

Общероссийский математический портал

Р. В. Голованов, К. И. Луцкий, Вычисление интегральной функции Ферми–Дирака, *Матем. моделирование*, 2012, том 24, номер 2, 129–138

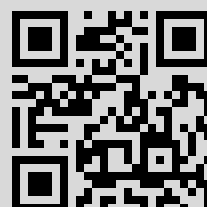
Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 89.175.96.54

3 июня 2016 г., 16:36:34



**ВЫЧИСЛЕНИЕ ИНТЕГРАЛЬНОЙ ФУНКЦИИ ФЕРМИ-ДИРАКА**© 2012 г. *Р.В. Голованов, К.И. Луцкий\**

Московский институт электронной техники, Зеленоград; golovanovrv@gmail.com

\* Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

konstantin.lutskiy@gmail.com

Работа поддержана грантом РФФИ №11-01-00102.

Функции Ферми-Дирака играют важную роль во многих областях физики. Проблема их вычислений изучается давно. В задачах физики высоких энергий требуется также вычислять производимые от них специальные функции. Предложен численный метод, позволяющий с высокой точностью вычислять одну такую функцию, выражающую обменную поправку к энергии электрона при произвольной температуре.

Ключевые слова: функция Ферми-Дирака, высокая точность.

**COMPUTATION OF THE INTEGRAL FERMI-DIRAC FUNCTION***R.V. Golovanov, K.I. Luzkii\**

National Research University of Electronic Technology, Zelenograd, Moscow

\* Keldysh Institute of Applied Mathematics, Moscow

The Fermi-Dirac functions appear in many areas of physics. The problem of their computation has been studied for a long time. In high energy physics it is also required to compute more complex special functions that use Fermi-Dirac functions. A numerical method is suggested to allow precise computation of one of such functions which is used to calculate the exchange correction to electron energy for arbitrary temperature.

Key words: Fermi-Dirac function, high-precision.

**Введение**

Важную роль в физике экстремального состояния вещества играют специальные функции Ферми-Дирака (ФД) [1]. Они определяются следующим образом:

$$F_k(x) = \frac{1}{\Gamma(k+1)} \int_0^\infty \frac{y^k dy}{e^{y-x} + 1}. \quad (1)$$

Здесь  $\Gamma(x)$  – гамма-функция Эйлера. В физических приложениях функции ФД требуются с целыми и полуцелыми индексами  $k$ . В уравнениях состояния требуются целые индексы, а в задачах переноса энергии – полуцелые. В ряде теоретических моделей используются различные комбинации этих функций.

При вычислении обменной поправки к энергии взаимодействия электронов в квазиклассическом приближении возникает одна нетривиальная комбинация [2]. Это интегральная функция ФД:

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

Она является обобщением поправки Слэтера для холодного атома.

В [3] производится расчёт термодинамики модели Томаса-Ферми с квантовыми и обменными поправками. Там же предложен следующий способ вычисления функции (2) на сетке. При задании начального значения  $J(x_0)$  остальные значения в узлах  $J(x_i)$  получаются рекуррентно:

$$J(x_0) \equiv J(-8) = \frac{\pi}{8} e^{-16} \left( 1 - \frac{2\sqrt{3}}{3} e^{-8} \right), \quad J(x_{n+1}) = J(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} [F'_{1/2}(\xi)]^2 d\xi. \quad (3)$$

Последний интеграл в (3) берётся по формуле трапеций с применением сгущения сеток и приемом Рунге-Ричардсона. Окончательно

$$\begin{aligned} J(x_{n+1}) = J(x_n) + \frac{h}{22680} \bigg\{ & 217 \cdot F_{-1/2}^2(x_n) + 1024 \cdot F_{-1/2}^2(x_n + \frac{h}{8}) + 352 \cdot F_{-1/2}^2(x_n + \frac{h}{4}) + \\ & + 1024 \cdot F_{-1/2}^2(x_n + \frac{3h}{8}) + 436 \cdot F_{-1/2}^2(x_n + \frac{h}{2}) + 1024 \cdot F_{-1/2}^2(x_n + \frac{5h}{8}) + \\ & + 352 \cdot F_{-1/2}^2(x_n + \frac{3h}{4}) + 1024 \cdot F_{-1/2}^2(x_n + \frac{7h}{8}) + 217 \cdot F_{-1/2}^2(x_n + h) \bigg\}. \end{aligned} \quad (4)$$

При этом относительная погрешность термодинамических функций модели [3], использующих формулу (4), не превышает  $10^{-6}$ . Это не удовлетворяет современным требованиям, предъявляемым к термодинамическим таблицам, и особенно влияет на вычисление таких характеристик, как энтропии и ударные адиабаты.

В данной работе предложен новый численный метод, позволяющий вычислить эту функцию с относительной погрешностью не хуже  $10^{-12}$ .

### Функция Ферми-Дирака

При расчёте  $J(x)$ , основная трудность связана с точным вычислением функции  $F'_{1/2}(x)$ . В современных работах предлагаются методы, обеспечивающие точность до  $10^{-14}$ . Существует рекуррентное соотношение [4]:

$$F'_k(x) = k \cdot F'_{k-1}(x), \quad k > -1. \quad (5)$$

Тогда из (2) и (5) следует

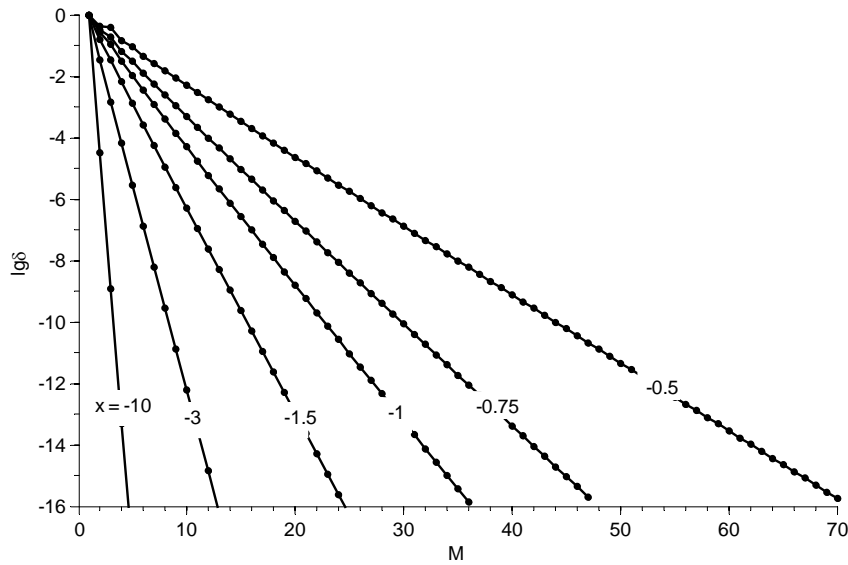
$$J(x) = \frac{1}{4} \int_{-\infty}^x [F_{-1/2}(\xi)]^2 d\xi. \quad (6)$$

### Асимптотические приближения

Для функций  $F_k(x)$ ,  $x < 0$  существует асимптотическое приближение рядом, предложенное в [5]:

$$F_k(x) = \sum_{i=1}^{\infty} (-1)^{i-1} \frac{e^{ix}}{i^{k+1}}, \quad x < 0, \quad k > -1. \quad (7)$$

Ряд является истинно сходящимся. В [7, 9] при  $x \leq -5$  использование пяти первых членов суммы обеспечивает точность  $10^{-12}$ . На рис.1 показана зависимость скорости сходимости ряда от  $x$ . Для  $x > -1$  сходимость ряда заметно ухудшается (например, для  $x = -10^{-5}$  требуется уже более  $10^3$  членов ряда). Поэтому на практике [6, 8] ряд (7) используют только для  $x \leq -1$ .



**Рис.1.** Зависимость относительной погрешности асимптотики (7) от числа членов  $M$  для  $F_{-1/2}(x)$ .

Для случая  $x > 0$ ,  $k > -1$  предложен следующий асимптотически сходящийся ряд [7]:

$$F_k(x) = \frac{1}{\Gamma(k+1)} \frac{x^{k+1}}{k+1} \left[ 1 + \sum_{v=1}^{\infty} 2\tau_{2v} \left( \prod_{n=k-2v+2}^{k+1} n \right) x^{-2v} \right]. \quad (8)$$

Здесь

$$\tau_0 = \frac{1}{2}, \quad \tau_n = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(-1)^{p+1}}{p^n} = (1 - 2^{1-n})\zeta(n), \quad (9)$$

где  $\zeta(n)$  есть дзета-функция Римана. Скорость сходимости (8) показана на рис.2. Видно, что точность в 14 знаков достигается для  $x \geq 30$ .

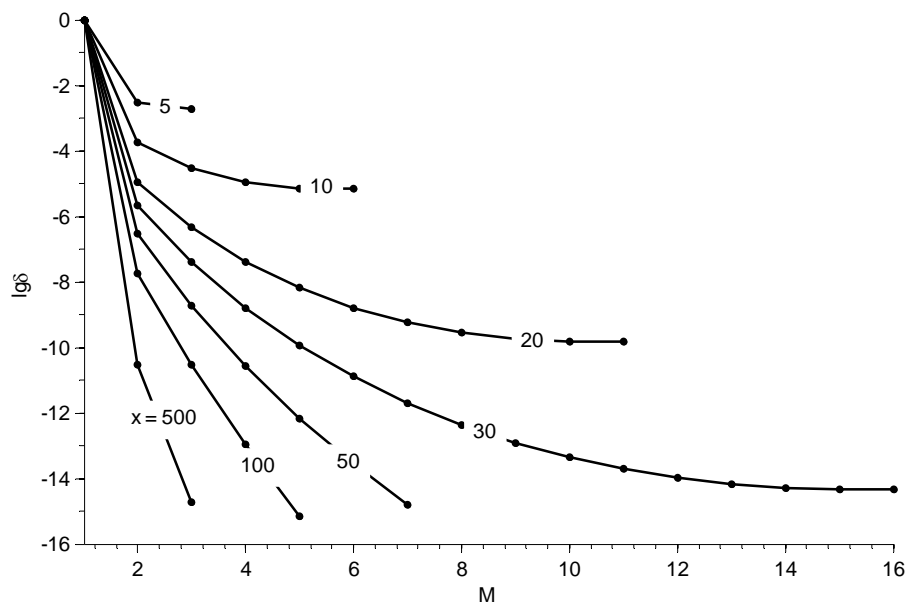


Рис.2. Зависимость относительной погрешности асимптотики (8) от числа членов  $M$  для  $F_{-1/2}(x)$ .

### Аппроксимация

На оставшемся отрезке  $x \in [-1; 30]$  ранее известные способы дают невысокую относительную точность  $10^{-6}$ . Распространенным методом является использование полиномов Чебышева первого рода [11]. Такие аппроксимации с высокой точностью (до  $10^{-14}$ ) были построены в библиотеке GSL [10]. Там отрезок  $x \in [-1; 30]$  разбивается на 4 отрезка:

$$x \in [-1; 1] \cup x \in [1; 4] \cup x \in [4; 10] \cup x \in [10; 30]. \quad (10)$$

На каждом из отрезков используются свои разложения по многочленам Чебышева  $P_n(x)$ :

$$P_1(x), \quad x \in [-1; 1], \quad (11)$$

$$P_2(t), \quad t = \frac{2}{3}(x-1)-1, \quad x \in [1; 4], \quad (12)$$

$$P_3(t), \quad t = \frac{1}{3}(x-4)-1, \quad x \in [4; 10], \quad (13)$$

$$\sqrt{x} \cdot P_4(t), \quad t = 0.1x-2, \quad x \in [10; 30]. \quad (14)$$

Коэффициенты этих разложений приведены в табл.1. В результате для  $F_{-1/2}(x)$  имеем систему из уравнений: (7)–(8) и (11)–(14), которые обеспечивают точность до 14 знаков.

**Таблица 1.** Коэффициенты многочленов Чебышева первого рода для аппроксимации функции  $F_{-1/2}(x)$  на интервале  $x \in [-1; 30]$ .

	$x \in [-1; 1]$	$x \in [1; 4]$
$c_k$	1.2663290042859741974, 0.3697876251911153071, 0.0278131011214405055, -0.0033332848565672007, -0.0004438108265412038, 0.0000616495177243839, 8.7589611449897e-6, -1.2622936986172e-6, -1.837464037221e-7, 2.69495091400e-8, 3.9760866257e-9, -5.894468795e-10, -8.77321638e-11, 1.31016571e-11, 1.9621619e-12, -2.945887e-13, -4.43234e-14, 6.6816e-15, 1.0084e-15, -1.561e-16	3.270796131942071484, 0.5809004935853417887, -0.0299313438794694987, -0.0013287935412612198, 0.0009910221228704198, -0.0001690954939688554, 6.5955849946915e-6, 3.5953966033618e-6, -9.430672023181e-7, 8.75773958291e-8, 1.06247652607e-8, -4.9587006215e-9, 7.160432795e-10, 4.5072219e-12, -2.3695425e-11, 4.9122208e-12, -2.905277e-13, -9.59291e-14, 3.00028e-14, -3.4970e-15
	$x \in [4; 10]$	$x \in [10; 30]$
$c_k$	5.828283273430595507, 0.677521118293264655, -0.043946248736481554, 0.005825595781828244, -0.000864858907380668, 0.000110017890076539, -6.973305225404e-6, -1.716267414672e-6, 8.59811582041e-7, -2.33066786976e-7, 4.8503191159e-8, -8.130620247e-9, 1.021068250e-9, -5.3188423e-11, -1.9430559e-11, 8.750506e-12, -2.324897e-12, 4.83102e-13,	2.2530744202862438709, 0.0018745152720114692, -0.0007550198497498903, 0.0002759818676644382, -0.0000959406283465913, 0.0000324056855537065, -0.0000107462396145761, 3.5126865219224e-6, -1.1313072730092e-6, 3.577454162766e-7, -1.104926666238e-7, 3.31304165692e-8, -9.5837381008e-9, 2.6575790141e-9, -7.015201447e-10, 1.747111336e-10, -4.04909605e-11, 8.5104999e-12,

Таблица 1. (продолжение)

	$x \in [4; 10]$	$x \in [10; 30]$
$c_k$	$-8.1207\text{e-}14,$ $1.0132\text{e-}14,$ $-4.64\text{e-}16,$ $-2.24\text{e-}16,$ $9.7\text{e-}17,$ $-2.6\text{e-}17,$ $5.\text{e-}18$	$-1.5261885\text{e-}12,$ $1.876851\text{e-}13,$ $1.00574\text{e-}14,$ $-1.82002\text{e-}14,$ $8.6634\text{e-}15,$ $-3.2058\text{e-}15,$ $1.0572\text{e-}15,$ $-3.259\text{e-}16,$ $9.60\text{e-}17,$ $-2.74\text{e-}17,$ $7.6\text{e-}18,$ $-1.9\text{e-}18$

### Прецизионные вычисления интегральной функции

**Возведение в квадрат.** Для вычисления (6) необходимо знать аналитическое приближение для функции  $[F_{-1/2}(x)]^2$ . Явные аппроксимации  $F_{-1/2}(x)$  приведены выше. Остается возвести их в квадрат. Для этой операции используется стандартный метод перемножения двух рядов. В результате для ряда (7) получим следующую левую асимптотику:

$$[F_{-1/2}(x)]^2 = e^x \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^{i+1} e^{ix} b_i, \quad (15)$$

где

$$b_i = \sum_{k=0}^i [(i+1-k)(k+1)]^{-1/2}. \quad (16)$$

Абсолютная сходимость этого ряда следует из абсолютной сходимости (7). Аналогично для (8) будем иметь выражение:

$$[F_{-1/2}(x)]^2 = 4x \sum_{i=0}^{\infty} x^{-2i} d_i, \quad (17)$$

где

$$d_i = 4 \sum_{j=0}^i \left( \left( \prod_{k=3/2-2j}^{1/2} k \right) \left( \prod_{k=3/2-2(i-j)}^{1/2} k \right) (1-2^{-2j+1})(1-2^{-2(i-j)+1}) \zeta(2j) \zeta(2(i-j)) \right). \quad (18)$$

Поскольку исходный ряд (8) имеет асимптотическую сходимость, полученный ряд также будет иметь асимптотическую сходимость. Количественная зависимость точности от

числа членов ряда после возведения в квадрат может отличаться от исходных значений. Отметим, что в результате возведения ряда в квадрат может наблюдаться эффект ухудшения сходимости. Этот вопрос будет исследован далее.

На промежуточном отрезке  $x \in [-1; 30]$ , где функция ФД представлена полиномами, эти полиномы просто были возведены в квадрат. При этом относительная погрешность в норме  $C$  могла возрасти не более чем в 2 раза.

**Интегрирование.** Аппроксимация для интегральной функции ФД получается точным интегрированием приведенных выше аппроксимаций. С учетом того что

$$J(-\infty) = 0, \quad (19)$$

для  $x \leq -1$  получим

$$J(x) = \int_{-\infty}^x [F_{-1/2}(\xi)]^2 d\xi = e^{2x} \left[ \frac{b_0}{2} - e^x \frac{b_1}{3} + e^{2x} \frac{b_2}{4} + \dots \right], \quad (20)$$

где  $b_i$  определяется из (16). Ряд (20) позволяет вычислить  $J(-1)$ . Правее этой точки интегрирование даёт

$$J(x) = J(-1) + \frac{1}{2} \int_{-1}^x [F_{-1/2}(x)]^2 dx. \quad (21)$$

Из него можно получить значение на правом конце очередного отрезка  $x \in [-1; 1]$ :

$$J(x) = J(-1) + \int_{-1}^x P_1^2(t) dt, \quad x \in [-1; 1]. \quad (22)$$

Аналогичным образом находится аналитическое представление  $J(x)$  на оставшихся отрезках:

$$J(x) = J(1) + \frac{3}{2} \int_{-1}^{\xi} P_2^2(t) dt, \quad \xi = \frac{2}{3}(x-1)-1, \quad x \in [1; 4], \quad (23)$$

$$J(x) = J(4) + 3 \int_{-1}^{\xi} P_3^2(t) dt, \quad \xi = \frac{1}{3}(x-4)-1, \quad x \in [4; 10] \quad (24)$$

$$J(x) = J(10) + 100 \int_{-1}^{\xi} t P_4^2(t) dt + 200 \int_{-1}^{\xi} P_4^2(t) dt, \quad \xi = 0.1x - 2, \quad x \in [10; 30]. \quad (25)$$

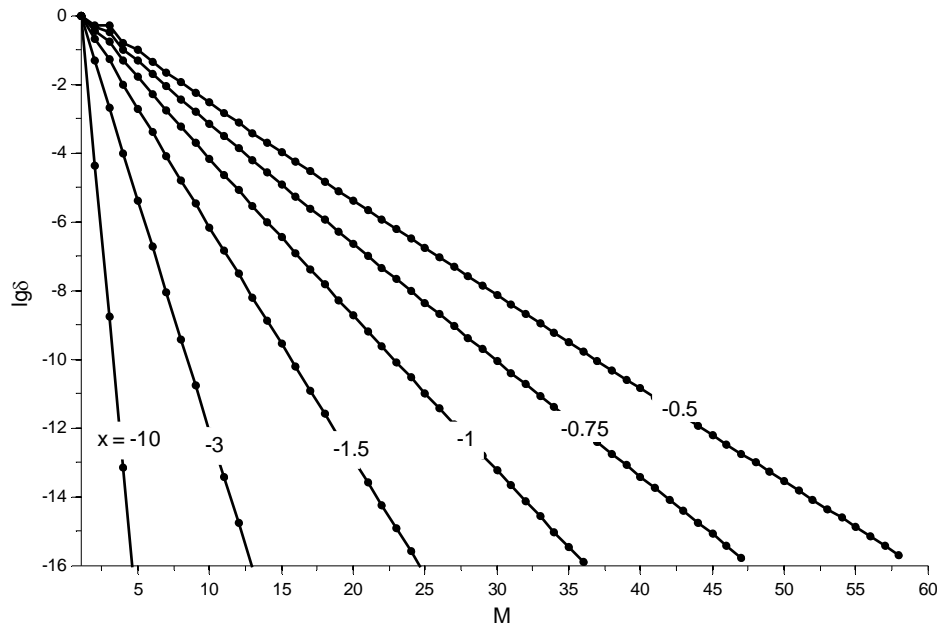
Операция интегрирования многочленов представляет собой явное нахождение первообразной.



Для  $x > 30$  имеем

$$J(x) = J(30) + 4 \int_{30}^x \left( \xi d_0 + \xi^{-1} d_1 + \xi^{-3} d_2 + \dots + \xi^{1-2r} d_r \right) d\xi. \quad (26)$$

В результате интегрирования сходимость асимптотик (20) и (26) могла улучшиться. Результаты анализа сходимости этих асимптотик приведены на рис.3, 4. Видно, что скорость сходимости незначительно выросла. Это является естественным следствием улучшения сходимости рядов при интегрировании.



**Рис.3.** Зависимость относительной погрешности асимптотики (20) от числа членов  $M$  для  $J(x)$ .

### Оценка погрешности

Для оценки погрешности вычисления  $J(x)$  воспользуемся формулой:

$$F_{-1/2}(\xi) = \tilde{F}_{-1/2}(\xi) \pm \Delta(\xi), \quad (27)$$

где  $\Delta(\xi)$  – абсолютная погрешность, а знак « $\sim$ » – значение, полученное численным методом. В результате

$$J(x) = \int_{-\infty}^x \left( \tilde{F}_{-1/2}(\xi) \pm \Delta(\xi) \right)^2 d\xi, \quad (28)$$

откуда следует

$$J(x) = \tilde{J}(x) \pm \underbrace{2 \int_{-\infty}^x \tilde{F}_{-1/2}(\xi) \Delta(\xi) d\xi + \int_{-\infty}^x \Delta^2(\xi) d\xi}_{D(x)}, \quad (29)$$

где  $D(x)$  – оценка абсолютной погрешности вычисления функции  $J(x)$ . Вторым слагаемым в  $D(x)$  можно пренебречь. Для того чтобы рассчитать  $D(x)$ , использовались грубые оценки для  $\Delta(\xi)$  и  $\tilde{F}_{-1/2}(\xi)$ . В результате мажорантной оценки было получено значение относительной точности не хуже 12 знаков.

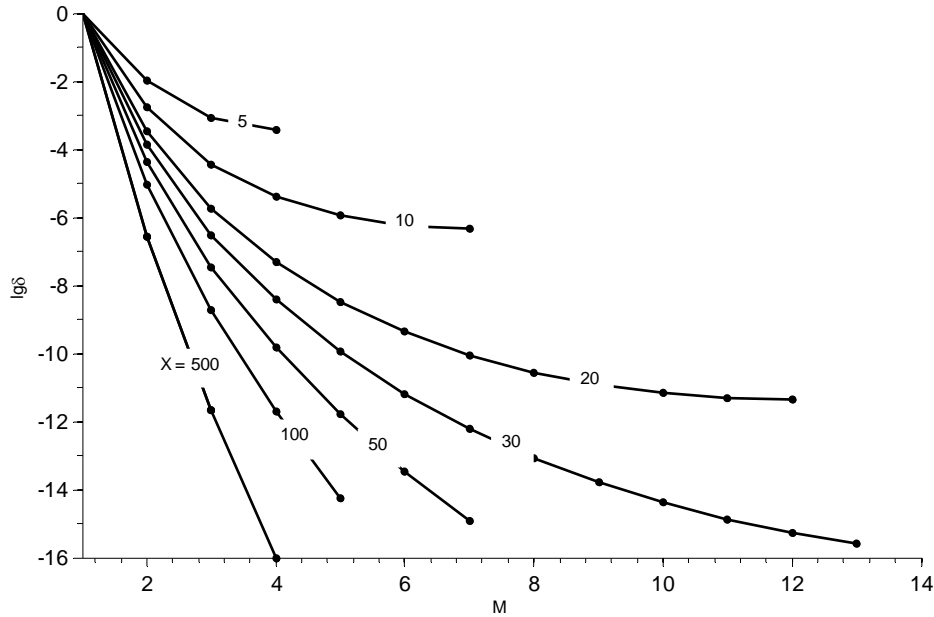


Рис.4. Зависимость относительной погрешности асимптотики (26) от числа  $M$  для  $J(x)$ .

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Raseong Kim, Mark Lundstrom. Notes on Fermi-Dirac Integrals 2nd edition. Network for Computational Nanotechnology Purdue University, June 27, 2008.
2. Н.Н. Калиткин, Л.В. Кузьмина. Математическое моделирование в низкотемпературной плазме. Энциклопедия низкотемпературной плазмы, 2008.
3. Л.В. Кузьмина. Численный расчёт термодинамических функций вещества в статистической модели атома с квантово-обменными поправками. Кандидат. диссерт., ИПМ АН СССР, 1978.
4. Н.Н. Яненко. Асимптотические и приближенные формулы для давления и внутренней энергии вещества в обобщенной модели атома Томаса-Ферми [Работа 1958 года] // Избранные труды. – М.: Наука, 1991, с.317-352.
5. J. McDougall and E.C. Stoner. The Computation of Fermi-Dirac Functions. Phil. Trans. Roy. Soc. London 237, 1938, 67-104.

6. *M. Goano*. Algorithm 745: Computation of the Complete and Incomplete Fermi-Dirac Integral. ACM Trans. Math. Softw. 21, 1995, 221-232
7. *L.D. Cloutman*. Numerical evaluation of the Fermi-Dirac integrals // Astrophysical J. Suppl. Series 1989, v.71, p.677-699.
8. *A.J. Macleod*. Algorithm 779: Fermi-Dirac Functions of Order  $-1/2$ ,  $1/2$ ,  $3/2$ ,  $5/2$ , ACM Trans. Math. Softw. 24, p.1-12.
9. *J.P. Cox and R.T. Giuli*. Principles of Stellar Structures. Volume 2. Applications to Stars, Gordon and Beach, New York, 1968.
10. <http://www.gnu.org/s/gsl> The GNU Scientific Library (GSL) is a numerical library for C and C++ programmers.
11. *W.J. Cody, H.C. Thacher Jr.* Rational Chebyshev Approximations for Fermi-Dirac Integrals of Orders  $-1/2$ ,  $1/2$  and  $3/2$ , U.S. Atomic Energy Commission, 1966.

Поступила в редакцию 20.06.2011.