

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ЧЕТЫРЕХКОМПОНЕНТНОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА НА ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ МЕТОДОМ ВАНГА–ЛАНДАУ С КОНТРОЛИРУЕМОЙ ТОЧНОСТЬЮ

*М. А. Фадеева<sup>a\*</sup>, Л. Н. Щур<sup>b,a\*\*</sup>*

<sup>a</sup> Научно-исследовательский университет «Высшая школа экономики»,  
101100, Москва, Россия

<sup>b</sup> Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук  
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 8 июня 2022 г.,  
после переработки 8 июня 2022 г.  
Принята к публикации 4 июля 2022 г.

Численно исследуется критическое поведение четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке. Использован модифицированный метод Ванга–Ландау с контролем точности оценки плотности состояний. Конечномерный анализ полученных результатов подтверждает наличие фазового перехода второго рода с критическими показателями, соответствующими классу универсальности двумерной четырехкомпонентной модели Поттса.

DOI: 10.31857/S0044451022120112  
EDN: LDVPPK

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Теория фазовых переходов второго рода предсказывает классификацию моделей статистической физики с ферромагнитным взаимодействием по набору признаков, таких как пространственная размерность системы, размерность параметра порядка и симметрия основного состояния (см., например, [1]). Гипотеза универсальности является следствием подхода к критическим явлениям — теории ренормализационной группы, в которой детали гамильтониана не влияют на значения критических показателей и на масштабные преобразования функций [2]. Результаты, полученные с применением этой теории, получили подтверждение в рамках таких общих теорий, как конформная теория поля [3, 4] и стохастическая теория эволюции Шрамма–Левнера [5, 6]. Имеется большое число численных исследований, которые воспроизводят критические индексы с достаточной надежностью и не противоречат гипотезе универсальности. Более

того, результаты исследования неравновесных систем также формулируются на языке универсальности [7]. Таким образом, многочисленные системы с разнообразными деталями гамильтониана и отличиями на малых масштабах хорошо классифицируются набором критических индексов, зависящим лишь от глобальных свойств гамильтониана. Технически это можно выразить так, что амплитуда корреляционной длины зависит от локальных свойств, но ее убывание на больших расстояниях в окрестности фазового перехода не зависит от локальных свойств и поведение на больших расстояниях описывается универсальной функцией.

Следует заметить, что не все величины являются универсальными. Например, значения критических амплитуд универсальных функций не являются универсальными сами по себе, а лишь их некоторые комбинации оказываются не зависящими от деталей гамильтониана [1]. Следует также с осторожностью трактовать универсальность в системах с ограниченными размерами, в которых конечность системы в одном из направлений может давать явную зависимость как от размера системы, так и от типа граничных условий. Конечно, эти эффекты также являются следствием глобальных влияний, поскольку размер системы и тип граничных условий ограничивают расходимость корреляцион-

\* E-mail: mafadeeva@hse.ru

\*\* E-mail: lev@landau.ac.ru

ной длины, за счет чего зависимость от размера системы будет явной. Замечательный пример, это выражение для корреляционной длины в модели Изинга на бесконечной полоске конечной ширины  $L$  со свободными граничными условиями на краях полоски, полученное в статье [8] с помощью конформной теории поля [3]  $\xi(L) \propto L/\pi$ , с явной зависимостью корреляционной длины вдоль полоски от ее ширины. Эта зависимость является универсальной при оговорке ширины полоски и типа граничных условий.

Еще одно уточнение универсальности происходит от анизотропии системы [9]. Например, для модели Изинга на треугольной решетке с константой  $J'$  взаимодействия спинов вдоль одного из направлений решетки и константой взаимодействия вдоль двух других направлений  $J$  значение кумулянта Биндера, которое является некоторой универсальной комбинацией критических амплитуд, зависит явно от параметра анизотропии — отношения констант взаимодействия  $q = J'/J$  [10]. Заметим однако, что анизотропия взаимодействия — это глобальная характеристика гамильтониана.

Заметим также, что в некоторых случаях даже введение примесей может не менять класс универсальности. Это можно увидеть на примере хорошо изученной аналитически и численно двумерной модели Изинга, в которой корреляционная длина приобретает аддитивную логарифмическую поправку за счет примесей [11], что приводит к логарифмическим поправкам термодинамических наблюдаемых, однако их зависимость от корреляционной длины остается той же функцией, что и в случае отсутствия примесей. При этом сохраняется и универсальность отношения критических амплитуд — их численные значения также характеризуют класс универсальности [12]. Таким образом, при относительно малой концентрации примесей не нарушаются глобальные свойства и модель демонстрирует поведение в классе универсальности двумерной модели Изинга. При таком подходе можно также увидеть, что изменение универсального поведения в этой модели может произойти только в окрестности точки перколяционного фазового перехода — большая концентрация примесей может привести к реализациям перколяционного геометрического кластера, что изменит критические свойства системы, при концентрации примесей более 10 процентов проявляется отклонение от универсального поведения модели Изинга за счет смешивания влияния двух критических областей [12]. Это также проявление влияния глобальной характеристики — гео-

метрической перколяции, которая описывается другим набором критических индексов и другой функциональной зависимостью корреляционной длины.

В последние годы появились работы, утверждения которых, основанные на численном моделировании, находятся в противоречии с описанной выше картиной универсальности. В частности, в статье [13] на основе численного моделирования четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке сделано утверждение, что система испытывает фазовый переход первого рода. Известно, что модель Поттса с локальным взаимодействием испытывает фазовый переход второго рода, что показано аналитически [14, 15], численно [16] и, что особо важно, экспериментально [17].

В разд. 3 мы приводим результаты численного анализа четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке с применением метода прямой оценки плотности состояний (DOS), аналогично использованному в статье [13]. Отличие состоит в том, что мы использовали для оценки DOS не прямой метод Ванга–Ландау [18, 19], а его модификацию [20], потенциально обладающую большей точностью оценки DOS. Кроме того, мы использовали для оценки степени сходимости вычислений DOS предложенный нами ранее метод [21]. Мы приводим результаты оценки критических индексов, которые указывают на то, что четырехкомпонентная модель Поттса на гексагональной решетке не демонстрирует отклонения от ожидаемого универсального поведения в классе универсальности четырехкомпонентной модели Поттса. Обратное и ошибочное утверждение статьи [13] основано, по-видимому, на отсутствии сходимости оценки DOS к требуемому в силу известных дефектов прямого метода Ванга–Ландау, а также в силу использования качественного метода анализа, не обладающего надлежащей точностью.

В разд. 2 мы подробно излагаем детали модифицированного метода, использованного нами для проведения численного исследования.

## 2. МОДИФИЦИРОВАННЫЙ МЕТОД ВАНГА–ЛАНДАУ С КОНТРОЛЕМ СХОДИМОСТИ

Метод Ванга–Ландау [18] получил широкое распространение благодаря простоте его реализации для классических систем с дискретным спектром энергии. Метод дает возможность прямой численной оценки плотности состояний (точнее, напрямую оценивается энтропия, как будет видно из формули-

ровки метода). Он основан на остроумной эвристической идее оценки принятия перехода между состояниями моделируемой системы пропорционально отношению текущих плотностей состояний, зависящих от начальной и конечной энергий. Эту вероятность перехода мы называем вероятностью Ванга–Ландау. Статистическая сумма систем с дискретным спектром может быть представлена в виде

$$Z = \sum_{k=1}^{N_E} g(E_k) e^{-E_k/k_B T}, \quad (1)$$

где  $g(E_k)$  — число состояний (DOS) с энергией  $E_k$ , ( $k = 1, 2, \dots, N_E$ ),  $N_E$  — число уровней энергии,  $k_B$  — постоянная Больцмана и  $T$  — температура. Заметим, что сама DOS не зависит от температуры, но ее знание дает возможность получить значения свободной энергии как функции температуры. Производные свободной энергии по температуре дают наблюдаемые термодинамические величины, например, внутреннюю энергию системы и теплоемкость. Для получения зависимости свободной энергии от других параметров гамильтониана, например магнитного поля, необходимо расширенное представление статсуммы с плотностью состояний, зависящей также от магнитного поля. Метод достаточно общий. Он может быть применен также в задачах оптимизации [22], допускающих представление целевой функции в виде, аналогичном выражению (1).

### 2.1. Алгоритм Ванга–Ландау

Алгоритм состоит из следующих шагов: 1) иницируется вспомогательная функция  $H(E_k) = 0$  и текущее значение логарифма DOS  $\lg(E_k) = 1$ , ( $k = 1, 2, \dots, N_E$ ), задается произвольная конфигурация системы и вычисляется ее энергия, задается начальное значение параметра  $f = \exp(1)$  (его значение будет пояснено ниже); 2) любым методом Монте-Карло разыгрывается возможный переход в другое состояние (чаще всего используется метод Метрополиса [19]); 3) переход из состояния с энергией  $E_k$  в состояние с энергией  $E_m$  принимается с вероятностью Ванга–Ландау

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

где используется текущая оценка DOS  $\tilde{g}(E_k) = \exp \lg(E_k)$  и происходит увеличение значения вспомогательной функции принятого состояния  $H(E_k) = H(E_k) + 1$  и функции  $\lg(E_k) = \lg(E_k) + 1$ ; шаги 2 и 3 повторяются до тех пор, пока вспомогательная функция  $H(E_k)$  не станет “плоской”

с некоторой процентной погрешностью, например 5% [18]; 4) после этого рекомендуется [18] сбросить значения вспомогательной функции  $H(E_k) = 0$ , уменьшить текущее значение параметра  $f = \sqrt{f}$ , откалибровать текущие значения логарифма DOS  $\lg(E_k) = f \lg(E_k)$ , ( $k = 1, 2, \dots, N_E$ ), и перейти к шагу 2. Процесс завершается по достижении некоторого выбранного значения параметра  $f$ , например  $f = \exp(10^{-8})$ .

### 2.2. Модификация: 1/t-алгоритм

Для большинства спиновых моделей с дискретным спектром энергии такая процедура приводит к неплохой оценке плотности состояний и алгоритм используется в огромном числе исследований<sup>1)</sup>. Тем не менее, уже в ранних применениях авторами метода было отмечено, что он приводит к некоторой конечной точности оценки DOS в несколько процентов [23]. Соответственно, для систем относительно большого размера результаты для термодинамических функций могут иметь существенные погрешности, в том числе в критической области.

Способ преодолеть такой дефект был предложен позднее в работе Беллардинелли и Пирелли [20] — 1/t-алгоритм. Теоретическое обоснование сходимости при применении 1/t-алгоритма было получено в работе Лианга с соавторами [22], основанной на применении теории стохастической аппроксимации.

Модификация с применением 1/t-алгоритма основана на изменении калибровочного коэффициента  $f$  не по закону квадратного корня, а обратно пропорционально времени вычисления  $f \propto 1/t$ , измеренного в шагах Монте-Карло. Коэффициент пропорциональности выбирается из расчета непрерывности сшивки двух законов после некоторого числа шагов 2-3-4 исходного алгоритма Ванга–Ландау.

### 2.3. Критерий сходимости DOS

При применении модифицированного метода Ванга–Ландау в принципе возможно получение оценки DOS с произвольной точностью. Однако для этого приходится платить астрономическим объемом вычислений, поскольку процесс схождения оценки к ожидаемой логарифмически медленный.

<sup>1)</sup> О распространенности применения метода Ванга–Ландау свидетельствует, например, такой факт, что на момент написания текста нашей статьи на официальном сайте издательства APS указан список цитирований из более чем 2140 статей.

Кроме того, заведомо неизвестна оценка сходимости DOS.

Решение этой проблемы было предложено в нашей статье [21]. Дополнительно вводится в анализ матрица  $T(E_k, E_m)$  с элементами  $T(E_k, E_m)$ , которые равны частоте переходов между состояниями с энергиями  $E_k$  и  $E_m$ . Для ее оценки на каждом шаге основного алгоритма Ванга–Ландау добавляется счетчик числа переходов  $\tilde{T}(E_k, E_m)$  между состояниями с энергией  $E_k$  и  $E_m$ . Результат статьи [22] дает основания полагать, что асимптотически  $\tilde{T}(E_k, E_m)$  приближает  $T(E_k, E_m)$ . Это предположение проверено путем численного моделирования моделей Поттса с числом компонент 2, 3 и 4 и XY-модели в размерностях решеток 1, 2 и 3 и сравнением с точными результатами в ряде случаев, а также с аккуратными численными экспериментами с применением других методов Монте-Карло. Для одномерной модели Изинга матрица была вычислена точно [21].

Во всех случаях аналитических и численных исследований было замечено, что искомая матрица  $T(E_k, E_m)$  является дважды стохастической. Ее старшее собственное значение равно единице. Таким образом, отклонение модуля разницы старшего собственного значения оценочной матрицы  $\tilde{T}(E_k, E_m)$  от единицы может быть использовано как критерий приближения к желаемой DOS. Вопрос однозначности такого значения DOS остается открытым. Однако удивительный факт того, что начальный этап оригинального метода Ванга–Ландау для систем с дискретным спектром приводит к неплохой начальной оценке DOS и доказанный факт того, что в таком случае  $1/t$ -алгоритм приведет к желаемой DOS, позволяют полагать такой метод контроля точности оценки DOS достаточно надежным. Более того, в приложении статьи [21] доказано утверждение о том, что если оценочная матрица  $\tilde{T}(E_k, E_m)$  близка к стохастической, то оценочная DOS близка к желаемой. Доказательство основано на том факте, что на этапе 2 алгоритма Ванга–Ландау мы генерируем случайное блуждание в конфигурационном пространстве, которое удовлетворяет условию детального баланса. При этом каждый элемент матрицы переходов  $T(E_k, E_m)$  является произведением вероятности Ванга–Ландау на вероятность случайного блуждания в конфигурационном пространстве из состояния с энергией  $E_k$  в состояние с энергией  $E_m$  (формула (2) статьи [21]). Дополнительно, в статье [21] на примере одномерной модели Изинга аналитически показано, что если при построении матрицы  $\tilde{T}(E_k, E_m)$  использовать точные значения

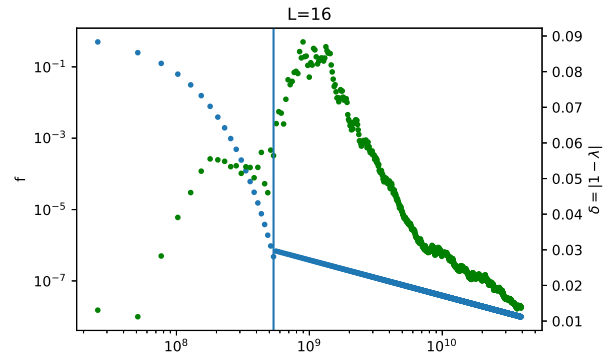


Рис. 1. (В цвете онлайн) Зависимость параметра  $f$  и критерия точности  $\delta = |1 - \lambda_1|$  от шага Монте-Карло  $t$  для расчета четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке с линейным размером  $L = 16$ . Синий цвет соответствует значениям параметра  $f$ , а зеленый — значениям критерия точности  $\delta$

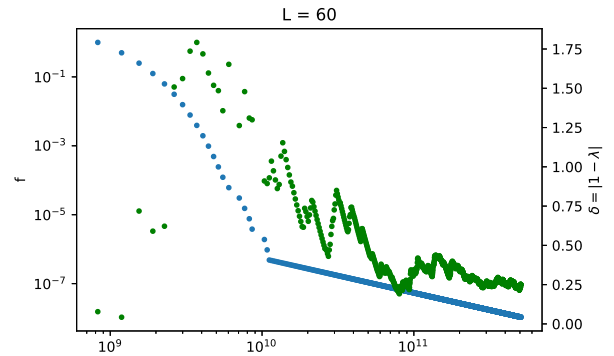


Рис. 2. (В цвете онлайн) Зависимость параметра  $f$  и критерия точности  $\delta = |1 - \lambda_1|$  от шага Монте-Карло  $t$  для расчета четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке с линейным размером  $L = 60$ . Синий цвет соответствует значениям параметра  $f$ , а зеленый — значениям критерия точности  $\delta$

DOS, то матрица переходов будет дважды стохастической.

На рис. 1, 2 показаны примеры изменения параметра  $f$  и критерия сходимости  $\delta = |1 - \lambda_1|$  от шага Монте-Карло  $t$  для двух размеров решетки. На первом этапе параметр  $f$  убывает по экспоненциальному закону метода Ванга–Ландау [18,19], далее включается степенное убывание по закону  $1/t$  [20]. Критерий сходимости  $\delta$  также убывает по степенному закону на заключительной стадии вычислений, хотя и не всегда равномерно.

#### 2.4. Оценки характерных времен алгоритма: время туннелирования и время перемешивания

Характерные времена алгоритма Ванга–Ландау — это время туннелирования (tunnelling time) и время перемешивания (mixing time).

Время туннелирования связано с начальным этапом алгоритма и характеризует типичное время при использовании критерия ровности гистограммы. Формально его можно определить как время первого достижения одного края энергетического спектра при старте моделирования с другого края спектра [24]. Это время также называют временем первого пересечения (first passage time) [25]. По сути, алгоритм Ванга–Ландау основан на случайном блуждании по спектру энергии. Если бы мы не использовали для принятия каждого перехода вероятность Ванга–Ландау  $P_{WL}$  (см. выражение (2)), то у нас было бы случайное блуждание по спектру энергии, т.е. по одномерной решетке с числом узлов  $L^2$ . В этом случае время достижения противоположного конца спектра (время туннелирования) было бы пропорционально квадрату числа уровней энергии, которое на двумерной решетке растет пропорционально  $L^2$ . Иными словами, свободное случайное блуждание по энергетическому спектру нашей модели дает время туннелирования пропорционально четвертой степени размера решетки  $L^4$ . Отличие вероятности Ванга–Ландау  $P_{WL}$  от единицы приводит в нашем случае к более выраженному росту времени туннелирования, и численные оценки приводят к еще более быстрому росту времени туннелирования с увеличением размера решетки, и для двумерной модели Изинга  $t_{un} \propto L^{4.8(4)}$ .

Второе характерное время, время перемешивания, важно на заключительном этапе алгоритма при приближении к искомому DOS. Оно определяется [26] разницей первого и второго собственных значений матрицы переходов  $T(E_k, E_m)$ ,

$$t_{mix} \propto \frac{1}{|\lambda_2 - \lambda_1|}, \quad (3)$$

т.е. целью в спектре (spectral gap).

Численный эксперимент показывает, что время перемешивания растет с размером решетки  $L$  по степенному закону  $t_{mix} \propto L^{4.28(4)}$  для двумерной модели Изинга.

Эти оценки показывают, что метод Ванга–Ландау требует гигантского количества исполнения шагов Монте-Карло для достижения требуемого результата, что можно увидеть из масштабов

горизонтальной оси приведенных выше графиков зависимости критерия сходимости, рис. 1, 2. Предварительные оценки характерных времен для исследуемой нами модели не сильно отличаются от времен для модели Изинга. Нам важно, что характерные времена растут быстрее, чем четвертая степень линейного размера решетки  $L$ .

#### 2.5. Детали численного эксперимента

Вычисление собственных значений  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  матрицы переходов случайного блуждания с вероятностью Ванга–Ландау  $T(E_n, E_m)$  проводилось с помощью функции `dgeev()` пакета Intel® oneAPI Math Kernel Library LAPACK [27].

Для случайного выбора спина на шаге 2 алгоритма использовался генератор псевдослучайных чисел MT19937 из библиотеки [28].

Количество шагов между проверкой гистограммы  $H(E)$  на равномерность заполнения  $10^6$ .

Каждый  $1/t$ -шаг алгоритма выполнялся до тех пор, пока на третьем шаге выполнения алгоритма не будет совершенно как минимум  $N_E \cdot 10^8 \approx 10^8 \cdot L^2$  шагов.

Термодинамические функции (см. выражения (5)-(8)) вычислялись программой Mathematica.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Гамильтониан модели Поттса имеет вид

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{nn} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}, \quad (4)$$

где суммирование проводится по всем ближайшим соседям и множитель  $1/2$  учитывает, что каждая пара спинов входит в сумму дважды,  $\delta$  — символ Кронекера. В нашем случае  $\sigma_i$  принимает четыре возможных значения.

Вычисление плотности состояний  $g(E_K)$  ( $k = 1, 2, \dots, N_E$ ) проводилось на гексагональных решетках с линейным числом узлов  $L = 6, 8, 12, 16, 24, 30, 36, 48, 54, 60, 62$  и  $72$  (см. рис. 3), на которой реализуются значения энергии в диапазоне от  $-3/2L^2$  до нуля.

При применении методики, описанной в разделе 2, был получен набор численных данных для плотности состояний  $g(E_k)$  четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке. Эти данные были использованы для вычисления энергии  $E$ , теплоемкости  $C$  и кумулянта Биндера  $B_E$  [29] как

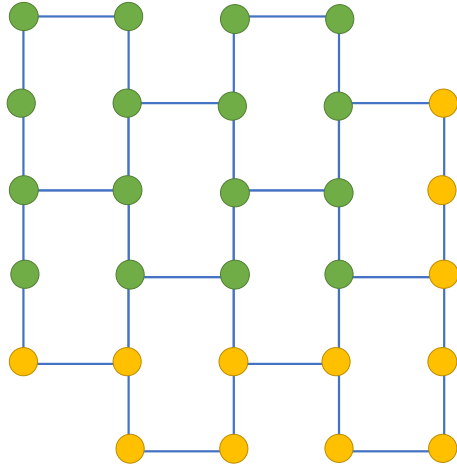


Рис. 3. (В цвете онлайн) Пример используемой при моделировании гексагональной решетки с линейным размером  $L = 4$ . Желтым цветом обозначены дополнительные узлы для демонстрации организации периодических граничных условий

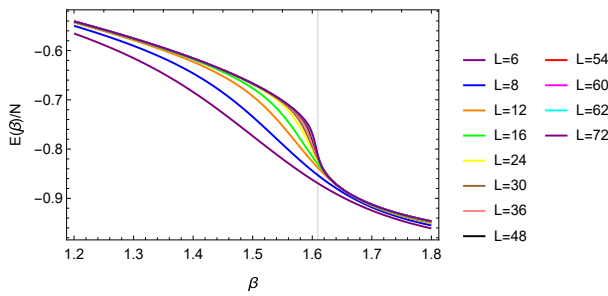


Рис. 4. (В цвете онлайн) Температурная зависимость удельной энергии для нескольких размеров решетки

функции обратной температуры  $\beta = 1/k_B T$  по формулам

$$E(\beta) = \langle E \rangle = \frac{\sum_{i=0}^{N_E} E_i g(E_i) e^{-\beta E_i}}{\sum_{i=0}^{N_E} g(E_i) e^{-\beta E_i}}, \quad (5)$$

$$\langle E^2 \rangle = \frac{\sum_{i=0}^{N_E} E_i^2 g(E_i) e^{-\beta E_i}}{\sum_{i=0}^{N_E} g(E_i) e^{-\beta E_i}}, \quad (6)$$

$$C(\beta) = \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2), \quad (7)$$

$$B_E(\beta) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle}{3 \langle E^2 \rangle^2}. \quad (8)$$

Графики энергии  $E/N$  и теплоемкости  $C/N$  на один узел, а также графики кумулянта Биндера приведены соответственно на рис. 4, 5, 6. Число узлов  $N = L^2$ .

Полученные результаты позволяют оценить значения критических амплитуд. На рис. 7 приведена

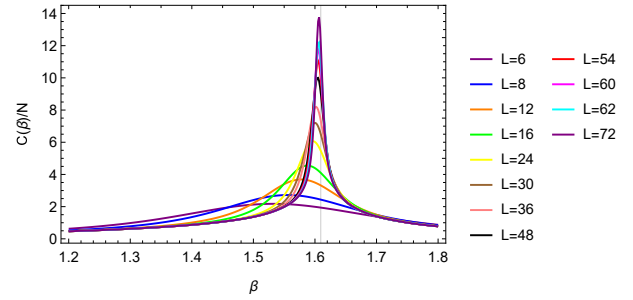


Рис. 5. (В цвете онлайн) Температурная зависимость удельной теплоемкости для нескольких размеров решетки

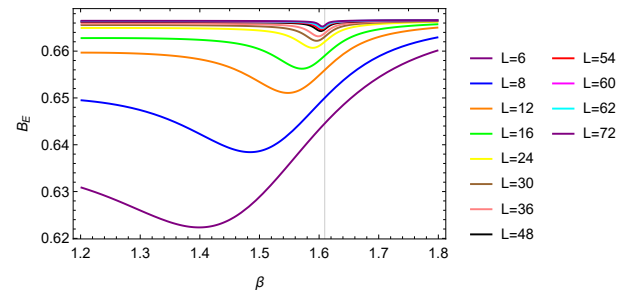


Рис. 6. (В цвете онлайн) Температурная зависимость кумулянта Биндера для нескольких размеров решетки

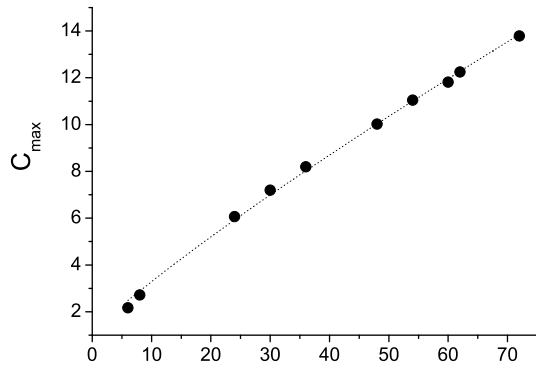
зависимость максимума удельной теплоемкости от линейного размера  $L$ .

Хорошо известно, что модели в этом классе универсальности демонстрируют мультипликативные логарифмические поправки к теплоемкости [30]. Конечномерный анализ [31] указывает на такую зависимость максимума теплоемкости от размера системы  $L$ ,

$$C_{max} \propto \frac{L^b}{(\ln L)^{3/2}} [1 + \dots] \quad (9)$$

с показателем степени  $b = \alpha/\nu = 1$  и сложной комбинацией логарифмических членов в квадратной скобке<sup>2)</sup>. Здесь  $\alpha$  и  $\nu$  — критические показатели теплоемкости и корреляционной длины [1]. Результат аппроксимации численных данных по этой формуле, приведенный в работе [31], при анализе модели на квадратной решетке дает значение показателя  $b = 1.044(8)$ , что неплохо согласуется с аналитическим значением. В нашем случае, аналогично, результат аппроксимации максимума теплоемкости хорошо соответствует формуле (9) со значением показателя  $b = 1.042(15)$ . В статье [31] также приводится результат наивной аппроксимации дан-

<sup>2)</sup> Мы не приводим громоздких выражений в скобках. Детали можно найти в статье [31].



**Рис. 7.** Максимум теплоемкости как функция размера системы. Пунктирная линия — аппроксимация численных данных

ных степенным законом без логарифмических поправок, что дает степень  $b = 0.770(8)$ . Аналогичная аппроксимация в нашем случае дает близкое значение  $b = 0.75(1)$ .

Также из полученных нами данных для теплоемкости можно определить зависимость сдвига положения максимума теплоемкости. Известно, что этот сдвиг зависит от размера решетки [32]

$$\Delta T \propto L^{-1/\nu} \quad (10)$$

и определяется показателем корреляционной длины  $\nu$ . Аппроксимация полученных нами данных для сдвига максимума теплоемкости по формуле (10) дает оценку степени 0.672(11), что близко к точному результату  $\nu = 2/3 \approx 0.667$ . Близкий результат был получен в работе [31] из численной оценки критического индекса корреляционной длины.

Таким образом, численное исследование критического поведения теплоемкости четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке модифицированным методом Ванга–Ландау приводит к результатам, аналогичным численному исследованию критического поведения четырехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке кластерным методом [31]. Этого следовало ожидать, как и было отмечено в разд. 1.

Положение минимума кумулянта Биндера также может быть использовано для оценки показателя корреляционной длины, но оно затруднено несингулярными поправками к восприимчивости [16].

Мы также провели анализ функции распределения энергии при различных температурах и не нашли указаний на сосуществование фаз, на основа-

нии которого в статье [13] был сделан вывод о фазовом переходе первого рода в исследуемой модели.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы показали, что метод Ванга–Ландау в модифицированном варианте с оценкой точности вычислений может быть с успехом применен к извлечению численных значений критических индексов модели Поттса с четырехкратным вырожденным основным состоянием. Также мы показали, что такая модель на гексагональной решетке демонстрирует критическое поведение, аналогичное ранее детально численно исследованной модели на квадратной решетке в классе универсальности [31], получившем имя модели.

Существенно, что для оценки плотности состояний были использованы два дополнительных ингредиента. Первый из них,  $1/t$ -метод, позволяет избежать искажений в оценке DOS [20]. Второй, метод оценки степени отклонения матрицы переходов от стохастической, позволяет контролировать приближение оценки DOS к ожидаемой [21]. Также важен учет логарифмических поправок к критическому поведению [16, 31] при конечномерном анализе критического поведения термодинамических наблюдаемых.

После завершения исследования мы обнаружили в текущем номере ЖЭТФ статью [33] авторов из того же коллектива, что и статья [13], в которой на основании анализа этой же модели с помощью кластерного метода Монте-Карло сделан вывод о фазовом переходе второго рода. При этом результаты ранней работы [13] с противоположным выводом о фазовом переходе первого рода не обсуждаются.

В отличие от этих работ, в которых выводы сделаны на основании качественного анализа распределения энергии, нами проведена численная оценка критических индексов и сравнение с результатами анализа других авторов [31]. В статье приведены и подробно описаны все необходимые детали исследования, что предоставляет возможность верификации представленных нами результатов.

**Благодарности.** Вычисления плотности состояний проводились на кластере Manticore (ИЦ РАН) и суперкомпьютере sHARISMa (НИУ ВШЭ).

**Финансирование.** Работа М.А.Ф. выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант «аспиранты» 20-37-90084).

## ЛИТЕРАТУРА

1. V. Privman, P.C. Hohenberg, and A. Aharony, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 14, ed. by C. Domb and J.L. Lebowitz, Academic, New York (1991).
2. M. Fisher, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 597 (1974).
3. A.A. Belavin, A.M. Polyakov, and A.B. Zamolodchikov, *Nucl. Phys. B* **241**, 333 (1984).
4. V.I. S. Dotsenko and V. A. Fateev, *Phys. B* **240**, 312 (1984).
5. O. Schramm, *Isr. J. Math.* **118**, 221 (2000).
6. S. Smirnov, *Compt. Rend. Ser 1* **333**, 239 (2001).
7. G. Ódor, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 663 (2004).
8. J.L. Cardy, *J. Phys. A: Math. Gen.* **17**, L385 (1984).
9. V. Dohm, *Phys. Rev. E* **77**, 061128 (2008).
10. W. Selke and L.N. Shchur, *Phys. Rev. E* **80**, 042104 (2009).
11. Вик.С. Доценко, Вл.С. Доценко, *ЖЭТФ* **83**, 727 (1982).
12. L.N. Shchur and O.A. Vasilyev, *Phys. Rev. E* **65**, 016107 (2001).
13. А. К. Мургазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Мазагаева, М. А. Магомедов, *ЖЭТФ* **156**, 502 (2019).
14. R.B. Potts, *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.* **48**, 106 (1952).
15. F.Y. Wu, The Potts model, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
16. L.N. Shchur, B. Berche, and P. Butera, *Nucl. Phys. B* **811**, 491 (2009).
17. M. Sokolowski and H. Pfñür, *Phys. Rev. B* **49**, 7716 (1994).
18. F. Wang and D.P. Landau, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2050 (2001).
19. F. Wang and, D.P. Landau, *Phys. Rev. E* **64**, 056101 (2001).
20. R. E. Belardinelli and V. D. Pereyra, *Phys. Rev. E* **75**, 046701 (2007).
21. L.Yu. Barash, M.A. Fadeeva, and L.N. Shchur, *Phys. Rev. E* **96**, 043307 (2017).
22. F. Liang, C. Liu, and R.J. Carroll, *J. Amer. Stat. Ass.* **102**, 305 (2007).
23. D.P. Landau, private communication.
24. L. N. Shchur, *J. Phys.: Conf. Ser.* **1252**, 012010 (2019).
25. S. Redner, *A Guide to First-Passage Processes*, Cambridge Univ. press, Cambridge (2001).
26. M. Fadeeva and L.N. Shchur, *J. Phys.: Conf. Ser.* **955**, 012028 (2018).
27. M. Krainiuk, M. Goli, and V.R. Pascuzzi, 2021 International Workshop on Performance, Portability and Productivity in HPC (P3HPC), p. 22.
28. M.S. Guskova, L.Yu. Barash, and L.N. Shchur, *Comp. Phys. Commun.* **200**, 402 (2016).
29. K. Binder, *Z. für Physik B. Conden. Matt.* **43**, 119 (1981).
30. J.L. Cardy, M. Nauenberg, and D.J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **22**, 2560 (1980).
31. J. Salas and A. Sokal, *J. Stat. Phys.* **88**, 567 (1997).
32. A.E. Ferdinand and M.E. Fisher, *Phys. Rev.* **185**, 832 (1969).
33. А.К. Мургазаев, А.Б. Бабаев, *ЖЭТФ* **161**, 847 (2022).