

# Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

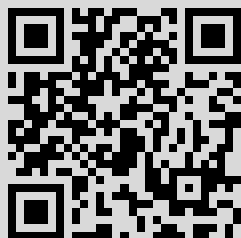
Н. Н. Калиткин, Л. В. Кузьмина, Интерполяционные формулы для функций Ферми–Дирака, *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 1975, том 15, номер 3, 768–771

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., 20:43:04



# НАУЧНЫЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 518:517.564

## ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ ФУНКЦИЙ ФЕРМИ — ДИРАКА

Н. Н. КАЛИТКИН, Л. В. КУЗЬМИНА

(Москва)

Строятся интерполяционные формулы, выражающие одни функции Ферми — Дирака через другие. Во всей допустимой области изменения аргумента формулы обеспечивают относительную точность до  $10^{-6}$ — $10^{-8}$ .

1. Функции Ферми — Дирака, определяемые следующим образом:

$$I_k(x) = \int_0^{\infty} \frac{\eta^k d\eta}{1 + \exp(\eta - x)}, \quad k > -1,$$

возникают в задачах квантовой механики при изучении системы фермионов (например, электронов в атоме, металле, плазме) при усреднении различных степеней импульса по распределению Ферми — Дирака. В этих задачах индекс принимает целые и полуцелые значения. Используя соотношения

$$I_k'(x) = k I_{k-1}(x),$$

можно доопределить функции Ферми — Дирака для всех нецелых  $k < -1$ . Свойства функций Ферми — Дирака и подробные таблицы для наиболее употребительных функций приведены в работах [1-5].

В задачах квантово-статистической модели атома требуются не только эти, но и другие функции, различные их комбинации, более сложные выражения:

$$(1) \quad I_{1/2}(x),$$

$$(2) \quad I_{3/2}(x),$$

$$(3) \quad x = \ln \left( \frac{4}{3\pi^{1/2}} y^2 \frac{1 + a_1 y^2 + a_2 y^4 + a_3 y^6 + a_4 y^8 + a_5 y^{10}}{1 + b_1 y^2} \right),$$

$$(4) \quad \frac{I_{1/2}'(x)}{I_{1/2}''(x)},$$

$$(5) \quad \frac{[I_{1/2}''(x)]^{1/2}}{[I_{1/2}'(x)]^2},$$

$$(6) \quad \frac{[I_{1/2}'(x)]^2}{[I_{1/2}''(x)]^{1/2}},$$

$$(7) \quad \left[ \frac{I_{1/2}'(x)}{I_{1/2}''(x)} \right]^{1/2},$$

$$(8) \quad J(x) = \int_{-\infty}^x [I_{1/2}'(\eta)]^2 d\eta,$$

$$(9) \quad J_1(x) = \int_{-\infty}^x [I_{1/2}''(\eta)]^{1/2} d\eta.$$

Затабулированы лишь немногие из них. Кроме того таблицы неудобны для численного решения задач на ЭВМ. Поэтому желательно иметь экономный алгоритм вычисления функций.

2. В некоторых случаях особенно удобны выражения требуемых функций через функцию (1), непосредственно связанную с электронной плотностью:

$$\rho(r) = \frac{\gamma^2}{\pi^2} T^{3/2} I_{1/2}(x(r)).$$

Нам требуется аппроксимировать функции на бесконечном интервале  $-\infty < x < +\infty$ . Вдали от особых точек большинство функций можно разложить в полином. Вблизи особых точек или на бесконечном интервале нужно искать не полиномиальное разложение.

Функции, которые мы будем рассматривать, вблизи особых точек имеют разложения следующего вида:

$$f \approx \alpha e^{ix} \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k e^{kx}, \quad x \rightarrow -\infty,$$

$$f \approx \beta x^n \sum_{k=0}^{\infty} \beta_k x^{-8k/3}, \quad x \rightarrow \infty.$$

Если в качестве аргумента взять  $y = [3/2 I_{1/2}(x)]^{1/2}$ , то асимптотики будут выглядеть так:

$$(10a) \quad f \sim \alpha y^k (1 + \alpha_1 y^2 + \dots), \quad \text{при } x \rightarrow -\infty, y \rightarrow 0;$$

$$(10b) \quad f \sim \beta y^{k/3} (1 + \beta_1 y^{-8/3} + \dots) \quad \text{при } x \rightarrow \infty, y \rightarrow \infty.$$

Можно искать аппроксимацию как дробно-рациональную функцию следующего вида:

$$z = \sum_{l=0}^m \alpha_l y^{\gamma_l} \left( \sum_{l=0}^n \beta_l y^{\gamma_l} \right)^{-1}.$$

При этом исследование асимптотик налагает дополнительные ограничения на пределы суммирования в числителе и знаменателе и на отношения главных (т. е. либо старших, либо младших) коэффициентов сумм.

Такая аппроксимирующая функция не может удовлетворить сразу обоим асимптотикам, т. е. придется разбивать интервал  $-\infty < x < \infty$  минимум на два и в каждом подбирать свои наилучшие параметры. Кроме того, поскольку структуры аппроксимирующей и исходной функций не вполне совпадают, для хорошей точности требуется довольно много свободных параметров. Например, в [5] для нахождения аппроксимационной формулы (2) необходимо было разбивать область определения на три интервала, а для получения точности  $\sim 10^{-8}$  брать до 10 варьируемых коэффициентов в каждом интервале.

Поэтому, учитывая приведенный пример, будем требовать, чтобы аппроксимирующая функция в интервале аппроксимации имела разложение, близкое к исходной функции, а вне этого интервала имела бы правильное асимптотическое поведение. Такими являются, например, следующие функции:

$$(11a) \quad z = a_0 y^k \left( 1 + \sum_{p=1}^m a_p y^{2p} \right)^{\nu} \left( 1 + \sum_{p=1}^n b_p y^{2p} \right)^{-\nu}, \quad 0 \leq y < \bar{y},$$

$$(11b) \quad z = \alpha_0 y^l \left( \sum_{p=0}^m \alpha_{p+1} y^{8p/3} \right)^{\mu} \left( \sum_{p=0}^n \beta_{p+1} y^{8p/3} \right)^{-\mu}, \quad \bar{y} \leq y < \infty.$$

Таблица 1

Функ- ция	$a_0$	$k$	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$a_4$
(2)	1	2	0.50625059+0	0.93656560-1	0.74482877-2	0.21519676-3
(4)	2/3	2	0.12159475+0	0.49155758-2		
(5)	$\sqrt{2}/\sqrt{3}$	1	0.21224834+1	0.82099570+0	0.75814482-1	
(6)	$2\sqrt{2}/3\sqrt{3}$	3	0.10527238+0	0.65348667-2		
(7)	1	0	0.41869012+2	0.35723113+2	0.10230906+2	
(8)	2/9	4	0.30565347+0	0.18557766-1		
(9)	$2\sqrt{2}/\sqrt{3}$	1	0.12266054+0	-0.57855355-1	-0.27446412-2	

Таблица 2

Функ- ция	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$a_4$	$a_5$
(3)	0.23960888+0	0.25551970-1	0.16001700-2	0.62234299-4	0.19780713-5

Таблица 3

Функ- ция	$\bar{y}$	$\Phi_{\text{макс}}$	$b_1$	$b_2$	$b_3$	$b_4$
(2)	3.75	$3 \cdot 10^{-8}$	0.10730909+0	0.33951152-2		
(4)	3.52	$3 \cdot 10^{-7}$	0.91947157+0	0.29736031+0	0.38095321-1	0.14335481-2
(5)	3.33	$3 \cdot 10^{-6}$	0.17236824+1	0.12298369+0	0.15638204-1	
(6)	3.60	$2 \cdot 10^{-6}$	0.50426376+0	0.74910583-1	0.63190618-2	0.38103053-3
(7)	3.52	$7 \cdot 10^{-6}$	0.41073189+2	0.27484776+1	0.37645845+0	
(8)	6.82	$3 \cdot 10^{-6}$	0.83750130+0	0.25541452+0	0.33350389-1	0.16203847-2
(9)	3.02	$6 \cdot 10^{-7}$	0.25565924+0	-0.49086260-1	-0.10565505-1	
(3)	3.02	$2 \cdot 10^{-7}$	-0.26354443-1			

Таблица 4

Функ- ция	$a_0$	$k$	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$a_4$
(2)	2/5	2	0.58432930+5	0.21851397+5	0.18917921+4	0.57806497+2
(4)	1	2	0.11424270+4	-0.86438821+1		
(5)	$\sqrt{2}$	1	-0.60370205+3	0.11593822+4	0.77986304+1	
(6)	$\sqrt{2}$	3	0.16998461+4	-0.55280085+1		
(7)	$\sqrt{2}$	0	-0.53567595+4	0.12572393+4	-0.37259280+2	
(8)	$\sqrt{2}$	4	0.71234954+7	0.12418053+5		
(9)	1/2	1	-0.14531154+4	0.52161098+3	0.65956384+1	
(3)	$2\sqrt{2}/3$	0	0.72771980+3	-0.11754360+4	0.32688108+3	-0.22333565+1
	1					

Таблица 5

Функ- ция	$\bar{y}$	$\Phi_{\text{макс}}$	$\beta_1$	$\beta_2$	$\beta_3$	$\beta_4$
(2)	3.75	$3 \cdot 10^{-8}$	0.11348583+4	0.41356686+2		
(4)	3.52	$3 \cdot 10^{-7}$	0.21793023+5	0.40308111+4	0.11313165+4	-0.53518459+1
(5)	3.33	$3 \cdot 10^{-6}$	0.11914686+5	0.12573112+4	0.14403693+2	
(6)	3.60	$2 \cdot 10^{-6}$	0.18311342+6	0.20011738+5	0.17382306+4	0.43573326+1
(7)	3.52	$7 \cdot 10^{-6}$	0.11315848+4	-0.32377772+2	0.10000444+1	
(8)	6.82	$3 \cdot 10^{-6}$	-0.75010872+9	0.14486184+9	0.74861861+7	0.12453952+5
(9)	3.02	$6 \cdot 10^{-7}$	0.13113651+4	0.56602247+3	0.10547260+2	
(3)	3.02	$2 \cdot 10^{-7}$	0.33069903+3	0.10575554+1		

Особенно удобными оказались  $\nu=1/3$  и  $\mu=1/4$ . Главные коэффициенты и пределы суммирования определяются с помощью разложений (10).

Из (10а), как правило, находятся  $a_0$ ,  $k$  и  $l$ , из (10б) определяются  $\alpha_0$  и  $(m-n)$ . Например, для (2) надо положить

$$a_0=1, \quad k=2, \quad l=2, \quad \alpha_0=2/5, \quad (m-n)=2.$$

Сделаем любопытное замечание: если для (2) положить  $n=0$  и выбрать соответствующим образом  $a_0$  и  $a_2$  в (11а), то формула будет одновременно передавать главные члены разложений (10) и удовлетворительно аппроксимировать исходную функцию во всей области определения. При  $a_1=0.481$ , таким образом, приходим к формуле

$$I_{3/2} \approx \frac{3}{2} I_{1/2} \left[ 1 + 0.481 I_{1/2} + \frac{18}{125} (I_{1/2})^2 \right]^{1/2},$$

которая имеет погрешность не выше 2% при любых значениях аргумента. Благодаря своей простоте эта формула удобна для физических оценок.

3. Учитывая характер дальнейшего использования аппроксимационных формул, целесообразно принять следующий критерий наилучшего приближения: функция заданного класса  $z(x, a_0, a_1, \dots, a_n)$  является наилучшим приближением к  $F(x)$ , если параметры  $a_0, a_1, \dots, a_n$  выбраны так, что  $\Phi = \max |z/F - 1|$  минимален. Иными словами, наша цель — получить формулы с малой относительной погрешностью.

Очевидно, параметрами формул (11) являются не только коэффициенты  $a, b, \alpha$  и  $\beta$ , но и величина  $\bar{y}$ . Пределы суммирования не следует рассматривать как свободные параметры, так как они определяют число коэффициентов и тем самым — класс аппроксимирующих функций.

Предварительные расчеты показали, что прибавление каждой лишней пары свободных коэффициентов увеличивает точность формул приблизительно в 10 раз (из вида формул следует, что число коэффициентов может меняться только на четную величину). Хорошая точность обеспечивается примерно шестью свободными коэффициентами. Это число и было выбрано для дальнейших расчетов.

Коэффициенты находились итерационным процессом. Теоретически его сходимость доказать не удалось, но практически процесс всегда сходиллся, хотя довольно медленно. Мы не описываем этот процесс, так как он не представляет самостоятельного математического интереса.

Конкретные коэффициенты формул, а также их точность приведены в табл. 1–5 (табл. 1, 3 — для (11а) с  $\nu=1/3$ , табл. 2 — для (3), табл. 4, 5 — для (11б) с  $\mu=1/4$ ).

Поступила в редакцию 29.04.1974

#### Цитированная литература

1. J. McDougall, E. S. Stoner. The computation of Fermi-Dirac functions. Philos. Trans. Roy. Soc. London, 1939, A237, 67–104.
2. P. Rhodes. Fermi-Dirac functions of integral order. Proc. Roy. Soc., 1950, A204, № 1078, 396–405.
3. A. C. Beer, M. N. Chase, P. F. Choquard. Extension of McDougall-Stoner tables of the Fermi-Dirac functions. Helv. phys. acta, 1955, 28, 529–542.
4. R. Latter. Temperature behavior of the Thomas-Fermi statistical model for atoms. Phys. Rev., 1955, 99, 1854–1870.
5. W. J. Cody, H. C. Thacher, jr. Rational Chebyshev approximation for Fermi-Dirac integrals of orders  $-1/2$ ,  $1/2$  and  $3/2$ . Math. Comput., 1967, 21, № 97, 30–40.