

Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

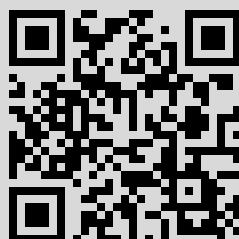
Н. Н. Калиткин, И. В. Ритус, Гладкая аппроксимация функций Ферми–Дирака, *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 1986, том 26, номер 3, 461–465

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 94.198.37.135

11 апреля 2015 г., 20:31:54



$$\begin{aligned}
p_j &= 1 - \frac{z_j}{y_j} \frac{h_j}{2k}, & \sigma &= \frac{h_j}{2} - \frac{z_j}{y_j}, & z_{j+1} &= \frac{h_j}{2} + \frac{\sigma}{p_j}, \\
q_j &= f_j - \frac{e_j}{y_j} \frac{h_j}{2k}, & y_{j+1} &= -1 - \frac{h_j}{2k} \frac{\sigma}{p_j}, & e_{j+1} &= -\frac{e_j}{y_j} - q_j \frac{\sigma}{p_j}; \\
\Delta &= \beta_1 y_J - e_J \beta_0, & u_J &= (e_J \beta_1 - z_J g_1) / \Delta, & v_J &= (g_1 y_J - e_J \beta_0) / \Delta; \\
v_j &= \frac{q_j + v_{j+1} - h_j u_{j+1} / (2k)}{p_j}, & u_j &= \frac{e_j - z_j v_j}{y_j}, & v_1 &= \frac{q_1 + v_2 - h_1 u_2 / (2k)}{p_1}, \\
u_1 &= (g_0 - \alpha_1 v_1) / \alpha_0.
\end{aligned}$$

Полученные рекуррентные формулы аналогичны формулам скалярной прогонки для системы уравнений с трехдиагональной матрицей. Примечательно, что для более сложных систем уравнений при больших n соответствующие рекуррентные формулы оказываются не намного сложнее, чем полученные выше формулы для решения уравнения теплопроводности. Это связано с тем, что матрицы B_j^+ , B_j^* , C_j^* сохраняют ту же степень разреженности, что и у исходных блоков A_j , B_j , C_j . Так, при решении параболизированной системы уравнений Навье — Стокса маршевым методом с использованием неявной разностной схемы [3] при размере блоков 10×10 матрица B_j содержала 21 ненулевой элемент, а матрица B_j^+ содержала 23 элемента.

Литература

1. Самарский А. А., Николаев Е. С. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
2. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1980.
3. Иванов М. А. Расчет дозвукового сжимаемого вязкого течения в диффузорных каналах. — В кн.: Аэрофиз. и геокосмич. иссл. М.: МФТИ, 1983, с. 48–51.

Поступила в редакцию 29.VI.1984

УДК 519.61:517.589

ГЛАДКАЯ АППРОКСИМАЦИЯ ФУНКЦИЙ ФЕРМИ — ДИРАКА

КАЛИТКИН Н. Н., РИТУС Н. В.

(Москва)

Предложены интерполяционные формулы, гладко аппроксимирующие функции Ферми — Дирака и хорошо передающие их асимптотики. Для наиболее употребительных функций вычислены коэффициенты наилучшей аппроксимации простейших трехчленных формул, обеспечивающие точность $\sim 1\%$.

1. Функции Ферми — Дирака (Ф.-Д.), возникающие при нахождении моментов электронной функции распределения, встречаются во многих задачах физики. Они определяются выражением

$$I_\nu(x) = \int_0^\infty \frac{\xi^\nu d\xi}{1 + \exp(\xi - x)}, \quad \nu > -1, \quad -\infty < x < +\infty.$$

Для них выполняется соотношение

$$I_\nu'(x) = \nu I_{\nu-1}(x),$$

с помощью которого функции Ф.-Д. доопределяются для любого нецелого $\nu < -1$. Исследованию этих функций, их табулированию и построению удобных аппроксимаций посвящен ряд работ (см. [1]–[6] и библиографию в них).

В атомной физике употребительны функции Ф.-Д. целого и полуцелого индексов. Простейшая функция целого индекса выражается через элементарные:

$$(1) \quad I_0(x) = \ln(1+e^x),$$

а остальные легко вычисляются с помощью быстро сходящегося ряда [5].

Поэтому наиболее важен сейчас вопрос о вычислении функций полуцелого индекса. Практически все предложенные до сих пор аппроксимации являлись набором формул, каждая из которых применялась в своем диапазоне значений x . Такие аппроксимации были лишь кусочно-гладкими и даже кусочно-непрерывными. Единообразный вид аппроксимирующих формул не удавалось подобрать, ибо качественное поведение функций Ф.-Д. при разных значениях x сильно различается.

Имеется пример вполне гладкого представления [6], выражающего одну функцию Ф.-Д. через другую. Однако использованный там вид аппроксимации недостаточно удачен, что ухудшает как точность, так и свойства. В настоящей работе предложены формулы, свободные от указанных недостатков.

2. Выбор аппроксимации. Когда аргумент x меняется от $-\infty$ до $+\infty$, значения функции Ф.-Д. (при $\nu > -1$) монотонно возрастают от 0 до $+\infty$. Используя в предельных случаях разложения, приведенные в [1], [6], можно получить при $I_\mu(x) \rightarrow 0$ сходящийся ряд

$$(2a) \quad I_\nu(x) = \Gamma(\nu+1) \sum_{k=0}^{\infty} a_k [I_\mu(x)/\Gamma(\mu+1)]^{1+k},$$

$$(2b) \quad a_0=1, \quad a_1=2^{-\mu-1}-2^{-\nu-1}, \quad a_2=2^{-2\mu-1}-2^{-\mu-\nu-1}-3^{-\mu-1}+3^{-\nu-1}, \dots,$$

а при $I_\mu(x) \rightarrow +\infty$ — асимптотический ряд

$$(3a) \quad I_\nu(x) \approx \frac{1}{\nu+1} \sum_{k=0} b_k [(\mu+1)I_\mu(x)]^{(\nu+1-2k)/(\mu+1)},$$

$$(3b) \quad b_0=1, \quad b_1 = \frac{\pi^2}{6} (\nu+1)(\nu-\mu),$$

$$b_2 = \frac{\pi^4}{360} (\nu+1)(\nu-\mu)(2\mu^2-3\mu\nu+7\nu^2-11\mu-21\nu+14).$$

Построим следующую вполне гладкую аппроксимацию, выражающую одну функцию Ф.-Д. через другую и правильно передающую главные члены и параметры малости обоих разложений, (2) и (3):

$$(4a) \quad I_\nu(x) \approx \frac{\Gamma(\nu+1)}{\Gamma(\mu+1)} I_\mu(x) \left\{ 1 + \sum_{k=1}^p \alpha_k [I_\mu(x)]^k + \right.$$

$$(4b) \quad \left. + \sum_{k=p+1}^n \alpha_k [I_\mu(x)]^{p+2(k-p)/(\mu+1)} \right\}^\kappa,$$

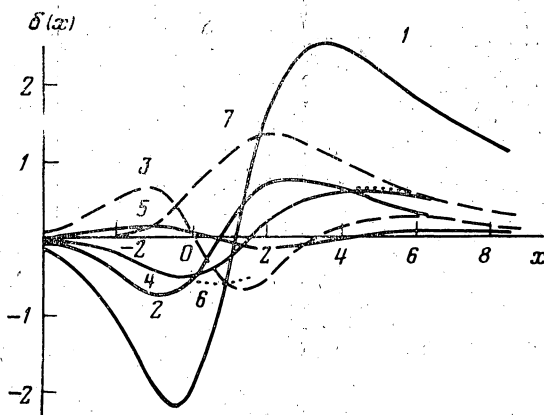
$$\kappa = \frac{\nu-\mu}{2n+p(\mu-1)}, \quad \alpha_n = \left[\frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\nu+1)} \frac{(\mu+1)^{(\nu+1)/(\mu+1)}}{\nu+1} \right]^{1/\kappa}.$$

Показатели степеней подобраны так, что слагаемое с $k=p$ можно отнести к любой из сумм.

Значения свободных параметров α_k , $1 \leq k \leq n-1$, и числа членов в суммах можно варьировать для удовлетворения различных критериев. Например, соответствующим выбором младших коэффициентов α_k , $1 \leq k \leq k_0 \leq p$, можно добиться точной передачи k_0 членов ряда (2), следующих за главным. Аналогично можно выбрать старшие коэффициенты α_k , $n-1 \geq k \geq k_1 \geq p$, так, чтобы правильно передать $n-k_1$ членов разложения (3). Остальные коэффициенты естественно определяются из условия минимума погрешности в $\|\cdot\|_C$ или $\|\cdot\|_{L_2}$, при этом для положительных и сильно меняющихся по величине функций Ф.-Д. целесообразно минимизировать не абсолютную, а относительную погрешность.

Очевидно, увеличение n позволяет уменьшить погрешность аппроксимаций, причем трудоемкость вычислений возрастает не сильно, ибо основное время расходуется на вычисление не сумм, а двух нецелых степеней. Значение p разумно полагать близким к $n/2$.

Замечание. В задачах атомной физики аргумент x играет роль потенциала поля, в котором движется электрон, а функция $I_{1/2}(x)$ пропорциональна плотности электронов в соответствующей точке поля. Поэтому наибольшее практическое значение имеют формулы, выражающие функции Ф.-Д. либо через $I_{1/2}(x)$, т. е. через плотность электронов, либо через $I_0(x)$, ибо в этом случае с помощью (1) устанавливается зависимость от потенциала поля.



3. Трехчленные формулы. Простейшими аппроксимациями типа (4) являются трехчленные формулы [7]

$$(5) \quad I_\nu(x) = \alpha_0 I_\mu(x) \{1 + \alpha_1 I_\mu(x) + \alpha_2 [I_\mu(x)]^\eta\}^\kappa,$$

где коэффициент α_1 определяется из условия минимизации максимума относительной погрешности (а остальные обеспечивают передачу главных членов обеих асимптотик).

№	I_ν	I_μ	κ	η	α_0	α_1	α_2	$\delta_m, \%$
1	$I_{3/2}$	I_0	$\left\{ \begin{array}{l} 1/2 \\ 1/6 \\ -1/6 \end{array} \right\}$	3	$3\pi^{1/2}/4$	0.870	$64/225\pi$	2.57
2	$I_{1/2}$				$\pi^{1/2}/2$	1.178	$4096/729\pi^3$	0.79
3	$I_{1/2}'$				$\pi^{1/2}/2$	1.614	$\pi^3/64$	0.66
4	$I_{3/2}$	$I_{1/2}$	$\left\{ \begin{array}{l} 2/7 \\ -1/7 \\ -2/7 \end{array} \right\}$	$7/3$	$3/2$	0.795	$(18/125)^{1/6}$	0.60
5	I_0				$2/\pi^{1/2}$	1.2	$(1024/81\pi^3)^{1/6}$	0.18
6	$I_{1/2}'$				1	1.452	$(2/3)^{1/6}$	0.62

Для трех наиболее употребительных функций Ф.-Д. были найдены коэффициенты и показатели степени их выражений (5), соответственно, через $I_0(x)$ или $I_{1/2}(x)$. В таблице приведены эти коэффициенты и максимум относительной погрешности δ . На фигуре даны графики зависимости относительных погрешностей от x , номера кривых соответствуют обозначениям таблицы.

Видно, что почти всюду погрешность не превосходит 1%. Этого достаточно для многих приложений, ибо неточность физических моделей зачастую превосходит эту величину. Заметим, что такая точность при единственном свободном параметре свидетельствует об удачном выборе вида аппроксимации.

4. Обменная энергия. В физике атома широко используется модель Хартри — Фока. В двух упрощенных вариантах этой модели (квантово-статистической модели [8] и модели Хартри — Фока — Слейтера [9], [10]) вычисление обменного слагаемого свободной энергии при ненулевой температуре привело к одина-

ковому результату, пропорциональному функции

$$(6) \quad J(x) = \int_{-\infty}^x [I_{1/2}'(\xi)]^2 d\xi.$$

Можно показать, что асимптотики зависимости этой функции от электронной плотности имеют вид

$$(7) \quad J(x) = \frac{1}{2} [I_{1/2}(x)]^2 \left[1 - \frac{2^{1/2}}{3\pi^{1/2}} I_{1/2}(x) + O(I_{1/2}^2) \right] \quad \text{при } I_{1/2}(x) \rightarrow 0,$$

$$(8) \quad J(x) = \frac{1}{2} [I_{1/2}(x)]^{4/3} - \frac{\pi^2}{18} \ln [I_{1/2}(x)] - \frac{\pi^2}{12} + \frac{1}{2}j + O(I_{1/2}^{-4/3})$$

при $I_{1/2}(x) \rightarrow \infty$,

где значение константы $j=0.95024075$ было вычислено В. С. Роговым. Асимптотика (8) качественно отличается от (3) наличием логарифмического члена.

В [9] для функции (6) была предложена гладкая аппроксимация, аналогичная трехчленной формуле из [6]. Она не учитывает логарифмический член и не передает параметр малости разложения (8), что обуславливает ее невысокую точность и медленное убывание погрешности при $I_{1/2}(x) \rightarrow \infty$. Предложенная в [10] аппроксимация еще менее точна.

Удалось получить заметно лучшую вполне гладкую аппроксимацию, похожую на трехчленные формулы (5), но с введением логарифмического слагаемого:

$$(9) \quad J(x) \approx \frac{1}{2} [I_{1/2}(x)]^2 \{ 1 + a I_{1/2}(x) \ln [b + c I_{1/2}(x)] + [I_{1/2}(x)]^{1/3} \}^{-2/7},$$

$$a = \frac{224\pi^2}{6561} \approx 0.337, \quad b = \exp \left(\frac{2187}{32\pi^2 (2\pi)^{1/2}} \right) \approx 15.84,$$

$$c = \frac{3}{2} \exp \left(\frac{3}{2} - \frac{9j}{\pi^2} \right) \approx 2.826.$$

Значения параметров подобраны так, что при $I_{1/2}(x) \rightarrow 0$ начало разложения точно совпадает с приведенными в (7) членами, а при $I_{1/2}(x) \rightarrow \infty$ отличается от (8) только тем, что отброшенный член есть $O(I_{1/2}^{-1})$. Относительная погрешность этой формулы приведена на фигуре под номером 7, она быстро убывает при $I_{1/2}(x) \rightarrow 0$ или ∞ , а ее максимум равен $\delta_m = 1.33\%$.

Таким образом, применение (9) может повысить точность многих современных квантовомеханических расчетов.

Литература

1. McDougall J., Stoner E. S. The computation of Fermi-Dirac functions.— Philos. Trans. Roy. Soc. London, 1939, v. A237, № 773, p. 67–104.
2. Beer A. C., Chase M. N., Choquard P. F. Extension of McDougall-Stoner tables of Fermi-Dirac functions.— Helv. phys. acta, 1955, v. 28, № 5–6, p. 529–542.
3. Cody W. J., Thacher H. C., Jr. Rational Chebyshev approximation for Fermi-Dirac integrals of orders $-1/2$, $1/2$ and $3/2$.— Math. Comput., 1967, v. 21, № 97, p. 30–40.
4. Rhodes P. Fermi-Dirac functions of integral order.— Proc. Roy. Soc. London, 1950, v. A204, № 1078, p. 396–405.
5. Калиткин Н. Н. О вычислении функций Ферми – Дирака.— Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1968, т. 8, № 1, с. 173–175.
6. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Интерполяционные формулы для функций Ферми – Дирака.— Препринт ИПМатем. АН СССР. М., 1972, № 62; Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1975, т. 15, № 3, с. 768–771.
7. Калиткин Н. Н., Ригус И. В. Гладкие аппроксимации функций Ферми – Дирака.— Препринт ИПМатем. АН СССР. М., 1981, № 72.
8. Калиткин Н. Н. О поправках к статистической модели горячего атома.— Препринт ИПМатем. АН СССР. М., 1968; Квантово-статистическое уравнение состояния.— В кн.: Вопр. физ. низкотемпературной плазмы. Минск: Наука и техн., 1970, с. 102–105.

9. Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Уваров В. Б. Модифицированная модель Хартри — Фока — Слэтера для вещества с заданной температурой и плотностью. — В кн.: Вопр. атомной науки и техн. Сер. Методика и программы. № 4(6). М.: ЦНИИАтоминформ., 1979, с. 16–26.
10. Perrot F. Gradient correction to the statistical electronic free energy at nonzero temperatures: Application to equation-of-state calculations. — Phys. Rev., 1979, v. 20, № 2, p. 586–594.

Поступила в редакцию 3.VIII.1984

УДК 519.6:533.9

КОНЕЧНЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ МЕТОДА СФЕРИЧЕСКИХ ГАРМОНИК С РАЗНЫМИ ПОРЯДКАМИ В ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ПОДОБЛАСТЯХ

КУТОВ В. П., СМЕЛОВ В. В.

(НОВОСИБИРСК)

В ограниченной области $V \subset R_3$, разбитой на конечное число подобластей V_ν , $\nu=1, 2, \dots, \nu_0$, сформулировано корректное понятие решения задач теории переноса излучения в P_N -приближении, когда N принимает разные значения в разных подобластях ($P_{N\nu}$ -приближение в подобласти V_ν). Постулирована одинаковая четность всех номеров N_ν .

1. При решении методом сферических гармоник (P_N -приближение) реальных задач теории переноса излучения в областях с неоднородными физическими характеристиками часто возникает ситуация, когда для достижения заданной точности в отдельных подобластях нужно реализовать P_N -приближение с достаточно большим N , а в других можно обойтись менее высоким номером приближения. Однако стандартный P_N -алгоритм [1]–[4] предполагает единый номер N во всех подобластях. Понижение порядка приближения там, где это возможно, крайне важно с практической точки зрения, так как с ростом N трудоемкость решения задач быстро возрастает.

В [5], [6] предложена формулировка P_N -приближения на случай разных N в разных подобластях. В дальнейшем обобщение P_N -алгоритма на случай разных N будем называть N -обобщением. Основная цель работ [5], [6] — в создании тех или иных вариантов условия сопряжения (сшивки) на границах контактирующих под областей, в которых постулированы разные номера приближений. После того как условия сопряжения сформулированы, строится согласованный с этими условиями и отвечающий поставленной задаче N -обобщенный P_N -алгоритм.

Итак, в упомянутых работах привнесены дополнительные элементы в математический аппарат P_N -приближения.

Таким образом, в [5] и [6] возникает неоднозначность в условиях сопряжения, а потому и неоднозначность решений интересующих нас задач, что ставит исследователя перед проблемой выбора наилучшего варианта условий сопряжения, но из упомянутых работ ответ на этот вопрос получить затруднительно. Добавим, что математические обоснования в [6] весьма непросты и трудоемки.

Цель предлагаемой работы — дать предельно простое и содержательное определение P_N -приближения с разными порядками N в разных подобластях. Некоторым ограничением, как и в [6], является требование одинаковой четности N_ν во всех подобластях V_ν . Здесь N -обобщение не привносит ничего извне в P_N -алгоритм, так что предлагаемое ниже определение N -обобщенного P_N -приближения не требует предварительной формулировки каких-то специальных условий сопряжения, как это делается в [5], [6]. На основе реализованного подхода можно в качестве следствия установить вполне определенные условия сопряжения, которые совпадают с одним из вариантов сопряжения из [6].

2. Сформулируем необходимые сведения, а также известные результаты из [2]–[4], развитием которых и будет излагаемый ниже N -обобщенный P_N -алгоритм.

Содержательное описание ряда фактов теории конечного P_N -приближения дано в [3], [4].