Препринт ЕФИ-865(16)-86

ԵՐԵՎԱՆԻ ՖԻԶԻԿԱՅԻ ԻՆՍՏԻՏՈՒՏ
ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

Г.К.САВВИДИ, Н.Г.ТЕР-АРУТЮНЯН-САВВИДИ

К ПРОБЛЕМЕ МОНТЕ-КАРЛО-МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ

ЦНИИатоминформ

ЕРЕВАН-1986

Նախնատիպ ЕФИ-865(I6)-86

Գ.Կ.ՍԱՎԻԴԻ, Ն.Գ.ՏԵՐ-ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ-ՍԱՎԻԴԻ

ՖԻԶԻԿԱԿԱՆ ՀԱՄԱԿԱՐԳԵՐԻ ՄՈՆՏԵ-ԿԱՐԼՈ ԵՂԱՆԱԿՈՎ ՄՈԴԵԼԱՎՈՐՄԱՆ ԽՆԴՐԻ ՄԱՍԻՆ

Առաջարկվում է օգտագործել Կոլմոգորով-Անոսով-Սինայի K - և Y - համակարգերը որպես թվացյալ-պատահական թվերի գեներատորներ՝ Մոնտե-Կարլո եղանակով ԷՀՄ վրա վիճակագրական մոդելավորման համար:

Երևանի Ֆիզիկայի ինստիտուտ

Երևան 1986

Препринт ЕФИ-865(16)-86

УДК 519.283

Г.К.САВВИДИ, Н.Г.ТЕР-АРУТЮНЯН-САВВИДИ

К ПРОБЛЕМЕ МОНТЕ-КАРЛО-МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Предлагается использовать многомерные К - и У - системы Колмогорова-Аносова-Синая в качестве генераторов псевдослучайных чисел для статистического моделирования на ЭВМ методом Монте-Карло.

Ереванский физический институт
Ереван 1986

Preprint ЕФИ-865(16)-86

G.K. SAVVIDI, N.G. TER-ARUTYUNYAN-SAVVIDI

ON THE PROBLEM OF MONTE-CARLO MODELING OF PHYSICAL SYSTEMS

Kolmogorov- Anosov-Sinai multidimensional K- and Y-systems are proposed to use as generators of pseudorandom numbers for the statistical computer-modeling by the Monte-Carlo method.

Yerevan Physics Institute
Yerevan 1986

Всякий, кто питает слабость к арифметическим методам получения случайных чисел, грешен вне всяких сомнений.

Джон фон Нейман (I95I)

I. Поскольку современные мощные ЭВМ открывают новые уникальные возможности приложений метода Монте-Карло для статистического моделирования физических систем со многими степенями свободы [I-3] , возрастает роль "качества" псевдослучайных чисел, используемых при таких вычислениях.

Первый генератор случайных чисел был предложен Нейманом и основывался на последовательном вычислении "середины квадрата" [4] . Однако обширные исследования, проведенные Метрополисом показали, что он недостаточно хорош [5,6].

В последнее время интерес к этой старой проблеме возрос в связи с тем, что обнаружилось несовпадение результатов численного моделирования при использовании различных генераторов псевдослучайных чисел [7,8] . Так в [7] рассматривалась трехмерная модель Изинга, где были обнаружены значительные расхождения при вычислении намагниченности и перенормированной константы взаимодействия.

Очевидно, что здесь проявляются трудности, свойственные методу Монте-Карло и заключающиеся в том, что нужен i) хороший способ оценки погрешности вычислений, ii) генератор псевдослучайных чисел, обеспечивающий по возможности быструю сходимость.

Существует критерий, с помощью которого можно оценить погрешность вычислений в зависимости от "качества" псевдослучайных чисел P_K, называемую отклонением D_N и определяемую следующим образом [9].

Пусть Π^d – единичный гиперкуб в d – мерном пространстве: Π^d состоит из всех точек P с декартовыми координатами $P=(x_1,\dots x_d)$, которые удовлетворяют неравенству $0\leqslant x_i\leqslant 1$ $(i=1,\dots d)$, тогда

$$D_N(P_0,\dots P_N)=\sup_{P\in\Pi^d}|N\cdot x_1\dots x_d-S_N|, \qquad (I)$$

где S_N – есть число точек последовательности $P_0\dots P_{N-1}$, координаты которых $(x_i^{(K)}\dots x_d^{(K)}$, $(K=0\dots N-1)$ удовлетворяют неравенству $0\leqslant x_i^{(K)}\leqslant x_i$, $i=1,\dots d$. Геометрический смысл определения (I) в том, что $N x_1\dots x_d$ – это количество точек, приходящихся на параллелепипед с диагональю OP при идеальном, равномерном распределении, а S_N – количество точек, фактически попавших в этот параллелепипед $(D_N\leqslant N)$. Поэтому D_N оценивает максимальное отклонение фактического распределения точек от идеального.

Имеет место следующий результат [I0]: если $f(P)$ ограничена и непрерывна вместе со своими частными производными, содержащими не более одного дифференцирования по каждой из переменных, то

$$\left| \frac{1}{N} \sum_{K=0}^{N-1} f(P_K) - \int_{\Pi^d} f(P)\,dP \right| < C \cdot \frac{D_N}{N} \,, \qquad (2)$$

где $C > 0$. Иными словами, хорошее согласие эмпирической функции распределения S_N псевдослучайной последовательности с теоретической влечет малость остатка интегрирования.

Поэтому нужно уметь генерировать псевдослучайную последовательность точек P_K так, чтобы D_N росла по возможности медленнее.

Существуют и другие "качественные" характеристики последовательности P_K , такие как критерии χ^2 и ω^2 , которые однако не дают возможности получать оценок типа (2) [9,II] .

Если не интересоваться динамическим происхождением псевдослучайной последовательности P_K , а рассматривать ее как последовательность независимых испытаний случайной величины ξ , равномерно распределенной в кубе Π^d с плотностью вероятности $\rho(\xi) = 1$, то в силу центральной предельной теоремы скорость сходимости в (2) с большой вероятностью будет $1/\sqrt{N}$ [9].

Так что скорость сходимости зависит от динамической природы псевдослучайной последовательности P_K и определяется скоростью роста D_N .

Последнее утверждение становится еще более ясным, если вспомнить, что, как правило, каждая псевдослучайная последовательность генерируется ЭВМ с помощью рекуррентного соотношения [9-II]

$$x_1^{(k)} = F[x_1^{(1)}, \ldots x_1^{(k-1)}], \tag{3}$$

где F – некоторая функция. К примеру , F берут равной

$$\{Kx_1\}, \tag{4}$$

где $K \gg 1$ – фиксированное целое число, а $\{\ \}$ – обозначает дробную часть аргумента *.

2. Представим последовательность P_K траекторией некоторой динамической системы. Для этого примем куб Π^d за фазовое пространство M динамической системы T , а её оператор эволюции T за F .

Тогда

$$P_N = T[T[\ldots TP_0]] \equiv T^N P_0 , \tag{5}$$

где P_0 – начальная точка траектории,

$$T^N \equiv F[F[\ldots \tag{6}$$

В таком контексте последовательность точек P_K представляет собой одну из траекторий динамической системы T . Будем считать при этом, что фазовый объем этой динамической системы сохраняется, т.е. имеет место теорема Лиувилля. В приведенном выше примере (4) мера сохраняется, если K – целое.

Теперь – уже с точки зрения динамических систем – сходимость сумм к интегралу

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{K=0}^{N-1} f(T^K P_0) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{K=0}^{N-1} f(P_K) = \int_{\Pi^d} f(P)\, dP \tag{7}$$

---

* Используются также и её модификации [9,II]

обеспечивается, как известно, тогда и только тогда, когда динамическая система T является эргодической [12,13], причем скорость сходимости может быть произвольной.

Рассматривая генератор псевдослучайных чисел как динамическую систему, можно переформулировать утверждение (2) как утверждение о том, что скорость сходимости обеспечивается более тонким свойством динамической системы, чем эргодичность, так как в (7) скорость сходимости вообще не фигурирует [12,13] .

3. Возникает вопрос, какое свойство динамической системы T, задающей генератор псевдослучайных чисел, обеспечивает наиболее медленный рост отклонения D_N и тем самым быструю сходимость в (2) ?

Наводящее соображение состоит в следующем.

Известно, что динамические системы можно классифицировать по степени возрастания их статистических свойств. Это системы с перемешиванием , с n - кратным перемешиванием и, наконец, K - системы Колмогорова, обладающие максимально сильными статистическими свойствами [13-17] . Все эти динамические системы характеризуются тем, что обладают свойством релаксировать [16], причем максимально быстро релаксируют именно K - системы. Связано это с тем, что K - системы обладают экспоненциальной неустойчивостью [16] .

Теперь становится понятным, что медленный рост отклонения D_N будет обеспечиваться тем лучше, чем быстрее будет релаксировать к равновесному состоянию динимическая система T , задающая генератор, т.е. чем более она неустойчива (ср.(2) и (7)).

Поэтому K - системы являются хорошими кандидатами для использования их в качестве генераторов псевдослучайных чисел. Будем характеризовать каждый генератор псевдослучайных чисел его временем релаксации τ, и он тем лучше, чем это время меньше.

Если с этой точки зрения взглянуть на существующие генераторы псевдослучайных чисел (4), то обнаруживается, что они также являются одномерными K - системами [I8-20]. Корреляционная функция этой системы.

$$R_N = \frac{\int_0^1 (x_1^{(M+N)} - \langle x_1^{(M+N)} \rangle)(x_1^{(M)} - \langle x_1^{(M)} \rangle)\, dx_1^{(M)}}{\int_0^1 (x_1^{(M)} - \langle x_1^{(M)} \rangle)^2\, dx_1^{(M)}}, \qquad (8)$$

где $\langle x_1^{(M)} \rangle = \langle x_1^{(M+N)} \rangle = 1/2$, для $K \gg 1$ ведет себя как

$$R_N \simeq \frac{1}{12} \exp(-N \ln K), \qquad (9)$$

т.е. K - определяет существенную характеристику движения - время расщепления корреляций

$$\tau_0 = 1/\ln K. \qquad (\mathrm{I0})$$

Рассмотрим совокупность точек на очень малом интервале $\delta x_1^{(0)} \ll \frac{1}{K}$. Нетрудно найти время τ, за которое траектории, выходящие из этих точек, разбегутся достаточно далеко и равномерно заполнят интервал [0,I]

$$\tau = \tau_0 \ln\left(\frac{1}{\delta x_i^{(0)}}\right), \qquad (\mathrm{II})$$

так как $\delta x_1^{(N)} = K^N \delta x_1^{(0)} = \exp(N \ln K)\, \delta x_1^{(0)}$. Физически время τ - это время установления стационарного распределения, т.е. именно время релаксации. Сама же равновесная функция распределения $\rho(x_1)$ равна единице. Характерные времена в этой системе связаны соотношением

$$\tau_0 < t < \tau \tag{12}$$

– время установления стационарного состояния больше времени одного "шага" t и времени потери памяти о начальных условиях.

Генератор (4) используется и в тех случаях, когда нужны случайные числа, равномерно заполняющие d – мерный куб. С этой целью формируется последовательность $x_1^{(1)}, \dots x_1^{(N)} \dots$, а затем составляются "слова" длины d

$$\begin{aligned} P_1 &= (x_1^{(1)} \dots x_1^{(d)}) \\ P_2 &= (x_1^{(d+1)} \dots x_1^{(2d)}) \\ &\dots\dots\dots\dots \end{aligned} \tag{13}$$

При этом совершенно ясно, что неустойчивость, теперь уже в d – мерном кубе, будет опять характеризоваться одним параметром K или кратными ему числами. Физически это означает, что "дробление" фазового пространства $M = \Pi^d$ в разных направлениях идет с одним и тем же масштабом.

4. Нельзя ли сделать так, чтобы неустойчивость траекторий в M была бы совершенно произвольной в различных направлениях? Положительный ответ можно получить, используя многомерные K – системы. В настоящей статье предполагается использовать автоморфизмы куба Π^d, порожденные линейным преобразованием

$$P_K = A P_{K-1}, \quad x_i^{(K)} = \sum_{j=1}^{d} a_{ij} x_j^{(K-1)}, \tag{14}$$

где $A = \| a_{ij} \|$ – целочисленная матрица с определителем, равным ± 1.* Последнее условие обеспечивает сохранение фазового объёма. Динамическая система $T = \| A \|$ (I4) является K – системой тогда и только тогда, когда все собственные значения матрицы $A = \| a_{ij} \|$ отличны по модулю от единицы [I2,2I-24] .

Формула Синая-Арова [I9-24] позволяет вычислить энтропию динамической системы (I4) , которая равна

$$h(T) = \sum_{|\lambda_k|>1} \ln |\lambda_k| \,, \tag{I5}$$

а также верхнюю оценку для времени расщепления корреляций

$$\tau_0 \leqslant 1/h(T) \tag{I6}$$

и времени релаксации

$$\tau \leqslant \tau_0 \ln (1/\delta V_0^d) \,. \tag{I7}$$

Преимущество генератора псевдослучайных чисел, заданного динамической системой (I4) , состоит в том, что хотя времена релаксации τ (I7) и (II) могут быть сделаны равными; "качество" перемешивания у системы (I4) выше из-за того, что в разных направлениях скорость разбегания (неустойчивость) у нее различна и пропорциональна собственным значениям матрицы A , которые совершенно произвольны. Такое "мелкомасштабное" смешивание направлений обеспечивает более медленный рост отклонения D_N ; являющегося "мерилом" степени релаксации.

Иначе говоря, хотя всякая K – система релаксирует при $N \to \infty$, "качество" релаксации к каждому данному моменту N

---

* Обратная матрица $T^{-1} = A^{-1}$ тоже целочисленная.

определяется D_N , и оно тем лучше, чем более "мелкомасштабная" неустойчивость обеспечивается в системе.

Существует еще один аргумент в пользу изложенного выше подхода к проблеме сходимости. Когда, к примеру, моделируются калибровочные теории на решетке [3] , то в точке фазового перехода калибровочные системы релаксируют очень медленно. Ясно, что роль "термостата" в данном случае играет динамическая система T , задающая генератор псевдослучайных чисел. Поэтому чем меньше время релаксации генератора по сравнению с характерными временами исследуемой системы, тем лучше :

$$\tau_{генер} \ll \tau_{сист}(\beta) . \qquad (18)$$

5. В заключение отметим, что нам не удалось получить аналитической оценки D_N для генератора (14) , тем более, что она не известна и для системы (4), однако развитая в настоящей статье точка зрения позволяет более целенаправленно искать системы T , которые окажутся более эффективными при Монте-Карло-моделировании существенно многомерных задач.

Как показали численные эксперименты, результаты которых будут опубликованы отдельно, псевдослучайные последовательности, полученные с помощью (14), обладают лучшими статистическими характеристиками, чем (4).

Авторы признательны Н.З.Акопову, Б.Лаутрупу и А.А.Мигдалу за стимулирующие обсуждения проблем Монте-Карло-моделирования.

Авторы благодарны С.Г.Матиняну за внимание к работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Metropolis N. et al., J.Chem.Phys., 1951, vol.21, p.1087.
2. Wilson K.G., Phys.Rev. 1974, vol.D10, p.2445.
3. Rebbi C. Lattice gauge theories and Monte-Carlo simula - tions Preprint IC/81/151.
4. Von Neuman J. Various techniques used in connection with random digits Monte-Carlo method, Nat.Bur.Stand. Appl.Math. Series 1951, vol.12, p.36.
5. Metropolis N., Ulam S. The Monte-Carlo method, J.Amer.Statical Assoc. 1949, vol.44, p.335.
6. Metropolis N., Reitwiesner G., J.von.Neuman Statistical treatment of first 2000 decimal digits of a and calculated on the Eniac MTAC 1950, vol.4, p.109.
7. Parisi G., Rapnano F. Effects of the random number generator on computer simulations. Preprint CERN-TH 4141/85.
8. Katznelson E., Nobile A. Implementation and statistical analysis of Metropolis algorithm for SU(3),Preprint IC/84 1235.
9. Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Курс статистического моделирования. М.: Наука, 1976.
10. Соболь И.М. Численные методы Монте-Карло.М.: Наука,1973.
11. Knuth D.E. The art of computer programming V.2, Seminumerical algorithms at Addison-Wesley, London, 1969.
12. Халмош П.Р. Лекции по эргодической теории. М.: ИЛ,1959.

I3. Корнфельд И.П., Синай Я.Г., Ромин С.В. Эргодическая теория, М.: Наука, I974.

I4. Колмогоров А.Н. Новый метрический инвариант транзитных динамических систем и автоморфизмов пространств Лебега. Докл. АН СССР, I958, т.II9, с.86I.

I5. Аносов Д.В. Геодезические потоки на замкнутых римановых многообразиях отрицательной кривизны. М.: Наука, I967.

I6. Крылов Н.С. Работы по обоснованию статистической физики. Изд-во АН СССР, М.,-Л, I950.

I7. Savvidy G.K. Nucl.Phys. 1984, vol.B246, p.302.

I8. Holladay T.C. Proc. Amer. Math Soc., 1957, vol.8, p.887

I9. Рохлин В.А. Точные эндоморфизмы пространств Лебега. Изв. АН СССР, серт.мат., I96I, т.25, с.499.

20. Renyi A. Acta Math Acad.Sci. Hungary 1957, vol.8, p.477

2I. Рохлин В.А. Об эндоморфизмах компактных коммутативных групп. Изв.АН СССР, сер.мат., I949, т.I3, с.329.

22. Синай Я.Г. О понятии энтропии динамических систем. Докл. АН СССР, I959, т.I24, № 4, с.768.

23. Генис Л.Г. Метрические свойства автоморфизмов торов. ДАН СССР, I96I, т.I38, № 5, с.99I.

24. Рохлин В.А. Об энтропии автоморфизма компактных коммутативных групп. Теор.вер.и ее применение. I96I, т.3, № 3, с.35I.

Рукопись поступила 7 января I986 г.

Г.К.САВВИДИ, Н.Г.ТЕР-АРУТЮНЯН-САВВИДИ

К ПРОБЛЕМЕ МОНТЕ-КАРЛО-МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Редактор Л.П.Мукаян

Технический редактор А.С.Абрамян

Подписано в печать I9/III-86г. ВФ-053I7 Формат 60x84/I6
Офсетная печать. Уч.изд.л. 0,5 Тираж 299 экз. Ц. 7 к.
Зак.тип.№ I85 Индекс 3624

Отпечатано в Ереванском физическом институте
Ереван 36, Маркаряна 2

индекс 3624

ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ