

ขั้นตอนวิธีหวัง-ลันเดาและการประยุกต์ใช้ในแบบจำลองพอตส์

Wang-Landau algorithm and its application to the Potts model

มานิต แก้วทองค้ำ*

ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยรามคำแหง

*Corresponding author E-mail: manit.k@ru.ac.th

วันที่รับบทความ: 16 กันยายน 2563, วันที่แก้ไขบทความ: 28 ตุลาคม 2563, วันที่ตอบรับบทความ: 30 ตุลาคม 2563

บทคัดย่อ

ขั้นตอนวิธีหวัง-ลันเดาเป็นหนึ่งในวิธีมอนติคาร์โลที่ใช้สร้างความหนาแน่นสถานะจากการเดินสุ่มในปริภูมิพลังงาน ความหนาแน่นสถานะซึ่งในเริ่มต้นนั้นเป็นปริมาณที่ไม่ทราบค่า จะถูกปรับแก้ระหว่างกระบวนการเดินสุ่มจนกระทั่งเป็นไปตามเกณฑ์ที่กำหนด ด้วยวิธีดังกล่าวทำให้เราสามารถคำนวณปริมาณอุณหพลศาสตร์ได้อย่างแม่นยำโดยไม่ต้องประสบปัญหาการเข้าสู่สมดุลอย่างเชื่องช้า บริเวณจุดวิกฤติ เนื่องจากความหนาแน่นสถานะไม่ขึ้นกับอุณหภูมิ เพื่อสาธิตขั้นตอนวิธีหวัง-ลันเดา เราใช้วิธีการดังกล่าวกับแบบจำลองกิวสเททพอตส์ด้วย $q = 10$ สถานะ บนแลตทิซสี่เหลี่ยมในสองมิติ แบบจำลองจะแสดงการเปลี่ยนเฟสลำดับหนึ่งสำหรับ $q > 4$ จากผลการจำลอง ความจุความร้อนของระบบที่มีขนาดจำกัด คำนวณจากความหนาแน่นสถานะ จะเข้าสู่ค่าสูงสุดที่อุณหภูมิวิกฤติ เมื่อวิเคราะห์ผลของขนาดระบบ อุณหภูมิวิกฤติในลิมิตอุณหพลศาสตร์จะสามารถหาค่าได้

คำสำคัญ: ขั้นตอนวิธีหวัง-ลันเดา, แบบจำลองพอตส์, วิธีมอนติคาร์โล

Abstract

Wang-Landau algorithm is a variant of Monte Carlo methods used to generate the density of states by performing random walks in the energy space. The density of states, an initially unknown parameter, is modified during the random walk process until criteria are met. This method enables us to calculate the thermodynamic variables accurately without encountering the critical slowing down near the critical point as the density of states is independent of temperature. To illustrate the Wang-Landau algorithm, we apply the method to

the q -state Potts model with $q = 10$ states on a two-dimensional square lattice. The model exhibits a first-order phase transition for $q > 4$. From simulation results, the heat capacity of finite size systems, calculated from the density of states, reaches its maximum value at the critical temperature. By analyzing the finite size effect, the critical temperature in the thermodynamic limit is obtained.

Keywords: Wang-Landau algorithm, Potts model, Monte Carlo method

เนื้อหาของฟิสิกส์เชิงสถิติสามารถสรุปให้กระชับผ่านเพียงสมการเดียว คือ

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

โดยที่ฟังก์ชัน Z มีชื่อเรียกว่า ฟังก์ชันแบ่งส่วน (Partition function) หาได้จากผลรวมของสถานะ a มีพลังงาน E_a ของทุก ๆ สถานะที่เป็นไปได้ทั้งหมด เมื่อระบบอยู่ในสมดุลความร้อนกับสิ่งแวดล้อมที่อุณหภูมิ T ส่วน k_B คือ ค่าคงที่โบลต์ซมันน์ ข้อมูลทั้งหมดของระบบถูกรวบรวมไว้ในฟังก์ชันแบ่งส่วน ยกตัวอย่างเช่น พลังงานอิสระเฮล์มโฮลทซ์ (Helmholtz free energy) หาได้จาก

$$F = -k_B T \ln Z \quad (2)$$

อย่างไรก็ตาม มีระบบเพียงไม่กี่ระบบเท่านั้นที่สามารถเขียนฟังก์ชันแบ่งส่วนให้อยู่ในรูปที่กระชับได้ และแน่นอนว่าส่วนใหญ่ที่เป็นเนื้อหาที่อยู่ในหนังสือฟิสิกส์เชิงสถิติ สำหรับระบบส่วนใหญ่ที่อนุภาคมีอันตรกิริยาต่อกัน ฟังก์ชันแบ่งส่วนต้องอาศัยการประมาณแทบทั้งสิ้น

สำหรับการประมาณโดยใช้คอมพิวเตอร์เข้ามาช่วยคำนวณ หนึ่งในวิธีที่ได้รับความนิยมคือ วิธีมอนติคาร์โล (Monte Carlo method) [1] ใจความหลักของวิธีมอนติคาร์โลคือ ใช้เลขสุ่ม (เทียม) เพื่อสำรวจสถานะของระบบที่เป็นอิสระต่อกันให้ได้มากที่สุดเท่าที่จะทำได้ โดยหวังว่าจำนวนสถานะที่เป็นอิสระต่อกันเหล่านี้ จะเป็นตัวแทนที่ดีของสถานะทั้งหมดของระบบ วิธีที่ง่ายที่สุดคือ สร้างสถานะสุ่มมาจำนวน N สถานะ แต่ละสถานะ i จะให้ปริมาณของระบบที่เราสนใจเท่ากับ A_i ค่าเฉลี่ยของปริมาณนี้จึงประมาณได้ว่า

$$\langle A_i \rangle_{est} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_i \approx \langle A_i \rangle \quad (3)$$

เพื่อให้ค่าประมาณ $\langle A_i \rangle_{est}$ ใกล้เคียงกับค่าเฉลี่ยจริง $\langle A_i \rangle$ มากที่สุด จำนวนสถานะสุ่มที่สร้างขึ้นต้องมีจำนวนมาก ๆ $N \rightarrow \infty$ ถ้าจำนวนสถานะสุ่ม N มีน้อย ๆ สถานะที่ได้อาจจะไม่เป็นตัวแทนที่ดีของระบบ สำหรับวิธีสร้างสถานะสุ่มที่ดีกว่าคือ การสุ่มตัวอย่างที่สำคัญ (Importance sampling) ซึ่งมีหลากหลายรูปแบบ ยกตัวอย่างเช่น การสุ่มตัวอย่างที่สำคัญแบบเมโทรโพลิซิส (Metropolis importance sampling) เมื่อรวมวิธีมอนติคาร์โลกับการสุ่มตัวอย่างที่สำคัญ เราสามารถจำลองระบบที่อุณหภูมิ T ต่าง ๆ ได้ โดยทั่วไปแล้ว สถานะสมดุลสุดท้ายของระบบจะไม่ขึ้นกับสถานะเริ่มต้น ถ้าระบบวิวัฒนาการไปโดยใช้เวลา $t \gg \tau$ นานกว่าเวลาที่ระบบใช้ผ่อนคลาย τ

(Relaxation time) มาก ๆ ดังนั้น ระยะเวลาที่ใช้ในการจำลองทางคอมพิวเตอร์โดยวิธีดังกล่าวนอกจากจะขึ้นอยู่กับจำนวนสถานะสุ่ม N แล้ว ยังขึ้นอยู่กับเวลาผ่อนคลายของระบบ τ ด้วยเช่นกัน สำหรับระบบที่มีการเปลี่ยนเฟสลำดับสอง (Second-order phase transition) ผ่านอุณหภูมิวิกฤต (Critical temperature) T_c เวลาผ่อนคลาย τ จะสเกลตามผลต่างอุณหภูมิเทียบกับอุณหภูมิวิกฤตเป็นไปตามความสัมพันธ์ [2]

$$\tau \propto |T - T_c|^{-\nu z} \quad (4)$$

โดยที่ ν และ z เป็นเลขชี้กำลังวิกฤต (Critical exponents) เมื่อขนาด L ของระบบเข้าสู่ลิมิตอุณหพลศาสตร์ $L \rightarrow \infty$ เวลาผ่อนคลายจะมีค่าเป็นอนันต์ที่อุณหภูมิวิกฤตดังกล่าว สำหรับระบบอื่น ๆ ที่มีเฟสร่วมหลายเฟส (Coexisting phases) ที่จุดเปลี่ยนเฟสลำดับหนึ่ง (First-order phase transition) หรือระบบที่มีภูมิพลังงาน (Energy landscape) ที่ซับซ้อน เช่น แบบจำลองสปินกลาส (Spin glass model) การที่ระบบจะข้ามกำแพงศักย์จากเฟสหนึ่งไปยังอีกเฟสหนึ่งเป็นเหตุการณ์ที่มีโอกาสเกิดขึ้นได้น้อย ทำให้ต้องเสียเวลามากในการจำลองระบบเพื่อที่จะข้ามปัญหาเหล่านี้ จำเป็นต้องใช้เทคนิคที่ซับซ้อนขึ้น หรือไม่ก็หาทางเลือกอื่นที่แตกต่างออกไป

หวังและลันเดา [3,4] ได้นำเสนอวิธีมอนติคาร์โลอีกวิธีหนึ่งที่สามารถแก้ปัญหาข้างต้นได้ โดยการหาความหนาแน่นสถานะ (Density of states) ของระบบที่พลังงาน E ใด ๆ โดยตรง ค่าเฉลี่ยของปริมาณมหภาคที่เป็นฟังก์ชันของพลังงาน E ที่อุณหภูมิใด ๆ ก็จะสามารถหาได้จากความหนาแน่นสถานะดังกล่าว ขั้นตอนวิธีหวัง-ลันเดาได้ถูกนำไปปรับปรุงและประยุกต์ใช้อย่างกว้างขวาง ตัวอย่างบทความที่ศึกษาขั้นตอนวิธีหวัง-ลันเดา เช่น การประยุกต์ใช้กับระบบที่ต่อเนื่อง [5] และระบบที่มีตัวแปรบ่งบอกระเบียบ (Order parameter) หลายตัวแปร [6] รวมถึงการปรับปรุงขั้นตอนวิธีให้มีประสิทธิภาพยิ่งขึ้น [7,8] และการแก้ปัญหาบริเวณขอบของความหนาแน่นสถานะ [9] นอกจากนี้ ขั้นตอนวิธีหวัง-ลันเดายังถูกนำไปใช้กับแบบจำลองต่าง ๆ เช่น เพื่อหาประจุศูนย์กลาง (Central charge) ในทฤษฎีสันนามคงแบบ (Conformal field theory) [10] หาเอนโทรปีของระบบแม่เหล็กแอนดิเฟอร์โรเจอจางโดยใช้แบบจำลองไอซิง (Ising model) [11] หาแผนภาพสถานะของแบบจำลองพอดส์บนแลตทิซสามเหลี่ยม [12] และศึกษาจุดวิกฤตในแบบจำลองบลูม-กาเปิล (Blume-Capel model) [13] หรือแม้กระทั่งนำไปใช้เป็นขั้นตอนวิธีหาค่าที่เหมาะสมที่สุด (Optimization algorithm) [14]

สำหรับวัตถุประสงค์ของบทความนี้คือ นำเสนอวิธีการจำลองทางคอมพิวเตอร์ทางเลือกอีกวิธีการหนึ่ง เพื่อให้ผู้อ่านที่มีความสนใจในด้านนี้ได้นำไปประยุกต์ใช้งาน โดยจะเน้นเฉพาะส่วนสำคัญของขั้นตอนวิธีหวัง-ลันเดา เมื่อผู้สนใจสามารถเขียนแบบจำลองและเปรียบเทียบกับผลได้แล้ว ก็จะเป็นเรื่องง่ายที่จะสร้างขั้นตอนวิธีหวัง-ลันเดาที่ซับซ้อนขึ้นไปอีก

ขั้นตอนวิธีหวัง-ลันเดา

ขั้นตอนวิธีหวัง-ลันเดา (Wang-Landau algorithm) [3,4] เป็นขั้นตอนวิธีมอนติคาร์โลที่หาความหนาแน่นสถานะ $g(E)$ สำหรับพลังงาน E ใด ๆ เมื่อรู้ความหนาแน่นสถานะ ก็สามารถคำนวณฟังก์ชันแบ่งส่วนได้โดยตรง เป็นไปตามสมการ (1)

$$Z = \sum_a e^{-E_a/k_B T} = \sum_E g(E) e^{-E/k_B T} \quad (5)$$

มีความน่าจะเป็นที่จะเจอระบบมีพลังงาน E เท่ากับ

$$p(E) = g(E)e^{-E/k_B T} / Z \quad (6)$$

ทำให้ปริมาณของระบบ $A(E)$ สามารถหาค่าเฉลี่ยได้จาก

$$\langle A(E) \rangle = \sum_E p(E) A(E) \quad (7)$$

เพื่อที่จะหาความหนาแน่นสถานะ $g(E)$ จินตนาการว่ามีการเดินแบบสุ่ม (Random walk) ในปริภูมิพลังงาน (Energy space) ทุกพลังงานจะถูกเยี่ยมชมในจำนวนที่เท่ากัน ถ้าความน่าจะเป็นในการเดินแบบสุ่มไปเยี่ยมพลังงานดังกล่าวแปรผันตรงกับ $1/g(E)$ การที่พลังงานทุกพลังงานถูกเยี่ยมชมในจำนวนที่เท่ากัน จะทำให้ฮิสโตแกรมพลังงานนั้นเรียบ บางครั้งจึงเรียกขั้นตอนวิธีห้วง-ลันเดาว่าเป็นวิธีฮิสโตแกรมเรียบ (Flat histogram method) เนื่องจากในการจำลองเริ่มแรกนั้น ยังไม่ทราบความหนาแน่นสถานะที่ถูกต้อง ดังนั้นใจความหลักของขั้นตอนวิธีห้วง-ลันเดาก็คือ สร้างวิธีปรับเปลี่ยนความหนาแน่นสถานะระหว่างการเยี่ยมชม จนทำให้ฮิสโตแกรมพลังงานนั้นเรียบ

สมมุติว่าระบบอยู่ในสถานะเริ่มต้น m มีพลังงาน E_m สร้างสถานะทดลองแบบสุ่ม n มีพลังงาน E_n ความน่าจะเป็นที่จะเดินสุ่มไปเยี่ยมสถานะทดลอง n มีค่าเท่ากับ

$$p(E_m \rightarrow E_n) = \min [g(E_m)/g(E_n), 1] \quad (8)$$

ถ้าความน่าจะเป็น $p(E_m \rightarrow E_n)$ ถูกยอมรับ ก็จะเดินสุ่มไปเยี่ยมสถานะทดลอง n จริง ทำให้สถานะสุดท้าย f ของระบบเปลี่ยนไปเป็นสถานะ $f = n$ ที่มีพลังงาน $E_f = E_n$ ในทางตรงกันข้าม ถ้าความน่าจะเป็นดังกล่าวถูกปฏิเสธ ก็จะไม่ได้เดินสุ่มไปเยี่ยมสถานะทดลองนั้น แต่จะไปเยี่ยมสถานะเริ่มต้น $f = m$ มีพลังงาน $E_f = E_m$ แทน เมื่อสถานะสุดท้าย f ถูกเยี่ยมชม ก็จะปรับความหนาแน่นสถานะเป็น $g(E_f) \leftarrow k g(E_f)$ และปรับฮิสโตแกรมพลังงานเป็น $h(E_f) \leftarrow h(E_f) + 1$ เมื่อ $k = k_0 > 1$ เป็นค่าคงที่เริ่มต้น การเดินสุ่มไปเยี่ยมสถานะต่าง ๆ จะดำเนินต่อไป จนกระทั่งฮิสโตแกรมพลังงานเรียบ ก็จะปรับค่าคงที่ $k \leftarrow \sqrt{k}$ และตั้งค่า $h(E) = 0$ ใหม่ สำหรับทุก ๆ ค่า E หลังจากนั้นเริ่มกระบวนการเดินสุ่มใหม่ จนกระทั่งค่าคงที่ $k \leq k_f$ เป็นไปตามเงื่อนไขที่กำหนด เป็นอันสิ้นสุดกระบวนการเดินสุ่ม พร้อมกับได้ความหนาแน่นสถานะ $g(E)$ ที่ต้องการ เหนือที่บอกว่าฮิสโตแกรมพลังงานเรียบ อาจกำหนดได้ว่า $h(E) \geq c \bar{h}$ สำหรับทุก ๆ ค่า E เมื่อ $\bar{h}$ คือ ค่าเฉลี่ยฮิสโตแกรมและ $0 \leq c \leq 1$ คือ ตัวแปรที่บ่งบอกความเรียบของฮิสโตแกรม เช่น ถ้า $c = 0.8$ หมายความว่า $h(E)$ ของทุก ๆ ค่า E มีค่ามากกว่าหรือเท่ากับ 80% ของค่าเฉลี่ยฮิสโตแกรม ขั้นตอนวิธีห้วง-ลันเดาสามารถสรุปได้ดังนี้

- 1) กำหนดค่าเริ่มต้น $h(E) = 0, g(E) = 1$ สำหรับทุก ๆ ค่า E กำหนดค่าคงที่ k_0, k_f และค่าคงที่ c กำหนดสถานะเริ่มต้น m ของระบบ
- 2) สำหรับลำดับ $i = 0, 1, 2, 3, \dots$ ที่ $k_i > k_f$
 - 2.1) สร้างสถานะทดลอง n แบบสุ่ม
 - 2.2) คำนวณความน่าจะเป็นที่จะเชื่อมสถานะทดลอง $p(E_m \rightarrow E_n) = \min [g(E_m)/g(E_n), 1]$
 - 2.3) สร้างเลขสุ่ม $0 < r < 1$ ถ้า $p(E_m \rightarrow E_n) > r$ ไปเชื่อมสถานะทดลอง n สถานะสุดท้ายของระบบคือ $f = n$ มีพลังงาน $E_f = E_n$
 - 2.4) ถ้า $p(E_m \rightarrow E_n) \leq r$ ไปเชื่อมสถานะเริ่มต้น m สถานะสุดท้ายของระบบคือ $f = m$ มีพลังงาน $E_f = E_m$
 - 2.5) ปรับความหนาแน่นสถานะเป็น $g(E_f) \leftarrow k_i g(E_f)$ และปรับฮิสโทแกรมพลังงานเป็น $h(E_f) \leftarrow h(E_f) + 1$
 - 2.6) ทดสอบว่าฮิสโทแกรมพลังงานเรียบหรือไม่ ถ้า $h(E) \geq c\bar{h}$ สำหรับทุก ๆ ค่า E ปรับค่าคงที่ $k_{i+1} \leftarrow \sqrt{k_i}$ และตั้งค่า $h(E) = 0$ ใหม่ แล้วไปยังข้อ 2)
 - 2.7) ถ้า $h(E) < c\bar{h}$ สำหรับบางค่า E ไปยังข้อ 2.1)
- 3) ถ้า $k_i \leq k_f$ สิ้นสุดกระบวนการเดินสุ่ม

เพื่อสาธิตการประยุกต์ใช้งานวิธีหวั่ง-กันเคาในระบบที่มีเฟสรวมหลายเฟสที่จุดเปลี่ยนเฟสลำดับหนึ่ง จะศึกษาแบบจำลองระบบทางแม่เหล็กที่เรียกว่า แบบจำลองพอตส์ (Potts model) ในสองมิติ

แบบจำลองพอตส์

แบบจำลองพอตส์ หรือแบบจำลองควิสเตทพอตส์ (q -state Potts model) เป็นแบบจำลองที่ถูกสร้างขึ้นมาเพื่อใช้ศึกษาสมบัติทางแม่เหล็กของระบบที่ประกอบด้วยสปินที่มีอันตรกิริยาต่อกัน ฮามิลโตเนียนของระบบเมื่อไม่มีสนามแม่เหล็กภายนอกสามารถเขียนได้เป็น [15]

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{s_i, s_j} \quad (9)$$

สปิน $s_i = 1, 2, 3, \dots, q$ มีสถานะได้ q สถานะ ที่แตกต่างกัน สัญลักษณ์ δ_{s_i, s_j} แทนโครเนกเกอร์เดลตา เมื่อสปิน s_i และสปิน s_j ที่เป็นเพื่อนบ้านใกล้สุด (Nearest neighbor) มีสถานะเหมือนกัน พลังงานระหว่างพันธะมีค่าเท่ากับ $-J$ และมีค่าเท่ากับ 0 ถ้าสปิน s_i และสปิน s_j มีสถานะที่ต่างกัน โดยมีค่าคงที่ $J > 0$ แทนความแรงของพันธะ สังเกตว่า ผลรวมจะคิดเฉพาะสปินเพื่อนบ้านใกล้สุด s_j ของสปิน s_i เท่านั้น ระบบมีสถานะพื้นที่สมมูลกันได้ q สถานะ ที่สปินทุกตัวในระบบมีสถานะ q เหมือนกัน เมื่อ $q = 2$ แบบจำลองพอตส์จะเหมือนกับแบบจำลองไอซิง และเมื่อ $q \rightarrow \infty$ แบบจำลองพอตส์จะเหมือนกับแบบจำลองเอ็กซ์วาย (XY model)

สำหรับระบบสปินบนแลตทิซสี่เหลี่ยมในสองมิติ การเปลี่ยนเฟสแม่เหล็กจะเป็นการเปลี่ยนเฟสลำดับสองเมื่อ $q \leq 4$ และจะเป็นการเปลี่ยนเฟสลำดับหนึ่งเมื่อ $q > 4$ อุณหภูมิวิกฤตสำหรับ $q = 2$ และ $q \geq 4$ มีค่าเท่ากับ

$$k_B T_c = J / \ln(1 + \sqrt{q}) \quad (10)$$

ยกตัวอย่างเช่น เมื่อแทน $q = 2$ และ $J = 2$ จะได้ $k_B T_c = 2.2691 \dots$ เท่ากับอุณหภูมิวิกฤติของแบบจำลองไอซิง

ผลการจำลองและวิเคราะห์ผล

บทความนี้ ยกตัวอย่างการประยุกต์ใช้ขั้นตอนวิธีหวั่ง-กันเดอในแบบจำลองพอดส์บนแลตทิซสี่เหลี่ยมสองมิติ ที่สปินมีสถานะได้ทั้งหมด $q = 10$ สถานะ เพื่อความสะดวกจะกำหนดให้ $k_B = 1$ และ $J = 1$ ขนาดของแลตทิซอยู่ในช่วง $L = 4 \times 4$ ถึง $L = 20 \times 20$ เงื่อนไขขอบของแลตทิซสี่เหลี่ยมจะเป็นแบบคาบ (Periodic boundary conditions) ขนาดของแลตทิซ ดังกล่าวสามารถจำลองบนคอมพิวเตอร์ทั่วไปได้โดยใช้เวลาไม่นานมาก ตัวคงที่ต่าง ๆ ที่ใช้ในวิธีหวั่ง-กันเดอมี่ค่าดังนี้ $k_0 = e \approx 2.71828$, $k_f = 10^{-8}$ ถึง $k_f = 10^{-6}$ และ $c = 0.80$ ถึง $c = 0.95$ ขึ้นอยู่กับขนาดของแลตทิซ

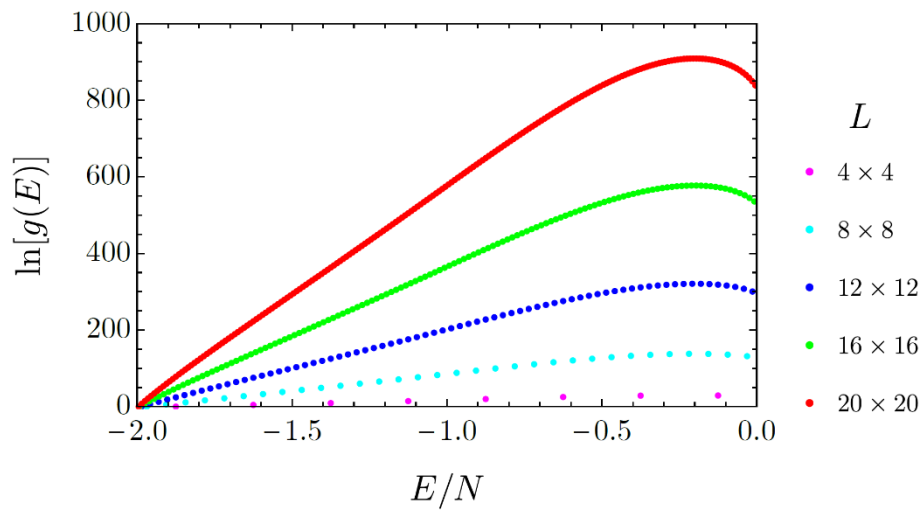
รูปที่ 1 แสดงความหนาแน่นสถานะที่ค่าพลังงานต่าง ๆ เมื่อเพิ่มขนาดของระบบ ความหนาแน่นสถานะก็จะเพิ่มขึ้นด้วย พลังงานต่อสปิน E/N มีค่าอยู่ในช่วง -2.0 ถึง 0.0 สังเกตว่า ค่าความหนาแน่นสถานะอยู่ในสเกล $\ln[g(E)]$ ความจุความร้อน $C_V(T)$ หาได้จากสมการ

$$C_V(T) = (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) / k_B T^2 \quad (11)$$

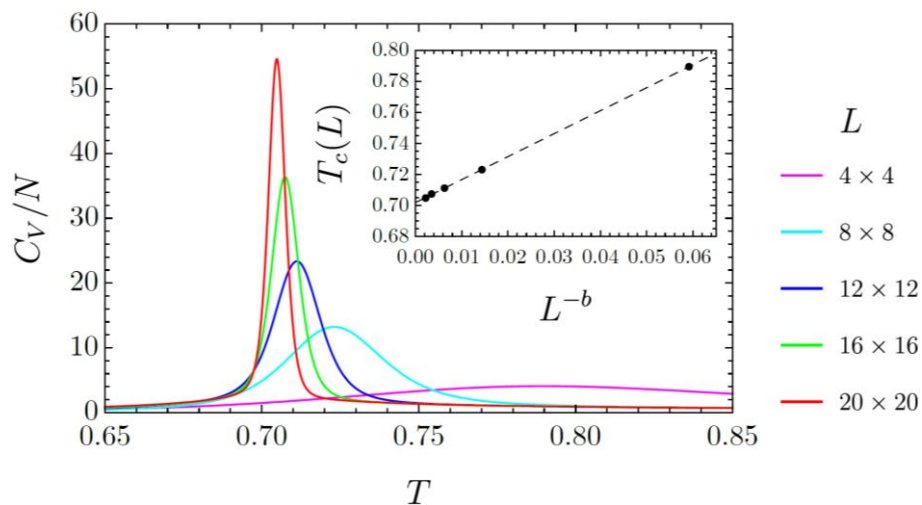
รูปที่ 2 แสดงความจุความร้อนต่อสปินที่อุณหภูมิต่าง ๆ ความจุความร้อนจะลู่ออกที่อุณหภูมิวิกฤติ อย่างไรก็ตาม สำหรับระบบที่มีขนาดจำกัด ค่าสูงสุดของความจุความร้อนก็จะถูกจำกัดเช่นกัน ค่าสูงสุดจึงเพิ่มขึ้นตามขนาดของระบบ นอกจากนี้ อุณหภูมิวิกฤติของระบบที่มีขนาดจำกัด $T_c(L)$ ยังสเกลตามขนาดของระบบ L สามารถเขียนได้เป็น

$$T_c(L) = T_c + aL^{-b} \quad (12)$$

โดย a, b เป็นค่าคงที่ และ $T_c = T_c(L \rightarrow \infty)$ เป็นอุณหภูมิวิกฤติเมื่อขนาดของระบบเข้าสู่ลิมิตอุณหพลศาสตร์ $L \rightarrow \infty$ รูปแทรก (ในรูปที่ 2) แสดงความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิวิกฤติของระบบที่มีขนาดจำกัดกับค่า L^{-b} จุดคือ ค่าที่ได้จากการจำลอง ส่วนเส้นประได้จากการหาค่าเหมาะสมจากสมการ (12) มีค่าเท่ากับ $a = 1.482$, $b = 1.020$ และ $T_c = 0.701(8)$ ซึ่งมีค่าใกล้เคียงกับค่าอุณหภูมิวิกฤติตามสมการ (10) เท่ากับ $T_c = 0.7012 \dots$



รูปที่ 1 ความหนาแน่นสถานะที่ค่าพลังงานและขนาดต่าง ๆ ของระบบ ความหนาแน่นสถานะอยู่ในสเกล $\ln[g(E)]$ และค่า E/N คือพลังงานต่อสปิน



รูปที่ 2 ความจุความร้อนต่อสปินที่อุณหภูมิและขนาดต่าง ๆ ของระบบ มีค่าสูงสุดที่อุณหภูมิวิกฤติซึ่งสเกลตามขนาดของระบบ รูปแทรกแสดงความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิวิกฤติของระบบที่มีขนาดจำกัดกับขนาดของระบบตามสมการ (12) จุดแทนค่าที่ได้จากการจำลอง ส่วนเส้นประแทนค่าที่ได้จากการหาค่าเหมาะสมตามสมการดังกล่าว

สรุปผล

บทความนี้ได้นำเสนอขั้นตอนวิธีหวัง-ลันเตา ซึ่งเป็นวิธีมอนติคาร์โลอีกวิธีหนึ่ง ขั้นตอนวิธีหวัง-ลันเตาสามารถใช้หาความหนาแน่นสถานะได้โดยตรง ทำให้หลีกเลี่ยงปัญหาต่าง ๆ เมื่อระบบอยู่ใกล้จุดวิกฤติ เนื่องจากความหนาแน่นสถานะไม่ขึ้นกับอุณหภูมิ ทำให้วิธีหวัง-ลันเตาสามารถใช้หาค่าเฉลี่ยปริมาณของระบบที่อุณหภูมิต่าง ๆ โดยที่ไม่ต้องจำลองระบบจริงที่อุณหภูมิเหล่านั้น เพื่อการประยุกต์ใช้งาน เราได้ใช้ขั้นตอนวิธีหวัง-ลันเตากับแบบจำลองพอดส์ ระบบประกอบด้วยสปินที่มีสถานะได้ทั้งหมด 10 สถานะ วางตัวอยู่บนแลตทิซสี่เหลี่ยมในสองมิติ จากผลการจำลอง เราได้ค่าความหนาแน่นสถานะที่พลังงานและขนาดต่าง ๆ ของระบบ ความจุความร้อนสามารถหาค่าได้เมื่อรู้ความหนาแน่นสถานะที่พลังงานต่าง ๆ เมื่อพิจารณาผลของขนาดระบบ ทำให้สามารถประมาณจุดวิกฤติในลิมิตอุณหพลศาสตร์ ซึ่งสอดคล้องกับค่าอุณหภูมิวิกฤติทางทฤษฎี ขั้นตอนวิธีหวัง-ลันเตาสามารถนำไปประยุกต์ใช้กับแบบจำลองอื่น ๆ นอกเหนือไปจากแบบจำลองทางแม่เหล็ก

เอกสารอ้างอิง

- [1] D. P. Landau and K. Binder, "A guide to Monte-Carlo simulations in statistical physics", 3rd Edition, Cambridge University Press, Cambridge (2009).
- [2] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, "Monte Carlo methods in statistical physics", 1st Edition, Oxford University Press, Oxford (1999).
- [3] F. Wang and D. P. Landau, "Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states", Physical Review Letters, 86, 2050 (2001).
- [4] D. P. Landau, S.-H. Tsai, and M. Exler, "A new approach to Monte Carlo simulations in statistical physics: Wang-Landau sampling", American Journal of Physics, 72, 1294 (2004).
- [5] M. S. Shell, P. G. Debenedetti, and A. Z. Panagiotopoulos, "Generalization of the Wang-Landau method for off-lattice simulations", Physical Review E, 66, 056703 (2002).
- [6] C. H. Chan, G. Brown, and P. A. Rikvold, "Macroscopically constrained Wang-Landau method for systems with multiple order parameters and its application to drawing complex phase diagrams", Physical Review E, 95, 053302 (2017).
- [7] R. E. Belardinelli and V. D. Pereyra, "Fast algorithm to calculate density of states", Physical Review E, 75, 046701 (2007).
- [8] Chenggang Zhou, "Optimal modification factor and convergence of the Wang-Landau algorithm", Physical Review E, 78, 046705 (2008).
- [9] A. G. Cunha-Netto, A. A. Caparica, S.-H. Tsai, R. Dickman, and D. P. Landau, "Improving Wang-Landau sampling with adaptive windows", Physical Review E, 78, 055701(R) (2008).
- [10] P. A. Belov, A. A. Nazarov, and A. O. Sorokin, "Determination of the conformal-field-theory central charge by the Wang-Landau algorithm", Physical Review E, 95, 063308 (2017).

- [11] Y. Shevchenko, K. Nefedev, and Y. Okabe, “Entropy of diluted antiferromagnetic Ising models on frustrated lattices using the Wang-Landau method”, *Physical Review E*, 95, 052132 (2017).
- [12] M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, and M. A. Magomedov, “Phase diagrams and ground-state structures of the Potts model on a triangular lattice”, *Physica A*, 521, 543 (2019).
- [13] M. Azhari and U. Yu, “Tricritical point in the mixed-spin Blume-Capel model on three-dimensional lattices: Metropolis and Wang-Landau sampling approaches”, *Physical Review E*, 102, 042113 (2020).
- [14] C. G. Dai and J. S. Liu, “Wang-Landau algorithm as stochastic optimization and its acceleration”, *Physical Review E*, 101, 033301 (2020).
- [15] J. M. Yeomans, “Statistical mechanics of phase transitions”, 1st Edition, Oxford University Press, Oxford (1993).