РАСЧЁТ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ КЛАССИЧЕСКОЙ МНОГОЧАСТИЧНОЙ СИСТЕМЫ С ПОМОЩЬЮ МОДИФИЦИРОВАННОГО АЛГОРИТМА ВОНГА–ЛАНДАУ

Ларкин А.С.,* Филинов В.С., Левашов П.Р.

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**alexanderlarkin@rambler.ru*

Плотность состояний $G(E)$ для классической системы представляет собой число микроскопических состояний с энергией на интервале $[E, E + \mathrm{d}E]$, относящемся к $\mathrm{d}E$. Согласно распределению Гиббса, вероятность того, что система при температуре T обладает энергией E, пропорциональна $G(E)\exp(-E/T)$. Важной особенностью этого подхода является то, что термодинамические величины, такие как статистическая сумма, свободная энергия, энтропия, внутренняя энергия, теплоемкость и т.д., могут быть рассчитаны путем простого численного интегрирования во всем диапазоне температур по одной универсальной функции $G(U)$.

Плотность состояний может быть численно рассчитана с использованием алгоритма Вонга-Ландау, относящегося к так называемым гистограммным методам Монте-Карло. В данной работе предлагается модификацию этого алгоритма, которая применима к классическим системам с непрерывным спектром, состоящим из одинаковых частиц, взаимодействующих посредством парного потенциала. Чтобы улучшить сходимость и гарантировать эргодичность случайных блужданий, мы ввели в алгоритм специальные шаги, заменяющие микроскопическое состояние другим, имеющим ту же энергию. Программная реализация алгоритма позволяет проводить параллельные вычисления на многопроцессорных системах с общей памятью.

Мы применили разработанную реализацию алгоритма Ванга-Ландау к системе мягких сфер, состоящей из частиц с парным взаимодействием, описываемым обратным потенциалом двенадцатой степени $\varphi(r) = \varepsilon(\sigma/r)^{12}$. Плотность состояний $G(E)$ была рассчитана для значений плотности ρ от $0.1\sigma^{-3}$ до $0.5\sigma^{-3}$. Она был использован для вычисления статистической суммы $Z(T)$, свободной энергии $F(T)$, внутренней энергии $\bar{E}(T)$, теплоемкости $C_V(T)$ и энтропии $S(T)$ для температуры T в диапазон от 0 до $2\varepsilon/k_B$. Надежность метода подтверждается отличным согласованием полученных результатов с известными аналитическими данными широкого диапазона [2].

1. F. Wang, D. P. Landau *Phys. Rev. Lett.*, 86, 2021.
2. S. Pieprzyk, D.M. Heyes, and A.C. Branca,*Phys. Rev. E*, 90,2014.