

parallel tempering

J. Wang

November 2021

1 简介

parallel tempering 中文叫做“并行退火”，指的是在一系列连续设置的参数下进行并行计算，并通过交换“构型”实现退火过程的算法。该算法主要是用来处理蒙卡算法中局域极小值的问题。

在一般的蒙卡计算中，温度决定了构型更新的能力。温度越高，系统越容易跨过势垒，进入差别较大的构型。温度较低时，系统容易呆在局部能量极小的构型，无法实现有效的更新。

传统的模拟退火法 (annealing) 使温度逐渐下降。这样的方法虽然对于“寻找全局极值”这样的问题有帮助，但是低温下无法克服更新效率低的问题。对于平均值问题，而非最值问题，模拟退火法显得无能为力。

并行退火算法提供了解决问题的思路。让高温和低温程序并行启动，运行过程中不断交换“构型”。这样，高温部分可以确保系统走遍全局，低温部分可以对局域极小进行有效采样。

2 原理

考虑一系列温度不同的系统， $\{T_1, T_2, \dots, T_M\}$ ，这些系统是完全独立的。每个系统 T_i 的统计性质由其微观构型 ν_i 和权重 $W_i(\nu_i)$ 决定。物理量 A_i 的平均值可以写成

$$\langle A_i \rangle = \frac{\sum_{\nu_i} A_i(\nu_i) W_i(\nu_i)}{\sum_{\nu_i} W_i(\nu_i)}. \quad (1)$$

蒙特卡罗算法的本质在于对构型 $\{\nu_i\}$ 的有效采样。如果把 M 个独立

系统的“直和”作为一个大系统。新的系统状态为

$$\nu = \nu_1 \otimes \nu_2 \otimes \cdots \otimes \nu_M. \quad (2)$$

对应的权重为

$$W(\nu) = W_1(\nu_1)W_2(\nu_2) \cdots W_M(\nu_M). \quad (3)$$

显然，如果 ν_i 之间相互独立，那么大系统的每个部分仍然各自满足独立的统计性质。大系统达到了热力学平衡的前提是，它的每个子系统都达到了热力学平衡。

我们在对大系统进行蒙卡更新的时候，除了考虑每个子系统的独立的更新以外，另外定义了一类交换操作，即随机交换两个子系统的构型。这样的操作的接受概率为

$$R_{swap}(i, j) = \frac{W(\nu')}{W(\nu)} = \frac{W_i(\nu_j)W_j(\nu_i)}{W_i(\nu_i)W_j(\nu_j)}. \quad (4)$$

在进行并行退火时，我们在并行的部分对每个子系统分别进行计算，每隔一段时间提出一个交换操作，并按照接受概率决定是否接受¹。经过足够长时间，就能实现大系统的平衡。其子系统必然也达到平衡。

值得注意的是，这样一个方法对并行参数是不是温度不做要求。具体的问题可以选择合适的并行参数。

3 我们的问题

在 extended hard core 的蒙卡模拟中，问题在于粒子数多的时候系统容易发生阻塞，无法有效更新。阻塞发生时，几乎不可能改变系统的 winding number. 在这个问题中，影响更新的主要是粒子数，所以，把化学势作为并行退火的参数是合适的。

低化学势粒子较少，高化学势粒子较多。交换构型，可以使高化学势的系统不断遇到粒子数少的构型，从而有效更新。低化学势的系统遇到粒子数多的构型也可以很轻松的消除粒子，从而打破“阻塞”。

对于这样一个交换操作，概率上仅仅与粒子数和化学势相关。很容易得到接受概率为

$$R_{swap}(1, 2) = \frac{\exp(\beta\mu_1 N_2) \exp(\beta\mu_2 N_1)}{\exp(\beta\mu_1 N_1) \exp(\beta\mu_2 N_2)} = \exp(-\beta\Delta\mu\Delta N) \quad (5)$$

¹标准做法是每一步都按照一定的概率提出某操作，这里采用的是每隔一定的步数提出某操作。文献中给出了肯定的答案，但是我需要进一步去验证。

4 目前的结果

温度: $T = 0.2$

跃迁振幅: $t = 1$

系统大小: $L = 20$

并行组数: 45

化学势间隔: $\Delta\mu = 0.1$

经过足够长时间的热化 (Thermalization), 开始统计。以下的结果反应了均值的收敛情况。结果的趋势已经相当乐观, 需要更长的计算时间去抹平涨落。

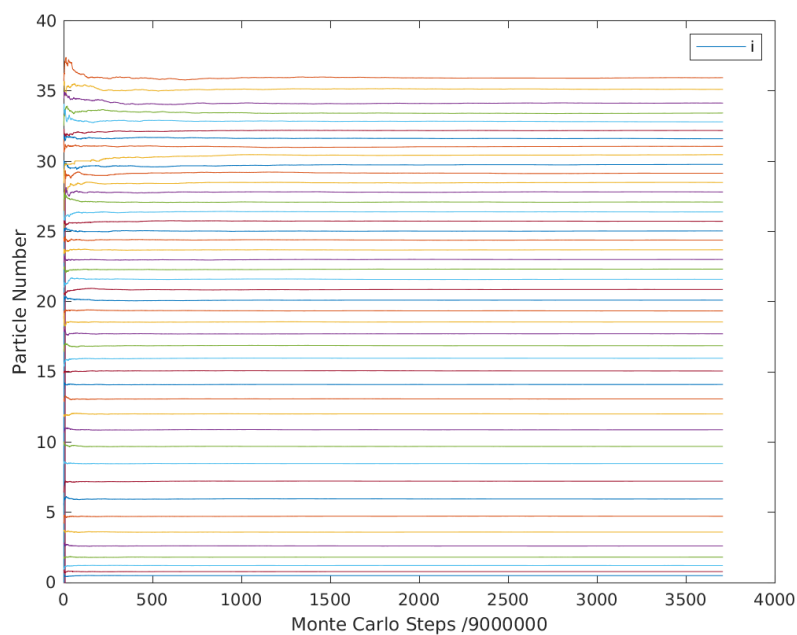


图 1: 粒子数的收敛情况

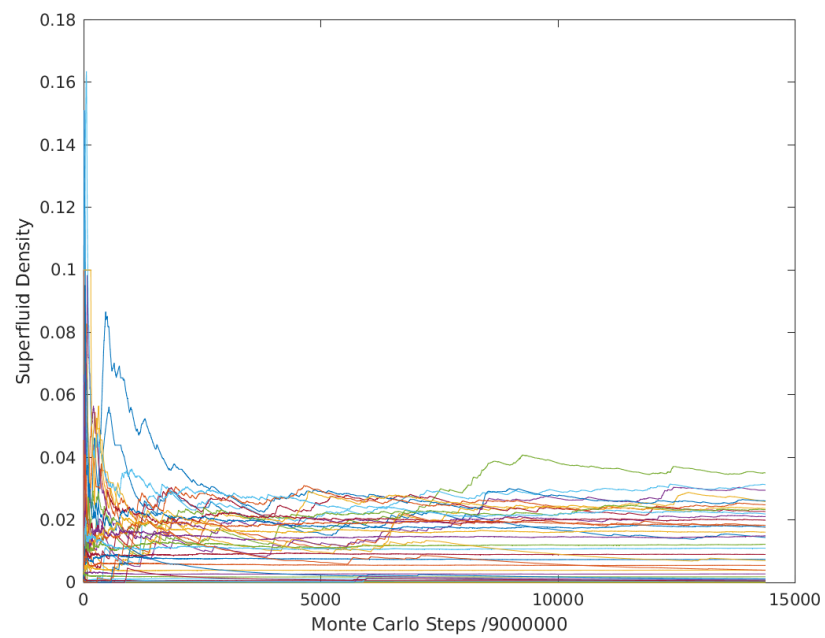


图 2: 超流密度的收敛情况

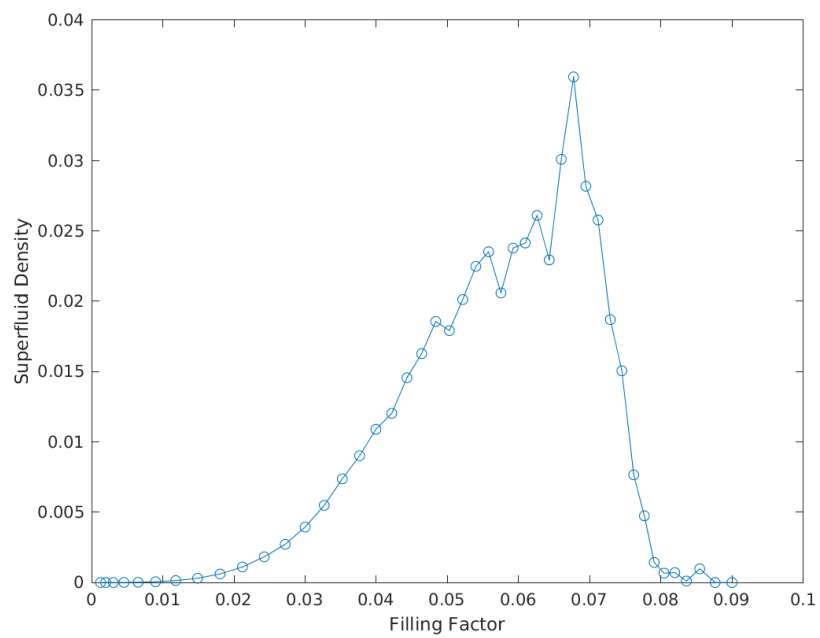


图 3: 超流密度-填充系数

5 参考文献

1. Earl, D. J., & Deem, M. W. (2005). Parallel tempering: Theory, applications, and new perspectives. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 7(23), 3910-3916.
2. Manousiouthakis, V. I., & Deem, M. W. (1999). Strict detailed balance is unnecessary in Monte Carlo simulation. *The Journal of chemical physics*, 110(6), 2753-2756.