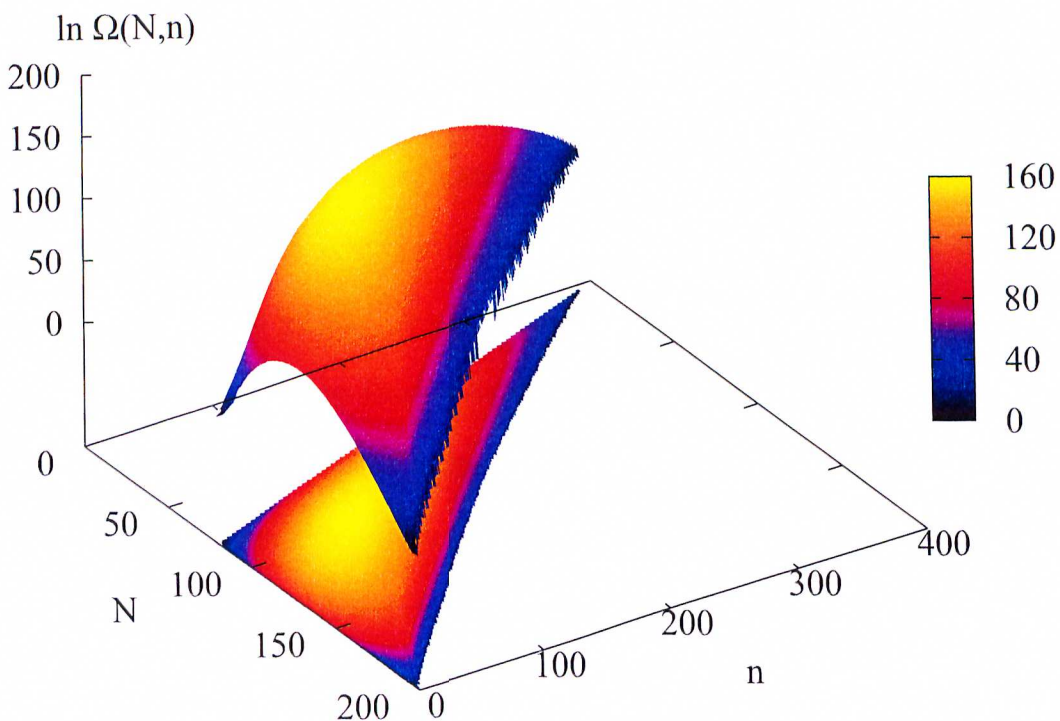
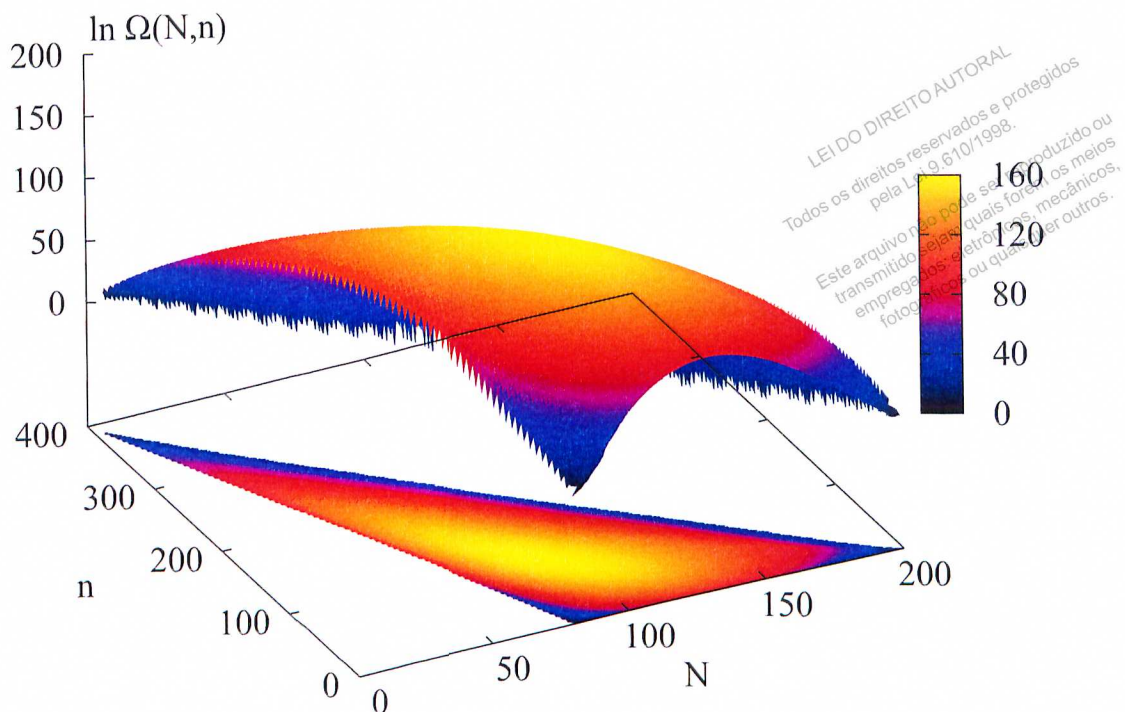


**Figura 4.2:** Pares ordenados representando os níveis de  $N, n$  em que a densidade de estados é diferente de zero, lembrando que  $N$  é o número de partículas grandes e  $n$  o número de sítios da rede disponíveis para partículas pequenas. A “falha” presente em  $n \approx 0$  e  $N \approx 50$  é uma falha real que persiste para os sistemas grandes. Ela surge devido a forma de ocupação dos sítios na rede: as duas subredes são preenchidas por partículas grandes de forma a não ser possível inserir partículas pequenas.

#### 4.2.1 Comparação com o EPV

Como um teste preliminar de nosso algoritmo, comparamos nossos resultados com enumerações exatas de  $\check{\Omega}(N, n)$  para  $L = 8$ , obtida através do método de matriz transferência (Cunha-Netto; Dickman, 2011), analogamente ao que foi feito para o caso simples de um só tipo de partícula, EPV. O erro relativo em estimar  $\ln \Omega$  é bastante pequeno exceto próximo ao número máximo de ocupação. O erro relativo típico em  $\ln \Omega$  é  $\approx 0,07\%$ . Nossos resultados também podem ser comparados com simulações do gás de rede EPV (Cunha-Netto;





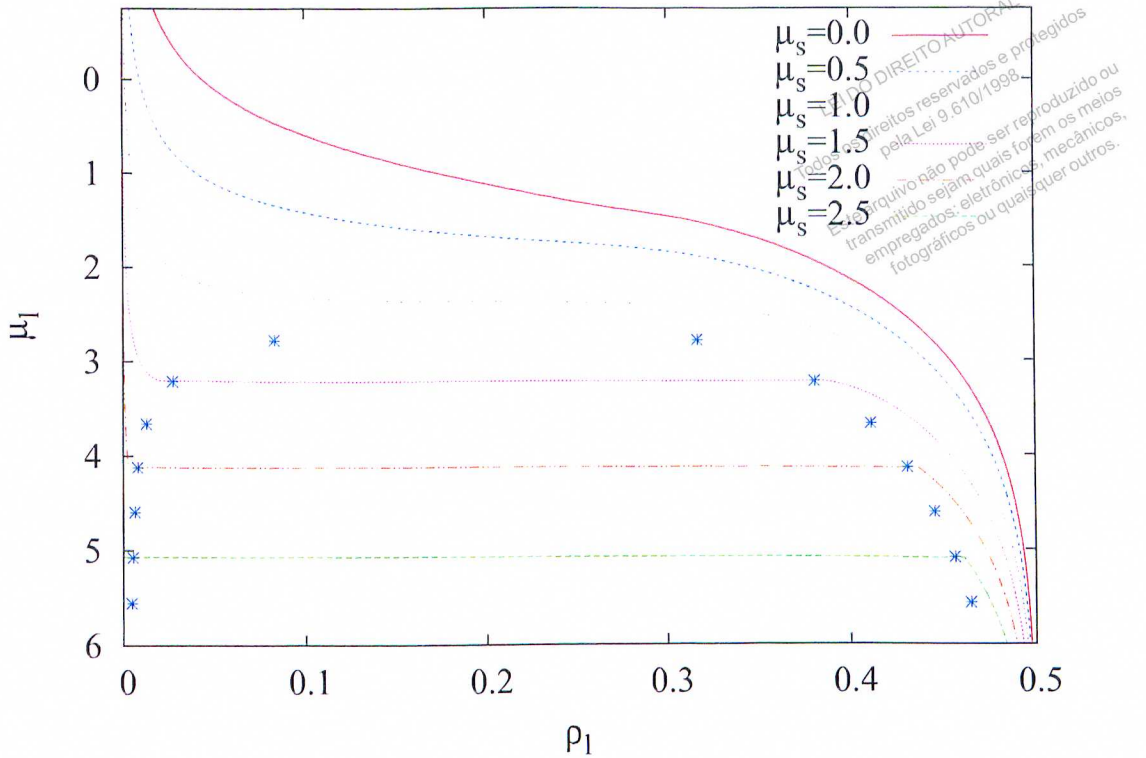
**Figura 4.3:** Logaritmo da densidade de estados em função de níveis  $N, n$  para uma rede de  $20 \times 20$  sítios. As duas figuras (superior e inferior) estão desenhadas com os mesmos dados, apenas em perspectivas diferentes.

Dickman, 2011) fazendo  $z_s = 0$ . Determinamos o máximo da susceptibilidade  $\chi_{l,c}$  e potencial químico associado  $\mu_{l,c}$  para  $L = 48$ . O valor resultante,  $\mu_{l,c} = 1,2674(3)$  e  $\chi_{l,c} = 77,11(6)$  estão em bom acordo com aqueles obtidos nas simulações do gás de rede EPV mostradas no capítulo anterior:  $\mu_{EPV,c} = 1,270(4)$  e  $\chi_{EPV,c} = 77,3(9)$ . Resultados similares foram obtidos para a compressibilidade. Uma análise de tamanho finito dos dados simulados levam a  $\mu_{l,\chi_c} = 1,3346(8)$  ( $L > 22$ ) e  $\gamma/\nu = 1,751(1)$  ( $16 \leq L \leq 48$ ). Diante desses valores fica evidente que é possível obter resultados mais precisos quando realizamos uma simulação bidimensional. Acreditamos que a amostragem bidimensional é melhor porque usa um número maior de classes, forçando subclasses da amostragem unidimensional a serem visitadas mais uniformemente. Resultados similares para o modelo de Heisenberg são mostrados por (Zhou et al., 2006).

#### 4.2.2 Mistura binária

Voltamos agora para os resultados da mistura. Uma característica de interesse é observar a variação da densidade de partículas grandes  $\rho_l$  quando variamos o potencial químico associado  $\mu_l$ , com o potencial  $\mu_s$  de partículas pequenas fixo. A Figura 4.4 mostra que para um valor  $\mu_s$  suficiente grande,  $\rho_l$  exhibe uma descontinuidade quando  $\mu_l$  é variado, demonstrando coexistência entre fluidos de diferentes composições, que é a separação (“*demixing*”). Na figura, os asteriscos definem a localização da região de duas fases (curva bimodal). Nosso critério numérico para a descontinuidade na densidade é  $\Delta\rho_l/\Delta\mu_l \geq 5$ ; tal critério parece adequado uma vez que, fora da região do ponto tricrítico,  $\Delta\rho_l/\Delta\mu_l \leq 1$  ao longo das linhas de  $\mu_s$  fixo, exceto na transição.

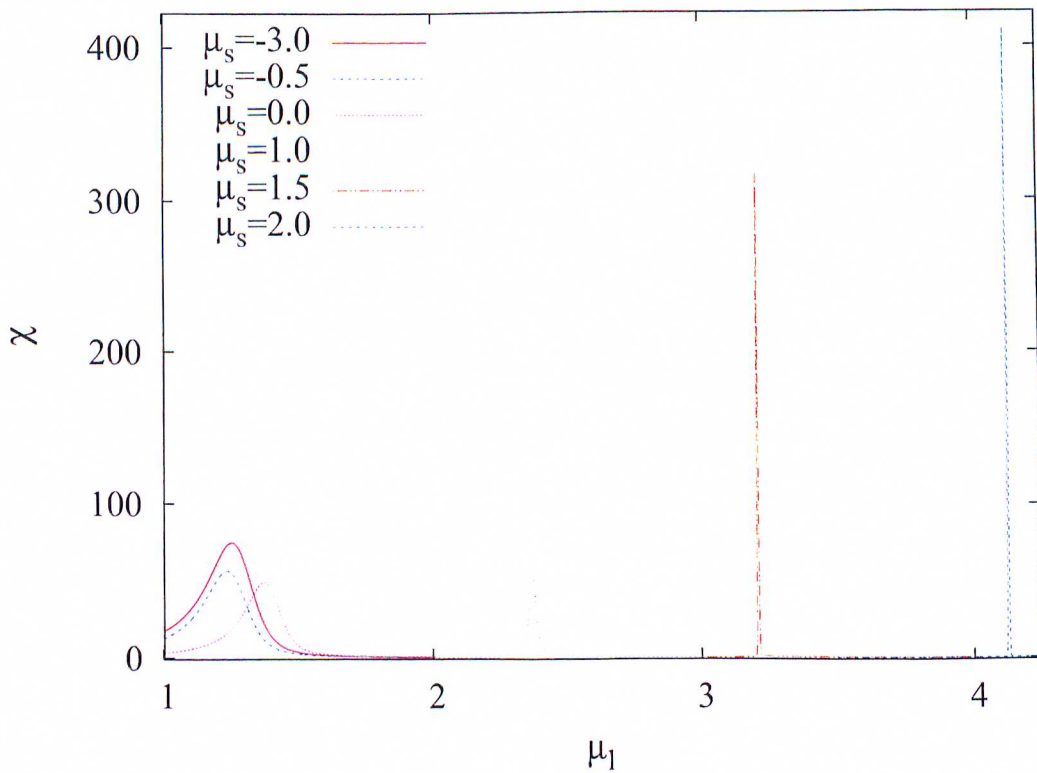
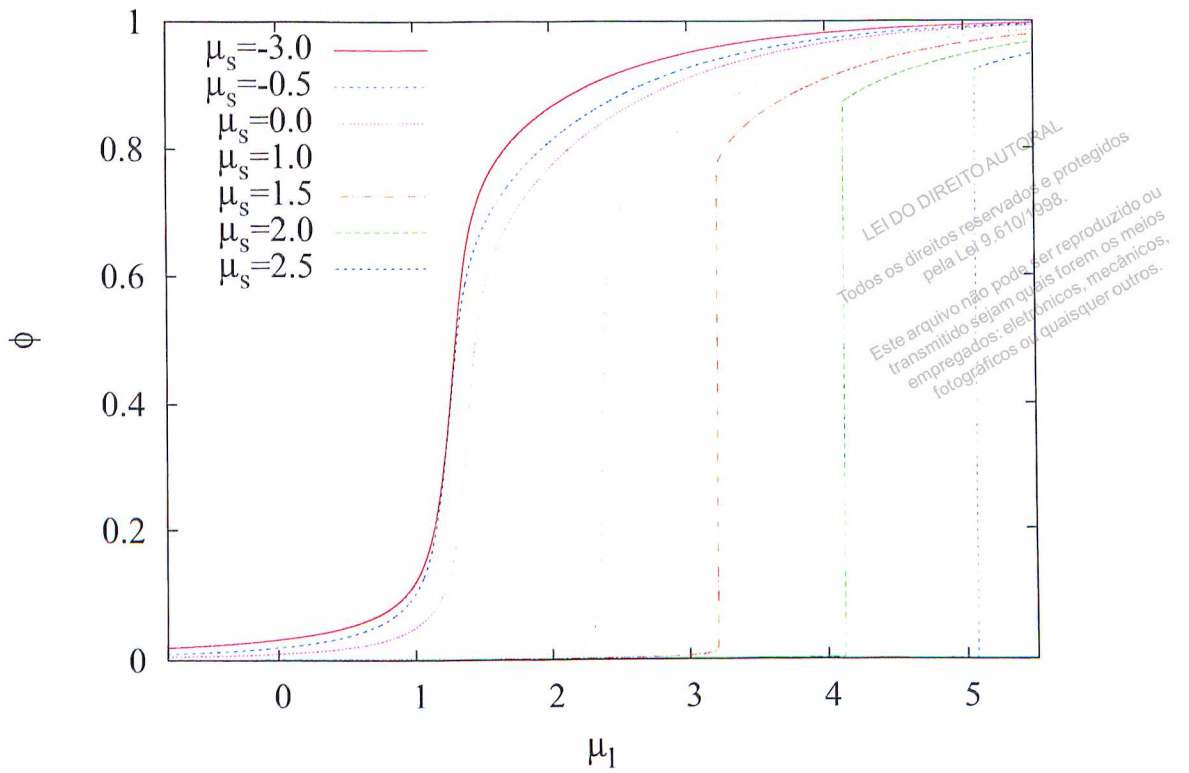
Usando  $\Omega(N, n)$  e médias microcanônicas, calculamos o parâmetro de ordem e a susceptibilidade como função de  $\mu_l$  para  $\mu_s$  fixo (Fig. 4.5). A Fig. 4.6 mostra o parâmetro de ordem e a susceptibilidade como função de  $\mu_s$  para um valor fixado de  $\mu_l$ .



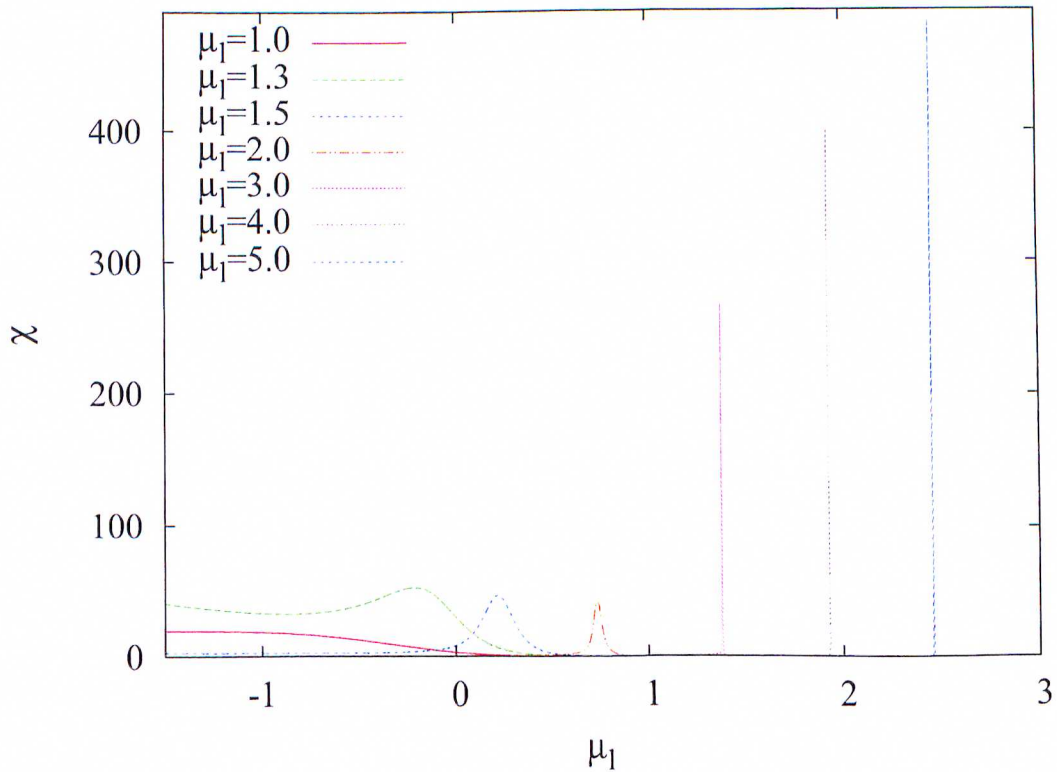
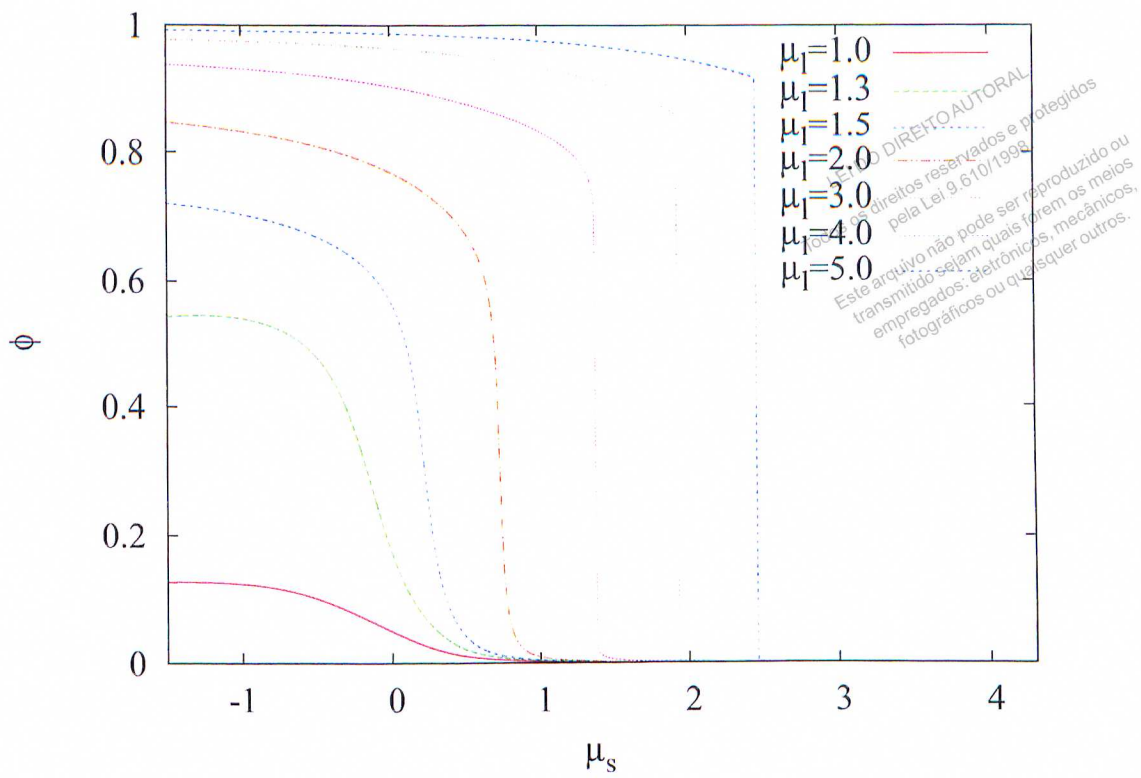
**Figura 4.4:** Isofugacidades para  $L = 48$ . As barras de erros são menores que os símbolos. Os asteriscos definem a curva bimodal.

Seja  $(\mu_{s,c}, \mu_{l,c})$  um ponto no qual a susceptibilidade exhibe um máximo, quando variarmos  $\mu_l$  (com  $\mu_s$  fixo) ou  $\mu_s$  (com  $\mu_l$  fixo). A curva construída por uma sequência de pontos  $(\mu_{s,c}, \mu_{l,c})$  representa o diagrama de fases no plano dos potenciais (veja Fig. 4.7); em um certo ponto,  $(\mu_{s,t}, \mu_{l,t})$ , a natureza da transição de fase muda. Começando de  $\mu_s = -\infty$  (i.e., o caso puro do gás de rede EPV), até  $\mu_{s,c} = \mu_{s,t}$ , o contorno é uma linha de transições contínuas entre a fase sem ordenamento em subrede e uma fase ordenada. Em contraste, para  $\mu_{s,c} > \mu_{s,t}$  observamos separação em duas fases: fase rica em partículas grandes e fase pobre em partículas grandes; a fase rica em partículas grandes tem ordenamento em subredes, como esperado. Assim encontramos um ponto tricrítico separando a linha de transições contínuas e descontínuas. (a inserção da Fig. 4.7 mostra em detalhe a região  $\mu_{s,c} < -0,5$ .)

Na figura 4.8 mostramos o diagrama de fases no plano  $\rho_{l,c} - \rho_{s,c}$ . A linha sólida re-

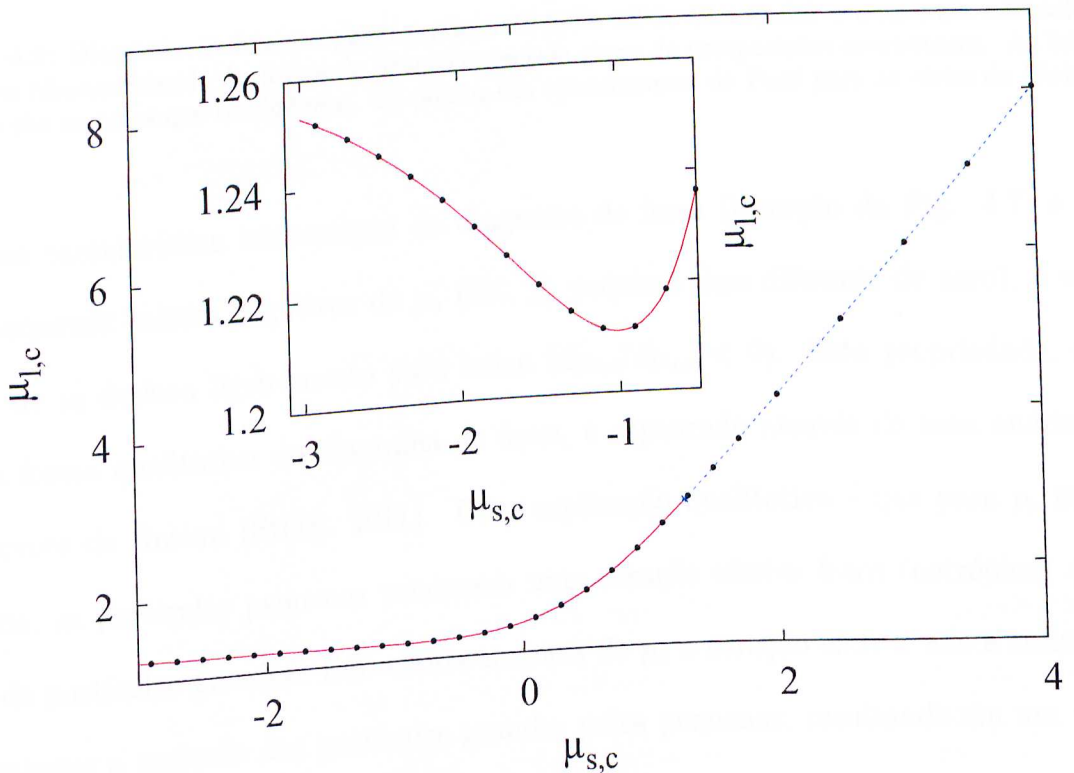


**Figura 4.5:** Parâmetro de ordem (Fig. superior) e susceptibilidade (Fig. inferior) em função do potencial químico das partículas grandes  $\mu_l$ , fixado o valor de  $\mu_s$  como indicado. Tamanho do sistema:  $48 \times 48$ .

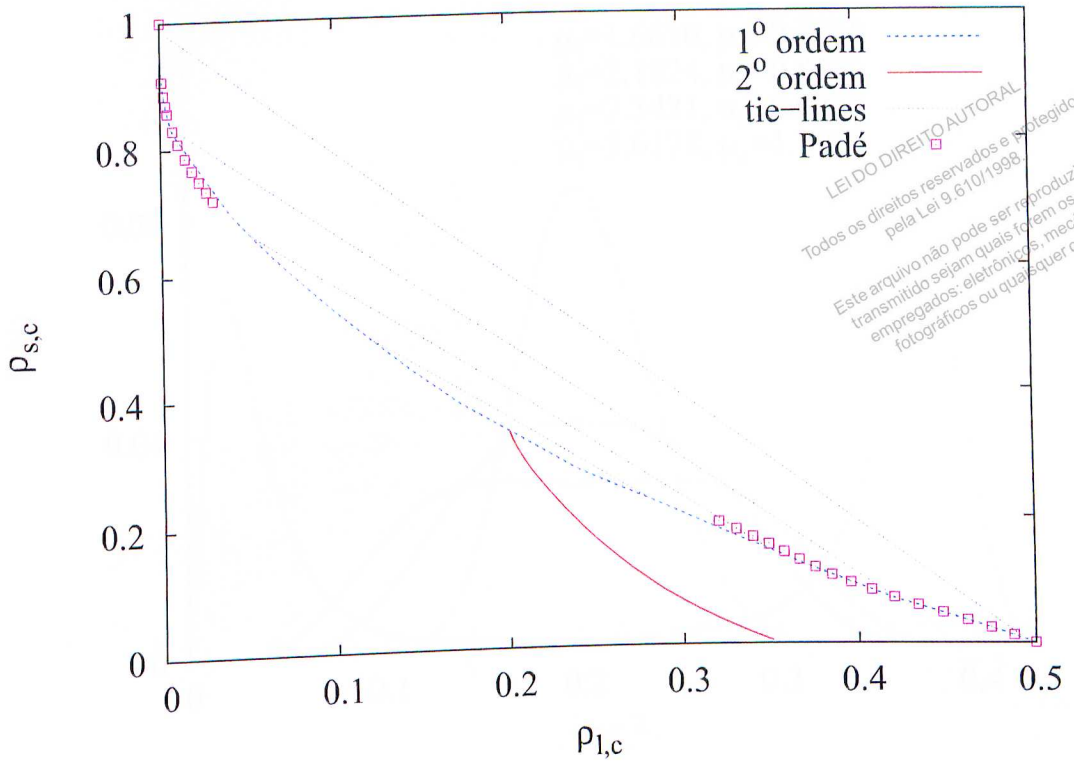


**Figura 4.6:** Parâmetro de ordem (Fig. superior) e susceptibilidade (Fig. inferior) em função do potencial químico das partículas grandes  $\mu_s$ , fixado o valor de  $\mu_l$ . Tamanho do sistema:  $48 \times 48$ .

apresenta uma transição de fases contínua, enquanto a linha tracejada ilustra a curva de coexistência. Uma série de linhas de conexão (“*tie-lines*”) ligam os pares de composições coexistentes ao longo dessa curva. Os valores para  $\rho_{l,c}$  e  $\rho_{s,c}$  são médias obtidas usando sete rodadas independentes. Longe do ponto tricrítico ( $\rho_{l,c} \lesssim 0,007$  e  $\rho_{s,c} \gtrsim 0,42$ ) estamos usando para o critério numérico de uma descontinuidade  $\Delta\rho_l/\Delta\mu_l \geq 0,1$ ; nessa região  $\Delta\rho_l/\Delta\mu_l \lesssim 10^{-9}$ . Estes resultados simulacionais concordam bem com os resultados preditos (símbolos na figura) fornecidos por aproximantes de Padé (Padé, 1892; Baker, 1975) para as séries derivadas por Poland (Poland, 1984). A separação de fases é novamente evidente na Fig. 4.9, na qual é mostrado a distribuição de probabilidades  $P(N)$  do número de partículas grandes em quatro pontos ao longo da linha crítica. A distribuição é bimodal para  $\mu_s > \mu_{s,t}$ .

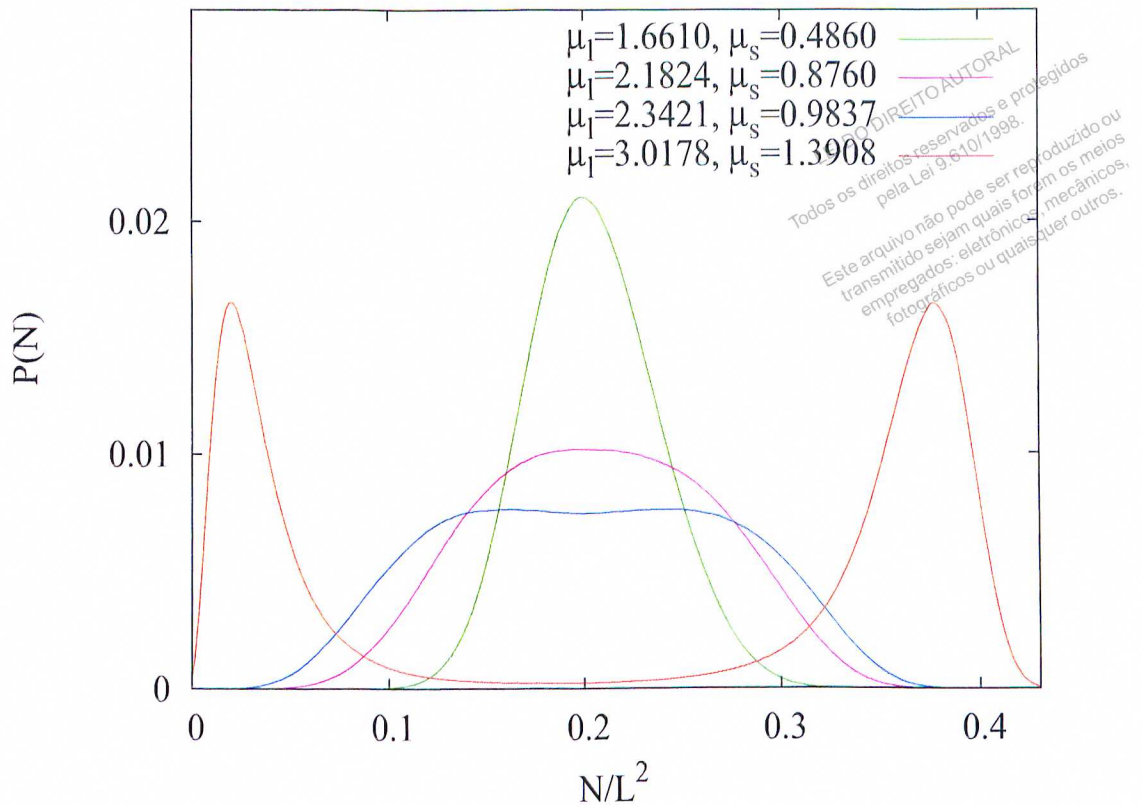


**Figura 4.7:** Diagrama de fases ( $L = 48$ ) da mistura binária. Para  $\mu_s < \mu_{s,t}$ , a linha de transições (sólida) é uma linha de transições de segunda ordem, enquanto que para  $\mu_s > \mu_{s,t}$  (linha tracejada) corresponde a transições de primeira ordem. Inserção: detalhe da região  $\mu_{s,c} < -0,5$ .



**Figura 4.8:** Diagrama de fases no plano  $\rho_{l,c}$ - $\rho_{s,c}$ . A linha sólida (tracejada) corresponde a transições contínuas (descontínuas). As linhas de ligação conectam pares de composições coexistentes. As barras de erros são menores que os símbolos. Os pontos são aproximantes de Padé para as séries de (Poland, 1984).

Uma característica interessante do diagrama de fases (inserção da Fig. 4.7) é que para pequenos valores negativos de  $\mu_s$  (i.e.,  $\rho_s$  pequeno mas diferente de zero), o valor crítico de  $\mu_l$  desloca ligeiramente para baixo ( $d\mu_{l,c}/d\mu_{s,c} < 0$ ). Esta propriedade, e de fato, a forma qualitativa do diagrama de fases, é capturado através de uma análise do tipo árvore de Husimi (Stilck, 2011). Uma explicação qualitativa é que para  $\rho_s$  muito pequeno, as partículas pequenas produzem uma atração efetiva fraca (entrópica) entre pares de partículas grandes. Em valores maiores de  $\rho_s$  a atração efetiva não é suficiente para superar a exclusão das partículas grandes pelas pequenas, resultando em um valor maior de  $\mu_l$  para encontrar ordenamento em subredes.



**Figura 4.9:** Distribuição de probabilidades ( $L = 24$ ) em função da densidade de partículas grandes em quatro pontos  $(\mu_l, \mu_s)$  ao longo da linha de transições.

### 4.3 Ponto tricrítico

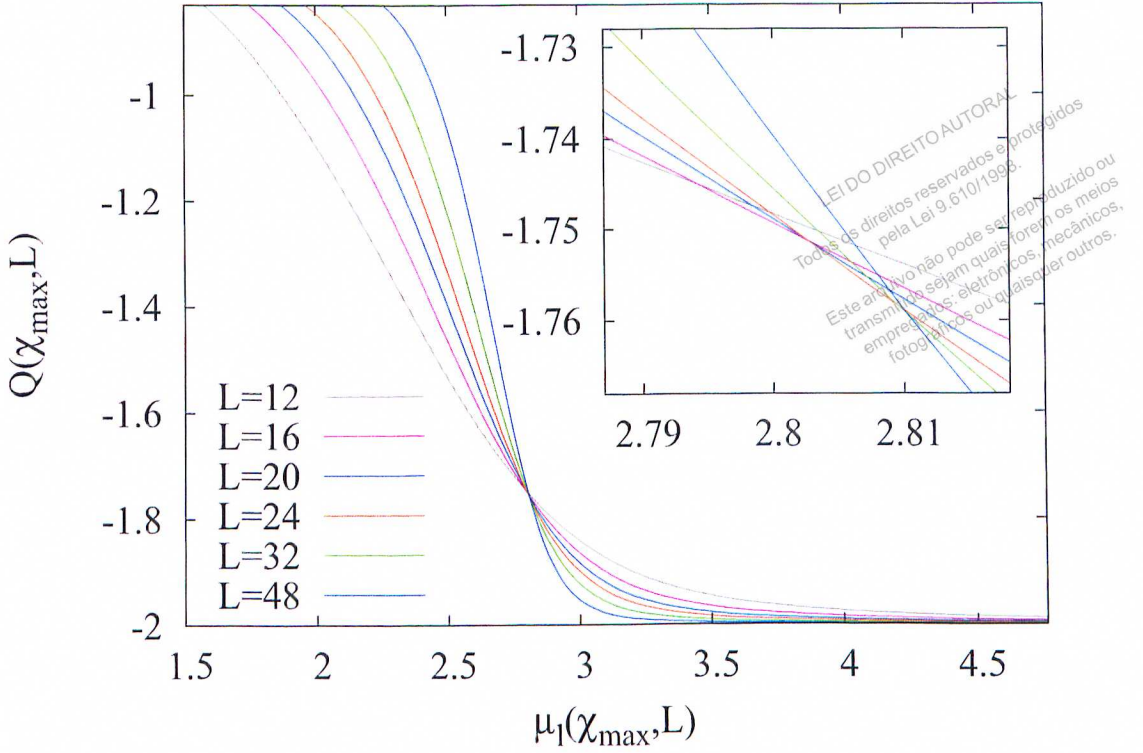
Afim de localizar o ponto tricrítico, estudamos o quarto cumulante reduzido (Fig. 4.10) (Binder, 1981; Tsai; Salinas, 1998), definido como  $Q = K_4/K_2^2$ , onde  $K_2 = \text{var}(\phi)$  e,

$$K_4 = \langle \phi^4 \rangle - 4\langle \phi^3 \rangle \langle \phi \rangle - 3\langle \phi^2 \rangle^2 + 12\langle \phi^2 \rangle \langle \phi \rangle^2 - 6\langle \phi \rangle^4. \quad (4.9)$$

$Q$  é esperado ter um valor universal,  $Q_t$ , no ponto tricrítico. Analisando o cruzamento de cumulantes ao longo da linha onde observamos máximos na susceptibilidade, obtivemos o valor de  $\mu_{l*}, \mu_{s*}$  no cruzamento. Apesar dos cumulantes se cruzarem esse não é de fato o ponto tricrítico. Para ilustrar tal fato calculamos a densidade das partículas grandes em função de  $1/L$ . A figura 4.11 mostra a não convergência da densidade no ponto  $\mu_{l*}, \mu_{s*}$ .

Uma alternativa para obter o ponto tricrítico é determinando o ponto onde a linha





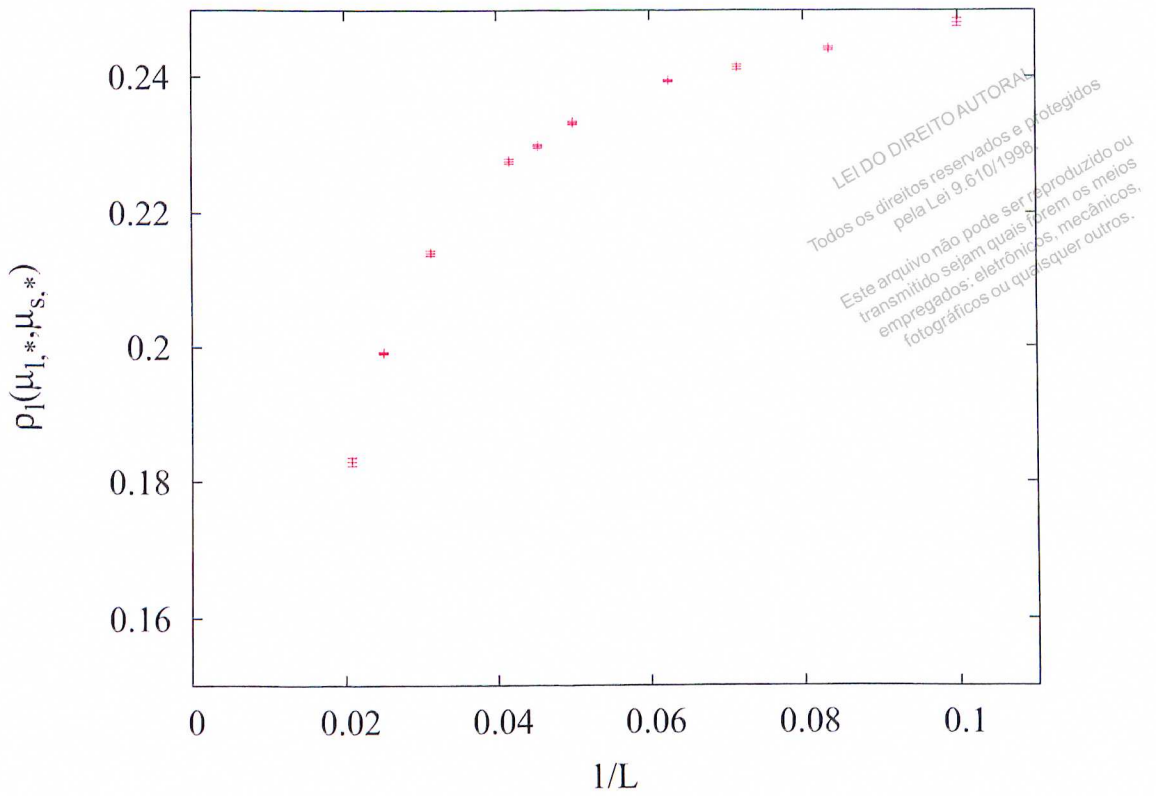
**Figura 4.10:** Quarto cumulante reduzido ao longo da linha dos máximos da susceptibilidade; tamanhos do sistema como indicado. As barras de erros não estão exibidas por serem menores que símbolos. Inserção: detalhe da região de cruzamento.

de coexistência e a linha crítica se encontram (ver Fig. 4.8). Para isso ajustamos um polinômio de 5<sup>o</sup> grau aos pontos entre  $\rho_l = 0,09$  e  $0,35$  da linha de coexistência. O coeficiente do polinômio interpolado para a rede com  $L = 48$  foi

$$f(x) = 0,60016 + 2,784475x - 57,23338x^2 + 293,4156x^3 - 659,3951x^4 + 551,9805x^5 \quad (4.10)$$

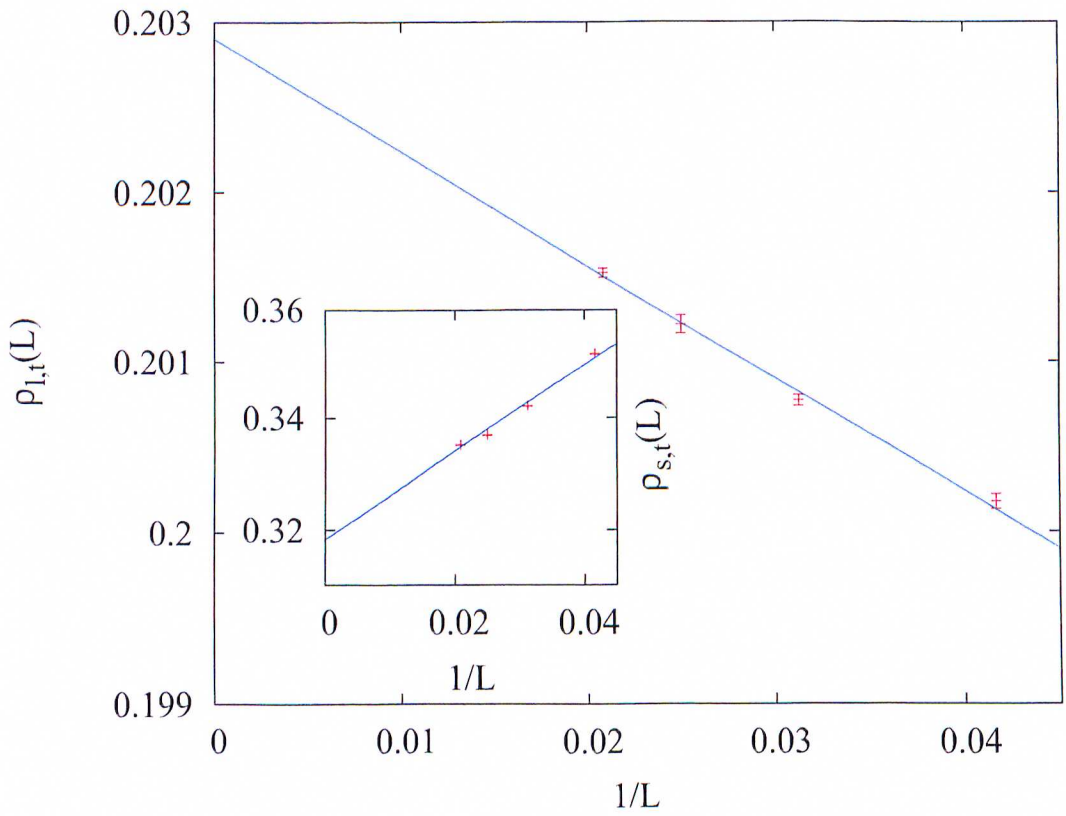
Buscando o cruzamento entre a linha interpolada e a linha crítica obtemos  $\rho_{l,t}(L = 48) = 0,202(1)$  e  $\rho_{s,t}(L = 48) = 0,336(1)$ . Realizando este mesmo procedimento para os outros tamanhos simulados e fazendo uma extrapolação com  $1/L$  obtemos  $\rho_{l,t} = 0,2029(1)$  e  $\rho_{s,t} = 0,318(2)$  (ver Fig. 4.12).<sup>5</sup> Para comparação, os valores obtidos por Poland foram  $\rho_l = 0,20(1)$  e  $\rho_s = 0,29(2)$ . Neste ponto enfatizamos que nossos resultados são

<sup>5</sup>Lembramos aqui que o passeio aleatório é feito em um espaço bidimensional  $\Omega(N, n)$ , limitando assim a simulação para redes maiores.



**Figura 4.11:** Densidade das partículas grandes em função de  $1/L$  para os valores de  $\mu_{l*}, \mu_{s*}$ . Como fica evidente na figura, a densidade não converge quando  $L \rightarrow \infty$ .

mais precisos que os resultados obtidos usando a expansão em série, concordando para a densidade das partículas grandes e sendo 9% maior para as partículas pequenas.



**Figura 4.12:** Extrapolação de  $\rho_{l,t}(L)$  e  $\rho_{s,t}(L)$  em função de  $1/L$  para obter o ponto tricrítico. Usamos nesta extrapolação  $L = 24, 32, 40$  e  $48$ .

# Capítulo 5

---

## Amostragem tomográfica

LEI DO DIREITO AUTORAL  
Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998.  
Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
transmitido sem a qual forem os meios  
empregados: eletrônicos, mecânicos,  
fotográficos ou quaisquer outros.

Neste capítulo apresentaremos um método de Monte Carlo que usa uma amostragem alternativa para estimar o número de configurações de uma dada energia, a amostragem tomográfica. Introduzimos na técnica um esquema que utiliza múltiplos estudos, começando por diferentes regiões do espaço de configurações, obtendo estimativas precisas do número de configurações para o intervalo completo de energias possíveis, sem dividi-lo em sub-intervalos (janelas).

### 5.0.1 Método

Considere um modelo estatístico com um espaço de configurações discreto. Considere  $\vartheta$  uma variável (ou conjunto de variáveis) caracterizando cada configuração, tal como energia ou número de partículas. Para um dado tamanho do sistema, conhecido o número de configurações  $\check{\Omega}(\vartheta)$ , é possível obter a função de partição e médias térmicas associadas. Métodos de simulação entrópica usam simulações de Monte Carlo para fornecer estima-

tivas do número de configurações. A proposta básica do algoritmo pode ser descrita da maneira abaixo. Suponha  $E(\mathcal{C})$  ser a energia da configuração  $\mathcal{C}$ . Considere uma simulação que gera configurações a partir da distribuição de probabilidade

$$P(\mathcal{C}) \propto \frac{1}{\check{\Omega}[E(\mathcal{C})]}, \quad (5.1)$$

isto é, a probabilidade da configuração  $\mathcal{C}$  é inversamente proporcional ao número de configurações tendo a mesma energia. Isto poderia ser feito usando uma probabilidade de aceitação

$$p(\mathcal{C}') = \min \left[ \frac{\check{\Omega}(E)}{\check{\Omega}(E')}, 1 \right]. \quad (5.2)$$

(Como usual, quando uma nova configuração  $\mathcal{C}'$  é rejeitada, a configuração atual  $\mathcal{C}$  é contabilizada novamente na amostragem.) Seja  $H(E)$  o número de vezes que a energia  $E$  ocorreu na amostragem. Em uma simulação que segue a Eq. (5.1),  $\langle H(E) \rangle = \text{Const.}$ , independente de  $E$ . Naturalmente os  $\check{\Omega}(E)$  são em geral desconhecidos. Se realizamos a simulação usando uma escolha de valores estimados,  $\Omega(E)$ , no lugar de  $\check{\Omega}(E)$  na Eq. (5.1), quanto melhor a estimativa, mais uniforme deverá ser o histograma  $H(E)$ . O número esperado de visitas à energia  $E$  quando usamos um  $\Omega(E)$  estimado para definir  $p(\mathcal{C})$  é

$$\langle H(E) \rangle \propto \frac{\check{\Omega}(E)}{\Omega(E)}. \quad (5.3)$$

Suponha que começamos a amostragem usando um “chute inicial”,  $\Omega_0(E)$ , para  $\check{\Omega}(E)$ . Simulando por um período de tempo longo o suficiente tal que  $H(E) \approx \langle H(E) \rangle$  para todas as energias  $E$ , podemos refinar nosso chute, usando a Eq. (5.3) e escrever

$$\Omega_1(E) = \frac{H_1(E)}{\overline{H}_1} \Omega_0(E) \quad (5.4)$$

onde  $H_1(E)$  é o número de vezes que a energia  $E$  ocorre e  $\overline{H}_1$  é a média de  $H_1(E)$  sobre todas as energias possíveis. A equação (5.4) é a base do nosso método de simulação. A proposta é iterar este procedimento, começando de um chute inicial, repetidas vezes até que  $\Omega_N$  esteja bem próximo ao verdadeiro valor. (Durante a última iteração, as médias microcanônicas requeridas para calcular médias térmicas também serão determinadas.)

Para o método atingir uma estimativa apreciável para  $\check{\Omega}(E)$ , é essencial que o espaço de configurações seja amostrado por um tempo suficiente, afim de que em cada passo  $j = 1, \dots, N$ , o histograma observado  $H_j(E)$  seja próximo a seu valor esperado,  $H_j(E) \propto \check{\Omega}(E)/\Omega_{j-1}(E)$ . Experimentos numéricos indicam que melhores resultados são obtidos usando um número relativamente pequeno de iterações, com um número relativamente grande de atualizações na rede (LUDs) <sup>1</sup>, ao invés de usar um número grande de iterações, cada uma tendo um pequeno número de atualizações. Nos estudos descritos nesta tese usamos  $N = 5$  iterações, cada uma consistindo de um conjunto de dez atualizações a configuração inicial, cada uma com  $N_U = 10^7$  LUDs. Para garantir uma amostragem adequada do espaço completo de valores de energia, as simulações em uma dada iteração usam uma variedade de configurações iniciais. Para o modelo de Ising na rede quadrada, no qual o número de configurações é invariante sob (i) inversão de todos os spins, e (ii) inversão de todos os spins em uma subrede, usamos as seguintes escolhas para as configurações iniciais: (1 e 2) orientações aleatórias para os spins; (3) todos os spins para cima; (4) todos os spins para baixo; (5) todos para baixo exceto por dois spins vizinhos; (6) todos para cima exceto por dois spins vizinhos; (7 e 8) todos os spins em uma subrede para cima, o restante para baixo; (9 e 10) configuração (7) ou (8) com um par de spins

---

<sup>1</sup>Definimos como uma “atualização na rede” uma tentativa de inversão de spin por sítio, ou  $L^d$  tentativas para a rede.

invertidos. Assim escolhemos quatro configurações iniciais com energia baixa, quatro com energia alta e duas que possuem energia  $E \approx 0$ . Tomando uma certa liberdade com a terminologia, chamaremos essa abordagem de *amostragem tomográfica* da distribuição  $\Omega_j$ , uma vez que estudos usando diferentes pontos de partida são usados para calcular as correções em  $\Omega$ .

Uma questão chave consiste no chute inicial  $\Omega_0$  para o número de configurações. Aqui é importante observar que, em termos da densidade de energia  $e = E/L^d$ , a densidade de entropia microcanônica,

$$s(e, L) \equiv \frac{1}{L^d} \ln \check{\Omega}(L^d e, L) \quad (5.5)$$

depende muito fracamente do tamanho  $L$  do sistema. Assim o resultado final para  $s(e, L)$  pode ser usado como um primeiro chute para um sistema maior  $L'$ . Usamos um chute inicial simples (por exemplo  $\Omega(E)$  uniforme sobre todo o conjunto de valores permitidos de energia, ou uma aproximação de campo médio) para alguns sistemas iniciais pequenos. Para valores de  $L$  pequenos a simulação converge rapidamente para uma boa estimativa de  $\Omega(E, L)$ , e a densidade de entropia resultante  $s(e, L)$  é então usada para gerar o chute inicial  $\Omega_0(E, L')$  para o novo tamanho do sistema a ser simulado.

### 5.0.2 Implementação

Todos os estudos tratados aqui usam condições de contorno periódicas; outras condições de contorno não são impeditivas para a metodologia. As configurações de spin são classificadas através do número de *elos*  $n$ , isto é, o número de pares de primeiros vizinhos tendo a mesma orientação. Na rede quadrada os valores permitidos são  $n = 0, 4, 6, \dots, n_{max} - 4, n_{max}$  com  $n_{max} = 2L^2$ . (A energia é  $E = 2(L^2 - n)$ .) Para começar a simulação escolhemos a distribuição inicial  $\Omega_0(n)$ . Devido aos valores de  $\Omega$  serem ex-

tremamente grandes, (da ordem de  $\sim \mathcal{O}(10^{30})$  para  $L = 10$ ), eles são representados na forma do logaritmo natural. Em sequência o processo de iteração é realizado  $N$  vezes. (Na maioria dos estudos apresentados aqui  $N = 5$ .) A simulação usa a dinâmica de inversão de um único spin por vez. As probabilidades de aceitação  $\Omega_j(n)/\Omega_j(n')$  (para uma transição de energia  $n$  para  $n'$ ), são armazenadas em uma tabela de verificação. (Os valores permitidos de  $\Delta n$  são  $0, \pm 2$ , e  $\pm 4$ .) Além de armazenar a orientação de cada spin guardamos o número de vizinhos tendo a mesma orientação de spin, para facilitar a avaliação de  $\Delta n$ .

Cada vez que a subrotina é chamada, o histograma  $H_j(n)$  é reinicializado. Ele acumula o número de visitas a classe  $n$  sobre  $N_{sim} = 10$  simulações (usando configurações iniciais variadas), cada uma consistindo de  $N_U$  LUDs. (Estes estudos poderiam ser realizados em paralelo, em processadores separados.) Uma vez que  $N_{sim}$  estudos foram realizados atualizamos  $\Omega(n)$  conforme Eq. (5.4). As probabilidades de aceitação são recalculadas usando a nova estimativa, procedemos com a nova iteração parando quando  $N$  iterações forem completadas. Durante todo o procedimento, uma vez que uma configuração  $\mathcal{C}$  foi gerada, seja esta uma nova (seguindo o critério de aceitação) ou uma repetição (se a nova configuração foi rejeitada) atualizamos o valor acumulado de  $H_j(n)$ . Para calcular as médias microcanônicas do valor absoluto da magnetização  $|M|$ ,  $M^2$  e  $M^4$  estamos acumulando um histograma para estas grandezas apenas na última iteração,  $j = N$ . (Este procedimento é importante uma vez que, no início da simulação, os valores de  $H(n)$  podem diferir consideravelmente dos valores corretos.)

Como mencionado anteriormente, a distribuição inicial  $\Omega_0(n, L)$  é gerada na base da estimativa final de um sistema menor. Para o menor tamanho ( $L = 10$  no caso da rede quadrada) usamos a aproximação simples para a densidade de entropia,



$$s(\rho) \approx -\ln 2(\rho - 1)^2 \quad (5.6)$$

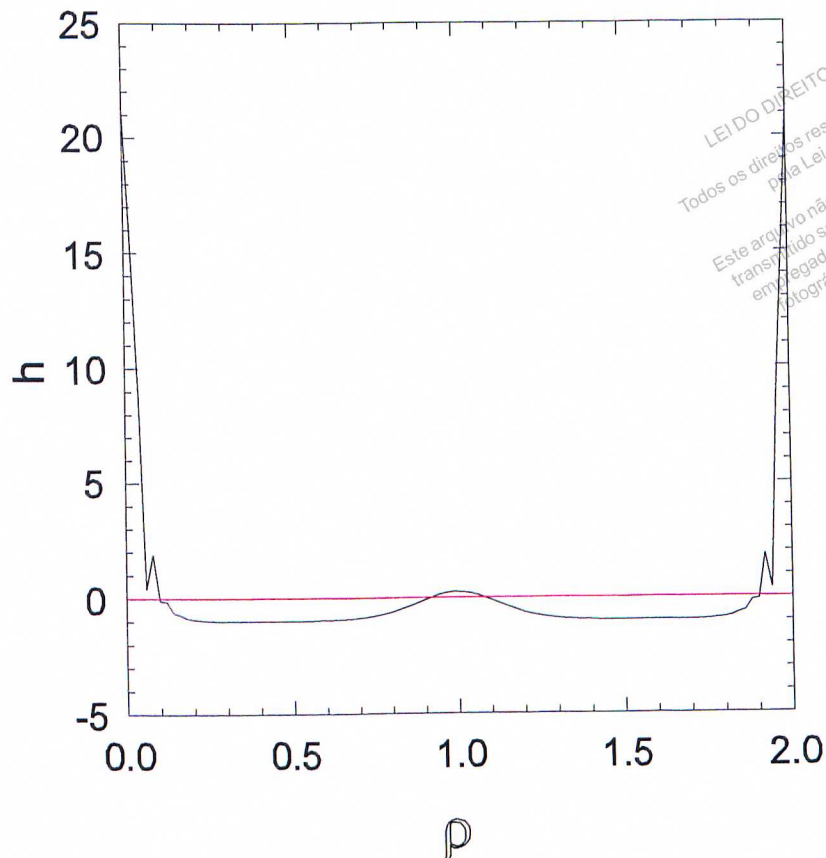
onde  $\rho = n/L^2$ . Isso é motivado pelo fato que  $\check{\Omega}(n = L^2) \sim 2^{2n}$ , considerando que  $\check{\Omega}(n = 2L^d) = \check{\Omega}(n = 0) = 2$  e  $s(\rho)$  é simétrico em relação a  $\rho = 1$ . (Por conveniência subtraímos  $\ln 2$  da definição original,  $s = [\ln \check{\Omega}(n)]/L^2$ .) Para  $L = 10$  a distribuição depois da primeira iteração,  $\Omega_1(n)$ , já é bem parecida à distribuição final, mostrando uma convergência rápida.

A evolução de  $h(\rho) \equiv [H(\rho) - \bar{H}]/\bar{H}$  para  $L = 10$  é ilustrada na Fig. 5.1. O resultado da primeira iteração (começando da aproximação inicial parabólica) mostra variações relativamente grandes, enquanto que histogramas subsequentes estão todos nivelados na escala da figura. A evolução detalhada em iterações subsequentes é mostrada na Fig. 5.2. O histograma final é nivelado com um critério de aproximadamente 99.5%.

Na “transição” de um tamanho do sistema  $L$  para um maior  $L'$  fazemos uma aproximação algébrica para a densidade de entropia  $s(\rho, L)$ . Para os tamanhos menores, um ajuste polinomial em  $s(x)$  para os valores de  $x \equiv \rho - 1$  funcionam razoavelmente bem, mas para manter a boa precisão para os sistemas maiores é necessário aumentar a ordem do polinômio. Os ajustes tendem a ser piores próximo a  $x = \pm 1$ . (De fato, podemos antecipar uma singularidade fraca,  $s \sim |1 - x| \ln |1 - x|$  nos limites.) Observamos que, dada a simetria  $s(-x) = s(x)$ , uma alternativa mais conveniente é uma série de Fourier em cossenos:

$$s(x) - s(1) = \sum_{j=0}^J a_j \cos \left[ \frac{(2j+1)\pi x}{2} \right] \equiv f(s) \quad (5.7)$$

Os coeficientes da expansão são facilmente calculados usando a aproximação discreta



**Figura 5.1:** Modelo de Ising, rede quadrada: desvio relativo do histograma,  $h(\rho) \equiv [H(\rho) - \overline{H}]/\overline{H}$ , em função da densidade  $\rho$  para  $L = 10$ . A curva escura é o resultado da primeira iteração, enquanto que a linha horizontal corresponde as quatro iterações subsequentes.

para a expressão integral <sup>2</sup>. A qualidade do ajuste varia consideravelmente com o número de termos na série. Calculamos o desvio máximo absoluto  $\delta \equiv \max_x |s(x) - f(s)|$  como função do número de termos  $J$ , e usamos o valor de  $J$  que minimiza  $\delta$ . O mesmo procedimento funciona igualmente bem para o modelo de Ising em três dimensões.

O tempo de execução (para um dado número de iterações, configurações iniciais e LUDs) escala com o número de sítios da rede. O maior estudo apresentado aqui (para

<sup>2</sup>Uma vez que  $\check{\Omega}$  é simétrico, simetrizamos o resultado da simulação, o qual apresenta sutis desvios devido a flutuações, piorando o ajuste de Fourier. O número de configurações oscila consideravelmente próximo aos valores extremos  $x = \pm 1$ . Para suavizar a distribuição nos extremos fazemos a média de dois valores vizinhos antes de fazer o ajuste.

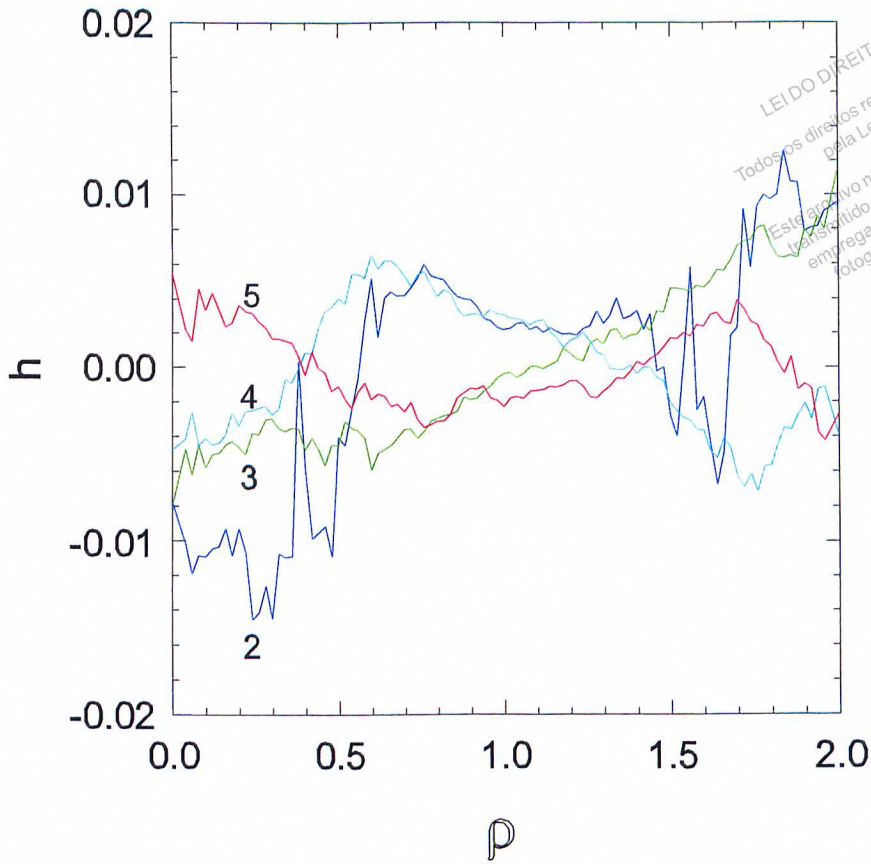


Figura 5.2: Detalhe da iterações 2 - 5 como na Fig. 5.1.

$L = 160$ ) requer aproximadamente uma semana em um processador com velocidade de  $2.8GHz$ .

## 5.1 Resultados

### 5.1.1 Modelo de Ising em uma rede quadrada

Aplicamos a amostragem tomográfica ao modelo de Ising na rede quadrada para os tamanhos de sistema  $L = 10, 20, 40, 80, 120$ , e  $160$ . O procedimento foi realizado como o

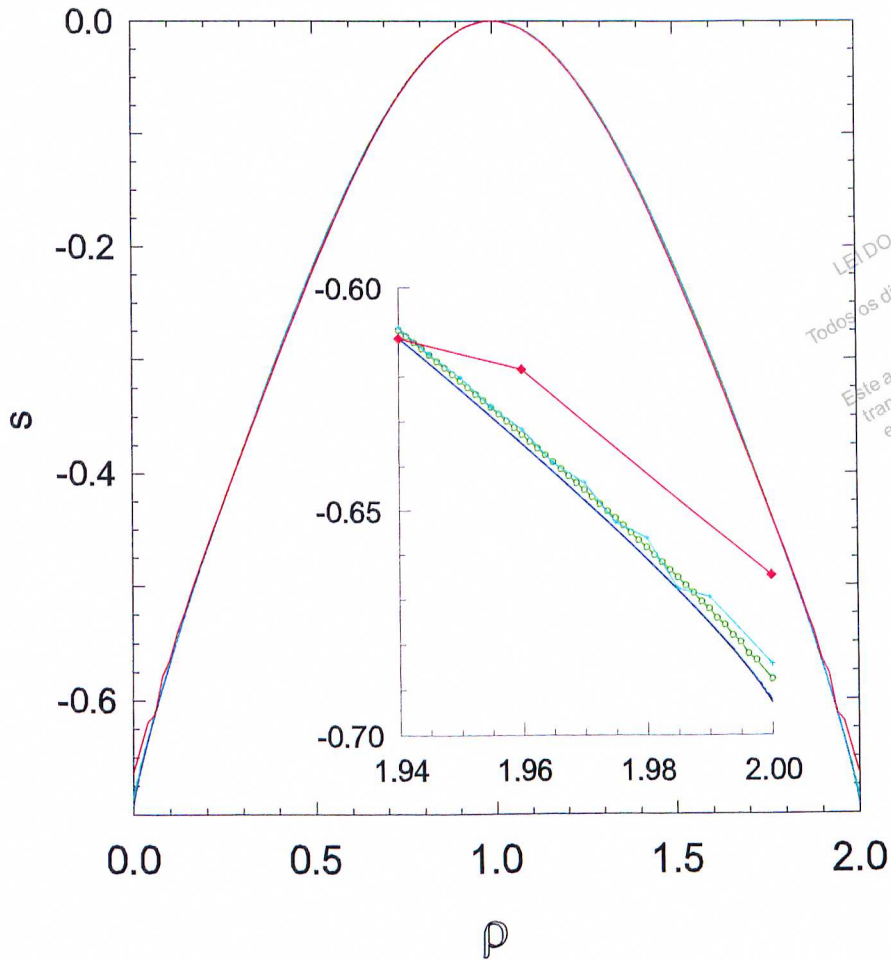
descrito anteriormente, exceto que para os dois sistemas maiores, seguindo as cinco realizações usando  $N_U = 10^7$  atualizações na rede, uma sexta realização foi feita usando  $N_U = 2 \times 10^7$ . Em todos os casos as médias termodinâmicas são calculadas na base da última realização. Médias e incertezas são calculadas usando cinco ou em alguns casos seis sementes diferentes para o gerador de números aleatórios.

O número de configurações  $\Omega(\rho)$  tem valor máximo em  $\rho = 1$  onde o mesmo é simétrico (exceto pelas flutuações) com relação a esse ponto. Na Fig. 5.3 desenhamos a densidade de entropia

$$s(\rho) = \frac{1}{L^2} \ln \left( \frac{\Omega(\rho)}{\Omega(1)} \right) \quad (5.8)$$

para diferentes tamanhos do sistema. Na escala da figura os efeitos de tamanho finito são evidentes apenas próximo aos valores extremos.

Afim de fazer um teste quantitativo do nosso método comparamos predições para o calor específico, magnetização, susceptibilidade e quarto cumulante reduzido com valores conhecidos e com a teoria de escala de tamanho finito (Fisher, 1971; Fisher; Barber, 1972; Barber, 1983). Definimos o calor específico como  $c = \text{var}(E)/(L^d k_B T^2)$ , onde  $E$  é a energia total. (A partir daqui usamos unidades tal como a constante de Boltzmann  $k_B = 1$ .) A figura 5.4 mostra  $c(T)$  ( $L = 80$ ) obtida para cinco rodadas independentes. As curvas são indistinguíveis na escala do gráfico principal, mas o detalhe na região crítica revela uma certa dispersão nos máximos do calor específico e nas temperaturas nas quais eles ocorrem. Na análise de Ferdinand e Fisher (Ferdinand; Fisher, 1969) foi mostrado que na rede quadrada com  $L \times L$  sítios (com condições periódicas de contorno), o calor específico apresenta o máximo na temperatura  $T(c_{max}) \simeq T_c(1 + 0.3603/L)$ , onde  $T_c \simeq 2,269185$  é a temperatura crítica. Combinando os resultados das Refs. (Ferdinand; Fisher, 1969) e (Salas, 2001) temos também uma expansão para o calor específico na temperatura crítica:



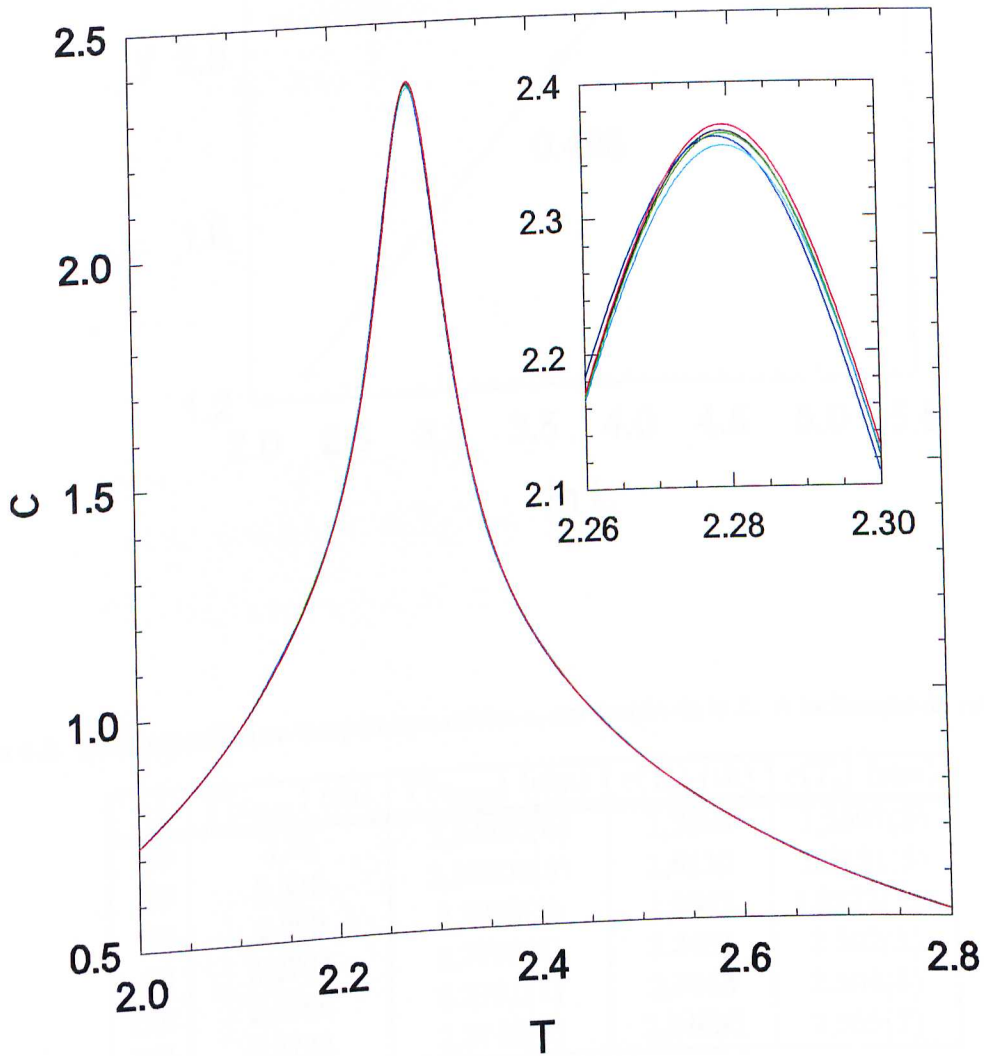
LEIDO DIREITO AUTORAL  
 Todos os direitos reservados e protegidos  
 pela Lei 9.610/1998.  
 Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
 transmitido sejam quais forem os meios  
 empregados: eletrônicos, mecânicos,  
 fotográficos ou quaisquer outros.

**Figura 5.3:**  $s(\rho)$  em função de  $\rho$  para  $L = 10, 20, 40, 80,$  e  $160$  (de cima para baixo). A inserção mostra uma imagem detalhada nas proximidades de  $\rho = 2$ .

$$c(T_c, L) = A_0 \ln L + C_0 + \frac{C_1}{L} + \frac{C_2}{L^2} + \frac{C_3}{L^3} + \dots \quad (5.9)$$

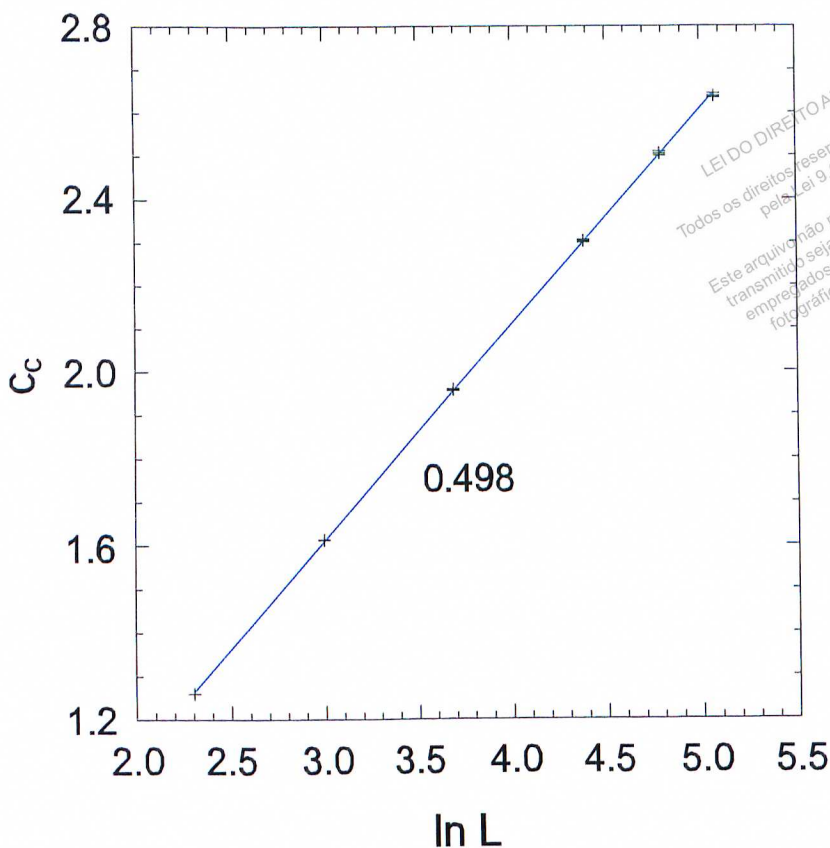
onde  $A_0 = (2/\pi)[\ln(1+\sqrt{2})]^2 \simeq 0,494358$  e, para uma rede  $L \times L$  com condições periódicas,  $C_0 \simeq 0,138149$ ,  $C_1 \simeq -0,170951$ ,  $C_2 \simeq 0,018861$ , e  $C_3 \simeq 0,056765$ . Na Fig. 5.5 plotamos  $c(T_c)$  em função de  $\ln L$ ; um ajuste linear através dos mínimos quadrados leva a  $c(T_c) = 0,498(2) \ln L$ , ou seja, cerca de 1% acima da amplitude exata das correções dominantes do termo escala. Uma comparação detalhada com predições teóricas é dada na tabela 5.1. Os resultados simulacionais concordam com a teoria, levando em conta a barra de erros. Uma extrapolação linear dos resultados da simulação para  $T(c_{max})$  ( $L \geq 20$ ) em função de  $1/L$  leva a  $T_c = 2,26966(8)$ , que é aproximadamente 0,02%

acima do valor exato. Como observado anteriormente, nosso método de amostragem permite obter o ponto crítico antiferromagnético (AF) com a mesma precisão do caso ferromagnético. Verificamos que  $T(c_{max})$ ,  $c_{max}$ , e  $c(T_c)$  associados com a transição AF concorda, levando em conta a barra de erros, com os valores mostrados na tabela 5.1 para a transição ferromagnética.



**Figura 5.4:** Calor específico em função da temperatura para  $L = 80$ . Na figura são mostrados cinco simulações independentes.

Analisaremos agora a magnetização, susceptibilidade e cumulante de Binder. A magnetização pode ser expressa como



**Figura 5.5:** Calor específico na temperatura crítica  $c_c$  em função de  $\ln L$ . A inclinação da reta é 0,498(2).

$L$	$T(c_{max})$ (th)	$T(c_{max})$ (sim)	$c(T_c)$ (th)	$c(T_c)$ (sim)
10	2,35	2,34450(6)	1,2600	1,2597(3)
20	2,310	2,30806(8)	1,6112	1,6121(5)
40	2,290	2,2889(2)	1,9582	1,9573(18)
80	2,2794	2,2793(2)	2,3031	2,302(3)
120	2,2760	2,2761(1)	2,5043	2,504(5)
160	2,2743	2,2743(2)	2,64695	2,655(7)

**Tabela 5.1:** Rede quadrada: comparação dos resultados teóricos e da simulação para a temperatura onde o calor específico exibe um máximo e para o calor específico em  $T_c$ . Note que as expressões teóricas para  $T(c_{max})$  e  $c(T_c)$  são sujeitas a correções de ordem  $1/L^2$  e  $1/L^4$ , respectivamente.

$$m(T, L) = \frac{1}{L^d Z(T, L)} \sum_E \Omega(E, L) e^{-\beta E} \langle |N_+ - N_-| \rangle(E, L) \quad (5.10)$$

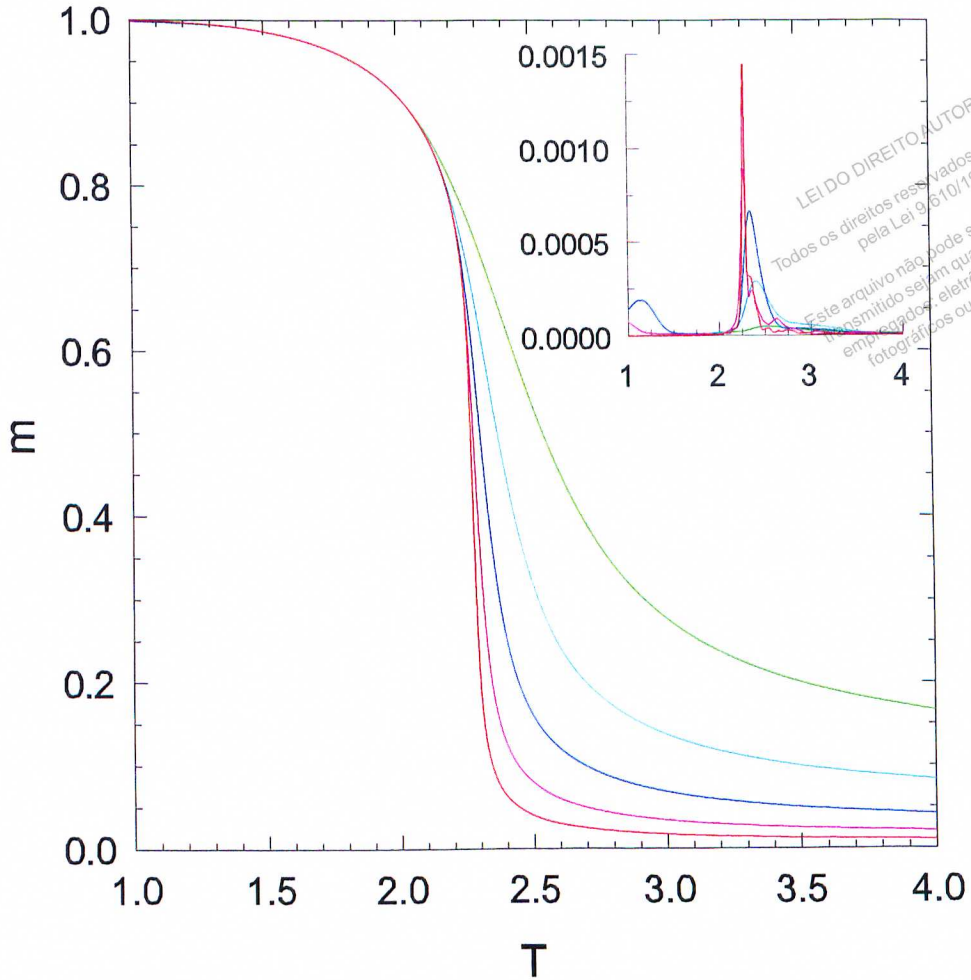
onde  $\beta \equiv 1/k_B T$ ,  $Z$  é a função partição e  $\langle |N_+ - N_-| \rangle(E, L)$  representa a média microcanônica da magnetização total ( $N_+$  é o número de sítios com spin  $\sigma = 1$ ). Os resultados para a magnetização são mostrados na Fig. 5.6. As incertezas, as quais não são visíveis na escala do gráfico principal, é detalhada na inserção. Como é de se esperar, elas são maiores nas proximidades do ponto crítico. Observamos ainda que, em todos os casos, a incerteza em  $m$  é menor que 0,4%. A relação de escala de tamanho finito  $m(T_c, L) \sim L^{-\beta/\nu}$  permite estimarmos a razão entre expoentes  $\beta/\nu$ . Usando os dados para todos os tamanhos os sistemas simulados encontramos  $\beta/\nu = 0,1237(5)$ , o qual é 1% menor que o valor exato de  $1/8$ .

A susceptibilidade  $\chi = \text{var}(M)/(L^d T)$  e sua incerteza estão desenhados na Fig. 5.7. A incerteza em  $\chi$  é de aproximadamente 1% na região crítica para  $L = 160$ ; para sistemas menores e longe da região crítica a incerteza é consideravelmente menor. Na tabela 5.2 listamos os resultados das simulações para a temperatura do máximo da susceptibilidade  $T(\chi_{max})$  e para a susceptibilidade em  $T_c$ . Extrapolando os valores de  $T(\chi_{max})$  encontramos  $T_c = 2,26926(10)$ . Uma análise dos dados da susceptibilidade usando a relação de escala  $\chi(T_c, L) \sim L^{\gamma/\nu}$  leva a  $\gamma/\nu = 1,754(2)$ , o qual é 0,2% maior que o valor exato de  $7/4$ . É interessante observar que, restringindo a análise a sistemas de tamanho  $20 \leq L \leq 120$ , obtemos uma estimativa sutilmente superior para as razões dos expoentes:  $\beta/\nu = 0,1240(8)$  e  $\gamma/\nu = 1,748(2)$ .

$L$	$T(\chi_{max})$	$\chi(T_c)$
10	2,4770(4)	3,5788(7)
20	2,3720(1)	12,185(9)
40	2,3208(2)	40,87(15)
80	2,2949(2)	137,9(5)
120	2,2864(1)	279,0(1,5)
160	2,28196(14)	466,3(3,6)

**Tabela 5.2:** Rede quadrada: resultados simulacionais para a temperatura do máximo da susceptibilidade e para a susceptibilidade em  $T_c$ .

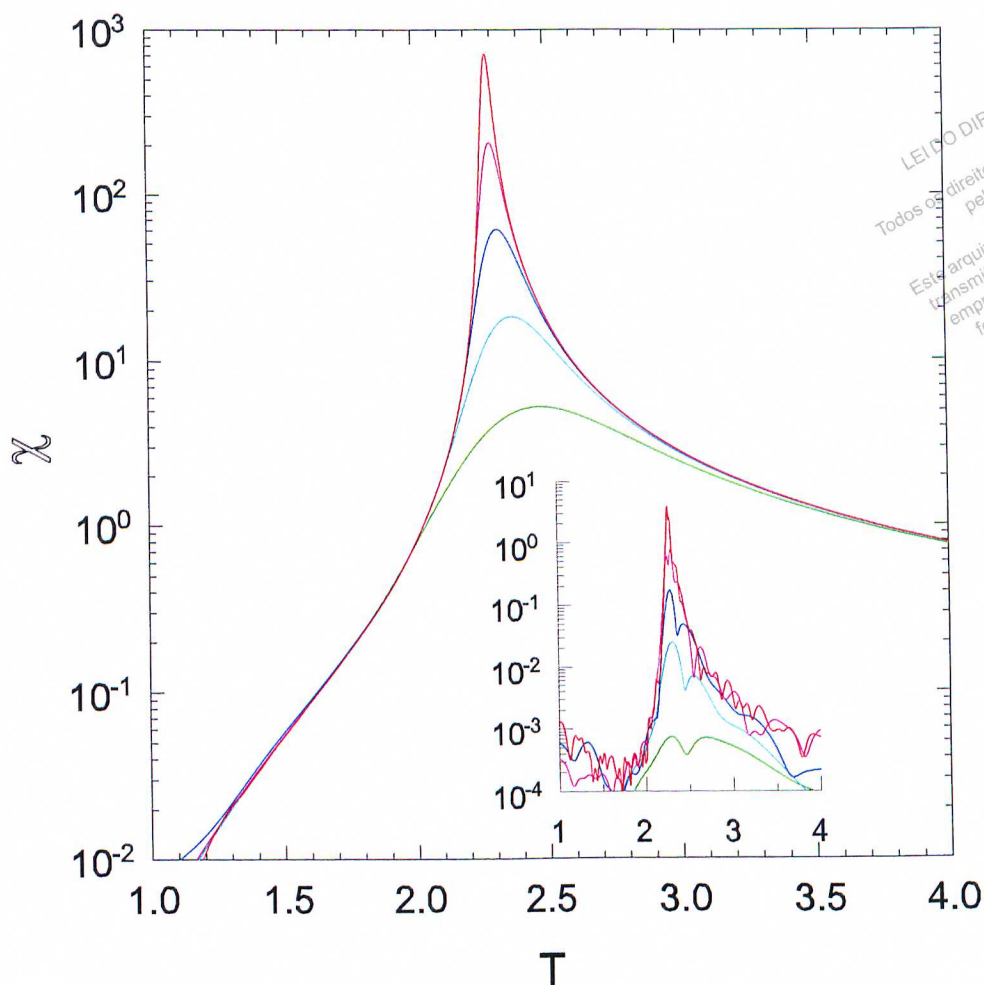




**Figura 5.6:** Magnetização por sítio em função da temperatura para tamanhos de sistema  $L = 10, 20, 40, 80, \text{ e } 160$ . Incertezas estão mostradas na inserção.

Uma estimativa independente da temperatura crítica pode ser obtida pelo quarto cumulante reduzido de Binder (Binder, 1981),  $Q_4 = 1 - \langle M^4 \rangle / (3\langle M^2 \rangle^2)$ <sup>3</sup>. Uma análise do cruzamento de cumulantes, como discutido no capítulo anterior, permite-nos obter as temperaturas e cumulantes listados na Tabela 5.3. A extrapolação linear dos resultados para os últimos quatro pares leva a  $T_c = 2,2694(2)$  e  $Q = 0,610(1)$ . A última estimativa está em bom acordo com o valor da literatura  $Q = 0,61071(2)$  (Kamieniarz; Blöte, 1993). Fazendo a média ponderada para a temperatura crítica usando as estimativas obtidas

<sup>3</sup>Note aqui que estamos definindo o cumulante reduzido de Binder como o usual, ou seja, com os fatores para que  $Q_4$  se restrinja ao intervalo  $[0, 1]$ . Nos capítulos anteriores usamos apenas as razões entre os momentos.



**Figura 5.7:** Susceptibilidade em função da temperatura para tamanhos de sistema  $L = 10, 20, 40, 80,$  e  $160$ . Incertezas são mostradas na inserção.

através da calor específico, susceptibilidade e cumulante de Binder encontramos  $T_c = 2,2695(1)$ , cerca de  $0,01\%$  acima de valor exato.

$L, L'$	$T_x$	$Q_x$
10, 20	2,2635(1)	0,61372(10)
20, 40	2,2692(2)	0,61115(20)
40, 80	2,2689(4)	0,6115(10)
80, 120	2,2696(4)	0,6096(17)
120, 160	2,2693(5)	0,611(2)

**Tabela 5.3:** Modelo de Ising, rede quadrada: resultados da simulação para a temperatura e valor do cumulante no cruzamento para os pares de tamanhos sucessivos.

### 5.1.2 Modelo de Ising na rede cúbica simples

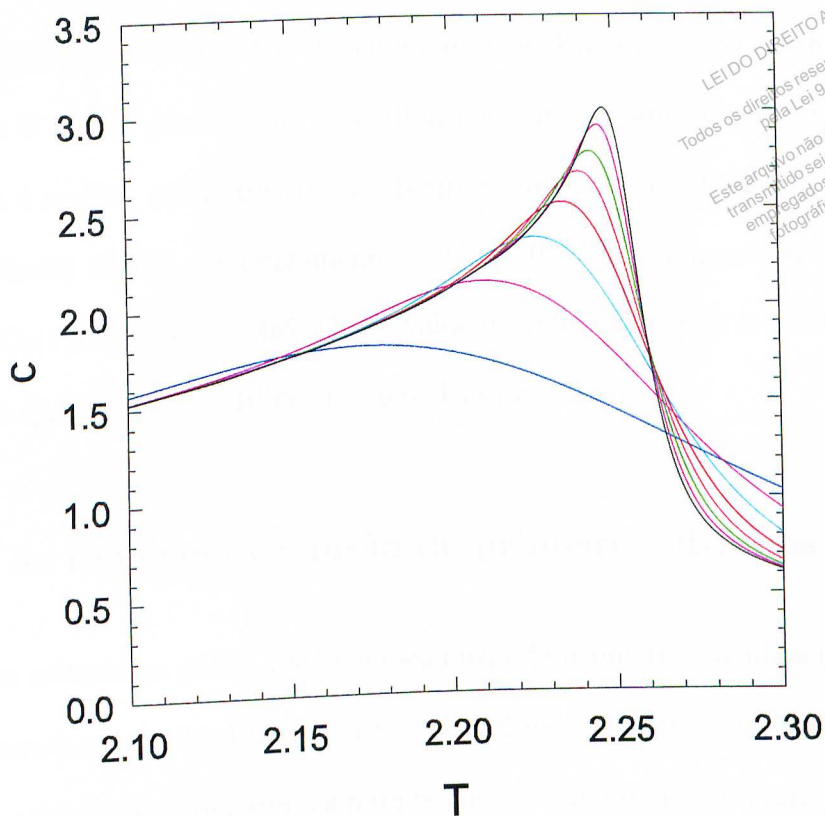
O procedimento de análise para o caso da rede cúbica simples é análogo ao caso da rede quadrada. Começamos simulando uma rede pequena ( $L = 4$ ) usando a simples aproximação inicial dada pela Eq. 5.6. Posteriormente estudamos os tamanhos  $L = 8, 12, 16, 20, 24, 28, 32$ , e  $36$ . O menor incremento em  $L$  (comparado ao caso bidimensional) é motivado pela convergência mais rápida e pela necessidade de estudar um número razoável de tamanhos diferentes para aplicação da análise de tamanho finito, que nesse caso inclui termos de correções a escala. O calor específico na região crítica é mostrado na Fig. 5.8; a incerteza nesses resultados está em torno de 0,5%.

Estimamos a temperatura crítica, como anteriormente, com base em  $T(c_{max})$  e  $T(\chi_{max})$ . Usando os valores de  $T(c_{max})$  para  $L = 12 - 36$  fizemos um ajuste quadrático em função de  $1/L^{1/\nu}$  levando a  $T_c = 4,5116(1)$ ; usando  $T(\chi_{max})$  obtemos  $4,5114(1)$ . (Estamos usando o valor da literatura,  $\nu = 0,6301(8)$  (Blöte; Luijten; Heringa, 1995).) Esses resultados estão em bom acordo com a melhor estimativa de  $T_c = 4,511528(6)$  (Talapov; Blöte, 1996). Para cada tamanho do sistema os valores de  $c_{max}$  e  $T(c_{max})$ , associados com o ponto crítico AF, são completamente consistentes com os correspondentes valores ferromagnéticos.

Dado o menor tamanho do sistema usado nos estudos do modelo de Ising em três dimensões, é interessante incluir correções de escala a análise de tamanho finito. Como exemplo, ajustamos os dados para a magnetização em  $T_c$  usando

$$\ln m(T_c, L) = -\frac{\beta}{\nu} \ln L + cL^{-y_i} \quad (5.11)$$

onde  $y_i$ , o expoente irrelevante dominante na escala, é tomado como sendo 0,8 (Blöte; Luijten; Heringa, 1995). Os parâmetros de melhor ajuste aos dados para os tamanhos



**Figura 5.8:** Modelo de Ising, rede cúbica simples: calor específico em função da temperatura para os tamanhos  $L = 8, 12, 16, 20, 24, 28, 32, \text{ e } 36$ .

$L = 8 - 36$  são  $c = -0,064$  e  $\beta/\nu = 0,521(12)$ . Para a susceptibilidade é esperado para a correção dominante ser  $\propto L^{-\gamma/\nu}$ , onde escrevemos

$$\ln \chi(T_c, L) = \frac{\gamma}{\nu} \ln L + c' L^{-\gamma/\nu}. \quad (5.12)$$

Neste caso encontramos  $\gamma/\nu = 1,987(4)$ . Uma análise similar para o calor específico (em sistemas de tamanho entre  $L = 12 - 36$ ) resulta em  $\alpha/\nu = 0,161(3)$ . Comparado com os valores da literatura (Talapov; Blöte, 1996),  $\beta/\nu = 0,519(2)$ ,  $\gamma/\nu = 1,963(3)$ , e  $\alpha/\nu = 0,174(4)$ , nossos resultados exibem erros de 0,4%, 1,2%, e 7,5%, respectivamente.

(Observamos, entretanto, que a determinação de  $\alpha/\nu$  através da simulação é uma questão certamente complexa.)

A extrapolação dos cruzamentos do cumulante de Binder leva a estimativa  $T_c = 4,5124(16)$ , que é menos precisa que as estimativas citadas anteriormente, mas ainda consistente com a melhor estimativa para a temperatura crítica. O valor assintótico do cumulante de Binder obtido dos cruzamentos é  $Q_4 = 0,47(1)$ , enquanto a extrapolação dos valores de  $Q_4(T_c, L)$  leva a  $0,467(1)$ . O valor de referência para o modelo de Ising tridimensional é  $Q_4 = 0,465(3)$  (Blöte; Luijten; Heringa, 1995).

### 5.1.3 Gás de rede com exclusão de primeiros vizinhos

Aplicamos nosso método ao gás de rede com exclusão de primeiros vizinhos (estudado no Cap. 3) em uma rede quadrada (Runnels, 1965; Guo; Blöte, 2002; Cunha-Netto; Dickman, 2011), usando a amostragem tomográfica para estimar o número de configurações distintas  $\Omega(\mathcal{N}, L)$  com  $\mathcal{N}$  partículas<sup>4</sup> satisfazendo a condição EPV sob condições periódicas na rede. Como mostrado anteriormente, a grande função partição do modelo pode ser escrita como

$$\Xi(z, L) = \sum_{\mathcal{N}=0}^{\mathcal{N}_{max}} z^{\mathcal{N}} \check{\Omega}(\mathcal{N}, L), \quad (5.13)$$

onde  $z = e^{\mu}$  é a fugacidade,  $\mu \equiv \hat{\mu}/k_B T$  ( $\hat{\mu}$  representa o potencial químico),  $\mathcal{N}_{max}$  é o número máximo possível de partículas na rede, igual a  $L^2/2$  para a rede quadrada. (Abaixo referiremos a  $\mu$  como potencial químico.)

Começamos nosso estudo com um sistema pequeno ( $L = 8$ ), usando uma distribuição inicial plana, ou seja,  $\ln \Omega_0 = 0$ . Seguindo o procedimento descrito na seção II deste capítulo, realizamos  $N = 5$  iterações com um número crescente de atualizações na rede<sup>5</sup>.

<sup>4</sup>Aqui estamos usando a letra  $\mathcal{N}$  para indicar o número de partículas na rede, reservando  $N$  para indicar o número de iterações do método.

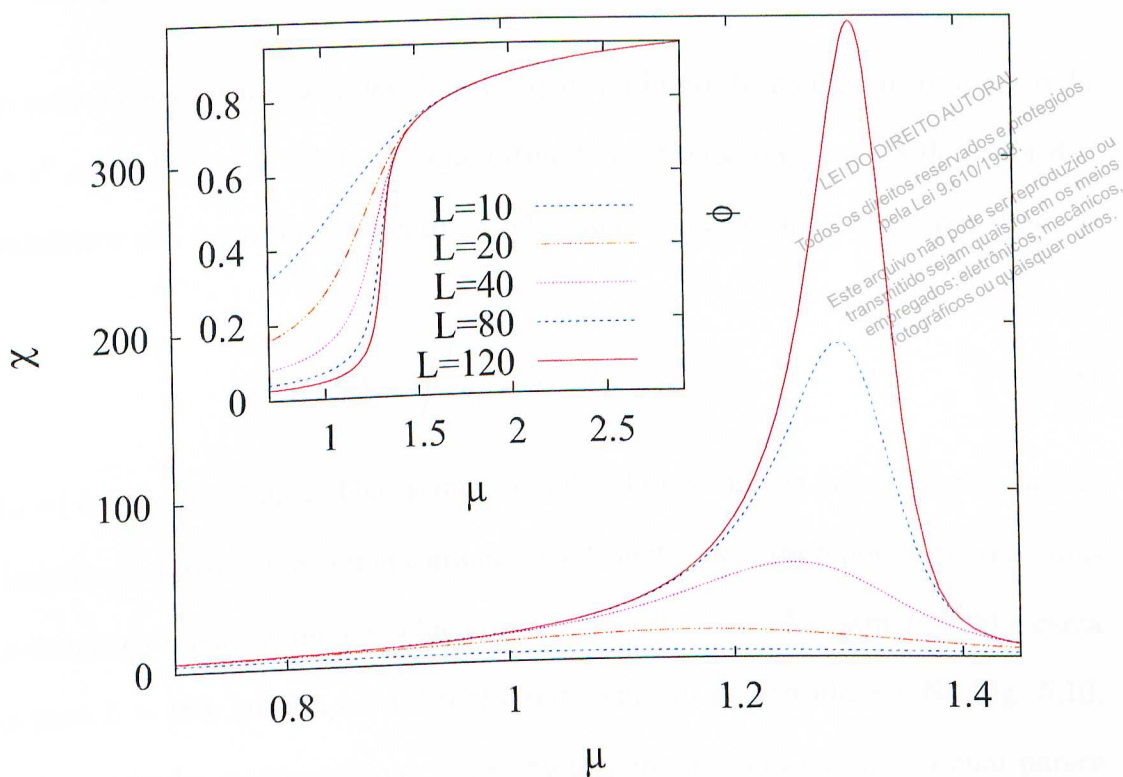
<sup>5</sup>Usamos  $N_U = 2 \times n \times 10^6$  para a  $n$ -ésima iteração.

Utilizamos dez configurações iniciais em cada iteração: cinco correspondendo a uma rede vazia e cinco com uma subrede totalmente ocupada (preenchimento máximo da rede). Aqui cada tentativa de movimento é uma inserção ou remoção de uma partícula; os sítios são escolhidos aleatoriamente. Para sistemas com  $L' > 8$ , onde  $L'$  representa o tamanho subsequente a ser simulado, construímos a distribuição inicial para  $\Omega_0(\mathcal{N}, L')$  usando um ajuste polinomial de décimo grau para  $s(\rho, L') = [\ln \Omega(\mathcal{N}, L')]/L'^2$  onde  $L$  é o tamanho anterior estudado e  $\rho = \mathcal{N}/L^2$ . Estudamos seis tamanhos diferentes no intervalo  $8 \leq L \leq 120$ .

A Fig. 5.9 mostra a susceptibilidade em função do potencial químico para tamanhos diferentes do sistema. A inserção mostra um gráfico similar para o parâmetro de ordem. Estimativas para o potencial químico crítico  $\mu_c$  são obtidas através de uma análise de FSS, como feito no Cap. 3. Extrapolações dos dados levam a  $\mu_{c,\chi} = 1,3359(3)$  e  $\mu_{c,\kappa} = 1,344(2)$  usando a susceptibilidade e compressibilidade, respectivamente. O valor anterior mais preciso é cerca de 0,24% maior que o valor da literatura. Uma análise de FSS do máximo da susceptibilidade leva a  $\gamma/\nu = 1,750(2)$ , consistente com o valor exato para o modelo de Ising bidimensional.

Usando o valor mais preciso para o potencial químico crítico  $\mu_c = 1,33401510027774(1)$ , obtido por (Guo; Blöte, 2002), calculamos  $\rho_c(L)$ ,  $\phi_c(L)$  e  $Q_c(L)$ , onde  $Q = \langle \phi^2 \rangle^2 / \langle \phi^4 \rangle$ <sup>6</sup> é relacionado ao cumulante de Binder. Uma extrapolação linear dessas quantidades em função de  $1/L$  resulta em  $\rho_c = 0,36773(1)$ ,  $\beta/\nu = 0,1247(3)$  e  $Q_c = 0,8565(5)$ . Estes resultados estão em excelente acordo com os valores da literatura (Kamieniarz; Blöte, 1993; Guo; Blöte, 2002). (Usando nossa estimativa menos precisa para  $\mu_c = 1,3359(3)$  obtemos  $\beta/\nu = 0,122(2)$  e  $\rho_c = 0,36815(3)$ .) Na Tab. 5.4 resumimos nossos principais resultados para o gás de rede e comparamos com os valores obtidos usando a amostragem usando janelas ajustáveis e com outros valores de referência da literatura.

<sup>6</sup>Observe que a definição usada aqui para  $Q$  é diferente da usada na análise do modelo de Ising.



**Figura 5.9:** Gás de rede EPV: susceptibilidade em função do potencial químico. Inserção: parâmetro de ordem em função do potencial químico. Os tamanhos do sistema estão indicados na figura. As barras de ordem em função do potencial químico. Os tamanhos do sistema estão indicados na figura. As barras de ordem são menores que os símbolos.

	ES	AWAWL	Valores da literatura
$\mu_{c,\chi}$	1,3359(3)	1,330(1)	1,33401510027774(1) <sup>3</sup>
$\mu_{c,\kappa}$	1,344(2)	1,337(2)	
$Q_c$	0,8565(5) <sup>6</sup>	0,852(6)	0,856 <sup>3</sup> ; 0,855(1) <sup>4</sup> ; 0,85625(5) <sup>5</sup>
$\rho_c$	0,36773(1) <sup>6</sup>	0,36800(5) <sup>6</sup>	0,3677429990410(3) <sup>2</sup>
$\gamma/\nu$	1,750(2)	1,762(8)	7/4 (exato)
$\beta/\nu$	0,1247(3) <sup>6</sup>	0,123(2) <sup>6</sup>	1/8 (exato)

**Tabela 5.4:** Valores críticos para o gás de rede com exclusão de primeiros vizinhos obtido através da amostragem tomográfica e usando a amostragem de WL com janelas ajustáveis. Os resultados da Ref. (Nicolaidis; Bruce, 1988) foram obtidos através de simulações de Monte Carlo e nas Refs. (Guo; Blöte, 2002; Burkhardt; Derrida, 1985; Kamieniarz; Blöte, 1993) foi usando uma análise de matriz transferência.

<sup>1</sup>(Cunha-Netto; Dickman, 2011)

<sup>2</sup>(Guo; Blöte, 2002)

<sup>3</sup>(Burkhardt; Derrida, 1985)

<sup>4</sup>(Nicolaidis; Bruce, 1988)

<sup>5</sup>(Kamieniarz; Blöte, 1993)

<sup>6</sup>Valores obtidos usando  $\mu_c$  de (Guo; Blöte, 2002).

<sup>7</sup>Usando nosso melhor valor para  $\mu_c$  obtemos  $\beta/\nu = 0,122(2)$ ,  $\rho_c = 0,36815(3)$  enquanto que com o método das janelas ajustáveis obtivemos  $\beta/\nu = 0,130(9)$  e  $\rho_c = 0,3675(5)$ .

### 5.1.4 Singularidade crítica na densidade de entropia

O ponto crítico corresponde ao valor de  $\rho$  tal que, no limite termodinâmico, a segunda derivada  $s'' \equiv d^2s/d\rho^2 = 0$ . Uma vez que estimativas diretas da segunda derivada dos dados numéricos não é um procedimento viável, usamos ao invés um filtro Gaussiano,

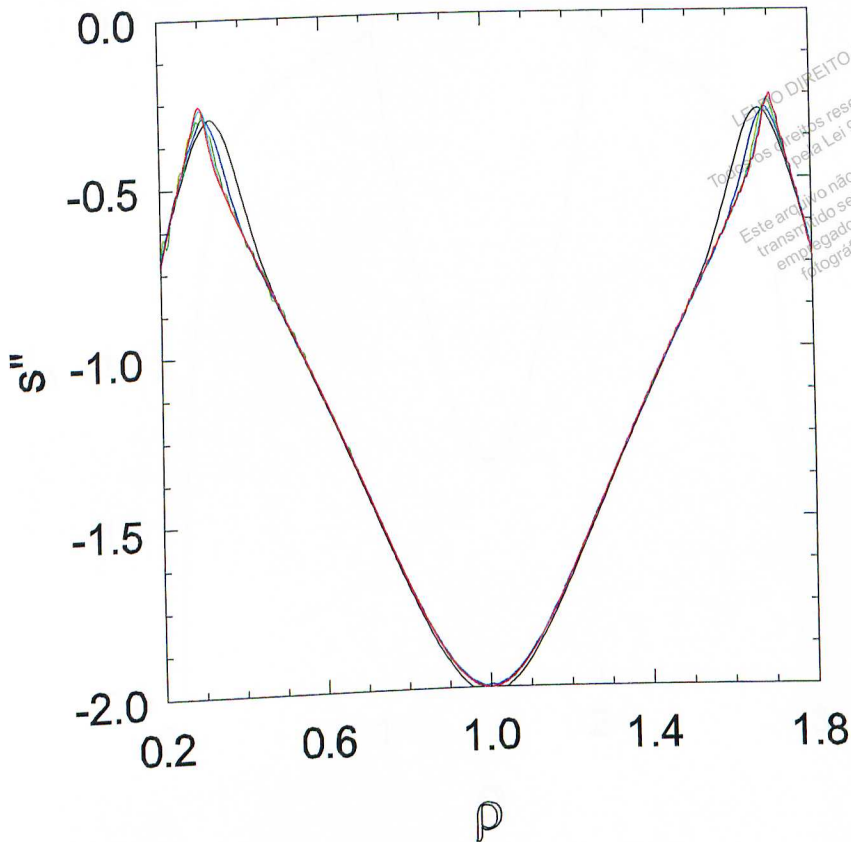
$$s''(\rho; \sigma) = \int_0^2 d\rho' s(\rho') g''(\rho - \rho'; \sigma) \quad (5.14)$$

onde  $g(\rho; \sigma)$  é uma distribuição Gaussiana normalizada com média zero e desvio padrão  $\sigma$ . (A largura do filtro  $\sigma$  é escolhida grande o suficiente para sobrepor flutuações mas pequeno o suficiente para manter resolução; este intervalo é de  $5\Delta\rho$  para  $L = 20$  e cerca de  $50\Delta\rho$  para  $L = 160$ , onde  $\Delta\rho = 1/(2L^2)$  é o incremento de densidade.) Na Fig. 5.10, para a rede quadrada, mostramos que  $|s''|$  exibe um pronunciado mínimo, o qual parece tender a zero com o aumento de  $L$ . O mínimo próximo a  $\rho = 0,3$  corresponde ao ponto crítico antiferromagnético. As figuras 5.11 e 5.12 são gráficos similares para o modelo de Ising em uma rede cúbica simples e para o gás de rede, respectivamente.

### 5.1.5 Restringir a amostragem

Nosso método, como observado, amostra todo o intervalo de energia. Enquanto isto é vantajoso em algumas circunstâncias, poderíamos questionar se a amostragem pode se restringir ou ao menos concentrar em uma região de interesse particular, como por exemplo naquelas energias que ocorrem com uma probabilidade significativa na região crítica. Na amostragem de Wang-Landau, impor limites fixos no intervalo de amostragem distorce as estimativas de  $\Omega(E)$ , como mostrado em (Cunha-Netto et al., 2008; Cunha-Netto; Dickman, 2011). Por essa razão consideramos uma escolha mais “suave” na amostragem, na qual a probabilidade de aceitação (Eq (5.15)) é assim modificada:





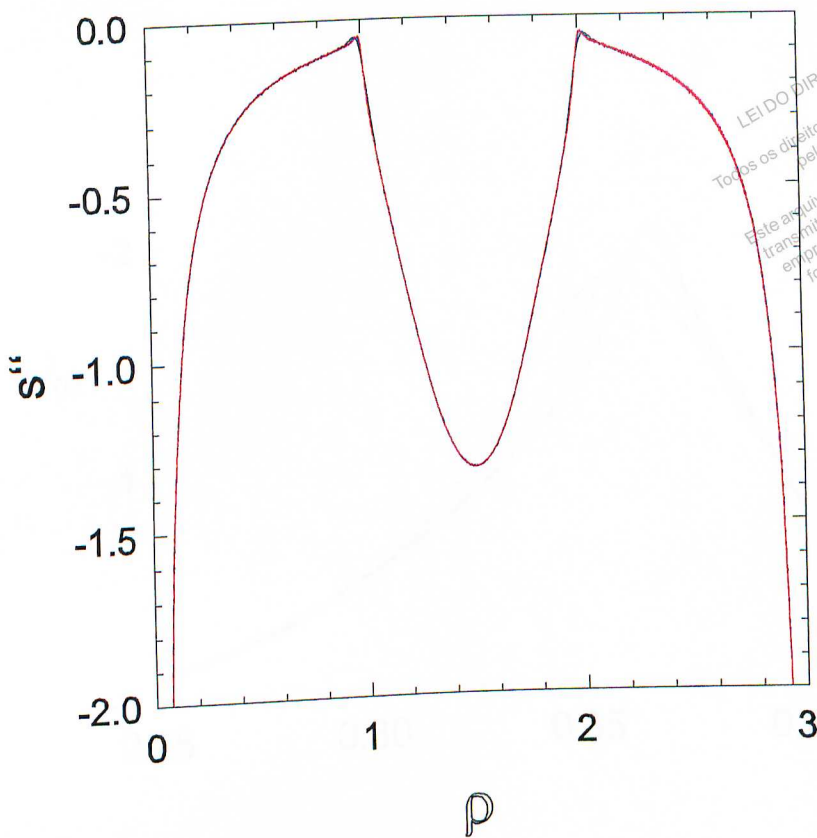
**Figura 5.10:** Modelo de Ising, rede quadrada:  $s''(\rho)$  em função de  $\rho$  para os tamanhos  $L = 20, 40, 80, 120$ , e 160. O mínimo em  $|s''|$  cresce e afina com o aumento do tamanho do sistema.

$$p_a(C') = \min \left[ \frac{\Omega(E)w(E)}{\Omega(E')w(E')}, 1 \right]. \quad (5.15)$$

Agora a probabilidade de visitar um nível de energia  $E$  é  $\propto 1/w(E)$  e a fórmula para atualizar  $\Omega(E)$  torna-se

$$\Omega_{j+1}(E) = \frac{H_j(E)}{\bar{H}_j} w(E) \Omega_j(E). \quad (5.16)$$

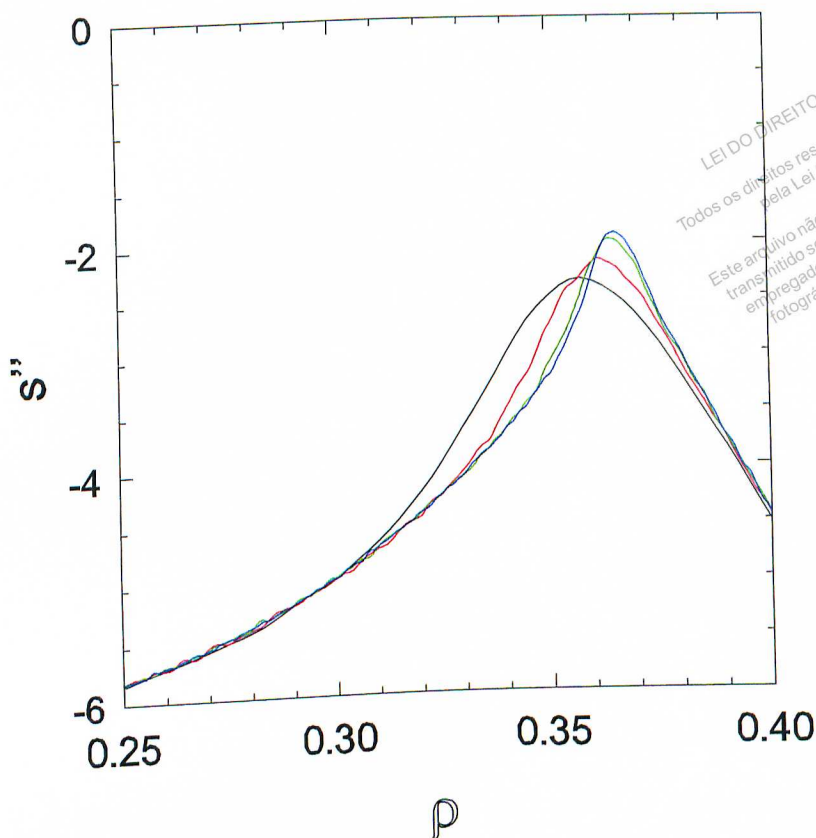
Em princípio, podemos penalizar visitas a regiões “desinteressantes” usando valores grandes de  $w$ , os quais são compensados na fórmula de atualização modificada. Uma vez que



**Figura 5.11:** Modelo de Ising, rede cúbica simples:  $s''(\rho)$  vem função de  $\rho = n/3L^3$  para os tamanhos  $L = 16, 24, \text{ e } 32$ . As três curvas são indistinguíveis nessa escala.

boa parte da amostragem ocorre na região de interesse, esperamos obter melhor estatística naquela região, para o mesmo número total de atualizações na rede.

Escolhemos  $w = 1$  na região de interesse ( $n \geq n_{min}$ ). Em uma série de estudos,  $w = \exp[\alpha(n_{min} - n)]$  para  $n < n_{min}$ , enquanto que na segunda série escolhemos  $w = \exp[\alpha(n_{min} - n)^2]$ . Aqui  $\alpha$  é um parâmetro que controla a severidade do corte na amostragem. No caso linear, usando  $n_{min} \approx L^2$  (ou seja, metade do número máximo de elos), e  $\alpha$  no intervalo entre 0, 1 - 0, 5, obtemos distribuições  $\Omega(n)$  (para  $L = 40$  e 80) que diferem significativamente daquelas obtidas com uma amostragem uniforme, mesmo na região



**Figura 5.12:** Gás de rede EPV, rede quadrada:  $s''(\rho)$  em função de  $\rho = N/L^2$  para os tamanhos  $L = 20, 40, 80,$  e  $120$ .

com  $w = 1$ . Na segunda série de estudos escolhemos  $\alpha$  tal que  $w(n = 0) = e^{-5} \simeq 0,007$ ;  $w$  cresce mais lentamente nas proximidades de  $n_{min}$ . Nesse caso o número estimado de configurações não exibe distorções aparentes, mas observamos que a susceptibilidade e calor específico, avaliados próximos a  $T_c$ , são significativamente maiores que os valores obtidos com a amostragem uniforme. As diferenças relativas crescem com o tamanho do sistema. Isso ocorre devido ao fato de que em  $T_c$ , a probabilidade  $e^{-\beta E} \Omega(E)$  associada com o número de elos  $n \leq n_{min}$  é  $\leq 10^{-30}$ , tal que a contribuição as médias térmicas devido a esse intervalo  $n$  de valores é completamente desprezível. Concluimos assim que restringir a amostragem dessa maneira não melhora a qualidade dos resultados, e poderia

levar a erros sistemáticos na estimativa dos expoentes críticos.

LEI DO DIREITO AUTORAL  
Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998.  
Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
transmitido sejam quais forem os meios  
empregados: eletrônicos, mecânicos,  
fotográficos ou quaisquer outros.

# Capítulo 6

## Conclusão

LEI DO DIREITO AUTORAL  
Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998.  
Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
transmitido sejam quais forem os meios  
empregados: eletrônicos, mecânicos,  
fotográficos ou quaisquer outros.

Realizamos simulações de Wang-Landau usando o algoritmo das janelas ajustáveis em um gás de rede com exclusão de primeiros vizinhos em uma rede quadrada e rede cúbica simples. Na rede quadrada, comparações com uma enumeração exata para uma rede pequena ( $L = 8$ ) mostra excelente concordância. Usando uma análise de escala de tamanho finito dos dados para sistemas com até  $256^2$  sítios na rede quadrada e  $48^3$  sítios em uma rede cúbica, estimamos as razões de expoentes críticos  $\gamma/\nu$  e  $\beta/\nu$ ; e os valores críticos do potencial químico, densidade e quarto cumulante. Em geral, razoável acordo é obtido com os valores da literatura. A precisão de nossos resultados é consideravelmente pequena quando comparamos com os resultados pela técnica de matriz transferência ou simulações de alta precisão de Monte Carlo. Testamos também a amostragem de WL em uma mistura binária, onde demonstramos a separação de fases induzida puramente por efeitos entrópicos em uma rede bidimensional com partículas do tipo caroço duro. Este é provavelmente um dos modelos mais simples que exhibe transições de primeira e segunda ordem, e conseqüentemente um ponto tricrítico. Localizamos o ponto tricrítico

com precisão razoável e comparamos com resultados de Poland usando os dados obtidos para o diagrama de fases no plano das densidades. Nossos resultados concordam para a densidade das partículas grandes, sendo ligeiramente superiores para a densidade das partículas pequenas. Dado a existência dessa transição, a determinação dos expoentes tricríticos é naturalmente uma questão de grande interesse. Deixamos esta análise, bem como o estudo do diagrama de fases para outras redes, para trabalhos futuros. Para o caso em questão, estudamos as propriedades críticas do sistema usando redes até  $L = 48$ . É importante ressaltar que nesse modelo é feita uma simulação bidimensional para obter  $\Omega(N, n)$ , inviabilizando assim o estudo de sistemas maiores usando WL. Em vista dos problemas observados nesse trabalho, delineamos um método de amostragem entrópica que cobre o intervalo completo de energias (ou macroestados de interesse) e leva a resultados de boa precisão para um modesto gasto de tempo computacional. Para o caso do modelo de Ising bidimensional obtivemos erro de  $\sim 0,01\%$  para a temperatura crítica, expoentes críticos com erro de  $0,5\%$  ou melhor quando comparados com os valores exatos. Obtivemos excelentes resultados tanto para o modelo de Ising em uma rede cúbica simples como para o gás de rede com exclusão de vizinhos. O método é relativamente simples e não envolve amostragem em janelas com os problemas consequentes de “costurar” a distribuição, surgindo distorções devido as bordas. As características-chaves dessa amostragem são: construir a distribuição partindo de diferentes configurações iniciais antes de atualizar a estimativa de  $\Omega$  e usar o resultado para um dado tamanho do sistema para gerar uma estimativa inicial para o novo tamanho a ser simulado. O método permite calcular médias termodinâmicas com boa precisão, bem como estimativas precisas para as propriedades críticas. Uma vez definida uma nova metodologia que permite a obtenção do número de configurações com maior precisão, é imediato o interesse em aplicar a nova técnica no modelo binário apresentado nesta tese, bem como em modelos de gás de rede com diferentes simetrias. O estudo em modelos de spins com diferentes iterações e modelos de polímeros

também será considerado em futuros trabalhos.

LEIDO DIREITO AUTORAL

Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998.

Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
transmitido sejam quais forem os meios  
empregados: eletrônicos, mecânicos,  
fotográficos ou quaisquer outros.

# Referências Bibliográficas

---

LEI DO DIREITO AUTORAL  
Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998.  
Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
transmitido sejam quais forem os meios  
empregados: eletrônicos, mecânicos,  
fotográficos ou quaisquer outros.

- Baker, G. A. *Essentials of Pade Approximants*. London: Academic Press Inc, 1975.
- Barber, M. N. *Phase Transitions and Critical Phenomena*. New York: Academic Press, 1983.
- Baxter, R. J. *J. Phys. A*, v. 13, p. L61, 1980.
- Baxter, R. J. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. London: Academic Press, 1982.
- Belardinelli, R. E.; Pereyra, S. V. D. *Phys. Rev. E*, v. 75, p. 046701, 2007.
- Belardinelli, R. E.; Pereyra, S. V. D. *J. Chem. Phys.*, v. 127, p. 184105, 2007.
- Biben, T.; Hansen, J. P. *Phys. Rev. Lett.*, v. 66, p. 2215, 1991.
- Binder, K. *Z. Phys. B*, v. 43, p. 119, 1981.
- Binder, K.; Heermann, D. W. *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics an introduction, 2nd ed.* Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 1992.
- Blöte, H. W. J.; Luijten, E.; Heringa, J. R. *J. Phys. A*, v. 28, p. 6289, 1995.
- Buhot, A.; Krauth, W. *Phys. Rev. Lett.*, v. 80, p. 3787, 1998.
- Burkhardt, T. W.; Derrida, B. *Phys. Rev. B*, v. 32, p. 7273, 1985.



Burley, D. M. *Proc. Phys. Soc.*, v. 75, p. 262, 1960.

Callen, H. B. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. [S.l.]: John Wiley and Sons, 1985.

Calvo, F.; Parneix, P. *J. Chem. Phys.*, v. 119, p. 256, 2003.

Caparica, A. A.; Cunha-Netto, A. G. *Phys. Rev. E*, v. 85, p. 046702, 2012.

Cunha-Netto, A. G. *Algoritmo das janelas adaptáveis no método de Wang-Landau*.  
Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Goiás, 2008.

Cunha-Netto, A. G. et al. *Phys. Rev. E*, v. 78, p. 055701(R), 2008.

Cunha-Netto, A. G.; Dickman, R. *Comput. Phys. Comm.*, v. 182, p. 719, 2011.

Cunha-Netto, A. G.; Dickman, R.; Caparica, A. A. *Comput. Phys. Comm.*, v. 180,  
p. 583, 2009.

Cunha-Netto, A. G. et al. *Braz. J. Phys.*, v. 36, p. 619, 2006.

de Menezes, M. A.; Lima, A. R. *Phys. A*, v. 323, p. 428, 2003.

Dickman, R.; Cunha-Netto, A. G. *Phys. Rev. E*, v. 84, p. 026701, 2011.

Dijkstra, M.; D. Frenkel; Hansen, J. P. *J. Chem. Phys.*, v. 101, p. 3179, 1994.

Dijkstra, M.; Frenkel, D. *Phys. Rev. Lett.*, v. 72, p. 298, 1994.

Dijkstra, M.; Roij, R. van. *Phys. Rev. E*, v. 56, p. 5594, 1997.

Ertel, W.; Froböse, K.; Jäckle, J. *J. Chem. Phys.*, v. 88, p. 5027, 1988.

Faller, R.; de Pablo, J. J. *J. Chem. Phys.*, v. 119, p. 4405, 2003.

Ferdinand, A. E.; Fisher, M. E. *Phys. Rev.*, v. 185, p. 832, 1969.

LEI DO DIREITO AUTORAL  
Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998.  
Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
distribuído sem a autorização dos seus  
titulares, seja por meios eletrônicos, mecânicos,  
fotográficos ou quaisquer outros.

Fernandes, H. C. M.; Arenzon, J. J.; Levin, Y. *J. Chem. Phys.*, v. 126, p. 114508, 2007.

Fisher, M. E. *Proceedings of the Enrico Fermi International School of Physics. Varenna, Italy*: Academic Press, 1971.

Fisher, M. E.; Barber, M. N. *Phys. Rev. Lett.*, v. 28, p. 1516, 1972.

Frenkel, D.; Louis, A. A. *Phys. Rev. Lett.*, v. 68, p. 3363, 1992.

Fytas, N. G.; Malakis, A.; Georgiou, I. *J. Stat. Mech.: Theory Exp.*, p. L07001, 2008.

García, J.; Gonzalo, J. A. *Physica A*, v. 326, p. 464, 2003.

Gaunt, D. S. *J. Chem. Phys.*, v. 46, p. 3237, 1967.

Gaunt, D. S.; Fisher, M. E. *J. Chem. Phys.*, v. 43, p. 2840, 1965.

Guo, W.; Blöte, H. W. J. *Phys. Rev. E*, v. 66, p. 046140, 2002.

Heringa, J. R.; Blöte, H. W. J. *Physica A*, v. 232, p. 369, 1996.

Heringa, J. R.; Blöte, H. W. J.; Luijten, E. *J. Phys. A*, v. 33, p. 2929, 2000.

Huller, A.; Pleimling, M. *Int. J. Mod. Phys. C*, v. 13, p. 947, 2002.

Jain, T. S.; de Pablo, J. J. *J. Chem. Phys.*, v. 118, p. 4226, 2003.

Kamieniarz, G.; Blöte, H. W. J. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 26, p. 201, 1993.

Kerley, G. I. *J. Chem. Phys.*, v. 91, p. 1204, 1989.

Kim, E. B. et al. *J. Chem. Phys.*, v. 117, p. 7781, 2002.

Kuijper, A. et al. *Europhys. Lett.*, v. 13, p. 679, 1990.

Landau, D. P.; Binder, K. *A Guide to Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*.

Cambridge: Cambridge University Press, 2005.

Lebowitz, J. L.; Rowlinson, J. S. *J. Chem. Phys.*, v. 41, p. 133, 1964.

Lee, J. *Phys. Rev. Lett.*, v. 71, p. 211, 1993.

Lee, T. D.; Yang, C. N. *Phys. Rev.*, v. 87, p. 410, 1952.

Leeb, C.-Y.; Han, S. K. *Lect. Notes Comp Sci*, v. 1285, p. 54, 1997.

Lekkerkerker, H. N. W.; Stroobants, A. *Physica A*, v. 195, p. 387, 1993.

Malakis, A. et al. *Phys. Rev. E*, v. 79, p. 011125, 2009.

Malakis, A. et al. *Phys. Rev. E*, v. 81, p. 041113, 2010.

Malakis, A. et al. *Phys. Rev. E*, v. 72, p. 066120, 2005.

Malakis, A.; Peratzakis, A.; Fytas, N. G. *Phys. Rev. E*, v. 70, p. 066128, 2004.

Metropolis, N. et al. *J. Chem. Phys.*, v. 21, p. 1087, 1953.

Mustonen, V.; Rajesh, R. *J. Phys. A*, v. 36, p. 6651, 2003.

Newman, M. E. J.; Barkema, G. T. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford: Oxford University Press, 1999.

Nicolaides, D.; Bruce, A. D. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 21, p. 223, 1988.

Okabe, Y.; Tomita, Y.; Yamaguchi, C. *Comput. Phys. Commun.*, v. 146, p. 63, 2002.

Oliveira, P. M. C. *Braz. J. Phys.*, v. 30, p. 195, 2000.

Oliveira, P. M. C.; Penna, T. J. P.; Herrmann, H. J. *Braz. J. Phys.*, v. 26, p. 677, 1996.

Padé, H. *Ann. Sci. École Norm. Sup. Suppl.*, v. 9, p. 1, 1892.

Pelissetto, A.; Vicari, E. *Phys. Rep.*, v. 368, p. 549, 2002.

LEI DO DIREITO AUTORAL  
Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998.  
Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
transmitido sejam quais forem os meios  
empregados: eletrônicos, mecânicos,  
fotográficos ou quaisquer outros.

Plichske, M.; Bergersen, B. *Equilibrium Statistical Physics, 3rd Ed.* Cambridge: Cambridge University Press, 2008.

Poland, D. *J. Chem. Phys.*, v. 80, p. 2767, 1984.

Rathore, N.; Knotts, T. A.; de Pablo, J. J. *J. Chem. Phys.*, v. 118, p. 4285, 2003.

Runnels, L. K.; Combs, L. L.; Salvant, J. P. *J. Chem. Phys.*, v. 47, p. 4015, 1967.

Runnels, R. K. *Phys. Rev. Lett.*, v. 15, p. 581, 1965.

Salas, J. *J. Phys. A*, v. 34, p. 1311, 2001.

Schulz, B. J.; Binder, K.; Müller, M. *Int. J. Mod. Phys. C*, v. 13, p. 477, 2002.

Schulz, B. J. et al. *Phys. Rev. E*, v. 67, p. 067102, 2003.

Shell, M. S.; Debenedetti, P. G.; Panagiotopoulos, A. Z. *Phys. Rev. E*, v. 66, p. 056703, 2002.

Stilck, J. *Comunicação privada*, 2011.

Talapov, A. L.; Blöte, H. W. J. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 29, p. 5727, 1996.

Troyer, M.; Wessel, S.; Alet, F. *Phys. Rev. Lett.*, v. 90, p. 120201, 2003.

Tsai, S. H.; Salinas, S. R. *Braz. J. Phys.*, v. 28, p. 58, 1998.

Tsai, S. H.; Wang, F.; Landau, D. P. *Braz. J. Phys.*, v. 36, p. 635, 2006.

Vlugt, T. J. H. *Mol. Phys.*, v. 100, p. 2763, 2002.

Wang, F.; Landau, D. P. *Phys. Rev. Lett.*, v. 86, p. 2050, 2001.

Wang, F.; Landau, D. P. *Phys. Rev. E*, v. 64, p. 056101, 2001.

Wang, F.; Landau, D. P. *Braz. J. Phys.*, v. 34, p. 354, 2004.

Wang, J.-S. *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, v. 138, p. 454, 2000.

Wang, J.-S.; Swendsen, R. H. *J. Stat. Phys.*, v. 106, p. 245, 2002.

Wilding, N. B. *J. Phys. Cond. Mat.*, v. 8, p. 9637, 1996.

Yamaguchi, C. *Proposal and application of Monte Carlo methods to calculate the density of states for classical spin systems*. Tese (Doutorado) — Tokyo Metropolitan University, 2003.

Yamaguchi, C.; Kawashima, N. *Phys. Rev. E*, v. 65, p. 056710, 2002.

Yamaguchi, C.; Okabe, Y. *J. Phys. A*, v. 34, p. 8781, 2001.

Zhang, W.; Deng, Y. *Phys. Rev. E*, v. 78, p. 031103, 2008.

Zhou, C.; Bhatt, R. N. *Phys. Rev. E*, v. 72, p. 025701(R), 2005.

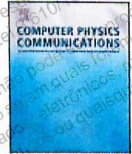
Zhou, C. et al. *Phys. Rev. Lett.*, v. 96, p. 120201, 2006.

Zhou, C.; Su, J. *Phys. Rev. E*, v. 78, p. 046705, e referências ali presentes, 2008.

LEI DO DIREITO AUTORAL  
Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998.  
Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
transmitido sem quais forem os meios  
fotográficos, eletrônicos, mecânicos,  
ou quaisquer outros.

# Apêndices (Artigos publicados)

**LEI DO DIREITO AUTORAL**  
Todos os direitos reservados e protegidos  
pela Lei 9.610/1998.  
Este arquivo não pode ser reproduzido ou  
transmitido sejam quais forem os meios  
empregados: eletrônicos, mecânicos,  
fotográficos ou quaisquer outros.



# Critical behavior of hard-core lattice gases: Wang–Landau sampling with adaptive windows

A.G. Cunha-Netto, R. Dickman\*

Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas, and National Institute of Science and Technology for Complex Systems, Universidade Federal de Minas Gerais, C.P. 702, 30123-970 Belo Horizonte, Minas Gerais, Brazil

## ARTICLE INFO

### Article history:

Received 20 July 2010  
Received in revised form 25 November 2010  
Accepted 2 December 2010  
Available online 7 December 2010

### Keywords:

Monte Carlo simulation  
Lattice gas  
Wang–Landau sampling

## ABSTRACT

Critical properties of lattice gases with nearest-neighbor exclusion are investigated via adaptive-window Wang–Landau sampling (WLS) on the square and simple cubic lattices, for which the model is known to exhibit an Ising-like phase transition. We study the particle density, order parameter, compressibility, Binder cumulant and susceptibility, in efforts to test WLS, which has been used quite widely in recent years, in the context of lattice gases. Of considerable interest is whether it is possible to estimate critical exponents reliably using WLS with adaptive windows. We find that the method yields results in fair agreement with exact values (in two dimensions) and numerical estimates (in three dimensions).  
© 2010 Elsevier B.V. All rights reserved.

## 1. Introduction

Recently efficient methods for estimating the number of configurations of classical statistical models have been developed. If the number  $\tilde{\Omega}(E)$  of configurations with energy  $E$  is determined to sufficient accuracy, many thermodynamic quantities can be obtained with little further effort, for any desired temperature. Critical exponents, the transition temperature (or chemical potential) and other quantities, such as cumulants, may then be estimated via finite size scaling (FSS) analysis [1–4]. Wang–Landau sampling (WLS) promises to be a simple and reliable approach for estimating  $\tilde{\Omega}(E)$  using Monte Carlo simulations [5,6]. Since WLS is applied quite extensively, it is of interest to examine its performance on a broad range of systems. In this paper we apply the Wang–Landau algorithm with adaptive windows [7] to the lattice gas with nearest-neighbor exclusion.

Lattice gases have been used extensively as models of simple fluids, and along with the Ising model have received much attention in equilibrium statistical physics as a prototype for phase transition. A particularly simple case is the lattice gas with nearest-neighbor exclusion (NNE), corresponding to an interparticle potential that is infinite for distances  $\leq 1$  (in units of the lattice constant) and zero otherwise. In the absence of an energy scale, temperature is not a relevant parameter, and the system is termed athermal. It is known that on bipartite lattices, the lattice gas with NNE suffers a continuous phase transition between a disordered

phase and an ordered one at a critical value of the density or of the reduced chemical potential  $\mu \equiv \hat{\mu}/k_B T$  [9–12]. ( $\hat{\mu}$  denotes the chemical potential.) In the ordered phase the occupation fractions of the two sublattices are unequal. The grand partition function is

$$\Xi(z, L) = \sum_{N=0}^{N_{\max}} z^N \tilde{\Omega}(N, L), \quad (1)$$

where  $z = e^{\mu}$  is the fugacity,  $N_{\max}$  is the maximum possible number of particles, and  $\tilde{\Omega}(N, L)$  the number of distinct configurations with  $N$  particles satisfying the NNE condition, under periodic boundaries. (On a hypercubic lattice of  $L^d$  sites in  $d$  dimensions,  $N_{\max} = L^d/2$  for  $L$  even.) On bipartite lattices, the order parameter is the difference between the occupations of sublattices A and B:

$$\phi = \frac{1}{N_{\max}} \left( \sum_{\mathbf{x} \in A} \sigma_{\mathbf{x}} - \sum_{\mathbf{x} \in B} \sigma_{\mathbf{x}} \right), \quad (2)$$

where  $\sigma_{\mathbf{x}}$  is the indicator variable for occupation of site  $\mathbf{x}$ .

The NNE lattice gas has been studied on various structures: the square [10–12], triangular [13], simple cubic [9], hexagonal [14], body-centered cubic [15], and face-centered cubic lattices [16], and in higher dimensions [17]. Repulsive lattice gases with exclusion extending to second or further neighbors have also been studied [12,18]. Various techniques have been applied to study the phase transition, including exact enumeration, series expansion (high- and low-density expansions), the cluster-variation method, transfer matrix analysis, and Monte Carlo simulation. The model exhibits Ising-like universality on the square and honeycomb lattices, while on the triangular lattice (Baxter's hard-

\* Corresponding author.

E-mail addresses: agcnetto@fisica.ufmg.br (A.G. Cunha-Netto), dickman@fisica.ufmg.br (R. Dickman).

0010-4655/\$ – see front matter © 2010 Elsevier B.V. All rights reserved.  
doi:10.1016/j.cpc.2010.12.013

hexagon model [19,20]) it belongs to the three-state Potts model universality class.

In this paper we calculate the critical properties of the NNE lattice gas on the square and simple cubic lattices using the adaptive-window Wang–Landau (AWWL) algorithm, which has been shown to improve the performance of WLS [7,25]. The critical density and chemical potential, as well critical exponents and the reduced fourth-order cumulant, are estimated using FSS analysis. The balance of this paper is organized as follows. In Section 2, the adaptive-window Wang–Landau algorithm is briefly reviewed. Section 3 contains our results for the number of configurations (exact enumeration and simulation results), thermodynamic quantities and critical exponents. A summary is provided in Section 4.

## 2. Method

Consider a statistical model with a discrete configuration space, and let  $\vartheta$  denote a variable (or set of variables) characterizing each configuration, such as energy or particle number. For a given system size, knowledge of the number  $\tilde{\Omega}(\vartheta)$  of configurations (called the “density of states”) for all allowed values of  $\vartheta$  permits one to evaluate the partition function and associated thermal averages for arbitrary values of the temperature. Wang–Landau samplings (WLS) [5,6] furnishes estimates of the configuration numbers, which we denote by  $\Omega(\vartheta)$ , reserving  $\tilde{\Omega}(\vartheta)$  to denote the exact values, which are in general unknown. This is done by performing a random walk in configuration space, with an acceptance probability proportional to  $1/\Omega(\vartheta')$ , where  $\vartheta'$  denotes the values associated with the newly generated (or trial) configuration. In WLS one aims for equal numbers of visits to each set of allowed values of  $\vartheta$ , as reflected in the histogram,  $H(\vartheta)$ .

Various strategies have been proposed to improve WLS and optimize its convergence [7,21–24]. In this work we apply one such scheme, adaptive-windows WLS (AWWLS). This method estimates the density of states by determining the range over which the histogram has attained the desired degree of uniformity at various stages of the simulation.

The AWWLS procedure furnishes estimates,  $\Omega(N; L)$ , of the number of  $N$ -particle configurations on a lattice of  $L^d$  sites, to within an overall multiplicative factor which is independent of  $N$ . For each accepted  $N$ -particle configuration, we update the histogram:  $H(N) \rightarrow H(N) + 1$ . Since the density of states is not known a priori, we set  $\Omega(N) = 1$  for all  $N$ , at the beginning of the simulation. During the random walk, if  $N$  and  $N + \Delta N$  are the particle numbers in the current and trial configurations, respectively (in practice,  $\Delta N = \pm 1$ ), then the acceptance probability is

$$P(N \rightarrow N + \Delta N) = \min \left[ \frac{\Omega(N)}{\Omega(N + \Delta N)}, 1 \right]. \quad (3)$$

(To simplify the notation we suppress the dependence of  $\Omega$  on system size  $L$ .)

Whenever a move to a configuration with  $N$  particles is accepted, the density of states  $\Omega(N)$  is updated, multiplying it by a modification factor  $f > 1$ , so:  $\Omega(N) \rightarrow f \cdot \Omega(N)$ . If the trial configuration is rejected we update  $\Omega(N)$  (as well as the histogram) of the current  $N$  value. As is usual in WLS, the modification factor is initially set to  $f_0 = e = 2.71828 \dots$ . After  $m = 10^4$  Monte Carlo steps we check if the histogram satisfies the flatness criterion on the minimal window, of width  $W = (N_{max} - N_{min})/n$ , beginning with  $N_{min} - 1$ . The histogram is said to be flat if, for all levels in the window of interest,  $H(N) > 0.8\bar{H}$ , where the overline denotes an

average over levels within the proposed window. If it is not flat, we perform an additional  $m$  Monte Carlo steps and check again, repeating until the histogram is flat on the minimal window. Once this condition is satisfied, we check whether the histogram is flat on a larger interval. Thus we define one window and repeat the procedure on the rest of the range of  $N$  values, forming windows for each stage of sampling. The window positions depend on the portion of the histogram that is flat; we include an overlap of three levels between adjacent windows. This process is repeated until all values of  $N$  have been included in a window with a flat histogram. Then a new stage is initiated: the modification factor is reduced,  $f \rightarrow \sqrt{f}$ , we reset  $H(N) = 0$  for all  $N$ , and impose continuity on the density of states by equating  $\Omega(N)$  associated with neighboring windows at the boundary. This process is iterated and the simulation halted when  $f - 1$  is approximately  $10^{-7}$ . As explained in [7], window boundaries are not allowed to take the same positions on subsequent stages, to avoid distortions in  $\Omega$  that arise when using fixed windows.

For simplicity, two kinds of trial moves are employed: insertion and removal of particles. Including particle-displacement moves – for which  $N$  does not change – leads to the same results to within uncertainty. The type trial of move is chosen at random (insertion or removal with equal probabilities), as is the site or particle involved in insertion or removal, respectively. We use the R1279 shift register random number generator [8].

## 3. Results

We study the hard core lattice gas defined above using AWWLS. The estimates  $\Omega(N)$  are used to calculate  $\langle N \rangle$  and  $\text{var}(N)$  directly; other thermal averages are given by

$$\langle A \rangle_\mu = \frac{\sum_N \langle A \rangle_N \Omega(N) e^{\mu N}}{\Xi}. \quad (4)$$

Here  $\langle A \rangle_N$  is the microcanonical average of quantity  $A$  over all configurations having exactly  $N$  particles, which must also be estimated during the simulation. The development of reliable methods for estimating microcanonical averages is an important open problem [26]. In the WL procedure, all configurations having the same  $N$  should occur with the same probability, so that, in principle, the microcanonical average  $\langle A \rangle_N$  should be taken over all accepted configurations having exactly  $N$  particles, with equal weights. We nevertheless obtain better results if we restrict the microcanonical averages to the later stages of the sampling. Specifically, the averages  $\langle \phi \rangle_N$ ,  $\langle \phi^2 \rangle_N$  and  $\langle \phi^4 \rangle_N$  calculated using all  $N$ -particle configurations accepted during the simulation yield estimates for critical exponents that deviate significantly from their expected Ising model values. Such deviations are not observed for systems with  $L \lesssim 100$ , but do appear for larger sizes. Similar problems were found in studies of spin models using WLS [35]. The results for microcanonical averages improve when we restrict the sample to configurations accepted in the later stages of the simulation, i.e., for  $f \lesssim 1 + 10^{-4}$ .

### 3.1. Transfer-matrix analysis

As a preliminary test of our method, we compare our simulation estimates,  $\Omega(N)$ , with the results of an exact enumeration of  $\tilde{\Omega}(N)$ , on a lattice of  $8 \times 8$  sites. The latter are obtained via a transfer matrix approach. One begins by enumerating the allowed configurations  $\{c_1, \dots, c_M\}$  on a ring of  $L$  sites, and storing the number  $n(c_j)$  of particles in each configuration. An  $M \times M$  matrix  $T$  is then constructed, with  $T(c_j, c_j) = 1$  if adjacent rings may assume configurations  $c_i$  and  $c_j$  without violating the NNE condition, and  $T(c_i, c_j) = 0$  if the condition is violated. Then the allowed configurations on an  $L \times L$  lattice with periodic boundaries

<sup>1</sup> On the square lattice we use  $n = 4$  for  $L \leq 72$ ,  $n = 6$  for  $L = 96$ ,  $n = 8$  for  $L$  between 100 and 196, and  $n = 10$  for  $L = 256$ . On the simple cubic lattice  $n = 2$  for  $L \leq 12$ ,  $n = 4$  for  $L = 16$ ,  $n = 6$  for  $L$  between 24 and 32, and  $n = 8$  for  $L = 48$ .



**Table 1**  
Comparison with numerical results ( $L = 8$ ) for the density of states. The relative error is  $\varepsilon(N) = (\ln \Omega(N) - \ln \hat{\Omega}(N)) / \ln \hat{\Omega}(N)$ .

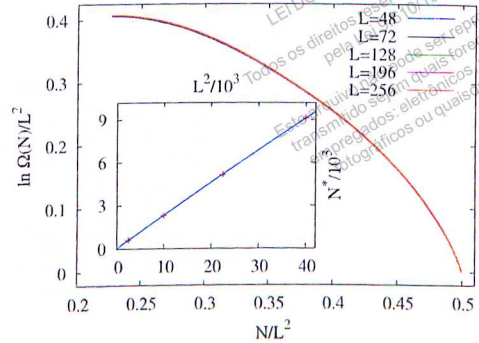
$N$	$\hat{\Omega}(N)$	$\ln \hat{\Omega}(N)$	$\ln \Omega(N)$	$10^3 \varepsilon(N)$
0	1	0.0	0.010(14)	—
1	64	4.15888	4.163(11)	0.9989
2	1888	7.54327	7.543(10)	-0.0481
3	34112	10.43740	10.436(11)	-0.1701
4	423152	12.95549	12.954(11)	-0.1295
5	3830016	15.15838	15.158(9)	-0.0301
6	26249184	17.08315	17.086(9)	-0.0003
7	139580160	18.75415	18.754(8)	-0.0515
8	585632520	20.18820	20.187(7)	-0.0643
9	1962132800	21.39730	21.396(7)	0.0576
10	5296005568	22.39022	22.392(8)	0.0447
11	11591943552	23.17358	23.175(7)	0.1189
12	20681906352	23.75253	23.755(8)	0.1510
13	30205108416	24.13131	24.135(8)	0.0881
14	36251041536	24.31373	24.316(8)	0.0815
15	35886874048	24.30364	24.306(7)	0.1273
16	29436488660	24.10550	24.109(6)	0.1330
17	20127048512	23.72533	23.728(6)	0.0997
18	11573937440	23.17202	23.174(7)	0.1247
19	5674532608	22.45925	22.462(6)	0.2128
20	2420605568	21.60728	21.612(5)	0.1918
21	922331136	20.64241	20.646(6)	-0.2539
22	322239232	19.59080	19.586(7)	-0.4439
23	104747904	18.46707	18.459(8)	-0.7674
24	31534744	17.26660	17.253(11)	-0.7995
25	8617024	15.96925	15.956(12)	-0.6443
26	2080576	14.54816	14.539(12)	-0.0571
27	430848	12.97351	12.973(12)	0.4370
28	73840	11.20966	11.215(13)	0.5301
29	9984	9.20874	9.214(15)	0.0983
30	992	6.89972	6.900(15)	0.2085
31	64	4.15888	4.160(17)	-6.359
32	2	0.69315	0.689(19)	—

are those sequences  $\{c_1, c_2, \dots, c_L\}$  of ring configurations satisfying  $\mathcal{T}(c_1, c_2) \mathcal{T}(c_2, c_3) \dots \mathcal{T}(c_{L-1}, c_L) \mathcal{T}(c_L, c_1) = 1$ . The resulting numbers of configurations for  $L = 8$  are listed in Table 1.

To compare our simulation estimates against the exact enumeration, the former must be normalized, as simulation in fact provides  $\hat{I}(N) \equiv \alpha \Omega(N)$ , with  $\alpha$  an unknown constant, independent of  $N$ . To eliminate  $\alpha$  we multiply the simulation estimates by a factor  $\lambda$ , varying  $\lambda$  so as to minimize  $\sum_N [\lambda \hat{I}(N) - \hat{\Omega}(N)]^2$ . This procedure is applied to each of the fifteen independent simulation studies, leading to the estimates and uncertainties listed in the table. The relative error in estimating  $\ln \hat{\Omega}$  is very small except near the minimum and maximum occupations. Even in the worst case,  $N = N_{max} = 32$ , the relative error in  $\ln \hat{\Omega}$  is  $\approx 0.6\%$ . If sampling errors were restricted to these regimes for larger system sizes, the effect on estimates for critical properties would be negligible.

### 3.2. Square lattice

In this work we study 18 system sizes in the range  $16 \leq L \leq 256$  using AWWLS. Let  $N^*(L)$  be the value of  $N$  that maximizes  $\Omega(N)$ , and let  $N_c(L)$  be the value of  $N$  that maximizes the probability distribution  $P(N) = \Omega(N) \exp[\mu_c N]$  at the critical point  $\mu_c$ . Preliminary studies on lattices with  $L \leq 200$  reveal that  $N^* \approx 0.227L^2$ , whereas  $N_c \approx 0.369L^2$ , so that  $N_c \gg N^*$ . As a result, configurations with  $N < N^*$  make a negligible contribution to thermal averages in the neighborhood of the critical point. To economize processor time we therefore restrict our high-statistics studies (which extend to  $L = 256$ ), to  $N$  values between  $N^*(L)$  and  $N_{max} = L^2/2$ . For  $L = 8$ , a study with sampling restricted to  $N \geq N^* = 14$  yielded results of equal accuracy as those obtained using unrestricted sampling, when compared against exact enumeration.



**Fig. 1.** (Color online.) Square lattice:  $\ln \Omega(N)/L^2$  versus density, system sizes as indicated. Inset:  $N^*(L)$  versus system size.

The following observation suggests that a further economy of processor time could be realized in studies of the critical region. Let  $P_c(N, L) = z_c^N \Omega(N, L)$  be the contribution to the grand canonical partition function due to the set of all  $N$ -particle configurations at the critical point, and let  $P^*(L) = \max_N [P_c(N, L)] = P(N_c)$ . For  $N$  values such that  $P_c(N, L)/P^*(L) < 10^{-50}$ , say, the contribution to  $\Xi$  and thermal averages is negligible. It therefore seems reasonable to restrict the sampling to the interval  $[N_1, N_2]$  of  $N$  values such that  $P_c(N, L)/P^*(L) \geq 10^{-50}$ . In practice we use  $N_1 = \lfloor 0.315L^2 - 131 \rfloor$  and  $N_2 = \lfloor 0.423L^2 + 129 \rfloor$ , where the brackets denote the largest integer. For  $L \leq 300$ , the largest size considered, the resulting interval is small enough to be studied using WLS without windows. Surprisingly, restricting the sampling in this manner yields estimates for critical exponents that deviate significantly from their expected Ising model values (for example, we find  $\gamma/\nu = 2.02(5)$  on the square lattice). We conclude that restricted sampling distorts the estimates for the numbers of configurations, and adversely affects microcanonical averages.

We turn now to the results obtained using the sampling interval  $[N^*(L), N_{max}(L)]$ . Fig. 1 shows the number of configurations versus density  $\rho$ ; the very good data collapse confirms the expected scaling

$$\Omega(N, L) \approx \exp[L^d g(\rho)]. \quad (5)$$

The inset shows  $N^*$  as a function of system size. Here and below all averages and uncertainties are obtained using fifteen independent runs.

Two thermodynamic properties used to characterize the transition in lattice gases are the particle density  $\rho(\mu)$  and the compressibility,

$$\kappa(\mu) = \frac{L^2(\langle \rho^2 \rangle_\mu - \langle \rho \rangle_\mu^2)}{\langle \rho \rangle_\mu^2}. \quad (6)$$

Fig. 2 shows simulation results for the density  $\rho$  and compressibility  $\kappa$  as functions of the chemical potential; Fig. 3 shows the order parameter, Eq. (2) and the susceptibility,

$$\chi(\mu) = L^2(\langle \phi^2 \rangle_\mu - \langle \phi \rangle_\mu^2). \quad (7)$$

The insets in Fig. 3 show the data collapse obtained using the exact critical exponents,  $\gamma/\nu = 7/4$  and  $\beta/\nu = 1/8$ , and the high-precision result for the critical chemical potential obtained by Guo and Blöte [10],  $\mu_c = 1.33401510027774(1)$ .

We analyzed the dimensionless ratio  $Q_4 = \langle \phi^2 \rangle^2 / \langle \phi^4 \rangle$  (Fig. 4), related to Binder's reduced cumulant [27], which is expected to take a universal value at the critical point. Let  $\mu_{c,L_i}$  denote the chemical potential at which  $Q_4(L_i) = Q_4(L_{i+1}) \equiv Q_{c,L_i}$ , i.e., the

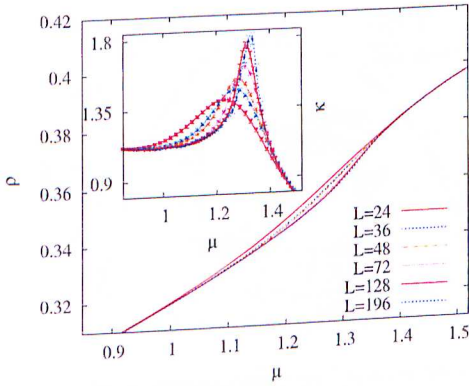


Fig. 2. (Color online.) Square lattice: density versus chemical potential on the square lattice. Error bars are smaller than the symbols. The inflection close to the transition point is weak, being imperceptible for the smaller systems. Inset: Compressibility versus chemical potential.

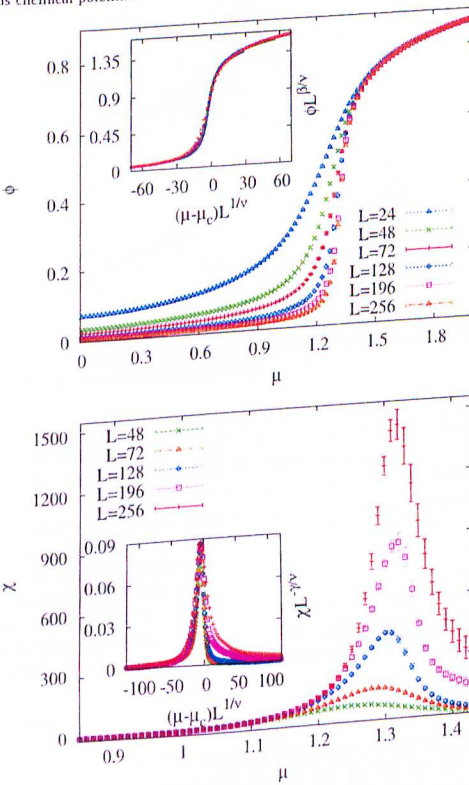


Fig. 3. (Color online.) Square lattice, upper panel: order parameter versus chemical potential. Lower panel: susceptibility versus chemical potential. The insets are data-collapse plots.

crossing between cumulants associated with a pair of successive systems sizes  $L_i$  and  $L_{i+1}$ , and let  $\bar{L} \equiv \sqrt{L_i L_{i+1}}$  denote the geometric mean of two successive sizes. It is common to plot  $\mu_{c,L}$  and  $Q_{c,L}$  versus  $1/\bar{L}^{1/\nu}$  to estimate the critical chemical potential and cumulant, via extrapolation to  $L \rightarrow \infty$ . In the present case, however, we observe no tendency; all values of  $Q_{c,L}$  and  $\mu_{c,L}$  agree to within uncertainty. Averaging over all values we obtain  $\mu_c = 1.335(3)$  and  $Q_c = 0.852(6)$ . Though of low precision,

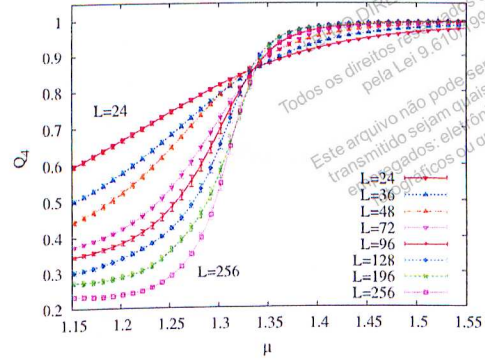


Fig. 4. (Color online.) Square lattice: fourth-order cumulant for system sizes as indicated.

Table 2

Critical values for the square lattice obtained via WLS with adaptive windows. The results from [29] were obtained using Monte Carlo simulations while Refs. [10,28,30] use a transfer-matrix technique.

	Present work	Literature values
$\mu_c$	1.332(2)	1.33401510027774(1) <sup>a</sup>
$Q_c$	0.852(6)	0.856 <sup>b</sup> ; 0.855(1) <sup>c</sup> ; 0.85625(5) <sup>d</sup>
$\rho_c$	0.3675(5)	0.3677429990410(3) <sup>a</sup>
$\gamma/\nu$	1.762(8)	7/4 (exact)
$\beta/\nu$	0.123(2)	1/8 (exact)

- <sup>a</sup> Guo and Blöte [10].
- <sup>b</sup> Burkhardt and Derrida [28].
- <sup>c</sup> Nicolaides and Bruce [29].
- <sup>d</sup> Kamieniarz and Blöte [30].

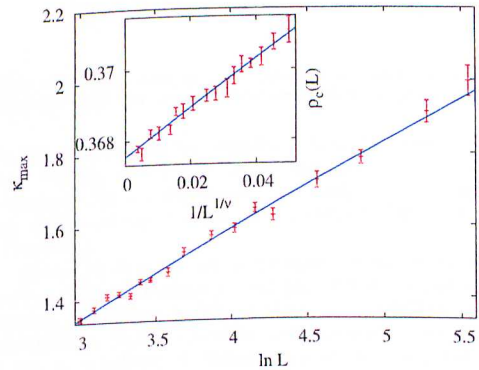


Fig. 5. (Color online.) Square lattice: maximum of the compressibility versus  $\ln L$ . The inset shows the density as a function of  $1/L^{1/\nu}$ .

these results are consistent with the literature values quoted in Table 2.

Estimates for the critical chemical potential  $\mu_c$  are obtained via analysis of the chemical potential values associated with the maxima of the susceptibility and compressibility for each system size. The extrapolated values,  $\mu_c = 1.330(1)$  using the susceptibility and  $\mu_c = 1.337(2)$  using the compressibility, are obtained using the susceptibility data for  $L = 20$ –196 and the compressibility data for  $L = 26$ –196. Pooling our results, we obtain  $\mu_c = 1.332(2)$ . Linear extrapolation of the density  $\rho(\mu_c, L)$  versus  $1/L$  yields  $\rho_c = 0.3675(5)$  (see Fig. 5), consistent with the critical density reported in [10],  $\rho_c = 0.3677429990410(3)$ . (Using the precise estimate for  $\mu_c$  quoted above [10], we obtain  $\rho_c = 0.36800(5)$ .)

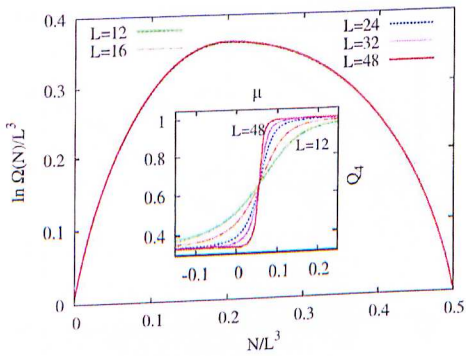


Fig. 6. (Color online.) Simple cubic lattice:  $\Omega(N)$  versus density, system sizes as indicated. Inset: Fourth-order cumulant.

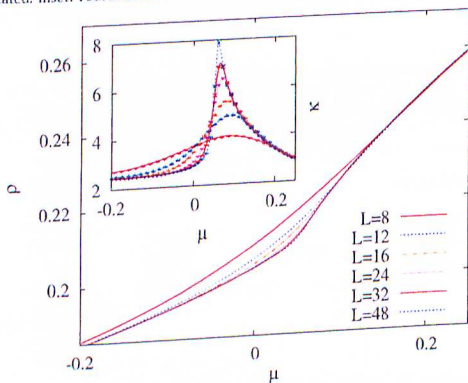


Fig. 7. (Color online.) Simple cubic lattice: density versus chemical potential. Inset: Compressibility versus chemical potential.

Applying FSS analysis to the results for susceptibility for  $L = 22$ –256 yields  $\gamma/\nu = 1.764(7)$  (see the inset of Fig. 9). To estimate  $\beta/\nu$  we analyze  $\phi_c(L)$  using the above cited value of  $\mu_c$  [10]; our data for  $L \leq 256$  yield  $\beta/\nu = 0.123(2)$ ; (see Fig. 10 inset). (Using our own less accurate estimate,  $\mu_c = 1.332(2)$ , we obtain  $\beta/\nu = 0.130(9)$ .) Fig. 5 shows the maximum of the compressibility versus system size; the results are consistent with  $\kappa_{m,L} \sim \ln L$ , as expected for a model in the 2d-Ising universality class. Table 2 summarizes our main results. It is interesting to note that we obtain essentially the same results,  $\gamma/\nu = 1.764(8)$ , and  $\beta/\nu = 0.122(3)$ , if we exclude the data for the two largest system sizes from the analysis.

### 3.3. Cubic lattice

We apply AWWLS to the NNE lattice gas on the simple cubic lattice, in system sizes  $L = 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, 22, 24, 28, 32, 40$  and 48. In this case we sample the full range of  $N$  values, for  $L \leq 256$  yield  $\beta/\nu = 0.123(2)$ ; (see Fig. 10 inset). (Using our own less accurate estimate,  $\mu_c = 1.332(2)$ , we obtain  $\beta/\nu = 0.130(9)$ .) Fig. 5 shows the maximum of the compressibility versus system size; the results are consistent with  $\kappa_{m,L} \sim \ln L$ , as expected for a model in the 2d-Ising universality class. Table 2 summarizes our main results. It is interesting to note that we obtain essentially the same results,  $\gamma/\nu = 1.764(8)$ , and  $\beta/\nu = 0.122(3)$ , if we exclude the data for the two largest system sizes from the analysis.

Using the critical exponent  $\nu = 0.6301(4)$  [33] we plot the values  $\mu_c(L)$  (corresponding to the maxima of the susceptibility and the compressibility) versus  $1/L^{1/\nu}$ . Extrapolation of the data for  $L > 14$  yields  $\mu_c = 0.05516(9)$  using the susceptibility, while the compressibility data (for  $L > 24$ ) yield  $\mu_c = 0.0567(2)$ . (It is not surprising that the critical value obtained using the compressibility is less precise than that found using the susceptibility, as the

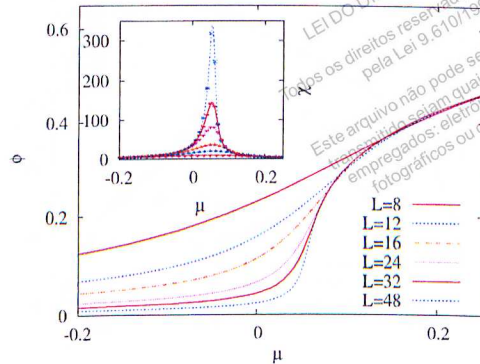


Fig. 8. (Color online.) Simple cubic lattice: Order parameter versus chemical potential. Inset: Susceptibility versus chemical potential.

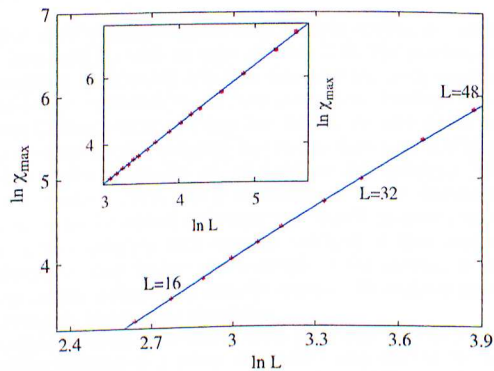


Fig. 9. (Color online.) Maximum of susceptibility versus system size on the square (inset) and simple cubic lattices. The solid lines are linear fits used to estimate  $\gamma/\nu$ .

former exhibits a weaker singularity than the latter.) Using our best estimate  $\mu_c = 0.05516(9)$  we calculate  $\rho(\mu_c, L)$ ; linear extrapolation (for  $L > 24$ ) versus  $1/L^{1/\nu}$  yields  $\rho_c = 0.21082(5)$  (if we instead use the estimate  $\mu_c = 0.05443(7)$  [9], we find  $\rho_c = 0.21058(5)$ ).

Proceeding as in the case of the square lattice, we estimate the critical chemical potential  $\mu_c$  and the critical moment ratio  $Q_c$ . Plotting  $\mu_{c,L}$  against  $1/L^{1/\nu}$  we obtain  $\mu_c = 0.0552(7)$  via linear extrapolation. This is consistent with previous results [9] which found  $\mu_c = 0.05443(7)$ . Extrapolation of  $Q_{c,L}$  as a function of  $1/L^{1/\nu}$  yields  $Q_c = 0.652(5)$ , somewhat higher than the literature value (see Table 3). If we use  $\mu_c = 0.05443(7)$  [9] to calculate  $Q_L(\mu_c)$ , we observe no significant dependence on  $L$ ; averaging over all values for  $L > 18$  yields  $Q_c = 0.636(3)$ .

FSS analysis of the susceptibility furnishes  $\gamma/\nu = 2.056(6)$  (Fig. 9). Using  $\mu_c = 0.05443(7)$  [9], FSS analysis of the order parameter at  $\mu_c$  yields  $\beta/\nu = 0.504(8)$  (Fig. 10). (Using our own best estimate,  $\mu_c = 0.05516(9)$ , we find  $\beta/\nu = 0.477(7)$ .) Table 3 summarizes our principal results for the simple cubic lattice. As in the case of the square lattice, our results do not change significantly if we exclude the data for the two largest system sizes from the analysis.

### 3.4. Critical behavior of $g(\rho)$

As is known [9], the compressibility of the NNE lattice gas diverges as  $\kappa \sim |\tilde{\mu}|^{-\alpha}$  in the vicinity of the critical point. (Here  $\tilde{\mu} = (\mu - \mu_c)/\mu_c$  is the reduced chemical potential.) On the other

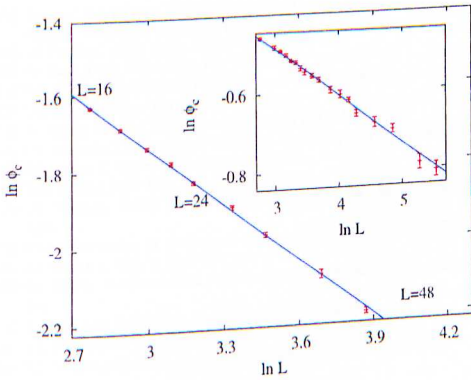


Fig. 10. (Color online.) Critical order parameter versus system size on square (inset) and simple cubic lattice. The solid lines are linear fits used to obtain  $\beta/\nu$ .

**Table 3**  
Critical values for the simple cubic lattice obtained via adaptive-window WLS. The critical values for the simple cubic lattice obtained using a cluster algorithm of the NNE lattice gas. Results from [9] were obtained using a cluster algorithm of the NNE lattice gas. Refs. [31] and [32] are from high resolution cluster simulations of the Ising model.

	Present work		Literature values	
$\mu_c$	0.05516(9)	0.05443(7) <sup>a</sup>	–	0.6233(4) <sup>c</sup>
$Q_c$	0.636(3)	0.626(4) <sup>a</sup>	–	–
$\rho_c$	0.21082(5)	–	–	0.963(3) <sup>c</sup>
$\gamma/\nu$	2.056(6)	1.94(2) <sup>a</sup>	2.005(6) <sup>b</sup>	0.519(2) <sup>c</sup>
$\beta/\nu$	0.504(8)	0.53(1) <sup>a</sup>	0.5002(6) <sup>b</sup>	0.174(4) <sup>c</sup>
$\alpha/\nu$	0.25(1)	0.20(4) <sup>a</sup>	–	–

<sup>a</sup> Heringa and Blöte [9].

<sup>b</sup> García and Gonzalo [31].

<sup>c</sup> Blöte et al. [32].

hand it is easy to show that  $\kappa \propto 1/|g''(\rho)|$ , where  $g''$  denotes the second derivative of  $g$  (defined in Eq. (5) with respect to  $\rho$ ). Thus the singularity in the compressibility is reflected in a singularity in  $g$ . While plots of  $g$  versus  $\rho$  appear quite smooth (see Figs. 1 and 6), the second derivative does indeed exhibit a singularity near  $\rho_c$ . To obtain  $g''$  we perform quadratic fits to  $g(N)$  on windows of  $b$  successive  $N$  values. We choose  $b$  large enough to eliminate small-scale fluctuations, but small enough that the singular behavior remains evident.<sup>2</sup> Despite the rounding incurred by such averaging (in addition, of course, to finite-size rounding), the data shown in Fig. 11 provide a clear indication of a developing singularity. The figure also shows that the minimum of  $|g''|$  approaches zero as  $L \rightarrow \infty$ . Our data, however, are not sufficiently precise to determine the critical singularity in  $g(\rho)$  quantitatively.

#### 4. Conclusions

We perform adaptive-window Wang–Landau simulations of the simple cubic lattice gas with nearest-neighbor exclusion on the square and simple cubic lattices. On the square lattice, comparison with an exact enumeration of configurations for  $L = 8$  yields excellent agreement. Using finite-size scaling analysis of data for systems of up to  $256^2$  sites on the square lattice and  $48^3$  sites on the cubic lattice, and, in addition, we estimate the critical exponent ratios  $\gamma/\nu$  and  $\beta/\nu$ , and the critical values of the chemical potential, the density, and the critical values of the cumulant. In general, fair agreement is observed with literature values. In three dimensions, the critical point is obtained with

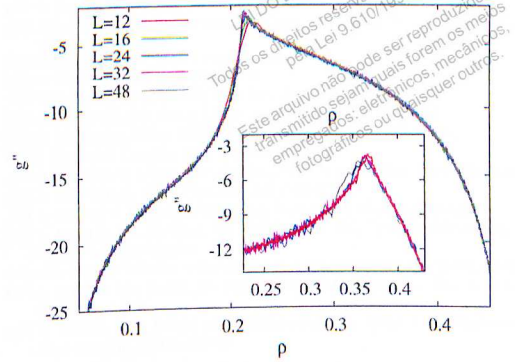


Fig. 11. Second derivative of  $g(\rho)$  on the simple cubic lattice, system sizes  $L = 12, 16, 24, 32$  and  $48$ . The inset is a similar plot for the square lattice for system sizes  $L = 24, 48, 128$  and  $196$ .

an error of about 1.3% compared with previous studies, and exponent ratios and  $Q_c$  with an error of about 3.5%. The precision of our results is considerably less than that obtained using transfer-matrix or high-resolution Monte Carlo simulations. Although this is somewhat disappointing, we note that despite the widespread interest in Wang–Landau sampling, few studies have been published in which critical exponents are obtained via this technique [34–38]. Our results confirm that it is possible to obtain reasonably accurate values for critical exponents and related quantities using Wang–Landau sampling with adaptive windows. It thus appears worthwhile to seek further improvements in the method, in efforts to develop a simple and versatile approach for studying phase transitions via Monte Carlo simulation.

In this regard two observations seem pertinent. The first is that restricting sampling to a subset of densities may worsen the results, even though densities outside this subset make a negligible contribution to thermal averages. It appears that the imposition of reflecting barriers on the random walk in configuration space somehow distorts the sampling. The second point is that the quality of the results furnished by the WLS procedure appears to decay with increasing system size, even while maintaining the same flatness criterion and schedule of updates of the factor  $f$ . Thus, including larger systems sizes in the analysis may not improve results; more extensive sampling of small and intermediate system sizes may represent a more effective allocation of computing resources. We hope to explore the reasons for, and implications of these observations in future work.

#### Acknowledgements

We are grateful to CNPq, and Fapemig (Brazil) for financial support.

#### References

- [1] M.E. Fisher, in: M.S. Green (Ed.), Proc. Internat. School Phys. Enrico Fermi, vol. 51, Academic Press, 1971; M.E. Fisher, M.N. Barber, Phys. Rev. Lett. 28 (1972) 1516.
- [2] M.N. Barber, in: C. Domb, J.L. Lebowitz (Eds.), Phase Transitions and Critical Phenomena, vol. 8, Academic Press, 1983.
- [3] M. Plichtske, B. Bergersen, Equilibrium Statistical Physics, Cambridge University Press, 2008.
- [4] J.J. Binney, N.J. Dowrick, A.J. Fisher, M.E.J. Newman, The Theory of Critical Phenomena: An Introduction to the Renormalization Group, Oxford University Press, 2001.
- [5] F. Wang, D.P. Landau, Phys. Rev. Lett. 86 (2001) 2050.
- [6] F. Wang, D.P. Landau, Phys. Rev. E 64 (2001) 056101.
- [7] A.G. Cunha-Netto, A.A. Caparica, S.-H. Tsai, R. Dickman, D.P. Landau, Phys. Rev. E 78 (2008) 055701(R).

<sup>2</sup> For the square lattice we use  $b = 3$  for  $L = 24$ ,  $b = 7$  for  $L = 48$ ,  $20$  for  $L = 128$  and  $50$  for  $L = 196$ ; for the simple cubic lattice,  $b = 10$  for  $L = 12$  and  $16$ ,  $b = 20$  for  $L = 24$ ,  $40$  for  $L = 32$  and  $70$  for  $L = 48$ .

- [8] See, e.g., D.P. Landau, K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*, Cambridge University Press, 2005.
- [9] J.R. Heringa, H.W.J. Blöte, *Phys. A* 232 (1996) 369.
- [10] W. Guo, H.W.J. Blöte, *Phys. Rev. E* 66 (2002) 046140.
- [11] D.S. Gaunt, M.E. Fisher, *J. Chem. Phys.* 43 (1965) 2840.
- [12] L.K. Runnels, *Phys. Rev. Lett.* 15 (1965) 581.
- [13] W. Zhang, Y. Deng, *Phys. Rev. E* 78 (2008) 031103.
- [14] L.K. Runnels, L.L. Combs, J.P. Salvant, *J. Chem. Phys.* 47 (1967) 4015.
- [15] D.S. Gaunt, *J. Chem. Phys.* 46 (1967) 3237.
- [16] D.M. Burley, *Proc. Phys. Soc.* 75 (1960) 262.
- [17] J.R. Heringa, H.W.J. Blöte, E. Luijten, *J. Phys. A: Math. Gen.* 33 (2000) 2929.
- [18] H.C.M. Fernandes, J.J. Arenzon, Y. Levin, *J. Chem. Phys.* 126 (2007) 114508.
- [19] R.J. Baxter, *J. Phys. A* 13 (1980) L61.
- [20] R.J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, 1982.
- [21] C. Zhou, R.N. Bhatt, *Phys. Rev. E* 72 (2005) 025701(R).
- [22] R.E. Belardinelli, S.V.D. Pereyra, *Phys. Rev. E* 75 (2007) 046701.
- [23] R.E. Belardinelli, S.V.D. Pereyra, *J. Chem. Phys.* 127 (2007) 184105.
- [24] C. Zhou, J. Su, *Phys. Rev. E* 78 (2008) 046705, and references therein.
- [25] A.G. Cunha-Netto, R. Dickman, A.A. Caparica, *Comput. Phys. Comm.* 180 (2009) 583.
- [26] P.M.C. de Oliveira, *Braz. J. Phys.* 30 (2000) 195.
- [27] K. Binder, *Z. Phys. B* 43 (1981) 119.
- [28] T.W. Burkhardt, B. Derrida, *Phys. Rev. B* 32 (1985) 7273.
- [29] D. Nicolaidis, A.D. Bruce, *J. Phys. A: Math. Gen.* 21 (1988) 223.
- [30] G. Kamieniarz, H.W.J. Blöte, *J. Phys. A: Math. Gen.* 26 (1993) 201.
- [31] J. García, J.A. Gonzalo, *Phys. A* 326 (2003) 464.
- [32] H.W.J. Blöte, E. Luijten, J.R. Heringa, *J. Phys. A: Math. Gen.* 28 (1995) 6289.
- [33] A. Pelissetto, E. Vicari, *Phys. Rep.* 368 (2002) 549.
- [34] A. Malakis, A. Peratzakis, N.G. Fytas, *Phys. Rev. E* 70 (2004) 066128.
- [35] A. Malakis, S.S. Martinos, I.A. Hadjiagapiou, N.G. Fytas, P. Kaloizoumis, *Phys. Rev. E* 72 (2005) 066120.
- [36] N.G. Fytas, A. Malakis, I. Georgiou, *J. Stat. Mech.: Theory Exp.* (2008) L07001.
- [37] A. Malakis, A.N. Berker, I.A. Hadjiagapiou, N.G. Fytas, *Phys. Rev. E* 79 (2009) 011125.
- [38] A. Malakis, A.N. Berker, I.A. Hadjiagapiou, N.G. Fytas, T. Papakonstantinou, *Phys. Rev. E* 81 (2010) 041113.

## Complete high-precision entropic sampling

Ronald Dickman\* and A. G. Cunha-Netto†

Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas, and National Institute of Science and Technology for Complex Systems, Universidade Federal de Minas Gerais, C.P. 702, 30123-970 Belo Horizonte, Minas Gerais, Brazil

(Received 10 April 2011; revised manuscript received 4 July 2011; published 4 August 2011)

Monte Carlo simulations using entropic sampling to estimate the number of configurations of a given energy are a valuable alternative to traditional methods. We introduce *tomographic* entropic sampling, a scheme which uses multiple studies, starting from different regions of configuration space, to yield precise estimates of the number of configurations over the *full range* of energies, *without* dividing the latter into subsets or windows. Applied to the Ising model on the square lattice, the method yields the critical temperature to an accuracy of about 0.01%, and critical exponents to 1% or better. Predictions for system sizes  $L = 10$ –160, for the temperature of the specific heat maximum, and of the specific heat at the critical temperature, are in very close agreement with exact results. For the Ising model on the simple cubic lattice the critical temperature is given to within 0.003% of the best available estimate; the exponent ratios  $\beta/\nu$  and  $\gamma/\nu$  are given to within about 0.04% and 1%, respectively, of the literature values. In both two and three dimensions, results for the *antiferromagnetic* critical point are fully consistent with those of the ferromagnetic transition. Application to the lattice gas with nearest-neighbor exclusion on the square lattice again yields the critical chemical potential and exponent ratios  $\beta/\nu$  and  $\gamma/\nu$  to good precision.

DOI: 10.1103/PhysRevE.84.026701

PACS number(s): 02.70.-c, 05.10.-a, 05.50.+q

## I. INTRODUCTION

A simple and reliable Monte Carlo method, capable of estimating thermodynamic properties at any desired temperature using a single simulation, has been sought for many years [1–4]. Such a method could in principle offer a great advantage over Metropolis Monte Carlo and cluster algorithms, which require a separate study for each temperature of interest. The information required to study the full temperature range is contained in the number of configurations  $\tilde{\Omega}(E, L)$  as a function of energy  $E$ , and associated microcanonical averages [for example, the mean magnetization  $\langle m \rangle(E, L)$ ], on a lattice of  $L^d$  sites. Wang-Landau sampling (WLS) [5,6] is currently the most widely used such *entropic sampling* method. Various improvements to the basic WLS scheme have been suggested [7–10]. In WLS of larger systems the range of energies (or of other relevant quantities) is divided into subsets and each such “window” is sampled separately. The latter procedure has been found to distort the estimates for  $\tilde{\Omega}(E, L)$  in some cases [8,10].

Despite the broad interest in WLS, relatively few works have been published in which critical exponents are determined using the method. Important exceptions to this general trend are the studies of Malakis and coworkers [11–15], who use a modified WLS procedure to find the critical exponents of several pure and disordered spin models. Their method involves a two-stage process, first using WLS with the energy range divided into windows to identify the critical energy subspace (i.e., the range of energies needed to sample the critical region adequately), followed by WLS restricted to the critical range. In Ref. [22] the present authors obtained fair results for the critical exponents of the lattice gas with nearest-neighbor exclusion, using WLS with adaptive windows.

Here we describe a high-precision entropic simulation method that samples the full configuration space without using

windows. Two fundamental aspects of the method are: (1) successive refinement of an initial estimate for the  $\tilde{\Omega}(E, L)$  on the basis of simulations starting from a diverse set of initial configurations, and (2) use of the final result at size  $L$  to generate a good preliminary estimate for  $\tilde{\Omega}(E, L')$  for size  $L' > L$ . After describing the method in Sec. II, we present in Sec. III applications to the Ising model on the square and simple cubic lattices, and to the lattice gas with nearest-neighbor exclusion. A summary and conclusions are given in Sec. IV.

## II. METHOD

Consider a statistical model with a discrete configuration space, and let  $\vartheta$  denote a variable (or set of variables) characterizing each configuration, such as energy or particle number. For a given system size, knowledge of the number  $\tilde{\Omega}(\vartheta)$  of configurations, for all allowed values of  $\vartheta$ , permits one to evaluate the partition function and associated thermal averages for any desired temperature. Entropic sampling methods use Monte Carlo simulation to furnish estimates of the configuration numbers, which we denote by  $\Omega(\vartheta)$ , reserving  $\tilde{\Omega}(\vartheta)$  to denote the *exact* values, which are in general unknown. The basic idea of entropic sampling is as follows. Let  $E(\mathcal{C})$  denote the energy of configuration  $\mathcal{C}$ . Consider a simulation method that generates configurations from the probability distribution,

$$P(\mathcal{C}) \propto \frac{1}{\tilde{\Omega}[E(\mathcal{C})]}, \quad (1)$$

that is, the probability of configuration  $\mathcal{C}$  is inversely proportional to the number of configurations having the same energy. This could be done using an acceptance probability,

$$p(\mathcal{C}') = \min \left[ \frac{\tilde{\Omega}(E)}{\tilde{\Omega}(E')}, 1 \right]. \quad (2)$$

\*dickman@fisica.ufmg.br  
†agcnetto@fisica.ufmg.br

(As usual, when the new configuration  $\mathcal{C}'$  is rejected, the current configuration  $\mathcal{C}$  is counted again in the sample.) Let  $H(E)$  be the number of times energy  $E$  occurs in the sample. In a simulation that follows Eq. (1),  $\langle H(E) \rangle = \text{Const.}$ , independent of  $E$ . Of course, the  $\tilde{\Omega}(E)$  are in general unknown. If we run the simulation using a set of estimated values,  $\Omega(E)$ , in place of  $\tilde{\Omega}(E)$  in Eq. (1), then the better the estimate, the more uniform the histogram  $H(E)$  should be. The expected number of visits to energy  $E$  when we use an estimate  $\Omega(E)$  to define  $p_n(\mathcal{C})$  is

$$\langle H(E) \rangle \propto \frac{\tilde{\Omega}(E)}{\Omega(E)}. \quad (3)$$

Suppose we begin using a *guess*,  $\Omega_0(E)$ , for  $\tilde{\Omega}(E)$ . Simulating for a sufficiently long time, so that  $H(E) \approx \langle H(E) \rangle$  for all energies  $E$ , we may refine our guess, using Eq. (3) to write

$$\Omega_1(E) = \frac{H_1(E)}{\bar{H}_1} \Omega_0(E), \quad (4)$$

where  $H_1(E)$  is the number of times energy  $E$  occurs in the simulation, and  $\bar{H}_1$  is the average of  $H_1(E)$  over all allowed energies. Equation (4) is the basis of our simulation method. The idea is to iterate this procedure, starting from an initial guess, enough times so that the final approximation,  $\Omega_N$ , is very close to the true distribution. (During the final iteration, the microcanonical averages required to calculate thermal averages are also determined.)

For the method to yield a reliable estimate for  $\tilde{\Omega}(E)$ , it is essential that the space of configurations be sampled long enough, and broadly enough, that at each step  $j = 1, \dots, N$ , the observed histogram  $H_j(E)$  is close to its expected value, that is,  $H_j(E) \propto \tilde{\Omega}(E)/\Omega_{j-1}(E)$ , for all allowed values of the energy. If this condition is satisfied at each iteration  $j$ , we expect the estimates  $\Omega_{j-1}(E)$  to approach the exact values.

The preceding discussion suggests that, to converge, the configuration space must be sampled well at each iteration. Our numerical experiments confirm that better results are obtained using a relatively small number of iterations, with a relatively large number of lattice updates (LUDs) [16] than with a larger number of iterations, each having a smaller number of updates, as shown in the following section. In the studies reported below, for example, we use  $N = 5$  steps, each consisting of a set of 10 simulations, each of which runs for  $N_U = 10^7$  LUDs.

To ensure adequate sampling of the full range of energies, the simulations in a given iteration use a variety of initial configurations. For the Ising model on the square and simple cubic lattices, for which the number of configurations is invariant under (1) inversion of all spins, and (2) inversion of all spins on *one sublattice*, we use the following set of initial conditions: (1 and 2) random spin orientations; (3) all spins up; (4) all spins down; (5) all but two neighboring spins up; (6) all but two neighboring spins down; (7 and 8) all spins up, the rest down; (9 and 10) configurations (7) or (8) with a pair of neighboring spins inverted. Thus there are four low-energy initial configurations, four of high energy (but of low energy for the antiferromagnetic model), and two that have  $E \approx 0$ . Taking a certain liberty with terminology, we call this approach *tomographic sampling* of the distribution

$\Omega_j$ , since studies using different starting points are pooled at each iteration.

A key question concerns the initial estimate,  $\Omega_0$ , for the number of configurations. Here it is important to note that, in terms of the energy density  $e = E/L^d$ , the microcanonical entropy density,

$$s(e, L) \equiv \frac{1}{L^d} \ln \tilde{\Omega}(L^d e, L) \quad (5)$$

depends on system size  $L$  rather weakly. Thus the final result for  $s(e, L)$  serves as a rather good first approximation for a larger system size,  $L'$ . We use a simple initial guess [e.g.,  $\Omega(E)$  uniform over the set of allowed energies, or a mean-field approximation] for some small initial system size. For small  $L$  the simulation rapidly converges to a good estimate of  $\tilde{\Omega}(E, L)$ , and the resulting entropy density  $s(e, L)$  is then used to generate the initial guess  $\Omega_0(E, L')$  for the next system size in the sequence.

### A. Implementation

All the studies reported here use periodic boundaries; other boundary conditions are readily implemented. The Ising spin configurations are classed by the *bond number*  $n$ , i.e., the number of nearest-neighbor pairs of spins having the same orientation. On the square lattice the allowed values are  $n = 0, 4, 6, \dots, n_{\max} - 4, n_{\max}$  with  $n_{\max} = 2L^2$ . [The energy is  $E = 2(L^2 - n)$ .] To begin, we set the initial distribution  $\Omega_0(n)$ . Due to the extremely large values these numbers may take [already  $\sim \mathcal{O}(10^{30})$  for  $L = 10$ ], they are represented in the form of their natural logarithm. Subsequently, the simulation procedure is called  $N$  times. (In most of the studies reported here,  $N = 5$ .) The simulation uses a single-spin-flip dynamics. The acceptance probabilities  $\Omega_j(n)/\Omega_j(n')$  (for a transition from energy  $n$  to  $n'$ ) are stored in a look-up table. (The allowed values of  $\Delta n$  are 0,  $\pm 2$ , and  $\pm 4$ .) In addition to storing the orientation of each spin, we store the number of neighbors having the same spin orientation, as this facilitates evaluation of  $\Delta n$ .

Each time the simulation subroutine is called, the histogram  $H_j(n)$  is set to zero. The latter then accumulates the number of visits to each class  $n$  over  $N_{\text{sim}} = 10$  simulations (with varied initial configurations), each consisting of  $N_U$  LUDs. (In principle, these studies could be carried out in parallel, on separate processors.) Once all  $N_{\text{sim}}$  studies are done we update  $\Omega(n)$  as per Eq. (4). The acceptance probabilities are recalculated using the new estimate, and we proceed to the next iteration, for a total of  $N$  iterations. Each time a configuration  $\mathcal{C}$  is generated, be it a new one (following an accepted spin flip) or a repetition (if the new configuration is rejected), we update the running sums used to calculate the microcanonical averages of the absolute magnetization  $|M|$ , as well as  $M^2$  and  $M^4$ . The resulting averages are saved, along with  $\ln \Omega_j(n)$ , at the end of each iteration. (Note, however, that only the results from the final iteration,  $j = N$ , are used to calculate the thermodynamic properties reported below.)

As mentioned above, the initial distribution  $\Omega_0(n, L)$  is generated on the basis of the final estimate for a smaller system

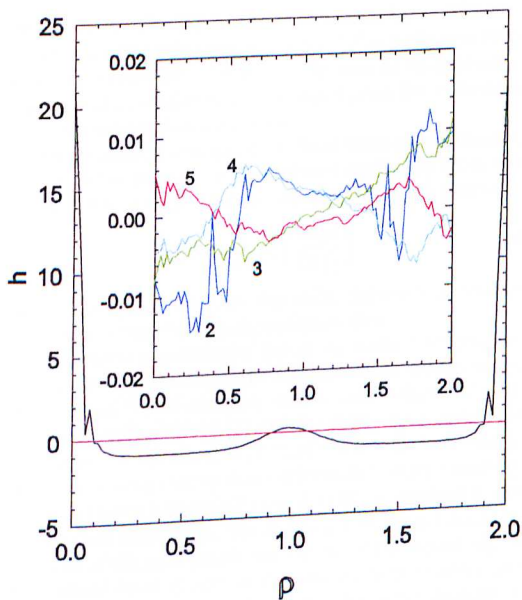


FIG. 1. (Color online) Ising model, square lattice: relative deviation of histogram,  $h(\rho) \equiv [H(\rho) - \bar{H}]/\bar{H}$ , versus bond density  $\rho$  for  $L = 10$ . The black curve is the result of the first iteration, while the horizontal line corresponds to the four subsequent iterations 2–5. (Inset) Detail of iterations 2–5.

size. For the smallest size ( $L = 10$  in the case of the square lattice) we use a simple approximation for the entropy density,

$$s(\rho) \approx -\ln 2(\rho - 1)^2, \quad (6)$$

where  $\rho = n/L^2$ . This is motivated by the fact that  $\tilde{\Omega}(n = L^2) \sim 2^{L^d}$  whereas  $\tilde{\Omega}(n = 2L^d) = \tilde{\Omega}(n = 0) = 2$ , and that  $s(\rho)$  is symmetric about  $\rho = 1$ . (For convenience we subtract  $\ln 2$  from the original definition,  $s = [\ln \tilde{\Omega}(n)]/L^2$ .) For  $L = 10$ , the distribution after the first iteration,  $\Omega_1(n)$ , is already very close to the final one, showing rapid convergence.

The quantity  $h(\rho) \equiv [H(\rho) - \bar{H}]/\bar{H}$  characterizes the relative deviation of the histogram from a uniform distribution; its evolution at successive iterations is illustrated in Fig. 1. The result of the first iteration (starting from the parabolic initial approximation) shows relatively large variations, while the subsequent histograms are all flat on the scale of this figure. The detailed evolution in the subsequent iterations is shown in the inset; the final histogram is flat to about 99.5%.

For the passage from one system size ( $L$ ) to the next ( $L'$ ), we require an algebraic approximation for the entropy density  $s(\rho, L)$ . Given that  $\tilde{\Omega}(n) = \tilde{\Omega}(n_{\max} - n)$ , we first symmetrize the result about  $\rho = 1$ , and average over pairs of neighboring values to suppress small systematic oscillations in  $s$ . (The latter are visible in Fig. 2, near  $\rho = 0$  and  $\rho = 2$ .) This defines the symmetrized and (slightly) smoothed entropy density,

$$\bar{s}(\rho') \equiv \frac{1}{4} [s(n/L^2) + s((n-1)/L^2) + s(2-n/L^2) + s(2-(n-1)/L^2)], \quad (7)$$

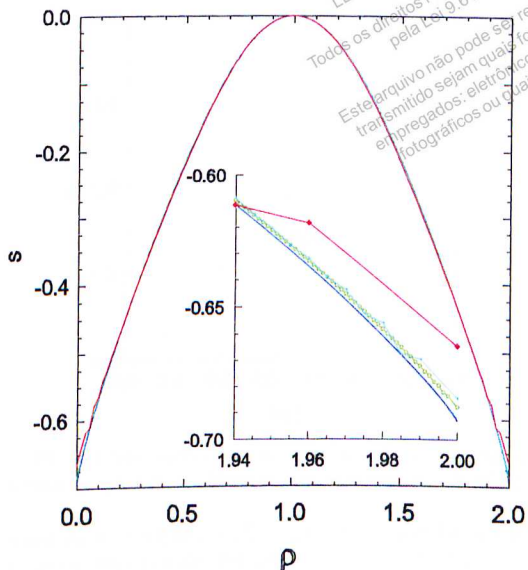


FIG. 2. (Color online) Microcanonical entropy density  $s(\rho)$  versus  $\rho$  for system sizes  $L = 10, 20, 40, 80$ , and  $160$  (upper to lower). The inset is a detailed view near  $\rho = 2$ .

where  $\rho' = (2n - 1)/(2L^2)$ . For smaller sizes,  $\bar{s}$  is well approximated by a polynomial fit in even powers of  $x \equiv \rho - 1$ . For larger systems, however, maintaining a good fit requires increasing the order of the polynomial. The fit tends to be worst near  $x = \pm 1$ . (In fact, one may anticipate a weak singularity,  $s \sim |1 - x| \ln |1 - x|$  at these limits.) We find that, given the symmetry  $s(-x) = s(x)$ , a more convenient alternative is a Fourier cosine series:

$$s(x) - s(1) = \sum_{j=0}^J a_j \cos \left[ \frac{(2j+1)\pi x}{2} \right] \equiv f(x). \quad (8)$$

The expansion coefficients are readily calculated using the discrete approximation to the standard integral expression; the quality of the fit varies considerably with the number of terms in the series. We calculate the maximum absolute deviation  $\delta \equiv \max_x |s(x) - f(x)|$  as a function of the number of terms, and use the value that minimizes  $\delta$ . For example, for  $L = 120$  (square lattice), we obtain the smallest  $\delta$  ( $2.7 \times 10^{-5}$ ) for a series with  $J = 9151$ . We use the Fourier series for all studies of the two- and three-dimensional Ising models reported below.

The execution time (for a given number of iterations, initial configurations, and lattice updates) scales as the number of lattice sites. The largest studies reported here (for system size  $L = 160$ ) required approximately one week on a processor with a speed of 2.8 GHz.

### III. RESULTS

#### A. Ising model on the square lattice

We apply tomographic sampling to the Ising model on the square lattice, for system sizes  $L = 10, 20, 40, 80, 120$ , and  $160$ . The procedure is as outlined above, except that for the two



largest sizes, following the five studies using  $N_U = 10^7$  lattice updates, a sixth study using  $N_U = 2 \times 10^7$  is performed. In all cases, the results are calculated on the basis of the final study. Means and uncertainties are calculated using five or in some cases six independent simulations.

The number of configurations  $\Omega(\rho)$  takes its maximum at  $\rho = 1$  and is (except for fluctuations) symmetric about this point. In Fig. 2 we plot the microcanonical entropy density,

$$s(\rho) = \frac{1}{L^2} \ln \left( \frac{\Omega(\rho)}{\Omega(1)} \right), \quad (9)$$

for several system sizes. At this scale, finite-size effects are only evident near the limiting bond densities.

To perform a quantitative test of the method we compare results for the specific heat, magnetization, susceptibility, and reduced fourth cumulant with known values and with finite-size scaling theory [17,18]. We define the specific heat per site as  $c = \text{var}(E)/(L^d k_B T^2)$ , where  $E$  is the total energy. (From here on we employ units such that Boltzmann's constant  $k_B = 1$ .) Figure 3 shows  $c(T)$  (for  $L = 80$ ) as obtained in five independent simulations. The curves are indistinguishable on the scale of the main graph, but a detail of the critical region does reveal some scatter in the specific heat maxima and the temperatures at which they occur. From the analysis of Ferdinand and Fisher [19] one knows that on a square lattice of  $L \times L$  sites (with periodic boundaries), the specific heat takes its maximum value at temperature  $T(c_{\max}) \simeq T_c(1 + 0.3603/L)$ , where  $T_c \simeq 2.269185$  is the critical temperature. Combining the results of Refs. [19] and [20] one also has an expansion for the specific heat at the critical temperature:

$$c(T_c, L) = A_0 \ln L + C_0 + \frac{C_1}{L} + \frac{C_2}{L^2} + \frac{C_3}{L^3} + \dots, \quad (10)$$

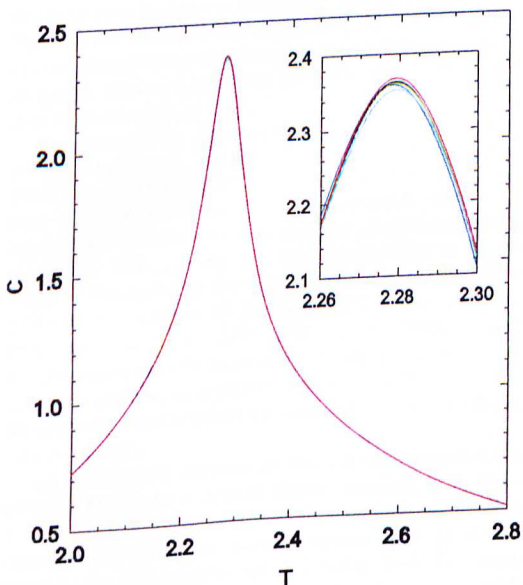


FIG. 3. (Color online) Specific heat per site  $c$  versus temperature for  $L = 80$  in five independent simulations.

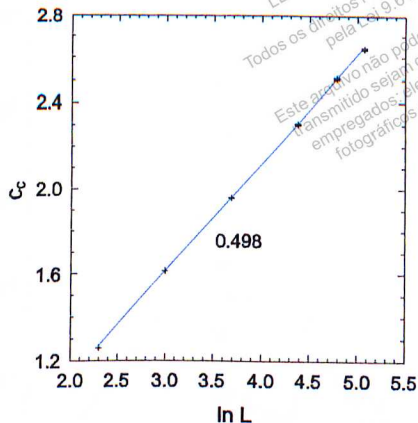


FIG. 4. (Color online) Specific heat per site at the critical temperature  $c_c$  versus  $\ln L$ . The slope of the regression line is 0.498(2).

where  $A_0 = (2/\pi)[\ln(1 + \sqrt{2})]^2 \simeq 0.494358$  and, for an  $L \times L$  lattice with periodic boundaries,  $C_0 \simeq 0.138149$ ,  $C_1 \simeq -0.170951$ ,  $C_2 \simeq 0.018861$ , and  $C_3 \simeq 0.056765$ . In Fig. 4 we plot  $c(T_c)$  versus  $\ln L$ ; a least-squares linear fit yields  $c(T_c) = 0.498(2) \ln L$ , that is, about 1% above the exact amplitude. A detailed comparison with theoretical predictions is given in Table I; simulation results agree with theory to within uncertainty. Linear extrapolation of the simulation results for  $T(c_{\max})$  (for  $L \geq 20$ ) versus  $1/L$  yields  $T_c = 2.26966(8)$ , that is, about 0.02% above the exact value of 2.269185... [21]. A similar analysis of the energy per site at  $T_c$  yields  $e_c = -1.4147(5)$ , consistent with the exact value,  $e_c = -\sqrt{2}$  [21]. As noted above, our sampling method represents the antiferromagnetic (AF) critical point with the same precision as the ferromagnetic one. We have verified that  $T(c_{\max})$ ,  $c_{\max}$ , and  $c(T_c)$  associated with the AF transition agree to within uncertainty with the values quoted in Table I for the ferromagnetic transition.

We turn now to the magnetization, the susceptibility, and Binder's cumulant. The magnetization per site is given by

$$m(T, L) = \frac{1}{L^d Z(T, L)} \sum_E \Omega(E, L) e^{-\beta E} (|N_+ - N_-|)(E, L), \quad (11)$$

TABLE I. Square lattice: comparison of theoretical and simulation results for the temperature of the specific heat maximum, and for the specific heat at  $T_c$ . Note that the theoretical expressions for  $T(c_{\max})$  and  $c(T_c)$  are subject to corrections of order  $1/L^2$  and  $1/L^4$ , respectively.

$L$	$T(c_{\max})$ (th)	$T(c_{\max})$ (sim)	$c(T_c)$ (th)	$c(T_c)$ (sim)
10	2.35	2.34450(6)	1.2600	1.2597(3)
20	2.310	2.30806(8)	1.6112	1.6121(5)
40	2.290	2.2889(2)	1.9582	1.9573(18)
80	2.2794	2.2793(2)	2.3031	2.302(3)
120	2.2760	2.2761(1)	2.5043	2.504(5)
160	2.2743	2.2743(2)	2.64695	2.655(7)

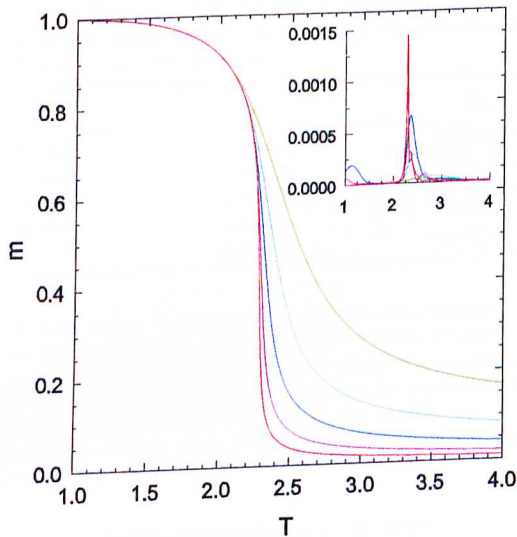


FIG. 5. (Color online) Magnetization per site versus temperature for system sizes (upper to lower)  $L = 10, 20, 40, 80,$  and  $160$ . Uncertainties (for the same system sizes, lower to upper) are plotted in the inset.

where  $\beta = 1/k_B T$ ,  $Z$  is the partition function, and  $\langle |N_+ - N_-| \rangle(E, L)$  denotes the microcanonical average of the absolute value of the total magnetization ( $N_+$  is the number of sites with spin  $\sigma = 1$ ). Results for the magnetization are plotted in Fig. 5. The uncertainties, which are not visible on the scale of the main graph, are shown in the inset; as is to be expected, they are most severe in the vicinity of the critical point. We note, however, that in all cases the relative uncertainty in  $m$  is less than 0.04%. The finite size scaling (FSS) relation  $m(T_c, L) \sim L^{-\beta/\nu}$  permits one to estimate the associated exponent ratio. Using the data for all system sizes we find  $\beta/\nu = 0.1237(5)$ , that is, 1% smaller than the exact value of  $1/8$ .

The susceptibility  $\chi = \text{var}(M)/(L^d T)$  and its uncertainty are plotted in Fig. 6. The relative uncertainty in  $\chi$  is largest 1% in the critical region for  $L = 160$ ; for smaller systems and away from the critical region, it is considerably smaller. We list simulation results for the temperature of the susceptibility maximum,  $T(\chi_{\max})$ , and for the susceptibility at  $T_c$ , in Table II. Extrapolating the values of  $T(\chi_{\max})$  we find  $T_c = 2.26926(10)$ . Analysis of the susceptibility data using the FSS relation  $\chi(T_c, L) \sim L^{\gamma/\nu}$  yields  $\gamma/\nu = 1.754(2)$ , which is 0.2% higher than the exact value of  $7/4$ . It is interesting to note that restricting the analysis to system sizes  $20 \leq L \leq 120$ , we obtain the slightly superior estimates  $\beta/\nu = 0.1240(8)$  and  $\gamma/\nu = 1.748(2)$ .

An independent estimate of the critical temperature is afforded by Binder's reduced fourth cumulant [23],  $Q_4 = 1 - \langle M^4 \rangle / (3 \langle M^2 \rangle^2)$ . Analysis of the crossings of Binder's cumulant for successive pairs of system sizes yields the linear temperatures and cumulant values listed in Table III. Linear extrapolation of the results for the last four pairs yields  $T_c = 2.2694(2)$  and  $Q = 0.610(1)$ . The latter is in good accord with the literature value  $Q = 0.61071(2)$  [32]. Pooling

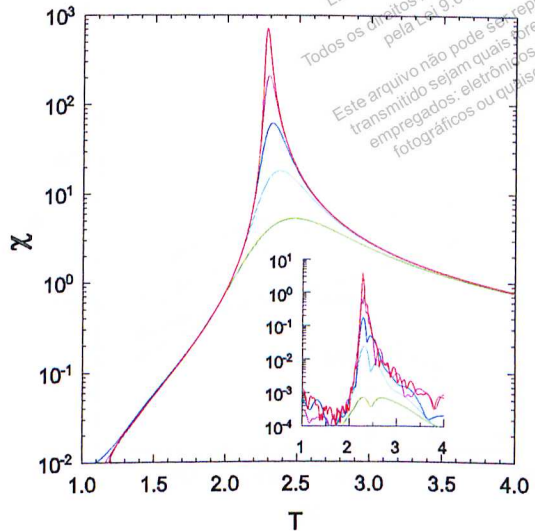


FIG. 6. (Color online) Susceptibility per site versus temperature for system sizes (lower to upper)  $L = 10, 20, 40, 80,$  and  $160$ . Uncertainties are plotted in the inset.

the estimates for the critical temperature derived from the analysis of the specific heat, the susceptibility, and the reduced cumulant, we find  $T_c = 2.2695(1)$ , about 0.01% above the exact value.

Our estimate for  $T_c$  is, as noted, based on extrapolations of three sets of size-dependent pseudocritical temperatures [i.e.,  $T(c_{\max})$ ,  $T(\chi_{\max})$ ] and  $T_\nu$ . These quantities are plotted versus  $1/L$  in Fig. 7. We analyzed the behavior of the pseudocritical temperature associated with the susceptibility maximum, which should follow  $T(\chi_{\max}) - T_c \sim L^{-1/\nu}$ . Using our estimate of  $T_c = 2.2695$ , a linear fit of  $\ln[T(\chi_{\max}) - T_c]$  versus  $\ln L$  yields  $\nu = 0.99(1)$  consistent with the critical exponent  $\nu = 1$  for the two-dimensional Ising model.

As noted above, we find it preferable to perform a relatively small number of long iterations than a large number of shorter ones. To illustrate this point, we performed a series of studies using a total of  $5 \times 10^8$  LUDS, divided into 5, 10, 25, and 50 iterations, for system size  $L = 20$ . In Fig. 8 we plot the relative uncertainties (estimated using the standard deviation calculated over a set of five independent studies) of  $T(c_{\max})$ ,  $T(\chi_{\max})$ , and of the magnetization, susceptibility, and Binder's cumulant, evaluated at the critical temperature. As is clear

TABLE II. Square lattice: simulation results for the temperature of the susceptibility maximum, and for the susceptibility at  $T_c$ .

$L$	$T(\chi_{\max})$	$\chi(T_c)$
10	2.4770(4)	1.7894(4)
20	2.3720(1)	6.093(5)
40	2.3208(2)	20.44(8)
80	2.2949(2)	68.95(25)
120	2.2864(1)	139.5(8)
160	2.28196(14)	233.2(1.8)

TABLE III. Ising model, square lattice: simulation results for the temperature and the cumulant value at crossings of Binder's cumulant for pairs of successive system sizes.

$L, L'$	$T_x$	$Q_x$
10, 20	2.2635(1)	0.61372(10)
20, 40	2.2692(2)	0.61115(20)
40, 80	2.2689(4)	0.6115(10)
80, 120	2.2696(4)	0.6096(17)
120, 160	2.2693(5)	0.611(2)

from the figure, the uncertainties decrease systematically as we reduce the number of iterations; the relative uncertainty is roughly 5–10 times larger using 50 iterations as compared to only five. The inset, for  $m_c$ , illustrates the general trend: Despite the monotonic variation of the uncertainties, the estimates obtained using different values of  $N$  are mutually consistent.

### B. Ising model on the simple cubic lattice

The procedure is essentially the same as for the square lattice. We begin sampling at  $L = 4$ , using the simple initial guess for  $s(\rho)$  given in Eq. (6). Subsequently we study system sizes  $L = 8, 12, 16, 20, 24, 28, 32$ , and 36. The smaller increment in  $L$  (as compared with the two-dimensional case), is motivated by faster convergence, and by the need to study a reasonably large number of system sizes in the FSS analysis, which in this case includes a correction to scaling term.

The specific heat in the critical region is shown in Fig. 9; the relative uncertainty in these results is at most 0.5%. We estimate the critical temperature on the basis of  $T(c_{\max})$  and  $T(\chi_{\max})$  (see Fig. 10). Using the values of  $T(c_{\max})$  for  $L = 12$ –36, a quadratic least-squares fit versus  $1/L^{1/\nu}$  yields  $T_c = 4.5116(1)$ ; a similar analysis using  $T(\chi_{\max})$  yields  $T_c = 4.51116(1)$ ; [We use the literature value,  $\nu = 0.6301(8)$  [24].] These results are in good accord with the best estimate of  $T_c = 4.511528(6)$  [25]. The energy per site at the critical point,  $e_c(L)$ , is

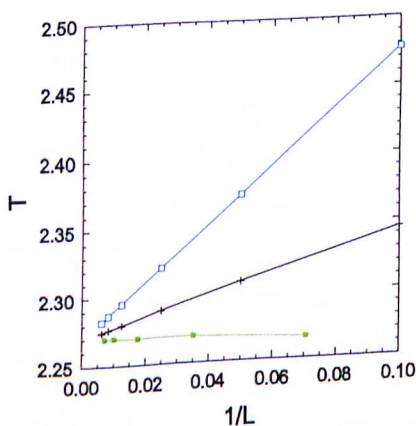


FIG. 7. (Color online) Two-dimensional Ising model: pseudocritical temperatures (upper to lower)  $T(\chi_{\max})$ ,  $T(c_{\max})$ , and  $T_x$  versus inverse system size. Error bars are smaller than the symbols.

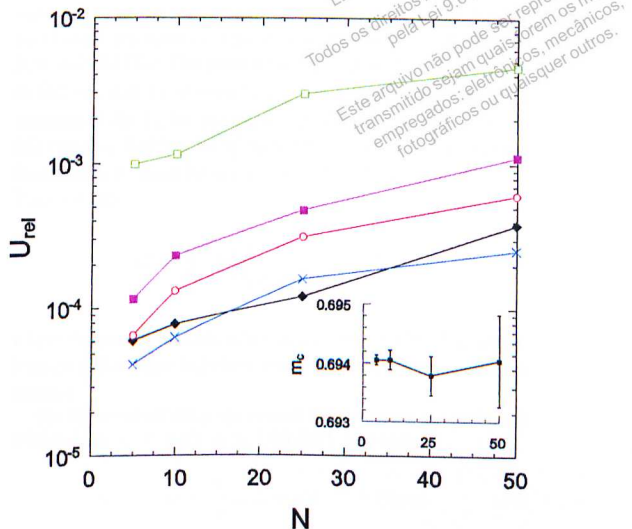


FIG. 8. (Color online) Relative uncertainties in  $T(c_{\max})$  (diamonds),  $T(\chi_{\max})$  ( $\times$ ),  $m_c$  (solid squares),  $\chi_c$  (open squares), and  $Q_c$  (circles) for  $L = 20$ , versus number of iterations  $N$ , in studies using a total of  $N \times N_{tr} = 5 \times 10^7$  lattice updates. (Inset) Estimates for  $m_c$  versus  $N$ .

essentially linear when plotted versus  $1/L^{1/\nu}$ ; extrapolation to infinite size yields  $e_c = -0.9928(2)$ , which compares well with the series-expansion estimate,  $e_c = -0.9922$  [26]. For each system size, the values of  $c_{\max}$  and  $T(c_{\max})$  associated with the antiferromagnetic critical point are fully consistent with the corresponding ferromagnetic values.

The critical specific heat, susceptibility, and magnetization are plotted versus system size (on log scales) in Fig. 11. In light of the slight curvature evident in these plots, and given the smaller system sizes used in the three-dimensional studies,

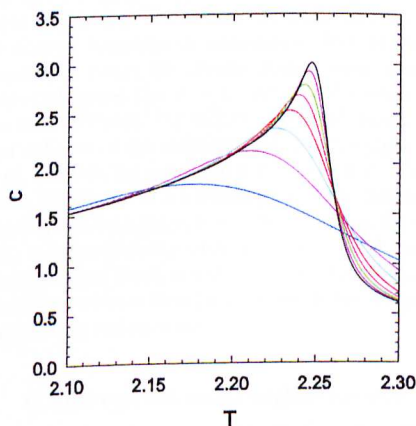


FIG. 9. (Color online) Ising model, simple cubic lattice: specific heat per site versus temperature for system sizes (lower to upper)  $L = 8, 12, 16, 20, 24, 28, 32$ , and 36.

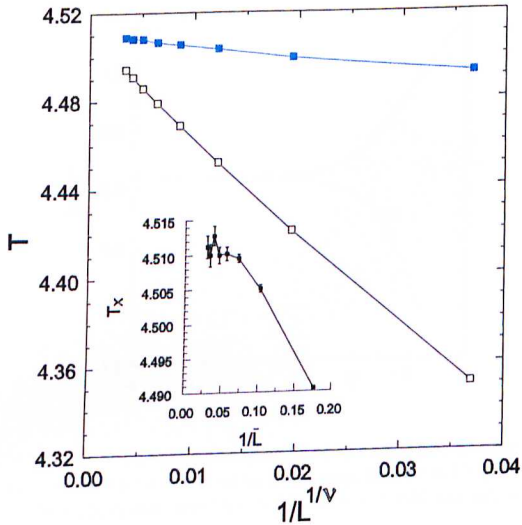


FIG. 10. (Color online) Ising model, simple cubic lattice: pseudocritical temperatures  $T(c_{\max})$  (lower) and  $T(\chi_{\max})$  (upper) versus  $1/L^{1/\nu}$ . (Inset) Temperatures  $T_{\chi}$  of Binder cumulant crossings versus  $1/\bar{L}$  (here  $\bar{L}$  denotes the geometric mean of the system sizes).

we found it useful to include a correction to scaling in the FSS analysis. For example, we fit the data for the magnetization at  $T_c$  using

$$\ln m(T_c, L) = -\frac{\beta}{\nu} \ln L + cL^{-\nu_i} + \text{Const.} \equiv f_L + \text{Const.}, \quad (12)$$

where  $\nu_i$ , the dominant irrelevant scaling exponent, is taken as 0.8. (Note that the constant term is not a fitting parameter, as we determine the values of  $\beta/\nu$  and  $c$  by minimizing the

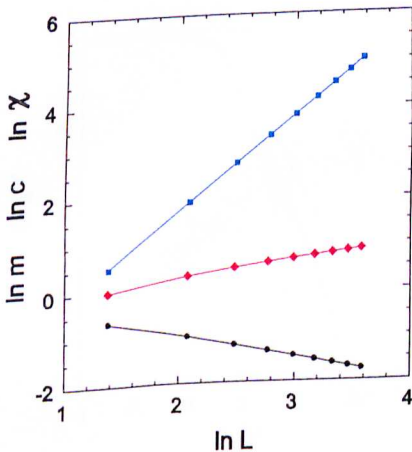


FIG. 11. (Color online) Ising model, simple cubic lattice: magnetization (lower), specific heat (middle), and susceptibility (upper) evaluated at the critical temperature versus system size. Error bars are smaller than symbols.

variance between the simulation data and  $f_L$ ). The best-fit parameters for system sizes  $L = 8-36$  are  $c = -0.064$  and  $\beta/\nu = 0.521(12)$ . The uncertainty  $\sigma_{\bar{\beta}}$  in  $\bar{\beta} \equiv \beta/\nu$  is calculated as follows. Let  $Y_L \equiv \ln m(T_c, L) - f_L$ , and let  $\sigma_Y^2$  denote the variance of the  $Y_L$  for parameters  $\bar{\beta}$  and  $c$  chosen to minimize this variance. Further, let  $\sigma_L^2$  denote the statistical uncertainty in the simulation result for  $\ln m(T_c, L)$ , and define  $\bar{\sigma}_L^2 \equiv \sigma_L^2 + \sigma_Y^2$ . Then we take

$$\sigma_{\bar{\beta}}^2 = \sum_L \bar{\sigma}_L^2 \left( \frac{\partial \bar{\beta}}{\partial \ln m(T_c, L)} \right)^2, \quad (13)$$

where the derivatives are determined numerically. The uncertainties in the other exponent ratios are estimated in a similar manner.

For the susceptibility, we expect the dominant correction to FSS to be  $\propto L^{-\nu_2}$  with  $\nu_2 \simeq 1.96$  [24], and write

$$\ln \chi(T_c, L) = \frac{\gamma}{\nu} \ln L + c' L^{-\nu_2} + \text{Const.} \quad (14)$$

In this case we find  $\gamma/\nu = 1.987(4)$ . [Using a correction to scaling term  $\propto 1/L$  we instead obtain  $\gamma/\nu = 1.955(11)$ .] A similar analysis of the specific heat data (for system sizes  $L = 12-36$ , using a correction term  $\propto L^{-\alpha/\nu}$ ) yields  $\alpha/\nu = 0.161(3)$ . Compared with the literature values [25],  $\beta/\nu = 0.519(2)$ ,  $\gamma/\nu = 1.963(3)$ , and  $\alpha/\nu = 0.174(4)$ , our results for exhibit errors of 0.4%, 1.2%, and 7.5%, respectively. (We note, however, that determination of  $\alpha/\nu$  via simulation is in general a difficult task.)

Extrapolation of the crossings of Binder's cumulant (see Fig. 10, inset), yields  $T_c = 4.5124(16)$ , which, while less precise than the estimates cited above, is consistent with the best estimate for the critical temperature. The asymptotic value of Binder's cumulant obtained from the crossings is  $Q_4 = 0.47(1)$ , while extrapolation of the cumulant values  $Q_4(T_c, L)$  yields 0.467(1). The reference value for the three-dimensional Ising model is  $Q_4 = 0.465(3)$  [24].

Entropic sampling is particularly advantageous for data collapse analyses, as it furnishes thermodynamic quantities as continuous functions of temperature. FSS predicts that magnetization curves for diverse system sizes should fall on universal curves (for  $T > T_c$  and  $T < T_c$ ) when plotted in the form  $L^{\beta/\nu} m(L^{1/\nu} |T - T_c|)$ . Figure 12 shows a near-perfect collapse of the magnetization data for eight system sizes ( $L = 8-36$ ); the associated exponents are  $\nu = 0.62$  and  $\beta/\nu = 0.512$ . Figure 13 is a similar plot for the susceptibility, again using  $\nu = 0.62$  and  $\gamma/\nu = 1.99$ . In this case the data for  $T > T_c$  collapse perfectly while those for  $T < T_c$  approach a common scaling function with increasing system size. (The downward curvature in these plots signals the low-temperature boundary of the scaling region.)

### C. Lattice gas with nearest-neighbor exclusion

We apply our entropic sampling to the lattice gas with nearest-neighbor exclusion (NNE) on the square lattice [22, 27, 28], using entropic sampling to estimate the number of distinct configurations  $\Omega(\mathcal{N}, L)$  with  $\mathcal{N}$  particles satisfying the NNE

RONALD DICKMAN AND A. G. CUNHA-NETTO

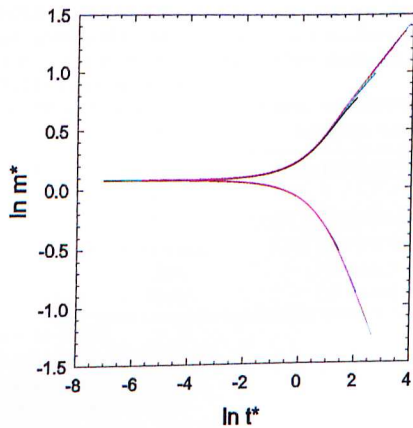


FIG. 12. (Color online) Ising model, simple cubic lattice: scaled magnetization  $m^* \equiv L^{\beta/\nu} m$  versus scaled temperature  $t^* = L^{1/\nu} |T - T_c|$  for eight system sizes ( $L = 8-36$ ), using  $\nu = 0.62$  and  $\beta/\nu = 0.512$ .

condition, on an  $L \times L$  lattice with periodic boundaries. The grand partition function is

$$\Xi(z, L) = \sum_{\mathcal{N}=0}^{\mathcal{N}_{\max}} z^{\mathcal{N}} \tilde{\Omega}(\mathcal{N}, L), \quad (15)$$

where  $z = e^{\mu}$  is the fugacity,  $\mu \equiv \hat{\mu}/k_B T$  ( $\hat{\mu}$  denotes the chemical potential), and  $\mathcal{N}_{\max}$  is the maximum possible number of particles, equal to  $L^2/2$  on the square lattice. (In what follows we refer to  $\mu$  as the chemical potential.) The model exhibits an Ising-like phase transition on bipartite lattices; in the ordered phase a majority of the particles occupy

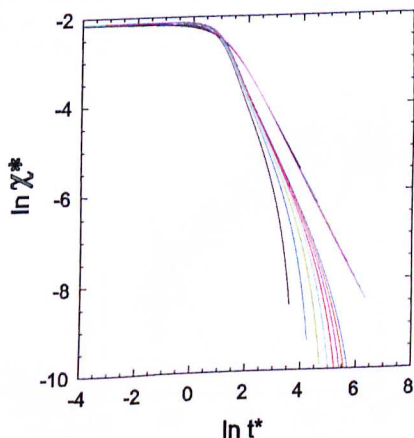


FIG. 13. (Color online) Ising model, simple cubic lattice: scaled susceptibility  $\chi^* \equiv L^{-\gamma/\nu} \chi$  versus scaled temperature  $t^* = L^{1/\nu} |T - T_c|$  for eight system sizes ( $L = 8-36$ ), using  $\nu = 0.62$  and  $\gamma/\nu = 1.99$ .

PHYSICAL REVIEW E 84, 026701 (2011)

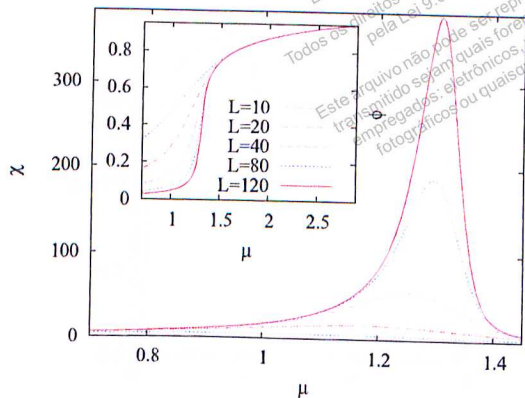


FIG. 14. (Color online) NNE lattice gas: susceptibility versus chemical potential. (Inset) Order parameter versus chemical potential; system sizes as indicated. Error bars are smaller than the symbols.

one of the sublattices. The associated order parameter is the difference between the occupancies of sublattices A and B:

$$\phi = \frac{1}{\mathcal{N}_{\max}} \left( \sum_{\mathbf{x} \in A} \sigma_{\mathbf{x}} - \sum_{\mathbf{x} \in B} \sigma_{\mathbf{x}} \right), \quad (16)$$

where  $\sigma_{\mathbf{x}}$  is the indicator variable for occupation of site  $\mathbf{x}$ .

We begin our study with a small system ( $L = 8$ ), using a flat initial distribution,  $\ln \Omega_0 = 0$ . Following the procedure described in Sec. II, we perform  $N = 5$  iterations, with increasing numbers of lattice updates [29]. We use 10 initial configurations at each iteration: five corresponding to an empty lattice, and five in which one sublattice is fully occupied. Here each trial move is either an insertion or a removal of a particle; target sites are chosen at random. For system sizes  $L' > 8$  we construct the initial guess for  $\tilde{\Omega}(\mathcal{N}, L')$  using a tenth-degree polynomial fit to  $s(\rho, L) = [\ln \tilde{\Omega}(\mathcal{N}, L)]/L^2$ , where  $L$  is the previous size studied and  $\rho = \mathcal{N}/L^2$ . We study six sizes in the range  $8 \leq L \leq 120$ .

Figure 14 shows the susceptibility,  $\chi(\mu) = L^2(\langle \phi^2 \rangle_{\mu} - \langle \phi \rangle_{\mu}^2)$ , as a function of the chemical potential for different system sizes; the inset is a similar plot of the order parameter. Estimates for the critical chemical potential  $\mu_c$  are obtained via analysis of the maxima of the susceptibility and of the compressibility,  $\kappa(\mu) = L^2(\langle \rho^2 \rangle_{\mu} - \langle \rho \rangle_{\mu}^2)/\langle \rho \rangle_{\mu}^2$ . Extrapolation versus  $1/L$  yields  $\mu_{c,\chi} = 1.3359(3)$  and  $\mu_{c,\kappa} = 1.344(2)$ . The former, more precise value, is about 0.14% higher than the literature value. FSS analysis of the susceptibility maxima yields  $\gamma/\nu = 1.750(2)$ , consistent with the exact value for the two-dimensional Ising model.

Using the high-precision result for the critical chemical potential obtained by Guo and Blöte [28],  $\mu_c = 1.33401510027774(1)$ , we calculate  $\rho_c(L)$ ,  $\phi_c(L)$ , and  $Q_c(L)$ , where  $Q = \langle \phi^2 \rangle / \langle \phi^4 \rangle$  is related to Binder's reduced cumulant [23]. Linear extrapolation of these quantities versus  $1/L$  yields  $\rho_c = 0.36773(1)$ ,  $\beta/\nu = 0.1247(3)$ , and  $Q_c = 0.8565(5)$ . These results are in very good agreement with the literature values [28,32]. [Using our own less accurate estimate,  $\mu_c = 1.3359(3)$  we obtain  $\beta/\nu = 0.122(2)$  and  $\rho_c = 0.36815(3)$ .] We summarize our main results for the

026701-8

TABLE IV. Critical values for the NNE lattice gas obtained via entropic sampling (ES) and WLS with adaptive windows (AW). The results of [31] were obtained via Monte Carlo simulation, those of [28,30,32] via transfer-matrix analysis.

	ES	AWWS [22]	Literature values
$\mu_{c,x}$	1.3359(3)	1.330(1)	1.33401510027774(1) <sup>a</sup>
$\mu_{c,x}$	1.344(2)	1.337(2)	
$Q_c$	0.8565(5) <sup>c</sup>	0.852(6)	0.856 <sup>b</sup> ; 0.855(1) <sup>f</sup> ; 0.85625(5) <sup>d</sup>
$\rho_c$	0.36773(1) <sup>e</sup>	0.36800(5) <sup>e</sup>	0.3677429990410(3) <sup>a</sup>
$\gamma/\nu$	1.750(2)	1.762(8)	7/4 (exact)
$\beta/\nu$	0.1247(3) <sup>e</sup>	0.123(2) <sup>e</sup>	1/8 (exact)

<sup>a</sup>Guo and Blöte [28].

<sup>b</sup>Burkhardt and Derrida [30].

<sup>c</sup>Nicolaides and Bruce [31].

<sup>d</sup>Kamieniarz and Blöte [32].

<sup>e</sup>Values obtained using  $\mu_c$  from [28].

<sup>f</sup>Using our best value for  $\mu_c$  we obtain  $\beta/\nu = 0.122(2)$ ,  $\rho_c = 0.36815(3)$  while the AW study yields  $\beta/\nu = 0.130(9)$  and  $\rho_c = 0.3675(5)$ .

lattice gas and compare them with reference values in Table IV.

#### D. Critical singularity of the entropy density

The critical point corresponds to a value of  $\rho$  such that, in the thermodynamic limit, the second derivative  $s'' \equiv d^2s/d\rho^2 = 0$ . Since direct estimation of the second derivative of numerical data via finite differences is not a viable procedure, we instead use a Gaussian filter,

$$s''(\rho; \sigma) = \int_0^2 d\rho' s(\rho') g''(\rho - \rho'; \sigma), \quad (17)$$

where  $g(\rho; \sigma)$  is a normalized Gaussian distribution with mean zero and standard deviation  $\sigma$ . [The filter width  $\sigma$  is chosen large enough to suppress fluctuations but small enough to maintain resolution; it ranges from about  $5\Delta\rho$  for  $L = 20$  to about  $50\Delta\rho$  for  $L = 160$ , where  $\Delta\rho = 1/(2L^2)$  is the bond density increment.] Figure 15, for the square lattice,

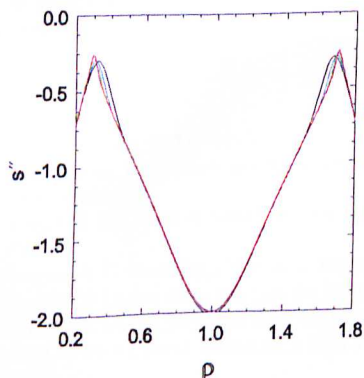


FIG. 15. (Color online) Ising model, square lattice:  $s''(\rho)$  versus  $\rho$  for system sizes  $L = 20, 40, 80, 120$ , and  $160$ . The minimum in  $|s''|$  grows sharper with increasing system size.

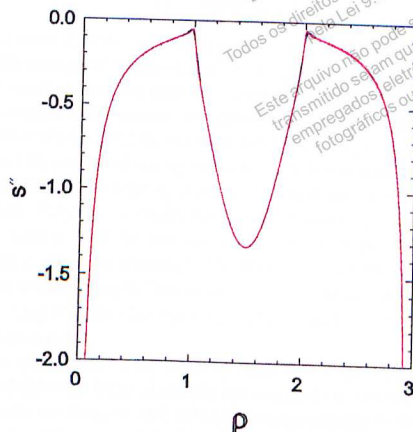


FIG. 16. (Color online) Ising model, simple cubic lattice:  $s''(\rho)$  versus  $\rho = n/L^3$  for system sizes  $L = 16, 24$ , and  $32$ . The three curves are indistinguishable at this scale.

shows that  $|s''|$  exhibits a sharp minimum, which appears to approach zero as  $L$  increases. The minimum near  $\rho = 1.7$  corresponds to the ferromagnetic transition; note that the expected (infinite-size) value is  $\rho_c = 1 - e_c/2 = 1 + 1/\sqrt{2} = 1.707107\dots$ . The minimum near  $\rho = 0.3$  corresponds to the antiferromagnetic critical point. Figures 16 and 17 are similar plots for the Ising model on the simple cubic lattice (for which  $\rho_c = (3 - e_c)/2 \simeq 1.997$ ), and the NNE lattice gas, respectively.

#### E. A note on restricted sampling

Our method, as noted, samples the entire range of energies, and while this is advantageous in some circumstances, one might inquire whether the sampling might be restricted or at least concentrated in a region of particular interest, for example, to those energies that occur with a significant

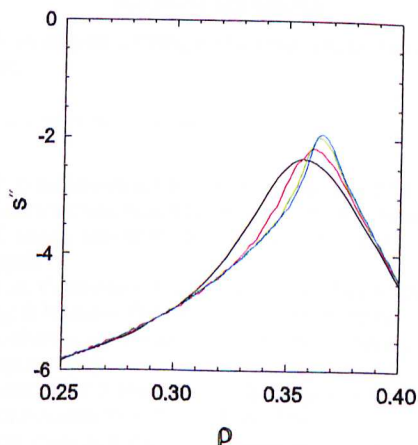


FIG. 17. (Color online) NNE lattice gas, square lattice:  $s''(\rho)$  versus  $\rho = N/L^2$  for system sizes  $L = 20, 40, 80$ , and  $120$ .

probability in the critical region. In Wang-Landau sampling, imposing fixed limits on the sampling range has been found to distort the estimates for  $\Omega(E)$  in certain cases [10,22]. We therefore consider a *smooth* preference in sampling, in which the acceptance probability, Eq. (2), is modified so

$$p_a(C') = \min \left[ \frac{\Omega(E)f(E)}{\Omega(E')f(E')}, 1 \right]. \quad (18)$$

Now the probability of visiting energy level  $E$  is  $\propto 1/f(E)$ , and the formula for updating  $\Omega(E)$  becomes

$$\Omega_{j+1}(E) = \frac{H_j(E)}{H_j} f(E) \Omega_j(E). \quad (19)$$

In principle, one can penalize visits to “uninteresting” regions using larger values of  $f$ , which are then compensated for in the modified updating formula. Since a greater fraction of the sampling occurs in the region of interest, one expects to obtain better statistics there, for the same total number of lattice updates.

We set  $f = 1$  in the region of interest, that is, for  $n \geq n_{\min}$ . In one series of studies,  $f = \exp[\alpha(n_{\min} - n)]$  for  $n < n_{\min}$ , while in the second we set  $f = \exp[\alpha(n_{\min} - n)^2]$ . Here  $\alpha$  is a parameter that controls the sharpness of the cutoff in sampling. In the linear case, using  $n_{\min} \approx L^2$  (i.e., half the maximum bond number), and  $\alpha$  in the range 0.1–0.5, we obtain distributions  $\Omega(n)$  (for  $L = 40$  and  $80$ ), that differ significantly from those obtained with uniform sampling, even on the region with  $f = 1$ . In the second set of studies we chose  $\alpha$  such that  $f(n = 0) = e^{-5} \simeq 0.007$ ;  $f$  grows quite slowly in the vicinity of  $n_{\min}$ . In this case the estimated number of configurations does not exhibit obvious distortions, but we find that the susceptibility and specific heat, evaluated near  $T_c$ , are significantly greater than the values obtained with uniform sampling. The relative differences grow with the system size. For example, the maximum susceptibility  $\chi_{\max}$  is found to be 0.6% (1%) higher than that obtained using unrestricted sampling, for  $L = 40$  (80). This occurs despite the fact that at  $T_c$ , the probability  $e^{-\beta E} \Omega(E)$  associated with bond numbers  $n \leq n_{\min}$  is  $\leq 10^{-30}$ , so that the contribution to thermal averages due to this range of  $n$  values is completely negligible. We conclude that restricting sampling in this manner does not improve the quality of the results, and in fact appears to cause systematic errors in thermal averages.

#### IV. SUMMARY

We have devised an entropic sampling method that covers the entire range of energies, and yields results of good precision for a modest expenditure of computer time. For the two-dimensional Ising model, we obtain the critical temperature to within about 0.01%, the exponent ratios  $\gamma/\nu$  and  $\beta/\nu$  to within 1%, and excellent agreement with theoretical results for the position and value of the specific heat and susceptibility maxima. Very good results for the Ising model on the simple cubic lattice, and for the lattice gas with nearest-neighbor exclusion, are also obtained. The method is relatively simple, and avoids sampling in “windows” with the attendant problems of patching together the results, and of possible distortions at the boundaries.

The sizes used in the present study are relatively modest, and indeed very large sizes are not required to obtain precise results for the Ising model. (One benchmark study of the three-dimensional Ising model [24], for example, uses  $L \leq 40$ . As the latter work illustrates, precise results for a large set of modest system sizes, coupled with finite-size scaling analysis, may be just as useful as simulations of much larger systems.) In the present study we observe a reduction in quality (as reflected in the relative uncertainty of thermodynamic variables), with increasing system size. We believe that an enriched set of initial configurations, permitting more thorough sampling of configuration space, will help to maintain precision as one increases the system size. This is an important issue for future work.

Key features of our *tomographic* sampling method are as follows: pooling results starting from very different initial configurations before updating the estimate for  $\Omega$ , and using the results for a given system size to generate an initial estimate for the next larger size. The method furnishes globally accurate results, as well as precise estimates for critical properties, using a single set of parameter-free simulations, thereby opening new possibilities for the application of entropic sampling.

#### ACKNOWLEDGMENTS

We are grateful to CNPq and Fapemig (Brazil) for financial support.

- 
- [1] J. Lee, Phys. Rev. Lett. **71**, 211 (1993).
  - [2] P. M. C. de Oliveira, T. J. P. Penna, and H. J. Herrmann, Braz. J. Phys. **26**, 677 (1996).
  - [3] J.-S. Wang, T. K. Tay, and R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **82**, 476 (1999).
  - [4] J.-S. Wang and R. H. Swendsen, J. Stat. Phys. **106**, 245 (2002).
  - [5] F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
  - [6] F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
  - [7] B. J. Schulz, K. Binder, and M. Müller, Int. J. Mod. Phys. C **13**, 477 (2002).
  - [8] B. J. Schulz, K. Binder, M. Müller, and D. P. Landau, Phys. Rev. E **67**, 067102 (2003).
  - [9] R. E. Belardinelli and V. D. Pereyra, Phys. Rev. E **75**, 046701 (2007); J. Chem. Phys. **127**, 184105 (2007); R. E. Belardinelli, S. Manzi, and V. D. Pereyra, Phys. Rev. E **78**, 067701 (2008).
  - [10] A. G. Cunha-Netto, A. A. Caparica, S.-H. Tsai, R. Dickman, and D. P. Landau, Phys. Rev. E **78**, 055701(R) (2008).
  - [11] A. Malakis, A. Peratzakis, and N. G. Fytas, Phys. Rev. E **70**, 066128 (2004).
  - [12] A. Malakis, S. S. Martinos, I. A. Hadjiagapiou, N. G. Fytas, and P. Kalozounis, Phys. Rev. E **72**, 066120 (2005).
  - [13] N. G. Fytas, A. Malakis, and I. Georgiou, J. Stat. Mech. **2008**, L07001 (2008).

- [14] A. Malakis, A. N. Berker, I. A. Hadjiagapiou, and N. G. Fytas, *Phys. Rev. E* **79**, 011125 (2009).
- [15] A. Malakis, A. N. Berker, I. A. Hadjiagapiou, N. G. Fytas, and T. Papakonstantinou, *Phys. Rev. E* **81**, 041113 (2010).
- [16] By a “lattice update” we mean one attempted spin flip per site, or  $L^d$  attempts, using a single-spin-flip algorithm.
- [17] M. E. Fisher, in *Proceedings of the Enrico Fermi International School of Physics*, Vol. 51, edited by M. S. Green (Academic Press, Varenna, 1971); M. E. Fisher and M. N. Barber, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 1516 (1972).
- [18] M. N. Barber, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 8, edited by C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic Press, New York, 1983).
- [19] A. E. Ferdinand and M. E. Fisher, *Phys. Rev.* **185**, 832 (1969).
- [20] J. Salas, *J. Phys. A* **34**, 1311 (2001).
- [21] H. A. Kramers and G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **60**, 252 (1941).
- [22] A. G. Cunha-Netto and R. Dickman, *Comput. Phys. Commun.* **182**, 719 (2011).
- [23] K. Binder, *Z. Phys. B* **43**, 119 (1981).
- [24] H. W. J. Blöte, E. Luijten, and J. R. Heringa, *J. Phys. A: Math. Gen.* **28**, 6289 (1995).
- [25] A. L. Talapov and H. W. J. Blöte, *J. Phys. A: Math. Gen.* **29**, 5727 (1996).
- [26] M. F. Sykes *et al.*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **5**, 640 (1972).
- [27] L. K. Runnels, *Phys. Rev. Lett.* **15**, 581 (1965).
- [28] W. Guo and H. W. J. Blöte, *Phys. Rev. E* **66**, 046140 (2002).
- [29] We use  $N_U = 2n \times 10^6$  at the  $n$ th iteration.
- [30] T. W. Burkhardt and B. Derrida, *Phys. Rev. B* **32**, 7273 (1985).
- [31] D. Nicolaiades and A. D. Bruce, *J. Phys. A: Math. Gen.* **21**, 223 (1988).
- [32] G. Kamieniarz and H. W. J. Blöte, *J. Phys. A: Math. Gen.* **26**, 201 (1993).