Дальневосточный математический журнал. 2017. Т. 17. № 1. С. 124–130

УДК 004.021
MSC2010 68Q87, 68W10

© К. В. Шаповалова[1], В. Ю. Капитан[1], А. Г. Макаров[1], Ю. А. Шевченко[1], К. В. Нефедев[1]

Методы канонического и мультиканонического семплирования пространства состояний векторных моделей

В работе представлены методы для численных расчетов термодинамических свойств векторных моделей. К наиболее популярным благодаря скорости и простоте реализации канонического семплирования относится алгоритм Метрополиса. Методы мультиканонического моделирования: алгоритм репличного обмена и метод семплирования Ванга – Ландау — позволяют преодолеть недостатки метода канонического моделирования.

Ключевые слова: *Алгорим Метрополиса, реплично-обменные алгоритмы Монте-Карло, алгоритм Ванга – Ландау.*

Введение

Компьютерное моделирование и численные расчеты являются неотъемлемыми инструментами исследователей в современной теоретической физике, математике и множестве других наук. Моделирование физической природы, или "численный эксперимент", в настоящее время широко используется как теоретиками, так и экспериментаторами. Компьютерные методы находят все более широкое применение в естественных науках, таких как статистическая физика и физика конденсированных систем, физика твердого тела и квантовая механика, физика фракталов и хаотических явлений, а также социальных, экономических и других науках, что позволило получить совершенно новые результаты и рассмотреть классы задач, ранее традиционно относимых к нерешаемым. Для решения сложных задач, не поддающихся теоретическому анализу, были созданы и применены специфические подходы, алгоритмы и методы, что позволило значительно ускорить получение конечных результатов.

[1] Дальневосточный федеральный университет, 690950, г. Владивосток, ул. Суханова, 8; Институт прикладной математики ДВО РАН, 690041, г. Владивосток, ул. Радио, 7.
Электронная почта: shapovalova.kv@students.dvfu.ru (К. В. Шаповалова).

1. Алгоритм Метрополиса

Алгоритм Метрополиса [1] чаще всего употребляется и является универсальным в такой области, как исследование свойств термодинамических систем. Он обладает свойствами хорошей масштабируемости при параллельных вычислениях и возможностью повышения точности вычислений.

Классический алгоритм Метрополиса [2] реализуется в три этапа:

1) Выбираем систему N взаимодействующих тел, например, спинов или магнитных моментов, и фиксируем ее состояние.

2) Фиксируем температуру. Выбираем случайный спин в системе, переворачиваем его и вычисляем энергию данной системы, например, по формуле

$$E = -\sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j.$$

Если энергия системы уменьшилась после переворота, событие считается достоверным, переворот принимается. Если энергия системы увеличилась после переворота, то принимаем изменение с вероятностью $e^{-\Delta E/k_B T}$.

3) Повторяем шаг (2) до достижения равновесия.

Возможность параллельной алгоритмизации метода Метрополиса заключается в том, что вычисления для каждого значения температуры проводятся одновременно на отдельных ядрах суперкомпьютерного кластера, поэтому время расчета не зависит от шага по шкале температуры.

Другой вариант распараллеливания состоит в следующем: проход по системе спинов и выполнение МК шагов производится в “шахматном порядке”. Это делается с целью учета граничных условий вычисляемых конфигураций. В течение МК операций с частью массива первоначальные значения соседей обрабатываемого спина не изменяются, т.е. для каждого шага температуры или поля половина МК шагов делается сначала для одной половины спинов, а затем для второй половины.

Вычисление свойств осложняется наличием больших флуктуаций в системе вблизи критической температуры T_c. Значения теплоемкости и магнитной восприимчивости с достаточной степенью точности могут быть получены методом оценки стандартного отклонения в статистической термодинамике.

2. Репличный Монте-Карло обмен

Начало развитию метода репличного обмена, или так называемого “параллельного отжига”, в 1986 году положила работа Свидсена и Ванга [3]. В этой работе был предложен репличный метод Монте-Карло, в котором конфигурации реплик (копий) одной и той же моделируемой системы исследуются на предмет расчета термодинамических средних при разной температуре. Реплики являются ”отжигаемыми” при близких температурах, отличающихся на небольшую величину δT. Реплики для соседних температур частично обмениваются информацией о своих конфигурациях.

Более знакомая форма параллельного отжига с полным обменом конфигурационной информации была сформулирована Гейером в 1991 году [4].

Метод параллельного отжига (от англ. Parallel Tempering) заключается в мультиканоническом семплировании нескольких копий системы (реплик) при разных температурах [5]. Для решения проблемы критического замедления, соседние по температуре реплики обмениваются своими конфигурациями с вероятностью

$$P_{\text{обмена}} = \min(1,\ \exp\left[-\frac{\Delta E}{\Delta T}\right]),$$

где ΔT — разница температур соседних реплик, ΔE — разница энергий конфигураций, участвующих в обмене. Число реплик и соответствующие значения температур подбираются в зависимости от конкретной задачи и вычислительных возможностей.

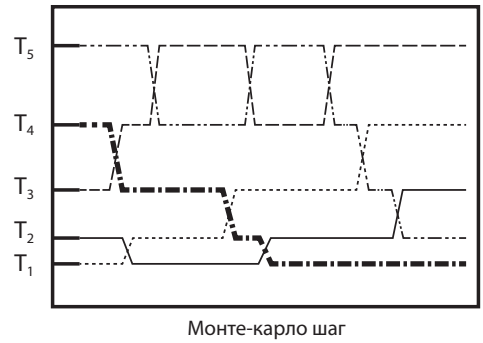

Рис. 1. Схематичное представление процесса обмена репликами в алгоритме параллельного отжига на примере 5 реплик.

На рис. 1 изображена схема обмена конфигурациями для 5 различных реплик с соответствующими температурами $T_i, i \in 1,2,3,4,5$. Начальная конфигурация реплики 4 в результате работы алгоритма стала обрабатываться при T_1. В последовательном алгоритме, работающем при $T = T_1$, для стабилизации системы потребовалось бы значительно большее число шагов.

Параллельный отжиг позволяет за меньшее число шагов провести семплирование сразу для набора различных температур. Алгоритм может быть реализован в виде параллельного суперкомпьютерного кода с использованием интерфейса обмена сообщениями между процессами MPI.

3. Алгоритм Ванга – Ландау

По правилам статистической механики для строгого расчета термодинамических параметров в состоянии равновесия необходимо вычислить статистическую сумму Z. Но это возможно только при наличии информации обо всех 2^N состояниях. Очевидно, что получение такой информации для больших систем требует колоссальных

ресурсов, и поэтому оно возможно только для небольшого числа частиц. Для больших систем можно использовать приближенные статистические методы. Одним из таких методов является алгоритм Ванга – Ландау [6] и его параллельная реализация (ВЛ) [7, 8].

В оригинальной работе Ф. Ванга и Д. П. Ландау [6] предложен следующий алгоритм, который для определённости будем применять для получения плотности состояний модели Изинга. Процесс инициализации алгоритма Ванга – Ландау состоит из следующих шагов (на основе описания, данного в работе Л.Н. Щура [9]):

1) задаётся начальное состояние значений спинов S_i ;

2) вычисляется значение энергии начального состояния E_0;

3) присваиваются начальные значения плотности состояний $\mathrm{g}(E) = 1$ для всех значений энергии E;

4) устанавливаются начальные значения вспомогательной гистограммы $H(E) = 0$ для всех значений E;

5) фиксируется начальное значение параметра $f = 2.718281828$.

Основной цикл алгоритма таков:

1) выбирается случайно спин S_i (для этого выбирается случайно узел i на решётке);

2) вычисляется энергия E_{k+1} нового состояния решётки с (виртуально) перевёрнутым спином $S_i \to \breve{}S_i$;

3) если $\mathrm{g}(E_{k+1}) < \mathrm{g}(E_k)$, то принимается новое состояние;

4) если нет, то принимается новое состояние с вероятностью $\mathrm{g}(E_k)/\mathrm{g}(E_{k+1})$;

5) если не произошло событий 4 и 5, то состояние остаётся неизменённым.

Основной цикл алгоритма повторяется MN раз, где N — это число спинов в системе; M — параметр алгоритма, некоторое большое число, имеющее значение, например, 10^4. После этого проверяется свойство «ровности» диаграммы. Эмпирически предлагается повторять процесс до тех пор, пока элементы вспомогательного алгоритма будут отличаться не более чем на 5% . Если гистограмма недостаточно "ровная", то шаги основного цикла 1—5 повторяются ещё MN раз.

Если желаемый уровень "ровности" диаграммы достигнут, то делаются такие операции нормировки:

1) нормируются значения плотности состояний $\mathrm{g}(E)$ для всех значений энергии E так, чтобы была выполнена нормировка на единицу значения плотности состояний энергии основного состояния моделируемой системы $\mathrm{g}(E_{\mathrm{gs}}) = 1$;

2) устанавливаются значения вспомогательной гистограммы $H(E) = 0$ для всех значений E;

3) изменяется текущее значение параметра $f = \sqrt{f}$.

Процессы основного цикла и нормировки повторяем до тех пор, пока значение параметра f не приблизится (близко) к 1, например $logf = 10^{-9}$.

Принятие нового состояния на этапах основного цикла 3 и 4 осуществляется следующим образом:

1) переворот спина $S_i = -S_i$;

2) изменение значения DoS с текущим значением E_{k+1} энергии системы, $\mathrm{g}(E_{k+1}) = f\mathrm{g}(E_{k+1})$;

3) изменение значения вспомогательной гистограммы $H(E_{k+1}) = H(E_{k+1}) + 1$.

Новое состояние не принимается на шаге 5 выполнением следующих действий:

1) изменение значения DoS с текущим значением E_k энергии системы, $\mathrm{g}(E_k) = f\mathrm{g}(E_k)$;

2) изменение значения вспомогательной гистограммы $H(E_k) = H(E_k) + 1$.

Термодинамическое среднее значение энергии при известном распределении $\mathrm{g}(E)$ вычисляется как

$$< E > (T) = \sum_{i=1}^{2^N} \mathrm{g}(E_i) \frac{\exp\{-\frac{E_i}{k_B T}\}}{Z},$$

где нормировочный коэффициент, или статистическая сумма,

$$Z = \sum_{i=1}^{2^N} \exp\{-\frac{E_i}{k_B T}\}.$$

Для построения гистограмм требуется предварительно выполнить оценки энергетических границ E_{min} (основное состояние) и E_{max}.

Для определения кратности вырождения требуется проверять на предмет повторения энергию текущей конфигурации системы. Очень важно учитывать в рамках ВЛ-семплирования специфику работы с машинными числами. Сравнение двух одинаковых машинных чисел с плавающей точкой чаще всего будет работать неверно. Каждая энергия будет иметь единичное, или в лучшем случае, двукратное вырождение, и число элементов гистограммы будет очень большим.

Для решения этой проблемы мы разделяем энергетическое пространство между E_{min} и E_{max} на интервалы, минимальное число которых было нами оценено для достижения сходимости данных численных экспериментов. Уменьшение числа интервалов может негативно повлиять на точность результатов, а увеличение — на стремительное удорожание расчетов. Величина выбранного интервала $\triangle E$ должна быть достаточно большой, чтобы адекватно отображать энергии и запрещенные зоны возле них вблизи минимума, и в то же время не бесконечно малой, чтобы не превысить предел вычислительной точности и объем доступной вычислителю памяти. При увеличении числа интервалов закономерно увеличивается число слагаемых в Z и возрастает сложность численного дифференцирования.

Заключение

Для решения современных задач в области статистической физики необходимо применение методов, которые обладают такими свойствами, как хорошее масштабирование при параллельных вычислениях, возможность повышения точности вычислений, а также возможность преодоления критического замедления и т.д.

Рассмотренный метод Метрополиса обладает свойствами масштабируемости при параллельных вычислениях и возможностью повышения точности вычислений. Однако его применение становится затруднительным в критической области — области вблизи фазового перехода. В случае фазового перехода второго рода метод Метрополиса проявляет свойства критического замедления, т.е. замедления скорости вычислений, что делает его применение затруднительным для систем большого размера.

Для ускорения расчетов и моделирования систем больших размеров для решения задач, связанных с решеточными, может быть широко использован параллельный метод Ванга – Ландау. Этот метод используется для вычисления плотности энергетических состояний. А, в свою очередь, при известной плотности состояний становятся доступными для вычисления такие температурные характеристики, как энтропия, средняя энергия, флуктуация средней энергии, теплоемкость, магнитная восприимчивость. Кроме того, скорость работы параллельного метода, в отличие от последовательного, мало зависит от типа, длины взаимодействия и количества элементов в системе. При корректном выборе параметров моделирования метод имеет высокие точностные характеристики.

Список литературы

[1] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, "Equation of state calculations by fast computing machines", *The journal of chemical physics*, **21**:6, (1953), 1087–1092.

[2] D. P. Landau, K. Binder, *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*, Cambridge Univ. Press, 2000, 384 pp.

[3] R. Swendsen and J. Wang, "Replica Monte Carlo Simulation of Spin-Glasses", *Physical review letters*, **57**:21, (1986), 2607.

[4] C. J. Geyer, "Markov chain Monte Carlo maximum likelihood", *Interface Foundation of North America*, 1991.

[5] D. J. Earl and M. W. Deem, "Parallel tempering: Theory, applications, and new perspectives", *Physical Chemistry Chemical Physics*, **7**, (2005), 3910.

[6] F. Wang and D. P. Landau, "Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states", *Physical review letters*, **86**:10, (2001), 2050.

[7] T. Vogel, Y. W. Li, T. W'ust, D. P. Landau, "Generic, hierarchical framework for massively parallel Wang-Landau sampling", *Physical review letters*, **110**:21, (2013), 210603.

[8] T. Vogel, Y. W. Li, T. W'ust and D. P. Landau, "Scalable replica-exchange framework for Wang-Landau sampling", *Physical Review E*, **90**:2, (2014), 023302.

[9] L. Shchur, "Wang-Landau algorithm: random walking on the energy spectrum",

Computational technologies in the natural sciences: methods of supercomputer modeling, ed. R. R. Nazirova, L. N. Shchura, M.: IKI RAS, 2014, 160–166.

Поступила в редакцию
10 мая 2017 г.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 16-32-00202 мол_а).

Shapovalova K. V., Kapitan V. Yu, Makarov A. G, Shevchenko Yu. A., Nefedev K. V. Methods of canonical and multicanonical sempling of phase space of vector models. *Far Eastern Mathematical Journal.* 2017. V. 17. No 1. P. 124–130.

ABSTRACT

Methods for numerical calculations of the thermodynamic properties of vector models were presented in the paper. The most popular because of the speed and simplicity of the implementation of canonical sampling is the Metropolis algorithm. Methods of multi-canonical simulation: parallel tempering, also known as replica exchange MC and the Wang-Landau method allow to overcome the shortcomings of the method of canonical modeling.

Key words: *Metropolis algorithm, Wang-Landau method, Parallel tempering.*