И. П. Базаров, П. Н. Николаев, Метод ускоренной сходимости в статистической физике,
Докл. АН СССР, 1987, том 296, номер 2, 321–323

Доклады Академии наук СССР
1987. Том 296, № 2

УДК 536.7 МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

И.П. БАЗАРОВ, П.Н. НИКОЛАЕВ

МЕТОД УСКОРЕННОЙ СХОДИМОСТИ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ

(Представлено академиком Н.Н. Боголюбовым 19 V 1986)

Как известно, в статистической физике вычисление термодинамических функций многочастичной системы сводится к определению статистического интеграла или, как правило, одночастичной и двухчастичной функций распределения. Из-за большой сложности этой проблемы для ее решения используются методы теории возмущений, приводящие к рядам. В результате расчетов мы имеем обычно лишь несколько членов ряда. Возникает задача наилучшего приближения функции по имеющейся численной информации и по общим ее свойствам.

В последнее время в статистической физике хорошо используются методы улучшения сходимости рядов теории возмущений. Они позволяют построить функции, описывающие экспериментальные зависимости с высокой степенью точности. Но эмпирический характер этих методов снижает ценность полученных результатов.

Методы ускоренной сходимости наиболее эффективны, когда они основываются на непосредственном учете свойств системы, следующих из вида ее гамильтониана. Ярким примером этого служат новые результаты нелинейной механики, полученные Н.Н. Боголюбовым методом последовательных замен переменных, обеспечивающих ускоренную сходимость [1, 2]. Здесь мы хотим показать, что в случае статистических систем решение задачи об ускоренной сходимости можно свести к поиску функций, медленно меняющихся с изменением термодинамических параметров. Действительно, если функция достаточно гладкая и медленно меняется, то для ее построения с достаточной степенью точности необходимо меньшее число членов ряда теории возмущений, чем для функции, меняющейся быстро. Мы будем исходить из выражения для свободной энергии системы N частиц, находящихся в объеме V при температуре T:

$$F = -\theta \ln Q, \tag{1}$$

где $\theta = kT$ (k – постоянная Больцмана), Q – статистический интеграл.

Практически любая теория возмущений основана на том, что в качестве нулевого приближения берется некоторая базисная система, для которой можно вычислить статистический интеграл Q_0, а затем на основе того или иного разложения определить поправки. Поэтому для общего рассмотрения перепишем (1) в виде

$$F = F_0 - \theta \ln (Q/Q_0) = F_0 + \varphi, \tag{2}$$

где $F_0 = -\theta \ln Q_0$.

Расчет величины Q_0 осуществляется для некоторого гамильтониана H_0. С другой стороны, можно определить некоторое асимптотическое поведение функции Q, на основе которого найти гладкую функцию Q_0, которая также позволит представить F в виде (2). В качестве примера рассмотрим систему твердых сфер. При

Таблица 1

ρ_0/ρ	Z	Z_1	ΔZ_1	Z_2	ΔZ_2
10,00	1,36	1,36	0,00	1,36	0,00
3,00	3,05	3,03	0,02	3,03	0,02
2,00	5,89	5,85	0,04	5,74	0,15
1,70	8,59	8,61	0,02	8,18	0,41
1,60	10,17	10,23	0,06	9,50	0,67
1,5981	10,2	10,26	0,06	9,53	0,67
1,50	12,5	12,56	0,06	11,28	1,22
1,4948	13,2	12,71	0,49	11,38	1,82
1,4017	15,7	16,07	0,37	13,67	2,03
1,3443	19,3	19,08	0,22	15,49	3,83

$\rho \to \rho_0$ (ρ_0 – плотность при плотной упаковке частиц, ρ – плотность) $Q \to 0$, причем

$$(3) \qquad \ln Q \sim nN \ln(1 - \rho/\rho_0),$$

где n – размерность пространства [3]. На основе этого результата естественно в качестве F_0 взять величину

$$(4) \qquad F_0 = -\theta\, nN \ln(1 - \rho/\rho_0) - \theta N \ln(e/\rho),$$

так как в результате функция $F - F_0$ будет ограниченной. Аналогичным образом можно определить F_0 и для более сложных случаев.

При исследовании свойств упорядоченной системы существенную роль играет величина z – число ближайших соседей. Первый поправочный корреляционный член пропорционален $m = z/2$ [4]. Структура следующих корреляционных членов такова, что для упорядоченных систем можно представить функцию φ в виде [5]

$$(5) \qquad \varphi = -\theta m N \ln \bar{p},$$

где

$$(6) \qquad \bar{p} = (Q/Q_0)^{1/mN}.$$

Согласно (2) и (5) окончательно имеем

$$(7) \qquad F = F_0 - \theta m N \ln \bar{p}.$$

Выражение (7) полностью эквивалентно (1).

Если мы рассматриваем неупорядоченную систему, то для малых плотностей сходимость рядов хорошая. При больших плотностях скорость сходимости уменьшается. С другой стороны, хорошо известно [6], что при очень больших плотностях неупорядоченная система может быть описана на основе ячеечной модели. Поэтому есть все основания полагать, что выражение (7) эффективно при произвольных плотностях. При данном подходе конкретизация структуры F на основе учета физических свойств системы, которая является дальнейшим развитием метода, предложенного в работе [7], сводит задачу вычисления Q к задаче определения функции $\bar{p}$.

В качестве примера рассмотрим снова систему твердых сфер, выбирая F_0 в форме (4), $n = 3$ (трехмерная система). Определим $\bar{p}$, используя разложение по степеням плотности. В результате из (7) найдем, дифференцируя F по объему V, выражение для давления

$$(8) \qquad \frac{p}{\theta\rho} = Z_1 = 1 + \frac{3\rho/\rho_0}{1 - \rho/\rho_0} + \frac{(B_2\rho_0 - 3)\rho/\rho_0 + \ldots}{1 - (B_2\rho_0 - 3)\rho/(\rho_0 m) - \ldots},$$

где $B_2, B_3, \ldots$ – вириальные коэффициенты. Сравним (8) с выражением для давления, полученным на основе вириального разложения

$$(9)\qquad \frac{p}{\theta\rho} = Z_2 = 1 + B_2\rho + B_3\rho^2 + \ldots$$

при учете семи известных вириальных коэффициентов (соотношение (8) в данном случае получено на основе уравнения (7), где $\overline{p}$ вычисленно с учетом семи членов разложения его в ряд по степеням ρ). В табл. 1 приведены данные для Z_1 и Z_2 в зависимости от плотности, а также Z согласно данным машинного эксперимента [8]. Величины ΔZ_i $(i = 1, 2)$ определяются выражением

$$(10)\qquad \Delta Z_i = |Z - Z_i|.$$

Непосредственно видно, что предлагаемый метод вычисления Z приводит к значительно лучшим результатам, чем вириальное разложение. Таким образом, ряд по степеням ρ для функции $\overline{p}$ сходится быстрее, чем ряд по ρ для давления p.

Недавно проведены расчеты уравнения состояния системы твердых сфер для 4000 частиц методом Монте-Карло [9]. Эти данные несколько отличаются от данных [8] и хорошо согласуются с нашими расчетами по формуле (8).

Авторы благодарят акад. Н.Н. Боголюбова за интерес к работе и стимулирующее обсуждение.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Поступило 28 V 1986

ЛИТЕРАТУРА

1. *Колмогоров А.Н.* – ДАН, 1954, т. 98, № 3, с. 527–530. 2. *Боголюбов Н.Н., Митропольский Ю.А., Самойленко А.М.* Метод ускоренной сходимости в нелинейной механике. Киев: Наук. думка, 1969. 248 с. 3. *Базаров И.П., Николаев П.Н.* – ЖФХ, 1983, т. 57, № 7, с. 1609–1617. 4. *Базаров И.П., Николаев П.Н.* Корреляционная теория кристалла. М.: Изд-во МГУ, 1981. 232 с. 5. *Westera K., Cowley E.R.* – Phys. Rev., 1975, vol. 11, № 10, p. 4008–4016. 6. *Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р.* Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: ИЛ, 1961. 930. 7. *Базаров И.П., Николаев П.Н.* – ДАН, 1982, т. 267, № 6, с. 1344–1345. 8. *Ma D., Adhmadi G.* – J. Chem. Phys., 1986, vol. 84, № 6, p. 3449–3450. 9. *Erpeabeck J.J., Wood W.W.* – J. Stat. Phys., 1984, vol. 35, № 3/4, p. 321–340.

УДК 519.6; 533.9

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Ю.А. ВОЛКОВ

МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ЛАНДАУ

(Представлено академиком А.Н. Тихоновым 17 VII 1986)

В данной работе предлагается метод Монте-Карло для расчета функционалов от решения задачи Коши для уравнения Ландау [1]. Предлагаемые оценки удовлетворяют системе стохастических дифференциальных уравнений (СДУ), которая служит аналогом моментной системы исходного кинетического уравнения. Рассматривается вопрос о скорости убывания возмущающих членов в моментных уравнениях в зависимости от числа траекторий.