

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский университет
«Высшая школа экономики»

На правах рукописи

Фадеева Марина Александровна

Исследование свойств алгоритма Ванга-Ландау

РЕЗЮМЕ ДИССЕРТАЦИИ

на соискание ученой степени кандидата наук по прикладной математике

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук
профессор Щур Лев Николаевич

Москва – 2023

Постановка задачи

Актуальность исследования

В последние годы высокопроизводительные вычисления приобретают все большую роль как в научных задачах, так и в практических приложениях. Эти вычисления проводятся наиболее эффективно на гибридных суперкомпьютерных системах. Особую роль при этом приобретает развитие алгоритмов и методов моделирования, которые позволяют использовать всю мощь гибридных высокопроизводительных вычислительных систем. Одним из перспективных подходов для задач моделирования является метод прямого вычисления плотности состояний, получивший название метод Ванга-Ландау. Этот метод применим для широкого класса задач - физики полимеров, в спиновых системах, а также в задачах оптимизации. Метод, несмотря на широкое его применение (более 3 тысяч цитирований оригинальной статьи [1] на Google Academy), в предложенном в оригинальной статье виде обладает ограниченной точностью. Исследование точности и применимости этого метода для решения задач на высокопроизводительных вычислительных системах является несомненно актуальной проблемой. Таким образом, проект междисциплинарный – развитие методов вычислений и применения разработанных подходов и алгоритмов для проверки теоретических гипотез статистической физики.

Цель

Разработка новых методов исследования вычислительных проблем статистической физики.

Задачи исследования

- Разработать численный метод исследования задач статистической физики с контролируемой точностью.
- Провести оценку времени туннелирования и времени перемешивания в алгоритме Ванга-Ландау.
- Разработать параллельный алгоритм с контролируемой точностью для метода Ванга-Ландау.
- Применение разработанной модификации алгоритма для изучения моделей статистической механики.

Степень разработанности темы исследования

В статистической механике важную роль в исследовании свойств различных систем играет статистическая сумма. Это функция от термодинамических величин, описывающая систему в состоянии термодинамического равновесия. В большом каноническом ансамбле она имеет вид

$$Z = \sum_j e^{-E_j/k_B T} \quad (1)$$

Здесь $E_i = \mathcal{H}(X_i)$ гамильтониан или энергия системы, которая описывает состояние системы, находящейся в конфигурации X_i ; k_B - константа Больцмана; T - температура. Термодинамические функции можно найти из функции статсуммы и ее производных. Для систем с малым числом взаимодействующих частиц статсумма может быть вычислена аналитически, однако даже для системы состоящей из N элементов, каждый из которых может принимать два значения, количество всевозможных конфигураций растет как 2^N , соответственно вычислительная задача становится крайне сложной, поэтому на практике используют методы для численного приближения статистической суммы.

К таким методам относятся алгоритмы семейства Монте-Карло, которые основаны на различных представлениях статистической суммы. Каждому представлению статистической суммы можно сопоставить численный алгоритм для ее вычисления.

Каноническая запись (1) статистической суммы используется в первом методе семейства Монте-Карло, в алгоритме Метрополиса [2]. Этот алгоритм относится к классу методов Монте-Карло с марковскими цепями. Новое состояние системы X_m генерируется из предыдущего состояния X_k с использованием вероятности перехода, которая зависит от разности энергий между начальным и конечным состоянием $\Delta E_{km} = E(X_m) - E(X_k)$. Здесь $E(X_m)$ - энергия, соответствующая конфигурации X_m , а $E(X_k)$ - энергия, соответствующая конфигурации X_k . Вероятность перехода в новое состояние определяется вероятностью Метрополиса

$$P = \min[1, e^{\Delta E_{km}/k_B T}] \quad (2)$$

Алгоритм MuCa (multicanonical Monte-Carlo) основан на микроканоническом представлении статистической суммы

$$Z = \sum_k^{N_E} g(E_k) W(E_k), \quad (3)$$

где $g(E_k)$ количество конфигураций системы с энергией E_k , $W(E_k)$ - весовая функция, определяемая в ходе вычислений.

Кластерное представление статистической суммы [3]

$$Z = \sum_{bonds} p^b (1-p)^n q^{N_c} \quad (4)$$

дает возможность ввести алгоритмы Вольфа [4] и Свендсена-Ванга [5]. Выше $p = 1 - \exp^{-J/k_B T}$, J - константа взаимодействия между элементами системы; N_c - количество кластеров, q - количество компонент в системе.

Алгоритм Ванга-Ландау

Алгоритм Ванга-Ландау основан на микроканоническом представлении статистической суммы. Он был предложен в 2001 году и изложен в статьях [1, 6]. Он дает возможность непосредственного вычисления плотности состояний системы. Алгоритм применим для любой дискретной системы, которую можно описать конечным набором конфигурационных состояний $\mathbf{X} = X_1, X_2, \dots, X_m$. Каждой конфигурации соответствует свой уровень энергии $E(X_i)$. Для таких систем в записи статистической суммы можно перейти от суммы по конфигурациям к сумме по уровням энергии:

$$Z = \sum_j e^{-E_j/k_B T} = \sum_{E_n} g(E_n) e^{-E_n/k_B T}, \quad (5)$$

где k_B - константа Больцмана, T - температура. Функция $g(E_n)$ называется плотностью состояний (DoS - density of states) системы - это количество конфигураций системы, имеющих энергию E_n . Так как $g(E_n)$ не зависит от температуры, то такое представление статистической суммы дает возможность вычислить, например, свободную энергию и теплоемкость при любом значении температуры

$$E(\beta) = \langle E \rangle = \frac{\sum_{i=0}^{N_E} E_i g(E_i) e^{-\beta E_i}}{\sum_{i=0}^{N_E} g(E_i) e^{-\beta E_i}}, \quad (6)$$

$$C(\beta) = \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2). \quad (7)$$

Вычисление DoS производится путем случайного блуждания с вероятностью Ванга-Ландау по спектру энергии системы. В процессе блуждания накапливаются две гистограммы [1]. Первая - это текущее значение логарифма плотности состояний $S(E) = \log(g(E))$. Вторая - это вспомогательная гистограмма $H(E)$, в которую заносится информация о количестве посещений каждого энергетического уровня. На старте алгоритма $H(E)$ инициализируется нулями, а $S(E)$ - единицами. Задается начальная конфигурация системы, и вычисляется ее энергия E_k . Задается начальное значение параметра $f = \exp(1)$. Дальнейшие шаги алгоритма устроены следующим образом: 1) состояние системы изменяется и вычисляется энергия нового состояния E_m ; 2) переход из состояния с энергией E_k в состояние с энергией E_m происходит с вероятностью Ванга-Ландау:

$$P_{WL}(E_k, E_m) = \min \left(1, \frac{\tilde{S}(E_k)}{\tilde{S}(E_m)} \right), \quad (8)$$

где используется текущая оценка значения $\tilde{S}(E_k) = \log(\tilde{g}(E_k))$. Следующим шагом происходит обновление вспомогательной гистограммы $H(E_k) \rightarrow H(E_k) + 1$, и текущей оценки $\tilde{S}(E_k) \rightarrow \tilde{S}(E_k)f$. Шаг 1 и 2 повторяются до тех пор, пока гистограмма $H(E_k)$ не станет достаточно “плоской” (например, на уровне 5% [1]). После чего значение параметра f обновляется как функция квадратного корня $f_i = \sqrt{f_{i-1}}$, а гистограмма сбрасывается $H(E_k) = 0$. После чего шаги 1 и 2 снова повторяются. Алгоритм останавливается, когда параметр f достигнет некоторого выбранного значения f_{end} .

Алгоритм получил широкое распространение, и нашел применение в различных областях науки. Метод активно применяют для моделирования полимеров [7, 8], цепочек белков [9, 10], оптимизации [11]. Однако несколько вопросов, касательно работы и точности алгоритма оставались без ответа, например: как выбрать оптимальное значение “ровности” гистограммы $H(E)$. Как требование “плоскости” гистограммы $H(E)$ влияет на конечную точность вычислений? Является ли выбор функции квадратного корня оптимальным для f ?

Модификации алгоритма Ванга-Ландау

Алгоритм Ванга-Ландау получил широкое распространение и нашел применение в различных областях науки. Метод активно применяют для моделирования полимеров [7, 8] и цепочек белков [9, 10], для оптимизации [11]. Однако, несколько вопросов касательно работы и точности алгоритма требовали ответа, например: как выбрать оптимальное значение “ровности” гистограммы $H(E)$. Как требование “плоскости” гистограммы $H(E)$ влияет на конечную точность вычислений? Является ли выбор функции квадратного корня оптимальным для f ?

Ответ на последний вопрос был получен в двух независимых работах [12] и [11], в которых была предложена модификация алгоритма $1/t$ -WL и алгоритм Stochastic approximation Monte Carlo (SAMC).

В статьях [12, 13] была предложена модификация алгоритма, получившая название $1/t$ -Wang-Landau. Модифицированный алгоритм состоит из двух этапов. На первом этапе выполняются обычные шаги Ванг-Ландау алгоритма [1] с одним изменением: вместо проверки гистограммы $H(E)$ на “ровность” выполняется проверка на заполненность каждого энергетического уровня $H(E) \neq 0$. Функция изменения параметра $F = \ln f$ также остается прежней $F_i = F_{i-1}/2$, пока выполняется условие $F_i \leq N_E/t$. При $F_i > N_E/t$ алгоритм переходит на второй этап. С этого момента гистограмма $H(E)$ не заполняется и не проверяется. Параметр F изменяется по новому правилу $F_i = N_E/t$. Здесь t - это количество элементарных переворотов спина, а N_E - количество уровней системы.

Модификация SAMC [11, 14] схожа с описанной выше [12, 13]. Вводится дополнительный параметр t_0 - время, когда алгоритм переходит на второй этап, измеренное в элементарных переворотах спина. Параметр F изменяется как

функция $F = \frac{t_0}{\max(t, t_0)}$. Таким образом, на первом этапе параметр F равен единице, а на втором меняется как $F = t_0/t$.

Выбор функции $1/t$ в качестве функции изменения параметра F имеет теоретическое обоснование. В работе [11] на основе теории стохастической аппроксимации сформулированы условия на функцию F , необходимые для сходимости метода

$$\sum_{i=0}^{\infty} F_i = \infty, \quad \sum_{i=0}^{\infty} F_i^{\zeta} < \infty, \quad (9)$$

где $\zeta \in (1, 2)$. В работе [15] было доказано, что наиболее оптимальным выбором функции является $F(t) \propto 1/t^\alpha$ при $1 \leq \alpha < 2$. Причем результаты численных экспериментов говорят о том, что $\alpha = 1$ является наилучшим выбором.

Модификация $1/t$ -WL позволила обойти проблему с систематической ошибкой алгоритма. Проблема заключалась в том, что с ростом количества шагов алгоритма, отклонение от точного значения выходило на константное значение. Одними из первых эту проблему описали авторы в статьях [16, 17]. Было показано наличие статистической ошибки, пропорциональной квадратному корню \sqrt{f} . В статье [12] также наглядно продемонстрирована ограниченная точность вычислений на примере модели Изинга. Отклонение $\epsilon(E, t) = \left| 1 - \frac{\ln g_n(E, t)}{\ln g_{ex}(E)} \right|$ вычисленного значения плотности состояний $g_n(E, t)$ от точного $g_{ex}(E)$ оценивалось при разном количестве алгоритмических шагов t . Результаты вычислений показали, что после некоторого значения параметра $F = \ln(f)$ размер ошибки выходит на константу, и не уменьшается с ростом количества шагов алгоритма. Аналогичный численный эксперимент для метода $1/t$ -WL показал, что $\epsilon(E, t)$ убывает с ростом количества шагов пропорционально $1/t$.

Обзор других модификаций также показывает, что выдвинутое условие (9) на F является критичным в сходимости метода. Например, в работе [16] были изложены соображения касательно значимости “плоскости” вспомогательной гистограммы $H(E)$ в точности вычислений, а также предложена идея зафиксировать параметр $F = 1$ после 14 итераций. Численные эксперименты показали, что такой подход дает значимое улучшение точности только на начальных шагах алгоритма по сравнению с оригинальным методом [1], однако с увеличением количества шагов алгоритм не дает значимых улучшений.

Частота корректировки значений $g(E)$ также не является критичным фактором в точности вычислений. В статье [18] авторы предлагают уменьшить частоту корректировки значений $g(E)$ в алгоритме Ванга-Ландау с каждого переворота спина до одного Монте-Карло шага, т.е. обновлять $g(E)$ через каждые L^2 элементарных переворота спина. Эффективность такого подхода сравнивается с оригинальным алгоритмом Ванга-Ландау с уровнем ровности гистограммы $H(E)$ 80% и 90%, а также с $1/t$ -модификацией. На основе сравнения результатов вычислений трех характеристик системы, а именно температуры максимума теплоемкости T_c и критических индексов β и γ , авторы делают вывод о повышении точности алгоритма Ванга-Ландау при более редком обнов-

лении плотности состояний по сравнению с оригинальным алгоритмом и модификацией 1-WL. Однако, такой подход требует в разы больше процессорного времени. Например, если сравнить результаты, полученные с помощью 1/t-WL алгоритма с критерием остановки $\ln f = 5 \cdot 10^{-8}$ и предложенной модификации ($T_c = 2.26916(12)$, $\beta = 0.1259(21)$ и $T_c = 2.26904(25)$, $\beta = 0.12494(68)$ соответственно), то последняя требует примерно в 7 раз больше времени [18].

Характерные времена алгоритма Ванга-Ландау

В алгоритме Ванга-Ландау можно выделить два характерных времени - это время туннелирования (tunnelling time) и время перемешивания (mixing time).

Время туннелирования связано с начальным этапом алгоритма 1/t-WL, и является характерным временем для алгоритмов, требующих критерия “ровности” гистограммы [19]. Время туннелирования - это время за которое случайное блуждание на отрезке достигает одного конца отрезка, начиная с другого, в первый раз. Это время ещё известно как first-passage time [20]. В терминах метода Ванга-Ландау, это время за которое алгоритм достигает уровня с максимальной энергией E_{max} , начиная с минимального E_{min} , в первый раз. Известно, что для свободного случайного блуждания время туннелирования масштабируется как количество уровней в квадрате $t_{tun} \approx N_E^2$ [20], т.е. для двумерной модели Изинга с размером решетки L это $t_{tun} \approx L^4$. Оценка этого времени для алгоритма Ванга-Ландау на примере модели Изинга приводится в статье [19].

На заключительном этапе алгоритма оценка $\tilde{g}(E)$ находится в окрестности точного значения $g(E)$, а шаги алгоритма являются марковским случайным блужданием по спектру энергии. Время, за которое марковский процесс сходится к равновесному состоянию, называется временем перемешивания t_{mix} . Известно, что это время обратно-пропорционально спектральной щели G , определяемой разницей между старшими собственными значениями матрицы переходов [35]

$$t_{mix} = \frac{1}{G} = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2}. \quad (10)$$

Оценка данного времени для алгоритма Ванга-Ландау ранее не проводилась.

Параллельные реализации алгоритма Ванга-Ландау

Среди существующих подходов к реализации параллельного алгоритма Ванга-Ландау можно выделить две группы:

- Алгоритмы, где случайные блуждания совершаются по всему спектру, и идет работа с общей или распределенной памятью [21–23].
- Алгоритмы, где энергетический спектр делится на отрезки, в каждом совершаются независимые случайные блуждания, используется распределенная память [24] - [33]

Рассмотрим далее предложенные реализации обоих подходов.

Случайные блуждания по всему спектру энергии

Начнем с варианта, когда несколько случайных блужданий совершаются по всему спектру энергии. Существуют реализации такого подхода на системах с распределенной памятью MPI [21], с общей памятью на OpenMP [22].

В случае использования распределенной памяти MPI [21] задается некоторый временной интервал, выраженный в шагах алгоритма, между которым происходит коммуникация независимых блужданий для обновления общего значения DoS. Для проверки ровности гистограммы используется агрегированная по всем блужданиям гистограмма. Определение интервала времени для обмена информацией между блужданиями является слабым местом подхода, так как может привести к неэффективности вычислений.

Реализация алгоритма на OpenMP [22] устроена следующим образом: создается несколько копий системы, каждой из которых соответствует свое начальное состояние генератора случайных чисел. Внутри каждой копии выполняются стандартные WL-шаги, связанные с чтением и изменением плотности состояний $g(E)$ и гистограммы ровности $H(E)$. Эти сущности являются общими и доступными на запись каждой копией. Шаг проверки гистограммы $H(E)$ на ровность также выполняется всеми процессами, однако разрешение на изменение параметра F доступно только тому процессору, где условие на “ровность” с заданной точностью выполняется. После этого параметр f становится доступным для чтения всем процессам.

Такой подход к распараллеливанию алгоритма достаточно прост, так как не требует переписывания всей логики алгоритма, а ограничивается добавлением директив, определяющих работу с общей памятью. В частности, чтобы определить порядок работы с $g(E)$ и $H(E)$ и избежать преждевременной перезаписи их значений, используются директивы ATOMIC или CRITICAL. Как показали эксперименты авторов [22] директива CRITICAL замедляет работу алгоритма настолько, что такая реализация уступает в скорости обычной последовательной реализации. В свою очередь использование директивы ATOMIC показывает ускорение в работе параллельной реализации. Однако допущение преждевременной перезаписи общих элементов дает самую эффективную по времени реализацию: потерянные значения $g(E)$ и $H(E)$ из-за преждевременной перезаписи компенсируются дополнительными шагами алгоритма, что требует меньше времени, чем ожидание в очереди на запись обновлений DoS и гистограммы $H(E)$. И по словам автором такой подход не ведет к потере точности. Однако, как показано в работе [23] это может быть справедливо лишь для некоторых моделей, но не гарантирует сходимости плотности состояний к точному решению. Это происходит из-за того, что хотя все уровни энергии равновероятны, но вероятность посещения уровней не равна. И некоторые из параллельных блужданий “застревают” на уровнях с низкой энергией, и вносят вклад в общую для всех

блужданий гистограмму $H(E)$, однако должным образом не проходят по всему спектру, тем самым переоценивая уровни с низкой энергией. Решением может стать более строгий критерий “ровности”, что в свою очередь увеличивает время работы алгоритма и теряет преимущество параллельной реализации перед последовательной. Поэтому для решения данной проблемы авторы предлагают использовать неравномерный параметр f : чем менее вероятно посещение уровня, тем большее значение параметра f используется для изменения текущего DoS.

Случайные блуждания по отрезкам спектра

В 2013 году Т.Вогель с коллегами [24–26] предложили параллельную реализацию алгоритма Ванга-Ландау, путем разделения спектра на пересекающиеся отрезки, которые между собой могут обмениваться конфигурациями.

Идея обмена конфигурациями взята из алгоритма Replica exchange Monte-Carlo [27], в котором параллельно моделируются несколько копий одной системы (реплик) при разных температурах, и с некоторой периодичностью между репликами происходит обмен конфигурациями, благодаря чему реплики с низкой температурой получают конфигурации системы при высоких температурах и наоборот. Такой подход позволяет обойти проблему попадания в локальный минимум при низкой температуре, и увеличить точность вычислений термодинамических характеристик системы [28]. Независимый характер моделирования каждой реплики позволяет масштабировать вычисления на высокопроизводительных кластерах и получать характеристики системы для заданного диапазона температуры.

В предложенном Вогелем алгоритме Replica exchange Wang-Landau (REWL) [24, 25] спектр энергии делится на h пересекающихся отрезков. В каждом из h -интервалов совершаются m -независимых случайных блужданий классическим алгоритмом Ванга-Ландау, и соответственно независимо вычисляются плотность состояний $g(E)$ и гистограмма ровности $H(E)$. После определенного количества шагов происходит обмен конфигурациями между двумя случайными блужданиями из соседних окон с вероятностью, удовлетворяющей принципу детального равновесия P_{acc} :

$$P_{acc} = \min\left[1, \frac{g_i(E(X)) g_j(E(Y))}{g_i(E(Y)) g_j(E(X))}\right] \quad (11)$$

где i и j - случайно выбранные блуждания из соседних интервалов, X и Y - соответствующие им конфигурации на данный момент времени, $E(X)$ и $E(Y)$ - энергия, системы с конфигурацией X и Y .

Стоит обратить внимание к выбору доли пересечения o между интервалами h . Величина o должна быть выбрана так, чтобы избежать двух крайностей. С одной стороны, высокая доля пересечения будет неэффективной, так как мы получим несколько блужданий практически по всему спектру энергии. В таком

случае распараллеливание алгоритма не имеет смысла. С другой стороны, излишне малая доля не сможет обеспечить достаточный уровень вероятности для обмена конфигурациями между окнами. Авторы алгоритма предлагают выбирать долю пересечений на уровне 75% [25, 26, 32, 33].

Научная новизна

1. Предложен новый математический объект для метода Ванга-Ландау - матрица переходов по дискретному спектру энергии.
2. Аналитически и численно показано, что матрица переходов стремится к стохастической при достижении необходимой точности вычисления плотности состояний.
3. Предложен критерий точности вычислений плотности состояний - отклонение старшего собственного значения матрицы переходов от единицы.
4. Предложен метод оценки масштабирования вычислений плотности состояний за счет анализа поведения спектральной щели матрицы переходов марковского процесса на спектре энергии как функции размера системы. Введено понятие времени перемешивания как оценки масштабируемости времени вычисления.
5. Предложена параллельная модификация с контролируемой точностью для метода Ванга-Ландау.
6. Применение разработанной методики продемонстрировано на исследовании четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке, что позволило разрешить дискутируемый в научной литературе парадокс принадлежности этой модели к классу универсальности четырехкомпонентной модели Поттса.

Краткое содержание работы

В **первой главе** обсуждается модификация алгоритма 1/t-Ванга-Ландау, путем введения матрицы перехода между уровнями энергии с вероятностью Ванга-Ландау.

Как было сказано выше, в алгоритме Ванга-Ландау фигурирует вспомогательная функция $H(E)$, в которой накапливается информация о количестве посещений каждого уровня энергии, однако данная функция не отражает информации о том, между какими уровнями был совершен переход. Для этого в алгоритм была введена дополнительная функция $U(E_k, E_m)$. Она представляет собой квадратную матрицу размером $N_E \times N_E$, где N_E - количество уровней энергии в системе. При старте алгоритма, матрица инициализируется нулями. В процессе блужданий при переходе с уровня энергии E_k на уровень E_m соответствующий элемент матрицы увеличивается на единицу $U(E_k, E_m) \rightarrow U(E_k, E_m) + 1$. В процессе выполнения алгоритма, мы также вычисляем нормированную матрицу $T(E_k, E_m) = U(E_k, E_m)/H$, где $H = \sum_{k,m} U(E_k, E_m)/N_E$. Результаты моделирования показали, что по мере сходимости алгоритма к точному значению $g(E)$, нормализованная матрица $T(E_k, E_m)$ стремится стать дважды стохастической, т.е. сумма ее элементов и по столбцам, и по строкам близка к единице. Соответственно ее старшее собственное значение стремится к единице $\lambda_1 \rightarrow 1$ [34].

Аналитическое решение матрицы было найдено для одномерной модели Изинга с периодическими граничными условиями. Было показано, что элементы матрицы являются вероятностями перехода с уровня E_k на уровень E_m , причем итоговая вероятность складывается из двух компонент

$$T(E_k, E_m) = \min \left(1, \frac{g(E_k)}{g(E_m)} \right) P(E_k, E_m). \quad (12)$$

Первая компонента - это вероятность Ванга-Ландау P_{WL} перейти с одного энергетического уровня на другой. Вторая компонента $P(E_k, E_m)$ - это вероятность перехода из конфигурации системы с энергией E_k в конфигурацию системы с энергией E_m . Полная система выражений для недиагональных элементов

матрицы $T(E_k, E_m)$:

$$\begin{aligned}
T(E_k, E_m) &= \min \left(1, \frac{g(E_k)}{g(E_m)} \right) \sum_{i=0}^{2k} \frac{N_i(k, L) Q_i^{E_k \rightarrow E_m}}{g(E_k)}, \\
N_i(k, L) &= \frac{L}{k} C_{2k-i}^i C_{L-2k-1}^{2k-i-1}, \\
N_{2k}(k, L) &= 2\delta_{L,2k}, \\
Q_i^{E_k \rightarrow E_{k-1}} &= \frac{i}{L}, \\
Q_i^{E_k \rightarrow E_{k+1}} &= \frac{L - 4k + i}{L}, \\
Q_i^{E_k \rightarrow E_k} &= \frac{4k - 2i}{L}, \\
g(E_k) &= 2C_L^{2k}.
\end{aligned} \tag{13}$$

Аналитическое решение, построенное на точном значении DoS, также подтверждает, что сумма элементов и по строкам, и по столбцам равна единице. На основе этого свойства предложен критерий точности алгоритма, как отклонения старшего собственного значения от единицы

$$\delta = |1 - \lambda|. \tag{14}$$

Было показано, что при точном значении $g(E)$ алгоритм Ванга-Ландау является марковским процессом.

Во **второй главе** анализируется оценка характерных времен модифицированного алгоритма и приводится методика их вычисления. Была произведена оценка времени туннелирования на примере двумерной модели Изинга с периодическими граничными условиями. Установлено, что это время масштабируется с ростом размера системы как $t_{tun} = L^{4.743(7)}$.

С введением матрицы переходов в алгоритм стало возможным оценить характерное время для второго этапа алгоритма $1/t$ -WL. Известно, что это время обратно-пропорционально разнице между старшими собственными значениями матрицы переходов $t_{mix} = \frac{1}{|\lambda_1 - \lambda_2|}$ [35]. Для одномерной модели Изинга элементы матрицы $T(E_k, E_m)$ известны (см. выражение 13), и найти собственные значения не представляет труда. Установлено, что $t_{mix} = L^{2.19}$. Для двумерной модели Изинга точное решение матрицы неизвестно. Поэтому были запущены Ванга-Ландау блуждания с изначально заданным точным значением $g(E)$ (вычисленное с помощью [36]), и в ходе выполнения алгоритма $g(E)$ не изменялось, но при этом накапливалась матрица переходов $U(E_k, E_m)$. Нормированная матрица $\tilde{T}(E_k, E_m)$ использовалась для вычисления собственных значений. Установлено, что для двумерной модели Изинга, время перемешивания растет как $t_{mix} = L^{4.28(4)}$.

Для q -компонентной модели Поттса также были найдены время туннелирования и перемешивания, результаты представлены в таблице 1. Для оценки

времени перемешивания сначала с помощью алгоритма 1/t-WL с матрицами переходов была найдена оценка $\tilde{g}(E)$, затем запущены шаги алгоритма с $\tilde{g}(E)$ в качестве начальных значений.

q	t_{tun}	t_{mix}
3	5.(3)	3.(3)
4	4.9(4)	3.(3)
5	4.7(2)	1.(7)
8	4.(9)	1.7(6)
10	4.8(1)	1.(3)

Таблица 1: Характерные времена алгоритма Ванга-Ландау на примере модели Поттса на квадратной решетке с разным количеством компонент q .

В **третьей главе** обсуждается подход эффективной реализации параллельного алгоритма Ванга-Ландау. Модификация предлагается на основе случайных блужданий по отрезкам (окнам) спектра энергии, которые пересекаются между собой с некоторой долей $\sigma\%$. В рамках каждого окна, помимо функций $g(E)$ и $H(E)$ накапливается матрица переходов $\tilde{T}(E_k, E_m)$. С некоторой периодичностью происходит обновление значений плотности состояний для всего спектра по формуле: $G_i = \frac{1}{k} \sum_{j=0}^k g^j(E_i)$, где k -количество окон, в которых встречается уровень энергии E_i , и соответственно $g_j(E_i)$ - это значение плотности состояния уровня E_i накопленное в окне j . Результаты экспериментов показали, что как для всего спектра энергии, так и для окон выполняется условие сходимости матрицы к стохастической, и в рамках каждого окна с ростом количества шагов t старшее собственное значение стремится к единице. Внутри каждого окна было вычислено время туннелирования двумя способами: на основе ровного распределения плотности состояний ($g(E_i) = 1$) и на основе точного значения ($g(E_i) = g_{exact}(E_i)$) [36]. В обоих случаях фиксировалось два времени: проход по спектру от меньшей энергии к большей и наоборот. Результаты дают представление об особенностях распределения времени туннелирования внутри окон спектра на начальном этапе алгоритма и его финальной стадии. На примере вычисления теплоемкости $C(\beta)$ для модели Изинга и ее относительной ошибки было показано, что предложенный подход для вычисления плотности состояний проще в вычислении, чем предложенный ранее в [24] и обеспечивает достаточную точность вычислений.

Результаты применения модифицированного метода для решения задач статистической физики приводятся в **четвертой главе**. Известно, что в модели Поттса на квадратной решетке с числом компонент $q > 4$ наблюдается фазовый переход первого рода, а при $q \leq 4$ - второго рода. Мотивация исследования обусловлена наличием ряда публикаций (например [37]), утверждающих о наличие фазового перехода первого рода в четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке, что противоречит теории универсальности [38], утверждающей, что на род фазового перехода не влияют локальные конфигу-

рации, а влияет размерность системы и ее гамильтониан. С помощью модифицированного метода $1/t$ - Ванга-Ландау с критерием точности $\delta = |1 - \lambda_1|$ была найдена плотность состояний $g(E)$ четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке. С помощью $g(E)$ были найдены функции от температуры β , такие как энергия $E(\beta)$, теплоемкость $C(\beta)$ и кумулянт Биндера $B_E(\beta)$ по формулам

$$E(\beta) = \langle E \rangle = \frac{\sum_{i=0}^{N_E} E_i g(E_i) e^{-\beta E_i}}{\sum_{i=0}^{N_E} g(E_i) e^{-\beta E_i}}, \quad (15)$$

$$\langle E^2 \rangle = \frac{\sum_{i=0}^{N_E} E_i^2 g(E_i) e^{-\beta E_i}}{\sum_{i=0}^{N_E} g(E_i) e^{-\beta E_i}}, \quad (16)$$

$$C(\beta) = \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2), \quad (17)$$

$$B_E(\beta) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle}{3 \langle E^2 \rangle^2} \quad (18)$$

Логарифмические поправки к зависимости положения критической точки β_c от размера системы L согласуются с аналитическими показателями, представленными в [39]. Результаты анализа показывают, что модель Поттса с числом компонент $q = 4$ на гексагональной решетке не противоречит теории универсальности.

Основные результаты, выносимые на защиту

- Введен новый объект в метод Ванга-Ландау - матрица переходов по дискретному спектру энергии. Продемонстрировано, что матрица стремится стать стохастической при приближении вычислений плотности состояний к точному значению.
- Разработан подход для контроля точности вычислений плотности состояний в алгоритме Ванга-Ландау.
- Впервые произведена оценка характерного времени в алгоритме Ванга-Ландау – времени перемешивания.
- Предложена параллельная реализация алгоритма Ванга-Ландау с контролируемой точностью. Предложен алгоритмически более простой способ “сшивки” плотности состояний всего спектра.
- Разработанный метод применен для установления вида фазового перехода в четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке.

Личный вклад автора в разработку проблемы

Идеи и гипотезы, рассматриваемые в диссертации, были выдвинуты совместно с научным руководителем. Автор диссертации лично разрабатывал программный код, провел вычислительные эксперименты и обработал их результаты, а также участвовал в написании текста статей.

Общие выводы исследования

- Предложено ввести в алгоритм $1/t$ -Ванга-Ландау матрицу переходов случайного блуждания с вероятностью Ванга-Ландау, в которой накапливается частота переходов из состояний с одной энергии системы в состояние с другой энергией. Получены аналитически выражения для матрицы переходов для одномерной модели Изинга с периодическими граничными условиями. Показано, что элементы матрицы являются вероятностями перехода с уровня E_m на E_k , причем вероятность перехода состоит из двух компонент: 1) вероятности перехода Ванга-Ландау $P_{wl} = \min\left(1, \frac{g(E_m)}{g(E_k)}\right)$; 2) вероятности оказаться на данном уровне энергии. Было показано, что нормированная матрица с ростом количества шагов моделирования стремится к стохастической, соответственно старшее собственное значение такой матрицы стремится к единице $\lambda_1 \rightarrow 1$. На основе этого свойства предложен критерий точности, как отклонение старшего собственного значения от единицы: $\delta = |\lambda_1 - 1|$.
- Произведена оценка двух характерных времен алгоритма: времени перемешивания и времени туннелирования алгоритма Ванга-Ландау. Была найдена взаимосвязь между размером системы и временем туннелирования, необходимым алгоритму пройти по всему энергетическому спектру, начиная с минимального уровня и заканчивая максимальным, иными словами установлено, как меняется время туннелирования с ростом системы. Введенная в алгоритм матрица переходов с вероятностью Ванга-Ландау позволила оценить время перемешивания алгоритма, исходя из оценки спектральной щели $G = |\lambda_1 - \lambda_2|$ для модели Изинга. Время перемешивания $t_{mix} = 1/G$, является оценкой характерного времени на втором этапе алгоритма $1/t$ Ванга-Ландау.
- Предложена параллельная реализация алгоритма Ванга-Ландау с использованием матрицы переходов и более простым подходом к “сшивке” плотности состояний всего спектра. Для проведения более эффективных расчетов спектр энергии системы разделяется на отрезки (окна), пересекающиеся с заданной долей. Внутри каждого окна производятся независимые между собой блуждания, накапливается оценка плотности состояний $g(E)$, гистограмма $H(E)$ и матрица переходов $T(E_k, E_m)$. Показано, что матрицы переходов внутри каждого окна также как и матрица переходов в последовательной реализации, стремится стать стохастической. Предложен новый подход к вычислению плотности состояний всего спектра из параллельных окон. Продемонстрировано, что новый подход позволяет вычислять термодинамические функции системы без потери точности при уменьшении времени вычислений.

Апробация результатов исследования, публикации по теме диссертации

Выступления на конференциях:

- “Исследование фазовых переходов в модели Поттса методом Ванга-Ландау”, Russian Supercomputing Days, 27-28 сентября, 2021
- “On phase transition in four-component hexagonal lattice Potts model”, CSP2020, 12-16 октября, 2020г
- “Исследование свойств алгоритма Ванга-Ландау”, Межвузовская научно - техническая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов им.Е.В.Арменского, 19 февраля-1марта 2018г., Москва
- “Analytical structure of transition matrix in Wang-Landau algorithm”, International Conference on Computer Simulation in Physics and beyond, October 9-12,2017, Moscow, Russia

Свидетельства о государственной регистрации ПО:

- Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2019613934 “Реализация алгоритма Ванга-Ландау с огрублением спектра энергии”.
- Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2017663374 “Построение матрицы переходов для одномерной модели Изинга в алгоритме Ванга-Ландау”.

Публикации:

Публикации по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях, входящих в международную систему цитирования WoS/Scopus:

- Barash L. Y., Fadeeva M. A., Shchur L. N. Control of accuracy in the Wang-Landau algorithm //Physical Review E. – 2017. – Т. 96. – №. 4. – С. 043307. (Scopus/WoS Q1)
- Fadeeva M., Shchur L. On the mixing time in the Wang-Landau algorithm //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2018. – Т. 955. – №. 1. – С. 012028. (Scopus/WoS Q4)
- М.А.Фадеева, Л.Н. Щур, Моделирование четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке методом Ванга-Ландау с контролируемой точностью, ЖЭТФ, 2022, том 162, вып.6(12), стр. 1-8 (Scopus/WoS Q3)

Публикации по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях, входящих в систему цитирования РИНЦ:

- М.А. Фадеева, Исследование фазовых переходов в модели Поттса методом Ванга-Ландау, Суперкомпьютерные дни в России : Труды международной конференции. 27–28 сентября 2021 г., Москва / Под. ред. Вл. В. Воеводина. – Москва : МАКС Пресс, 2021. – 192 с., стр.87-96 (РИНЦ)

Список литературы

- [1] Wang F., Landau D. P. Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states //Physical review letters. – 2001. – Т. 86. – №. 10. – С. 2050.
- [2] Metropolis N., Ulam S. The monte carlo method //Journal of the American statistical association. – 1949. – Т. 44. – №. 247. – С. 335-341.
- [3] Fortuin C. M., Kasteleyn P. W. On the random-cluster model: I. Introduction and relation to other models //Physica. – 1972. – Т. 57. – №. 4. – С. 536-564.
- [4] Wolff U. Lattice field theory as a percolation process //Physical review letters. – 1988. – Т. 60. – №. 15. – С. 1461.
- [5] Swendsen R. H., Wang J. S. Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations //Physical review letters. – 1987. – Т. 58. – №. 2. – С. 86.
- [6] Wang F., Landau D. P. Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram //Physical Review E. – 2001. – Т. 64. – №. 5. – С. 056101.
- [7] Zablotkiy S. V., Ivanov V. A., Paul W. Multidimensional stochastic approximation Monte Carlo //Physical Review E. – 2016. – Т. 93. – №. 6. – С. 063303.
- [8] Mark P. Taylor, Wolfgang Paul, Kurt Binder Phase transitions of a single polymer chain: A Wang–Landau simulation study // J. Chem. Phys. 131, 114907 (2009)
- [9] Rastogi C. et al. Accurate and sensitive quantification of protein-DNA binding affinity //Proceedings of the National Academy of Sciences. – 2018. – Т. 115. – №. 16. – С. E3692-E3701.
- [10] Wüst T., Reith D., Virnau P. Sequence determines degree of knottedness in a coarse-grained protein model //Physical review letters. – 2015. – Т. 114. – №. 2. – С. 028102.
- [11] Liang F., Liu C., Carroll R. J. Stochastic approximation in Monte Carlo computation //Journal of the American Statistical Association. – 2007. – Т. 102. – №. 477. – С. 305-320.
- [12] Belardinelli R. E., Pereyra V. D. Fast algorithm to calculate density of states //Physical Review E. – 2007. – Т. 75. – №. 4. – С. 046701.
- [13] Belardinelli R. E., Pereyra V. D. Wang-Landau algorithm: A theoretical analysis of the saturation of the error //The Journal of chemical physics. – 2007. – Т. 127. – №. 18. – С. 184105.

- [14] Liang F., Liu C., Carroll R. J. Stochastic approximation in Monte Carlo computation //Journal of the American Statistical Association. – 2007. – T. 102. – №. 477. – C. 305-320.
- [15] Zhou C. et al. Optimal modification factor and convergence of the Wang-Landau algorithm //Physical Review E. – 2008. – T. 78. – №. 4. – C. 046705.
- [16] Lee H. K., Okabe Y., Landau D. P. Convergence and refinement of the Wang–Landau algorithm //Computer physics communications. – 2006. – T. 175. – №. 1. – C. 36-40.
- [17] Zhou C., Bhatt R. N. Understanding and improving the Wang-Landau algorithm //Physical Review E. – 2005. – T. 72. – №. 2. – C. 025701.
- [18] Caparica Á. A., Cunha-Netto A. G. Wang-landau sampling: Improving accuracy //Physical Review E. – 2012. – T. 85. – №. 4. – C. 046702.
- [19] Dayal P. et al. Performance limitations of flat-histogram methods //Physical Review Letters. – 2004. – T. 92. – №. 9. – C. 097201.
- [20] Redner S. A guide to first-passage processes. – Cambridge university press, 2001.
- [21] Khan M. O., Kennedy G., Chan D. Y. C. A scalable parallel Monte Carlo method for free energy simulations of molecular systems //Journal of computational chemistry. – 2005. – T. 26. – №. 1. – C. 72-77.
- [22] Zhan L. A parallel implementation of the Wang–Landau algorithm //Computer Physics Communications. – 2008. – T. 179. – №. 5. – C. 339-344.
- [23] Yin J., Landau D. P. Massively parallel Wang–Landau sampling on multiple GPUs //Computer Physics Communications. – 2012. – T. 183. – №. 8. – C. 1568-1573.
- [24] Vogel T. et al. Generic, hierarchical framework for massively parallel Wang-Landau sampling //Physical review letters. – 2013. – T. 110. – №. 21. – C. 210603.
- [25] Vogel T. et al. Scalable replica-exchange framework for Wang-Landau sampling //Physical Review E. – 2014. – T. 90. – №. 2. – C. 023302.
- [26] Vogel T. et al. Exploring new frontiers in statistical physics with a new, parallel Wang-Landau framework //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2014. – T. 487. – №. 1. – C. 012001.
- [27] Hukushima K., Nemoto K. Exchange Monte Carlo method and application to spin glass simulations //Journal of the Physical Society of Japan. – 1996. – T. 65. – №. 6. – C. 1604-1608.

- [28] Earl D. J., Deem M. W. Parallel tempering: Theory, applications, and new perspectives //Physical Chemistry Chemical Physics. – 2005. – Т. 7. – №. 23. – С. 3910-3916.
- [29] Hansmann U. H. E. Parallel tempering algorithm for conformational studies of biological molecules //Chemical Physics Letters. – 1997. – Т. 281. – №. 1-3. – С. 140-150.
- [30] Y. Sugita and Y. Okamoto, Chem. Phys. Lett., 1999, 314, 141.
- [31] Sugita Y. et al. Replica-exchange methods for biomolecular simulations //Biomolecular Simulations. – Humana, New York, NY, 2019. – С. 155-177.
- [32] Li Y. W. et al. A new paradigm for petascale Monte Carlo simulation: Replica exchange Wang-Landau sampling //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2014. – Т. 510. – №. 1. – С. 012012.
- [33] Perera D. et al. Replica-Exchange Wang–Landau Sampling: Pushing the Limits of Monte Carlo Simulations in Materials Sciences //TMS 2015 144th Annual Meeting Exhibition. – Springer, Cham, 2015. – С. 811-818.
- [34] Ф.Р. Гантмахер, Теория матриц. Наука, М., 1967г. с.354-362.
- [35] S. Boyd, P. Diaconis, L. Xiao, Fastest mixing Markov chain on a graph, SIAM Review
- [36] Beale P.D. Exact Distribution of Energies in the Two-Dimensional Ising Model //Physical review letters.1996.Т.76.№. 1.С. 78.
- [37] Муртазаев А. К. и др. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОДЕЛИ ПОТТСА С ЧИСЛОМ СОСТОЯНИЙ СПИНА $q=4$ НА ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ //ЖЭТФ. – 2019. – Т. 156. – С. 502-506.
- [38] M. Fisher, The renormalization group in the theory of critical behavior, Rev. Mod. Phys. **46** 597 (1974).
- [39] Salas J., Sokal A. D. Logarithmic corrections and finite-size scaling in the two-dimensional 4-state Potts model //Journal of statistical physics. – 1997. – Т. 88. – №. 3. – С. 567-615.
- [40] Barash L. Y., Fadeeva M. A., Shchur L. N. Control of accuracy in the Wang-Landau algorithm //Physical Review E. – 2017. – Т. 96. – №. 4. – С. 043307.