



ขั้นตอนวิธีของหวัง-แลนด์าว์และการประยุกต์ใช้

The Wang-Landau Algorithm and its Applications

วันหยก อติเศรษฐพงศ์

สาขาวิชาคณิตศาสตร์และสถิติ คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์ (ศูนย์รังสิต) ปทุมธานี 12120

E-mail: awanyok@tu.ac.th

Received: 25 October 2018 | Revised: 28 December 2018 | Accepted: 8 March 2019

บทคัดย่อ

ขั้นตอนวิธีของหวัง-แลนด์าว์เป็นขั้นตอนวิธีหนึ่งในเทคนิคมอนติคาร์โลที่ใช้ในงานฟิสิกส์เชิงสถิติ ขั้นตอนวิธีนี้มีประสิทธิภาพอย่างมากในการประมาณค่าความหนาแน่นสถานะของแบบจำลองสปินชนิดไม่ต่อเนื่อง โดยเฉพาะในระบบขนาดใหญ่ ปัจจุบันนับได้ว่าขั้นตอนวิธีของหวัง-แลนด์าว์เป็นที่ยอมรับอย่างกว้างขวาง โดยมีงานวิจัยมากกว่า 1,000 ชิ้นที่นำขั้นตอนวิธีนี้ไปประยุกต์ใช้กับตัวแบบต่าง ๆ เช่น แบบจำลองพotts แบบจำลองไอซิง การคำนวณพหุของสายโปรตีน การศึกษาลักษณะของโพลิเมอร์ และการหาค่าปริพันธ์ในหลายมิติ ในบทความชิ้นนี้ ผู้เขียนได้รวบรวมหลักการทำงานของขั้นตอนวิธีของหวัง-แลนด์าว์ จุดเด่นของขั้นตอนวิธี ข้อจำกัดในการทำงาน การปรับปรุงขั้นตอนวิธี รวมทั้งการนำขั้นตอนวิธีไปประยุกต์ใช้ในงานต่าง ๆ

ABSTRACT

The Wang-Landau algorithm is one of the Monte Carlo techniques used in statistical physics. This algorithm is very efficient for approximating the density of states of discrete spin models, especially in a large system. Nowadays, the method has been widely accepted. There have been more than 1,000 research papers citing and using this method to solve various problems such as Potts models, Ising models, protein folding, homopolymers and multidimensional integrals. In this article, we focus on the main principle of the Wang-Landau algorithm, its advantages and limitations, improved algorithms and its applications.

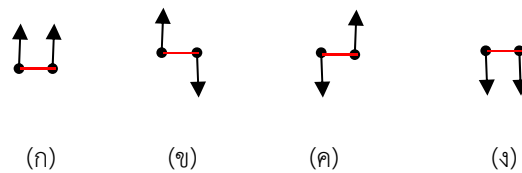
คำสำคัญ: ขั้นตอนวิธีหวัง-แลนด์าว์ วิธีมอนติคาร์โล ค่าความหนาแน่นสถานะ ปริพันธ์หลายมิติ

Keywords: Wang-Landau algorithm, Monte Carlo method, Density of states, Multidimensional integrals

1. บทนำ

ฟิสิกส์เชิงสถิติ (Statistical physics) เป็นศาสตร์หนึ่งของวิชาฟิสิกส์ ซึ่งใช้ทฤษฎีความน่าจะเป็น หลักการทางสถิติ และเครื่องมือทางคณิตศาสตร์ ในการศึกษาคุณสมบัติทางอุณหพลศาสตร์ (Thermodynamics) ของระบบในระดับอนุภาค (Widom, 2002; Landau, 2009) การศึกษาในระดับอนุภาคนั้น ถึงแม้ว่าจะพิจารณาระบบที่มีขนาดเล็ก รูปแบบการเรียงตัวของอนุภาคที่เป็นไปได้กลับเพิ่มขึ้นอย่างมหาศาล เพื่อให้เข้าใจการเพิ่มขึ้นของรูปแบบการเรียงตัวของสปินดังกล่าว จะพิจารณาแบบจำลองแบบไอซิง (Ising model) ของระบบขนาด 2×1 มิติ ดังนี้

กำหนดให้ลูกศรแทนสปิน (Spin) ของอะตอม ทิศทางของสปินเป็นไปได้เพียงสองทิศ คือชี้ขึ้น (Spin up) หรือชี้ลง (Spin down) เส้นตรงที่เชื่อมระหว่างลูกศรแทน พันธะระหว่างสปิน (Interaction) การจัดเรียงตัวของสปิน (Configuration) สามารถเป็นไปได้อีก 4 รูปแบบ (Patterns) หรือสถานะ (States) ดังรูปที่ 1



รูปที่ 1 การจัดเรียงตัวของสปินขนาด 2×1 มิติ

ค่าพลังงานของสถานะสามารถคำนวณได้จากฟังก์ชันฮามิลโทเนียน (H) นิยามโดย

$$H = -J_{ij} \sum_{\langle ij \rangle} \delta_i \delta_j \quad (1)$$

เมื่อ δ_i แทนสถานะของสปินตัวที่ i โดยมีค่าเป็น 1 เมื่อสปินมีทิศชี้ขึ้นและมีค่าเป็น -1 เมื่อสปินมีทิศชี้ลง

และ J_{ij} แทนพันธะระหว่างสปิน เพื่อความสะดวกในการคำนวณสำหรับแบบจำลองไอซิงเบื้องต้น จะกำหนดให้พันธะระหว่างสปินเป็นค่าคงตัว นั่นคือให้ $J_{ij} = J$

จากรูปที่ 1 เราสามารถคำนวณค่าระดับพลังงานของทั้งสี่สถานะ โดยใช้สมการที่ (1) และได้ค่าเท่ากับ $-J$, J , J และ $-J$ ตามลำดับ

ฟังก์ชันแบ่งกัน (The Partition Function) (Landau, 2009) เป็นฟังก์ชันที่มีความสำคัญทางอุณหพลศาสตร์ นิยามโดย

$$Z = \sum_{\text{configurations}} e^{-\frac{E}{k_B T}} \quad (2)$$

เมื่อ E แทนพลังงาน (Energy)

T แทนอุณหภูมิ (Temperature)

k_B แทนค่าคงตัวโบลต์ซมันน์ (Boltzmann constant) และ

$\sum_{\text{configurations}}$ แทนผลบวกบนสถานะที่เป็นไปได้ทั้งหมด

หากพิจารณาแบบจำลองไอซิงขนาด $L \times L$ มิติ รูปแบบของการจัดเรียงสปินที่เป็นไปได้ทั้งหมดจะมีมากถึง $2^{L \times L}$ สถานะ นั่นคือการเพิ่มขึ้นของจำนวนสถานะอยู่ในรูปของฟังก์ชันเลขชี้กำลัง โดยทั่วไปการหาสมบัติทางอุณหพลศาสตร์จะพิจารณาเมื่อ $L \rightarrow \infty$ ซึ่งเป็นไปได้ยากที่จะแจกแจงสถานะที่เป็นไปได้ทั้งหมด

อย่างไรก็ตามสถานะที่ต่างกันอาจให้ค่าพลังงานระดับเดียวกันได้ ตัวอย่างเช่น จากรูปที่ 1 มีระดับพลังงานที่เป็นไปได้สองระดับคือ รูป (ก) และ (ง) จะได้ค่าพลังงาน $E_1 = -J$ และรูป (ข) และ (ค) จะได้ค่าพลังงาน $E_2 = J$

ค่าความหนาแน่นสถานะ (The Density of States) เขียนแทนด้วย $g(E)$ คือจำนวนสถานะที่เป็นไปได้ทั้งหมดที่ให้ระดับพลังงาน E เราสามารถนิยามฟังก์ชันแบ่งกันจากสมการที่ (2) ในรูปของค่าความหนาแน่นสถานะได้ดังนี้

$$Z = \sum_{\text{configurations}} e^{-\frac{E}{k_B T}} = \sum_E g(E) e^{-\frac{E}{k_B T}} \quad (3)$$

สำหรับสมการที่ (3) การคำนวณผลบวกจะทำบนปริภูมิพลังงาน (Energy space) ซึ่งมีจำนวนพจน์น้อยกว่าผลบวกบนจำนวนสถานะที่เป็นไปได้ทั้งหมด ดังนั้นจะเห็นได้ว่าการหาค่าความหนาแน่นสถานะจึงเป็นสิ่งจำเป็นที่จะช่วยให้การคำนวณค่าต่าง ๆ ทำได้ง่ายขึ้น

จากค่าฟังก์ชันแบ่งกัน ค่าทางอุณหพลศาสตร์สามารถคำนวณได้ดังตารางที่ 1

ตารางที่ 1 สูตรการคำนวณค่าสำคัญทางอุณหพลศาสตร์

ค่าที่พิจารณา	สูตรที่ใช้ในการคำนวณ
พลังงานภายใน (Internal Energy)	$U(T) = \frac{\sum_E E g(E) e^{-\frac{E}{k_B T}}}{Z} \equiv \langle E \rangle_T$
พลังงานอิสระ (Free Energy)	$F(T) = -k_B T \log(Z)$
ความร้อนจำเพาะ (Specific Heat)	$C(T) = \frac{\partial U(T)}{\partial T} = \frac{\langle E^2 \rangle_T - \langle E \rangle_T^2}{T^2}$
เอนโทรปี (Entropy)	$S(T) = \frac{U(T) - F(T)}{T}$

ในบทความนี้จะกล่าวถึง ขั้นตอนวิธีของหวัง-แลนด์อว์ ซึ่งเป็นขั้นตอนวิธีสำหรับการคำนวณค่าความหนาแน่นสถานะ ว่ามีขั้นตอนการทำงานอย่างไร งานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการนำขั้นตอนวิธีไปใช้ จุดเด่นและข้อจำกัดของขั้นตอนวิธี การปรับปรุงขั้นตอนวิธี การประยุกต์ใช้ และปัญหาที่น่าสนใจ

2. ขั้นตอนวิธีของหวัง-แลนด์อว์ (The Wang-Landau Algorithm)

ขั้นตอนวิธีของหวัง-แลนด์อว์ เพื่อใช้ในการหาค่าความหนาแน่นสถานะได้รับการเสนอครั้งแรกในปี ค.ศ. 2001 (Wang and Landau, 2001) โดยแนวคิดของขั้นตอนวิธีนี้ใช้การเดินสุ่ม (Random walks) เช่นเดียวกับวิธีมอนติคาร์โล (Monte Carlo methods) แต่เป็นการเดินสุ่มบนปริภูมิพลังงานหรือปริภูมิเรนจ์ (Range space) แทนการเดินสุ่มบนปริภูมิสถานะหรือปริภูมิโดเมน (Domain space) และจะทำการตรวจสอบว่าการเดินสุ่มเดินไปทั่วถึงทุกระดับพลังงานหรือไม่ โดยใช้การตรวจสอบความเรียบของฮิสโตแกรม โดยฮิสโตแกรมนี้ใช้สะสมจำนวนครั้งในการเดินสุ่มไปยังระดับพลังงานนั้น ๆ

ขั้นตอนวิธีหวัง-แลนด์อว์สามารถสรุปขั้นตอนการทำงานได้ดังนี้

ข้อมูลนำเข้า (Input):

ค่าคงตัวที่ใช้ในการปรับค่าความหนาแน่นสถานะ (f) และเกณฑ์ที่ใช้วัดความเรียบของฮิสโตแกรม (p)

ขั้นตอนวิธี (Algorithm):

1. คำนวณค่าระดับพลังงานที่เป็นไปได้ทั้งหมด (E)
2. ในขั้นแรก เนื่องจากเรายังไม่ทราบค่าความหนาแน่นสถานะของแต่ละระดับพลังงาน ดังนั้นจะกำหนดให้ค่าความหนาแน่นสถานะเท่ากับ 1 เหมือนกันทุกระดับพลังงาน และกำหนดให้ค่าฮิสโตแกรมของทุกระดับพลังงานเท่ากับ 0 ($g(E_i) := 1, H(E_i) := 0, \forall E_i$)
3. สุ่มเลือกรูปแบบการเรียงตัวของสปินขึ้นมา แล้วนำไปคำนวณค่าระดับพลังงาน กำหนดให้เป็น E_{old}
4. สุ่มเลือกสปินขึ้นมา 1 สปิน และทำการสลับทิศของสปินนั้น ซึ่งจะได้สถานะใหม่ แล้วนำไปคำนวณค่าระดับพลังงาน กำหนดให้เป็น E_{new}

5. คำนวณค่าความน่าจะเป็นในการเดินจากระดับพลังงาน E_{old} ไป E_{new} โดยเป็นสัดส่วนกับค่าความหนาแน่นสถานะ กล่าวคือ ถ้าค่า $g(E_{new})$ มากกว่าหรือเท่ากับ $g(E_{old})$ ระบบจะตัดสินใจอยู่ที่สถานะเดิม มิฉะนั้นระบบการเลือกเดินไปที่ระดับพลังงานใหม่ ดังสมการ

$$P(E_{old} \rightarrow E_{new}) = \min \left[1, \frac{g(E_{old})}{g(E_{new})} \right] \quad (4)$$

หากเลือกที่จะเปลี่ยนไปสถานะใหม่ เราจะทำการปรับค่าความหนาแน่นสถานะและค่าฮิสโตแกรมของระดับพลังงานใหม่ ดังนี้

$$g(E_{new}) := g(E_{new})f, H(E_{new}) := H(E_{new}) + 1$$

หากเลือกที่จะอยู่ที่สถานะเดิม เราจะทำการปรับค่าความหนาแน่นสถานะและค่าฮิสโตแกรมของระดับพลังงานเดิม ดังนี้

$$g(E_{old}) := g(E_{old})f, H(E_{old}) := H(E_{old}) + 1$$

6. ทำซ้ำขั้นที่ 4-5 จนกระทั่งค่าฮิสโตแกรมของทุกระดับพลังงานใกล้เคียงกัน (Flat Histogram) ซึ่งจะวัดจากเกณฑ์ความเรียบที่กำหนดไว้

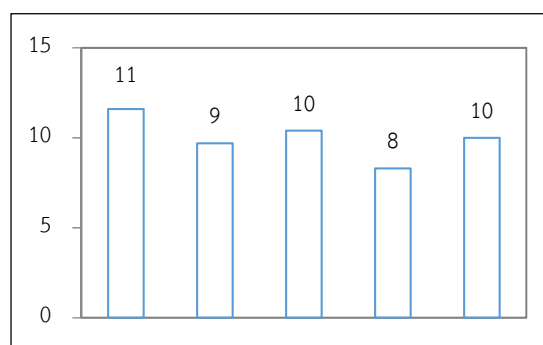
7. ล้างค่าในฮิสโตแกรมทั้งหมดให้เป็นศูนย์ และลดค่า f ลง เริ่มขั้นที่ 3-6 อีกครั้ง จนกระทั่ง f จะมีค่าเข้าใกล้ 1 หยุดการทำงาน

ผลลัพธ์ที่ได้ (Output): ค่าความหนาแน่นสถานะ $g(E)$

การใช้ความน่าจะเป็นในการเดินสุ่มตามสมการที่ (4) เป็นการเลือกเดินไปยังระดับพลังงานที่มีจำนวนครั้งในการเดินสุ่มไปถึงน้อย มากกว่าจะเดินไปยังระดับพลังงานที่ถูกเลือกบ่อยครั้ง ซึ่งทำให้การเดินสุ่มบนปริภูมิพลังงานเป็นไปอย่างทั่วถึง ซึ่งเป็นหัวใจสำคัญของขั้นตอนวิธีหวั่ง-กันเดว

เพื่อให้การเดินสุ่มไปยังแต่ละสถานะมีจำนวนที่ใกล้เคียงกัน ในขั้นตอนวิธีจึงมีฮิสโตแกรมสำหรับเก็บข้อมูลจำนวนครั้งสะสมในการเดินสุ่มไปถึงแต่ละระดับพลังงาน และใช้เกณฑ์วัดความเรียบของฮิสโตแกรม ในการทำงานจริงนั้น การที่จำนวนครั้งการเดินสุ่มไปยังแต่ละระดับพลังงานจะเท่ากันทั้งหมด เป็นไปได้น้อย คำว่า “เรียบ” ในที่นี้จึงหมายถึงจำนวนครั้งที่ใกล้เคียงกัน เพื่อให้เข้าใจเกณฑ์การวัดความเรียบของฮิสโตแกรม จะพิจารณาตัวอย่างต่อไปนี้

สมมติให้ฮิสโตแกรมของการเดินสุ่มเป็นดังรูปที่ 2



รูปที่ 2 ตัวอย่างฮิสโตแกรม

ค่าเฉลี่ยของฮิสโตแกรมคือ

$$\langle H(E) \rangle = (11 + 9 + 10 + 8 + 10) / 5 = 9.6$$

ถ้ากำหนดให้ เกณฑ์ที่ใช้วัดความเรียบของฮิสโตแกรม $p = 0.7$ ซึ่งหมายความว่าฮิสโตแกรมแต่ละระดับพลังงานต้องอยู่ในช่วงไม่ต่ำกว่า 70% ของค่าเฉลี่ย และไม่เกิน 130% ของค่าเฉลี่ย หรือ $6.72 \leq H(E_i) \leq 12.48$ ดังนั้นหากใช้ $p = 0.7$ เป็นเกณฑ์วัดความเรียบ จะได้ว่า ฮิสโตแกรมในตัวอย่างนี้เรียบแล้ว

หากเปลี่ยนเกณฑ์ความเรียบเป็น $p = 0.9$ (แต่ละค่าของฮิสโตแกรมต้องอยู่ในช่วงไม่ต่ำกว่า 90% ของค่าเฉลี่ยและไม่เกิน 110% ของค่าเฉลี่ยหรือ $8.64 \leq H(E_i) \leq 10.56$ ดังนั้นหากใช้ $p = 0.9$ เป็นเกณฑ์วัดความเรียบ จะได้ว่าฮิสโตแกรมนี้ยังไม่เรียบเนื่องจากมีค่า $H(E_1) = 11$ อยู่นอกช่วง

กำหนดเกณฑ์ความเรียบ p เรากล่าวว่า ฮิสโตแกรมมีความเรียบก็ต่อเมื่อ สอดคล้องกับเงื่อนไข

$$p \langle H(E) \rangle \leq H(E_i) \leq (1 + (1 - p)) \langle H(E) \rangle, \forall E_i \quad (5)$$

เมื่อ $\langle H(E) \rangle$ คือ ค่าเฉลี่ยของฮิสโตแกรม

สำหรับในระบบขนาดใหญ่ การตั้งเกณฑ์ความเรียบที่สูงเกินไปอาจทำให้ขั้นตอนวิธีใช้เวลาในการทำงานนาน หรือโปรแกรมทำงานไม่หยุด ในทางตรงกันข้ามหากเราตั้งเกณฑ์ความเรียบไว้ต่ำเกินไป อาจทำให้เกิดค่าคลาดเคลื่อน เนื่องจากการเดินสุ่มยังไม่ทั่วถึง ทำให้การปรับค่าความหนาแน่นสถานะในแต่ละรอบยังไม่เพียงพอ เราจึงจำเป็นต้องกำหนดเกณฑ์ความเรียบของฮิสโตแกรมนี้ให้เหมาะสมกับขนาดของระบบที่กำลังพิจารณา และความแม่นยำของค่าความหนาแน่นสถานะที่ต้องการ เช่น แบบจำลองไอซิงสองมิติ ขนาด $L = 32$ สามารถกำหนดเกณฑ์ความเรียบได้สูงถึง 95% (Wang and Landau, 2001) การหาค่าประมาณของปริพันธ์ในหนึ่งหรือสองมิติ สามารถกำหนดเกณฑ์ความเรียบได้ตั้งแต่ 60 - 90 % (Li et al., 2007) อย่างไรก็ตาม เราควรกำหนดเกณฑ์ความเรียบให้สูงไว้ก่อน (90 - 95%) เมื่อโปรแกรมใช้เวลาในการทำงานนานเกินไป จึงค่อยปรับลดลง

ในขั้นตอนวิธีของหวัง-แลนด์าว์ หลังจากการเดินสุ่มในปริภูมิพลังงานทุกครั้ง ค่าความหนาแน่นสถานะจะถูกปรับด้วยการคูณค่าคงตัว f หรือเราเรียกว่า ค่าคงตัวในการปรับ (Modification Factor) เพื่อช่วยในการปรับค่าความหนาแน่นสถานะให้เข้าสู่ความแม่นยำ เนื่องจากค่าความหนาแน่นสถานะส่วนใหญ่มีค่ามาก ในทางปฏิบัติ การเขียนโปรแกรมจะใช้ฟังก์ชันลอการิทึมมาช่วย เพื่อให้การคำนวณมีความแม่นยำขึ้น การปรับค่าความหนาแน่นสถานะจึงสามารถเขียนในรูปลอการิทึมฐานธรรมชาติได้ดังนี้

$$\log(g(E)) := \log(g(E)) + \log(f) \quad (6)$$

และเพื่อความสะดวกในการเขียนโปรแกรม ค่าคงตัวในการปรับเริ่มต้น (f_0) จะถูกกำหนดให้เท่ากับ e

เมื่อฮิสโตแกรมสอดคล้องกับเกณฑ์ความเรียบที่ตั้งไว้จะมีการลดค่า f ลง เพื่อให้การปรับค่า $g(E)$ ละเอียดยิ่งขึ้น โดยฟังก์ชันที่ใช้ในการปรับลดค่า f สามารถเป็นฟังก์ชันใดก็ได้ แต่ต้องมีสมบัติเป็นฟังก์ชันลดลงทางเดียวและเข้าสู่ 1 (Monotonically to 1) เช่น ฟังก์ชันรากที่ n $f_{i+1} = \sqrt[n]{f_i}$ โดยค่า n สามารถเลือกได้ ให้สอดคล้องกับเวลาที่มีและความแม่นยำที่ต้องการ โดยทั่วไป เราจะเลือกค่า $n = 2$ ในทำนองเดียวกัน เพื่อความสะดวกในการเขียนโปรแกรม การปรับค่า f สามารถเขียนในรูปฟังก์ชันลอการิทึมได้โดย

$$F_{i+1} = \frac{F_i}{2} \text{ เมื่อ } F = \log(f) \quad (7)$$

เมื่อค่า f ลดลงจนค่าเข้าใกล้ 1 แสดงว่า ค่าความหนาแน่นสถานะนั้นถูกปรับไปเพียงเล็กน้อย โปรแกรมจะสิ้นสุดการทำงานและให้ผลลัพธ์คือค่า $g(E)$

3. ผลการทำงาน

งานวิจัยที่เสนอขั้นตอนวิธีของหวัง-แลนด์าว์เป็นครั้งแรก (Wang and Landau, 2001) ผู้วิจัยได้ใช้ขั้นตอนวิธีในการหาค่าความหนาแน่นสถานะของของแบบจำลองพอดส์ 10 สถานะ สองมิติ ขนาด $L = 60$ ถึง $L = 200$ ซึ่งเป็นแบบจำลองที่มีการเปลี่ยน

สถานะอันดับหนึ่ง (First-order phase transition) เมื่อคำนวณค่าฟังก์ชันแบ่งกัน เพื่อหาค่าพลังงานภายใน พลังงานอิสระและค่าเอนโทรปี และพิจารณาอุณหภูมิวิกฤต (Critical Temperature: T_c) ของตัวแบบ จะได้ค่าอุณหภูมิวิกฤตที่ได้มีความแม่นยำและสอดคล้องกับค่าแม่นยำ

นอกจากนั้น ในงานวิจัยยังได้แสดงการนำขั้นตอนวิธีไปประยุกต์ใช้กับแบบจำลองแบบไอซิง ใน 2 มิติ ขนาด $L \times L$ เมื่อ $L = 32$ ถึง $L = 256$ ซึ่งเป็นแบบจำลองที่มีการเปลี่ยนสถานะอันดับสอง (Second-order phase transition) โดยขั้นตอนวิธีสามารถหาค่าความหนาแน่นสถานะ และคำนวณค่าทางอุณหพลศาสตร์ที่อุณหภูมิต่าง ๆ ได้อย่างแม่นยำ

Tröster และ Dellago (Tröster and Dellago, 2005) ได้ริเริ่มการนำขั้นตอนวิธีหวั่ง-ลันเตวาร์ ในการใช้หาค่าสูงสุดและต่ำสุดของฟังก์ชันที่จะนำมาใช้ในการหาค่าปริพันธ์ โดยวิธีการปรับช่วงค่าสูงสุดและต่ำสุดเอง (Self-adaptive range) และนำขั้นตอนวิธีดังกล่าวมาประมาณค่าปริพันธ์ อย่างไรก็ตาม งานวิจัยชิ้นนี้มีข้อจำกัดว่า ค่าต่ำสุดของปริพันธ์ (Integrand) ต้องมีค่ามากกว่าศูนย์

ต่อมาได้มีการเสนอวิธีการปรับปรุงการทำงานของขั้นตอนวิธีของหวั่ง-ลันเตวาร์ (Lee et al., 2006) โดยในงานวิจัยได้แสดงว่าการลดค่า f หลังจากโปรแกรมทำงานไประยะหนึ่ง ไม่ส่งผลต่อความแม่นยำของค่าความหนาแน่นสถานะที่ได้ โดยเฉพาะในกรณีที่ค่าความต่างระหว่างค่าสูงสุดและค่าต่ำสุดของฮิสโตแกรมไม่เปลี่ยนแปลง และยังแสดงให้เห็นว่าค่าความต่างนั้นเป็นสัดส่วนกับค่าคงตัวที่ใช้ในการปรับค่าความหนาแน่นสถานะ พร้อมทั้งเสนอขั้นตอนวิธีการลด f อีกรูปแบบหนึ่ง โดยได้นำไปใช้กับแบบจำลองไอซิงในสองมิติ ขนาด 8×8 , 16×16 และ 32×32 ซึ่งพบว่าขั้นตอนวิธีที่นำเสนอให้ค่าคลาดเคลื่อนลดลง

Li และคณะ (Li et al., 2007) นำขั้นตอนวิธีของหวั่ง-ลันเตวาร์มาประยุกต์ใช้ในการหาค่าประมาณปริพันธ์ในหนึ่งและสองมิตินิยามโดย

$$I_{1D} = \int_{-2}^2 (x^5 - 4x^3 + x^2 - x) \sin(4x) dx \quad (8)$$

$$I_{2D} = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 (x_1^6 - x_1 x_2^3 + x_1^2 x_2 + 2x_1) \sin(4x_1 + 1) \cos(4x_2) dx_1 dx_2 \quad (9)$$

โดยค่านี้สามารถหาค่าแม่นยำได้ เพื่อใช้ในการเปรียบเทียบความแม่นยำของขั้นตอนวิธี

ผลการทำงำนนั้นพบว่า ปัจจัยมีผลต่อความแม่นยำของค่าประมาณขึ้นอยู่กับกำรกำหนดค่า dy ให้มีค่าเล็กลง มากกว่ากำรกำหนดเกณฑ์ความเรียบของฮิสโตแกรมให้สูงขึ้น

นอกจากนั้น ในงานวิจัยชิ้นนี้ ยังนำขั้นตอนวิธีของหวั่ง-ลันเตวาร์มาประมาณค่าพลังงานของแบบจำลองแอนเดอร์สัน (Anderson model) ซึ่ง Blankenbecler และคณะ (Blankenbecler et al., 1987) ได้เสนอไว้ตั้งแต่ปี ค.ศ. 1987 ค่าพลังงานของแบบจำลองนี้อยู่ในรูปของปริพันธ์จำกัดเขตในหลายมิติ โดยที่ปริพันธ์เป็นฟังก์ชันที่มีลักษณะเป็นกราฟที่มีจุดยอดหลายจุดและมีความชันมาก ซึ่งเป็นข้อจำกัดของการใช้การประมาณค่าปริพันธ์โดยวิธีเชิงตัวเลขวิธีอื่น ผลจากการทำงำนพบว่าขั้นตอนวิธีของหวั่ง-ลันเตวาร์สามารถประมาณค่าพลังงานได้ใกล้เคียงกับค่าแม่นยำ ซึ่งวิธีเชิงตัวเลขวิธีอื่นทำไม่ได้ จุดเด่นอีกประการของขั้นตอนวิธีที่นำเสนอในงานวิจัยนี้คือการลดข้อกำรจัดเรียงค่าต่ำสุดของปริพันธ์ ซึ่งเดิมจำกัดว่าค่าต่ำสุดนี้จะต้องมากกว่าศูนย์ แต่ในงานวิจัยนี้ ค่าต่ำสุดของปริพันธ์จะมีค่าเท่าใดก็ได้

ความเชื่อมโยงระหว่างกำรหาค่าความหนาแน่นสถานะในปัญหำทางฟิสิกส์เชิงสถิติกับปัญหำการประมาณค่าปริพันธ์ในหลายมิติสามารถสรุปได้ดังตารางที่ 2

ตารางที่ 2 ตารางเปรียบเทียบการใช้ขั้นตอนวิธีของหวัง-ลันเตาในระบบแบบไม่ต่อเนื่องและต่อเนื่อง

ปัญหาทางฟิสิกส์เชิงสถิติ	ปัญหาการประมาณค่าปริพันธ์
1. โดเมนของปัญหาคือ รูปแบบการเรียงตัวของสปิน (Spin configurations) เป็นค่าไม่ต่อเนื่อง	1. โดเมนของปัญหาคือ ค่า x ที่อยู่ในช่วงขอบเขตของการอินทิเกรต เป็นค่าต่อเนื่อง
2. เรนจ์ของปัญหาคือ ปริภูมิพลังงานเป็นค่าไม่ต่อเนื่อง	2. เรนจ์ของปัญหาคือ ค่า y ที่สอดคล้องกับฟังก์ชันเป็นค่าต่อเนื่อง ดังนั้นในการขั้นตอนวิธีของหวัง-ลันเตา ต้องมีการแบ่งค่า y ออกเป็นช่วงย่อย ๆ กำหนดให้ แต่ละช่วงกว้าง dy
3. ค่าความหนาแน่นสถานะ ($g(E)$) คือจำนวนสถานะที่มีระดับพลังงาน เท่ากับ E	3. ค่าความหนาแน่นสถานะหรือ $g(y)$ คือจำนวนค่า x ที่อยู่ในโดเมน $[a,b]$ มีค่า y อยู่ในช่วงที่พิจารณา
4. การเดินสุ่มทำบนปริภูมิพลังงาน	4. การเดินสุ่มทำบนปริภูมิเรนจ์
5. ฟังก์ชันแบ่งกันคือ	5. ค่าประมาณของปริพันธ์คือ
$z = \sum_E g(E) e^{-\frac{E}{k_B T}}$	$I = \sum_y g(y) \cdot y$

ต่อมาได้มีการนำขั้นตอนวิธีของหวัง-ลันเตา มาวิเคราะห์ค่าคลาดเคลื่อนและปรับปรุง โดย Belardinelli และ Peereyra (Belardinelli and Peereyra, 2007) ได้นำเสนอขั้นตอนวิธี $1/t$ ซึ่งมีแนวคิดเดียวกับขั้นตอนวิธีของหวัง-ลันเตา เพื่อลดปัญหาการอิ่มตัวของค่าคลาดเคลื่อน (Error saturation)

ความแตกต่างระหว่างขั้นตอนวิธีของหวัง-ลันเตากับขั้นตอนวิธี $1/t$ คือ วิธีการปรับลดค่า f จากเดิม การปรับค่า f จะทำเมื่อฮิสโตแกรมสอดคล้องกับเกณฑ์ความเรียบ เป็นการปรับค่า f เมื่อการเดินสุ่มไปครบปริภูมิ y นั่นคือ $H(E_i) \neq 0, \forall i$ นอกจากนั้นยังเปลี่ยนเงื่อนไขในการลดค่า F จากเดิมที่ลดลงครึ่งหนึ่งเสมอซึ่งไม่ขึ้นกับจำนวนรอบในการทำงาน เป็นการลดค่าแบบขึ้นกับจำนวนรอบในการทำงาน (t) ซึ่งเป็นที่มาของชื่อของขั้นตอนวิธีนี้

ในงานวิจัยยังได้นำขั้นตอนวิธี $1/t$ ไปใช้กับแบบจำลองพอตส์ 10 สถานะ ในสองมิติ ขนาด $L = 40$ ถึง $L = 120$ และแบบจำลองไอซิ่งในสองมิติ ขนาด $L \times L$ เมื่อ $L = 8$ และ $L = 50$

ในปีต่อมา Belardinelli และคณะ (Belardinelli et al., 2008) ได้นำขั้นตอนวิธีแบบ $1/t$ มาประยุกต์ใช้กับการประมาณค่าปริพันธ์ในหลายมิติ ในการวิจัยได้พิจารณาการประมาณค่า I_{1D} และ I_{2D} เปรียบเทียบกับผลที่ได้จากขั้นตอนวิธีของหวัง-ลันเตา และพิจารณาปริพันธ์ในหนึ่งมิติเพิ่มขึ้นคือ

$$I_\pi = 4 \int_0^1 \sqrt{1-x^2} dx \quad (10)$$

ค่าแม่นยำของปริพันธ์คือ $I_\pi = \pi$ พร้อมทั้งพิจารณาปริพันธ์ใน 3-6 มิติ เพิ่มเติม โดยมีนิยามดังนี้

$$I_{nD} = \int_0^1 \int_0^1 \dots \int_0^1 \prod_{i=1}^n \cos(ix_i) dx_1 dx_2 \dots dx_n \quad (11)$$

โดยที่ปริพันธ์นี้มีค่าแม่นยำคือ $I_{nD} = \prod_{i=1}^n \frac{\sin(ix_i)}{i}$

ผลลัพธ์ของงานวิจัยนี้ได้แสดงให้เห็นว่าค่าความหนาแน่นสถานะที่ได้จากขั้นตอนวิธี $1/t$ เข้าสู่ค่าแม่นยำ แต่สาเหตุที่ค่าคลาดเคลื่อนยังคงเกิดการอิ่มตัว เกิดจากวิธีการแบ่งช่วงบนปริภูมิ y เพื่อแปลงระบบต่อเนื่องให้เป็นระบบไม่ต่อเนื่อง

วันหยกและพิน (Atisattapong and Maruphanton, 2016) ได้นำขั้นตอนวิธี $1/t$ มาปรับปรุง เพื่อหาค่าปริพันธ์ในหลายมิติ โดยเสนอให้ใช้ค่าเฉลี่ยของช่วงแทนใช้ค่ากึ่งกลาง ซึ่งส่งผลให้ค่าคลาดเคลื่อนของขั้นตอนวิธีไม่เกิดการอิ่มตัว ทั้งนี้ได้เสนอวิธีพิสูจน์ เพื่อ

ยืนยันว่าค่าคลาดเคลื่อนในการประมาณค่าจะไม่ขึ้นกับขนาดของช่วงย่อย ซึ่งทำให้เวลาในการคำนวณจะลดลงตามจำนวนรอบการเดินสุ่มที่ลดลง ผลของงานวิจัยนี้ทำให้เกิดแนวคิดที่ว่า สำหรับปริภูมิเรขาคณิตที่เป็นค่าต่อเนื่อง การแบ่งเป็นช่วงย่อยให้มีจำนวนช่วงมาก ๆ นั้นไม่จำเป็น และเนื่องจากค่าคลาดเคลื่อนที่ไม่ขึ้นกับขนาดของช่วงย่อย เพื่อให้สะดวกในการคำนวณ เราควรแบ่งปริภูมิเรขาคณิตให้มีขนาดใหญ่ที่สุด นั่นคือ แบ่งปริภูมิเรขาคณิตออกเป็นสองช่วงย่อยก็เพียงพอ

จิรารัตน์และวันหยก (Chairat and Atisattapong, 2016) ได้ศึกษาเงื่อนไขการหยุดของขั้นตอนวิธีหวัง-ลันเตา และได้เสนอเงื่อนไขการหยุดที่ขึ้นกับการอ้อมตัวของค่าคลาดเคลื่อนแทนการปรับลดค่า f แบบเดิม เมื่อนำเงื่อนไขการหยุดนี้ไปใช้ในการประมาณค่าปริพันธ์ในสมการที่ (10) พบว่า เวลาในการคำนวณลดลง 83.91% ในขณะที่ค่าคลาดเคลื่อนสัมพัทธ์ของค่าประมาณเพิ่มขึ้นเพียง 5.29% เมื่อเทียบกับการใช้เงื่อนไขการหยุดแบบเดิม นั่นคือเงื่อนไขการหยุดแบบใหม่สามารถช่วยลดเวลาในการคำนวณได้

วันหยกและพศิน (Atisattapong and Maruphanton, 2017) ได้นำแนวคิดจากขั้นตอนวิธี $1/t$ ที่เสนอไว้ มาใช้ในการหาค่าปริพันธ์ของฟังก์ชันที่มีลักษณะพิเศษคือมีจุดยอดชันมาก เมื่อนำขั้นตอนวิธีที่ปรับปรุงมาเพิ่มเติมการแบ่งสถานะที่ลดลง โดยแทนที่จะแบ่งเป็นหลายสถานะตามค่า dy ก็ปรับลดลงเหลือเพียงสองสถานะ ผลของงานวิจัยแสดงให้เห็นว่า ขั้นตอนวิธีแบบสองสถานะนั้นสามารถหาค่าปริพันธ์ของฟังก์ชัน Gaussian ring และ Setting sun Feynman diagram ได้ ในขณะที่งานวิจัยก่อนหน้านี้ไม่สามารถทำได้ ทั้งนี้การหาปริพันธ์ในขั้นตอนวิธีแบบสองสถานะไม่จำเป็นต้องหาค่าสูงสุดหรือต่ำสุดของปริพันธ์ ซึ่งเป็นเรื่องที่ยุ่งยาก เพียงแต่กำหนดค่าที่ใช้ในการแบ่งสถานะ ขั้นตอนวิธีนี้จะสามารถทำงานได้อย่างมีประสิทธิภาพ

4. บทสรุปและข้อเสนอแนะ

การศึกษาขั้นตอนวิธีหวัง-ลันเตามีหลายส่วน ทั้งการนำขั้นตอนวิธีมาประยุกต์ใช้ การวิเคราะห์ค่าคลาดเคลื่อนของผลลัพธ์ และการปรับปรุงพัฒนาขั้นตอนวิธี ซึ่งในบทความวิจัยนี้ ได้เลือกอภิปรายเพียงส่วนหนึ่งของแนวทางการพัฒนาขั้นตอนวิธี โดยมุ่งเน้นที่การหาค่าปริพันธ์ในหลายมิติ ซึ่งเป็นปัญหาพื้นฐานและมีความซับซ้อนในงานทางด้านคณิตศาสตร์และวิศวกรรม อย่างไรก็ตามขั้นตอนวิธีนี้ยังมีการพัฒนาและศึกษาในเชิงอื่นอีกมาก โดยเฉพาะปัญหาทางฟิสิกส์เชิงสถิติ ทั้งการใช้ในแบบจำลองพอดส์ แบบจำลองไอซิง และการหมุนพับของสายโปรตีน

ปัญหาที่เหมาะสมกับการนำขั้นตอนวิธีหวัง-ลันเตาไปแก้ปัญหามีลักษณะสำคัญ คือโดเมนของปัญหามีหลายมิติ แต่เรนจ์ของปัญหาเป็นค่าในหนึ่งมิติ เมื่อเพิ่มมิติของโดเมน ทำให้เกิดความยุ่งยากในการคำนวณ ซึ่งขั้นตอนวิธีหวัง-ลันเตาเลือกที่จะแก้ปัญหาโดยการพิจารณาบนปริภูมิเรขาคณิต การแก้ปัญหามีโดเมนหลายมิติ ขั้นตอนวิธีนี้จึงยังคงใช้งานได้อย่างมีประสิทธิภาพ

แนวคิดหนึ่งที่น่าสนใจและสามารถนำขั้นตอนวิธีไปต่อยอดได้ คือการคำนวณค่าความน่าเชื่อถือของเครือข่าย (Network reliability) (Cook and Ramierz-Marquez, 2007; Gertsbakh and Shpungin, 2010) โดยเฉพาะในเครือข่ายที่มีขนาดใหญ่ เนื่องจาก การประมาณค่าโดยใช้ขั้นตอนวิธีมอนติคาร์โลแบบดั้งเดิมขาดประสิทธิภาพสำหรับเครือข่ายขนาดใหญ่ที่มีความน่าเชื่อถือสูง การนำขั้นตอนวิธีของหวัง-ลันเตามาแก้ปัญหาดังกล่าวจึงเป็นอีกแนวทางหนึ่งที่สามารถศึกษาเพิ่มเติมได้ต่อไป

5. กิตติกรรมประกาศ

ผู้วิจัยขอขอบคุณทุนสนับสนุนการวิจัย จากเงินกองทุนวิจัยมหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์ภายใต้ ทุนทั่วไป ตามสัญญาเลขที่ ทป 2/14/2561

6. เอกสารอ้างอิง

- Atisattapong, W. and Maruphanton, P. (2016). Obviating the Bin Width Effect of the $1/t$ Algorithm for Multidimensional Numerical Integration. *Applied Numerical Mathematics* 104: 133–140.
- Atisattapong, W. and Maruphanton, P. (2017). A $1/t$ Algorithm with the Density of Two States for Estimating Multidimensional Integrals. *Computer Physics Communication* 220: 122-128.
- Belardinelli, R. E. and Peereyra, V. D. (2007). Fast algorithm to calculate the density of states. *Phys. Rev. E* 75: 046701.

- Belardinelli, R. E. and Peereyra, V. D. (2007). Wang-Landau algorithm: A theoretical analysis of the saturation of the error. J. Chem. Phys. 127: 184105.
- Belardinelli, R. E., Manzi, S. and Peereyra, V. D., (2008). Analysis of the convergence of the $1/t$ and Wang-Landau algorithms in the calculation of multidimensional integrals. Phys. Rev. E 78: 067701.
- Blankenbecler, R., Fulco, J. R., Gill, W. and Scalapino, (1987) Ground-state properties of the periodic Anderson model. Phys. Rev. Lett. 58: 411
- Chairat, J. and Atisattapong, W. (2016). A New termination Criterion of the Wang-Landau Algorithm for Numerical Integration. Proceeding of International Conference on Applied Statistics (ICAS2016)
- Cook, J. L. and Ramirez-Marquez, J. E., (2007). Two-terminal reliability analyses for a mobile ad hoc wireless network. Reliability Engineering and System Safety 92(6): 821-829.
- Gertsbakh, I. B. and Shpungin, Y. (2010). Models of Network Reliability Analysis, Combinatorics, and Monte Carlo. London, UK.: CRC Press.
- Landau, D. P. and Binder, K. (2009). A guide to Monte Carlo Simulations in statistical physics. New York: Cambridge University Press.
- Lee, H. K., Okabe, Y. and Landau, D. P. (2006). Convergence and refinement of the Wang-Landau algorithm. Comput. Phys. Commun. 175: 36.
- Li, Y. W., Wüst, T., Landau, D. P. and Lin, H. Q. (2007). Numerical integration using Wang-Landau sampling. Comput. Phys. Commun. 177: 524.
- Tröster, A. and Dellago, C. (2005). Wang-Landau sampling with self-adaptive range. Phys. Rev. E. 71: 066705
- Wang, F. and Landau, D. P. (2001). Efficient multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states: a random walk algorithm to produce a flat histogram. Phys. Rev. E. 64: 056101.
- Widom, B. (2002). Statistical Mechanics: a concise introduction for chemists. New York: University Press.

