

# Исследование фазовых переходов в модели Поттса методом Ванг-Ландау \*

М.А. Фадеева

Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, Москва

Алгоритм Ванг-Ландау используется для вычисления плотности состояний энергии в задачах статистической механики. В статье излагается модификация алгоритма Ванг-Ландау, основанная на ранее введенном критерии точности. Матрица переходов между уровнями энергии стремится к стохастической при приближении плотности состояний к искомому значению. В качестве критерия точности было предложено использовать отклонение старшего собственного значения матрицы переходов между уровнями энергии от единицы. Модифицированный алгоритм Ванг-Ландау применен для прямого вычисления плотности состояний энергии при исследовании окрестности фазового перехода первого рода в модели Поттса на квадратной решетке с периодическими граничными условиями и числом компонент  $q=5$  и  $q=20$ .

*Ключевые слова:* плотность состояний, метод Монте-Карло, метод Ванг-Ландау, модель Поттса, фазовый переход первого рода.

## 1. Введение

Повышение вычислительной мощности компьютерных систем и разработка эффективных алгоритмов дают возможность проведения численных экспериментов с целью уточнения применимости гипотезы универсальности теории фазовых переходов [1], а также для выявления тонких закономерностей в физике фазовых переходов и критических явлений. Например, применение компьютерного моделирования позволило установить, что наличие анизотропии взаимодействий приводит к явной зависимости кумулянта Биндера от степени анизотропии [2, 3], что уточнило понимание универсальности значений этой величины. Этот численный результат получил подтверждение в аналитическом исследовании [4].

В то же время, ряд опубликованных утверждений основан на применении численных методов, имеющих ограниченную точность оценки значений термодинамических величин, что приводит к неконтролируемым результатам. В настоящей заметке мы обсуждаем модификации метода оценки плотности состояний – алгоритма Ванг-Ландау [7]. Этот метод прост в реализации и активно используется многими исследователями. Однако, на примере точно решаемых моделей выяснено, что этот метод приводит к конечной ошибке при оценке плотности состояний, которая может составлять несколько процентов [8]. Повышение точности вычислений было эвристически решено в работах [12, 13], в которых был предложен так называемый метод  $1/t$  (смотри раздел 3), позволяющий повышать точность вычислений, однако не дающий возможности оценить их точность. Эта проблема была решена в работе [15], в которой был предложен метод оценки точности за счет анализа старшего собственного значения вспомогательной матрицы переходов по уровням энергии (смотри раздел 4). В разделе 5 мы приводим обзор методов распараллеливания алгоритма Ванг-Ландау, который применим и для  $1/t$  модификации, и предлагаем модификацию метода разбиения на окна с использованием матрицы переходов по энергии.

Таким образом, мы имеем возможность проведения контролируемого по точности вычисления плотности состояний спиновых систем с дискретным спектром энергии. Мы применили разработанный метод для анализа оценки температуры перехода двумерных моде-

---

\*Вычисления проводились на высокопроизводительном вычислительном кластере "сHARISMa" (Computer of HSE for Artificial Intelligence and Supercomputer Modelling)  
Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ «аспиранты» 20-37-90084.

лей Поттса с пятью и двадцатью компонентами, проявляющих фазовый переход первого рода. Мы проверили утверждение, сделанное авторами статьи [5] о том, что в точке перехода экстремумы плотности энергии пропорциональны энергии числу состояний  $q$  в модели Поттса, но не равно единице [6], как считалось на протяжении длительного времени. Таким образом, использование замечания, сделанного в статье [5] в совокупности с использованием изложенного в статье метода позволяет улучшить точность определения температуры фазового перехода первого рода.

## 2. Алгоритм вычисления плотности состояний

Алгоритм Ванг-Ландау [7, 8] относится к семейству методов Монте-Карло и напрямую вычисляет плотность состояний энергии  $g(E)$ . Алгоритм применим для любой системы, для которой статистическая сумма может быть представлена в следующем виде

$$Z = \sum_j e^{-E_j/k_B T} = \sum_{E_n} g(E_n) e^{-E_n/k_B T}, \quad (1)$$

где  $g(E_n)$  - количество состояний системы с энергией  $E_n$ ,  $T$  - температура,  $k_B$  - постоянная Больцмана. Вычисленная плотность состояний  $g(E)$  используется для вычисления термодинамических величин системы (теплоемкость, внутренняя энергия, восприимчивость), как функций температуры.

При некоторой конфигурации системы мы вычисляем энергию  $E_k$ . Далее случайным образом изменяем конфигурацию, считаем ее энергию  $E_m$  и оставляем с вероятностью

$$P_{WL} = \min \left[ 1, \frac{\tilde{g}(E_k)}{\tilde{g}(E_m)} \right], \quad (2)$$

где  $\tilde{g}(E_k)$  и  $\tilde{g}(E_m)$  текущие приближения плотности состояний энергетических уровней  $E_k$  и  $E_m$ . Эти приближения обновляются каждый раз, когда мы попадаем на конфигурацию системы с соответствующим энергетическим уровнем  $\tilde{g}(E_k) := f \tilde{g}(E_k)$ . Значения множителя  $f$  меняются каждый раз, когда гистограмма  $H(E)$  становится до некоторой степени “плоской”. При этом значения  $f$  меняются по правилу  $f_{i+1} = \sqrt{f_i}$ . Для повышения точности вычислений используются логарифмы величин  $S(E) = \ln(g(E))$  и  $F = \ln f$ , благодаря чему от произведения можно перейти к более простой операции сложения:  $\tilde{S}(E) := \tilde{S}(E) + F$ .

Несмотря на широкое применение, алгоритм обладает рядом ограничений.

Во-первых, гистограмма  $H(E_i)$  хранит в себе информацию о том, сколько раз был посещен каждый уровень энергии  $E_i$  и играет роль некоторого регулятора точности алгоритма, но явная зависимость между ровностью гистограммы и точностью вычислений не была выявлена [7, 8].

Во-вторых, это систематическая ошибка алгоритма. Итеративный характер алгоритма предполагает уточнение результата с увеличением количества шагов. Однако, начиная с некоторого момента, точность оценки плотности состояний выходит на константу, несмотря на рост числа шагов вычислений [12, 15].

## 3. Алгоритм 1/t

Была предложена модификация алгоритма [12], которая получила название 1/t-Wang-Landau. Ее теоретическое обоснование дано в работе [14]. Было предложено разделить выполнение алгоритма на два этапа. На первом этапе все происходит в точности, как в оригинальном алгоритме [7, 8], кроме замены условия ровности гистограммы на условие  $H(E_i) \neq 0$ , т.е. каждый уровень энергии  $E_i$  должен быть посещен хотя бы один раз. После выполнения условия  $F \leq N_E/t$ , алгоритм завершает первый этап. На втором этапе гистограмма больше не проверяется, а параметр  $F$  изменяется по другому закону  $F := N_E/t$ .

Здесь  $t$  - это время работы алгоритма, измеряемое в количестве попыток изменить конфигурацию системы, а  $N_E$  - некоторая константа. Позднее было показано, что ее можно принять за единицу  $N_E = 1$  [15]. На точно решаемой модели было проверено, что разница между вычисляемой плотностью состояний и известным аналитическим решением уменьшается обратно пропорционально времени вычислений  $\sim 1/t$ .

#### 4. Критерий точности в алгоритме Ванг-Ландау

Критерий точности необходим для исследования задач, в которых аналитическое решение отсутствует. В работах [15–17] было предложено вместо гистограммы ровности использовать матрицу переходов  $T$ . Алгоритм следующий. Матрица инициализируется нулями  $\tilde{T}$ , далее совершаются случайные блуждания Ванг-Ландау и, если совершается переход с уровня  $E_m$  на  $E_k$ , то элемент матрицы  $\tilde{T}(E_m, E_k)$  увеличивается на единицу  $\tilde{T}(E_m, E_k) + 1$ . Нормировка каждого элемента на сумму в столбце или строке  $T(E_m, E_k) = \tilde{T}(E_m, E_k)/H$  приводит к матрице, элементы которой  $T(E_m, E_k)$  будут давать оценку вероятности перехода с энергетического уровня  $E_m$  на уровень  $E_k$ . Причем, для недиагональных элементов эта вероятность может быть представлена в виде

$$T(E_m, E_k) = \min[1, \frac{\tilde{g}(E_k)}{\tilde{g}(E_m)}]P(E_m, E_k), \quad (3)$$

где первое слагаемое - это вероятность Ванг-Ландау принять новое состояние  $P_{WL}$  (выражение (2)), а второе  $P(E_m, E_k)$  - это вероятность из любой конфигурации системы с энергией  $E_m$  попасть в конфигурацию системы с энергией  $E_k$ . Можно показать [15], что матрица переходов является симметричной  $T(E_m, E_k) = T(E_k, E_m)$  и дважды стохастической, т.е. сумма ее элементов и по столбцам, и по строкам равна единице. При правильной организации вычислений с увеличением числа шагов матрица переходов должна приближаться к дважды стохастической, а старшее собственное значение  $\lambda_1$  такой матрицы равно 1. Отсюда вытекает, что отличие собственного значения матрицы переходов от единицы

$$\delta = |1 - \lambda_1|, \quad (4)$$

может быть использовано, как критерий сходимости алгоритма при  $\delta \rightarrow 0$ .

#### 5. Параллельный алгоритм Ванг-Ландау

На данный момент существует несколько подходов к решению задачи о модификации алгоритма для его эффективного распараллеливания. Условно эти подходы можно разделить на две группы: 1) независимые друг от друга блуждания происходят по отрезку спектра и 2) в каждой параллельной реплике происходит блуждание по всему спектру энергии.

В статьях [25–27] предлагается подход, в рамках которого весь спектр энергии делится на  $h$  частей (назовем их окнами), так, что доля их пересечений составляет  $x\%$ . Причем параметр  $x$  подбирается эмпирическим путем индивидуально для каждой задачи, и авторы предлагают отталкиваться от значения 75%. На каждом окне происходит  $m$  независимых Ванг-Ландау случайных блужданий: в рамках каждого блуждания существует своя гистограмма ровности  $H^{m,h}(E)$  и текущее приближение плотности состояний  $g^{m,h}(E)$ . После определенного числа шагов между двумя случайными блужданиями  $i$  и  $j$  происходит обмен текущими конфигурациями следующим образом: для  $i$ -того блуждания случайным образом выбирается случайное блуждание  $j$  среди соседних окон. Обмен конфигурациями происходит с вероятностью

$$P_{acc} = \min[1, \frac{g_i(E(X))}{g_i(E(Y))} \frac{g_j(E(Y))}{g_j(E(X))}] \quad (5)$$

где  $X$  конфигурация  $i$ -того случайного блуждания, а  $Y$  -  $j$ -того блуждания.  $E(X), E(Y)$  - соответствующие им уровни энергии.

После того, как внутри каждого случайного блуждания выполняется условие "ровнотности" гистограммы  $H(E)$ , значение  $g(E)$  на этом окне усредняется, чтобы избежать накопления ошибки, и происходит обновление параметра  $f$ . Алгоритм останавливается, когда на каждом окне случайное блуждание достигнет финального значения модификационного параметра  $f = f_{final}$ .

Итоговое значения плотности состояний на всем спектре формируется "из кусочков": точкой объединения любых двух интервалов является энергетический уровень  $E$ , где обратная микроканоническая температура  $\beta = d \log(g(E))/dE$  наилучшим образом совпадает.

В другом подходе [28] напротив, предлагается не делить спектр на части, а проводить  $n$  случайных блуждания по всему спектру так, что  $g(E)$ ,  $H(E)$  и значение  $f$  хранятся в общей памяти. В каждом ядре создается копия системы, происходят случайные блуждания, у которых есть право на чтение и запись  $g(E)$  и  $H(E)$ , но проверка "ровнотности" гистограммы и обновление параметра  $f$  происходит в рамках одного процесса. Так как значения гистограммы и плотности состояний являются общими для всех процессов, то возникает риск преждевременной перезаписи значений. Авторы решают эту проблему с помощью директив CRITICAL и ATOMIC из стандарта OpenMP.

Мы модифицировали метод окон [25] путем исключения вероятности обмена конфигурациями (выражение (5)) и введения шивки вычисленных в окнах плотностей энергии следующим образом. Пусть наш спектр энергий разбит на  $S$  пересекающихся интервалов. В каждом интервале  $i$  мы вычисляем плотность состояний по случайному блужданию с вероятностью Ванг-Ландау  $g_j$ . После определенного числа шагов вычисляется плотность состояний для всего спектра  $G_i$ , как взвешенная сумма интервальных оценок  $g_j$

$$G_i = \sum_{j=1}^N \frac{g_j}{|\lambda_j - 1|}, \quad (6)$$

где  $\lambda_j$  собственное значение блока матрицы переходов, соответствующего интервалу энергии  $j$ , при этом значения функции  $g_j$  в пересекающихся точках учитываются с коэффициентом  $1/2$ . Заметим, что после вычисления полной функции плотности состояний требуется проведение ее нормировки, что является обычной процедурой для метода оценки плотности состояний. Стохастичность блока матрицы гарантирована вблизи искомого решения для систем с дискретным спектром в случае, если интервал включает в себя число уровней, большее, чем ширина ленточной матрицы переходов. Эта величина легко оценивается для конкретной статистической модели с дискретным спектром. Такая модификация интервального метода увеличивает скорость сходимости плотности состояний к искомой [30].

## 6. Моделирование алгоритмом Wang-Landau

### 6.1. Модель Поттса

Гамильтониан в модели Поттса имеет вид [29]

$$H = - \sum \delta_{\sigma_i, \sigma_j}, \quad (7)$$

где спины  $\sigma_i$  могут принимать  $q$  различных значений и  $\delta$  - символ Кронекера. Мы исследовали модель Поттса на квадратной решетке с взаимодействием только ближайших соседей. Такая модель имеет фазовый переход первого рода при  $q \geq 5$ . Значение критической температуры известно из точного решения [24]

$$T_c = 1 / \ln(1 + \sqrt{q}). \quad (8)$$

Если обозначить за  $e_0 = E_0(\beta_c)/V$  значение внутренней энергии  $E(\beta) = -\frac{\delta Z(\beta)}{\delta \beta}$  как функцию обратной температуры  $\beta_c = 1/T$  при движении от высоких температур  $\beta < \beta_c \rightarrow \beta_c$ , а за  $e_d = E_d(\beta_c)/V$  при движении наоборот от низких температур  $\beta > \beta_c \rightarrow \beta_c$ , то известно [24], что их среднее определяется по формуле:

$$(e_0 + e_d)/2 = -(1 + 1/\sqrt{q}) \quad (9)$$

и их разница (скрытая теплота - latent heat) также известна точно [24]

$$\Delta e = e_d - e_0 = 2(1 + 1/\sqrt{q}) \tanh^2(\Theta/2) \prod_{n=1}^{\infty} \tanh^2(n\Theta) \quad (10)$$

где  $2 \cosh(\Theta) = \sqrt{q}$ .

## 6.2. Проведение моделирования

Моделирование проводилось по схеме  $1/t$ -алгоритма [12] Ванг-Ландау [7] с критерием точности [15]. Параметры моделирования:  $L$  - линейный размер квадратной решетки,  $q$  - количество компонент модели Поттса,  $steps_{min}$  - количество шагов  $t$  второго этапа алгоритма, это число шагов с изменением параметра  $f$  по алгоритму  $1/t$ . Типичное значение числа шагов  $steps_{min} = 10^6 \times L^2$ . Итоговая плотность состояний  $g(E)$  усреднялась по  $k = 10$  вычислениям со случайным начальным распределением спинов на решетке.

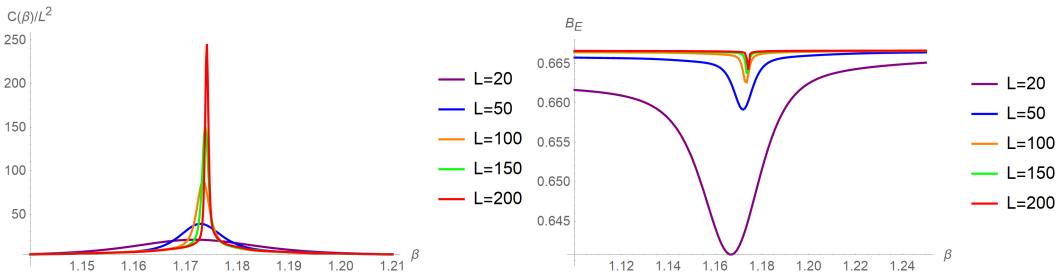
Численно исследовались теплоемкость

$$C(\beta, N) = \beta^2 N (\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2) \quad (11)$$

и кумулянт Биндера [9]

$$B_E(\beta, N) = 1 - \frac{\langle e^4 \rangle}{3\langle e^2 \rangle^2} \quad (12)$$

Положение максимума теплоемкости с ростом размера системы  $L$  приближается к критическому значению  $\beta_c$  и кривая теплоемкости приобретает ярко выраженный пик при увеличении размера системы, что видно на рис. 1 слева. Положение экстремума кумулянта Биндера также стремится к критическому значению при увеличении размера системы. Известно, что величина сдвига экстремума от критического значения  $\Delta\beta$  обратно пропорциональна объему системы [6] и в нашем случае  $\Delta\beta \propto L^{-2}$ .

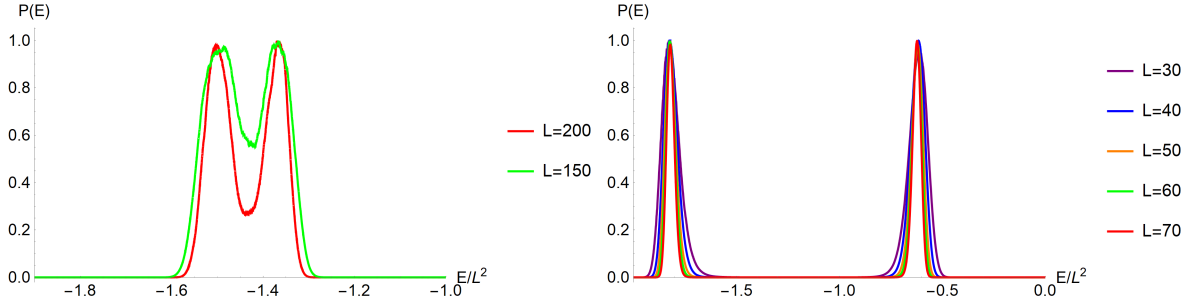


**Рис. 1.** График теплоемкости  $C(\beta, L)$  (слева) и график кумулянта Биндера  $B_E(\beta, L)$  (справа) для квадратной модели Поттса с числом компонент  $q = 5$  с периодическими граничными условиями на квадратной решетке с линейным размером  $L$ .

Фазовому переходу первого рода свойственно присутствие двух выраженных пиков на графике функции распределения энергии

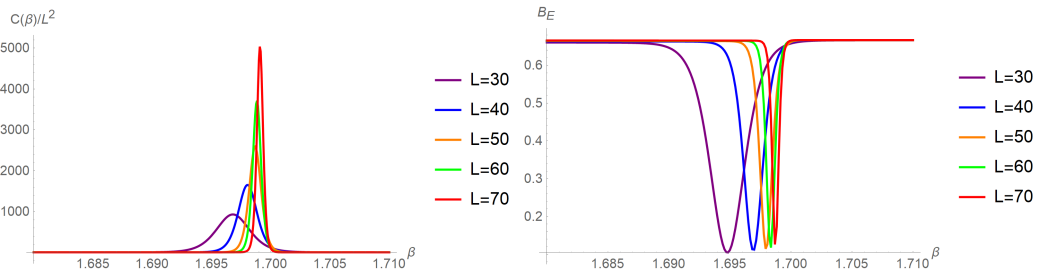
$$P_{\beta, L}(E) = g(E)e^{-E/k_B T} \quad (13)$$

при  $\beta = \beta_c$ , причем положения пиков соответствуют значениям энергии  $e_0$  и  $e_d$ , а расстояние между ними равно значению скрытой теплоты.



**Рис. 2.** Функция распределения энергии  $P_{\beta,L}(E)$  в точке  $\beta_0$ , при которой наблюдается два равных пика для квадратной модели Поттса с числом компонент  $q = 20$  с периодическими граничными условиями.

Результаты моделирования 5-компонентной модели Поттса для разных размеров решетки представлены на рис. 1. Для данной системы значение обратной критической температуры равно  $\beta_c = \ln(1 + \sqrt{5}) \approx 1,174$ . На графике видно, что с ростом размера решетки пик функции теплоемкости стремится к критической точке. Аналогичная тенденция наблюдается и на графике с зависимостью кумулянта Биндера от температуры для разных размеров: точки минимума также стремится к критической точке  $\beta_c \approx 1,174$ .



**Рис. 3.** График теплоемкости  $C(\beta, L)$  (слева) и график кумулянта Биндера  $B_E(\beta, L)$  (справа) для квадратной модели Поттса с числом компонент  $q = 20$  с периодическими граничными условиями

Таковую же тенденцию можно наблюдать и для 20-компонентной модели Поттса рис. 3: экстремум функции с ростом системы также сдвигается к критической температуре  $\beta_c = \ln(1 + \sqrt{20}) \approx 1,6997$ .

По графику теплоемкости можно заметить тенденцию, что с ростом системы пик кривой не только сдвигается к критической точке, но становится более ярко выраженным, и растет значение экстремума функции. В работе [6] выводится соотношение между значением максимума теплоемкости  $C_{max}$  и размером системы  $V = L^2$

$$C_{max} = V\beta_c^2(\Delta e/2)^2 \tag{14}$$

и определяется положение пика [6]:

$$\beta_{C_{max}} = \beta_c - \ln q/V\Delta e + \dots \tag{15}$$

Аналогичные выражения можно привести и для минимального значения кумулянта Биндера

$$B_{min} = 1 - (e_0/e_d + e_d/e_0)^2/12 \tag{16}$$

и

$$\beta_{B_{min}} = \beta_c - \ln(qe_0^2/e_d^2)/V\Delta e + \dots \tag{17}$$

Определим значение скрытой теплоты  $\Delta\tilde{\epsilon}$  из результатов моделирования следующим образом. Сначала найдем такое  $\beta_0$ , при котором наблюдаются равные значения пиков в графике функции распределения энергии  $P_{\beta_0,L}(E)$  (рис. 2 b) и определим значения оценки значений  $e_0$  и  $e_d$ .

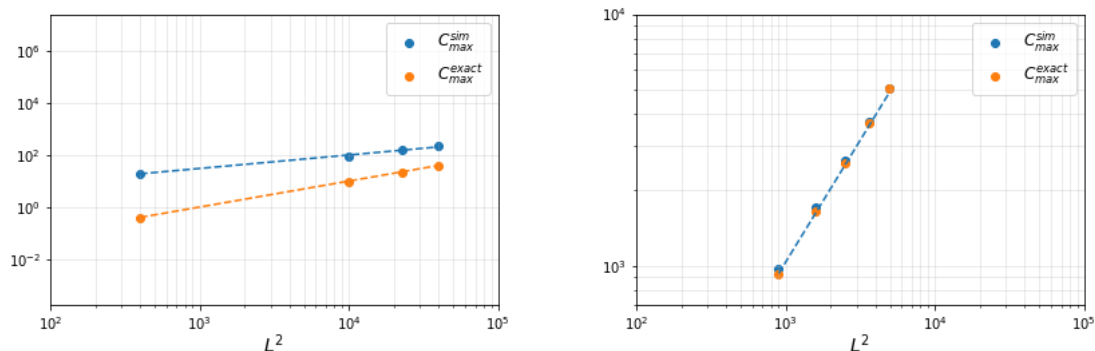


Рис. 4. График зависимости значения максимума теплоемкости от размера системы для модели Поттса с числом компонент  $q = 5$ (слева) и  $q = 20$  (справа)

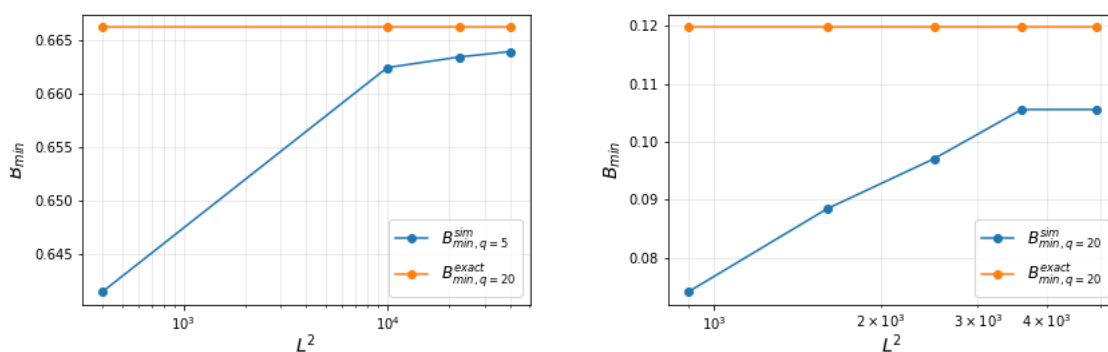


Рис. 5. График зависимости значения минимума кумулянта Биндера от размера системы для модели Поттса с числом компонент  $q = 5$ (слева) и  $q = 20$  (справа)

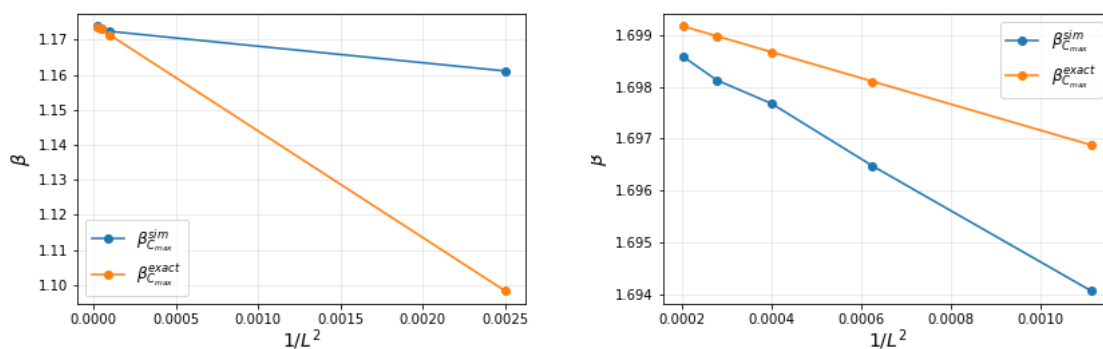
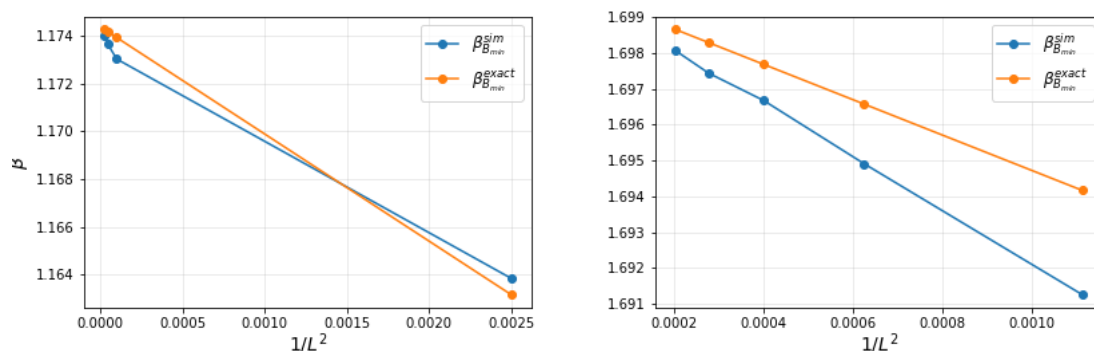


Рис. 6. График зависимости значения  $\beta_{C_{max}}$  в котором достигается максимум теплоемкости от размера системы для модели Поттса с числом компонент  $q = 5$ (слева) и  $q = 20$  (справа)

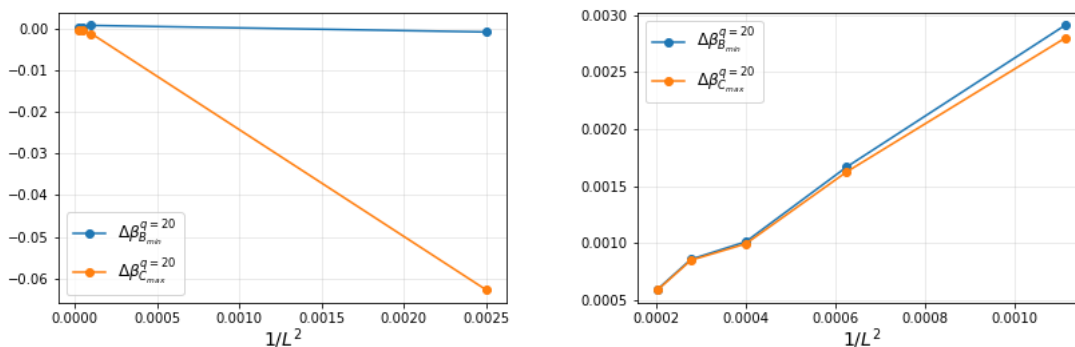
Затем подставим полученные значения  $\Delta\tilde{\epsilon}$  и  $\beta_0$  в уравнение 14. Результат отображен на рисунке 4. Для 5-компонентной модели наблюдается зависимость  $C_{max} \sim V^{0.5}$ , для 20-компонентной модели -  $C_{max} \sim V^{0.976}$ , что та близко к аналитическому расчету.

Значение минимума кумулянта Биндера по результатам моделирования также можно вычислить, подставив полученные значения  $\beta_0$ ,  $e_0$  и  $e_d$  в уравнение 16. Результаты представлены на рис. 5. Значение минимума кумулянта Биндера для бесконечно большой решетки является константой. По графику видно, что для обеих систем  $q = 5$  и  $q = 20$  с ростом размера решетки значение приближается к искомой константе.

Повторим аналогичное упражнение для значения температуры, при которой достигается максимум теплоемкости  $\beta_{C_{max}}$  (уравнение (15)) и минимум кумулянта Биндера  $\beta_{B_{min}}$  (уравнение(17)). Результаты отображены на рис. 6 и рис.7. Как видно из графиков, значение температуры, при которой наблюдается максимум теплоемкости и минимум кумулянта Биндера во всех случаях стремятся в истинному значению при увеличении размера решетки. Это также видно на графике отклонения от точного значения, выражение (8).



**Рис. 7.** График зависимости значения  $\beta_{B_{min}}$  при котором наблюдается минимум кумулянта Биндера от размера системы для модели Поттса с числом компонент  $q = 5$ (слева) и  $q = 20$  (справа)



**Рис. 8.** График отклонения обратной температуры  $\beta_{C_{max}}^{sim}$  и  $\beta_{B_{min}}^{sim}$  от точного значения  $\Delta\beta = \beta_{exact} - \beta_{sim}$  в зависимости от размера системы для модели Поттса с числом компонент  $q = 5$ (слева) и  $q = 20$  (справа)

Проверим соотношение :

$$r_c = \frac{\sum_{e < e_c} P_{\beta,L}(e)}{\sum_{e \geq e_c} P_{\beta,L}(e)} \quad (18)$$

Пиковое соотношение связано с разностью свободных энергий упорядоченных и неупорядоченных фаз. Поскольку существует  $q$  разных упорядоченных фаз, то точное значение пикового соотношения в пределе термодинамики равно  $q$  при температуре перехода  $\beta_c$  [31]. За  $e_c$  была принята средняя энергия, вычисленная по формулам (9) и (10), за  $\beta = \beta_c$ . Результаты моделирования представлены в таблиц, рис. 9

Автор благодарит Л.Н. Щура за научное руководство и помощь в подготовке рукописи.



L	$\epsilon_c = \frac{q_0 + \epsilon_d}{2} = -\left(1 + \frac{1}{\sqrt{q}}\right)$	$\beta_c$	$r_c$
20	-1,447213595	1,174359006	1.31013
50	-1,447213595	1,174359006	1.595096
100	-1,447213595	1,174359006	3.338584
150	-1,447213595	1,174359006	4.141748
200	-1,447213595	1,174359006	3.467259

L	$\epsilon_c = \frac{q_0 + \epsilon_d}{2} = -\left(1 + \frac{1}{\sqrt{q}}\right)$	$\beta_c$	$r_c$
30	-1,22361	1,69967	21.7514463248
40	-1,22361	1,69967	22.4148142337
50	-1,22361	1,69967	19.0111971469
60	-1,22361	1,69967	36.493148975
70	-1,22361	1,69967	29.017965312

**Рис. 9.** Соотношения величин пиков в модели Поттса с числом компонент  $q = 5$  (слева) и  $q = 20$  (справа)

## Литература

1. Phase transitions and critical phenomena, Edited by C. Domb and J.L. Lebowitz, Elsevier (2001).
2. W. Selke, L.N. Shchur, Critical Binder cumulant in a two-dimensional anisotropic Ising model with competing interactions, Phys. Rev. E 80, 042104 (2009)
3. W. Selke, L.N. Shchur, Critical Binder cumulant in two-dimensional anisotropic Ising models, J. Phys. A 38(44), L739-L744 (2005).
4. V. Dohm, Diversity of critical behavior within a universality class, Phys. Rev. E 77 061128 (2008).
5. N. Rose and J. Machta, Equilibrium microcanonical annealing for first-order phase transitions, Phys. Rev. E 100 063304 (2019).
6. Janke W. First-order phase transitions //Computer Simulations of Surfaces and Interfaces. – Springer, Dordrecht, 2003. – С. 111-135.
7. Wang F., Landau D. P. Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states //Physical review letters. – 2001. – Т. 86. – №. 10. – С. 2050.
8. Wang F., Landau D. P. Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram //Physical Review E. – 2001. – Т. 64. – №. 5. – С. 056101.
9. Taylor M. P., Paul W., Binder K. Phase transitions of a single polymer chain: A Wang–Landau simulation study //The Journal of chemical physics. – 2009. – Т. 131. – №. 11. – С. 114907.
10. Gervais C. et al. Application of the Wang–Landau algorithm to the dimerization of glycoporphin A //The Journal of chemical physics. – 2009. – Т. 130. – №. 21. – С. 06B609.
11. Zhou C., Bhatt R. N. Understanding and improving the Wang-Landau algorithm //Physical Review E. – 2005. – Т. 72. – №. 2. – С. 025701.
12. Belardinelli R. E., Pereyra V. D. Fast algorithm to calculate density of states //Physical Review E. – 2007. – Т. 75. – №. 4. – С. 046701.
13. Belardinelli R. E., Pereyra V. D. Wang-Landau algorithm: A theoretical analysis of the saturation of the error //The Journal of chemical physics. – 2007. – Т. 127. – №. 18. – С. 184105.
14. Liang F., Liu C., Carroll R. J. Stochastic approximation in Monte Carlo computation
15. L. Yu. Barash, M. A. Fadeeva, and L. N. Shchur, Control of accuracy in the Wang–Landau algorithm, Phys. Rev E 96, 043307 (2017).

16. M. Fadeeva and L. Shchur, On the mixing time in the Wang–Landau algorithm, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 955, 012028 (2018).
17. L.N. Shchur, On properties of the Wang–Landau algorithm, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 1252, 012010 (2019).
18. P. Dayal, et al, Performance limitations of flat-histogram method, *Phys. Rev. Lett.* 92, 097201 (2004).
19. S. Boyd, P. Diaconis, L. Xiao, Fastest mixing Markov chain on a graph, *SIAM Review*
20. Xu J., Ma H. R. Density of states of a two-dimensional X Y model from the Wang-Landau algorithm // *Physical Review E*. – 2007. – Т. 75. – №. 4. – С. 041115.
21. Wolff U. Collective Monte Carlo updating for spin systems // *Physical Review Letters*. – 1989. – Т. 62. – №. 4. – С. 361.
22. Kasteleyn P. W., Fortuin C. M. Phase transitions in lattice systems with random local properties // *PSJJS*. – 1969. – Т. 26. – С. 11.
23. Wu F. Y. The potts model // *Reviews of modern physics*. – 1982. – Т. 54. – №. 1. – С. 235.
24. Baxter R. J. Potts model at the critical temperature // *Journal of Physics C: Solid State Physics*. – 1973. – Т. 6. – №. 23. – С. L445.
25. Vogel T. et al. Generic, hierarchical framework for massively parallel Wang-Landau sampling // *Physical review letters*. – 2013. – Т. 110. – №. 21. – С. 210603.
26. Vogel T. et al. Exploring new frontiers in statistical physics with a new, parallel Wang-Landau framework // *Journal of Physics: Conference Series*. – IOP Publishing, 2014. – Т. 487. – №. 1. – С. 012001.
27. Li Y. W. et al. A new paradigm for petascale Monte Carlo simulation: Replica exchange Wang-Landau sampling // *Journal of Physics: Conference Series*. – IOP Publishing, 2014. – Т. 510. – №. 1. – С. 012012.
28. Zhan L. A parallel implementation of the Wang–Landau algorithm // *Computer Physics Communications*. – 2008. – Т. 179. – №. 5. – С. 339-344.
29. Potts R. B. Some generalized order-disorder transformations // *Mathematical proceedings of the cambridge philosophical society*. – Cambridge University Press, 1952. – Т. 48. – №. 1. – С. 106-109.
30. M. Fadeeva and L. Shchur, in preparation.
31. Rose N., Machta J. Equilibrium microcanonical annealing for first-order phase transitions // *Physical Review E*. – 2019. – Т. 100. – №. 6. – С. 063304.