Wangův-Landauův algoritmus pro simulace Monte Carlo

Aleš Vítek

seminář Skupiny fyziky klastrů, týmu molekulové dynamiky IT4I/VP3 a SGS PřF OU 2012

6. 12. 2012

Klasické termodynamické simulace metodami Monte Carlo: přehled

- 1953: První MC NVT simulace tuhých koulí v periodických okrajových podmínkách [1]
- 1988: Single-histograms metoda pro NVT soubor [2]
- 1989: Multiple-histograms metoda pro NVT soubor [3]
- 1991: Metoda parallel-tempering MC pro NVT a NVE soubor [4]
- 1993: MH metoda pro spojitý systém (klastry vody) [5]
- 2000: Wangův-Landauův algoritmus pro výpočet hustoty stavů (Issingův model)
- 2001: Metoda parallel-tempering MC pro NPT soubor [6]
- …
-
-

[1] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller aE. Teller: J. Chem. Phys. 21,1087 (1953)
[2] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett., 1989, 61,2635.
[3] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett., 1989, 63,1195.
[4] C. J. Geyer in Computing Science and Statistics Proceedeings of the 23rd Symposium on the interface (Am. Stat. Assoc., New York) 1991
[5] K. D. Jordan a C. J. Tsai, J. Chem. Phys 99, 6957, 1993
[6] T. Okabe, M. Kawata, Y. Okamoto a M. Mikami, Chem. Phys. Lett. 335:435,2001

MC NVT simulace

- parallel tempering MC: paralelní simulace několika systémů při různých teplotách
- „sběr“ histogramů energií každého systému
- Po ukončení simulace výpočet hustoty stavů z uchovaných histogramů
- Závěrečný výpočet fyzikálních veličin z hustoty stavů

$$\langle F \rangle_T \approx \frac{\sum_{i=1}^{n} F(E_i) \exp\left(\frac{-E_i}{k_B T}\right) \Omega(E_i)}{\sum_{i=1}^{n} \exp\left(\frac{-E_i}{k_B T}\right) \Omega(E_i)}$$

Wangův-Landauův algoritmus – základní idea

- Zcela náhodné procházka konfiguračním prostorem: pravděpodobnost navštívení konfigurací s energií E_i je rovna klasické hustotě stavů $\Omega(E\mathrm{i})$

- Metropolisův algoritmus: procházíme-li konfigurační prostor podle hustoty pravděpodobnosti $\rho(E_i(r))$, pravděpodobnost navštívení konfigurace s energií E_i je rovna součinu $\Omega(E_i)$ x $\rho(E_i(r))$

- Zvolíme-li $\rho(E_i(r)) = 1/(\Omega(E_i))$, potom MC algoritmus bude generovat plochý (konstantní) histogram energie

Wangův-Landauův algoritmus – výpočet hustoty stavů

- Na počátku simulace neznáme hustotu stavů $\Omega(E_i)$, volíme $\Omega(E_i) = 1$
- Vycházíme z náhodné konfigurace r_1
- Konfigurace r_2 vytvořená náhodnou změnou konfigurace $r1$ je přijímána s pravděpodobností

$$\min\left\{1, \frac{\rho\left(E_{new}\left(r_{new}\right)\right)}{\rho\left(E_{old}\left(r_{old}\right)\right)}\right\} = \left\{1, \frac{\Omega\left(E_{old}\right)}{\Omega\left(E_{new}\right)}\right\}$$

- Pokaždé, když navštívíme energii E_i, hustotu stavů $\Omega(E_i)$ pro energii E_i transformujeme podle pravidla $\Omega(E_i) \rightarrow \Omega(E_i) \times k_0$, kde modifikační faktor $k>1$. (Na počátku se volí např. $k_0=e$)
- Pozn. Velké k vede k rychlému navštívení všech stavů ale k velkým statistickým chybám, malé k vede k velmi dlouhé simulaci
- Po dosažení plochého histogramu energií(nutno zvolit vhodné kritérium plochosti) se histogram smaže, (hustota stavů se nesmaže!), zvolí se jemnější modifikační faktor k, např. podle pravidla:

$$k_{j+1} = \sqrt{k_j}$$

- Simulace se ukončuje, jakmile dosáhneme předem stanovené hodnoty modifikačního faktoru (např. 1,000 000 01)

Wangův-Landauův algoritmus – přesnost výsledku závisí na:

- závěrečné hodnotě modifikačního parametru k_{final}
- Jemnosti histogramu energie (tzn. i jemnosti hustoty stavů)
- Kritériu „plochosti“ histogramu
- Komplikovanosti systému
- Detailech implementace algoritmu

Wangův-Landauův algoritmus – paralelizace

- MPI, každé jádro má jednoho walkera, všechny jádra sdílejí jeden histogram a jednu hustotu stavů
- Lze paralelizovat (i na GPU, počítány klastry $(H_2O)_{50}$ TIP4P)
- Výhoda: možnost mnoha walkerů a tedy možnost zapojení kvantové chemie

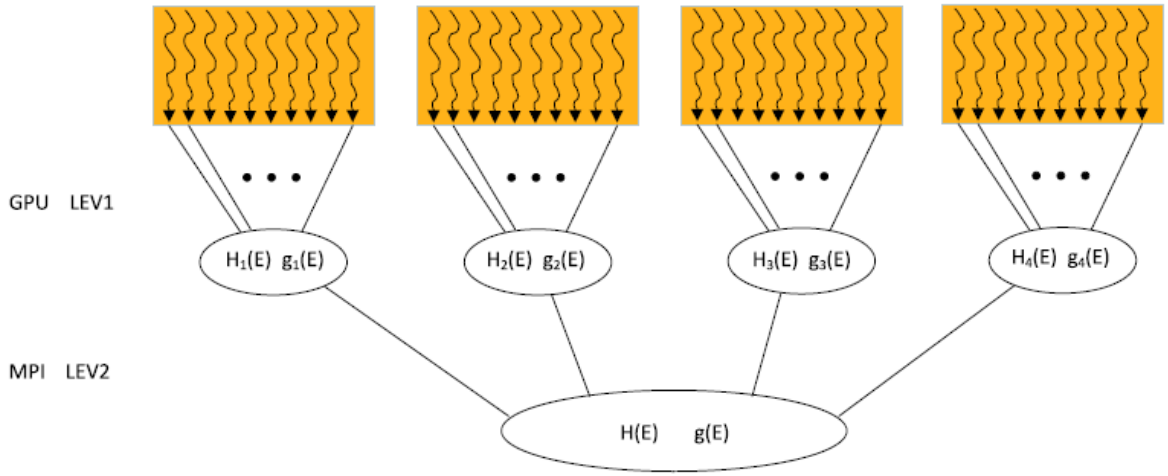

Fig. 1. Schematic plot of a four GPU implementation of the parallel Wang–Landau algorithm, where $H(E)$ is the energy histogram and $g(E)$ is the density of states. Each rectangle stands for a GPU card which contains thousands of threads.

Ukázka aplikace W-L algoritmu:

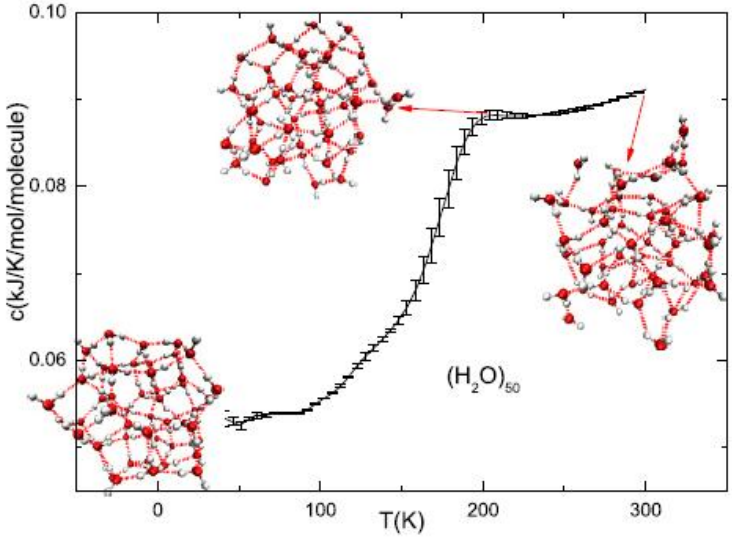

Fig. 6. Specific heat curve for $(H_2O)_{50}$. Two snapshots (with pointing arrow) are taken at the average energy for corresponding temperatures, respectively, and another snapshot (leftmost) is for the ground state structure after quenching. The red ball stands for an Oxygen atom, the white ball for a Hydrogen atom, and the dash line for the hydrogen bonding.

THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **134**, 024109 (2012)

Nevýhody oproti W-L algoritmu oproti kombinaci MH s PT-MC simulaci

- W-L algoritmus určí pouze hustotu stavů, tzn. negeneruje konfigurace při dané teplotě

- Nemůžeme měřit jiné veličiny než ty, které závisí pouze na interakční energii systému

Jenomže..

- W-L algoritmus generuje konfigurace s distribucí $1/\Omega(E)$

- Zaznamenáme-li vybrané konfigurace z W-L algoritmu, a budeme-li z nich vybírat s pravděpodobností (neboli přiřadíme-li jim váhu) $\Omega(E)$. $\exp(-E/kT)$, obdržíme distribuci konfigurací odpovídající termodynamické teplotě T. Na nich pak můžeme měřit jakoukoli veličinu..

Výzvy:

- Implementace W-L algoritmu pro L-J klastry
- Pokusy o maximální možný počet walkerů
- Kombinace s kvantovou chemií

- Sestavení NPT W-L algoritmu

Wangův-Landauův NPT algoritmus – výpočet *E* – *V* hustoty stavů

- Na počátku simulace neznáme hustotu stavů $\Omega(E_i, V_i)$, volíme $\Omega(E_i, V_j) = 1$
- Vycházíme z náhodné konfigurace $\{r_1, V_1\}$
- Konfigurace $\{r2, V2\}$ vytvořená náhodnou změnou konfigurace $\{r1, V1\}$
- je přijímána s pravděpodobností $\min\left\{1, \frac{\rho(E_{new}, V_{new})}{\rho(E_{old}, V_{old})}\right\} = \left\{1, \frac{\Omega(E_{old}, V_{old})}{\Omega(E_{new}, V_{new})}\right\}$
- Pokaždé, když navštívíme stav $\{E_i, V_j\}$, hustotu stavů $\Omega(E_i, V_j)$ pro energii E_i a objem V_j transformujeme podle pravidla $\Omega(E_i, V_j) \rightarrow \Omega(E_i, V_j) \times k_0$, kde modifikační faktor $k>1$. (Na počátku se volí např. $k_0=e$)
- Po dosažení plochého, nyní dvojrozměrného, histogramu se histogram smaže, (hustota stavů se nesmaže!), zvolí se jemnější modifikační faktor
- Simulace se ukončuje, jakmile dosáhneme předem stanovené hodnoty modifikačního faktoru (např. 1,000 000 01)

Možné nesnáze: má-li jednorozměrný histogram řádově tisíce dílků, dvojrozměrný histogram bude mít řádově miliony dílků – bude to chtít hodně walkerů (řádově 1000 krát více než pro NVT soubor), aby navštívily několikrát každý dílek..

Děkuji za pozornost