

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша
Российской академии наук

На правах рукописи

ЛУЦКИЙ КОНСТАНТИН ИГОРЕВИЧ

**ШИРОКОДИАПАЗОННАЯ МОДЕЛЬ ТЕРМОДИНАМИКИ
ГАЗОВОЙ И ЖИДКОЙ ПЛАЗМЫ**

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

по специальности 05.13.18 — математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ

Научный руководитель
член-корреспондент РАН,
доктор физико-математических наук, профессор
Калиткин Николай Николаевич

Москва
2015

Содержание

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Введение | 5 |
| 1.1 | Вещество в экстремальном состоянии | 5 |
| 1.1.1. | Проблема (5) | |
| 1.1.2. | Диаграмма состояний (6) | |
| 1.1.3. | Модели газовой плазмы (7) | |
| 1.1.4. | Модели жидкой плазмы: электронная компонента (9) | |
| 1.1.5. | Модели жидкой плазмы: ядерная компонента (14) | |
| 1.1.6. | Метод лоскутного одеяла (15) | |
| 1.1.7. | Модель Gas-Liquid Plasma (16) | |
| 1.2 | Общая характеристика работы | 17 |
| 1.2.1. | Актуальность темы исследования (17) | |
| 1.2.2. | Степень разработанности темы исследования (17) | |
| 1.2.3. | Цели и задачи (18) | |
| 1.2.4. | Научная новизна (18) | |
| 1.2.5. | Теоретическая и практическая значимость работы (18) | |
| 1.2.6. | Методология и методы исследования (19) | |
| 1.2.7. | Положения, выносимые на защиту (19) | |
| 1.2.8. | Степень достоверности и апробация результатов (20) | |
| 1.2.9. | Структура и объем работы (20) | |
| 1.2.10. | Апробация результатов (20) | |
| 1.2.11. | Публикации (21) | |
| 1.3 | Краткое содержание работы | 22 |
| 1.4 | Физические величины и единицы | 23 |
| 2 | Газовая плазма | 27 |
| 2.1 | Обобщенные уравнения Саха | 27 |
| 2.1.1. | Общий вид уравнений (27) | |
| 2.1.2. | Термодинамические функции (28) | |
| 2.1.3. | Поправки на взаимодействие (28) | |
| 2.2 | Модели заземленной границы | 30 |
| 2.2.1. | Общие выражения (30) | |
| 2.2.2. | Однородный электронный газ (31) | |
| 2.2.3. | Модель Дебая в ячейке (32) | |
| 2.2.4. | Средний заряд (34) | |
| 2.2.5. | Нулевая температура (34) | |
| 2.3 | Апробация | 35 |
| 2.3.1. | Холодная ионизация (35) | |
| 2.3.2. | Неидеальность (37) | |
| 2.3.3. | Применимость (37) | |
| 2.3.4. | О модели SHO (Simple Harmonic Oscillators) (39) | |
| 2.4 | Важнейшие результаты главы | 39 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 3 | Жидкая плазма | 40 |
| 3.1 | Исходные модели | 40 |
| | 3.1.1. Атомные ячейки (40) 3.1.2. Электронная компонента (41) 3.1.3. Ядерная компонента (46) | |
| 3.2 | Функции Ферми-Дирака | 50 |
| | 3.2.1. Свойства (51) 3.2.2. Вычисление специальных функций (52) | |
| 3.3 | Численное решение уравнений модели ТФП | 58 |
| | 3.3.1. Требование к расчетам (58) 3.3.2. Преобразование уравнений (60) 3.3.3. Разностная схема для уравнений ТФП (64) 3.3.4. Метод дополненного вектора (66) 3.3.5. Вычисление поправок (68) 3.3.6. Вычисления с заданной точностью (69) 3.3.7. Энергия связи (70) 3.3.8. Стандартные таблицы (71) | |
| 3.4 | Важнейшие результаты главы | 71 |
| 4 | Широкодиапазонное уравнение состояния | 73 |
| 4.1 | Термодинамически согласованная интерполяция | 73 |
| | 4.1.1. Метод лоскутного одеяла (73) 4.1.2. Сшивание интерполяцией (73) 4.1.3. Вклад излучения (76) 4.1.4. Границы применимости (76) 4.1.5. Параметр неидеальности (78) | |
| 4.2 | Термодинамическая рассогласованность в библиотеке SESAME | 79 |
| 4.3 | Ударные адиабаты | 81 |
| | 4.3.1. Вычисление адиабаты Гюгонио (81) 4.3.2. Главные ударные адиабаты металлов (83) 4.3.3. Сравнение с экспериментом (87) | |
| 4.4 | Важнейшие результаты главы | 90 |
| 5 | Аппроксимация гладких функций | 91 |
| 5.1 | Постановка задачи | 91 |
| 5.2 | Метод двойного периода | 92 |
| | 5.2.1. Метод (92) 5.2.2. Матрица Грама (93) 5.2.3. Сходимость (94) | |
| 5.3 | Обусловленность метода двойного периода | 95 |
| | 5.3.1. Эмпирический критерий (96) 5.3.2. Угловой критерий (97) 5.3.3. Оптимальные параметры (98) 5.3.4. Примеры (100) | |
| 5.4 | Двумерный метод двойного периода | 105 |
| 5.5 | Метод нечетного продолжения | 108 |
| | 5.5.1. Метод (108) 5.5.2. Численные примеры (111) 5.5.3. Обобщения (112) | |
| 5.6 | Аппроксимация термодинамических функций методом двойного периода | 114 |
| | 5.6.1. Нулевые изотермы (114) 5.6.2. Температурные таблицы (115) | |
| 5.7 | Специальная аппроксимация нулевых изотерм | 118 |

| | |
|--|------------|
| 5.7.1. Сравнение с другими методами (120) | |
| 5.8 Важнейшие результаты главы | 121 |
| 6 Программный комплекс ТЕФИС | 123 |
| 6.1 Программный комплекс | 123 |
| 6.1.1. Архитектура комплекса ТЕФИС (123) 6.1.2. Реализация моде- лей (125) | |
| 6.2 Программный пакет Gas-Liquid Plasma | 126 |
| 6.2.1. Библиотека SEq (126) 6.2.2. Библиотека LiP (128) 6.2.3. Библио- тека IEOS (131) 6.2.4. Библиотека FDSF (133) | |
| 7 Заключение | 135 |
| Список иллюстраций | 138 |
| Список таблиц | 140 |
| Список литературы | 141 |

1. Введение

1.1 Вещество в экстремальном состоянии

1.1.1. Проблема. В изучаемых современной физикой процессах реализуются самые разнообразные условия, охватывающие состояния от сильно сжатого вещества (плотность которого на порядки превышает плотность твердого тела) до разреженного газа в температурном диапазоне от нуля до миллионов градусов.

В современной науке и технике большую роль играют конструкции и процессы, в которых возникают высокие температуры или давления. Приведем некоторые примеры. В сильноточных газовых разрядах достигаются температуры в десятки тысяч градусов. При ударе снаряда о броню давление доходит до 1 Мбар (1 бар \approx 1 атм.). При ударе метеорита в оболочку спутника вблизи Земли давление достигает 3 Мбар, а для зонда, посланного к комете Галлея, в разы больше. Давление ударных волн, создаваемых взрывчатыми веществами, доходит до 0.4 Мбар. В центре солнца температура превышает 10 миллионов градусов, а давление составляет 1 Гбар. В лазерных термоядерных мишенях смесь дейтерий-тритий многократно сжимается, одновременно нагреваясь до огромных температур. Плотность вещества возрастает в разы в недрах планет и сильных ударных волнах, а в белых карликах составляет $10^5 - 10^9$ г/см³. Состояния вещества при подобных температурах и давлениях называют экстремальными.

Конструкции и процессы сейчас широко изучаются методами математического моделирования. Для этого движение вещества описывают сложной системой уравнений газодинамики с теплопроводностью (и, зачастую, с электромагнитными полями). В настоящее время хорошо развиты численные методы решения таких задач. При расчетах на суперкомпьютерах они могут использовать подробные разностные сетки и получать высокую точность даже в двумерных и трехмерных постановках. Но коэффициентами этих уравнений являются различные свойства веществ, такие как давление, энергия и энтропия, являющиеся функциями температуры и плотности. Если эти свойства известны с недостаточной точностью, это может обесценить конечные результаты.

Сами свойства веществ редко удается найти из строгих физических теорий. Обыч-

но для них строят более или менее сложные модели, то есть приближенно описывают их некоторыми уравнениями.

Для получения правильных значений свойств веществ необходимо, во-первых, чтобы сама модель имела достаточную физическую точность. Во-вторых, математическая погрешность расчета уравнений модели должна быть существенно меньше, чем физическая погрешность модели. Особенное внимание обратим на согласованность термодинамических функций. Из статистической физики известно, что между ними должны выполняться определенные термодинамические соотношения:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial E(T, V)}{\partial V}\right)_T &= T \left(\frac{\partial P(T, V)}{\partial T}\right)_V - P(T, V), \\ \left(\frac{\partial E(T, V)}{\partial T}\right)_V &= T \left(\frac{\partial S(T, V)}{\partial T}\right)_V \end{aligned} \quad (1.1)$$

и другие. Нередко в теоретико-физических работах для разных термодинамических функций строят разные модели. В этом случае для модельных термодинамических функций соотношения (1.1) могут нарушаться. При использовании таких функций в газодинамических расчетах могут наблюдаться нефизичные эффекты вроде нарушения законов сохранения энергии и другие. Это недопустимо.

1.1.2. Диаграмма состояний. Для неплазменного состояния вещества есть общепринятая классификация. Твердое тело характеризуется кристаллической решеткой, то есть дальним порядком атомов. В жидкости дальнего порядка нет, но есть ближний порядок. В газе отсутствует даже ближний порядок атомов.

Для плазмы возможна аналогичная классификация. Ионным остовам можно приписать определенные радиусы (объемы). Это те расстояния, на которых начинаются экспоненциально убывающие «хвосты» волновых функций связанных электронов. Если объемы ионных остовов много меньше объема атомной ячейки, то положения ионов слабо коррелированы, то есть нет даже ближнего порядка. В этом случае плазму можно считать газовой. Если же объемы ионных остовов сравнимы с объемом атомной ячейки, плазму следует считать жидкой.

Различные состояния вещества условно показаны на рис. 1.1. При достаточно низких температурах и ненулевых давлениях вещество является твердым телом. (Плотность ρ_0 вещества при $P = 0$ называют нормальной.) Твердое вещество является кристаллом, то есть характеризуется строгим (дальним) порядком расположения атомов. Атомы твердого тела колеблются вблизи положений равновесия. При нагревании амплитуда колебаний увеличивается. Это приводит к нарушению дальнего порядка и плавлению. Переход в жидкость является фазовым и показан сплошной линией.

При понижении плотности жидкость испаряется и появляется смесь фаз жидкости и пара. Это тоже истинный фазовый переход, показанный сплошной линией.

При дальнейшем понижении плотности вещество становится газом. В частности, это может быть молекулярный газ. При нагревании такого газа молекулы диссоциируют. При дальнейшем нагревании происходит ионизация и переход в газовую плазму. В таком веществе нет не только дальнего, но и ближнего порядка.

Если при этом повышать плотность, то появляется ближний порядок и жидкая плазма. В закритической области этот переход проходит гладко и не является фазовым. Таким образом, точной границы фаз жидкость-газ там нет. Вместо этого есть коридор плавного перехода, положение которого надо определить.

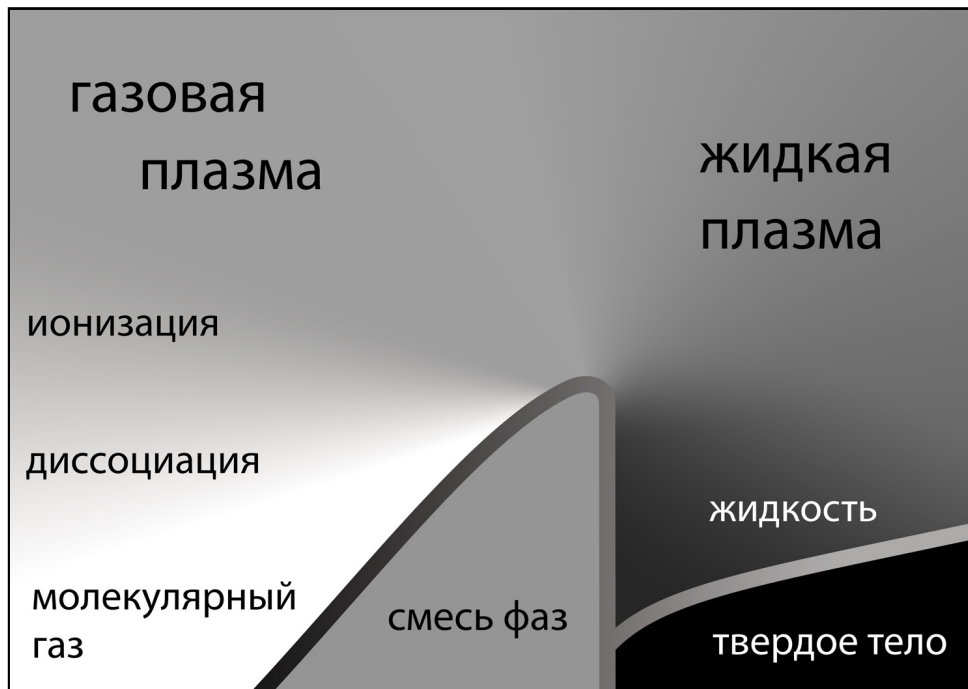


Рис. 1.1. Диаграмма состояний. Сплошные линии — фазовые переходы.

1.1.3. Модели газовой плазмы.

Ионизационное равновесие. Для газовых плотностей Саха (1920) написал уравнение однократной ионизации, точно решавшееся в радикалах. Этот подход был обобщен на многократную ионизацию. Это привело к системе алгебраических уравнений. Система явно не решалась, но Ю. П. Райзер (1963) предложил эффективный приближенный метод ее решения. Надежный компьютерный метод решения этой системы построили Калиткин и Царева (1971). Баско (1982) и Калиткин (1983) разработали современный вид модели ионизационного равновесия с учетом вырождения электронов.

Обобщенные уравнения Саха используют информацию о потенциалах многократной ионизации атомов, собранную в справочниках. Это обеспечивает хорошую физическую точность модели. В ней предусмотрена возможность вычисления статистических сумм каждого иона, хотя на практике для тех ионов, концентрации которых

не слишком малы, эти суммы мало отличаются от статистических весов основных состояний.

В работах Тимана (1954), Ликальтера (1969) и других были предложены различные способы учета взаимодействия заряженных частиц. Это позволило расширить область применимости модели в сторону газов высоких плотностей. Наибольшее продвижение получено в работах Калиткина и Козлитина (2008–2011), основанных на идеях учета плазменного микрополя (модель QUIP).

Модели МДХ, БДХ, ОКП, МКП. Традиционно для описания термодинамических свойств неидеальной плазмы используются модели дебаевского типа. Самой первой такой моделью (и самой первой моделью неидеальности плазмы) была модель Дебая в малом каноническом ансамбле (МДХ) [1]. Затем появилась модель Дебая в большом каноническом ансамбле (БДХ) [2] и модель однокомпонентной плазмы (ОКП) [3]. Позднее было предложено ее обобщение на случай многокомпонентной плазмы (МКП) [4]. Существуют и другие дебаевские модели. Их объединяет то, что они переходят в модель МДХ при малых плотностях. При больших плотностях результаты расчета по этим моделям сильно различаются.

Модель QUIP. Калиткиным и Козлитиним была предложена модель микрополя на основе квазинезависимых частиц (QUIP — Quasi Independent Particles) [5]. Она построена из общих физических соображений, и ее формулы очень просты. Эта модель описывает имеющиеся экспериментальные данные не хуже известных моделей, а энергия поля в ней конечна. Модель применима в огромном диапазоне температур и плотностей, покрывающем все потребности практики.

В области плотной плазмы QUIP дает большую неидеальность, чем БДХ, но меньшую, чем другие модели. Большинство из них (кроме БДХ) предсказывают плазменный фазовый переход, условия возникновения которого отличаются в разных моделях. Например, возникают области отрицательного давления. Сначала отрицательное давление возникает в модели МДХ, затем в ОЭГ, а потом и в МКП. В модели QUIP (как и в БДХ) оно возникнуть не может. Экспериментаторы искали такой плазменный фазовый переход, но не обнаружили.

Кроме того, в моделях МДХ, МКП и БДХ нарушается электронейтральность среды в целом, а в моделях МДХ и МКП существуют области неединственности решения уравнений ионизационного равновесия [4].

Модели МДХ, МКП, ОЭГ противоречат термодинамическим экспериментам. Модель БДХ дает разумные результаты, но, возможно, несколько занижает неидеальность плазмы. Поэтому для расчетов термодинамики плазмы целесообразно использовать лишь модели QUIP и БДХ. Они дают близкие результаты, и термодинамические эксперименты не позволяют сделать выбор между ними.

Однако оптические эксперименты показывают, что модель БДХ неправильно опи-

сывает заселенность уровней, а QUIP — правильно. Поэтому в данной работе для проведения расчетов и построения широкодиапазонного уравнения состояния в области газовой плазмы выбирается микрополевая модель QUIP.

1.1.4. Модели жидкой плазмы: электронная компонента.

Модель Томаса-Ферми. Статистическая модель атома Томаса-Ферми [6, 7] была изначально предложена для нулевой температуры. В 1949 Фейнман, Метрополис и Теллер [8] построили температурную модель Томаса-Ферми. Брэхман [9] в 1951 доказал ее термодинамическую согласованность. В этой модели вещество разбивается на атомные ячейки, которые заменяются сферами того же объема (ячейки Вигнера-Зейтца). Уравнение описывает усредненное поведение электронов в такой ячейке в квазиклассическом приближении. Такое построение в принципе не могло передать оболочечную структуру электронов атома.

Однако модель оказалась сравнительно хорошей. Она давала разумные результаты в области твердотельных плотностей, где других моделей в те годы не было. При использовании модели в газовой области она сглаживала оболочечные эффекты, но количественно отличалась от модели Саха в среднем не более чем в 1.5 раза. Таким образом, модель оказалась широкодиапазонной.

Первые расчеты термодинамики (1955) по этой модели произвел Лэттер [10].

Введение квантовой и обменной поправок. Однако модель ТФ обладала рядом качественных недостатков. Причина в том, что вблизи ядра и на периферии изолированного атома квантовые эффекты настолько существенны, что это обесценивает не только саму модель, но и ее описанные обобщения. Поэтому те физические величины, для которых обсуждаемая область существенна, должны описываться особым образом.

Другой частный недостаток модели, в том, что в ней вещество не может быть конденсированным, так как не учитываются обменные силы, которые в основном определяют конденсацию. Для устранения этого и других недостатков вводились разные поправки: исключение электростатической собственной энергии электронов (Ферми и Амальди [11]), учет обменной энергии (модель Томаса-Ферми-Дирака [12]), поправки Йенсена [13], Вейцзеккера [14] и др. Наиболее удачным оказалось одновременное введение так называемых квантовой и обменной поправок.

Интересны два пути модификации модели ТФ: квантово-статистическая модель (КСМ) и модель Томаса-Ферми с квантовой и обменной поправкой (ТФП).

Формально можно вывести уравнения модели Томаса-Ферми из квантовомеханических уравнений Хартри [15] заменой оператора импульсов $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ на скаляр, что эквивалентно нулевому квазиклассическому приближению. Д. А. Киржниц [16] получил поправку для давления при произвольной температуре. Сами уравнения,

особенно для случая ненулевых температур, гораздо более трудны для численного решения. Для случая нулевой температуры такая задача была численно решена в [17]. Поэтому наряду с КСМ существует другой способ учета квантовой и обменной поправок — так называемая модель Томаса-Ферми с квантовыми и обменными поправками (ТФП).

Она предложена Киржницем [16] (и построена по образу теории возмущений). Уравнения состояния модели ТФП были получены Калиткиным [18, 19]. Теоретически модель ТФП менее совершенна, чем КСМ, но дает почти такие же значения термодинамических величин [20] и, в отличие от КСМ, обладает подобием по Z .

Модель ТФП сильно повысила точность модели ТФ в области низких температур. В частности, в модели появилось холодное несжатое вещество с разумными значениями нормальной плотности. Однако оболочечные эффекты при этом также не учитывались.

Расчеты термодинамики модели с поправками при ненулевой температуре первыми произвели Калиткин и Кузьмина [21].

Зонные модели Хартри-Фока и модификации. Группа Г. М. Гандельмана и Н. А. Дмитриева в 1960-е годы использовала уравнения Хартри-Фока в ячейке Вигнера-Зейтца, но с зонными граничными условиями, являющимися приближением к краевым условиям Блоха [22]. Эта модель была предназначена для описания твердых тел и учитывала оболочечные эффекты. Для обобщения на ненулевые (но не слишком высокие) температуры в нее включались возбужденные состояния атомов. Эта модель была построена целиком из первых принципов, то есть не включала подгоночных параметров.

Для низкотемпературной плазмы использовалась так называемая модель ограниченного атома [23, 24], но она была применима только при малых плотностях.

Модель Хартри-Фока позволила предсказать ряд так называемых электронных фазовых переходов, объясняющихся изменением порядка заполнения электронных оболочек при повышении давления. Некоторые предсказанные фазовые переходы были экспериментально подтверждены на ударных адиабатах при давлениях $P \approx 2-5$ Мбар. Однако успехи этой модели оказались скромнее ожиданий. Не все фазовые переходы подтвердились, а нормальные плотности веществ воспроизводились плохо.

Численное решение таких систем очень трудоемко. Они содержат Z нелинейных интегро-дифференциальных уравнений. Каждое уравнение с краевыми условиями типа ограниченного атома является задачей на собственные значения; краевое условие Блоха превращает ее в серию задач для многих значений квазиимпульса (хотя при численном расчете зон сетку по угловым переменным и квазиимпульсу приходится брать негустую).

Поэтому обычно обменный член или совсем опускают (переходя тем самым к бо-

лее грубой модели Хартри), или заменяют приближенным выражением Слэтера [25]. Изначально этот метод был предложен для случая нулевой температуры.

Обменная энергия всегда мала по сравнению с кинетической или электростатической. Поэтому можно находить ее с меньшей относительной точностью, например, в приближении квазиклассического электронного газа. (Это означает пренебрежение оболочечной структурой, но только в этом второстепенном члене.) При $T = 0$ это приводит к уравнениям Хартри, в которых самосогласованный потенциал одинаков для всех электронов. Ряд работ [26, 27, 28] был направлен на получение простых аппроксимирующих выражений для обменного члена.

На произвольные температуры приближение Слэтера было обобщено группой Никифорова и Уварова [27] и Гуптой [29]. Приближение Слэтера существенно облегчает численное решение задачи. Разные авторы отмечали также, что оно обычно несколько улучшает согласие с экспериментами по сравнению с, казалось бы, более точной моделью ХФ. Однако в описанном виде модель ХФС остается еще очень трудоемкой, ибо при высоких температурах существует огромное число возбужденных конфигураций.

Сильно облегчает расчеты дополнительное приближение среднего атома [27]. В нем принято, что электроны атома находятся не на определенных возбужденных уровнях, а на всевозможных одноэлектронных уровнях, но с вероятностями, равными фермиевским статистическим весам. Делается еще одно упрощение: для высоковозбужденных электронов волновые функции и собственные значения находят в квазиклассическом приближении, что гораздо менее трудоемко. Правда, в модели появляется свободный параметр (что означает отход от первых принципов) — граница квазиклассического спектра. Если выбрать границу высокой, то мало сокращается трудоемкость; если низкой, то при сжатии возникает вероятность перехода из квантовой группы в квазиклассическую. Последнее опасно, ибо может нарушить термодинамическую согласованность или породить нефизические фазовые переходы (см. [30]).

Модель с уравнениями ХФС, приближением среднего атома и квазиклассическим учетом высоковозбужденных электронов называют модифицированной моделью ХФС (МХФС); она комбинируется с зонными граничными условиями в сферической ячейке.

Сейчас это самая детальная из моделей, используемых для расчета горячего сжатого вещества.

Псевдозонная модель. Она фактически является моделью МХФС, в которой вместо зонных граничных условий Блоха ставятся грубо имитирующие их условия. Положение границ и плотность уровней таких полос могут существенно отличаться от настоящих зон; поэтому следовало бы назвать такой спектр псевдозонным. Но

исторически закрепилось название — модель самосогласованного поля (ССП)¹. Первоначальный вариант псевдозонной модели [31] содержал термодинамически несогласованные выражения давления и энергии. Впоследствии модель ССП была согласованно построена методом термодинамического потенциала [32]. Она содержит один свободный параметр — границу квазиклассичности, значение которой заметно влияет на результаты. Этот параметр в расчетах [32] для каждого элемента выбирается индивидуально, чтобы обеспечить наилучшее согласие ударных адиабат с экспериментами, то есть фактически является подгоночным.

Метод функционала плотности (МФП). В описанных выше моделях многоэлектронное уравнение Шредингера приближенно сводилось к системе одноэлектронных. Погрешность таких приближений является корреляционной поправкой, и ее достаточно трудно оценить. Поэтому представляет интерес принципиальная возможность точного упрощения многоэлектронной задачи, основанная на строгой теореме [33]: существует такой функционал плотности $\Phi[\rho]$, которому истинная электронная плотность ρ_e доставляет минимум.

Однако найти точный вид функционала плотности никому не удалось. Даже приближенные функционалы плотности до сих пор фигурировали только в двух статистических моделях: ТФ и КСМ (обе модели построены до появления указанной теоремы). Оболочечные же модели, описанные выше, сводятся к функционалам, но не от электронной плотности, а от одночастичных волновых функций.

Сейчас принята паллиативная методика. Основную трудность метода МФП составляет преобразование кинетического многоэлектронного члена задачи в уравнении Шредингера. Его приближенно заменяют кинетическим членом модели ХФ, а неизвестную разность между точным и приближенным выражениями относят к корреляционной поправке. Тогда вместо уравнения для ρ_e получают систему уравнений типа ХФС для одноэлектронных волновых функций, где в самосогласованный потенциал включают обменный и корреляционный члены. Обменный член берут в форме Слэтера, а для корреляционного используют дополнительные приближения. За этой моделью сохранилось название МФП, хотя по существу она является некоторой модификацией модели ХФС. Вдобавок, на практике в корреляционный потенциал вводят свободные параметры, что превращает модель в полуэмпирическую.

Наибольшее количество работ по МФП выполнено для несжатого кристалла. Уже слэтеровский потенциал позволил хорошо описать нормальное состояние щелочных и щелочноземельных металлов: плотность с точностью 1–4%, структуру электронного спектра и взаимодействие с излучением. Добавление простейших корреляционных поправок распространило модель на простые металлы. Введение спинового взаимодействия позволило рассчитать переходные металлы, бывшие камнем преткновения

¹Все рассмотренные модели этого раздела содержат самосогласованное поле.

в моделях Хартри и ХФС. Сложнее построить потенциал, пригодный для редкоземельных металлов. Следующими по трудности являются проблемы неметаллов и благородных газов.

Отсюда видно, что пока МФП является не единой моделью, а группой моделей, где каждая описывает элементы сходного химического поведения с помощью своего эффективного корреляционного потенциала, в который зачастую включают свободные параметры. Это фактически означает отказ от построения модели из первых принципов, хотя подгонка производится за счет второстепенных членов.

В МФП давно освоены расчеты для реальных несферических кристаллических ячеек. Для этого внутри ячейки выделяют сферу вокруг ядра атома. В пограничной области волновые функции описывают суперпозициями плоских волн, удовлетворяющих условию Блоха на границе ячейки. В центральной сфере граничным условием служит требование гладкого сопряжения с плоскими волнами. Эту процедуру называют методом присоединенных плоских волн (ППВ). Такие расчеты крайне трудоемки. Имеются работы с использованием МФП (чаще всего, в форме модели ХФС в реальной ячейке) для описания холодного сжатого вещества. Эти расчеты предсказывают на кривых холодного сжатия оболочечные эффекты, но очень небольшие. К сожалению, в этих работах опубликованы не все существенные детали; в частности, не указано, как именно подбирались свободные параметры в разных компонентах потенциала. Есть также попытки обобщить МФП на высокие температуры. Но для жидкости или газа неприменимы зонные граничные условия, ибо отсутствует кристаллическая решетка. Обоснованных граничных условий в этом случае не написано. Поэтому такие попытки пока безуспешны.

Квазиклассические оболочечные модели (КОМ). Это направление развито в ряде работ Цинка [34], Шпатаковской [35], Андрияша и Симоненко [36]. В них энергии и волновые функции электронов находились из одноэлектронного радиального уравнения Шредингера на основе квазиклассического приближения. Уширение атомных уровней не учитывалось. Соответствующие вычисления менее трудоемки, чем в более точных квантовомеханических постановках.

Детали этих работ сильно отличаются. Внутриатомный потенциал обычно берут из модели ТФ, но иногда добавляют обменный член или согласовывают с электронной плотностью. Волновые функции находят как по общим формулам квазиклассики, так и в водородоподобном приближении. Иногда в дополнительных приближениях удается найти компактные аналитические выражения электронной плотности. Термодинамические функции получают из независимых допущений и, как правило, несогласованными между собой. Обилие приближений и упрощений делает модели КОМ эклектичными и ненадежными.

Поэтому до сих пор модели КОМ серьезного теоретического значения не имели,

а применять как сравнительно дешевое средство расчета можно только тот вариант, который выдержит тщательный контроль по экспериментам и более надежным моделям. Кроме того, для модели МФП разрабатываются быстрые алгоритмы, что лишает модели КОМ перспективы.

1.1.5. Модели жидкой плазмы: ядерная компонента.

Идеальный газ ядер (ИГЯ). Движение ядер приводит к смещению атомных ячеек как целого и также вносит свой вклад в термодинамические величины. Этот вклад практически аддитивен со вкладом электронов. Есть различные модели, описывающие движения ядер. Первой и простейшей из них была модель ИГЯ, в которой система ядер представляется как идеальный газ. Такое представление действительно применимо для газовых плотностей. Для больших плотностей она имеет правильную асимптотику при очень высоких температурах. Для плотного вещества необходима более точная модель.

Однокомпонентная плазма ядер (ОКП). Эта модель была предложена Копышевым [37, 38] для учета неидеальности ядерной компоненты. В ней используется понятие кратности ионизации z , хотя для сжатого вещества оно является нестрогим. Электроны делятся на свободные и связанные в ионном остове. Размеры остова предполагаются пренебрежимо малыми по сравнению с ячейкой.

Свободные электроны рассматриваются как однородный фон отрицательных зарядов. Ионные остовы на таком фоне называются однокомпонентной плазмой.

У модели ОКП нет правильного предела при $T \rightarrow 0$, что ухудшает ее шансы описать конденсированное вещество. Кроме того, Калиткин показал, что при учете взаимодействия в модели ОКП одна и та же поправка входит в энергию дважды, что неправильно. Тем не менее умеренную неидеальность ядерной компоненты эта модель, по-видимому, описывает. Поэтому ее использование заметно сблизило расчетные ударные адиабаты с экспериментальными по сравнению с моделью ИГЯ.

Модель осциллирующих ядер (ОСЯ). Эта модель была построена для учета свойств конденсированного вещества (Калиткин и Кузьмина [39]). Она также рассматривает точечные ионные остовы заряда z в однородном фоне отрицательных зарядов. При низких температурах ионы колеблются около положений равновесия, а при высоких их движение переходит в свободное.

Модель ОСЯ качественно правильно передает термодинамику с учетом закритической конденсации и квантового вырождения колебаний при низких температурах. Энтропия в этой модели обращается в нуль при $T = 0$.

Между моделями ОКП и ОСЯ существует заметное различие, на которое до сих пор не обращали внимания. К сожалению, расчеты термодинамики по этим моделям при одной и той же электронной модели не проводились; это затрудняет их сравнение

с экспериментами и оценку адекватности. Нам представляется, что модель ОКП более точна при очень высоких температурах, где поправки на неидеальность ядер малы; зато модель ОСЯ правильнее при умеренных и низких температурах, где эти поправки существенны. Поэтому мы отдаем предпочтение модели ОСЯ.

Неточечные ионы (НТИ). Ионные остовы имеют конечные размеры, но нечеткую границу, то есть они похожи на мягкие (сжимаемые) заряженные сферы. Модель неточечных, но несжимаемых сферических ионных остовов в газе свободных электронов была рассмотрена Ашкрофтом и Строудом [40]; она привела к более жесткому ходу расчетных ударных адиабат.

Эта модель была использована Новиковым (1985 г.) для исправления теоретических ударных адиабат, которые в модели МХФС с ИГЯ идут существенно мягче экспериментальных кривых.

Однако модель НТИ представляется искусственной. Во-первых, сближение с экспериментом здесь не является критерием адекватности, ибо оно было априори заложено в расчет. Во-вторых, модель НТИ не улучшает кривой холодного сжатия железа, чрезмерная мягкость которой в модели МХФС сильно сказывается даже на ударной адиабате. В-третьих, внутриатомная электронная плотность гладка, так что ион не имеет четкой границы и, вдобавок, сжимаем. Выбор радиуса иона означает введение свободного параметра, то есть превращение модели в полуэмпирическую.

1.1.6. Метод лоскутного одеяла. Все описанные выше модели рассчитаны на экстремальные состояния, и не могут описать процесс плавления или фазовый переход жидкость-пар. Поэтому для построения глобального уравнения состояния в известной библиотеке SESAME (Лос-Аламос) [41] применялся метод лоскутного одеяла. Строились модели, применимые лишь в отдельных узких областях. Например, для описания процесса испарения строилась модель мягких сфер, использующая некоторый сконструированный потенциал взаимодействия нейтральных атомов между собой. Такие модели обычно содержат некоторое число подгоночных параметров.

Модели выбирались так, чтобы области их применимости в сумме покрывали всю фазовую плоскость, по возможности перекрываясь между собой. По каждой модели проводились расчеты таблиц термодинамических функций. На стыках моделей они сшивались. Проводились интерполяции или другие математические процедуры, обеспечивающие непрерывный и возможно более гладкий переход одной модели в другую.

Итоговая фазовая диаграмма напоминает одеяло, сшитое из лоскутков. Такой пример из библиотеки SESAME приведен на рис. 1.2.

Такой подход может обеспечить неплохую количественную точность. Однако у него есть недостатки, на которые не всегда обращают внимание. Исходные модели

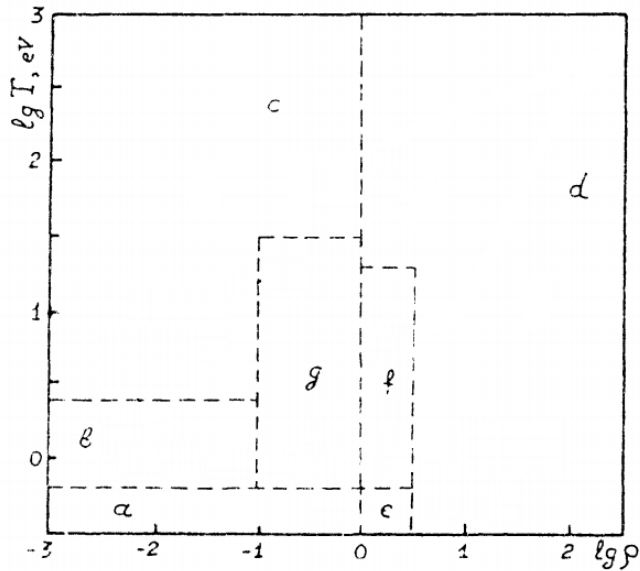


Рис. 1.2. «Лоскутное одеяло» моделей SESAME согласно [42]. Штриховые линии разбивают фазовую плоскость на области разных моделей.

обычно строят так, чтобы они были строго термодинамически согласованы: в каждой модели должны выполняться термодинамические соотношения (1.1). Но процедура сшивания зачастую приводит к тому, что у сшитых (то есть слегка поправленных) моделей термодинамическая согласованность нарушается.

Такое нарушение термодинамической согласованности совсем не безобидно. Когда подобные уравнения состояния вставляют в газодинамические расчеты, эти расчеты могут давать нефизичные эффекты (например, появление «энтропийного следа» при прохождении ударной волны через границу слоистых сред).

1.1.7. Модель Gas-Liquid Plasma. В данной работе предложено строить широкодиапазонное уравнение состояния, справедливое не во всей фазовой плоскости, а лишь для плазменного состояния. Такое уравнение состояния будет неприменимо в области твердого вещества и смеси жидкость-пар. Ориентировочные границы его применимости несколько отступают от линии фазовых переходов (см. рис. 1.1).

Область плазмы хороша тем, что она покрывает большую часть фазовой диаграммы. Эту область условно можно разбить на две части: газовая плазма и жидкая плазма. Газовая плазма хорошо описывается обобщенной моделью Саха, а жидкая плазма — моделью Томаса-Ферми с квантовой и обменной поправками. Поэтому одеяло состоит всего из двух больших кусков, что кардинально упрощает процедуру сшивания.

Для процедуры сшивания в работе предложен метод, обеспечивающий термодинамическую согласованность итогового уравнения состояния. При этом сшивание

происходит не на границе между моделями, а во всей плазменной области. Построенная модель получила название *Gas-Liquid Plasma* (GLP).

Условная граница между моделями расположена совсем не так, как в глобальном уравнении состояния SESAME. Это указывает, что к данным SESAME надо относиться с большой осторожностью.

1.2 Общая характеристика работы

1.2.1. Актуальность темы исследования. Разработка технических конструкций, использующих вещество в экстремальных состояниях, и детальное исследование физических процессов в таких конструкциях являются важной задачей современной науки и техники. Одним из основных инструментов такой работы является математическое моделирование с помощью компьютерных программ радиационной магнитной газодинамики. Физическим наполнением таких программ служат данные о термодинамических и других свойствах веществ в экстремальных состояниях. Математическая точность современных двумерных и даже трехмерных расчетов на суперкомпьютерах нередко достигает 1%. Поэтому математическое моделирование термодинамических свойств веществ в широком диапазоне температур и плотностей, также обеспечивающее физическую точность на уровне 1%, является актуальной проблемой.

1.2.2. Степень разработанности темы исследования. Обзор публикаций и исследованной области дан в п. 1.1.1.

Из него видно, что для области газовой плазмы важнейшей нерешенной проблемой являлось нахождение поправки на взаимодействие заряженных частиц. В данной работе предложена и надежно обоснована модель, дающая такую поправку. Тем самым эту проблему можно считать разрешенной.

Слабым местом современных квантовомеханических моделей является их трудоемкость. В жидкой плазме нерешенным оставалось построение быстрого математического алгоритма, позволяющего проводить оперативные расчеты. В данной работе такой алгоритм был построен, и эту проблему можно также считать завершенной.

Глобальные и широкодиапазонные уравнения состояния сейчас строят методом лоскутного одеяла. При этом не удается обеспечить термодинамическую согласованность получающихся уравнений состояний. В данной работе предложен метод построения уравнения состояния по нескольким моделям. Метод реализован на примере сшивания уравнений состояния газовой и жидкой плазмы. Тем самым принцип построения получен, хотя для конкретных моделей нужно находить и обосновывать свои параметры сшивания.

Нужны новые компьютерные программы обеспечивающие оперативные и точные расчеты для произвольных веществ в широком диапазоне температур и плотностей. Такие программы были написаны в данной работе.

1.2.3. Цели и задачи. Целью данной работы является построение единого широкодиапазонного уравнения состояния, покрывающего область газовой и жидкой плазмы. Расчет такого уравнения состояния должен обеспечивать хорошую физическую точность (1%) и существенно более высокую математическую точность (0.1–0.01%). Расчет полных термодинамических таблиц конкретного вещества должен выполняться оперативно на персональном компьютере за разумное время (на современных портативных компьютерах не превышать нескольких минут).

1.2.4. Научная новизна. В диссертации впервые предложены и обоснованы следующие новые результаты.

Предложено новое краевое условие на границе атомной ячейки (названное условием трех нулей). Из него следует, что поправки на взаимодействие заряженных частиц в газовой плазме оказываются в 2.5 раза меньше, чем приводится во всех статьях и учебниках. Применение новой поправки позволило существенно расширить область применимости модели газовой плазмы в сторону высоких плотностей и низких температур (то есть в область, где ее применение раньше было невозможно).

Построен новый специализированный алгоритм для решения уравнений статистической модели атома, описывающей жидкую плазму. Он многократно превосходит ранее известные алгоритмы по быстродействию и точности. Это позволило составить программы для оперативных расчетов термодинамики произвольных веществ.

Предложен новый метод объединения разных дополняющих друг друга моделей в единое широкодиапазонное уравнение состояния, сохраняющее термодинамическую согласованность во всей области фазовой диаграммы. Ранее не существовало методов объединения моделей, обеспечивающих термодинамическую согласованность.

Развит общематематический метод для аппроксимации непериодических гладких функций. Определены его оптимальные параметры и построено обобщение на функции двух переменных. Метод применен для аппроксимации термодинамических таблиц жидкой плазмы.

1.2.5. Теоретическая и практическая значимость работы. Разработанные в диссертации модели, алгоритмы и программы обеспечивают оперативные расчеты термодинамических свойств как газовой, так и жидкой плазмы. Такое уравнение состояния имеет высокую физическую точность (в частности учитывает влияния оболочечной структуры атома на осцилляции термодинамических кривых) во всей

области экстремальных состояний, за исключением области твердого тела и смеси фаз. Это позволяет создать надежное физическое наполнение газодинамических программ для расчета конструкций. Такие данные должны найти применение во многих ведущих организациях: федеральных ядерных центрах в Сарове и Снежинске, Физическом институте им. П. Н. Лебедева РАН, Институте общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Институте прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, Национальном исследовательском центре «Курчатовский институт», Объединенном институте высоких температур РАН, Московском физико-техническом институте и других.

1.2.6. Методология и методы исследования. При разработке физических моделей использовались традиционные методы теоретической физики. Верификация этих моделей проводилась путем сравнения с экспериментальными данными.

Специализированные алгоритмы строились на базе отдельных известных численных методов (таких, как составление разностных схем, их разрешение методом дополненного вектора, сгущение сеток с уточнением по методу Ричардсона и т. п.). Однако ранее эти методы в данной проблеме не использовались.

При составлении единого комплекса с хорошей автоматизацией и высокой надежностью расчетов потребовалось найти оригинальные подходы для решения ряда частных проблем.

Для составления программного комплекса был использован язык высокого уровня C++ и методы промышленного программирования (тестирование, автоматическое построение, интеграция, система контроля версий). Это обеспечило высокую производительность и надежность комплекса. Для вычислений, не требующих высокой производительности, и для визуализации расчетов использовался комплекс GNU Octave [43, 44] — свободно распространяемая система для математических вычислений, использующая совместимый с MATLAB язык высокого уровня. Для визуализации расчетов и построения графиков дополнительно использовалась библиотека matplotlib [45, 46] на языке программирования Python. Это позволило удобно использовать построенный программный комплекс.

1.2.7. Положения, выносимые на защиту. На защиту выносятся следующие положения:

- Построена и обоснована новая модель взаимодействия заряженных частиц в плазме. Ее включение в обобщенное уравнение ионизационного равновесия позволило далеко расширить область применимости модели газовой плазмы в сторону низких температур и сверхвысоких плотностей и разумно количественно описать явление ионизации сжатием при нулевой температуре.

- Разработан сверхбыстрый специализированный алгоритм решения уравнений Томаса-Ферми с квантовыми и обменными поправками. На его основе написана программа для расчета таблиц термодинамических функций жидкой плазмы.
- Разработан метод интерполяции по разным моделям, сохраняющий строгую термодинамическую согласованность давления, энергии и энтропии. С его помощью построено широкодиапазонное термодинамическое уравнение состояния, одновременно описывающее газовую и жидкую плазму. Разработан алгоритм для расчета такого уравнения состояния и ударных адиабат. Выполнены расчеты ударных адиабат некоторых металлов и получено хорошее согласие с экспериментами при давлениях $P \geq 20$ Мбар.
- Разработано два метода для аппроксимации гладких непериодических функций одного и двух аргументов рядами Фурье. Это метод двойного периода и метод четно-нечетных продолжений. Найдены оптимальные параметры этих методов. Построены аппроксимации термодинамических функций жидкой плазмы, рекомендуемые в качестве справочных данных, имеющие точность до 0.1%.
- Составлены программы для решения уравнений статистической модели атома с квантовой и обменной поправками. Модернизированы программы для решения обобщенных уравнений ионизационного равновесия в газовой плазме. Составлены программы для расчета широкодиапазонного уравнения состояния, а также программы расчета ударных адиабат. Эти программы объединены в автоматизированный программный комплекс.

1.2.8. Степень достоверности и апробация результатов. Достоверность математических расчетов подтверждается известными фундаментальными теоремами о сходимости и проведением расчетов на последовательности сгущающихся сеток. В ходе этих расчетов программно проверяется сходимость сеточной функции к некоторому предельному значению. Это достоверно устанавливает математическую точность в пределах ошибок округления компьютера.

Физическая достоверность обеспечивается в газовой области использованием надежных справочных данных о потенциалах ионизации, а в области жидкой плазмы — использованием статистической модели атома с квантовой и обменной поправками, надежно апробированной ранее.

1.2.9. Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения. Общий объем диссертации: страниц 148, рисунков 31, таблиц 17. Список литературы включает наименований 111.

1.2.10. Апробация результатов. Результаты работы докладывались на семинаре ИПМех им. А. Ю. Ишлинского РАН «Аэрофизика и физическая механика клас-

сических и квантовых систем» (14 января 2015), на научно-координационной сессии «Исследования неидеальной плазмы» (Москва, 2–3 декабря 2014), на научно-методологическом семинаре НИВЦ МГУ (27 ноября 2014) на семинаре ИПМ им. М. В. Келдыша РАН (29 мая 2014), на семинаре, посвященном 100-летию со дня рождения Л. В. Альтушлера (Саров, 12–13 ноября 2013), на международной конференции 12th International Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing (IWPCTM12) — 3 доклада (Москва, 12–17 июля 2010), на международной конференции International Workshop Numerical Analysis and Scientific Computing (NASCom'08, 13-17 октября 2008, Ростов-на-Дону), на совместном семинаре ИММ РАН и кафедры математического моделирования МФТИ (апрель 2008), на международной конференции 3rd Moscow Workshop on Targets and Applications (Москва, 2007), на X и XI Всероссийской школе-семинаре «Современные проблемы математического моделирования» (Абрау-Дюрсо, 2005 и 2003), на Второй Всероссийской конференции памяти А. Ф. Сидорова «Актуальные проблемы прикладной математики и механики» (Абрау-Дюрсо, 2004).

1.2.11. Публикации. По теме диссертации всего опубликовано 9 работ в журналах, входящих в перечень ВАК: ДАН — 2, Математическое моделирование — 7, а также 2 работы в сборниках трудов всероссийских конференций.

1. *Н.Н. Калиткин, К.И. Луцкий*, **Широкодиапазонное уравнение состояния газовой и жидкой плазмы** // Матем. моделирование, **27:4** (2015), 31 – 49
2. *Н.Н. Калиткин, К.И. Луцкий*, **Обобщение уравнений Саха на жидкую плазму** // ДАН Физика, **457:2** (2014), 157 – 161
3. *Р.В. Голованов, Н.Н. Калиткин, К.И. Луцкий*, **Нечётное продолжение для фурье-аппроксимации непериодических функций** // Матем. моделирование, **25:5** (2013), 67 – 84
4. *Р.В. Голованов, К.И. Луцкий*, **Вычисление интегральной функции Ферми–Дирака** // Матем. моделирование, **24:2** (2012), 129 – 138
5. *Н.Н. Калиткин, К.И. Луцкий*, **Метод нечетного продолжения для фурье-аппроксимации непериодических функций** // ДАН, **441:1** (2011), 19 – 23
6. *К.И. Луцкий*, **Обусловленность метода двойного периода** // Матем. моделирование, **23:8** (2011), 89 – 96
7. *Н.Н. Калиткин, К.И. Луцкий*, **Аппроксимация гладких поверхностей методом двойного периода** // Матем. моделирование, **22:2** (2010), 64 – 68
8. *Н.Н. Калиткин, К.И. Луцкий*, **Прецизионная аппроксимация квантово-статистических кривых холодного сжатия** // Матем. моделирование, **20:6** (2008), 111 – 118
9. *Н.Н. Калиткин, К.И. Луцкий*, **Оптимальные параметры метода двойного**

периода // Матем. моделирование, **19**:1 (2007), 57 – 68

10. *Н.Н. Калиткин, К.И. Луцкий* **Выбор параметров метода двойного периода.** // Сборник трудов XI Всероссийской школы-семинара «Современные проблемы математического моделирования», 2005, с. 181 – 187.
11. *Н.Н. Калиткин, К.И. Луцкий* **Аппроксимация и экстраполяция функций, заданных на неравномерной сетке. Метод двойного периода** // Сборник трудов X Всероссийской школы-семинара «Современные проблемы математического моделирования», Абрау-Дюрсо, 2004, с. 156 – 161.

1.3 Краткое содержание работы

Работа состоит из введения, пяти глав и заключения.

Введение начинается с изложения проблемы построения термодинамики плазмы. Рассмотрены различные диапазоны температур и плотностей. Выделены области, в которых плазму можно считать газообразной или жидкой. Дан обзор различных физических моделей, применяемых для различных областей. Описано построение широкодиапазонного уравнение состояния на основе узкодиапазонных моделей. Выбрано направление работы — построение широкодиапазонного уравнения состояния на основе двух моделей: модели Саха и модели Томаса-Ферми с квантовой и обменной поправками.

Обоснована актуальность данной темы, сформулированы цели и задачи работы, указана научная новизна результатов и их теоретическая и практическая значимость. Описаны методология и методы исследования, степень достоверности результатов и их апробации. Сформулированы положения, выносимые на защиту.

Глава **Газовая плазма** посвящена развитию обобщенной модели Саха, описывающей газовую плазму. Показано, что в этой модели поправку на взаимодействие заряженных частиц следует уменьшить в несколько раз по сравнению со значениями, принятыми в современных источниках. Эта поправка получена путем введения нового типа условий на границе атомных ячеек — условия заземленной сферы (условия «трех нулей»). Введение данной поправки позволило расширить область применимости уравнений Саха в сторону высоких плотностей и низких температур.

Показана неправомочность модели простых гармонических осцилляторов, на которой основано большинство расчетов микроскопических электрических полей и оптических свойств плазмы в известной библиотеке свойств веществ SESAME (Лос-Аламос).

Глава **Жидкая плазма** посвящена нахождению свойств жидкой плазмы на основе модели Томаса-Ферми с квантовой и обменной поправками. Разработан новый численный метод решения уравнений этой модели, которая сводится к задаче на соб-

ственные значения для системы дифференциальных уравнений. Ранее эту задачу решали методом стрельбы. В данной работе составлена разностная схема, разрешаемая методом дополненного вектора. Это позволило кардинально сократить трудоемкость вычислений и повысить точность и устойчивость расчетов. Описан алгоритм и программа для расчета термодинамических функций данной модели. Описаны новые алгоритмы для вычисления некоторых функций Ферми-Дирака с высокой точностью.

Глава *Широкодиапазонное уравнение состояния* посвящена построению единого уравнения состояния плазмы на основе двух описанных выше моделей. Найдена общая граница применимости этих моделей. Рассматривается новый способ построения единого уравнения состояния путем такой интерполяции, которая не нарушает термодинамической согласованности различных величин: давления, энергии и энтропии. Описывается алгоритм и программа, реализующая указанную интерполяцию и построение единого уравнения состояния плазмы.

Разработан алгоритм расчета ударных адиабат, обеспечивающий высокую математическую точность. Составлена его программная реализация. В качестве примера рассчитаны главные ударные адиабаты Al, Fe, Cu и проанализированы их осцилляции, обусловленные оболочечной структурой атома.

Глава *Методы аппроксимации гладких функций* посвящена методу двойного периода, позволяющему аппроксимировать гладкие непериодические функции с помощью двойного базиса Фурье. Исследована обусловленность этого алгоритма. Найдены оптимальные параметры метода.

С помощью данного метода построены аппроксимации одномерных функций кривых холодного сжатия в модели ТФП и двумерных функций — таблиц термодинамических функций в той же модели при ненулевых температурах. Для кривых холодного сжатия строятся также аппроксимации другого вида. Все аппроксимации могут служить справочными данными.

Глава *Программный комплекс ТЕФИС* содержит описание программ, составленных по всем указанным в работе алгоритмам, и структуру их объединения в единый комплекс.

Заключение содержит основные результаты, выносимые на защиту.

1.4 Физические величины и единицы

В табл. 1.1 приведены физические величины и их обозначения, используемые в работе по умолчанию.

В табл. 1.2 приведены обозначения и значения используемых констант².

²Значения констант рекомендованы институтом National Institute of Standard and Technology [47]

Таблица 1.1. Используемые физические величины и их обозначения

| | |
|-----------------------------|--|
| Z | заряд ядра |
| A | атомный вес |
| T | температура |
| C_V | теплоемкость |
| V | объем атомной ячейки |
| R | радиус атомной ячейки |
| r, \vec{r} | координата |
| \vec{p} | импульс |
| $\rho(\vec{r})$ | электронная плотность |
| U | внутриатомный потенциал |
| $F, DF, \Delta F, \delta F$ | свободная энергия и поправки к ней |
| $P, DP, \Delta P, \delta P$ | давление и поправки к нему |
| $E, DE, \Delta E, \delta E$ | энергия и поправки к ней |
| $S, DS, \Delta S, \delta S$ | энтропия и поправки к ней |
| $\mu, D\mu, \Delta\mu$ | химический потенциал и поправки к нему |
| z | степень ионизации |
| n | концентрация ядер |
| κ | отношение объема ионного остова к V |
| ρ | плотность вещества |
| E_∞, DE_∞ | энергия невозбужденного изолированного атома; в п. 2.2.3: параметр неидеальности плазмы |
| E_0, P_0, V_0 | Энергия, давление, и объем несжатой атомной ячейки (состояние перед фронтом волны) |
| Γ | гамма функция; |

Для задач атомной физики удобна атомная система единиц, в которой полагают $m_e = 1, e_0 = 1, \hbar = 1$. В табл. 1.4 приводятся единицы для остальных величин и их значения в других системах, а в табл. 1.3 их связь с физическими единицами. Далее во всех теоретических формулах, если специально не указано, будут использоваться эти единицы.

Таблица 1.2. Используемые физические константы и их обозначения

| | |
|--|-------------------------------|
| $m_0 = 9.10938291(40) \times 10^{-31}$ кг | масса электрона |
| $e_0 = -1.602176565(35) \times 10^{-19}$ Кл | заряд электрона |
| $a_0 = 5.2917720859(36) \times 10^{-11}$ м | боровский радиус |
| $M_c = 1.660538782(83) \times 10^{-27}$ кг | атомная единица массы |
| $c = 299792458$ м/с | скорость света в вакууме |
| $\hbar = 1.054571726(47) \times 10^{-34}$ Дж·с | приведенная постоянная Планка |
| $N_A = 6,02214129(27) \times 10^{23}$ моль ⁻¹ | число Авогадро |
| $\alpha = 1/137.035999074(44)$ | постоянная тонкой структуры |

Таблица 1.3. Связь атомных единиц с физическими.

| Единица | Величина |
|-------------------|----------------------------------|
| $\rho \equiv 1/V$ | 11.2058783(69) г/см ³ |
| E/M_c | 2625.5000 кДж/г |
| S/M_c | 96.48538 кДж/г · эВ |
| P | 294.21033(18) Мбар |
| T | 27.2113962(8) эВ |

Таблица 1.4. Атомные единицы.

| Величина | Выражение через элементарные константы |
|---------------------|--|
| масса электрона | m_0 |
| длина | a_0 |
| заряд | e_0 |
| время | $e_0^{-1} m_e^{\frac{1}{2}} a_0^{\frac{3}{2}}$ |
| скорость | $e_0 m_e^{-\frac{1}{2}} a_0^{-\frac{1}{2}}$ |
| плотность | $M a_0^{-3}$ |
| сила | $e_0^2 a_0^{-2}$ |
| давление | $e_0^2 a_0^{-4}$ |
| энергия | $e_0^2 a_0^{-1}$ |
| температура | $e_0^2 a_0^{-1}$ |
| энергия на массу | $e_0^2 a_0^{-1} M^{-1}$ |
| потенциал | $e_0 a_0^{-1}$ |
| электрическое поле | $e_0 a_0^{-2}$ |
| плотность тока | $e_0^2 m_0^{-\frac{1}{2}} a_0^{-\frac{7}{2}}$ |
| проводимость | $e_0 m_0^{-\frac{1}{2}} a_0^{-\frac{3}{2}}$ |
| теплопроводность | $e_0 m_0^{-\frac{1}{2}} a_0^{-\frac{5}{2}}$ |
| эффективное сечение | a_0^2 |
| концентрация частиц | a_0^{-3} |

2. Газовая плазма

2.1 Обобщенные уравнения Саха

2.1.1. Общий вид уравнений. Для простоты ограничимся плазмой, состоящей из k -кратных ионов единственного элемента и свободных электронов. Их относительные концентрации обозначим x_k, x_e ($0 \leq k \leq Z$, где Z — порядковый номер элемента). Ионы будем считать классическими, а для электронов учтем частичное вырождение. Собственным объемом ионов будем пока пренебрегать. Свободная энергия, в среднем приходящаяся на один атом (или остов), равна [48, 49]

$$\begin{aligned} F &= F_e + \sum_{k=0}^Z x_k F_k + \Delta F, \\ F_e &= \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} T^{\frac{5}{2}} V \left[\frac{\mu}{T} I_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu}{T} \right) - \frac{2}{3} I_{\frac{3}{2}} \left(\frac{\mu}{T} \right) \right], \\ F_k &= -T \ln \left[\frac{eV G_k}{x_k} \left(\frac{MT}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \right] + \sum_{j=1}^k \phi_j, \quad e = 2.71828 \dots \end{aligned} \quad (2.1)$$

Здесь T — температура, μ — химический потенциал электронов, I_ν — функции Ферми-Дирака, M — масса атома (в электронных массах), G_k — статистическая сумма иона, ϕ_j — потенциал j -й ионизации, ΔF — поправка на взаимодействие. Должны выполняться уравнения балансов частиц и электрических зарядов:

$$\sum_{k=0}^Z x_k = 1, \quad \sum_{k=0}^Z k x_k = x_e = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} T^{\frac{3}{2}} V I_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu}{T} \right). \quad (2.2)$$

Обобщение (2.1), (2.2) на двухтемпературную плазму смесей элементов дано в [49].

Величина F является термодинамическим потенциалом для переменных T, V . Минимизируя (2.1) по всем концентрациям при сохранении балансов (2.2), получим обобщенные уравнения Саха:

$$\mu T \ln \frac{G_{k-1} x_k}{G_k x_{k-1}} + \phi_k + \Delta \phi_k + \delta \phi_k = 0, \quad 1 \leq k \leq Z, \quad (2.3a)$$

$$\Delta \phi_k = \left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_{k-1}} + \frac{\partial}{\partial x_e} \right) \Delta F, \quad (2.3b)$$

$$\delta\phi_k = -T \sum_{q=1}^Z x_q \left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_{k-1}} + \frac{\partial}{\partial x_e} \right) \ln G_q. \quad (2.3c)$$

Появляются две поправки к потенциалам ионизации. Поправка $\delta\phi_k$ связана с обрезанием статистических сумм, а поправка $\Delta\phi_k$ — с взаимодействием зарядов.

Статистические суммы G_k берутся по всем возбужденным состоянием иона. Оценки и расчеты показывают, что возбужденные состояния вносят заметный вклад в свою статистическую сумму при настолько высоких температурах, когда концентрация самого иона уже стала ничтожной по сравнению с ионами большей кратности. Поэтому для расчетов термодинамики вещества можно с хорошей точностью заменять статистические суммы на статистический вес основного состояния: $G_k = g_k$. Тогда статистические суммы можно считать постоянными, а их производными пренебрегать, и полагать $\delta\phi_k = 0$. Далее будем использовать только это приближение.

Заметим, что возбужденное состояние ионов необходимо учитывать при расчете оптических свойств плазмы.

2.1.2. Термодинамические функции. Давление P , энергия E и энтропия S получают из F с помощью термодинамических соотношений [50]. Дифференцировать по T и V надо только явную зависимость $F(T, V)$. Дифференцирование косвенной зависимости через x_k, x_e дает нули в силу уравнений (2.3). Это приводит к следующим выражениям для давления

$$P = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2} T^{\frac{5}{2}} I_{\frac{3}{2}} \left(\frac{\mu}{T} \right) + \frac{T}{V} + \Delta P, \quad \Delta P = -\frac{\partial(\Delta F)}{\partial V}, \quad (2.4)$$

энергии

$$E = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} T^{\frac{5}{2}} V I_{\frac{3}{2}} \left(\frac{\mu}{T} \right) + \frac{3}{2} T + \sum_{k=1}^Z x_k \sum_{q=1}^k \phi_q + \Delta E, \quad \Delta E = -T^2 \frac{\partial(\Delta F/T)}{\partial T} \quad (2.5)$$

и энтропии

$$S = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} T^{\frac{3}{2}} \left(\frac{5}{3} I_{\frac{3}{2}} \left(\frac{\mu}{T} \right) - \frac{\mu}{T} I_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu}{T} \right) \right) + \frac{5}{2} + \sum_{k=0}^Z x_k \ln \left[\frac{V}{x_k} \left(\frac{MT}{2\pi} \right)^{3/2} \right] + \Delta S, \quad \Delta S = -\frac{\partial \Delta F}{\partial T}. \quad (2.6)$$

Здесь ΔP , ΔE и ΔS — поправки на взаимодействие заряженных частиц.

2.1.3. Поправки на взаимодействие. С 1950-х годов предлагались разнообразные поправки ΔF и соответствующие им $\Delta\phi_k$ (см. [51, 52] и приведенную там литературу). Одной из первых была поправка Тимана [1]:

$$\Delta E = \Delta F = -z^2/D, \quad \Delta\phi_k = -k/D, \quad (2.7)$$

где D — дебаевский радиус. Для разреженной плазмы она была малой (и ее не было смысла учитывать), а при повышении плотности давала физически неправдоподобные результаты: вещество становилось полностью ионизованным, а давление отрицательным. Последующие модели дебаевского типа количественно были несколько лучше, но по-прежнему не позволяли продвинуться в область высоких плотностей. Исключением была модель Дебая в большом каноническом ансамбле (БДХ) [2]. К сожалению, она не получила широкого распространения в прикладных расчетах.

При высоких плотностях существует приближение — модель электронного газа (ОЭГ), которая дает следующие поправки на взаимодействие:

$$\Delta E = \Delta F = -\frac{9}{10}z^2/R, \quad (2.8a)$$

$$\Delta\phi_k = -\frac{9}{5}k/R. \quad (2.8b)$$

Здесь R — радиус сферического объема, приходящегося на один атом. Множитель 0.9 очень близок к известной константе Маделунга ≈ 0.896 для кристаллов.

Эта модель намного правдоподобнее дебаевской поправки (2.7). Она позволяет далеко продвинуть уравнения Саха для высоких плотностей, и даже формально получить их решение при нулевой температуре $T = 0$. Для газовых плотностей холодное вещество оказывается неионизованным, а при повышении плотности последовательно отрываются электроны. Такая картина качественно разумна, но количественные результаты плохи.

Модели ОЭГ и Дебая нигде не переходят друг в друга. Однако, есть модель Дебая в ячейке [4], в которой модель строилась по образцу дебаевской, но не в бесконечном пространстве, а в одной атомной ячейке. На границе ячейки ставилось условие электронейтральности. Эта модель давала поправку ΔF , которая при малых плотностях переходила в дебаевскую, а при больших плотностях — в ОЭГ. Но в прикладных программах эта поправка на взаимодействие не использовалась.

Была также построена микрополевая модель QUIP[5]. В ней поправка на неидеальность привязывалась к ОЭГ, но с одним дополнением: при высоких плотностях и низких температурах она склеивалась с моделью простых гармонических осцилляторов (SHO — Simple Harmonic Oscillators) [53], используемой в библиотеке SESAME. Это давало следующее выражение:

$$\Delta E = \Delta F = -\frac{9}{10}\frac{z^2}{R} / \left(1 + \frac{9}{5}\frac{z^2}{RT}\right). \quad (2.9a)$$

$$\Delta\phi_k = -\frac{9}{10R} \left(1 + \frac{9}{5}\frac{z^2}{RT}\right)^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_{k-1}} + \frac{\partial}{\partial x_e}\right) z^2. \quad (2.9b)$$

Однако при $T \rightarrow 0$ поправки на неидеальность (2.9) также стремятся к нулю. Это вызывает серьезные сомнения в адекватности модели SHO.

Новые варианты модели взаимодействия из раздела п. 2.1.3 показывают, что для ΔE целесообразно взять выражение (2.19). Оно же соответствует пределу (2.23) для высоких плотностей. (Предел при низких плотностях можно не рассматривать: он применим только тогда, когда пренебрежимо мала сама поправка.) Эта модель сохраняет качественную разумность при $T = 0$, а ее количественные результаты оказались неожиданно хорошими.

2.2 Модели заземленной границы

2.2.1. Общие выражения. Рассмотрим общий способ вывода потенциальной энергии системы зарядов. Берем сферически-симметричную атомную ячейку объема V и радиуса R . В центре этой ячейки помещен точечный положительный заряд z (это может быть точечный ион). В ячейке находятся z электронов, распределенных с плотностью $\rho_e(r)$, так что в целом ячейка электронейтральная:

$$4\pi \int_0^R \rho_e(r)r^2 dr = z. \quad (2.10)$$

Обозначим потенциал центрального заряда через $U_{\text{я}}(r)$, $0 \leq r \leq R$. Потенциал, создаваемый электронами, обозначим через $U_e(r)$. Его можно восстановить из соотношения $\Delta U_e(r) = +4\pi\rho_e(r)$; здесь справа стоит знак '+' поскольку электроны имеют заряд -1. Потенциальная энергия такой системы зарядов равна

$$\Delta E = -4\pi \int_0^R \left[U_{\text{я}}(r) + \frac{1}{2}U_e(r) \right] \rho_e(r)r^2 dr. \quad (2.11)$$

Перед электронным потенциалом в (2.11) стоит множитель $1/2$, поскольку это самоогласованное поле самих электронов.

Граничные условия. Одно граничное условие очевидно. Поскольку ячейка электронейтральна, то на ее внешней границе равна нулю напряженность электрического поля, то есть градиент суммарного потенциала:

$$\left. \frac{\partial(U_{\text{я}} + U_e)}{\partial r} \right|_{r=R} = 0. \quad (2.12)$$

Потенциал всегда определен с точностью до константы. В качестве второго условия обычно выбирают нуль полного потенциала на границе ячейки:

$$U_{\text{я}}(R) + U_e(R) = 0. \quad (2.13)$$

Это подразумевает, что все пространство состоит из одинаковых ячеек, так что на бесконечно удаленной внешней границе вещества потенциал равен 0.

Традиционные условия. Обычно в качестве ядерного потенциала берут потенциал точечного заряда в бесконечном пространстве. В этом случае второе граничное условие принимает следующий вид:

$$U_{\text{я}}(r) = \frac{z}{r}, \quad U_{\text{я}}(R) + U_e(R) = 0. \quad (2.14)$$

До сих пор справедливость условия (2.14) не ставилась под сомнение.

Условие трех нулей. С точностью до константы определен любой потенциал, не только полный, но и по отдельности: ядерный и электронный. Если границу ячейки считать заземленной сферой, то для ядерного потенциала также не существует бесконечно удаленной точки, и он должен обращаться нуль на границе ячейки. В этом случае граничные условия для потенциала примут следующий вид:

$$U_{\text{я}}(R) = 0, \quad U_e(R) = 0. \quad (2.15)$$

Два граничных условия (2.15) и условие электронейтральности (2.12) будем называть граничным условием трех нулей. Только такие условия являются правильными для ячеечных моделей вещества (разумеется, в приближении сферически-симметричных ячеек).

Из (2.15) следует правильное (исправленное) выражение ядерного потенциала в ячеечной модели:

$$U_{\text{я}}(r) = \frac{z}{r} - \frac{z}{R}. \quad (2.16)$$

Оно кажется непривычным, но именно таков потенциал точечного заряда внутри заземленной сферы.

2.2.2. Однородный электронный газ. Эта простейшая модель реализуется при очень высоких температурах или очень больших сжатиях. Тогда кинетическая энергия настолько больше потенциальной, что неоднородностью электронной плотности можно пренебречь, и считать $\rho_e(r) = z/V = \text{const}$. Тогда из уравнения Пуассона $\Delta U_e = 4\pi\rho_e$ вытекает следующее выражение для электронного потенциала:

$$U_e(r) = \frac{zr^2}{2R^3} + \text{const}. \quad (2.17)$$

При традиционном граничном условии (2.14) из (2.17) следовало

$$\text{const} = -\frac{3z}{2R}, \quad \Delta E = -\frac{9}{10} \frac{z^2}{R}. \quad (2.18)$$

Множитель $9/10$ в потенциальной энергии из (2.18) очень близок к известной постоянной Маделунга ≈ 0.896 в кристаллах. Поэтому более полувека модель ОЭГ не подвергалась сомнениям.

Граничные условия трех нулей (2.15), (2.12) дают сильно отличающиеся результаты:

$$const = -\frac{z}{2R}, \quad \Delta E = -\frac{2}{5} \frac{z^2}{R}. \quad (2.19)$$

Значение потенциальной энергии получилось в 2.5 раза меньше, чем в (2.18)! Такое сильное отличие от традиционного значения требует серьезного дополнительного обоснования модели заземленной границы. Это будет сделано далее.

Заметим, что такое сильное влияние граничных условий и выбора константы в потенциалах связано с множителем $1/2$ внутри интеграла потенциальной энергии (2.11). Если мы увеличим электронный потенциал на некоторую константу, то для соблюдения граничного условия $U(R) = 0$ надо уменьшить ядерный потенциал на такую же константу. Но в интеграл потенциальной энергии (2.11) электронный потенциал входит с множителем $1/2$, а ядерный — с множителем 1. Поэтому выбор константы влияет на энергию, следовательно, требует надежного обоснования. Ссылка на константу Маделунга здесь неправомерна, так как ее вычисление проводилось с традиционными граничными условиями.

2.2.3. Модель Дебая в ячейке. Можно построить более точную модель, приближенно учитывающую неоднородность электронной плотности. Электронный газ находится в поле центрального заряда (ионного остова), что приводит к его неоднородности. Эту неоднородность можно учесть способом, предложенным Дебаем.

Классическая модель Дебая [50] рассматривает бесконечную ячейку и приводит к суммарному потенциалу $U(r) = (z/r) \exp(-r/D)$. Если при этом вырезать вокруг ионного остова ячейку радиуса R , то на границе напряженность $\partial U/\partial r > 0$. Это означает, что ячейка содержит избыток положительного заряда. Если разбить газ на ячейки вокруг каждого ионного остова, то все ячейки положительно заряжены, и нарушена электронейтральность среды. Этот фатальный эффект классической модели Дебая не обсуждается в литературе.

В дебаевском приближении полный потенциал удовлетворяет уравнению Гельмгольца: $\Delta U = U(r)/D^2$, где D — есть дебаевский радиус, зависящий от z , T и V .

В случае сферической симметрии имеется два линейно-независимых решения этого уравнения. В бесконечном пространстве эти решения обычно записывают в виде $(z/r) \exp(\pm r/D)$. Решение, соответствующее знаку '+', неограниченно растет на бесконечности, поэтому его отбрасывают. Оставляют только убывающее решение, соответствующее знаку '-'.

В случае конечной ячейки надо оставить общее решение уравнения Гельмгольца с затухающей и возрастающей экспонентами. Коэффициенты перед ними надо подобрать так, чтобы при $r \rightarrow 0$ потенциал переходил в кулоновский, а на границе выполнялось условие электронейтральности (2.12). Тогда полный потенциал можно

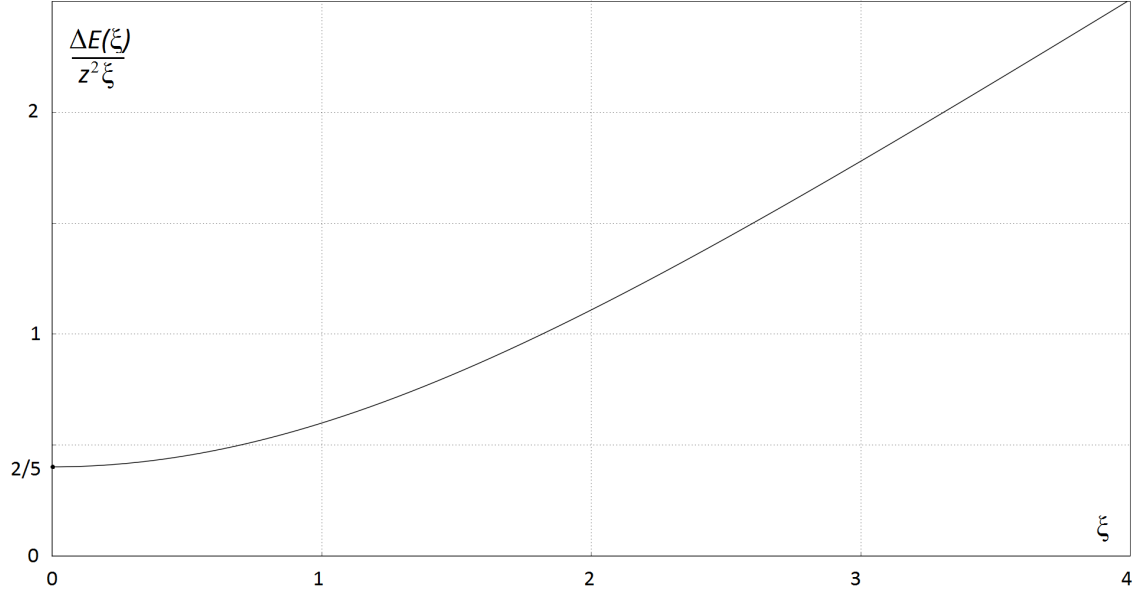


Рис. 2.1. Потенциальная энергия модели Дебая в ячейке, отнесенная к $z^2\xi$.

представить в виде:

$$U(r) = \frac{z}{r} \left(\operatorname{ch} \frac{r}{D} - y \operatorname{sh} \frac{r}{D} \right), \quad y = \frac{\xi \operatorname{th} \xi - 1}{\xi - \operatorname{th} \xi}, \quad \xi = \frac{R}{D}. \quad (2.20)$$

Электронная плотность равна

$$\rho_e(r) = -\frac{1}{4\pi} \Delta U(r) = -\frac{U(r)}{4\pi D^2}. \quad (2.21)$$

Далее потенциал (2.20) следует разбить на кулоновский и электронный, вычесть из каждого потенциала его граничное значение и найти энергию взаимодействия аналогично (2.11), где в интеграл надо ставить электронную плотность (2.21). Получим

$$\Delta E_D = -\frac{z^2}{2D} \frac{2(1 - \xi^2 + \xi^4) - 2(1 + 4\xi^2) \operatorname{ch} 2\xi + \xi(7 + 3\xi^2) \operatorname{sh} 2\xi}{4\xi(\xi \operatorname{ch} \xi - \operatorname{sh} \xi)^2}. \quad (2.22)$$

Предельные случаи. Для выражения (2.22) они имеют следующий вид:

$$\Delta E_D \approx \begin{cases} -\frac{2}{5} \frac{z^2}{R} [1 + O(\xi^2)] & \text{при } \xi \rightarrow 0, \\ -\frac{3}{4} \frac{z^2}{D} \left[1 - \frac{2}{3\xi} + O(\xi^{-2}) \right] & \text{при } \xi \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (2.23)$$

Первый предел (2.23) соответствует высоким плотностям и совпадает с (2.19). Вторым предел (2.23) соответствует газовым плотностям и отличается множителем $3/4$ от традиционной дебаевской поправки.

Зависимость энергии (со специально подобранным множителем) от ξ показана на рис. 2.1. Решение (2.22) изображено жирной линией. Видно, что выход на дебаевско-ячеечную асимптоту (2.23) происходит уже при $\xi \approx 4$.

Связь с параметром неидеальности. Если взять классические выражения для традиционного параметра неидеальности Γ и дебаевского радиуса D , то нетрудно получить следующую их связь с параметром ξ :

$$\Gamma = \frac{z^2}{RT}, \quad D = \sqrt{\frac{TV}{4\pi z^2}}, \quad \xi = \frac{R}{D} = \sqrt{3\Gamma}. \quad (2.24)$$

Характеристикой неоднородности распределения электронов может служить величина

$$-\rho_e(R)V = \frac{z}{3} \frac{\xi^3}{\xi \operatorname{ch} \xi - \operatorname{sh} \xi} \approx \begin{cases} z \left(1 + \frac{\xi^2}{10} + \frac{\xi^4}{280} + \dots\right)^{-1} & \text{при } \xi \rightarrow 0, \Gamma \rightarrow 0; \\ \frac{2}{3} z e^{-\xi} & \text{при } \xi \rightarrow \infty, \Gamma \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (2.25)$$

Величина $\rho_e(R)V$ монотонно убывает от z до 0 при увеличении ξ и Γ от нуля до бесконечности. Первый случай (2.25) соответствует слабой неидеальности и однородному электронному газу. Второй случай (2.25) соответствует сильной неидеальности и сильной неоднородности электронного газа.

2.2.4. Средний заряд. Для многокомпонентной плазмы есть разные модельные способы введения среднего заряда. Наиболее известны усреднения по Дебаю [50]:

$$z_D = \left(x_e + \sum_j x_j z_j^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.26)$$

и по Хольцмарку [54]:

$$z_H = \left(x_e + \sum_j x_j |z_j|^{\frac{3}{2}} \right)^{\frac{2}{3}}. \quad (2.27)$$

Заряды (2.26), (2.27) приводят к следующим сдвигам потенциалов ионизации:

$$\Delta\phi_{kD} = -\frac{4}{5} \frac{k}{R}, \quad \Delta\phi_{kH} = -\frac{8}{15} \frac{\sqrt{z_H}}{R} \left(k^{\frac{3}{2}} - (k-1)^{\frac{3}{2}} + 1 \right). \quad (2.28)$$

В [5, 55] показано, что каждая из этих моделей имеет свои достоинства и недостатки, так что выбор между ними нельзя сделать на основании только теоретических соображений. Необходима экспериментальная апробация этих моделей. Различия между ними для сильно сжатого вещества малы.

2.2.5. Нулевая температура. Можно сделать предельный переход $T \rightarrow 0$ в уравнениях Саха. При этом энергия и давление классических ионных остовов обращаются в нуль, и остается только вклад полностью вырожденных электронов. Картина ионизации при этом следующая. При газовых плотностях (больших R) $\phi_k + \Delta\phi_k > 0$ для всех k и вещество не ионизовано. При повышении плотности (уменьшении R) наступает момент, когда $\phi_1 + \Delta\phi_1$ становится отрицательным. При этом от атома

скачком отрывается первый электрон. При дальнейшем повышении плотности аналогично скачком отрывается второй электрон, и т. д. Происходит ионизация холодным сжатием. Таким образом, впервые предложено разумное обобщение модели Саха на нулевую температуру.

Нетрудно написать соответствующие выражения термодинамических функций. Обозначим через R_k радиус ячейки, при котором ионизуется k -й электрон. Тогда в интервале $R_{k+1} < R < R_k$ атом будет k -кратно ионизованным. Его давление примет вид

$$P = \frac{(3\pi^2)^{\frac{2}{3}}}{5} \left(\frac{k}{V} \right)^{\frac{5}{3}} + \Delta P. \quad (2.29)$$

Здесь при вычислении ΔP в зарядах надо оставить только один ион с $z_j = k$, $x_j = 1$, и взять $x_e = k$.

Величина ΔP меньше нуля, и при отрыве первых нескольких электронов возможно $P < 0$. Это явление качественно разумно, так как холодное вещество при плотности меньше нормальной должно растягиваться, что соответствует отрицательному давлению. Аналогично вычисляется энергия E , а энтропия $S = 0$.

Сделаем два замечания. Во-первых, в исключительных случаях при некоторых значениях k возможно $R_{k+1} > R_k$. Это означает, что одновременно отрывается не один электрон, а два (или более). Во-вторых, при переходе через точку R_k давление скачком увеличивается. Такое явление нефизично. Однако эти скачки невелики и не приводят к серьезным последствиям. Существуют две поправки к потенциалам ионизации. Поправка $\delta\phi_k$, связанная с обрезанием статистических сумм, всегда существенно меньше поправки $\Delta\phi_k$, связанной с взаимодействием зарядов, поэтому далее не будем ее учитывать.

2.3 Апробация

2.3.1. Холодная ионизация. При $T = 0$ наиболее точные результаты получают квантовомеханическим методом функционала плотности. По существу это метод Хартри-Фока-Слэттера с корреляционными поправками. Коэффициенты в корреляционных поправках берут не из первых принципов, а подгоняя под эксперименты. Поэтому метод в целом является полуэмпирическим. Он обеспечивает наилучшее согласие с экспериментами, но это достигается в значительной мере за счет подбора полуэмпирических корреляционных коэффициентов, то есть за счет того самого эксперимента с которым происходит сравнение.

Не содержат подгонок под эксперименты лишь два простейших варианта метода функционала плотности: модель Томаса-Ферми и квантово-обменные поправки к этой модели (ТФП). Эти модели недостаточно точны, так как сглаживают оболочеч-

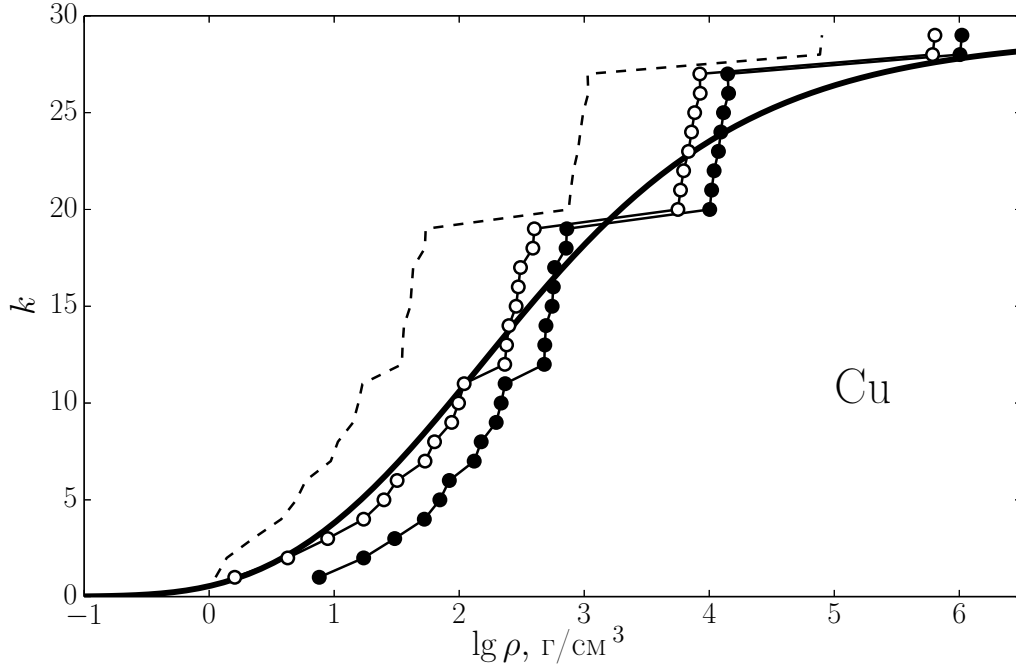


Рис. 2.2. Кривые холодной ионизации Cu. Жирная линия — ТФП, маркеры — модель Саха: кружок полый — заряд z_N , точка — заряд z_D , сплошные линии — поправка (2.19), пунктир — поправка (2.18) с коэффициентом 9/10.

ную структуру. Ограничимся здесь сравнением только с этими результатами [56].

На рис. 2.2 показано сравнение зависимости степени ионизации от сжатия. Модель ТФП не передает оболочечных эффектов, и ее ионизация идет плавно. В модели Саха отчетливо видны скачки, связанные с началом ионизации K -оболочки (при наибольших плотностях), L -оболочки и даже M -оболочки (при меньших плотностях).

Видно, что для поправки модифицированного ОЭГ (2.19) с зарядом Хольцмарка (2.27) модель Саха хорошо совпадает с ТФП. Нижняя оболочка лежит практически на кривой ТФП, а кривые остальных оболочек пересекаются с ней в своих серединах. При заряде Дебая (2.26) совпадение на внутренних оболочках столь же хорошее, но на внешней оболочке существенно хуже. Кроме того, на рис. 2.2 пунктиром приведена линия ионизации для классической модели ОЭГ (2.18) (с коэффициентом 9/10) и z_N . Она отличается от модели ТФП в ~ 10 раз по плотности. Таким образом, наилучшие результаты дает модифицированная поправка ОЭГ с зарядом Хольцмарка. Ее будем использовать в дальнейших расчетах.

Заметим, что в этой модели для Cu при $k \leq 3$ холодное давление отрицательное, а при $k > 3$ оно положительно. Это означает, что в обобщенной модели Саха появляется холодное несжатое вещество! Однако нормальная плотность оказывается в несколько раз больше экспериментальной, и можно говорить только о качественной разумности модели.

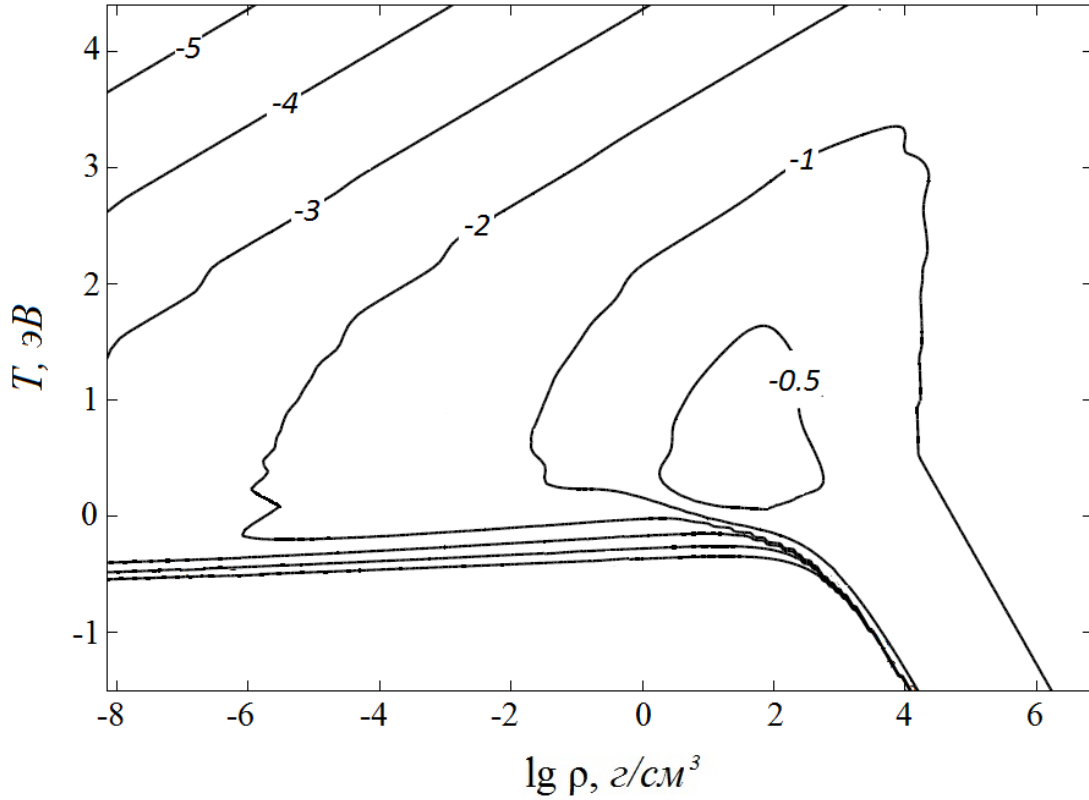


Рис. 2.3. Изолинии параметра неидеальности для Cu. На линиях указаны значения $\lg \gamma$.

2.3.2. Неидеальность. Примем за количественную меру неидеальности отношение $\gamma = -\Delta P/P_{\text{ид}}$. Здесь $P_{\text{ид}}$ есть идеальная газовая часть давления в (2.4). На рис. 2.3 показано семейство изолиний γ для Cu. График построен для значений $T > 300\text{K}$. Видно, что в этом диапазоне неидеальность не превышает $\gamma \sim 0.3$ внутри замкнутой изолинии. По мере удаления от этой изолинии γ быстро убывает. При этом полное давление остается положительным, и никакого плазменного фазового перехода в данной модели не появляется.

Любопытно, что наибольшая неидеальность достигается не при сверхвысоких плотностях, а при умеренных $\rho \sim 30 \text{ г/см}^3$ и довольно высоких $T \sim 10 \text{ эВ}$. Это объясняется тем, что при сверхвысоких плотностях или более низких температурах становится преобладающим вклад упругого давления вырожденных электронов.

Подробное построение изотерм $P(\rho)$ показало, что в этом диапазоне $(\partial P/\partial \rho)_T > 0$. Это означает, что фазовый переход ван-дер-ваальсовского типа, характерный для нейтральных газов, также отсутствует. Поэтому данная модель не позволяет определить критические точки веществ.

2.3.3. Применимость. Оценим достоинства и недостатки данного обобщения модели Саха. Способ построения модели гарантирует точную термодинамическую со-

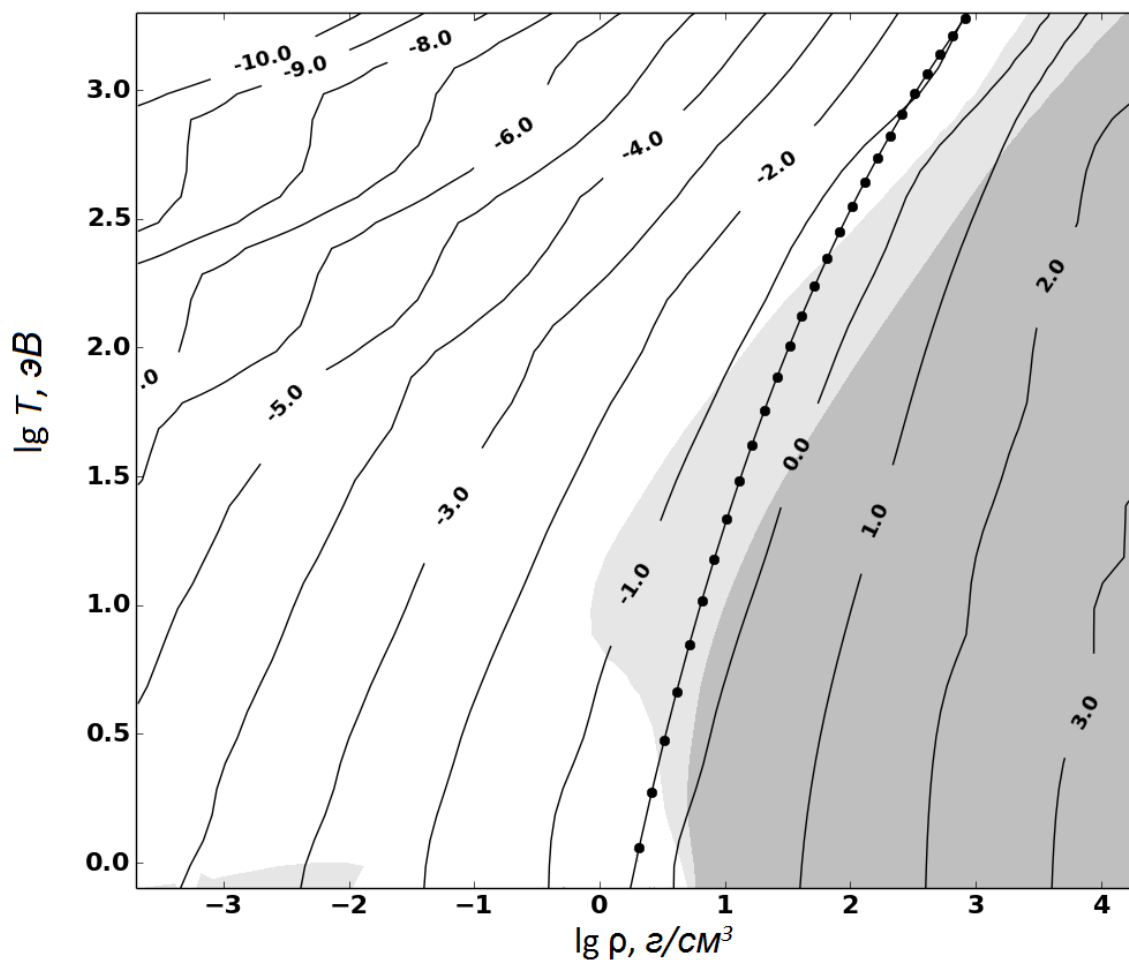


Рис. 2.4. Изолинии $lg\xi$ для Cu. На линиях указаны значения $lg\xi$. Жирной линией показана кривая «испарения» θ из (3.25с). Фон указывает отличие моделей Саха и ТФП. Белый — до 1.2 раза. Светлый — от 1.2 до 2.5 раз, темный — свыше 2.5 раз.

гласованность всех выражений. Использование надежных справочных данных по потенциалам ионизации обеспечивает хорошую количественную точность этой модели для газовой плазмы. Новая поправка на неидеальность дает качественно разумный переход к нулевым температурам, что позволяет существенно расширить область применимости модели в сторону низких температур и сверхвысоких плотностей, то есть на жидкую плазму.

Однако в этой модели отсутствует критическая точка, то есть переход газовой плазмы в жидкую передается не вполне адекватно. Для аккуратного перехода в жидкое состояние необходимо учитывать конечные объемы и упругость ионных остовов. Их можно ввести в модель [55], но при этом очень сложно получить термодинамическую согласованность всех выражений. Однако объемы ионных остовов можно использовать для определения границы применимости. На рис. 2.4 для Cu показаны изолинии $lg\xi$, где ξ есть отношение суммарного объема ионных остовов к полному

объему. Если $lg\kappa < -2$, то есть $\kappa < 1\%$, то вкладом объема остовов можно пренебречь и следует считать плазму чисто газовой. Если $lg\kappa = 0$, то есть ионные остовы занимают весь объем, модель Саха неприменима. Поэтому модель теряет применимость между изолиниями -2 и 0 .

2.3.4. О модели SHO (Simple Harmonic Oscillators). Мы рассмотрели также другую поправку на неидеальность [55], которая при $T \rightarrow 0$ переходит в известную модель простых гармонических осцилляторов SHO [53]. Эта поправка имеет вид

$$\Delta E = -\frac{9}{10} \frac{z^2}{R} \left(1 + \frac{9}{5} \frac{z^2}{RT} \right)^{-1}. \quad (2.30)$$

Последнее слагаемое в скобках возникает из модели SHO. Видно, что из-за этого слагаемого $\Delta E \rightarrow 0$ при $T \rightarrow 0$, и модель Саха дает качественно неразумные результаты. Это свидетельствует о неадекватности модели SHO. Это существенно, так как именно модель SHO применяется в библиотеке SESAME для расчета оптических свойств плотной плазмы.

2.4 Важнейшие результаты главы

1. Для самосогласованного поля в ячеечных моделях вещества предложен и надежно апробирован новый тип краевых условий — **условия трех нулей**. Это условие приводит к существенному уменьшению поправки на взаимодействие заряженных частиц в газовой плазме.
2. Применение полученной поправки на взаимодействие в обобщенной модели Саха позволило существенно расширить область ее применимости в сторону низких температур и высоких плотностей. При этом в модели отсутствуют так называемые плазменные фазовые переходы, что улучшает согласие модели с экспериментами по сравнению с большинством других плазменных моделей.
3. Показана неадекватность модели простых гармонических осцилляторов (SHO), традиционно используемой в зарубежных расчетах оптических свойств вещества.
4. На основе перечисленных теоретических результатов построена надежная модель термодинамики газовой плазмы и найдена граница ее применимости. Эта модель позволяет легко производить расчеты подробных таблиц термодинамических функций для газовой плазмы, состоящей как из отдельного химического элемента, так и из произвольной смеси химических элементов. По физической точности ($\sim 1\%$) эта модель [57] является лучшей из существующих.

3. Жидкая плазма

3.1 Исходные модели

В этом разделе рассмотрим основные модели, которые мы будем использовать для расчетов термодинамики жидкой плазмы. В основном эти модели известны, но модель учета ядер была здесь существенно улучшена.

3.1.1. Атомные ячейки. Масса ядра значительно превышает массу электрона. Вследствие этого тепловая скорость движения ядер мала (она меньше в ~ 40 раз для водорода и в ~ 600 раз для урана) по сравнению со скоростью движения электронов. В результате медленно движущиеся ядра образуют электростатическое поле, в котором с намного большей скоростью движутся электроны, успевающие быстро подстроиться к любому изменению координат ядер. Поэтому справедливо приближение Борна-Оппенгеймера [58]: в первом приближении считают ядра фиксированными, и рассматривают только движение электронов. Обратное влияние электронного распределения на движение ядер можно считать как аддитивный эффект.

В твердом теле существует кристаллическая ячейка. Для плотноупакованных решеток это многогранник, который с приемлемой точностью можно заменить на сферу равного объема. При больших давлениях следует ожидать плотной упаковки вещества. Поэтому вводят понятие атомной ячейки Вигнера-Зейца, представляющей собой сферу объема V , приходящегося в среднем на один атом вещества заданной плотности ρ с центром в ядре.

Естественно использовать средний радиус атомной ячейки R , определяемый из условия

$$\frac{4}{3}\pi R^3 n = 1, \quad (3.1)$$

где $n = \rho N_A/A$ — число ядер в единице объема, то есть их концентрация; ρ — плотность вещества; A — атомный вес; N_A — число Авогадро.

В такой атомной ячейке многоэлектронную задачу приближенно сводят к задаче о движении каждого электрона в самосогласованном поле, создаваемом ядром и всеми электронами. Влияние соседних ячеек на это поле учитывают обычно неявным образом через соответствующие граничные условия. Обычно ставят условия типа

$\nabla\rho_e = 0$, которое также обеспечивает гладкость электронной плотности при переходе из ячейки в ячейку, а тем самым во всем пространстве.

Существует еще движение ячеек как целого, связанное с тепловым движением и нулевым (холодным) колебанием ядер. Взаимодействие этого движения с движением электронов внутри ячейки сравнительно невелико. Вклад теплового движения ядер можно считать аддитивным и учитывать отдельно.

Излучение настолько слабо взаимодействует с заряженными частицами [59], что его термодинамические функции также будем считать отдельно и просто прибавлять к термодинамическим функциям ячеек.

Таким образом, термодинамические функции внутри атомной ячейки искусственно разбиваются на аддитивные компоненты:

$$P(T, V) = P_e + P_{\text{я}} + P_{\text{и}}. \quad (3.2)$$

Здесь P_e — электронное давление, $P_{\text{я}}$ — давление теплового движения ячеек, $P_{\text{и}}$ — давление излучения. Аналогичные соотношения записываются для остальных термодинамических функций и поправок к ним.

3.1.2. Электронная компонента. Во Введении перечислены основные теоретические модели, используемые для расчета электронной компоненты. Перечислим их в порядке физического упрощения. Это

- метод Хартри-Фока с зонными граничными условиями (Гандельман);
- метод Хартри-Фока-Слэтера с корреляционными поправками и зонными граничными условиями в кристаллической ячейке — метод функционала плотности (МФП);
- метод Хартри-Фока-Слэтера в сферической ячейке с зонными граничными условиями (Уваров, Никифоров, Новиков);
- метод Хартри-Фока-Слэтера в сферической ячейке с псевдозонными граничными условиями (Rozsnyai, Синько);
- Квантово-статистическая модель (Калиткин);
- Модель Томаса-Ферми с квантовыми и обменными поправками (Киржниц, Калиткин, Кузьмина);
- Модель Томаса Ферми (Feynman, Metropolis, Teller).

Однако поскольку это все модели, то из теоретических соображений невозможно оценить какая из них лучше.

Апробацию этих моделей традиционно проводят на ударных адиабатах веществ, по которым в настоящее время накоплен обширный экспериментальный материал [60]. При давлениях меньше 10-20 Мбар, все модели достаточно сильно отличаются друг от друга. При этом ни одна из них не дает достаточно хорошего описания всего экспериментального материала. Имеются совпадения по отдельным веществам, но

они носят скорее случайный характер. Если давление превышает ~ 20 Мбар, то модели дают довольно близкие результаты и одинаково хорошо описывают эксперименты в пределах экспериментальных ошибок.

Так как модели Хартри-Фока требуют огромных численных расчетов, в данной работе мы делаем выбор в пользу несложной модели Томаса-Ферми с поправками. При $P > 20$ Мбар она не уступает в точности более сложным моделям, а ее простота позволяет построить быстрые программы для оперативных расчетов даже на портативных компьютерах.

Модель Томаса-Ферми. Первоначально модель Томаса-Ферми [6, 7] была сформулирована для нулевой температуры. Позже она была обобщена на случай произвольной температуры [8]. Модель учитывает неоднородность электронного газа в самосогласованном сферически-симметричном поле $U(r)$.

Предполагается, что электроны образуют квазиклассический газ, заключенный в некотором фиксированном объеме, то есть электроны считаются непрерывно распределенными в фазовом пространстве в соответствии со статистикой Ферми-Дирака:

$$f(\vec{r}, \vec{p}) = \left[1 + \frac{\left(\frac{p^2}{2} - U(\vec{r}) - \mu \right)}{T} \right]^{-1}, \quad (3.3)$$

где \vec{p} — импульс электрона, \vec{r} — его координата, $U(\vec{r})$ — внутриатомный потенциал атомной ячейки, μ — химический потенциал, а $\varepsilon = \frac{p^2}{2} - U(\vec{r})$ есть энергия электрона в самосогласованном поле. Такое предположение игнорирует оболочечную структуру связанных электронов, то есть оно эквивалентно гипотезе о полном «размазывании» оболочек.

Если учесть наличие спина у электрона, приводящее к удвоению числа состояний, число возможных состояний электрона, приходящееся на элемент фазового пространства $d\vec{r}d\vec{p}$, равно $2d\vec{r}d\vec{p}/(2\pi)^3$. Интегрируя распределение (3.3) по импульсам, получим плотность электронов в данной точке ячейки:

$$\rho(\vec{r}) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{4\pi p^2 dp}{1 + \exp\left(\frac{\frac{p^2}{2} - U(\vec{r}) - \mu}{T}\right)}. \quad (3.4)$$

Сделаем в (3.4) замену переменных интегрирования $y = p^2/(2T)$ и введем функцию Ферми-Дирака:

$$I_k(x) = \int_0^\infty \frac{y^k dy}{1 + \exp(y - x)}, \quad (3.5)$$

Получаем

$$\rho(\vec{r}) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} T^{\frac{3}{2}} I_{\frac{1}{2}}\left(\frac{U(\vec{r}) + \mu}{T}\right). \quad (3.6)$$

Самосогласованное поле по своему определению должно подчиняться уравнению Пуассона [61]. После усреднения по различным положениям ядер [62], потенциал $U(\vec{r})$ будет сферически-симметричным, и для него можно записать

$$\Delta U = -4\pi Z\delta(\vec{r}) + \frac{4\sqrt{2}}{\pi} T^{\frac{3}{2}} I_{\frac{1}{2}} \left(\frac{U(r) + \mu}{T} \right), \quad 0 \leq r < R. \quad (3.7)$$

Здесь δ — дельта функция, а R — радиус атомной ячейки. Запишем условие электронейтральности:

$$4\pi \int_0^R \rho(r) r^2 dr = Z. \quad (3.8)$$

Из условия (3.8) и уравнения (3.7) с помощью теоремы Гаусса получаем [62] граничное условие:

$$\left. \frac{dU}{dr} \right|_{r=R} = 0. \quad (3.9)$$

Оно эквивалентно условию симметричности и гладкости электронной плотности при переходе из одной атомной ячейки в соседние. Такое условие эффективно учитывает взаимодействие заряженных частиц из соседних ячеек, включая его в потенциальную энергию ячейки. Оно выделяет такие электрически нейтральные ячейки, поэтому электростатическое взаимодействие ячеек в первом приближении отсутствует. Благодаря этому сами ячейки можно считать невзаимодействующими и складывать их термодинамические потенциалы.

Кроме того, так как потенциал U определяется с точностью до постоянного слагаемого, примем начало отсчета потенциала:

$$U(R) = 0. \quad (3.10)$$

Переходя в (3.7)–(3.10) к сферическим координатам, получим обобщенную задачу Томаса-Ферми:

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} [rU(r)] = \frac{4\sqrt{2}}{\pi} T^{\frac{3}{2}} I_{\frac{1}{2}} \left(\frac{U(r) + \mu}{T} \right), \quad 0 \leq r < R, \quad (3.11a)$$

$$rU(r) \Big|_{r=0} = Z, \quad U(R) = 0, \quad \left. \frac{dU}{dr} \right|_{r=R} = 0. \quad (3.11b)$$

Эта задача представляет собой уравнение Пуассона для радиально-симметричного распределения с тремя краевыми условиями. Формулы (3.11) — это задача на собственные значения, где роль собственного значения играет неизвестный параметр μ (химический потенциал). Третье условие в (3.11b) используется для нахождения этого параметра. Численно решая задачу (3.11), можно определить $U(r)$ и μ при заданных значениях T и V . Существует единственное решение этой задачи.

Все квазиклассические термодинамические функции выражаются через решение задачи (3.11). В частности, давление, энергия и энтропия, отнесенные к одной атомной ячейке, равны [9]:

$$P = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2} T^{\frac{5}{2}} I_{\frac{3}{2}}\left(\frac{\mu}{T}\right), \quad (3.12a)$$

$$E = \frac{Z}{2} \left[\frac{d(rU(r))}{dr} \right]_{r=0} + \frac{4\sqrt{2}}{\pi} T^{\frac{5}{2}} \int_0^R \left[I_{\frac{3}{2}}\left(\frac{U(r)+\mu}{T}\right) - \frac{U(r)}{2T} I_{\frac{1}{2}}\left(\frac{U(r)+\mu}{T}\right) \right] r^2 dr + C(Z), \quad (3.12b)$$

$$S = \frac{4\sqrt{2}}{\pi} T^{\frac{3}{2}} \int_0^R \left[\frac{5}{3} I_{\frac{3}{2}}\left(\frac{U(r)+\mu}{T}\right) - \frac{U(r)+\mu}{T} I_{\frac{1}{2}}\left(\frac{U(r)+\mu}{T}\right) \right] r^2 dr. \quad (3.12c)$$

Здесь $C(Z)$ подбирается так, чтобы энергия невозбужденного изолированного атома ($T \rightarrow 0, V \rightarrow \infty$) обращалась в нуль.

Важным свойством модели Томаса-Ферми является подобие по Z :

$$\begin{aligned} T_{Z=1} &= Z^{-\frac{4}{3}} T, & V_{Z=1} &= ZV, & R_{Z=1} &= Z^{\frac{1}{3}} R, \\ U_{Z=1} &= Z^{-\frac{4}{3}} U, & \mu_{Z=1} &= Z^{-\frac{4}{3}} \mu, \\ P_{Z=1} &= Z^{-\frac{10}{3}} P, & E_{Z=1} &= Z^{-\frac{7}{3}} E, & S_{Z=1} &= Z^{-1} S. \end{aligned} \quad (3.13)$$

При введении переменных (3.13)¹, из уравнений (3.11) и (3.12) исключается Z , то есть они переходят в уравнения для водорода ($Z = 1$). Это позволяет один раз рассчитать таблицы термодинамических функций для $Z = 1$ и затем пользоваться ими для любого элемента².

Точность модели Томаса-Ферми. Представление о точности модели Томаса-Ферми дано в [56]. Отклонение модели Томаса-Ферми от эксперимента имеет две составляющие: осциллирующую по Z и монотонную. Действительно, модель Томаса-Ферми можно рассматривать как квазиклассическое приближение к модели Хартри [61]. Первая связана с неучетом оболочечной структуры. Зависимость осциллирующей составляющей неаналитическая. Поэтому в рамках квазиклассических приближений получить оболочки нельзя. Вторая составляющая, монотонная — гораздо большая. Ее точность есть $O(\hbar^2)$.

Величины обеих составляющих убывают с ростом давления, но не слишком быстро.

¹В литературе иногда такие переменные называют автомодельными, но, строго говоря, это следует называть подобием.

²Поскольку до недавних лет вычислительные мощности были невелики, это было очень существенным преимуществом. Впервые расчеты таких таблиц были проведены в [10], но сами таблицы не были опубликованы.

Теоретические оценки и экспериментальные данные показывают, что монотонная составляющая холодного давления $P_{\text{ТФ}} (T = 0)$ примерно равна:

$$\delta P/P_{\text{ТФ}} \approx -0.18 P_{\text{ТФ}}^{-\frac{1}{5}}, \quad (3.14)$$

а амплитуда осциллирующей составляющей вдвое меньше. Это означает, что при $P = 1$ а. е. ≈ 300 Мбар модель завышает холодное давление в среднем на 20%. Заметим, что при $P = 0$ модель дает бесконечный объем атомной ячейки; в этой модели не существует холодного несжатого твердого тела, что является качественным недостатком модели.

Квантовые и обменные поправки. Для частичного устранения недостатков модели Томаса-Ферми были предложены квантовые и обменные поправки. Мы используем их в форме, предложенной Киржницем [16]. Эта форма удобна тем, что она сохраняет подобие по Z . Тем самым, расчеты остаются простыми и пригодными для любого вещества. Это позволяет строить быстродействующие программы для оперативных расчетов.

В этой модели все поправочные члены вынесены в отдельные уравнения.

Исправленный атомный потенциал $\tilde{U}(r)$ имеет вид:

$$\tilde{U}(r) = U(r) + \frac{\sqrt{2T}}{6\pi} \left[I'_{\frac{1}{2}} \left(\frac{U(r) + \mu}{T} \right) + DU(r) \right] - D\mu. \quad (3.15)$$

Поправка к потенциалу $DU(r)$ удовлетворяет линейной задаче на собственные значения для дифференциального уравнения второго порядка:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} [DU(r)] - \frac{4\sqrt{2T}}{\pi} I'_{\frac{1}{2}} \left(\frac{U(r) + \mu}{T} \right) DU(r) = \\ = \frac{4\sqrt{2T}}{\pi} \left\{ 7 \left[I'_{\frac{1}{2}} \left(\frac{U(r) + \mu}{T} \right) \right]^2 + I_{\frac{1}{2}} \left(\frac{U(r) + \mu}{T} \right) I''_{\frac{1}{2}} \left(\frac{U(r) + \mu}{T} \right) \right\}, \\ 0 \leq r < R, \end{aligned} \quad (3.16a)$$

$$rDU(r) \Big|_{r=0} = 0, \quad \frac{dDU(r)}{dr} \Big|_{r=R} = 0, \quad U(R) = 0, \quad (3.16b)$$

где роль собственного значения играет поправка к химическому потенциалу $D\mu$, определяемого при помощи третьего условия (3.16b). Однако $D\mu$ входит во все выражения аддитивно. Это позволяет решать для уравнения (3.16a) не задачу на собственные значения, а краевую задачу с двумя условиями из (3.16b). Решив ее, можно определить $D\mu$ из (3.15) и (3.16b):

$$D\mu = U(R) + \frac{\sqrt{2T}}{6\pi} \left[I'_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu}{T} \right) + DU(R) \right]. \quad (3.17)$$

Квантово-обменные поправки к квазиклассическим термодинамическим функциям выражаются при помощи поправки к потенциалу:

$$DP = \frac{T^2}{3\pi^3} \left[I_{\frac{1}{2}}\left(\frac{\mu}{T}\right) DU(R) + I_{\frac{1}{2}}\left(\frac{\mu}{T}\right) I'_{\frac{1}{2}}\left(\frac{\mu}{T}\right) + 6\mathcal{J}\left(\frac{\mu}{T}\right) \right], \quad (3.18a)$$

$$DE = \frac{\sqrt{2T}}{6\pi} Z DU(0) + \frac{4T^2}{3\pi^2} \int_0^R \left[\frac{1}{2} DU(r) I_{\frac{1}{2}}(\xi) + I_{\frac{1}{2}}(\xi) I'_{\frac{1}{2}}(\xi) + 6\mathcal{J}(\xi) \right] r^2 dr + DC(Z), \quad (3.18b)$$

$$DS = \frac{Z}{3\pi\sqrt{2T}} DU(0) + \frac{4T^2}{3\pi^2} \int_0^R \left[\frac{1}{2} DU(r) I_{\frac{1}{2}}(\xi) + 2I_{\frac{1}{2}}(\xi) I'_{\frac{1}{2}}(\xi) + 12\mathcal{J}(\xi) \right] r^2 dr, \quad (3.18c)$$

$$\xi(r) = \frac{U(r) + \mu}{T},$$

где $DC(Z)$ подбирается так, чтобы поправка к энергии невозбужденного изолированного атома обращалась в нуль, а $\mathcal{J}(x)$ есть интеграл от функции Ферми-Дирака:

$$\mathcal{J}(x) = \int_{-\infty}^x \left[I'_{\frac{1}{2}}(\tau) \right]^2 d\tau. \quad (3.19)$$

Поправки (3.18) суммируются с квазиклассическими термодинамическими функциями (3.12): $P_e = P + DP$, где P_e соответствует электронной компоненте в формуле (3.2).

В модели ТФП также имеется подобие по Z :

$$DU_{Z=1} = DU, \quad D\mu_{Z=1} = Z^{-\frac{2}{3}} D\mu, \\ DP_{Z=1} = Z^{-\frac{8}{3}} DP, \quad DE_{Z=1} = Z^{-\frac{5}{3}} DE, \quad DS_{Z=1} = Z^{-\frac{1}{3}} DS. \quad (3.20)$$

Следовательно, численный расчет таблиц квантово-обменных поправок в модели ТФП достаточно проводить только для $Z = 1$.

Заметим, что электронное давление с учетом поправки равно:

$$P_e = Z^{\frac{10}{3}} P_{Z=1} + Z^{\frac{8}{3}} DP_{Z=1} = Z^{\frac{10}{3}} \left(P + Z^{-1} + Z^{-\frac{2}{3}} DP_{Z=1} \right). \quad (3.21)$$

Отсюда видно, что для элементов с большим Z относительный вклад квантово-обменных поправок меньше, чем для легких элементов.

3.1.3. Ядерная компонента.

Идеальный газ ядер. В п. 3.1.1 отмечалось, что основная часть взаимодействия ячеек эффективно учитывается при расчете внутреннего состояния ячейки, благодаря постановке условия непрерывности и гладкости электронной плотности на границах ячеек. Остаточным взаимодействием ячеек между собой обычно пренебрегают, рассматривая газ ячеек как идеальный одноатомный газ. Его термодинамические функции равны:

$$F_{\text{я}} = -T \left[1 + \ln \left(g_0 V \left(\frac{MT}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \right) \right], \quad (3.22a)$$

$$P_{\text{я}} = \frac{T}{V}, \quad (3.22b)$$

$$E_{\text{я}} = \frac{3}{2}T, \quad (3.22c)$$

$$S_{\text{я}} = \frac{3}{2} \ln \left(\frac{MTV^{\frac{2}{3}}}{2\pi} \right) + \frac{5}{3}. \quad (3.22d)$$

Здесь M — масса ячейки, измеренная в электронных массах, $g_0 = 1$ — статистический вес основного состояния. Величины объема V , давления P , энергии E , энтропии S и свободной энергии F относятся к одной ячейке. Формулы (3.22) приводят к постоянной теплоемкости газа ячеек $C_v = 3/2$.

Эта модель активно использовалась до 1975 г., однако такое описание движения ячеек имеет недостаточную физическую точность. Действительно, когда либо температура вещества в несколько раз превышает критическую, соответствующую переходу из жидкости в газ, либо плотность меньше критической на 2-3 порядка, вещество находится в газовой фазе, и газ ячеек действительно с хорошей точностью можно рассматривать как идеальный одноатомный. Но если вещество является смесью жидкой и газовой фаз, или его состояние близко к линии этого фазового перехода, то приближение идеальным газом неверно. Тем более это справедливо для сильно сжатого слабо нагретого вещества.

Первым недостатком модели является неправильное значение теплоемкости $C_v = 3/2$ для конденсированного вещества. В конденсированном веществе движение ячеек имеет характер колебаний около положений равновесия, чему соответствует теплоемкость $C_v \approx 3$ (если температура заметно выше дебаевской). Вторым формальным недостатком модели в том, что при $T \rightarrow 0$ энтропия вместо того, чтобы обратиться в 0, становится отрицательной. Третьим недостатком является то, что ударные адиабаты, рассчитываемые по модели идеального газа ядер идут несколько мягче экспериментальных кривых (то есть вещество на них сильнее сжимается).

Поэтому были развиты модели, позволяющие качественно описать испарение и даже плавление вещества [63, 64, 65, 3], а также учитывающие произвольное распределение электронов [37]. В [66] была предложена модель неточечных ионов — более искусственный полуэмпирический подход, приближающий теоретические ударные

адиабаты к экспериментальным данным. Наиболее точной и подходящей для широкого диапазона расчетов представляется модель осциллирующих ядер, предложенная в [21].

Модель осциллирующих ядер. Эта модель основана на том, что электронная плотность при удалении от ядра в малой его окрестности убывает быстро, а в остальной части атомной ячейки — медленно. Это позволяет условно разбить электроны на связанные и свободные, а плотностью свободных электронов считать величину $\rho_e(R)$. Количество свободных электронов, называемое степенью ионизации z , равно:

$$z = \rho_e(R)V. \quad (3.23)$$

Связанные электроны вместе с ядром образуют ионный остов, движущийся как единое целое. Эти остовы в поле свободных электронов удерживаются электростатическими силами около центров атомных ячеек. Тепловое движение остовов состоит в колебаниях около положений равновесия. Энергия и давление, связанные с этими колебаниями, представляют вклад ядер в термодинамику. Пока температура мала, колебания остовов невелики и происходят со средней частотой

$$\omega = 2z\sqrt{\pi/(3MV)}. \quad (3.24)$$

Этот случай соответствует конденсированному состоянию. При увеличении температуры амплитуда колебаний начинает превышать радиус ячейки. Это означает, что ядра могут переходить в другие ячейки и двигаться по всему объему. Следовательно, модель описывает переход конденсированного вещества в газ. В модели также выбран способ учета квантовых эффектов [63], при котором колебания ядер считаются гармоническими. Таким образом само ядро является квантовым осциллятором. В итоге свободная энергия в МОЯ записывается как:

$$F_{\text{я}} = 3T \ln(1 - e^{-\frac{\omega}{T}}) - \frac{3}{2}T \ln(1 - e^{-\frac{\theta}{T}}), \quad (3.25a)$$

$$\omega = \frac{2z\sqrt{\pi}}{\sqrt{3MV}}, \quad (3.25b)$$

$$\theta = \frac{2z^2}{3V^{\frac{1}{3}}}. \quad (3.25c)$$

Первое слагаемое в (3.25) описывает конденсированное вещество, а второе — критический переход жидкости в газ. Соответственно ω имеет смысл дебаевской температуры, а θ — температуры испарения. Для плотного вещества $\omega \ll \theta$.

Другие термодинамические функции получаются дифференцированием (3.25) по

T или V с учетом зависимости степени ионизации $z = z(T, V)$:

$$P_{\text{я}} = -\frac{\partial F_{\text{я}}}{\partial V} = \frac{T}{V} \left[\frac{3\omega}{2T} \frac{1 - 2\frac{\partial \ln z}{\partial \ln V}}{e^{\frac{\omega}{T}} - 1} - \frac{\theta}{2T} \frac{1 - 6\frac{\partial \ln z}{\partial \ln V}}{e^{\frac{\theta}{T}} - 1} \right], \quad (3.26a)$$

$$E_{\text{я}} = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F_{\text{я}}}{T} \right) = \frac{3}{2} T \left[\frac{2\omega}{T} \frac{1 - \frac{\partial \ln z}{\partial \ln T}}{e^{\frac{\omega}{T}} - 1} - \frac{\theta}{T} \frac{1 - 2\frac{\partial \ln z}{\partial \ln T}}{e^{\frac{\theta}{T}} - 1} \right], \quad (3.26b)$$

$$S_{\text{я}} = \frac{F_{\text{я}} - E_{\text{я}}}{T}. \quad (3.26c)$$

При этом в [39] зависимость $z(T, V)$ рассчитывалась по полным температурным таблицам модели ТФП. В этой модели $z(T, V)$ есть монотонно возрастающая функция температуры T . В области низких температур $(\partial z/\partial T) \sim T$ очень мало. В области испарения $z(T, V)$ начинает быстро расти, в дальнейшем достигая величины Z . Соответственно при этом $\partial z/\partial T$ сначала быстро возрастает, достигает максимума, и далее становится отрицательным. Это может приводить к нефизичному поведению формул (3.26) в области испарения и более высоких температур $T > \theta$.

Модификация МОЯ. Считать ядра осциллирующими можно только до тех пор, пока амплитуды их колебаний не превышают R . Но в этой области $z(T, V)$ отличается от значения $z(0, V)$ на малую величину $O(T^2)$. Таким отличием можно пренебречь, поэтому в данной работе предложена следующая модификация модели осциллирующих ядер.

Будем для расчета осцилляций использовать значение ионизации z , соответствующее холодной кривой:

$$z_0(V) \equiv z(0, V). \quad (3.27)$$

Подставляя (3.27) в формулы (3.25), (3.26) и учитывая $\partial z_0(V)/\partial T = 0$, получим следующее выражение термодинамических функций модифицированной модели осциллирующих ядер:

$$F_{\text{я}} = 3T \ln \left(1 - e^{-\frac{\omega}{T}} \right) - \frac{3}{2} T \ln \left(1 - e^{-\frac{\theta}{T}} \right), \quad (3.28a)$$

$$P_{\text{я}} = \frac{T}{V} \left[\frac{3\omega}{2T} \frac{1 - 2\frac{\partial \ln z_0}{\partial \ln V}}{e^{\frac{\omega}{T}} - 1} - \frac{\theta}{2T} \frac{1 - 6\frac{\partial \ln z_0}{\partial \ln V}}{e^{\frac{\theta}{T}} - 1} \right], \quad (3.28b)$$

$$E_{\text{я}} = \frac{3}{2} T \left[\frac{2\omega/T}{e^{\frac{\omega}{T}} - 1} - \frac{\theta/T}{e^{\frac{\theta}{T}} - 1} \right], \quad (3.28c)$$

$$S_{\text{я}} = \frac{F_{\text{я}} - E_{\text{я}}}{T}, \quad (3.28d)$$

$$\omega = \frac{2z_0\sqrt{\pi}}{\sqrt{3MV}}, \quad (3.28e)$$

$$\theta = \frac{2z_0^2}{3V^{\frac{1}{3}}}. \quad (3.28f)$$

Формально изменение произошло только в формуле для энергии $E_{\text{я}}$, но из-за этого фактически изменилась величина энтропии $S_{\text{я}}$. Кроме того, все термодинамические

величины изменились еще потому, что при высоких температурах в них поставляется не $z(T, V)$, а взятое с холодной кривой значение $z_0(V)$.

Очень существенно, что модификация модели МОЯ не нарушило ее термодинамическую согласованность. Изменился только модельный выбор ионного заряда. Все термодинамические соотношения (1.1) с учетом этого заряда выполняются строго.

Проанализируем поведение построенных нами термодинамических функций (3.28). Учтем, что масса ядра $M \approx 1822.887A$, где A — атомный вес. Тогда из (3.28), $\theta/\omega \approx 14zV^{1/6}A^{1/2}$. С учетом реального поведения $z_0(V)$ в модели ТФП, можно оценить, что $\theta/\omega > 1$ для всех веществ во всем физически интересном диапазоне объемов. Кроме того, всегда $\partial z_0/\partial V < 0$. Тогда выделяются характерные температурные диапазоны поведения термодинамических функций.

- Низкие температуры. При $T < \omega$ происходит квантовое «вымораживание» колебаний. Все термодинамические функции (3.28) стремятся к нулю примерно как $\exp(-w/T)$. Этот закон не соответствует дебаевскому, но для многих приложений такое отличие несущественно, так как сохраняется главное свойство — стремление энтропии к нулю при $T \rightarrow 0$.
- Классическая жидкость соответствует промежуточным температурам $\omega \ll T \ll \theta$. При этом $C_v = 3$, $E_{\text{я}} \approx 3T$, $P_{\text{я}} \approx (3T/V) \left(\frac{1}{2} - \frac{\partial \ln z}{\partial \ln V} \right)$.
- Область испарения $T \sim \theta$. При этом происходит переход от конденсированного состояния к газовому. Этот переход является не скачкообразным, а плавным, что и должно иметь место при плотностях больше критической.
- Газовая область. При достаточно высоких температурах $T \gg \theta$ формулы (3.28) переходят в выражения (3.22) для одноатомного идеального газа с теплоемкостью $C_v = 3/2$.

Из (3.28) легко показать, что $P_{\text{я}}$, $E_{\text{я}}$ и $S_{\text{я}}$ являются положительными монотонно возрастающими функциями температуры T .

3.2 Функции Ферми-Дирака

Специальной функцией Ферми-Дирака индекса k аргумента x называется

$$I_k(x) = \int_0^{\infty} \frac{y^k dy}{1 + \exp(y - x)}. \quad (3.29)$$

Функции (3.29) играют важную роль в ряде задач квантовой механики. Для системы фермионов важны функции полуцелого индекса, а для системы бозонов — функции целого индекса. Но в математике рассматривают функции для произвольного индекса.

В модели Томаса-Ферми с поправками используются функции полуцелых индексов $k = -1/2, 1/2, 3/2$, а также их комбинации, производные и интегралы. Расчеты

необходимо выполнять с гораздо лучшей точностью, чем требовалось в предшествующие годы. В данном разделе собираются и строятся формулы, обеспечивающие относительную точность 10^{-14} .

3.2.1. Свойства. Приведем важные для дальнейшего рассмотрения свойства функций (3.29) (их подробные доказательства приводятся, например, в [67]):

1. функция $I_k(x)$ определена для всех значений x в интервале $-\infty < x < \infty$ и для всех значений k в интервале $-1 < k < \infty$;
2. $I_k(x)$ — монотонно возрастающая функция x в интервале $-\infty < x < \infty$;
3. $I_k(x)$ — монотонно возрастающая функция k в интервале $-1 < k < \infty$;
4. $I_0(x) = \ln(e^x + 1)$;
5. Для производной выполняется соотношение:

$$I'_k(x) = kI_{k-1}(x); \quad (3.30)$$

оно позволяет формально доопределить функции Ферми-Дирака для любых нецелых $k < -1$.

6. Для $x > 0$, $k > -1$ существует соотношение с асимптотически сходящимся рядом [68]:

$$I_k(x) = \cos(\pi k)I_k(-x) + \frac{2}{\pi} \sum_{\nu=0}^{\infty} \tau_{2\nu} \sin(\pi(2\nu - k - 1)) \Gamma(2\nu - k - 1) x^{k+1-2\nu}, \quad (3.31)$$

где $\tau_0 = 1/2$, $\tau_n = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(-1)^{p+1}}{p^n} = (1 - 2^{1-n})\zeta(n)$ и $\zeta(n)$ — дзета-функция Римана.

Асимптотики. При $x \rightarrow \infty$ функции (3.29) разлагаются в асимптотически сходящийся ряд [69]

$$I_k(x) \sim \frac{x^{k+1}}{k+1} + 2 \sum_s x^{k-s} \eta(s+1) \prod_{i=0}^{s-1} (k-i), \quad (3.32a)$$

$$s = 1, 3, 5, \dots, \min\{i \mid k < i, i = 2j - 1, j \in \mathbb{N}\}. \quad (3.32b)$$

Здесь $\eta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n^s}$ — функция Дирихле.

$$I_k(x) = \frac{x^{k+1}}{k+1} \left[1 + \sum_{r=1}^{\infty} 2C_{2r} \left(\prod_{k=n-2r+2}^{n+1} k \right) x^{-2r} \right]. \quad (3.33)$$

Здесь коэффициенты $C_{2j} = \sum_{i=1}^{\infty} (-1)^{i+1} j^{-2j} = (1 - 2^{-2j+1})\zeta(2j)$, где ζ — дзета-функция Римана: $\zeta(s) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i^s}$.

При $x < 0$ функции (3.29) разлагаются в абсолютно сходящийся ряд [70]

$$I_k(x) = \Gamma(k+1)e^x \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \frac{e^{nx}}{n^{k+1}}. \quad (3.34)$$

Поскольку ряд (3.34) абсолютно сходящийся и знакопеременный, то ошибка конечной суммы ряда не превышает первого отброшенного члена. Для асимптотически сходящегося ряда (3.32) также существуют оценки погрешности и оптимального числа членов $N(x)$, при превышении которого погрешность с увеличением N начинает возрастать. Почленное дифференцирование рядов (3.32), (3.34) удовлетворяет соотношению (3.30).

3.2.2. Вычисление специальных функций. Методам вычисления функции Ферми-Дирака (3.29) посвящены работы [71, 69, 72, 70, 73, 74, 75]. Особенно важными в данной работе являются функции полуцелых индексов $I_{-\frac{1}{2}}(x)$, $I_{\frac{1}{2}}(x)$, $I_{\frac{3}{2}}(x)$, вторая производная $I_{\frac{1}{2}}''(x)$, а также редко встречающаяся нелинейная комбинация $\mathcal{J}(x)$ из (3.19):

$$\mathcal{J}(x) = \int_{-\infty}^x \left[I_{\frac{1}{2}}'(\tau) \right]^2 d\tau. \quad (3.35)$$

Для практического применения требуется с высокой точностью вычислять эти функции в диапазоне аргумента $-\infty < x < +\infty$. Специальные вычислительные методы были разработаны в работе автора [76].

Функции полуцелых индексов. Для их вычисления составляют подробные таблицы с помощью численного интегрирования. В диапазоне $x \in (-\infty; -1]$ используют ряд (3.34). Он обеспечивает достаточную точность при небольшом количестве членов. В диапазоне $x \in [30; +\infty)$ аналогично используется ряд (3.32).

На отрезке $[-1; 30]$ функцию (3.29) находят численным интегрированием. Для обеспечения высокой точности приходится выбирать очень малый шаг интегрирования. Объем полученных таблиц оказывается огромным. Поэтому такие таблицы не публикуют и непосредственно не используют. Их заменяют какими-то аппроксимациями.

Подобрать единую аппроксимацию во всем диапазоне трудно. В [77] найдено удачное разбиение $[-1; 30]$ на 4 отрезка $[-1; 1) \cup [1; 4) \cup [4; 10) \cup [10; 30)$, на каждом из которых построены прецизионные аппроксимации многочленами Чебышева первого рода:

$$P(t) = \frac{1}{2}c_0T_0(t) + c_1T_1(t) + c_2T_2(t) + \dots \quad (3.36a)$$

$$T_n(t) = \cos(n \arccos t), \quad -1 \leq t \leq +1. \quad (3.36b)$$

Вычислять многочлены Чебышева следует именно по формуле (3.36b), используя подпрограммы тригонометрических функций; это самый надежный способ, устойчивый относительно ошибок округления даже при больших n , $n \sim 100$ и более.

Здесь коэффициенты c_i полинома определяют, используя узловые точки много-

членов (то есть систему точек, на которой многочлены Чебышева ортогональны):

$$c_i = \frac{\sum_{j=1}^N f(x_j) T_i(x_j)}{\sum_{j=1}^N T_i^2(x_j)}, \quad (3.37a)$$

$$x_j = \cos\left(\frac{2j-1}{2N}\pi\right), \quad (3.37b)$$

$$j = 1, 2, \dots, N. \quad (3.37c)$$

На каждом из отрезков используются свои разложения P_n и делается масштабирующая замена переменных:

$$P(x) = \begin{cases} P_1(x), & x \in [-1; 1), \\ P_2(t), & t = \frac{2}{3}(x-1) - 1, x \in [1; 4), \\ P_3(t), & t = \frac{1}{3}(x-4) - 1, x \in [4; 10), \\ \sqrt{x}P_4(t), & t = 0.1x - 2, x \in [10; 30). \end{cases} \quad (3.38)$$

В итоге для вычисления значений функций Ферми-Дирака $I_{-\frac{1}{2}}(x)$, $I_{\frac{1}{2}}(x)$, $I_{\frac{3}{2}}(x)$ с высокой точностью на интервале $-\infty < x < \infty$ используется следующее выражение:

$$I_k(x) = \begin{cases} e^x \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{e^{nx}}{(n+1)^{k+1}}, & x \leq -1; \\ P(x), & -1 < x \leq 30; \\ \frac{x^{k+1}}{k+1} \left[1 + \sum_{r=1}^{\infty} 2C_{2r} \left(\prod_{k=n-2r+2}^{n+1} k \right) x^{-2r} \right], & x > 30. \end{cases} \quad (3.39)$$

Относительная погрешность вычислений функций Ферми-Дирака (3.29) по формуле (3.39) для $k = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ не превосходит 10^{-14} . Это полностью отвечает требованиям к расчетам).

Функция $I_{\frac{1}{2}}''(x)$. Используя свойство (3.30), найдем $I_{\frac{1}{2}}''(x)$ через функцию $I_{-\frac{1}{2}}'(x)$. Ее можно считать по разностным формулам вычисления производной.

Практически оказалось удобным использовать симметричную первую разность, вычисленную в данной точке несколько раз с разными шагами, а для получения высокого порядка точности применить уточнение по Ричардсону. Будем использовать убывающие вдвое шаги. Так как погрешность симметричной разности разлагается только по четным степеням шага h , получим

$$I_{\frac{1}{2}}''(x) = \frac{1}{2} I_{-\frac{1}{2}}'(x) = \frac{1}{11340h} \left\{ -I_{-\frac{1}{2}}(x+h) + I_{-\frac{1}{2}}(x-h) + \right. \\ + 168I_{-\frac{1}{2}}(x+h/2) - 168I_{-\frac{1}{2}}(x-h/2) - \\ - 5376I_{-\frac{1}{2}}(x+h/4) + 5376I_{-\frac{1}{2}}(x-h/4) + \\ \left. + 32768I_{-\frac{1}{2}}(x+h/8) - 32768I_{-\frac{1}{2}}(x-h/8) \right\}. \quad (3.40)$$

В расчетах использовалась формула (3.40) с $h = 0.14$. Это обеспечивало потерю точности не более порядка от точности вычислений значений $I_{-\frac{1}{2}}(x)$, которая составляет 10^{-14} .

Интегральная функция Ферми-Дирака. Самостоятельную задачу представляет вычисление функции (3.35). В используемой модели термодинамики ТФП (см. р. 3.1) она является обобщением поправки Слэтера для холодного атома. В [63] был предложен метод вычислений этой функции, дающий погрешность 10^{-6} , что не соответствует современным требованиям. Поэтому в данной работе разработан альтернативный подход [76] к прецизионному вычислению функции (3.19). Он состоит из двух этапов: аналитического возведения в квадрат подынтегрального выражения и его аналитического интегрирования.

Возведение в квадрат. Для вычисления (3.35) необходимо знать аналитическое приближение для функции $I_{-\frac{1}{2}}^2(x)$. Явные аппроксимации $I_{-\frac{1}{2}}(x)$ приведены выше. Остается возвести их в квадрат. Для этой операции используется стандартный метод перемножения двух рядов. В результате для ряда (3.34) получается следующая левая асимптотика:

$$I_{-\frac{1}{2}}^2(x) = e^{2x} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n b_n e^{nx}, \quad x < 0, \quad (3.41)$$

где

$$b_n = \sum_{k=0}^n [(n+1-k)(k+1)]^{-1/2}. \quad (3.42)$$

Абсолютная сходимость ряда (3.41) следует из абсолютной сходимости (3.34).

Аналогично для (3.33) будем иметь выражение:

$$I_{-\frac{1}{2}}^2(x) = 4x \sum_{i=0}^{\infty} x^{-2i} d_i, \quad x > 30, \quad (3.43a)$$

$$d_i = 4 \sum_{j=0}^i \left(\prod_{k=3/2-2j}^{1/2} k \right) \left(\prod_{k=3/2-2(i-j)}^{1/2} k \right) f_{ij}, \quad (3.43b)$$

$$f_{ij} = (1 - 2^{-2j+1}) (1 - 2^{-2(i-j)+1}) \zeta(2j) \zeta(2(i-j)), \quad (3.43c)$$

где ζ — дзета-функция Римана.

Поскольку исходный ряд (3.33) имеет асимптотическую сходимость, полученный ряд (3.43) также будет иметь асимптотическую сходимость. Количественная зависимость точности от числа членов ряда после возведения в квадрат может отличаться от исходных значений. В результате возведения ряда в квадрат может наблюдаться ухудшение сходимости. Этот вопрос будет исследован далее.

На промежуточном отрезке $x \in [-1; 30]$, где функция (3.29) представлена полиномами, эти полиномы просто были возведены в квадрат. При этом локальная относительная погрешность в норме могла возрасти не более чем в 2 раза.

Интегрирование. Аппроксимация для интегральной функции Ферми-Дирака (3.35) получается точным интегрированием приведенных выше аппроксимаций (3.41), (3.33) и возведенных в квадрат полиномов.

С учетом того, что $\mathcal{J}(-\infty) = 0$, для $x < -1$ получим

$$\mathcal{J}(x) = \int_{-\infty}^x [I_{-1/2}(\xi)]^2 d\xi = e^{2x} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{b_n}{n+2} e^x, \quad (3.44)$$

где b_n определяется из (3.42).

Ряд (3.44) позволяет вычислить $\mathcal{J}(-1)$. Правее этой точки интегрирование дает

$$\mathcal{J}(x) = \mathcal{J}(-1) + \frac{1}{2} \int_{-1}^x [I_{-1/2}(\xi)]^2 d\xi. \quad (3.45)$$

Из него можно получить значение на интервале $x \in [-1; 1]$:

$$\mathcal{J}(x) = \mathcal{J}(-1) + \int_{-1}^x P_1^2(t) dt, \quad x \in [-1; 1], \quad (3.46)$$

а также на правом конце очередного отрезка $\mathcal{J}(1)$. Аналогичным образом находится аналитическое представление $\mathcal{J}(x)$ на оставшихся отрезках:

$$\mathcal{J}(x) = \mathcal{J}(1) + \frac{3}{2} \int_{-1}^{\xi} P_2^2(t) dt, \quad \xi = \frac{2}{3}(x-1) - 1, \quad x \in [1; 4], \quad (3.47)$$

$$\mathcal{J}(x) = \mathcal{J}(4) + 3 \int_{-1}^{\xi} P_3^2(t) dt, \quad \xi = \frac{1}{3}(x-4) - 1, \quad x \in [4; 10], \quad (3.48)$$

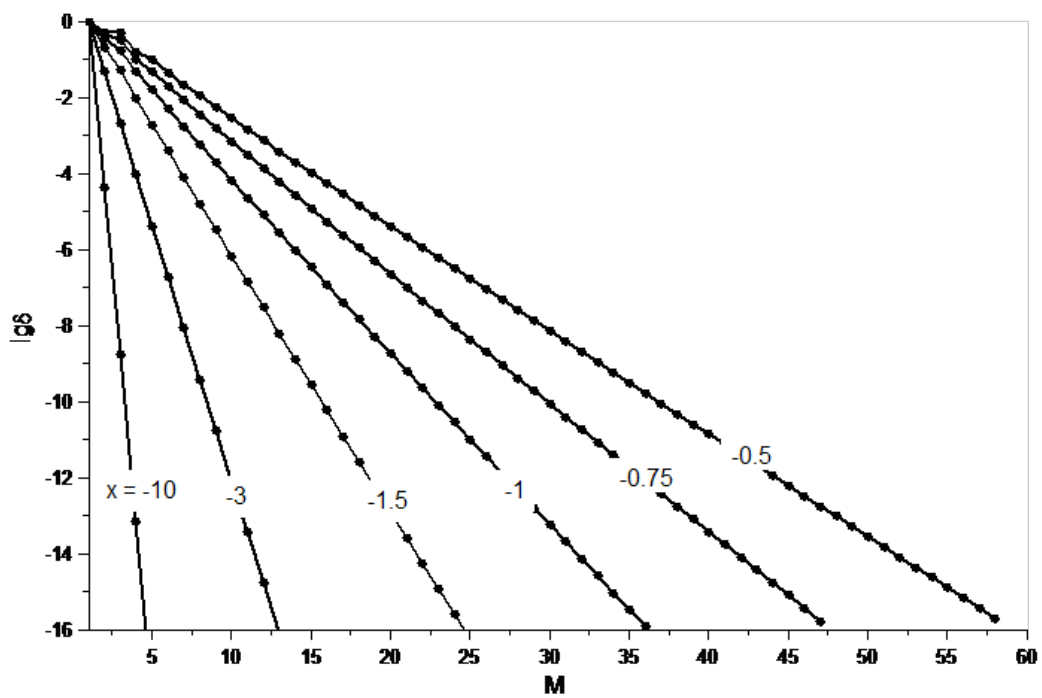
$$\mathcal{J}(x) = \mathcal{J}(10) + 100 \int_{-1}^{\xi} t P_4^2(t) dt + 200 \int_{-1}^{\xi} P_4^2(t) dt, \quad \xi = 0.1x - 2, \quad x \in [10; 30]. \quad (3.49)$$

Операция интегрирования многочленов представляет собой явное нахождение первообразной.

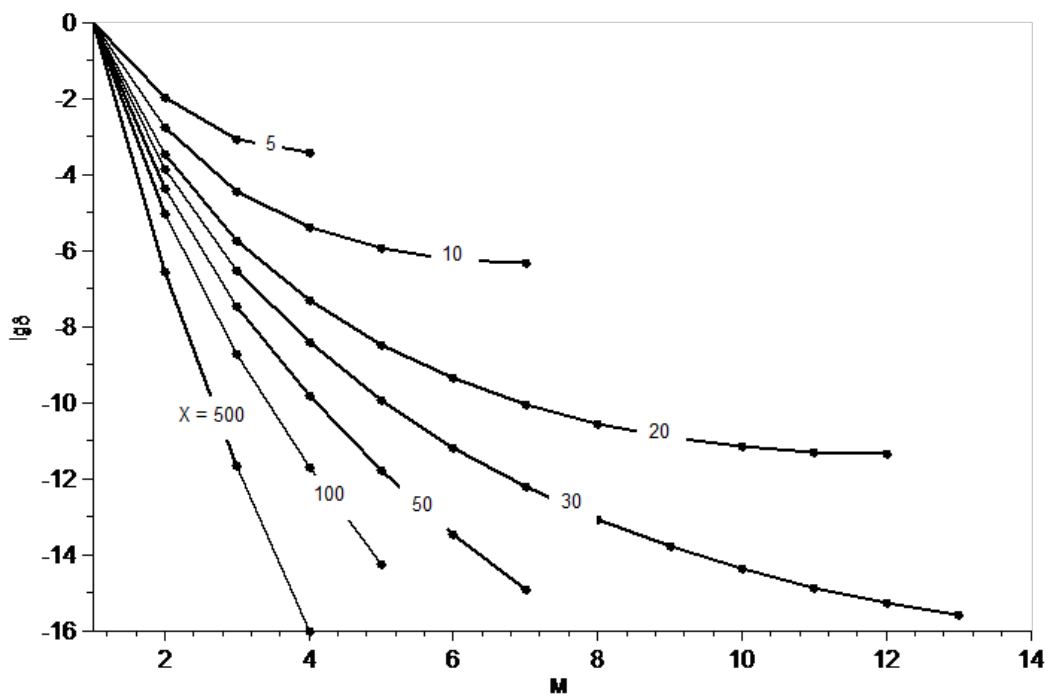
Для $x > 30$ имеем

$$\mathcal{J}(x) = \mathcal{J}(30) + 4 \int_{30}^x (\xi d_0 + \xi^{-1} d_1 + \xi^{-3} d_2 + \dots + \xi^{1-2r} d_r) d\xi. \quad (3.50)$$

В результате интегрирования сходимость асимптотик (3.44) и (3.50) могла улучшиться. Результаты анализа сходимости этих асимптотик приведены на рис. 3.1. Видно, что скорость сходимости незначительно выросла. Это является естественным следствием улучшения сходимости рядов при интегрировании.



(a) Зависимость относительной погрешности формулы (3.44) от числа членов M



(b) Зависимость относительной погрешности формулы (3.50) от числа членов M

Рис. 3.1. Относительная погрешность вычислений функции (3.35) по асимптотикам. На каждой кривой написано соответствующее значение x .

Оценка погрешности. Для оценки погрешности вычисления $\mathcal{J}(x)$ воспользуемся формулой:

$$I_{-\frac{1}{2}}(x) = \tilde{I}_{-\frac{1}{2}}(x) \pm \Delta(x), \quad (3.51)$$

где $\Delta(x)$ — абсолютная погрешность, а $\tilde{I}_{-\frac{1}{2}}(x)$ — значение, полученное численным методом. В результате

$$\mathcal{J}(x) = \int_{-\infty}^x \left(\tilde{I}_{-\frac{1}{2}}(\xi) \pm \Delta(\xi) \right)^2 d\xi. \quad (3.52)$$

Отсюда следует

$$\mathcal{J}(x) = \tilde{\mathcal{J}}(x) \pm 2 \underbrace{\int_{-\infty}^x \tilde{I}_{-\frac{1}{2}}(\xi) \Delta(\xi) d\xi + \int_{-\infty}^x \Delta^2(\xi) d\xi}_{D(x)}. \quad (3.53)$$

В (3.53) функция $D(x)$ и есть абсолютная погрешность вычисления функции $\mathcal{J}(x)$. Исследуем отдельно слагаемые, дающие вклад в погрешность $D(x)$:

$$D(x) = D_1(x) + D_2(x), \quad (3.54a)$$

$$D_1(x) = 2 \int_{-\infty}^x \tilde{I}_{-\frac{1}{2}}(\xi) \Delta(\xi) d\xi, \quad (3.54b)$$

$$D_2(x) = \int_{-\infty}^x \Delta^2(\xi) d\xi. \quad (3.54c)$$

Можно сделать следующие мажорантные оценки:

$$\Delta(\xi) \leq \hat{\Delta}(\xi) = \begin{cases} 3^{-15} e^\xi, & \xi < -1; \\ 5^{-15}, & \xi < 30; \\ 4^{-13} \sqrt{\xi}, & \xi \geq 30. \end{cases} \quad (3.55)$$

Ввиду (3.55),

$$D_2(x) = \begin{cases} 3^{-15} e^x, & x < -1; \\ D_2(-1) + 5^{-15}(x+1), & x < 30; \\ D_2(30) + \frac{8^{-13}}{3}(x^{3/2} - 30^{3/2}), & x \geq 30. \end{cases} \quad (3.56)$$

Для получения мажорантной оценки $D_1(x)$, найдем более грубое аналитическое приближение для функции $\mathcal{J}(x)$, но в более простом виде:

$$I_{-\frac{1}{2}}(\xi) \leq \hat{I}_{-\frac{1}{2}}(\xi) = \begin{cases} \sqrt{\pi} e^\xi, & \xi \leq -1; \\ 0.6496\xi + 1.1708, & -1 < \xi \leq 1; \\ 2\sqrt{\xi}, & \xi > 1. \end{cases} \quad (3.57)$$

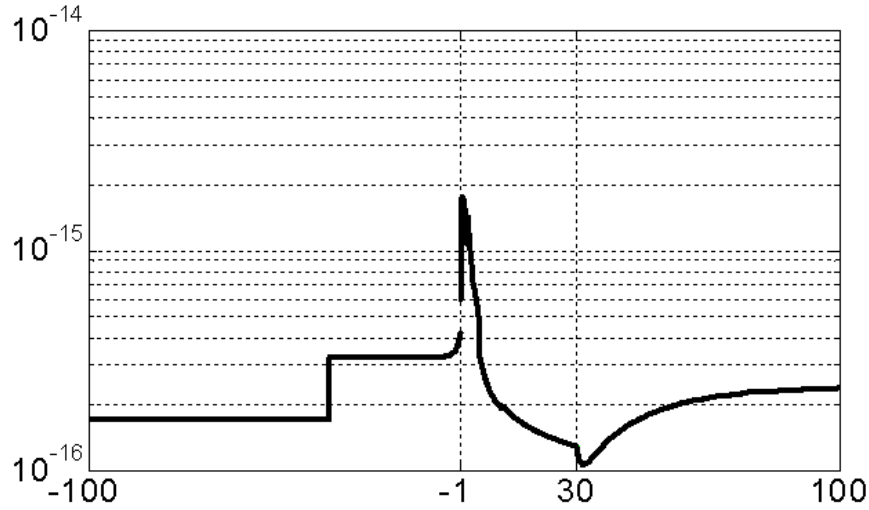


Рис. 3.2. Мажорантная оценка относительной погрешности метода расчета функции $\mathcal{J}(x)$.

Тогда $D_1(x)$ будет выглядеть следующим образом:

$$D_1(x) = \begin{cases} 15^{-16} \sqrt{\pi} e^{2x}, & x \leq -1; \\ D_1(-1) + 5^{-15} (0.3248(x+1)^2 + 1.1708(x+1)), & -1 < x \leq 1; \\ D_1(1) + 10^{-15} \frac{2}{3} (x-1)^{3/2}, & 1 < x \leq 30; \\ D_1(30) + 8^{-13} \frac{2}{3} (x-30)^{3/2}, & x > 30. \end{cases} \quad (3.58)$$

На рис.3.2 построена мажорантная оценка погрешности вычисления функции $\mathcal{J}(x)$. На нем в окрестности $x = 1$ погрешность не превосходит 10^{-14} , а на остальной действительной оси на порядок меньше.

Таким образом, был разработан алгоритм более совершенный по точности, чем предлагаемые в предыдущих работах. Скорость работы алгоритма весьма высока, так как в нем не используются традиционные численные методы интегрирования (итеративные и сеточные методы). Алгоритм значительно повышает точность вычисления специальной функции $\mathcal{J}(x)$. Это позволяет использовать его для численного решения уравнений термодинамики модели ТФП.

Реализация. Разработанные алгоритмы для вычисления специальных функций (3.29),(3.40) и (3.35) были реализованы на языке C++. Они распространяются как отдельный динамически подключаемый модуль: библиотека с экспортируемыми методами. Интерфейс библиотеки описан в п. 6.2.4;

3.3 Численное решение уравнений модели ТФП

3.3.1. Требование к расчетам. Для физических приложений необходимо иметь подробные расчеты термодинамических функций. Данный раздел посвящен расчету электронных термодинамических функций по модели Томаса-Ферми с квантовой и обменной поправками. Их значения для требуемых параметров T и V можно получить, решая краевые задачи (3.11), (3.16а). Для расчета вклада ядер используются выражения МОЯ (3.25), (3.26). Сформулируем требования по точности к этим расчетам, а также допустимый диапазон изменения аргументов.

Диапазоны аргументов. Расчеты должны перекрывать широкий диапазон значений объемов V (от тысячекратно сжатых твердых тел до тысячекратно разреженных газов) и температур T (от абсолютного нуля до звездных). Минимальная температура определяется тем, чтобы конденсированное вещество было жидким. Для всех веществ (кроме самых тугоплавких) достаточно положить $T_{min} \approx 0.2 \text{ эВ}$. При высоких температурах точность модели определяется релятивистскими эффектами. Их влияние пропорционально отношению тепловой энергии наружных электронов $(3/2)T$ к массе покоя электрона, которая равна $\approx 500 \text{ КэВ}$. Если взять $T_{max} \approx 25 \text{ КэВ}$, то релятивистская поправка к энергии составит 3%. Заметно более высокие температуры рассчитывать уже нецелесообразно.

Вещества при нормальной плотности имеют объем атомной ячейки примерно ~ 100 а. е.. Поэтому достаточно разреженным газам будет соответствовать объем $V_{max} \sim 10^6$ а. е.; при меньшей плотности (больших V) модель ТФП заведомо недостаточно точна, и следует переходить на модель Саха. Сверхсжатым можно считать вещество при $V_{min} \sim 10^{-3}$ а. е.. При дальнейшем увеличении сжатия кинетическая энергия вырожденных электронов при этом настолько велика, что также необходимо учитывать релятивистские поправки.

Эти соотношения должны выполняться для любого элемента с атомным номером Z , который в пределах $1 \leq Z \lesssim 100$. Поэтому для универсальных таблиц расчеты следует производить в следующих пределах (в атомных единицах):

$$10^{-4} \leq V_{\text{авт}} = ZV \leq 10^{13}, \quad (3.59a)$$

$$10^{-5} \leq T_{\text{авт}} = Z^{-4/3}T \leq 10^3. \quad (3.59b)$$

Кроме того, для единожды вычисленных значений и построения графиков, удобно иметь интерполяционную формулу для каждой термодинамической величины. Поэтому необходимо также рассчитать таблицу значений на прямоугольной сетке в заданных диапазонах (3.59). Целесообразно, чтобы узлы сетки были распределены равномерно в переменных $\lg T$, $\lg V$, поскольку в логарифмических переменных графики всех термодинамических функций имеют небольшую кривизну. Интервалы между узлами следует выбрать не слишком малыми, чтобы объем таблиц был приемлем по размеру, но и не слишком большими, чтобы интерполяция функций на

промежуточные значения между узлами обеспечивала бы требуемую точность, а при решении численной задачи методом Ньютона полученные расчеты можно было бы использовать в качестве нулевого приближения расчетов в соседнем узле. Для этого необходимо брать шаги сетки не менее чем $\Delta \lg T = 0.1$ и $\Delta \lg V = 0.1$, но для многих применений (таких, как расчеты ударных адиабат) приходится брать шаги в 2 раза меньше.

Быстродействие. Сказанное означает, что необходим расчет не менее 14000 узлов таблицы. Это предъявляет жесткие требования к быстродействию алгоритма. Разрабатываемая методика должна позволять вычислять значения электронных термодинамических функций при заданных параметрах T , V за доли секунды на процессоре класса Intel(R) Core(TM) i7 CPU @ 2.9 GHz.

Необходимая точность. Хотя физическая точность модели ТФП сравнительно невысока, математическая точность расчетов должна быть существенно выше. Это необходимо потому, что поправки к квазиклассическим функциям обычно имеют знаки, противоположные знакам самих функций, и при их сложении происходит потеря точности.

В работе Лэттера [10] строился специальный численный метод, комбинирующий формулу Симпсона и метод стрельбы. Точность расчетов была невелика и давала 3-4 верных знака.

В [63] уравнения были преобразованы таким образом, что решалась задача Коши методом стрельбы. Это позволило повысить точность примерно на два порядка (за исключением некоторых диапазонов значений T и V).

Особое требование к точности предъявляет расчет тепловых членов при высоких плотностях и низких температурах. Тепловые члены получаются вычитанием холодной кривой из расчетов для горячего вещества. В модели Томаса-Ферми была развита даже специальная процедура [78, 79] нахождения тепловых членов $O(T^2)$.

В предыдущих работах [63] не удалось провести прямые расчеты в этой области, и проводилось искусственное сглаживание ошибок округления. Чтобы избежать этой неестественной процедуры, необходима очень высокая точность расчета в каждой точке. Поэтому в данной работе требуемый уровень относительной точности вычисления конечных значений термодинамических функций составляет 10^{-14} .

3.3.2. Преобразование уравнений. Запишем полную систему уравнений модели Томаса-Ферми с квантовой и обменной поправками (ТФП), описанной в р. 3.1, которую необходимо интегрировать для нахождения термодинамических функций:

$$0 \leq r < R. \quad (3.60a)$$

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} [rU(r)] = \frac{4\sqrt{2}}{\pi} T^{\frac{3}{2}} I_{\frac{1}{2}} \left(\frac{U(r) + \mu}{T} \right),$$

$$rU(r)\Big|_{r=0} = Z, \quad U(R) = 0, \quad \frac{dU}{dr}\Big|_{r=R} = 0, \quad (3.60b)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} [rDU(r)] - \frac{4\sqrt{2T}}{\pi} I'_{\frac{1}{2}} \left(\frac{U(r) + \mu}{T} \right) DU(r) = \\ & = \frac{4\sqrt{2T}}{\pi} \left\{ 7 \left[I'_{\frac{1}{2}} \left(\frac{U(r) + \mu}{T} \right) \right]^2 + I_{\frac{1}{2}} \left(\frac{U(r) + \mu}{T} \right) I''_{\frac{1}{2}} \left(\frac{U(r) + \mu}{T} \right) \right\}, \end{aligned}$$

$$rDU(r)\Big|_{r=0} = 0, \quad \frac{dDU(r)}{dr}\Big|_{r=R} = 0, \quad (3.60c)$$

Все термодинамические величины P , E , S , μ и поправки к ним DP , DE , DS и $D\mu$ вычисляются подстановкой в формулы (3.12), (3.18) решения системы (3.60).

Как уже отмечалось, уравнения (3.60) — это задача на собственные значения. В таком виде решать уравнение численными методами весьма трудоемко, поэтому было предложено несколько замен переменных [8, 10, 80, 81]. В отличие от [10, 63] в этой работе будет решаться исходная краевая задача для нелинейного уравнения методом дополненного вектора [82].

Замена переменных. Наиболее удачными оказались безразмерные радиальная переменная и атомный потенциал из [10]:

$$x = \sqrt{\frac{r}{R}}, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (3.61a)$$

$$\phi(x) = \frac{r}{R} \frac{U(r) + \mu}{T}. \quad (3.61b)$$

По аналогии вводится безразмерная квантово-обменная поправка к атомному потенциалу:

$$\psi(x) = \frac{r}{R} DU(r) \sqrt{T}. \quad (3.62)$$

Замена (3.61), (3.62) представляется наиболее удобной по следующим причинам:

1. функции $\phi(x)$, $\psi(x)$ при $x \rightarrow 0$ разлагаются по целым степеням x , в то время как $U(r)$ и $DU(r)$ разлагаются по полуцелым степеням r ;
2. несмотря на то, что r меняется очень сильно, по переменной $x \in [0; 1]$ не требуется вводить никаких масштабов.

Недостатком переменных (3.61), (3.62) является невозможность перехода к предельно низким температурам $T \rightarrow 0$. Поэтому для расчетов холодных кривых по модели (3.60) целесообразно использовать другую замену:

$$x = \sqrt{\frac{r}{R}}, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (3.63a)$$

$$\phi(x) = \frac{r}{R} (U(r) + \mu), \quad (3.63b)$$

$$\psi(x) = \frac{r}{R} DU(r). \quad (3.63c)$$

Таким образом, расчеты холодного и горячего вещества проводятся независимо.

Запишем отдельно «холодные» уравнения в переменных (3.63) и «горячие» уравнения в переменных (3.61), (3.62). Так как в модели ТФП есть подобие по Z (3.13), для удобства в дальнейших формулах будет принято $Z = 1$.

Уравнения холодного вещества. Для заданного вещества Z и объема атомной ячейки $V = \frac{4}{3}\pi R^3$ при $T \rightarrow 0$, система уравнений (3.60) записывается в переменных (3.63) следующим образом:

$$\phi'' - \frac{\phi'}{x} = \frac{32\sqrt{2}}{3\pi} R^2 x \phi^{\frac{3}{2}}, \quad (3.64a)$$

$$\phi'(1) = 2\phi(1), \quad \phi(0) = \frac{Z}{R}, \quad (3.64b)$$

$$\psi'' - \frac{\psi'}{x} - \frac{16\sqrt{2}}{\pi} R^2 x \sqrt{\phi} \psi = \frac{22}{3} \frac{16\sqrt{2}}{\pi} R^2 x^2 \phi, \quad (3.64c)$$

$$\psi(0) = 0, \quad \psi'(1) = 2\psi(1), \quad (3.64d)$$

$$0 \leq x \leq 1. \quad (3.64e)$$

Таким образом следует выразить в переменных (3.63) все термодинамические функции:

$$P = \frac{4\sqrt{2}}{15\pi^2} \phi^{\frac{5}{2}}(1), \quad (3.65a)$$

$$E = 3PV - \frac{16\sqrt{2}}{5\pi} R^3 \int_0^1 \phi^{\frac{5}{2}}(\xi) d\xi - E_\infty, \quad (3.65b)$$

$$S = 0, \quad (3.65c)$$

$$\mu = \phi(1), \quad (3.65d)$$

$$DP = \frac{2\mu^{\frac{2}{3}}\psi(1) + 11\mu^2}{9\pi^3}, \quad (3.65e)$$

$$DE = \frac{\sqrt{2}}{6\pi R} \psi'(0) - \frac{22}{3\pi} V \int_0^1 \xi \phi^2(\xi) d\xi - DE_\infty, \quad (3.65f)$$

$$DS = 0, \quad (3.65g)$$

$$D\mu = \frac{\sqrt{2}}{6\pi} (\sqrt{\mu} + \psi(1)). \quad (3.65h)$$

Константы E_∞ и DE_∞ подбираются так, чтобы энергия и поправка к ней обращались в нуль для бесконечно разряженного вещества при нулевой температуре: $V \rightarrow \infty$,

$T = 0$. Величина E_∞ является томас-фермиевской энергией связи электронов невозбужденного изолированного атома. Соответственно величина $E_\infty + DE_\infty$ является полной энергией связи всех электронов атома в модели ТФП.

Уравнения горячего вещества. Для заданного вещества Z , объема атомной ячейки $V = \frac{4}{3}\pi R^3$ и конечной температуры $T > 0$, система уравнений (3.60) записывается в переменных (3.61), (3.62) следующим образом:

$$\phi'' - \frac{\phi'}{x} = ax^4 I_{\frac{1}{2}}\left(\frac{\phi}{x^2}\right), \quad (3.66a)$$

$$a = \frac{16\sqrt{2}}{\pi} R^2 \sqrt{T}, \quad (3.66b)$$

$$\phi'(1) = 2\phi(1), \quad \phi(0) = \frac{Z}{RT}, \quad (3.66c)$$

$$\psi'' - \frac{\psi'}{x} - \frac{a}{2}x^2 I_{-\frac{1}{2}}\left(\frac{\phi}{x^2}\right) \psi = ax^4 \mathcal{J}\left(\frac{\phi}{x^2}\right), \quad (3.66d)$$

$$\psi(0) = 0, \quad \psi'(1) = 2\psi(1), \quad (3.66e)$$

$$0 \leq x \leq 1. \quad (3.66f)$$

Термодинамические функции выражаются следующим образом:

$$P = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2} T^{\frac{5}{2}} I_{\frac{3}{2}}(\phi(1)), \quad (3.67a)$$

$$E = 3PV - \frac{6\sqrt{2}}{\pi^2} VT^{\frac{5}{2}} \int_0^1 I_{\frac{3}{2}}\left(\frac{\phi(\xi)}{\xi^2}\right) \xi^5 d\xi - E_\infty, \quad (3.67b)$$

$$S = \frac{6\sqrt{2}}{\pi^2} VT^{3/2} \int_0^1 \left[\frac{5}{3} I_{\frac{3}{2}}\left(\frac{\phi(\xi)}{\xi^2}\right) - \phi(\xi) I_{\frac{1}{2}}\left(\frac{\phi(\xi)}{\xi^2}\right) \right] \xi^3 d\xi, \quad (3.67c)$$

$$\mu = T\phi(1), \quad (3.67d)$$

$$DP = \frac{T^2}{3\pi^3} \left[\psi(1) I_{\frac{1}{2}}(\phi(1)) + \mathcal{H}(\phi(1)) \right], \quad (3.67e)$$

$$DE = \frac{T^{\frac{1}{2}}}{3\sqrt{2}\pi} \phi(0)\psi'(0) + \quad (3.67f)$$

$$+ \frac{T^2V}{\pi^3} \int_0^1 \left[\psi(\xi) I_{\frac{1}{2}}\left(\frac{\phi(\xi)}{\xi^2}\right) + 2\xi^2 \mathcal{H}\left(\frac{\phi(\xi)}{\xi^2}\right) \right] \xi^3 d\xi - DE_\infty,$$

$$DS = \frac{1}{6\pi} \frac{\psi''(0)}{\sqrt{2T}} + \frac{TV}{\pi^3} \int_0^1 \left[\psi(\xi) I_{\frac{1}{2}}\left(\frac{\phi(\xi)}{\xi^2}\right) + 4\xi^2 \mathcal{H}\left(\frac{\phi(\xi)}{\xi^2}\right) \right] \xi^3 d\xi, \quad (3.67g)$$

$$D\mu = \frac{\sqrt{2T}}{6\pi} \left[\frac{1}{2} I_{-\frac{1}{2}}(\phi(1)) + \psi(1) \right]. \quad (3.67h)$$

В них входят величины E_∞ и DE_∞ , описанные выше, а также специальные функции Ферми-Дирака (3.29), рассматриваемые в р. 3.2:

$$I_k(x) = \int_0^\infty \frac{y^k dy}{1 + e^{y-x}}. \quad (3.68)$$

$$\mathcal{H}(x) = \frac{1}{2} I_{-\frac{1}{2}}(x) I_{\frac{1}{2}}(x) - \frac{6}{3} \int_0^x \left[I_{-\frac{1}{2}}(\xi) \right]^2 d\xi. \quad (3.69)$$

3.3.3. Разностная схема для уравнений ТФП. В работах Лэттера [10] и Кузьминой [63] решение задачи на собственные значения проводилось методом стрельбы от левой границе к правой. Такой метод был плохо обусловлен и требовал множественных подгонок. При этом в [63] интегрирование дифференциальных уравнений проводилось методом Рунге-Кутты точности $O(h^4)$. Для расчета с заданной погрешностью и контроля точности применялось сгущение сеток и метод Ричардсона.

Этот подход имеет существенный недостаток. Погрешность схем Рунге-Кутты разлагается в ряд, содержащий все степени шага h . Поэтому каждое сгущение сетки позволяет повысить порядок точности лишь на единицу. Поэтому в данной работе был построен другой алгоритм. Задачи на собственные значения (3.64) и (3.66) решались с помощью симметрично написанной разностной схемы и метода дополненного

вектора [82]. Метод дополненного вектора обеспечивал малое число итераций на каждой сетке. Благодаря симметричности разностной схемы, погрешность разлагалась в ряд только по четным степеням шага h . Поэтому каждое сгущение сетки повышало порядок точности на 2. В результате улучшились точность и быстродействие алгоритма, а также его надежность и устойчивость к ошибкам округления.

Введем на отрезке $x \in [0; 1]$ равномерную сетку:

$$x_n = hn, h = \frac{1}{N}, 0 \leq n \leq N. \quad (3.70)$$

Обозначим $\phi_n \equiv \phi(x_n)$, $\psi_n \equiv \psi(x_n)$.

Аппроксимируя первую и вторую производные симметричными разностями со вторым порядком точности, запишем разностную схему для горячего уравнения (3.66а) во внутренних узлах сетки $1 \leq n \leq N - 1$:

$$F_n \equiv \frac{\phi_{n-1} - 2\phi_n + \phi_{n+1}}{h^2} - \frac{\phi_{n+1} - \phi_{n-1}}{2hx_n} - ax_n^4 I_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\phi_n}{x_n^2} \right) = 0, \quad (3.71)$$

Краевые условия. Условие в центре (3.66с) дает уравнение для $n = 0$:

$$F_0 = \frac{\phi_1 - 2\phi_0 + \phi(0)}{h^2} - \frac{\phi_1 - \phi(0)}{2h^2} - ah^4 I_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\phi_0}{h^2} \right) = 0. \quad (3.72)$$

Граничное условие на правой границе напишем методом фиктивных точек. Для этого вводим за правой границей точку $n = N + 1$ и значения функции в ней ϕ_{N+1} . Это позволяет заменить граничную производную также симметричной разностью и написать правое граничное условие в следующем виде:

$$\frac{\phi_{N+1} - \phi_{N-1}}{2h} = 2\phi_N. \quad (3.73)$$

Такое приближение производной дает разложение погрешности в ряд по h^2 , как и для разностной схемы (3.71). Это существенно для применения метода Ричардсона.

Запишем разностную схему (3.71) в граничном узле $n = N$. Она будет содержать ϕ_{N+1} . Для его исключения используем (3.73):

$$\phi_{N+1} = 4h\phi_N + \phi_{N-1}. \quad (3.74)$$

Заметим, что в учебниках нередко используют одностороннее краевое условие повышенной точности. Оно не требует введения фиктивного узла, но из-за отсутствия симметрии в нем погрешность разлагается в ряд по всем степеням h . Поэтому предпочтение отдается методу фиктивной точки, который оказывается более простым и точным.

Нулевые температуры. Аналогичным образом для функции ϕ выписывается разностная схема и краевые условия (3.64) для нулевой температуры:

$$a = \frac{32\sqrt{2}}{3\pi}R^2; \quad (3.75a)$$

$$F_0 \equiv \frac{\phi_1 - 2\phi_0 + \phi(0)}{h^2} - \frac{\phi_1 - \phi(0)}{2h^2} - ah\phi_0^{\frac{3}{2}} = 0; \quad (3.75b)$$

$$F_n \equiv \frac{\phi_{n-1} - 2\phi_n + \phi_{n+1}}{h^2} - \frac{\phi_{n+1} - \phi_{n-1}}{2hx_n} - ax\phi_n^{\frac{3}{2}} = 0, \quad 1 \leq n \leq N; \quad (3.75c)$$

$$\phi_{N+1} = 4h\phi_N + \phi_{N-1}. \quad (3.75d)$$

3.3.4. Метод дополненного вектора. Напомним, что система (3.60) является задачей на собственные значения. При этом сеточный вектор $\{\phi_n, 0 \leq n \leq N\}$ и собственное значение μ принадлежат различным пространствам. Зачастую такие задачи решают методом простых итераций. При этом берут некоторое нулевое приближение для μ и вектора $\{\phi_n\}$ и первое приближение для $\{\phi_n\}$. По нему уточняют μ . С уточненным значением снова находят $\{\phi_n\}$ и т. д.. Сходимость такого процесса является лишь линейной, то есть медленной. Кроме того, этот процесс простых итераций может не сходиться, даже если нулевое приближение выбрано в окрестности корня. Напомним, что метод стрельбы является именно таким методом. Известно, что стрельба сходится далеко не всегда. Кроме того, даже в случае сходимости стрельба может оказаться неустойчивой по отношению к ошибкам округления.

Этих недостатков лишен метод дополненного вектора [82]. В нем размерность пространства вектора $\{\phi_n\}$ увеличивается на 1, а собственное значение принимается в качестве новой компоненты дополненного вектора: $\mu \equiv \phi_{n+1}$ (Не путать с исключенным граничным значением ϕ_{N+1} !).

Разностная схема (3.71) с граничными условиями является нелинейной алгебраической системой для нахождения компонент дополненного вектора $\{\phi_n, 0 \leq n < N + 1\}$. Для решения этой системы необходимо выбрать хорошо сходящийся метод, равноправный относительно всех компонент дополненного вектора.

В качестве такого метода целесообразно выбрать метод Ньютона. Как известно, этот метод всегда сходится в достаточно малой окрестности простого корня, если уравнения системы имеют непрерывные первые и вторые производные. При этом сходимость в малой окрестности квадратичная, то есть очень быстрая.

Матрица Якоби. Искомая система уже написана. Для реализации метода Ньютона необходима матрица Якоби этой системы. Есть два способа ее получения. Простейший способ — заменить каждую производную симметричными разностями. Это существенно упрощает алгоритм, но может очень сильно увеличить ошибки округления и ухудшить надежность метода. Поэтому был выбран более громоздкий, но более надежный метод — прямое аналитическое написание всех производных. При-

ведем соответствующие формулы:

$$J_{m,k} \equiv \frac{\partial F_m}{\partial \phi_k}, \quad 0 \leq m, k \leq N. \quad (3.76)$$

Матрица $J_{m,k}$ трехдиагональная, в n -й ее строке отличны от нуля следующие три элемента:

$$J_{n,n-1} = \frac{1}{h^2} + \frac{1}{2hx_n} \quad (3.77a)$$

$$J_{n,n+1} = \frac{1}{h^2} - \frac{1}{2hx_n}, \quad (3.77b)$$

$$J_{n,n} = -\frac{2}{h^2} - \frac{a}{2} x_n^2 I_{-\frac{1}{2}} \left(\frac{\phi_n}{x_n^2} \right), \quad (3.77c)$$

$$1 \leq n \leq N - 1. \quad (3.77d)$$

В первой и последней строках отличны от нуля по два элемента:

$$J_{0,1} = \frac{3}{h^2}, \quad J_{0,0} = -\frac{2}{h^2} + \frac{a}{2} h^2 I_{-\frac{1}{2}} \left(\frac{\phi_0}{h^2} \right), \quad (3.78a)$$

$$J_{N,N-1} = \frac{2}{h^2}, \quad J_{N,N} = \frac{4h-2}{h^2} - 2 - \frac{a}{2} I_{-\frac{1}{2}}(\phi_N). \quad (3.78b)$$

Для уравнения холодного вещества (3.64) матрица Якоби $J_{m,k}^c \equiv \frac{\partial F_m^c}{\partial \phi_k}$, $0 \leq m, k \leq N$ записывается аналогично (3.78):

$$J_{0,1}^c = \frac{1}{h^2}, \quad J_{0,0}^c = -\frac{2}{h^2} + \frac{3a^c}{2} \sqrt{\phi_0}; \quad (3.79a)$$

$$1 \leq n \leq N - 1 :$$

$$J_{n,n-1}^c = \frac{1}{h^2} + \frac{1}{2hx_n}, \quad (3.79b)$$

$$J_{n,n+1}^c = \frac{1}{h^2} - \frac{1}{2hx_n}, \quad (3.79c)$$

$$J_{n,n}^c = -\frac{2}{h^2} - \frac{3a^c}{2} x_n \sqrt{\phi_n}; \quad (3.79d)$$

$$J_{N,N-1}^c = \frac{2}{h^2}, \quad J_{N,N}^c = \frac{4h-2}{h^2} - 2 - \frac{3a^c}{2} \sqrt{\phi_N}. \quad (3.79e)$$

Системы уравнений с трехдиагональными матрицами $J_{m,k}$ и $J_{m,k}^c$ решаются методом прогонки. Нетрудно показать, что при этом выполнено условие преобладание диагонального элемента. В самом деле, умножим уравнение (3.71) на h^2 . Тогда диагональный коэффициент равен $2 + h^2 * A > 2$, $A > 0$. Недиагональные коэффициенты будут составлять $1 \pm \frac{h}{2x_n}$. Поскольку $x_n \geq h$, то оба внедиагональных элемента положительны, а их сумма равна 2. Тем самым выполнено условие преобладания диагонального элемента, то есть прогонка устойчива.

Устойчивость прогонки показывает, что метод дополненного вектора надежнее метода стрельбы.

Усеченные итерации. Выберем некоторое начальное приближение ϕ . Каждое следующее приближение $\hat{\phi}$ получается из предыдущего по формуле

$$\hat{\phi} = \phi - \tau\Delta, \quad (3.80)$$

где приращение Δ есть решение системы линейных алгебраических уравнений $J\Delta = F$ с матрицей Якоби в левой части и вектором F в правой. На каждом шаге такую систему эффективно решать методом прогонки.

Множитель $\tau = 1$ в (3.80) соответствует классическому методу Ньютона. В данной работе для более надежной сходимости значение $\tau = 1$ устанавливается изначально. Если F — значение на текущем слое, то вводя $\hat{F} = F(\phi - \Delta)$ — значение на следующем слое. При вычислении значения $\hat{\phi}$, оценивается невязка (сумма квадратов (F, F)), и в случае, когда она увеличивается, именно $(\hat{F}, \hat{F}) > (F, F)$ считается, что сходимость нарушилась и итерация делается заново с вдвое уменьшенным значением $\hat{\tau} = \frac{\tau}{2}$.

Критерием остановки итераций служит малость величины невязки (F, F) .

3.3.5. Вычисление поправок. Поправочное уравнение (3.60с) является линейным. Однако для вычисления его коэффициентов следует находить значение внутриатомного потенциала $U(r)$ из основного уравнения (3.60b).

После преобразований переменных (3.64), (3.66) в конечных разностях линейную задачу можно эффективно решать методом прогонки. Запишем разностные схемы для поправочных уравнений на сетке $x_n = hn$, $1 \leq n \leq N$.

Аппроксимация уравнения для горячих поправок:

$$\begin{aligned} F_0 &= 0, \\ F_n &= \frac{\psi_{n-1} - 2\psi_n + \psi_{n+1}}{h^2} - \frac{\psi_{n+1} - \psi_{n-1}}{2hx_n} - \\ &\quad - \frac{a}{2} I_{-\frac{1}{2}} \left(\frac{\phi_n}{x_n^2} \right) \psi_n x_n^2 - ax_n^4 \mathcal{J} \left(\frac{\phi_n}{x_n^2} \right) = 0, \\ \psi_{N+1} &= 4h\psi_N + \psi_{N-1}. \end{aligned} \quad (3.81)$$

Аппроксимация уравнения для холодных поправок:

$$\begin{aligned} F_0 &= 0, \\ F_n &= \frac{\psi_{n-1} - 2\psi_n + \psi_{n+1}}{h^2} - \frac{\psi_{n+1} - \psi_{n-1}}{2hx_n} - \\ &\quad - \frac{16\sqrt{2}}{\pi} R^2 \sqrt{\phi_n} \psi_n x_n - \frac{22}{3} \frac{16\sqrt{2}}{\pi} R^2 \phi_n x_n = 0, \\ \psi_{N+1} &= 4h\psi_N + \psi_{N-1}. \end{aligned} \quad (3.82)$$

Выражения (3.81), (3.82) приводят к прогонке с трехдиагональной матрицей. Несложно показать преобладание диагонального элемента, поэтому такая прогонка устойчива к ошибкам округления.

3.3.6. Вычисления с заданной точностью. Апостериорная оценка и контроль точности численного решения методом сгущения сеток предложен еще Ричардсоном [83]. Современное состояние этого метода подробно изложено в [84]. Применение метода Ричардсона возможно не только на равномерных сетках, но и на так называемых квазиравномерных сетках [85]. Суть метода в том, что погрешность численного решения для достаточно гладких функций представима суммой $\sum_{m=0} c_m N^{-(p+sm)}$, где $s = 1$ для несимметричных схем и $s = 2$ для симметрично построенных схем. В данной работе используются только симметричные схемы. Верхний предел этой суммы зависит от гладкости решения.

Пусть на данном классе решений схема сходится с порядком точности p и найдены решения U_N и U_{rN} на двух сетках с числом узлов N и rN соответственно. Погрешность численного решения U_{rN} на более подробной сетке в совпадающих узлах t этих сеток может быть вычислена по формуле

$$\Delta_{rN}(t) = \frac{U_{rN} - U_N}{r^p - 1} + O(N^{-p-s}) \quad (3.83)$$

Оценка (3.83) асимптотически точна при $N \rightarrow \infty$ для функций, имеющих необходимое число непрерывных ограниченных производных.

По результатам расчетов на трех соседних сетках N , rN , r^2N можно вычислить эффективный порядок точности схемы:

$$p^{eff}(t) = \frac{\ln \Delta_N - \ln \Delta_{rN}}{\ln r}. \quad (3.84)$$

Численное решение U_{rN} может быть уточнено добавлением к нему найденной ошибки Δ_{rN}

$$\tilde{U}_{rN} = U_{rN} + \Delta_{rN} = U_{rN} + \frac{U_{rN} - U_N}{r^p - 1} + O(N^{-(p+2s)}). \quad (3.85)$$

Итак, имея расчет на двух вложенных сетках можно вычислить ошибку расчета на более подробной сетке и уточнить расчет на 1–2 порядка. Имея расчет на трех сетках N , rN и r^2N , можно провести уточнение дважды по тому же самому принципу: сначала уточнить решение на сетке r^2N , затем на сетке rN , и потом снова на сетке r^2N по уже уточненному решению на вложенной сетке.

Нулевое приближение. Наиболее удобно сгущать сетки вдвое. Тогда каждый четный узел новой сетки будет одним из узлов предыдущей сетки. Нечетному узлу новой сетки соответствует середина интервала предыдущей сетки. В нечетных узлах новой сетки получим нулевое приближение линейной интерполяцией. Точность нашей схемы есть $O(h^2)$, а процедура линейной интерполяции имеет такую же точность, поэтому данное нулевое приближение будет отстоять от искомого решения

на данной сетке на величину $O(h^2)$. Это достаточно малая величина, поэтому можно рассчитывать, что это нулевое приближение будет лежать в малой окрестности искомого корня, и ожидать быстрой сходимости Ньютоновских итераций.

Практика расчетов показала, что действительно при таком выборе нулевого приближения на подробных сетках для сходимости достаточно 2–4 итераций. Лишь на грубых сетках число итераций бывает больше, но там само число узлов невелико, так что это мало сказывается на быстродействии алгоритма в целом.

Заметим, что не любой способ интерполяции хорош. Например, был протестирован способ интерполяции, при котором в нечетном узле сетки бралось значение из соседнего четного узла. При этом ошибка нулевого приближения была $O(h)$, то есть много больше, и число итераций многократно возрастало.

Расчеты таблиц. Остается еще вопрос о выборе нулевого приближения на самой грубой сетке. Этот вопрос естественно решается, если производятся расчеты таблиц для большого набора значений T, V .

Все величины, получающиеся в результате решения уравнений (3.64) и (3.66), как и сама ϕ , являются гладкими функциями аргументов T и V . При незначительном изменении температуры T и объема атомной ячейки V (при фиксированном Z) решения будут мало отличаться. В этом случае окончательное решение только что сосчитанного узла будет служить хорошим начальным приближением для следующего узла. Начальное приближение для первого узла столбца (или строки) хорошо находится из известных асимптотик модели ТФП.

Поэтому выгодно производить расчеты таблиц не поточечно, а серией. Серию расчетов целесообразно производить либо построчно (при $T = const$) от малых объемов V к большим, либо по столбцам (при $V = const$) от больших температур к малым. На практике построчный расчет оказался более эффективным.

Отметим, что построчные расчеты можно вести параллельно. Составленная программа расчета использует возможности многопроцессорных компьютеров и в параллельных потоках вычисляет серии по V при заданном наборе значений T . Количество одновременно запущенных потоков вычисления соответствует количеству процессоров вычислительной системы. Для этих вычислений выгодно использование графических плат.

3.3.7. Энергия связи. В формулы энергии входят константы E_∞ и DE_∞ , имеющие смысл энергии связи всех электронов в холодном изолированном атоме и квантово-обменной поправки к ней.

Для получения значений этих констант проводился специальный расчет при $T = 0$ и $V \rightarrow \infty$. Полученные значения приведены в табл. 3.1. Там же для сравнения приведены данные предшествующих работ разных лет. Видно, что сейчас удалось

Таблица 3.1. Энергия связи электронов в атоме водорода.

| E_∞ | DE_∞ | Источник | Разрядность |
|------------------|----------------|---------------|-------------|
| 0.768057917 | отсутствует | Лэттер [10] | неизвестно |
| 0.7687451253 | 0.269900170 | Калиткин [18] | 36 бит |
| 0.76874512422 | 0.269900170 | Кузьмина [21] | 48 бит |
| 0.76874512421364 | 0.269900169992 | данная работа | 64 бита |

существенно повысить точность расчета этих важных констант.

Это позволило заметно повысить точность расчета тепловых поправок для негорячего высокоплотного вещества и обойтись без дополнительного "ручного" сглаживания таблиц в этой области.

3.3.8. Стандартные таблицы. Это таблицы термодинамических функций, рассчитанные для водорода ($Z = 1$). Для элементов с другим Z они пригодны на основании соотношения подобия по Z (3.13), (3.20). Эти таблицы должны быть достаточно подробными, чтобы по ним было можно интерполировать. Для вычисления ударных адиабат желательно иметь шаг таблиц $\Delta \lg T = \Delta \lg V = 0.05$. Для большинства других применений достаточен вдвое больший шаг. Диапазон изменения аргументов возьмем $-5 \leq \lg T \leq 3$ и $-4 \leq \lg V \leq 11$.

Таким образом, каждая таблица должна содержать ~ 50000 многозначных чисел. Таких таблиц будет 8 по числу термодинамических функций и поправок к ним. Это огромный объем, который нецелесообразно приводить в печатной форме, как это делалось раньше.

Сами числа в таблицах меняются на много порядков. Но приводить их в логарифмической форме нецелесообразно, так как величины μ и DE знакопеременные. (Остальные 6 величин знакопостоянны.) Поэтому таблицы приводятся в формате E.

3.4 Важнейшие результаты главы

1. Предложена модификация модели осциллирующих ядер, повышающая физическую точность модели ядерной компоненты термодинамики жидкой плазмы.
2. Разработан специализированный алгоритм решения уравнений модели Томаса-Ферми с квантовой и обменной поправками (ТФП), более устойчивый и существенно менее трудоемкий, чем применявшиеся ранее. Быстродействие алгоритма таково, что позволяет использовать его для оперативных расчетов подробных таблиц термодинамических функций (даже на портативных компьютерах). Ранее это было невозможно.

3. Проведен расчет стандартных подробных таблиц термодинамических функций жидкой плазмы. На основе перечисленных теоретических результатов построена надежная модель термодинамики жидкой плазмы и найдена граница ее применимости. Эта модель позволяет легко производить оперативные расчеты подробных таблиц термодинамических функций для жидкой плазмы. По точности и подробности они существенно превосходит ранее существовавшие таблицы. Эти данные обеспечивают потребности современных приложений.

4. Широкодиапазонное уравнение состояния

4.1 Термодинамически согласованная интерполяция

4.1.1. Метод лоскутного одеяла. Широкодиапазонное или глобальное уравнение состояния пока не удалось описать с помощью единой модели не только с хорошей, но даже с удовлетворительной точностью. На практике обычно используют метод лоскутного одеяла. Сравнительно узкие области описывают частными моделями, а на границах областей эти модели сшивают. При этом стараются обеспечить непрерывность и гладкость термодинамических функций настолько это возможно (если границы не являются фазовыми переходами). Так построена Лос-Аламосская библиотека SESAME, где сшивается около десяти различных моделей.

Мы же исходим из того, что можно построить широкодиапазонное уравнение состояния вне области фазовых переходов (то есть охватывающее газовую и жидкую плазму) с помощью всего двух моделей: модели Саха и ТФП. Одеяло сшивается всего из двух кусков. Каждая из моделей обеспечивает хорошую точность в своей области. Остается важный вопрос — как именно сшивать модели, чтобы обеспечить хорошую физическую точность в промежуточной области.

Этот вопрос нетривиален. В. Ф. Куропатенко обратил внимание [86] на то, что многие предложенные в литературе способы сшивания нарушают термодинамическую согласованность получающихся функций, даже если каждая из сшиваемых моделей была термодинамически согласованной. При расчете газожидкостных течений по таким уравнениям состояния возникают нефизичные артефакты. Например, при прохождении ударной волны через контактную границу появляется энтропийный след, не исчезающий при сгущении разностных сеток.

4.1.2. Сшивание интерполяцией. Любая сколько-нибудь точная модель не описывается аналитическими формулами. Они требуют более или менее трудоемких численных расчетов, так что их результатами являются таблицы термодинамических функций, рассчитанные на некоторых сетках по T и V . Очевидно, нельзя просто

разграничить эти модели какими-то линиями и брать по одну сторону границы одну модель, а по другую — другую модель. Такой способ в общем случае не обеспечивает даже непрерывности термодинамических функций. Если же выбрать границы из условия равенства функций на них, то на границе будут разрывны производные. Поэтому сшивание должно захватывать некоторую область вблизи границы применимости моделей. Тогда оно является сглаживанием, то есть некоторой интерполяцией.

Независимость интерполяции каждой термодинамической функции в общем случае нарушает термодинамическую согласованность с другими функциями. Поэтому мы предлагаем [87] использовать интерполяцию для одной величины — свободной энергии F , которая является термодинамическим потенциалом от T, V . Все остальные термодинамические функции следует строить дифференцированием F в соответствии с термодинамическими соотношениями. Этот способ гарантирует сохранение термодинамической согласованности.

Сравнение моделей. Каждая из моделей хороша тем, что по ней вычисления могут быть произведены во всем диапазоне значений T, V . Поэтому можно наложить таблицы этих моделей друг на друга, и непосредственно сравнить их термодинамические функции в одинаковых узлах сетки.

Мы сравнивали полное давление в этих моделях. На рис. 2.4 фонами показано отношение $P_{Саха}$ к $P_{ТФП}$. Для белого фона это отношение отличается от 1 не более чем в 1.2 раза. Этот фон покрывает всю газовую область и коридор вблизи кривой испарения ТФП. Светлый фон соответствует отлнчию от 1.2 до 2.5 раз. Темный фон соответствует большему отлнчию. Эти фоны приходятся на область жидкой плазмы.

На рис. 2.4 также показаны изолинии относительных объемов ионных остовов \varkappa , рассчитанных по модели Саха. Видно, что границы фоновых областей идут примерно параллельно изолиниям \varkappa .

Кривая испарения жидкой плазмы по модели ТФП соответствует $\lg \varkappa \approx -0.5$. По мере удаления от этой линии влево \varkappa быстро стремится к 0, а вправо — к бесконечности. Это обеспечивает переход в чистые модели в соответствующих областях.

Термодинамические функции. Для свободной энергии $F(T, V)$ в качестве коэффициента интерполяции выберем функцию от $\varkappa(T, V)$:

$$F(T, V) = \frac{\varkappa_0}{\varkappa_0 + \varkappa(T, V)} F_{Саха}(T, V) + \frac{\varkappa(T, V)}{\varkappa_0 + \varkappa(T, V)} F_{ТФП}(T, V). \quad (4.1)$$

Это достаточно естественный вид интерполяции, а разумное значение постоянной $\varkappa_0 \approx 0.1$, что близко к кривой испарения. Остальные величины получим из $F(T, V)$ дифференцированием по T или V . Это дает

$$P = \frac{\varkappa_0}{\varkappa_0 + \varkappa} P_{Саха} + \frac{\varkappa}{\varkappa_0 + \varkappa} P_{ТФП} + \frac{\varkappa_0 \varkappa}{(\varkappa_0 + \varkappa)^2} \frac{F_{Саха} - F_{ТФП}}{V} \frac{\partial \lg \varkappa}{\partial \lg V}, \quad (4.2a)$$

$$S = \frac{\varkappa_0}{\varkappa_0 + \varkappa} S_{\text{Саха}} + \frac{\varkappa}{\varkappa_0 + \varkappa} S_{\text{ТФП}} + \frac{\varkappa_0 \varkappa}{(\varkappa_0 + \varkappa)^2} \frac{F_{\text{Саха}} - F_{\text{ТФП}}}{T} \frac{\partial \lg \varkappa}{\partial \lg T}, \quad (4.2b)$$

$$E = \frac{\varkappa_0}{\varkappa_0 + \varkappa} E_{\text{Саха}} + \frac{\varkappa}{\varkappa_0 + \varkappa} E_{\text{ТФП}} + \frac{\varkappa_0 \varkappa}{(\varkappa_0 + \varkappa)^2} (F_{\text{Саха}} - F_{\text{ТФП}}) \frac{\partial \lg \varkappa}{\partial \lg T}. \quad (4.2c)$$

Здесь под функциями $P_{\text{ТФП}}$, $E_{\text{ТФП}}$, $S_{\text{ТФП}}$ понимаются полные термодинамические величины, учитывающие вклад как электронов, так и ядер. Из (4.2) видно, что для надежности интерполяции нужны два условия. Во-первых, термодинамические функции газовой и жидкой плазмы должны быть близки при $\varkappa \approx \varkappa_0$. Во-вторых, каждая из моделей должна давать качественно разумные результаты довольно далеко от границы своей применимости. Из рис. 2.4 понятно, что оба этих условия выполнены.

Выражения (4.2) содержат по три слагаемых. Из них первые два — это простейшая интерполяция двух моделей, аналогичная (4.1). Но появляется и третье слагаемое. Это нетривиальное следствие из требования термодинамической согласованности. Любые склейки разнородных моделей надо проводить аналогичным образом. В библиотеке SESAME такой склейки нет.

Заметим, что выражения (4.2) не вполне безукоризненны. Значения концентраций в модели Саха минимизируют $F_{\text{Саха}}(T, V)$, а не (4.1). Однако это не должно влиять на качество газодинамических расчетов, выполняемых по широкодиапазонным таблицам.

Таким образом, данный метод позволил построить термодинамически согласованное широкодиапазонное уравнение состояния. Оно существует только в табличной форме, так как для получения значений термодинамических функций в конкретной точке следует проводить расчет по обоим моделям на одинаковых сетках по T и V .

Разумным представляется следующий выбор \varkappa_0 . При $\varkappa = 1$ ионные остовы заполняют весь объем, модель Саха неприменима, и следует пользоваться моделью ТФП. При $\varkappa = 0.01$ вклад ионных остовов составляет 1%, и хорошо применима модель Саха. Среднее геометрическое между этими границами разумно принять за точку, в которой вклад этих моделей одинаков. Это соответствует $\varkappa_0 = 0.1$. Численные расчеты хорошо подтверждают такой выбор.

Производные параметра \varkappa . В (4.2) входят $\partial \lg \varkappa / \partial \lg V$ и $\partial \lg \varkappa / \partial \lg T$. Производные специально были преобразованы к логарифмической форме, так как в ней они невелики. Их значения определяются по модели Саха, и прямых аналитических выражений для них через T и V не получено. Поэтому их надо определять численным дифференцированием. Из рис. 2.4 видно, что изолинии \varkappa не вполне плавные. Имеются небольшие осцилляции, связанные с ионизацией отдельных электронов. Окончаниям каждой осцилляции соответствуют границы электронных оболочек. Учитывать эти мелкие осцилляции нецелесообразно, и производные следует сглаживать. Для этого шаг численного дифференцирования по $\lg V$ и $\lg T$ следует брать не слишком малым.

Была принята следующая процедура. Около данного узла T, V по модели Саха рассчитывался крест из четырех вспомогательных точек со сдвигами аргументов $\Delta \lg T = \Delta \lg V = 0.05$. (Меньшие сдвиги брать нецелесообразно, поскольку зависимость $\varkappa(T, V)$ недостаточно плавная.) Производные $\partial \lg \varkappa / \partial \lg V$ и $\partial \lg \varkappa / \partial \lg T$ находились с помощью первых симметричных разностей.

4.1.3. Вклад излучения. При очень высоких температурах становится значительной роль излучения.

Если слой вещества имеет достаточно большую оптическую толщину (много больше длин пробега фотонов), то можно пользоваться формулами для излучения абсолютно черного тела [59]:

$$P_{\text{и}} = \frac{\pi^2 \alpha^3}{45} T^4, \quad (4.3a)$$

$$E_{\text{и}} = \frac{\pi^2 \alpha^3}{15} T^4 V, \quad (4.3b)$$

$$S_{\text{и}} = \frac{4\pi^2 \alpha^3}{45} T^3 V, \quad (4.3c)$$

где $\alpha = 137.035999679(94)^{-1}$ есть постоянная тонкой структуры, а энергия $E_{\text{и}}$ и энтропия $S_{\text{и}}$ отнесены к ячейке объема V . Нетрудно проверить, что выражения (4.3) термодинамически согласованы. Их прибавление к термодинамическим функциям (4.2) также приводит к термодинамически согласованным выражениям.

Формулы (4.3) теряют свою применимость, если либо слой вещества очень тонкий, либо вещество достаточно разрежено. В этих случаях оптическая толщина невелика, и приближение черного тела неправомерно.

4.1.4. Границы применимости. Оценим границы применимости модели построенного широкодиапазонного уравнения состояния газовой и жидкой плазмы. Эти границы условно показаны на рис. 4.1 жирным пунктиром.

Низкие температуры. Со стороны низких температур граница определяется из следующих соображений. Для неплотного атомарного газа уравнения Саха применимы даже при очень низких температурах, когда газ не ионизован. В этом случае нижняя граница отсутствует. Если газ молекулярный, то уравнения Саха применимы начиная с таких температур, когда молекулы практически полностью диссоциировали на атомы.

В области умеренных плотностей нижняя граница применимости должна лежать настолько выше границы фазового перехода, чтобы вещество успело термически ионизоваться.

Соответственно при высоких плотностях для металлов нижняя граница должна лежать почти на кривой плавления (несколько выше). Для неметаллов эта грани-

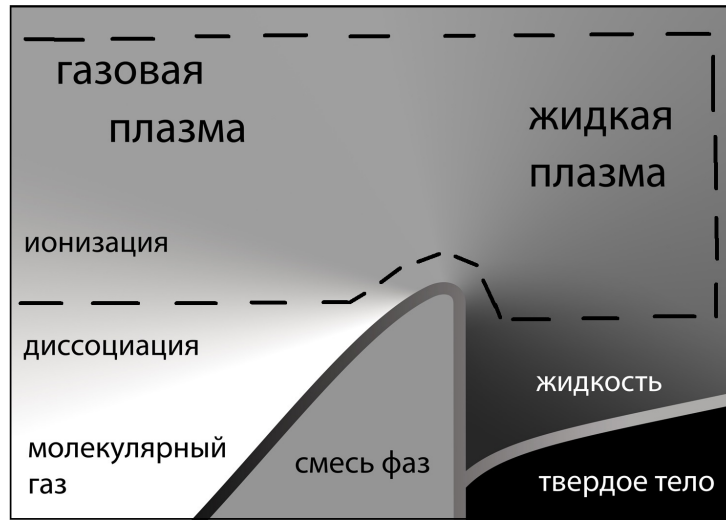


Рис. 4.1. То же, что и рис. 1.1. Пунктир — границы применимости широкодиапазонного уравнения состояния плазмы.

ца должна быть настолько выше кривой плавления, чтобы атомы жидкости успели термически ионизоваться.

Высокие температуры. Мы используем классические уравнения Саха, не учитывая релятивистских эффектов. Поэтому верхняя граница применимости будет определяться величиной этих эффектов. Оценим их. Релятивистская кинетическая энергия электрона равна

$$E_k = mc^2 - m_0c^2 = m_0c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - 1 \right) = \frac{m_0v^2}{2} \left(1 - \frac{3}{2} \frac{m_0v^2/2}{m_0c^2} + \dots \right). \quad (4.4)$$

Последнее слагаемое в (4.4) есть релятивистская поправка. Средняя кинетическая энергия электрона равна $(3/2)T$. Обозначая величину относительной поправки через δ и учитывая значение $m_0c^2 \approx 511$ КэВ, получаем верхнюю границу применимости по температуре

$$T \approx \delta \cdot 227 \text{ КэВ}. \quad (4.5)$$

Если требуется точность 1%, то границей будет $T \approx 2.27$ КэВ, если мы считаем допустимой точность 10%, то границей будет $T = 22.7$ КэВ.

Эти границы являются довольно низкими, однако следует учесть что при высоких температурах излучение вносит большой вклад в термодинамику, а формулы излучения (4.3) являются точными. За счет этого фактическая граница применимости поднимается и становится зависящей от плотности.

Высокие плотности. При высоких плотностях граница также определяется релятивистскими поправками. Кинетическая энергия нерелятивистского электрона приблизительно равна

$$E_k = \frac{3}{10} \left(\frac{3\pi^2 Z}{V} \right)^{2/3} [\text{a. e.}]. \quad (4.6)$$

Граница определяется условием $E_{kin} < m_0 c^2 \delta$. Объем выражается через плотность вещества $\rho = A/V$. Это приводит к условию

$$\frac{3}{10} \left(\frac{3\pi Z}{A} \rho \right)^{2/3} < m_0 c^2 \delta; \quad (4.7)$$

здесь ρ измерена в атомных единицах. Для всех веществ (исключая водород, но включая дейтерий) величина $Z/A \approx 0.5$. Переходя к физическим единицам, получим $\rho < \delta^{3/2} \cdot 3.7 \cdot 10^7$ г/см³. Для точности 1% получаем $\rho < 3.7 \cdot 10^4$ г/см³; для точности 10% имеем $\rho < 1.2 \cdot 10^6$ г/см³.

Сверхнизкие плотности. Здесь граница определяется тем, что при таких плотностях очень медленно устанавливается локальное термодинамическое равновесие. Поэтому в реальных достаточно быстро протекающих процессах равновесные модели не применимы. Этак граница зависит от применения модели к конкретным процессам. Обычно при концентрациях более чем 10^{-3} от числа Лошмидта ($2.7 \cdot 10^{-19}$ см⁻³) в большинстве применений плазму можно считать равновесной.

4.1.5. Параметр неидеальности. В физике плазмы часто пользуются параметром неидеальности (2.24) $\Gamma = \frac{z^2}{RT}$. Его трактуют как отношение потенциальной энергии взаимодействия заряженных частиц к их кинетической энергии. Нередко утверждают, что если этот параметр велик (> 1), то плазму следует считать сильно неидеальной, а ее термодинамику сильно отличающейся от термодинамики идеального газа. Покажем, что это не так.

В самом деле, потенциальная энергия системы z электронов в поле остова заряда z при высоких плотностях равна $E_p = -0.4z^2/R$, как показано в п. 2.2.3. Но кинетическая энергия z электронов при этом составляет $E_k = 1.5zT$. Поэтому вклад потенциальной энергии следует связывать с параметром

$$\gamma = \left| \frac{E_p}{E_k} \right| = \frac{4}{15} \frac{z}{RT} \quad (4.8)$$

Он отличается от параметра Γ не только численным множителем, но и степенью заряда в числителе! Это отличие было незаметным в физике низкотемпературной плазмы, где обычно $z \approx 1$. Но для многократно ионизованных газов отличие становится очень существенным.

Поясним это примером. Возьмем Cu при $T \approx 3$ КэВ и $\rho \approx 10$ г/см³. При этих условиях вещество полностью ионизовано, так что $z = 29$, общепринятый параметр неидеальности $\Gamma \approx 2.55$, а правильный параметр неидеальности $\gamma \approx 0.02$. По традиционным представлениям плазму следовало бы считать сильно неидеальной, а на самом деле ее неидеальность очень мала.

Поэтому традиционным параметром Γ не следует пользоваться для определения неидеальности плазмы. За ним остается гораздо более скромная роль: он определяет

условие перехода от радиуса атомной ячейки R к дебаевскому радиусу D в формуле (2.24) для определения величины энергии взаимодействия заряженных частиц.

4.2 Термодинамическая рассогласованность в библиотеке SESAME

Была произведена проверка выполнения термодинамических соотношений в библиотеке SESAME [41]. Нам были доступны только две термодинамические функции этой библиотеки: давление и энергия. Причем в не слишком широком диапазоне температур (менее 100 эВ) и плотностей (от нормальной до 1000 г/см³) Узловые значения температур и плотностей приблизительно (но не точно) соответствовали логарифмической шкале.

При таких условиях можно проверить выполнимость только одного термодинамического соотношения: $\partial E/\partial V = T(\partial P/\partial T) - P$. При этом производные приходится вычислять интерполированием по таблицам. Наиболее удобно произвести вычисления в пределах одной клетки таблицы. Как известно, зависимости P и E от аргументов T и ρ близки к степенным, поэтому наилучшую точность обеспечивает интерполирование в логарифмическом масштабе. Перепишем искомое термодинамическое соотношение в следующей форме

$$\frac{\partial \lg E}{\partial \lg \rho} = \frac{E\rho}{P} \left(1 - \frac{\partial \lg P}{\partial \lg T} \right). \quad (4.9)$$

При этом значения P , E , ρ заданы в узлах таблицы.

Чтобы использовать возможно меньший шаг интерполяции, ограничимся вычислением в каждой клетке таблицы, относя полученный результат к центру клетки. Для этого надо вычислить во всех четырех узлах отношения $E\rho/P$, и взять среднее геометрическое из этих четырех значений. Каждая производная заменяется простейшей разностью двум противоположащим сторонам клетки, и в качестве центрального берется полусумма этих значений. Расчеты показали, что производные на противоположных сторонах клетки обычно близки между собой; разница между ними не превышает единиц процентов. Вычислим отношение левой и правой сторон формулы (4.9). Если оно не отличимо от единицы в пределах точности интерполяции, то P и E термодинамически согласованы. Если отношение значима отличается от единицы, то величина этого отличия является мерой термодинамической несогласованности.

На рис. 4.2 показана проверка соотношения (4.9) для Cu в библиотеке SESAME. Участки таблицы заливались фоном разной плотности. Белый фон принят для участков, где правая и левая части (4.9) отличаются не более чем на 3%. Такое отличие примерно соответствует точности интерполяции и может считаться незначимым.

Черный фон соответствует отличиям в 2 и более раз. То есть, грубейшим нарушением термодинамической согласованности. Обсудим полученные результаты.

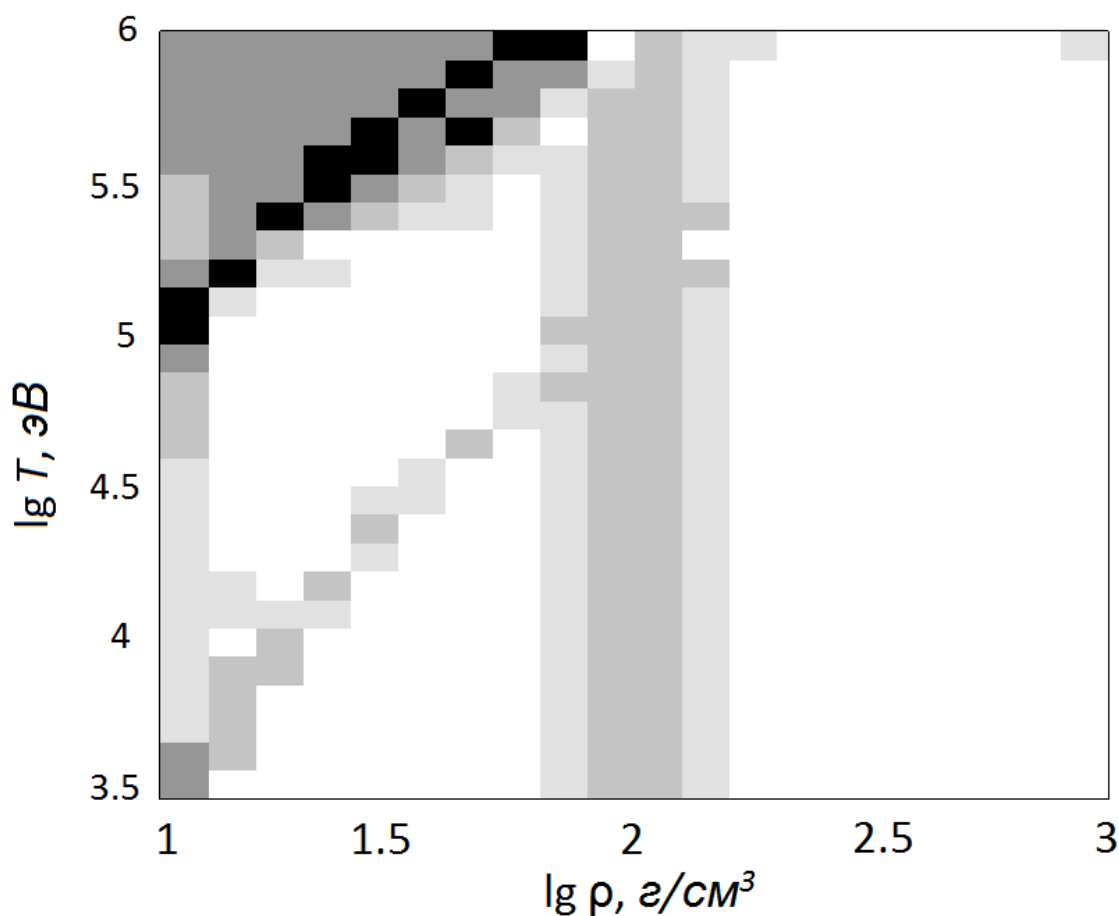


Рис. 4.2. Нарушение термодинамического соотношения (4.9) в библиотеке SESAME на примере Си. Нарушение менее 3% — белый фон, 3–10% светло серый, 10–30% — серый, свыше 30–100% — темно серый, свыше 100% — черный.

Бросается в глаза косая черная линия отчеркивающая верхний угол графика. Нетрудно опознать ее как линию склейки моделей типа Саха (для газовой области) и типа Томаса-Ферми (для жидкой плазмы). Грубое нарушение термодинамического соотношения (4.9) на этой линии показывает очень плохое качество склейки указанных моделей.

Ниже линии склейки, где используется модель типа ТФ, около двух третей занято белым фоном. В этих участках имеется хорошая термодинамическая согласованность. В остальной части графика имеется одна вертикальная и одна коса полосы, в которых термодинамическая несогласованность превышает 3% (то значима), а в отдельных клетках даже более 10%. Как известно, модели типа ТФ, используемые в библиотеке SESAME термодинамически согласованны, поэтому указанная рассо-

гласованность не может быть связана с ними. Возможно причина несогласованности содержится в модели учета вклада ядер.

Вызывает удивление серьезная термодинамическая несогласованность в области газовой плазмы. Там рассогласованность превышает всюду 10% причем в большей части области она более 30%, а местами отличие доходит почти до 2 раз! Это указывает на термодинамическую несогласованность самой модели, принятой в данной области.

Из сказанного видно, что в библиотеке SESAME, во-первых, часть использованных моделей не является термодинамически согласованной, причем несогласованность может оказываться большой. Во-вторых, склейка этих моделей выполняется с сильным нарушением термодинамической согласованности. Все это показывает кардинальные преимущества тех методов построения уравнения состояния плазмы, которые предложены в данной диссертации.

4.3 Ударные адиабаты

4.3.1. Вычисление адиабаты Гюгонио. Далее всего в область сверхвысоких давлений позволяют продвинуться эксперименты по ударным сжатиям. В них были проведены хорошие измерения при давлениях до 500 Мбар. Для сопоставления модели с экспериментами надо рассчитывать теоретические ударные адиабаты. Их находят из соотношения Гюгонио

$$E = E_0 + 0.5(P + P_0)(V_0 - V). \quad (4.10)$$

Здесь P_0, E_0, V_0 — характеристики несжатой атомной ячейки (состояние перед фронтом волны), а P, V, E — состояние за фронтом волны. Если известно уравнения состояния $P(E, V)$, то для любого давления ударной волны P можно из (4.10) вычислить соответствующие E и V , то есть получить точку на ударной адиабате. Для этого достаточно численно решить одно нелинейное уравнение с неизвестным E и довольно сложной функцией $P(E, V)$. Это несложная задача. Задавая большой набор значений P , получим множество точек, составляющее искомую кривую.

Однако теоретики обычно дают уравнение состояния в форме $E(T, V)$ и $P(T, V)$. Именно в такой форме получались уравнения состояния в гл. 2–4. При этом результаты расчета адиабаты оказываются чувствительными к качеству алгоритма. Например, если алгоритм включает интерполяцию табличных значений на недостаточно подробных сетках, итоговая погрешность оказывается значительной и даже хорошо видимой на графике. Для удовлетворения современным требованиям точности пришлось разработать новый алгоритм. Опишем его.

Алгоритм. Фиксируем некоторое значение T^* . По теоретическому уравнению состояния будем вычислять при различных V отношение

$$\beta(V) = 2(E - E_0) / [(P + P_0)(V_0 - V)]. \quad (4.11)$$

Вследствие (4.10) на ударной адиабате достигается $\beta(V^*) = 1$. Нетрудно показать, что $0 < \beta(V) < 1$ при $V < V^*$, и $\beta(V) > 1$ при $V^* < V < V_0$. На участке $0 < V < V_0$ функция $\beta(V)$ монотонно возрастает. Значения $V > V_0$ рассматривать не следует, так как на ударных адиабатах происходит сжатие.

Требуется найти корень уравнения $\beta(V) = 1$. Для начала расчета возьмем достаточно малое значение $V \sim V_0/20$, поскольку более сильное сжатие на ударной адиабате нереально. При таком объеме $\beta(V) < 1$. Будем увеличивать V до тех пор, пока получим $\beta(V) > 1$. Шаг удобно брать в логарифмическом масштабе $\Delta V = 0.2$. При заметно большем шаге есть опасность перескочить через V_0 . При заметно меньшем шаге сильно возрастает трудоемкость расчета. Тогда последний интервал содержит внутри V^* . Затем корень находится методом деления. Чтобы обеспечить хорошую плавность итоговой кривой, точность сходимости по $\lg V$ выбирается 10^{-5} , что соответствует 0,0023%. Этот алгоритм прост и надежен. Его трудоемкость невелика, поскольку наши алгоритмы расчета термодинамических функций являются сверхбыстрыми.

В таком алгоритме невозможно использовать заранее рассчитанные универсальные таблицы термодинамических функций. Здесь приходится в ходе расчета каждый раз вычислять термодинамику по программам Саха и ТФП в очередной точке T, V . При этом в программе расчета уравнений Саха необходимо делать 4 вспомогательных расчета для вычисления производных $\partial \lg \kappa / \partial \lg V$ и $\partial \lg \kappa / \partial \lg T$, входящих в формулы широкодиапазонной интерполяции (4.2). В программе ТФП приходится делать 2 вспомогательных расчета для нахождения $\partial \lg z / \partial \lg V$ при вычислении ядерной компоненты.

Описанный алгоритм позволяет получить одну точку ударной адиабаты соответствующую заданному T . В этой точке одновременно с объемом V вычисляются все термодинамические функции: P, E, S, μ, z, κ . Для расчета всей кривой Гюгонио необходимо взять сетку значений T (целесообразно с шагом $\Delta \lg T = 0.05$). Расчеты целесообразно проводить от высоких температур к низким. Для высоких температур решение всегда существует, так как используемые нами модели заведомо точны. При низких температурах $T < 0.3$ эВ точность широкодиапазонного уравнения состояния может оказаться неудовлетворительной, и происходит срыв расчетов.

Важной характеристикой ударной адиабаты являются скорость ударной волны

D и массовая скорость вещества за фронтом u :

$$D = \frac{(P - P_0)V_0}{u}; u = \sqrt{\frac{2(E - E_0)(P - P_0)}{P + P_0}}; \sigma = V_0/V. \quad (4.12)$$

Величина σ относительное сжатие вещества в ударной волне.

Программа. Алгоритм вычисления реализован на языке C++ и распространяется как библиотека функций (см. п. 6.2.3). Для конкретного атомного номера Z эти функции позволяют оперативно вычислять точки ударной адиабаты с учетом излучения.

4.3.2. Главные ударные адиабаты металлов. Существует несколько металлов, по которым имеется особенно много ударно-волновых экспериментов, в том числе при сверхвысоких давлениях. В качестве примеров рассмотрим главные ударные адиабаты тех металлов, которые принято считать эталонными (потому что по ним градуируют ударные адиабаты других металлов).

Медь. На рис. 4.3 приведен расчет главной ударной адиабаты Cu. Она соответствует ударному сжатию вещества нормальной плотности $\rho_0 = 8.93 \text{ г/см}^3$ и начальной энергии $E_0 = -5.324 \text{ КДж/г}$. Расчеты проведены по нескольким моделям. Обсудим полученные результаты.

Кривая по модели ТФП имеет только один максимум плотности. Он лежит выше линии "испарения", то есть в области газообразной плазмы. Участок прямого хода (где сжатие монотонно возрастает при увеличении температуры и/или давления) соответствует ионизации наружных электронов и M -оболочки. Для этих электронов потенциалы соседних ионизаций близки, так что истинная кривая на этом участке и не должна содержать никаких оболочечных эффектов. Истинные оболочечные осцилляции, которые модель ТФП показать не может, должны лежать при еще более высоких температурах в области газовой плазмы.

Эти оболочечные осцилляции хорошо видны на кривой, рассчитанной по модели Саха. Уже вблизи нижнего максимума плотности она достаточно сильно отличается от модели ТФП. Выше следует область обратного хода, обусловленная большим скачком потенциалов ионизации между M - и L -оболочками. Еще выше у кривой Саха имеется второй участок прямого хода, связанный с ионизацией L -оболочки. Любопытно, что второй максимум сжатия оказался больше первого. Еще выше лежит второй участок обратного хода. Далее заметен небольшой вертикальный участок, который связан с ионизацией K -электронов (этих электронов всего два, поэтому участок слабо выражен). За ним следует асимптотический выход обеих моделей к значению $\rho/\rho_0 = 4$, что соответствует одноатомному газу.

Для интерполяционного широкодиапазонного уравнения состояния мы остановились на $\kappa_0 = 0.1$. Интерполяционная кривая хорошо совпадает с моделью Саха выше

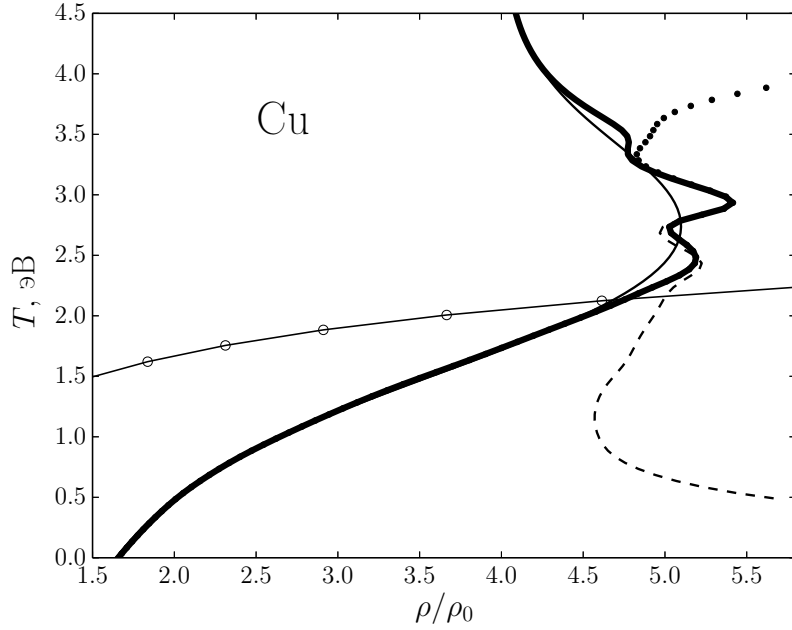


Рис. 4.3. Главная ударная адиабата Cu. Тонкая сплошная линия — модель ТФП, тонкий пунктир — модель Саха. Жирная линия — интерполяция с $\kappa_0 = 0.1$. Жирный пунктир — учет излучения. Кружками маркирована линия испарения θ из (3.25с).

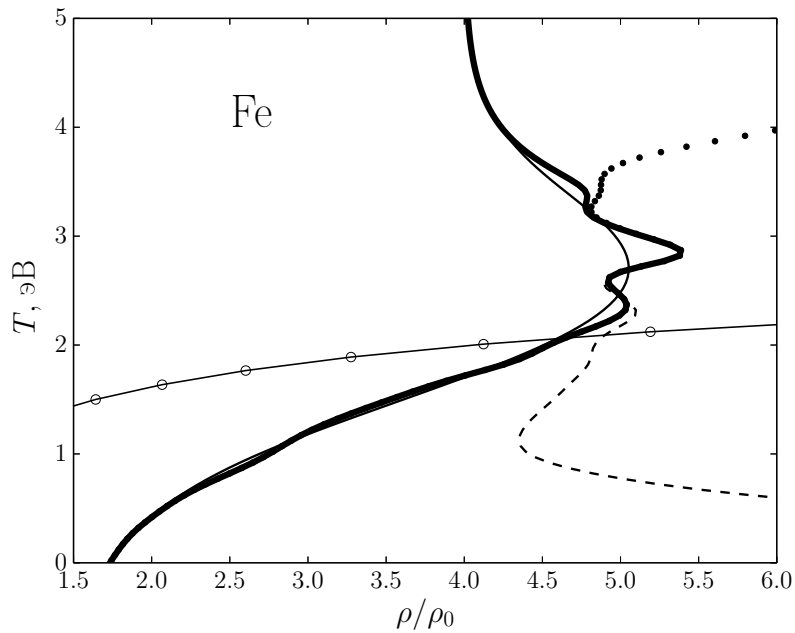


Рис. 4.4. Главная ударная адиабата Fe. Тонкая сплошная линия — модель ТФП, тонкий пунктир — модель Саха. Жирная линия — интерполяция с $\kappa_0 = 0.1$. Жирный пунктир — учет излучения. Кружками маркирована линия испарения θ из (3.25с).

линии ”испарения”, а ниже этой линии хорошо совпадает с кривой ТФП. Напомним, что для жидкой плазмы модель ТФП надежно подтверждена экспериментами по

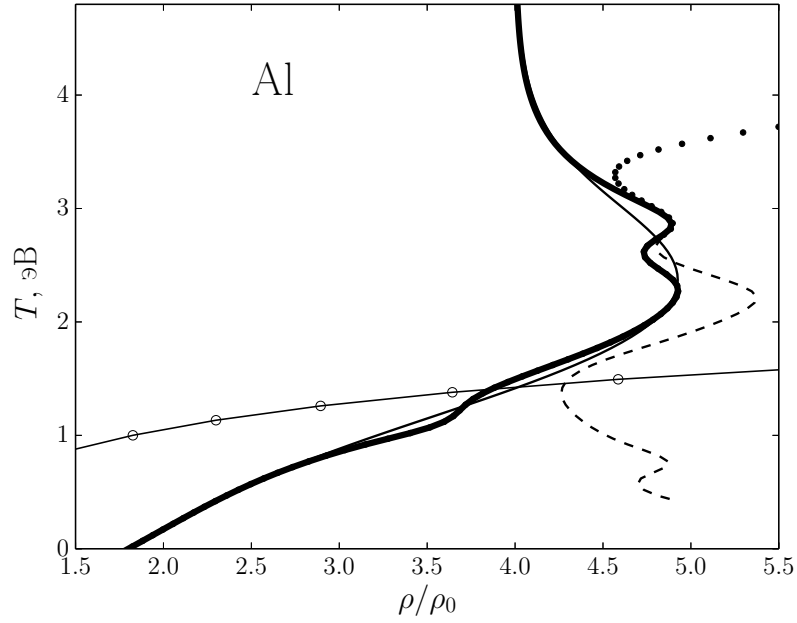


Рис. 4.5. Главная ударная адиабата Al. Тонкая сплошная линия — модель ТФП, тонкий пунктир — модель Саха. Жирная линия — интерполяция с $\kappa_0 = 0.1$. Жирный пунктир — учет излучения. Кружками маркирована линия испарения θ из (3.25с).

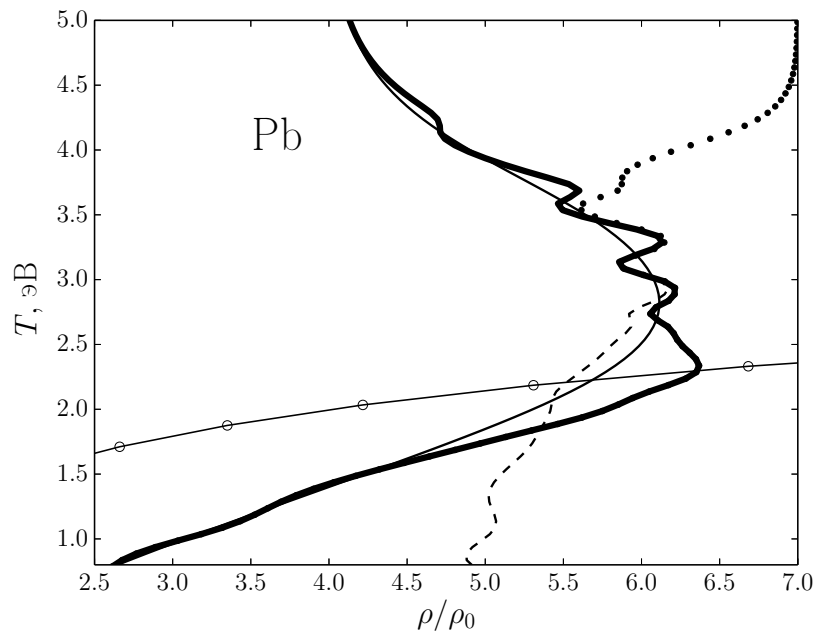


Рис. 4.6. Главная ударная адиабата Pb. Тонкая сплошная линия — модель ТФП, тонкий пунктир — модель Саха. Жирная линия — интерполяция с $\kappa_0 = 0.1$. Жирный пунктир — учет излучения. Кружками маркирована линия испарения θ из (3.25с).

ударным сжатиям [88].

Все ударные адиабаты пересекают линию "испарения" при сравнительно невысо-

кой температуре $T \approx 110$ эВ. Следовательно, плавный переход из жидкого состояния в газовое происходит в довольно широком коридоре вокруг этого значения.

Таким образом, выбранный способ интерполяции оказался удачным. Построенное на его основе широкодиапазонное уравнение состояния можно считать надежным.

Напомним, что в оптически плотном веществе надо учитывать вклад излучения. При $T > 2$ КэВ кривая снова поворачивает направо и стремится к пределу $\rho/\rho_0 = 7$, что эквивалентно трехатомному газу. При этом вклад излучения настолько велик, что становится почти незаметной осцилляцией, связанная с K -оболочкой. Однако на осцилляцию L -оболочки излучение уже не влияет. Таким образом, между кривой испарения и "включением" излучения лежит довольно широкий промежуток газовой плазмы, в котором можно наблюдать оболочечные эффекты в термодинамике.

Железо. Нормальное состояние железа соответствует $\rho_0 = 7.873$ г/см³ и $E_0 = -7.452$ КДж/г. Расчеты главной ударной адиабаты по различным моделям представлены на рис. 4.4. Общее поведение всех кривых разумно и качественно практически такое же, как у Си. Поэтому отдельно его описывать не будем.

Алюминий. Нормальное состояния алюминия соответствует $\rho_0 = 2.71$ г/см³ и $E_0 = -11.93$ КДж/г. Расчеты главной ударной адиабаты по различным моделям представлены на рис. 4.5. Общее качественное поведения такое же, как для Си, поэтому остановимся только на оболочечных эффектах.

На всех кривых, кроме ТФП, хорошо видна осцилляция, соответствующая K -оболочке. Она лежит выше остальных осцилляций, но температура при этом такова, что вклад излучения еще недостаточно велик и не маскирует ее. Ниже лежит осцилляция, обусловленная L -оболочкой. Она выражена гораздо резче, чем у Си. При этом обе описанные осцилляции лежат заметно выше кривой испарения, то есть относятся к газовой плазме.

M -оболочка содержит всего 3 наружных электрона. Она также порождает осцилляцию, но слабее выраженную. Тем не менее она отчетливо заметна на широкодиапазоном уравнении состояния. Однако эта осцилляция лежит ниже кривой испарения, поэтому ее достоверность проблематична.

Отметим, что все кривые пересекают линию "испарения" при $T \approx 25$ эВ. Это существенно ниже, чем для Си.

Свинец. Нормальное состояния свинца соответствует $\rho_0 = 11.346$ г/см³ и $E_0 = -0.95$ КДж/г. Расчеты главной ударной адиабаты по различным моделям представлены на рис. 4.6. Общее качественное поведения такое же, как для остальных металлов, с тем лишь отличием, что M -оболочке соответствуют множественные осцилляции в нижней и средней частях адиабаты.

4.3.3. Сравнение с экспериментом. Проведем сравнение расчетных ударных адиабат с экспериментами. Поскольку в экспериментах непосредственно измеряют скорость ударной волны D и массовую скорость U , сравнение следует производить в этих переменных. Скорости меняются в огромных пределах, поэтому выбор масштабов для построения графика очень важен. Здесь предлагается новый масштаб, никогда ранее не применявшийся: по оси абсцисс откладывается скорость D , а по оси ординат — отношение U/D . Это отношение меняется в небольших пределах от 0 до 1. Поэтому можно хорошо сравнивать значение экспериментов и теории в огромном диапазоне D на одном графике.

Медь. На рис. 4.7 сплошной линией показана теоретическая кривая, рассчитанная по нашему широкодиапазонному уравнению состояния для Cu.

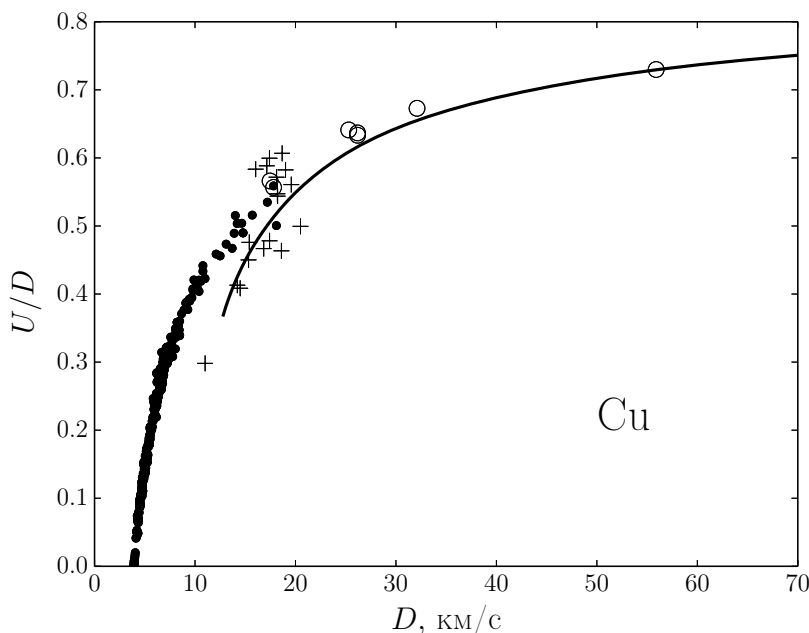


Рис. 4.7. Главная ударная адиабата Cu в скоростных переменных. Кривая — данная теория. Эксперименты на взрывчатках — жирные точки, в ядерных взрывах — светлые кружки, в лазерных взрывах — крестики.

Эксперименты взяты из компендиумов Лос-Аламосского [89], Ливерморского [90] и Саровского [91] разбиты на три группы.

Первая группа — это эксперименты на химических взрывчатках. В них обеспечивается давление примерно до 10 Мбар, а типичная точность таких экспериментов составляет 1–2%. Эта группа содержит более 200 измерений, показанных на рисунке черными точками.

Вторая группа содержит измерения в подземных ядерных взрывах. Этих измерений немного, и они обозначены кружками. Зато в них достигаются огромные давления до 200 Мбар. Погрешность этих экспериментов составляет примерно 3%.

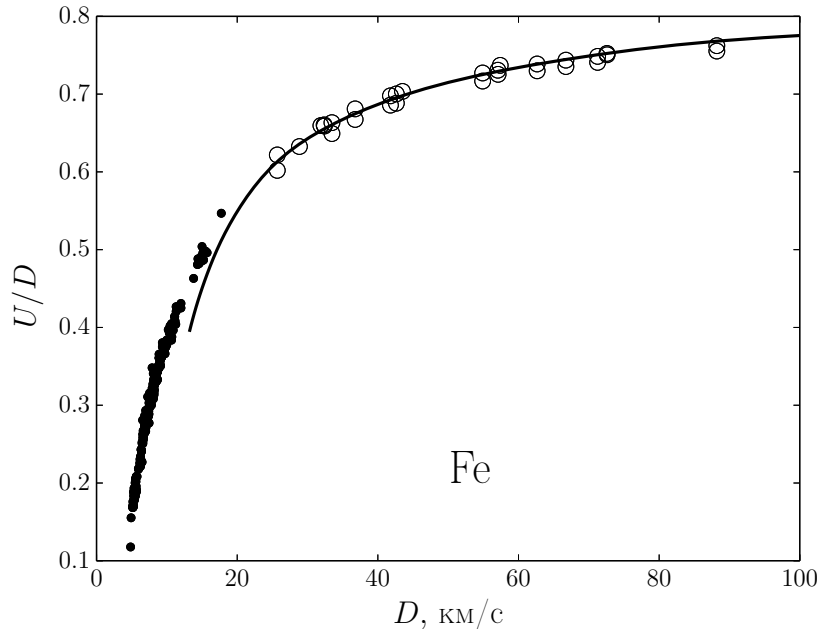


Рис. 4.8. Главная ударная адиабата Fe в скоростных переменных. Кривая — данная теория. Эксперименты на взрывчатках — жирные точки, в ядерных взрывах — светлые кружки.

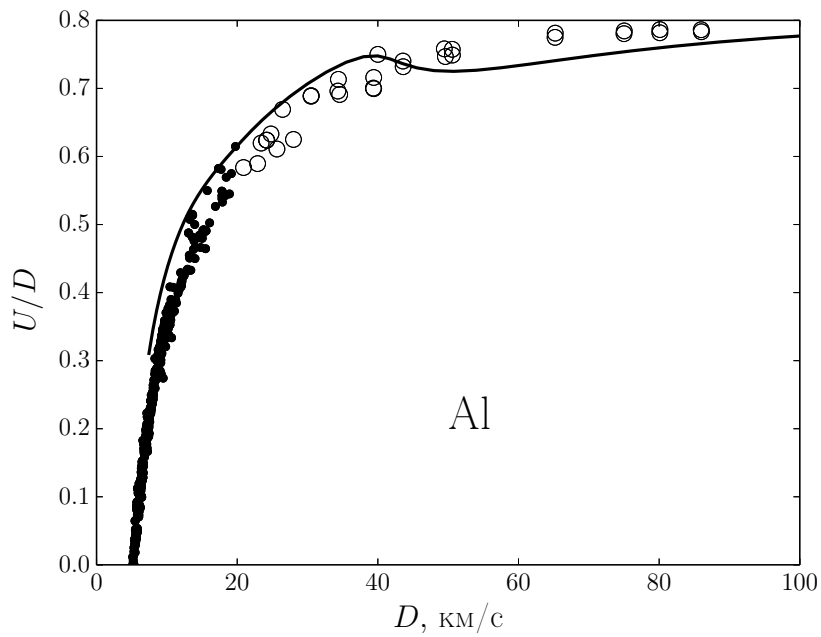


Рис. 4.9. Главная ударная адиабата Al в скоростных переменных. Кривая — данная теория. Эксперименты на взрывчатках — жирные точки, в ядерных взрывах — светлые кружки.

Третью группу составляют эксперименты по ударному сжатию лазерным пучком. Эти точки обозначены крестиком. Точность этих экспериментов очень низкая,

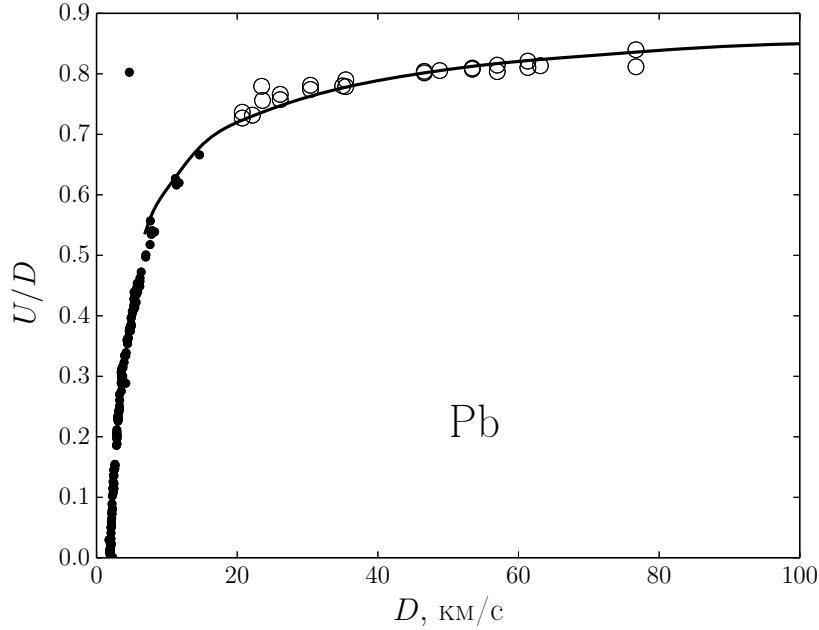


Рис. 4.10. Главная ударная адиабата Al в скоростных переменных. Кривая — данная теория. Эксперименты на взрывчатках — жирные точки, в ядерных взрывах — светлые кружки.

и погрешность может достигать 10–20%. Хотя они нанесены на рисунок, их можно не принимать во внимание.

Из рис. 4.7 видно, что при малых скоростях эксперименты существенно отличаются от теории. При увеличении D они быстро сближаются с ней. Начиная с $D \approx 20$ км/с, что соответствует давлениям $P \approx 20$ Мбар, экспериментальные точки ложатся на нашу теоретическую кривую с точностью 1–3%, что соответствует погрешности самих экспериментов. Таким образом, теоретические ударные адиабаты можно считать надежно подтвержденными, начиная с давлений ≈ 20 Мбар.

Железо. На рис. 4.8 проведено аналогичное сравнение для Fe. Здесь лазерные эксперименты отсутствуют. Как и для меди, экспериментальные данные выходят на теоретическую кривую при $D > 20$ км/с, что соответствует давлениям $P \approx 20$ Мбар.

Алюминий. Al лежит на границе между легкими и средними элементами. Поэтому модель ТФП для него хуже применима, что должно сказаться и на широкодиапазонном уравнении состояния. Его главная ударная адиабата в скоростных переменных приведена на рис. 4.9. Видно, что экспериментальные точки неожиданно хорошо вливаются в теоретическую кривую уже при $D \approx 6$ км/с, что соответствует давлению $P \approx 0.5$ Мбар. Однако затем имеется участок расхождения теории с экспериментами. Максимальное расхождение лежит при $D \approx 38$ км/с, и $P \approx 25$ Мбар. Далее эксперименты снова хорошо выходят на теоретическую кривую. Детально выявить причины такого поведения не удалось.

Свинец. Он относится к тяжелым металлам, где следует ожидать хорошей применимости модели ТФП. Действительно, из рис. 4.10 видно, что эксперименты хорошо совпадают с теорией, начиная с $D \approx 5$ км/с, что соответствует $P \approx 3$ Мбар.

Выводы. Наше широкодиапазонное уравнение состояния было построено строго из теоретических соображений. В нем отсутствуют какие-либо подгоночные параметры. Поэтому полученное согласие с экспериментом можно считать отличным.

4.4 Важнейшие результаты главы

1. Предложен метод построения широкодиапазонных уравнений состояния, основанный на использовании нескольких моделей с разными областями применимости и обеспечивающий строгую термодинамическую согласованность всех полученных термодинамических функций.
2. С помощью найденного метода построено широкодиапазонное уравнение состояния плазмы с использованием модели Саха в газовой области и модели ТФП в области жидкой плазмы.
3. Разработан математический алгоритм и программный комплекс для расчета ударных адиабат плазмы.
4. Рассчитаны главные ударные адиабаты Cu, Fe, Al и Pb. Проанализированы осцилляционные эффекты, связанные с оболочечной структурой атома. Проведено сравнение с ударно-волновыми экспериментами. Получено отличное согласие, при давлениях 20 Мбар и выше, что является надежной верификацией предложенной модели.

5. Аппроксимация гладких функций

В этой главе рассмотрен вопрос аппроксимации гладких непериодических функций одной и двух переменных. Разрабатывался новый метод — *метод двойного периода*, использующий ряды Фурье. По скорости сходимости он кардинально превосходит классические ряды Фурье. Метод применен для аппроксимации всех термодинамических функций жидкой плазмы (из гл. 3).

5.1 Постановка задачи

Пусть на конечном интервале $[a; b]$ задана достаточно гладкая $u(x)$. Задача ее наилучшей среднеквадратичной аппроксимации обобщенным многочленом $\Phi_N(x) = \sum_{n=0}^N c_n \phi_n(x)$ по системе базисных функций $\{\phi_n(x)\}$ изучается давно. Коэффициенты $\{c_n\}$, при которых $\|u - \Phi_N\|_{L_2}$ принимает свое наименьшее значение, удовлетворяют системе линейных уравнений:

$$\sum_{n=0}^N (\phi_k, \phi_n) c_n = (\phi_k, u), \quad 0 \leq k \leq N, \quad (5.1)$$

коэффициенты которой образуют матрицу Грама для базисных функций.

Если функции $\{\phi_n(x)\}$ не ортогональны, то система обычно плохо обусловлена. Поэтому, вообще говоря, с неортогональными системами работать сложно.

Дополнительно в прикладных задачах от построенных аппроксимаций могут требоваться особенные свойства:

1. равномерность распределения ошибки $u(x) - \Phi_N$ на интервале $[a; b]$: требуется аппроксимировать функцию одинаково хорошо как в средней части интервала $[a; b]$, так и на его границах;
2. требуется аппроксимировать как саму функцию $u(x)$, так и несколько ее младших производных;
3. экстраполяция: разумное поведение построенной аппроксимации недалеко за пределами интервала $[a; b]$.

Для периодических функций $u(x)$ наиболее удобно разложение в тригонометрический ряд Фурье. Если существует непрерывная производная $u^{(p)}(x)$, то почленное

дифференцирование ряда q раз ($q \leq p$) дает ряд для $u^{(q)}(x)$, сходящийся в норме L_2 с погрешностью $O(N^{-(p-q+1/2)})$ и в норме C со скоростью $O(N^{-(p-q)})$. Оценка локальной погрешности аппроксимации, как $u(x)$, так и ее производных, оказывается одинаковой во всех точках интервала аппроксимации.

Сами члены тригонометрического ряда Фурье просто и устойчиво вычисляются на компьютере при любых больших значениях индекса и аргумента. Стандартные программы их вычислений основаны на приведении аргумента к первой четверти и разложении в ряд Тейлора, так что ошибки округления пренебрежимо малы даже при очень больших n .

Для непериодической функции $u(x)$ разложение в тригонометрический ряд Фурье сходится к ее периодическому продолжению. Оно в общем случае разрывно, так что сходимости на концах отрезка будет очень плохой (так называемый эффект Гиббса). Если же воспользоваться разложением по классическим ортогональным многочленам (см. [92]), например, полиномам Чебышева первого рода $T_n(x)$, то погрешность аппроксимации производных резко возрастает вблизи границ.

Отсюда возникает вопрос: как использовать ряды Фурье для аппроксимации непериодических функций?

5.2 Метод двойного периода

Оригинальная идея метода двойного периода была предложена Н. Н. Калиткиным в [93]. Однако для практической применимости предложенная идея потребовала существенных последовательных доработок и изменений произведенных в работах автора [94, 95, 96, 97, 98, 99].

5.2.1. Метод. Пусть отрезок $[a; b]$ линейно преобразован в $[-\frac{\pi}{2}; \frac{\pi}{2}]$, так что $u(x)$ задана на последнем отрезке, непрерывна и ограничена вместе с p младшими производными.

Определим на этом отрезке скалярное произведение в смысле интеграла с единичным весом:

$$(u, v) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} u(x)v(x)dx. \quad (5.2)$$

Если функции заданы на произвольной (в общем случае неравномерной) сетке $-\pi/2 = x_0 < x_1 < \dots < x_R = \pi/2$, то их скалярное произведение определяется в смысле некоторой квадратурной формулы. Для произвольной неравномерной сетки нет ничего лучше формулы трапеций:

$$(u, v) = \frac{1}{2} \sum_{r=0}^{R-1} (u_r v_r + u_{r+1} v_{r+1}) (x_{r+1} - x_r). \quad (5.3)$$

Рассмотрим обобщенный многочлен

$$\Phi_{N,M}(x) = \sum_{n=0}^{2N} c_n \phi_n(x) + \sum_{m=1}^M c_{m+2N} \psi_m(x), \quad (5.4)$$

составленный из двух тригонометрических подсистем. Первая подсистема содержит только четные гармоники, подключаемые в расчет парами синус и косинус:

$$\{\phi_n(x), 0 \leq n \leq 2N\} = \{1, \sin 2x, \cos 2x, \sin 4x, \cos 4x, \dots, \sin 2Nx, \cos 2Nx\}. \quad (5.5)$$

Вторая подсистема содержит только нечетные гармоники, и они подключаются в расчет поодиночке:

$$\{\psi_m(x), 1 \leq m \leq M\} = \{\sin x, \cos x, \sin 3x, \dots\}. \quad (5.6)$$

Легко видеть, что подсистема (5.5) есть полная система Фурье для периода π , равного длине отрезка задания $u(x)$. В совокупности (5.5) и (5.6) образуют полную систему Фурье на вдвое большем отрезке длины 2π . Отсюда название метода двойного периода.

Исследуем структуру матрицы скалярных произведений (матрицы Грама).

5.2.2. Матрица Грама. Легко проверить, что на отрезке $[-\frac{\pi}{2}; \frac{\pi}{2}]$ каждая подсистема (5.5) и (5.6) ортогональна. При этом

$$(1, 1) = \pi; \quad (\cos kx, \cos lx) = (\sin kx, \sin lx) = \pi/2, \quad (k \geq 1). \quad (5.7)$$

Однако подсистемы (5.5) и (5.6) взаимно не ортогональны, но в силу четности все синусы одной подсистемы ортогональны косинусам другой подсистемы. Ненулевыми остаются лишь следующие недиагональные элементы матрицы, которые вычисляются аналитически:

$$(\cos kx, \cos lx) = (-1)^{(k-l-1)/2} \left[\frac{1}{k-l} + \frac{(-1)^l}{k+1} \right], \quad (5.8a)$$

$$(\sin kx, \sin lx) = (-1)^{(k-l-1)/2} \left[\frac{1}{k-l} - \frac{(-1)^l}{k+1} \right], \quad (5.8b)$$

где $(k+l)$ — нечетное. Если упорядочить базисные функции так, чтобы подсистема (5.6) записывалась после подсистемы (5.5), то матрица Грама примет вид, изображенный в табл. 5.1. Она состоит из двух квадратных клеток, каждая из которых диагональна, и двух прямоугольных клеток, заполненных в шахматном порядке. Для $N=2, M=3$ построенная матрица Грама показана в табл. 5.2.

Легко видеть, что линейная система уравнений с такой матрицей расщепляется на две независимые подсистемы, соответствующие синусам и косинусам. Каждая из них имеет аналогичную клеточную структуру, причем прямоугольные клетки будут

Таблица 5.1. Общая структура матрицы скалярных произведений Грама.

| | | | | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| ● | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ● | ○ | ● |
| ○ | ● | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| ○ | ○ | ● | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| ○ | ○ | ○ | ● | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| ○ | ○ | ○ | ○ | ● | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |

Таблица 5.2. Матрица Грама для $N = 2, M = 3$.

| | 1 | $\sin 2x$ | $\cos 2x$ | $\sin 4x$ | $\cos 4x$ | $\sin x$ | $\cos x$ | $\sin 3x$ |
|-----------|-------|-----------|-----------|-----------|-----------|----------|----------|-----------|
| 1 | π | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 2 | 0 |
| $\sin 2x$ | 0 | $\pi/2$ | 0 | 0 | 0 | $4/3$ | 0 | $4/5$ |
| $\cos 2x$ | 0 | 0 | $\pi/2$ | 0 | 0 | 0 | $-8/15$ | 0 |
| $\sin 4x$ | 0 | 0 | 0 | $\pi/2$ | 0 | $-2/35$ | 0 | $-8/7$ |
| $\cos 4x$ | 0 | 0 | 0 | 0 | $\pi/2$ | 0 | $-2/15$ | 0 |
| $\sin x$ | 0 | $4/3$ | 0 | $-2/35$ | 0 | $\pi/2$ | 0 | 0 |
| $\cos x$ | 2 | 0 | $-8/15$ | 0 | $-2/15$ | 0 | $\pi/2$ | 0 |
| $\sin 3x$ | 0 | $4/5$ | 0 | $-8/7$ | 0 | 0 | 0 | $\pi/2$ |

заполнены целиком. Порядок первой квадратной клетки равен $N + 1$ для матрицы косинусов и N для матрицы синусов. Это расщепление удобно использовать для решения линейной системы.

5.2.3. Сходимость. Подсистема (5.5) полна на $[-\frac{\pi}{2}; \frac{\pi}{2}]$: любая кусочно-непрерывная $u(x)$ разлагается по ней в ряд Фурье, сходящийся в норме L_2 . Значит, добавление подсистемы (5.6) делает задачу аппроксимации переопределенной, если $N = \infty$. При конечном N это не так. Тогда какова роль второй подсистемы?

Пусть $u(x)$ достаточно гладкая, но неперіодическая. Тогда ее периодическое продолжение разрывно (вместе с производными) на границах отрезка. При отсутствии второй подсистемы ($M = 0$) ряд Фурье для $u(x)$ по подсистеме (5.5) сходится медлен-

но. Погрешность аппроксимации δ_{L_2} с ростом N убывает как $O(N^{-1/2})$. Включение в расчет функции $\psi_1(x) \equiv \sin(x)$ эквивалентно вычитанию из $u(x)$ граничного разрыва; остается непрерывная функция с разрывом первой производной, а сходимость разложения по подсистеме (5.5) улучшается до $O(N^{-3/2})$. Включение в расчет функции $\psi_2(x) \equiv \cos(x)$ эквивалентно исключению разрыва $u'(x)$, что ускоряет сходимость до $O(N^{-5/2})$ и так далее.

Таким образом, включение подсистемы (5.6) ускоряет сходимость разложения $u(x)$ по подсистеме (5.5). Поэтому функции $\psi_m(x)$ целесообразно подключать в расчет поодиночке, беря число M небольшим, а функции $\phi_n(x)$ — парами, беря N возможно большим.

Справедливы следующие теоремы.

Теорема 1. *Если $u(x)$ интегрируема с квадратом на отрезке $[-\frac{\pi}{2}; \frac{\pi}{2}]$, то аппроксимация (5.4), (5.5), (5.6) сходится к ней в норме L_2 .*

Доказательство. Возьмем любое интегрируемое с квадратом продолжение $u(x)$, имеющее период 2π . Тригонометрический ряд Фурье на $[-\pi; \pi]$ сходится к нему в норме L_2 . Но аппроксимация (5.4), (5.5), (5.6) при равном числе членов обеспечивает меньшую погрешность на отрезке $[-\frac{\pi}{2}; \frac{\pi}{2}]$ и, следовательно, сходится. \square

Теорема 2. *Если на $[-\frac{\pi}{2}; \frac{\pi}{2}]$ существует ограниченная $u^p(x)$, а все младшие производные непрерывны, то*

$$\|\Phi_{N,M} - u(x)\|_{L_2} \leq K (2N + M + 1)^{-p} \ln(2N + M + 1), \quad (5.9)$$

где K зависит от $u(x)$ и ее производных.

Доказательство. Возьмем любое, не ухудшающее гладкости, продолжение $u(x)$, имеющее период 2π . Применяя известные оценки сходимости для ряда Фурье [100], получим (5.9). \square

Ограничения на выбор конкретных параметров N и M метода двойного периода ставит обусловленность матрицы Грама. Этот вопрос отдельно исследовался в работах автора [97] и [98].

5.3 Обусловленность метода двойного периода

Рассмотрим два различных по сути подхода к оценке обусловленности: эмпирический (специально предложенный для данной матрицы) и угловой критерий обусловленности из [101]. Эти критерии дали практически одинаковый результат, и на их основании предложены оптимальные параметры двойного периода.

5.3.1. Эмпирический критерий. При $M = 0$ матрица Грама диагональная, и обусловленность идеальная; но этот случай неинтересен.

При $M = 1$ прямоугольные клетки матрицы (см. табл. 5.1) превращаются в строку и столбец. Исключение нижней строки методом Гаусса при этом нетрудно сделать явно. Угловой элемент матрицы Грама, принимавший ранее значение $a_{2N+1,2N+1} = \frac{\pi}{2}$, становится равным

$$a'_{2N+1,2N+1} = \frac{\pi}{2} - \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^N \left(\frac{4n}{4n^2 - 1} \right)^2 = \frac{4}{\pi(2N+1)} [1 + O(N^{-2})]. \quad (5.10)$$

Уменьшение этого элемента примем за меру обусловленности:

$$\frac{a'_{2N+1,2N+1}}{a_{2N+1,2N+1}} \approx \frac{8}{\pi^2(2N+1)}. \quad (5.11)$$

Из (5.11) видно, что при увеличении N обусловленность ухудшается, но очень медленно. Это позволяет использовать большие значения N без потери точности решения линейной системы. При $N \rightarrow \infty$ матрица Грама стремится к вырожденной, что объясняется переобусловленностью задачи аппроксимации.

Для $M = 2$, благодаря шахматному заполнению прямоугольной клетки, новая строка также легко исключается, что дает новый диагональный элемент и число обусловленности

$$a'_{2N+2,2N+2} = \frac{4}{3\pi(2N+1)^3} [1 + O(N^{-2})]; \quad (5.12)$$

$$\frac{a'_{2N+2,2N+2}}{a_{2N+2,2N+2}} \approx \frac{8}{\pi^2(2N+1)^3}. \quad (5.13)$$

Видно, что обусловленность существенно хуже, чем для $M = 1$.

Для $M > 2$ аналогичные оценки трудно сделать. Кроме того, (5.11), (5.13) лишь приблизительно можно считать оценками обусловленности. Поэтому их следует проверить численными расчетами. Такие расчеты были проведены.

При тестировании для каждой пары N, M строилась матрица Грама (5.7), (5.8). Выбирались 10 векторов \mathbf{y} , компонентами которых были псевдослучайные числа. Для каждого такого столбца вычислялась правая часть $\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{y}$; ошибками округления при этой операции можно пренебречь. Затем методом Гаусса решалась линейная система $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ с этой правой частью. Восстановленное решение сравнивалось с исходным и определялась погрешность

$$\delta = \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|_{L_2} / \|\mathbf{y}\|_{L_2}. \quad (5.14)$$

Для 10 решений бралось среднее арифметическое δ и среднеквадратичное отклонение от него. Такой тест достаточно представительен. На рис. 5.1 представлена зависимость

$\lg \delta(N)$ для разных M при 64-разрядных вычислениях. Видно, что с увеличением M обусловленность быстро ухудшается. Для сравнения на рис. 5.1 сплошными линиями показаны оценки обусловленности (5.11), (5.13), соответственно помноженные на относительную погрешность единичной операции $\delta_{op} = 10^{-16}$. Согласие оказалось отличным. По аналогии с (5.11), (5.13) для $M > 2$ ожидается

$$\delta \sim (2N + 1)^{-(2M-1)}. \quad (5.15)$$

Эти оценки обусловленности систем также показаны на рис. 5.1 сплошными линиями. Эмпирическая оценка (5.15) хоть и требует подгонки, исключительно хорошо согласуется с расчетами.

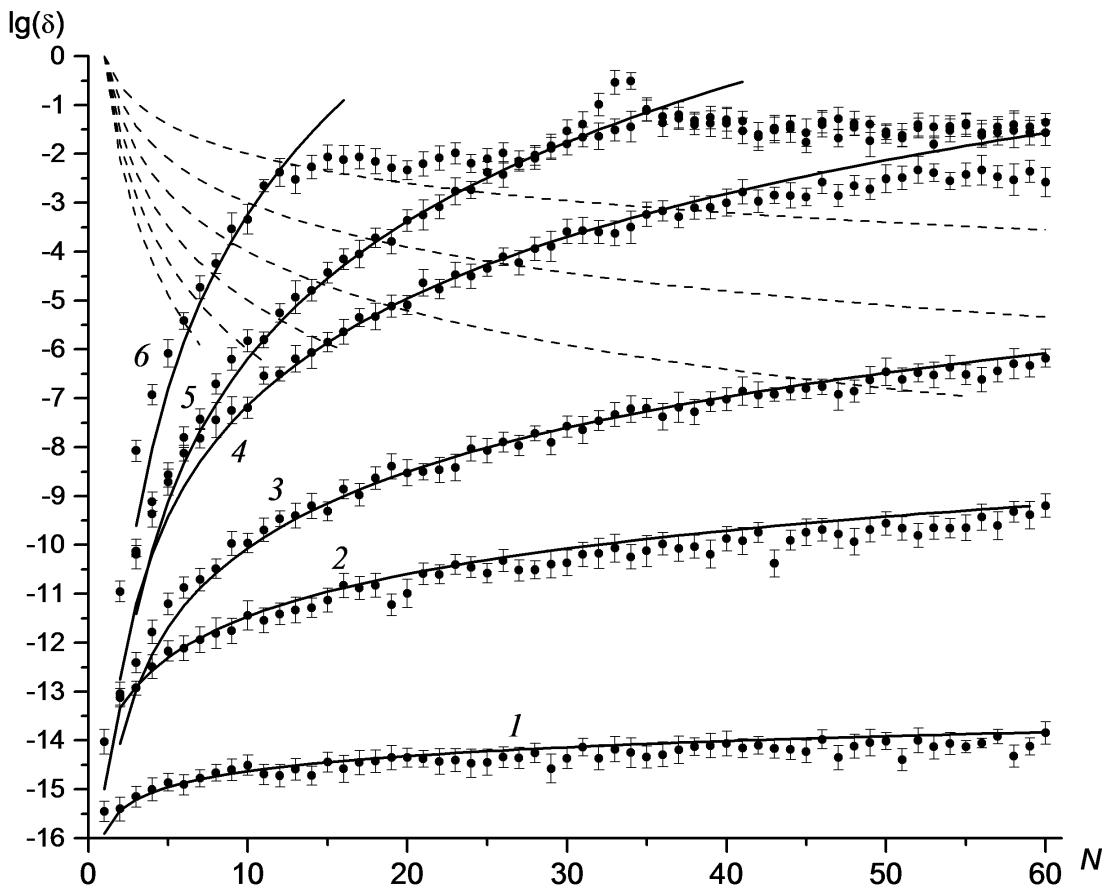


Рис. 5.1. Эмпирический критерий обусловленности. Точки с разбросами — численные расчеты ошибок округления коэффициентов разложения (при 64-разрядных вычислениях); сплошные линии — их теоретические оценки; штриховые линии — оценки самих коэффициентов. N — ось абсцисс, M — цифры около кривых

5.3.2. Угловой критерий. В [101] был предложен новый количественный критерий обусловленности — угловой. В нем под числом обусловленности матрицы понимается

такое число, при котором величина $\lg \delta$ есть количество десятичных знаков, теряемых при численном решении линейной системы уравнений с этой матрицей. Конструктивно угловой критерий строится из геометрических соображений. Так как (см. [101]) решение системы есть точка пересечения всех гиперплоскостей, соответствующих отдельным уравнениям системы, то к потере точности приводит наличие малых углов между этими гиперплоскостями и различными элементами их пересечений. Обозначая за α минимальный из этих углов, критерий обусловленности вводится как

$$\delta = 1/\sin \alpha. \quad (5.16)$$

Для вычисления этого значения можно воспользоваться формулой

$$\delta = \max_i (|\mathbf{a}_i| \cdot |\mathbf{c}_i|), \quad (5.17)$$

где \mathbf{a}_i — i -я вектор-строка матрицы, а \mathbf{c}_i — i -й вектор-столбец обратной к ней матрицы. На рис. 5.2 сплошными линиями аналогично рис. 5.1 показаны оценки обусловленности (5.15).

Толстыми линиями показаны значения углового числа обусловленности (5.16), вычисленного по формуле (5.17). Согласие с расчетом оказалось отличным.

5.3.3. Оптимальные параметры. Таким образом, выяснен вопрос о потере точности, связанной с ошибками округления при решении линейной системы уравнений с матрицей двойного периода (5.7), (5.8). По рис. 5.2 для каждой пары значений N , M определяется количество теряемых знаков. Перед тем как предложить оптимальные параметры, сформулируем некоторые результаты проведенных тестов на обусловленность.

1. Угловой критерий (5.16) из геометрических соображений кажется не улучшаемым, то есть количественно он соответствует точной верхней грани множества ошибок округления в конкретных расчетах. Это хорошо согласуется с расчетами, показанными на рис. 5.2, где теоретические кривые $\lg \delta(N)$ (рассчитанные по формуле (5.17)) проходят через верхнюю границу разбросов экспериментальных точек. Это объясняет отличие критерия (5.16) от эмпирических оценок обусловленности (5.15). Таким образом, удобно ошибку представить в виде

$$\delta_{N,M} = C_{N,M}(2N + 1)^{2M-1}. \quad (5.18)$$

При $N \rightarrow \infty$ значение коэффициента $C_{N,M}$ устанавливается с хорошей точностью для $M = 1, 2, 3, 4$. В табл. 5.3 приводятся численные коэффициенты в приближении (5.18) для каждого значения M . Видно, что число достоверных знаков быстро убывает с ростом M . Для случая $M = 1$ удалось подобрать эмпирическое выражение:

$$C_{N,1} = \frac{\pi^2}{4} \frac{5N - 1}{5N}, \quad (5.19)$$

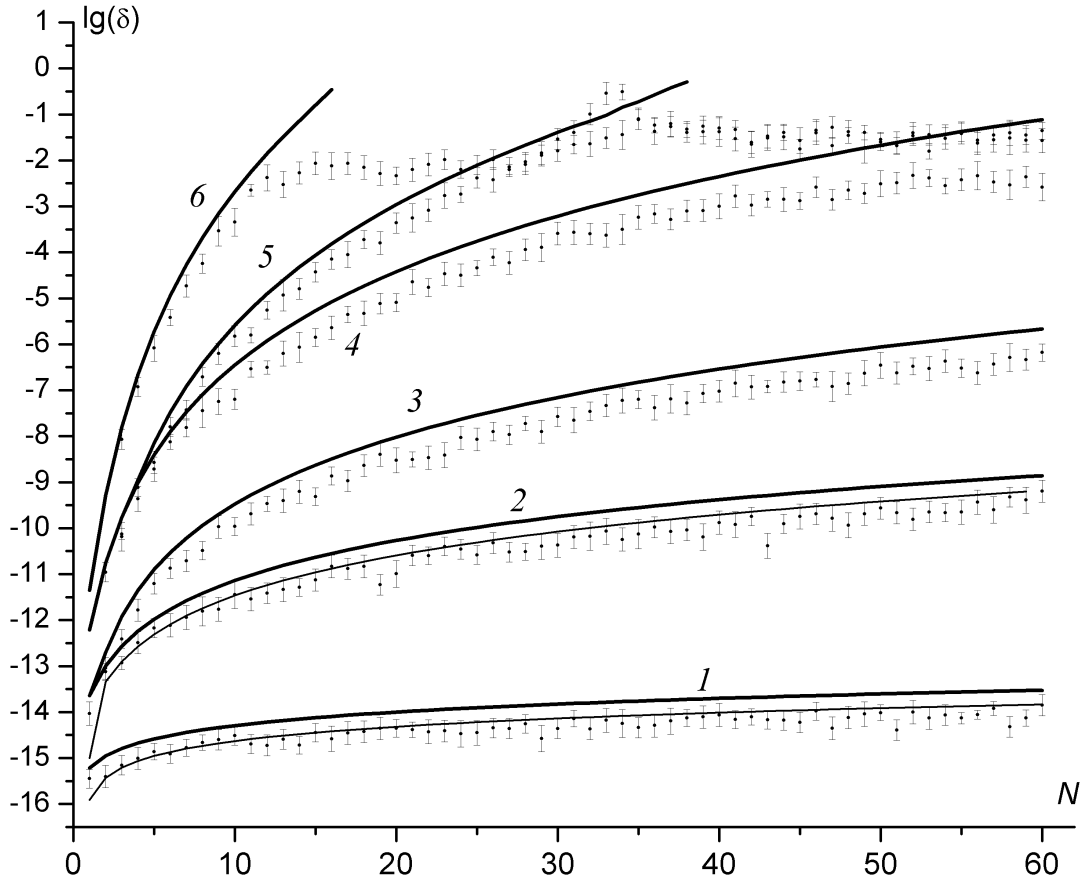


Рис. 5.2. То же, что и рис. 5.1. Добавлены толстые линии — ошибки округления, рассчитанные по угловому критерию обусловленности.

имеющее точность не хуже 0.05% и дающее $C_{\infty,1} = \frac{\pi^2}{4}$.

2. Расчеты показали, что сходимость $C_{N,M} \rightarrow C_{\infty,M}$ носит быстрый характер, подобно (5.19). Уже при $N = 10$ отличие $C_{10,M}$ от $C_{\infty,M}$ составляет не более 5% для всех значений M . Это позволяет сформулировать рекомендации для практического использования метода. Если требуется расчет с точностью ε , то допустимая потеря точности составляет

$$\delta = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_{\text{маш}}} = C_{\infty,M} (2N + 1)^{2M-1}, \quad (5.20)$$

откуда получается максимально допустимое значение N :

$$N_{\text{max}} \approx \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_{\text{маш}}} C_{\infty,M} \right)^{1/(2M-1)} - 1. \quad (5.21)$$

Например, если строится аппроксимация, имеющая непрерывную вторую производную (то есть $M = 3$) с требуемой точностью $\varepsilon = 10^{-5}$, то при 64-разрядных вычислениях из (5.21) получаем $N_{\text{max}} \approx \frac{1}{2} \left(\frac{10^{-5}}{10^{-16}} C_{\infty,3} \right)^{1/5} - 1 \approx 76$. Формулу (5.21) удобно использовать для практического определения оптимальных параметров метода двойного периода.

3. Критерий (5.16) не зависит от разрядности вычислений. По нему можно оценить целесообразность перехода на большую (для повышения точности) или меньшую (для повышения производительности) разрядность.
4. Критерий легко линейно обобщается на многомерный метод двойного периода [99]. Если в двумерном случае используется N_x , M_x функций по одной переменной и N_y , M_y по другой, то при решении двумерной задачи количество теряемых знаков будет складываться из соответствующих значений по каждой из переменных x , y .
5. Легко видеть, что линейная система уравнений с матрицей (5.7), (5.8) расщепляется на две независимые подсистемы, соответствующие синусам и косинусам. Каждая из них имеет аналогичную клеточную структуру, причем прямоугольные клетки будут заполнены целиком. Вопреки [93], такое расщепление не дает выигрыша в точности (из геометрической интерпретации углового критерия [4]) и может быть использовано только с целью ускорения при параллельном решении двух независимых систем.

Таблица 5.3. Коэффициенты $C_{\infty, M}$ при аппроксимации погрешности формулой (5.17) с тем числом знаков, которые надежно устанавливаются в процессе расчета.

| | | | | | | |
|-----------------|-----------|------|-------|------|------|------|
| M | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
| $C_{\infty, M}$ | $\pi^2/4$ | 7.83 | 0.828 | 2.00 | 0.03 | 0.06 |

Для практики удобно сформулировать следующие оптимальные параметры метода двойного периода.

1. $M = 2$ и большое число $N \approx 250$ для функций со сложным поведением (довольно большим числом экстремумов и т. п.).
2. $M = 3$ и умеренное $N \leq 50$ для функций с достаточно простым поведением (парой экстремумов и т. п.).
3. При особо простом поведении $u(x)$ допустимо $M = 4$ и более, а при особо большом количестве экстремумов — $M = 1$.

Таковы оптимальные параметры метода двойного периода.

5.3.4. Примеры.

Линейная функция. Рассмотрим функцию $u(x) = x$, $x \in [-\pi/2; \pi/2]$. Ее разложение по системе (5.5)-(5.6) показано на рис. 5.3. Сама функция табулирована в 100 точках. Для всех значений M бралось $N = 14$. Видно, что при $M = 0$ сходимость разложения вблизи конца отрезка плохая (эффект Гиббса). При увеличении M аппроксимация существенно улучшается и при $M \geq 2$ становится пригодной для экстраполяции.

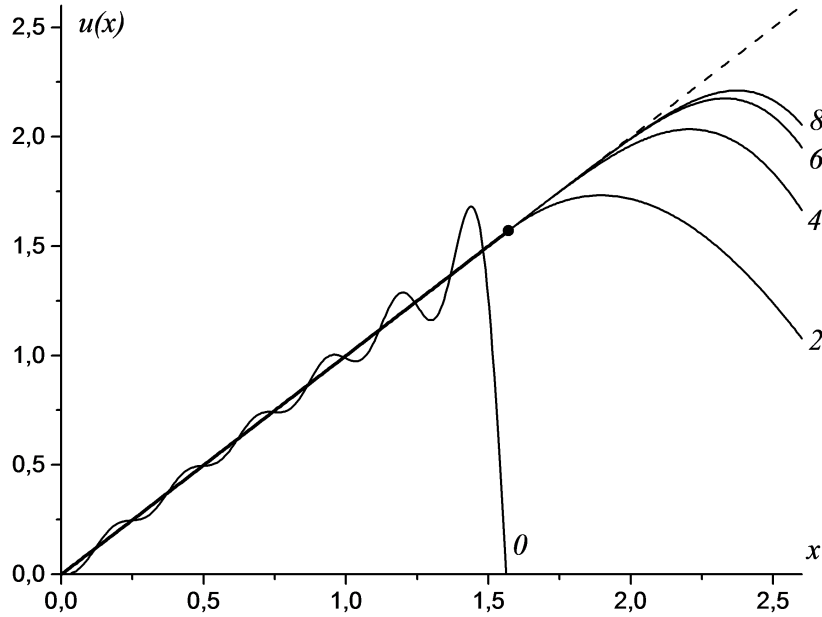


Рис. 5.3. Экстраполяция функции $u(x) = x$ методом двойного периода. Заданный отрезок — жирная линия; экстраполяция — тонкие линии, около них указаны значения M .

Таблица 5.4. Погрешность аппроксимации кривых холодного сжатия в нормах C и L_2 . Здесь $\varepsilon = (-\partial E/\partial V - P)/P$.

| Величина | $\lg E$ | $\lg E$ | $\lg P$ | $\lg P$ | ε | ε |
|----------------------|------------|------------|------------|------------|---------------|---------------|
| Параметры $\{N, M\}$ | $\{5, 3\}$ | $\{9, 3\}$ | $\{5, 3\}$ | $\{9, 3\}$ | $\{5, 3\}$ | $\{9, 3\}$ |
| δ_C | 0,00074 | 0,00008 | 0,0005 | 0,0003 | 0,006 | 0,0035 |
| δ_{L_2} | 0,00026 | 0,00003 | 0,0018 | 0,0001 | 0,0032 | 0,00014 |

Кривые холодного сжатия. Возьмем кривые холодного давления и энергии модели Томаса-Ферми, описанные в гл. 3. Будем их табулировать с шагом $\Delta \lg V = 0.1$ в диапазоне $-4 \leq \lg V \leq 11$ и строить аппроксимации с различными параметрами N, M . Наиболее удачными оказались 2 случая. Их относительные погрешности приведены в табл. 5.4. Полученная точность перекрывает потребности практики, а число параметров соответственно в разы меньше, чем число точек табуляции. Удалось не только построить пригодные для практики аппроксимации. Пользуясь возможностями метода двойного периода, аппроксимация энергии при дифференцировании по объему удовлетворяла термодинамическому соотношению

$$\partial E/\partial V = -P. \quad (5.22)$$

Ошибки аппроксимаций и отклонение от соотношения (5.22) приведены в табл. 5.4.

Сравнение с полиномами Чебышева. Полиномы Чебышева первого рода считаются удобными для аппроксимации непериодических функций. Проведем сравнение аппроксимаций полиномами Чебышева и методом двойного периода на следующем наборе данных. Возьмем кривые кросс курсов валют во времени. Это существенно негладкие кривые, содержащие высокочастотные колебания. Поэтому при построении аппроксимации потребуется много параметров. Поскольку нас интересует относительное отклонение ошибки, будем использовать не сами величины курсов, а их десятичный логарифм.

На рис. 5.4 показано, как убывает ошибка аппроксимации в нормах C и L_2 с ростом числа параметров (напомним, что для многочленов Чебышева число параметров — это просто число многочленов, а для метода двойного периода — это общее число базисных функций $2N + M + 1$). В норме L_2 погрешность должна убывать с увеличением числа параметров. Но так как сами значения параметров определяются по выборке размера R , мы в качестве нормы берем среднеквадратичное отклонение в смысле статистики:

$$\delta_{L_2} = \sqrt{\sum_{k=1}^R (x_k - \bar{x})^2 / (R - 2N - M - 1)}. \quad (5.23)$$

Такая погрешность должна убывать, пока число параметров не слишком близко к числу членов выборки. Видно, что для метода двойного периода это хорошо выполняется: загиб кверху наблюдается только при $R \approx 2N + M + 1$. Однако для многочленов Чебышева резкий загиб кверху происходит, когда число параметров составляет всего лишь половину от числа точек выборки. Также видно, что при малом числе параметров погрешность обоих методов почти одинакова и довольно быстро спадает: при 30 параметрах она достигает значения ~ 0.03 , что означает 7% для нелогарифмированной величины. Далее погрешность убывает медленно и в методе двойного периода доходит до 0.01 (2.3% нелогарифмированной величины), а для многочленов Чебышева она не опускается ниже 0.025 (5.8% нелогарифмированной величины). Безусловно, такая погрешность не мала; однако следует учитывать, что она относится ко всему диапазону значений функции.

Отметим, что погрешность в норме C в обоих случаях убывает немонотонно. Это неудивительно, поскольку ищется наилучшее приближение в норме L_2 . Заметим, что в методе двойного периода погрешность в норме C приближается к погрешности в L_2 с ростом числа параметров и в конце концов выходит на то же значение 2.3%. Для многочленов Чебышева это не так: погрешность все время остается довольно большой.

Наряду с нормами интересно поточечное сравнение. На рис. 5.5 построены аппроксимации с 25 параметрами. Оба способа дают одинаковую погрешность в среднем (рис. 5.4), но качественно аппроксимация многочленами Чебышева сильно сгла-

живает осциллирующие участки, а метод двойного периода их подчеркивает. Кроме того, уже при столь небольшом числе параметров настораживают «всплески» кривой между точками вблизи краев. При увеличении числа параметров до 35 (см. рис. 5.6) «всплески» катастрофически увеличиваются (причем погрешность во всех точках остается умеренной) — это неправдоподобно. В методе двойного периода такого поведения не наблюдается.

Данные примеры демонстрируют эффективность метода двойного периода для различных актуальных прикладных задач и разумность приведенных оптимальных параметров.

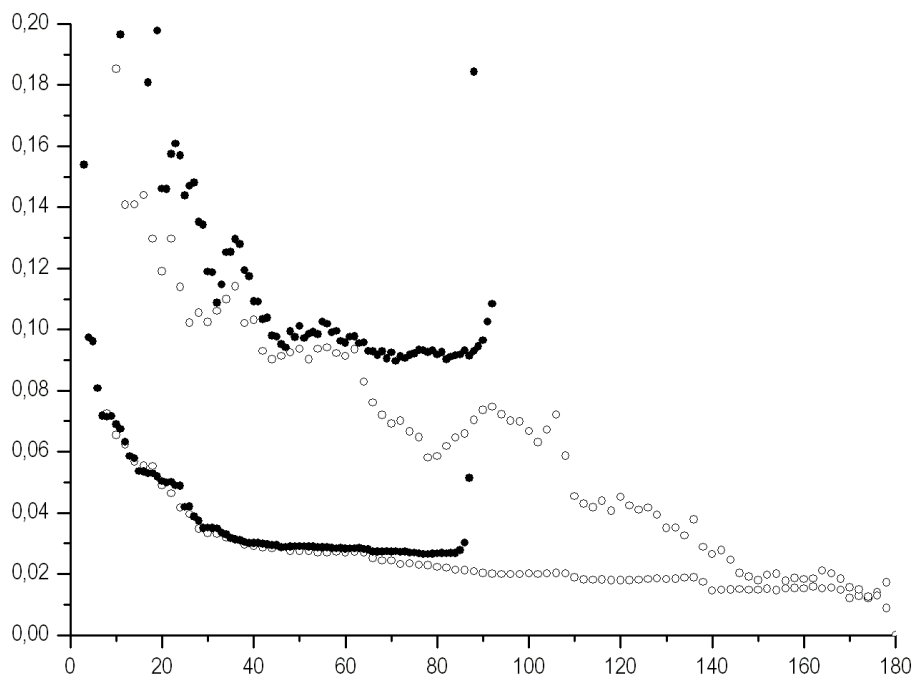


Рис. 5.4. Зависимость ошибки аппроксимации сильно осциллирующей функции по методу двойного периода (белые точки) и многочленам Чебышева первого рода (черные кружки) в нормах C (верхний набор точек) и L_2 (нижний набор точек) от количества параметров (ось абсцисс).

Обобщение на случай неравномерной сетки. Пусть функция $u(x)$ задана на произвольной сетке $\{x_r, 0 \leq r \leq R, x_0 = -\pi/2, x_R = \pi/2\}$. Тогда скалярное произведение определяется по формуле трапеций (5.3). На неравномерной сетке любая пара базисных функций (5.5)–(5.6) становится неортогональной, даже синус неортогонален косинусу. Однако если все шаги сетки достаточно малы, то формула (5.3) аппроксимирует интеграл с точностью $O(h_{max}^2)$. Тогда все элементы матрицы мало изменятся по сравнению с «интегральным» скалярным произведением, и система

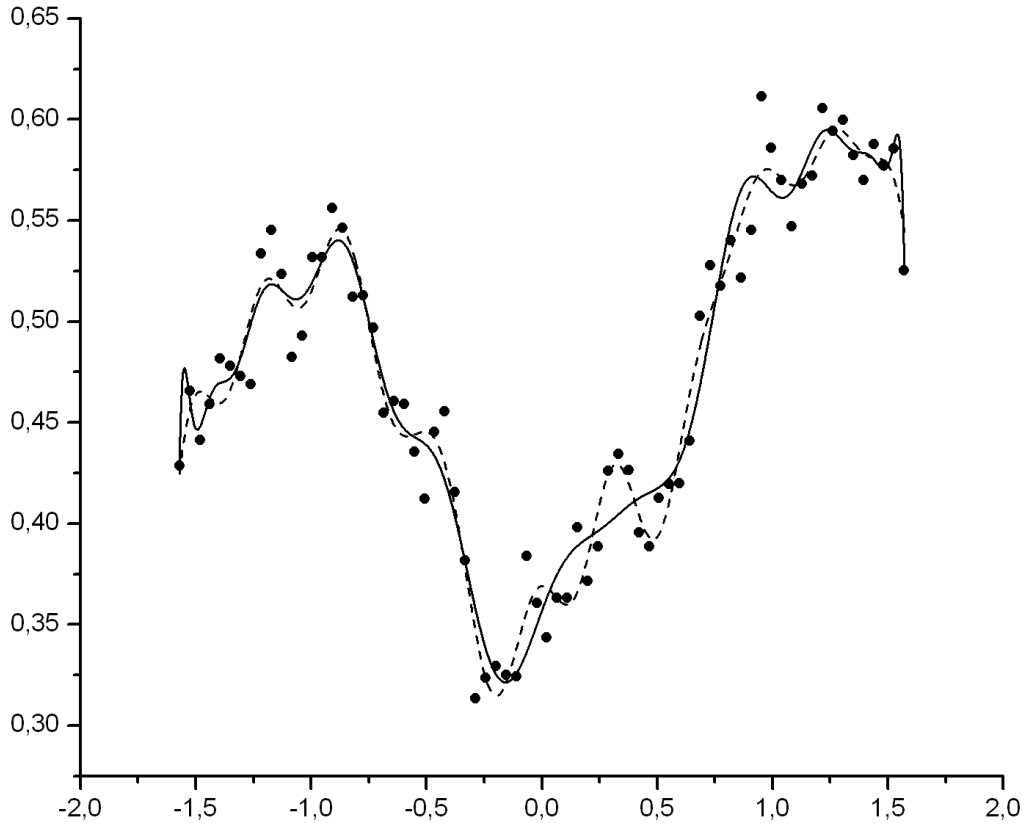


Рис. 5.5. Сравнение аппроксимации сильно осциллирующей функции методом двойного периода (пунктир) и многочленами Чебышева (сплошная линия) при одинаковом числе параметров 25. Точки — аппроксимируемый материал.

(5.5)–(5.6) оказывается почти ортогональной. Можно ожидать неплохой обусловленности матрицы Грама.

Подтверждает это следующий тест. В качестве исходной бралась равномерная сетка с шагом $h = \pi/R$. Затем ее внутренние узлы x_r сдвигались с помощью случайных чисел $\gamma \in [-h/2; h/2]$. Каждый расчет усреднялся по 10 различным наборам γ . Недиагональность матрицы характеризовалась отношением μ недиагональной части сферической нормы ко всей сферической норме. На рис. 5.7 показана зависимость $\mu(N)$. Оно убывает как $N^{-1/2}$. При малых N оно не очень мало, но благодаря малости N обусловленность хорошая. При больших N видно, что $\mu(N)$ мало, что также обеспечивает хорошую обусловленность. Таким образом, использование формулы трапеций обеспечивает малость ошибок округления для случая функций, табулированных на произвольных сетках.

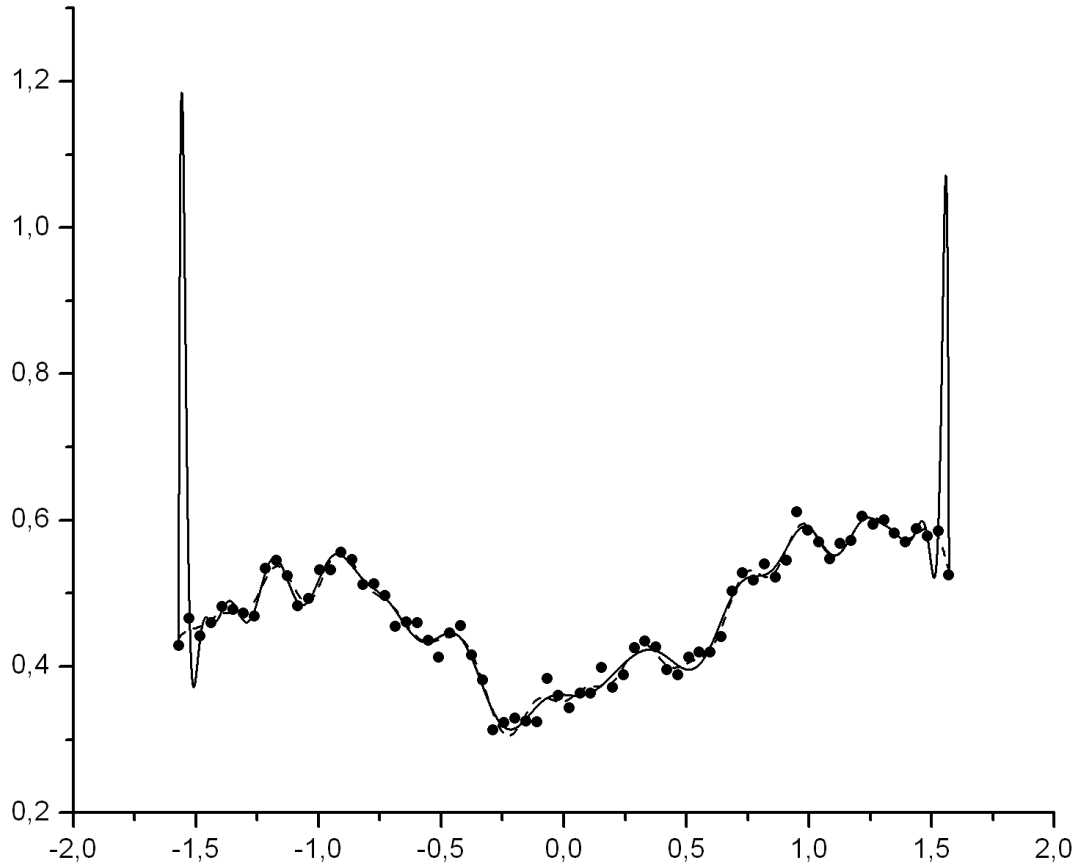


Рис. 5.6. Сравнение аппроксимации сильно осциллирующей функции методом двойного периода (пунктир) и многочленами Чебышева (сплошная линия) при одинаковом числе параметров 35. Точки — аппроксимируемый материал.

5.4 Двумерный метод двойного периода

В общей практике при аппроксимации двумерной функции $f(x, y)$ обобщенным многочленом $\Phi(x, y)$ используется базис, являющийся прямым произведением одномерных базисов $\{\phi(x)\} \times \{\phi(y)\}$:

$$f(x, y) \approx \Phi(x, y) = \sum_i c_i \phi_i(x, y) = \sum_n c_n \phi_n(x) \sum_k d_k \phi_k(y). \quad (5.24)$$

Будем считать, что $f(x, y)$ задана в прямоугольной области. Линейно преобразуем ее в квадрат $[-\pi/2; \pi/2] \times [-\pi/2; \pi/2]$. Определим в нем скалярное произведение в смысле интеграла с единичным весом.

Очевидно, при прямом произведении базисов (5.5), (5.6) для построения аппроксимации (5.24) матрица Грама будет иметь существенно более сложную структуру заполнения, и исследовать ее аналогично одномерному случаю, то есть адекватно ввести меру обусловленности, не просто. Естественно ожидать гораздо худшей обусловленности. Поэтому предлагается метод, в котором аппроксимации строятся сле-

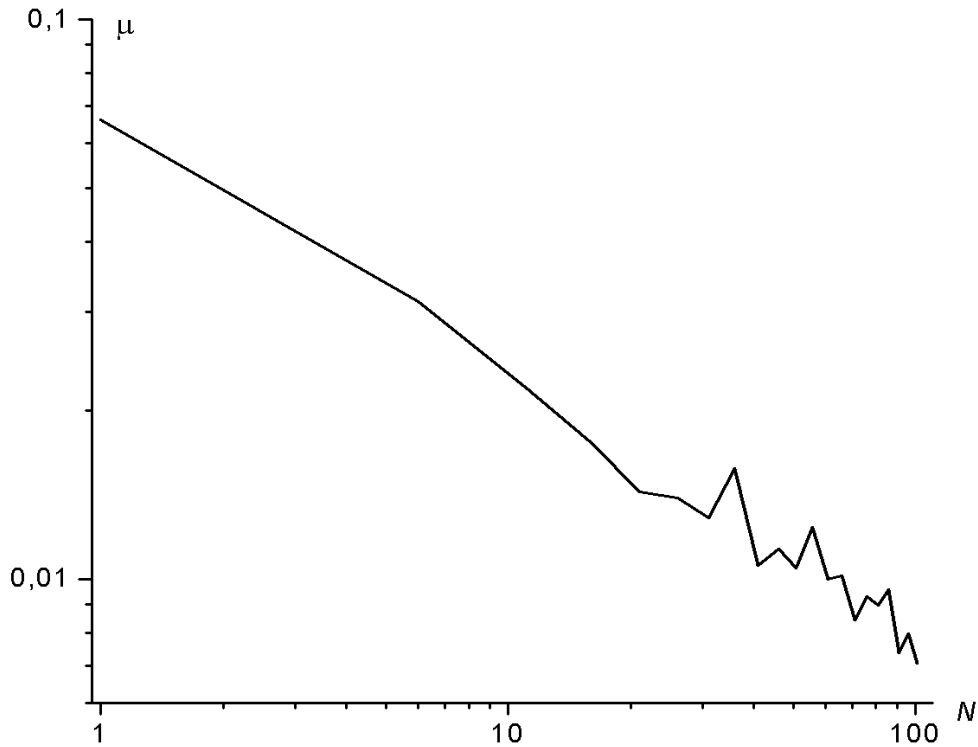


Рис. 5.7. Средняя мера недиагональности первой клетки матрицы Грама на неравномерной сетке

дующим образом.

Для табулированной двумерной функции $f_{i,j} \equiv f(x_i, y_j)$ строятся сначала одномерные аппроксимации по i . Методом двойного периода аппроксимируются строки таблицы по первой переменной (для определенности x): $f_j(x) = \sum_n c_n \phi_n(x)$. После этого полученные коэффициенты $c_{jn}(y_j)$ также методом двойного периода аппроксимируются по второй переменной y .

В случае ортогонального базиса последовательное нахождение коэффициентов по двум переменным эквивалентно одновременному разложению по двумерным базисным функциям (5.24). В нашем случае базисы не ортогональны, поэтому эквивалентность отсутствует. Очевидно, последовательное разложение по переменным дает худшую точность в норме L_2 , чем прямое двумерное. Тем не менее, разложение по двумерным функциям позволяет использовать значения M не более чем 1 или 2, чего недостаточно для хорошей точности.

Поэтому предложенный алгоритм выгоден. Расчет коэффициентов аппроксимации ведется на недиагональных матрицах меньших размерностей и работают оценки сходимости и обусловленности, приведенные в п. 5.3.3 (см. также [99, 98]). Аналогично можно воспользоваться данными выше рекомендациями по выбору оптимальных параметров аппроксимации N и M .

Пример. Рассмотрим аппроксимацию описанным методом двумерной линейной функции (плоскости) $f(x, y) = x + y$, заданной на равномерной сетке $x, y \in [-\pi/2; \pi/2]$, имеющей по 50 узлов по каждой переменной. На рис. 5.8 построены аппроксимирующие поверхности для разных значений M при фиксированном N , а также их экстраполяции в область $x, y \in [-3\pi/4; 3\pi/4]$, которая выходит за область задания функции на 50% по каждому направлению. Видно, что при $M = 0$ сходимость разложения вблизи границ отсутствует в норме C (эффект Гиббса) и экстраполяция невозможна. При $M \geq 1$ эффект Гиббса отсутствует, аппроксимация хорошо описывает саму функцию вблизи границ. Это позволяет рассчитывать на разумную экстраполяцию.

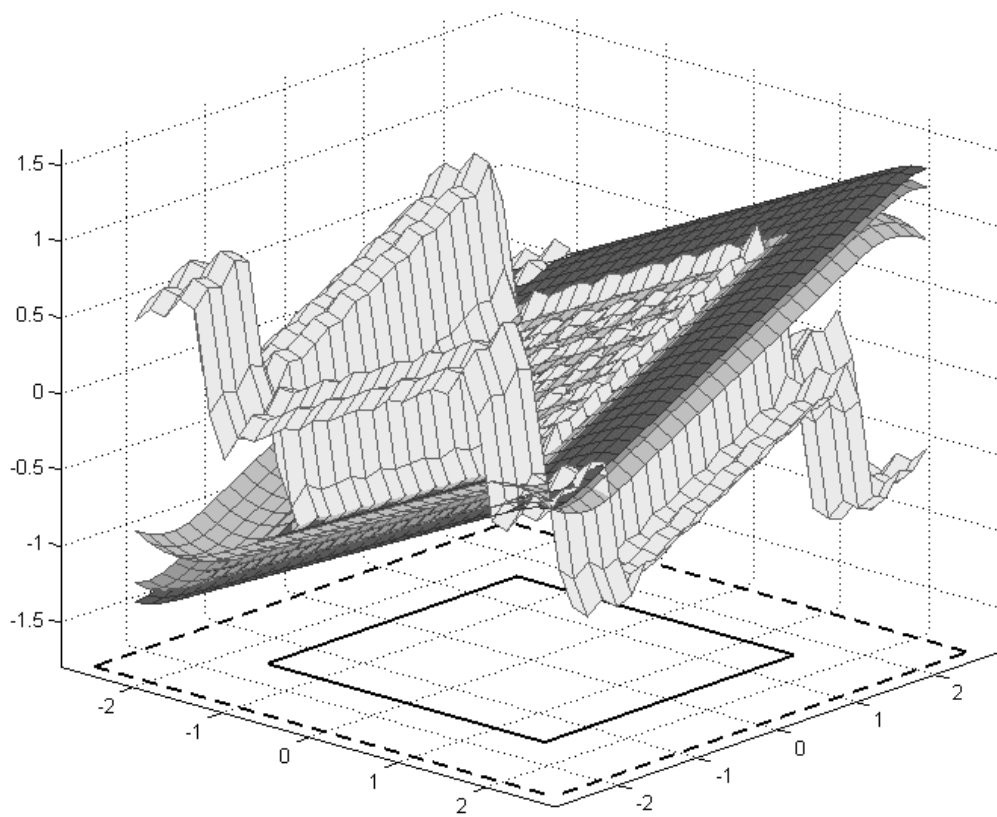


Рис. 5.8. Аппроксимация и экстраполяция двумерной функции $f(x, y) = x + y$ двумерным методом двойного периода при $N = 7$ и различных M . $M = 0$ — самая светлая поверхность, $M = 6$ — самая темная, между ними аппроксимации при $M = 2$ и $M = 4$. Сплошной линией обведена область аргументов задания $f(x, y)$, пунктиром — область экстраполяции.

5.5 Метод нечетного продолжения

Основным недостатком метода двойного периода является неортогональность базисных функций. Это существенно усложняет обобщение на двумерный случай.

Поэтому в данной работе (см. также работы автора [102, 103]) предлагается метод нечетного продолжения, позволяющий увеличить гладкость периодического продолжения до $p = 2$, что существенно улучшает сходимость. При этом используется ортогональный базис синусов, так что метод легко обобщается на случай двух и более переменных. В многомерном случае сходимость улучшается кардинально по сравнению с известными методами. Это важно, например, в задачах цифровой обработки сигналов.

Напомним следующее. Пусть периодическая функция $u(x)$ имеет кусочно-непрерывную p -ю производную, а все младшие производные непрерывны. Обозначим через c_m коэффициенты Фурье m -тых гармоник (синуса и косинуса). Убывание этих коэффициентов и погрешностей частичных сумм ряда Фурье, среднеквадратичной δ_{L_2} и максимальной δ_C , определяется мажорантными оценками (см., например, [104]):

$$\delta_{L_2} \leq \frac{\alpha}{N^{p+0.5}}, \quad \delta_C = \frac{\beta}{N^p}, \quad |c_n| \leq \frac{\gamma}{n^{p+1}}. \quad (5.25)$$

Здесь N — число членов суммы, а коэффициенты $\alpha, \beta, \gamma \in \mathcal{R}$ зависят от скачков $u^{(p)}(x)$ в точках разрыва.

5.5.1. Метод.

Одномерный случай. Идея одномерного метода предложена в [105].

Пусть задана непериодическая $u(x)$, $x \in [0; \pi]$. В общем случае $u(0) \neq u(\pi)$. Вычтем из нее прямую, проходящую через граничные точки:

$$v(x) = u(x) - \left[\frac{u(\pi) - u(0)}{\pi} x + u(0) \right]. \quad (5.26)$$

Функция $v(x)$ обращается в нуль на границах. Нечетно продолжим ее на отрезок $[-\pi; \pi]$. Это продолжение будет непрерывно на границе вместе с первой производной, чему соответствует гладкость $p = 2$. Согласно (5.25) скорость убывания коэффициентов Фурье, а также погрешность аппроксимации улучшаются на порядок. В силу нечетности периодического продолжения, ряд Фурье будет содержать только синусы, так что по трудоемкости метод не уступает методу четного продолжения косинусами [106]. А вычисление коэффициентов Фурье $\{c_m\}$ достаточно проводить, интегрируя по отрезку $[0; \pi]$:

$$c_m = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} u(x) \sin(mx) dx. \quad (5.27)$$

Для восстановления самой $u(x)$ необходимо помимо $\{c_m\}$ сохранять 2 параметра вычитаемой прямой: $u(0)$ и $u(\pi)$.

Двумерный случай. Обобщим описанный выше метод на двумерный случай. Пусть $u(x, y)$ задана на квадрате $[0; \pi] \times [0; \pi]$. Аналогично (5.26) при каждом фиксированном значении y проведем вычитание линейной функции аргумента x :

$$v(x, y) = u(x, y) - \left[\frac{u(\pi, y) - u(0, y)}{\pi} x + u(0, y) \right]. \quad (5.28)$$

Функция (5.28) будет обращаться в нуль на двух сторонах $x = 0$ и $x = \pi$ исходного квадрата. Затем из функции (5.28), фиксируя x , вычтем линейную функцию аргумента y :

$$w(x, y) = v(x, y) - \left[\frac{v(x, \pi) - v(x, 0)}{\pi} y + v(x, 0) \right]. \quad (5.29)$$

Функция (5.29) будет обращаться в нуль на всех четырех сторонах исходного квадрата. Нечетно продолжим ее на область $[-\pi; \pi] \times [-\pi; \pi]$. Получившуюся функцию можно рассматривать как периодическую непрерывную вместе со своими первыми производными. Поскольку она нечетна, ее разложение в ряд Фурье будет содержать только члены $\sin nx \sin my$. Вычислять коэффициенты разложения можно, интегрируя только по исходной области $[0; \pi] \times [0; \pi]$:

$$c_{nm} = \frac{4}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi w(x, y) \sin(nx) \sin(my) dx dy. \quad (5.30)$$

Для восстановления $u(x, y)$ потребуется помнить не только коэффициенты, а также четыре одномерных функции, описывающие значения $u(x, y)$ на границе: $u(x, 0)$, $u(x, \pi)$, $u(0, y)$ и $u(\pi, y)$. Разумеется, эти одномерные функции также следует разлагать в ряд Фурье по синусам с той же скоростью сходимости $p = 2$ и сохранять только значимые коэффициенты разложения.

Усечение рядов. Разложение в ряд Фурье имеет вид

$$w(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_{nm} \sin nx \sin my. \quad (5.31)$$

Возникает вопрос: как целесообразно выбрать верхние пределы в суммах (5.31)? При прямом произведении одномерных рядов Фурье каждую сумму берут до фиксированных номеров N и M . Обычно полагают $N = M$, то есть матрица коэффициентов является квадратной с числом членов N^2 . Для c_{nm} справедлива оценка

$$|c_{nm}| \leq \frac{\gamma^2}{(nm)^{p+1}}. \quad (5.32)$$

Из (5.25) и (5.32) видно, что наибольшими являются коэффициенты в левом верхнем углу ($n, m \ll N$) матрицы $\{c_{nm}\}$. В левом нижнем ($n \sim N, m \ll N$) и правом верхнем

($n \ll N, m \sim N$) углах они будут существенно меньше. В правом нижнем углу ($n \sim N, m \sim N$) коэффициенты оказываются пренебрежимо малыми и не вносят заметного вклада в сумму (5.31). Поэтому в теории цифровой обработки сигналов правый нижний угол матрицы коэффициентов зачастую отбрасывают (например, по линии $n + m = const$), практически не проигрывая в точности. Это позволяет уменьшить число сохраняемых коэффициентов вдвое при $const = N$.

Однако обрезание по прямой линии не является оптимальным. Возникает проблема: по какой кривой $m = f(x)$ следует ограничить суммирование в (5.31), чтобы при заданном числе коэффициентов получить наименьшую погрешность. В принципе ответ может зависеть от выбранной нормы погрешности.

Пусть выбрана норма L_2 . Тогда погрешность определяется суммой квадратов отброшенных коэффициентов (равенство Парсеваля). Эта сумма должна быть минимальной. Тем самым, сумма учтенных c_{nm}^2 должна быть максимальной. Математически задача формулируется следующим образом: найти такую функцию $f(n)$, для которой

$$\sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^{f(n)} \frac{\gamma^2}{(nm)^{2p+2}} = \max, \quad 4(N+2) + \sum_{n=1}^N [f(n) - 1] = R. \quad (5.33)$$

Здесь R — полное заданное число коэффициентов, а дополнительное слагаемое перед суммой составляют коэффициенты фурье-аппроксимаций значений функции $u(x, y)$ на сторонах квадрата. Очевидно, кривая $f(n)$ симметрична относительно диагонали квадрата и опирается на его стороны $n = 1$ и $m = 1$. Поэтому $f(1) = N$ и $f(N) = 1$. Справедлива

Теорема 3. *Решением задачи (5.33) является гипербола $f(n) = N/n$; полное число коэффициентов при этом равно*

$$R = (N+1) \ln(N+1) - N, \quad (5.34)$$

а погрешность

$$\delta_{L_2} = \frac{\sqrt{1 + (2p+1) \ln(N+1)}}{(2p+1)(N+1)^{p+1/2}}. \quad (5.35)$$

Переформулируем задачу (5.33) для нормы C :

$$\sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^{f(n)} \frac{\gamma^2}{(nm)^{p+1}} = \max, \quad 4(N+2) + \sum_{n=1}^N [f(n) - 1] = R. \quad (5.36)$$

Для нее также справедлива

Теорема 4. *Решением задачи (5.36) является гипербола $f(n) = N/n$; полное число коэффициентов при этом равно*

$$R = (N+1) \ln(N+1) - N, \quad (5.37)$$

а погрешность

$$\delta_C = \frac{\sqrt{1 + p \ln(N + 1)}}{(N + 1)^p}. \quad (5.38)$$

Из теорем видно преимущество усечения рядов по гиперболе. Для получения одинаковой точности при квадратной матрице коэффициентов нужно N^2 коэффициентов, при треугольном усечении — несколько более $N^2/2$ коэффициентов, а при усечении по гиперболе — несколько более $N \ln N$ коэффициентов. Последний способ дает огромную экономию в числе хранимых коэффициентов. Это очень важно при передаче двумерных изображений.

5.5.2. Численные примеры.

Одномерный случай. Была взята функция

$$u(x, y) = [1 + (3/4 - x/\pi)^2]^{-1}, \quad x \in [0; \pi], \quad (5.39)$$

имеющая неограниченное число непрерывных производных. Строились ее классическая фурье-аппроксимация, косинус-аппроксимация четного продолжения и синус-аппроксимация нечетного продолжения (описанным методом с вычитанием прямой). На рис. 5.9 представлена зависимость погрешности в норме L_2 от числа параметров N для всех трех способов. Выбран двойной логарифмический масштаб. В нем зависимости быстро выходят на прямые линии, что соответствует степенному характеру убывания погрешности. Наклоны прямых соответствуют теоретическим значениям $p = 0, 1, 2$ для указанных методов соответственно. Видно, что метод нечетного продолжения дает более высокую точность, чем другие два способа.

Двумерный случай. По аналогии с одномерным случаем была выбрана функция

$$u(x, y) = [1 + (3/4 - x/\pi)^2 + (7/20 - y/\pi)^2]^{-1}, \quad x, y \in [0; \pi]. \quad (5.40)$$

Строились ее аппроксимации теми же тремя способами. При этом для каждого способа сравнивалось три вида матрицы коэффициентов: квадратная, усеченная треугольная, усеченная по гиперболе. На рис. 5.10 приведены зависимости в норме L_2 от числа параметров. Здесь для квадратной и треугольно усеченной матриц коэффициентов виден четкий выход на асимптотические прямые с теоретическим наклоном $(2p + 1)/4$. Их наклон в два раза меньше, чем в одномерном случае. Для усечения по гиперболе теоретическая асимптота слегка искривлена из-за логарифмического члена в (5.35). Однако это искривление невелико. Зато ее наклон близок к $(p + 1/2)$, то есть он вдвое больше, чем для остальных двух способов. Усечение по гиперболе дает кардинальный выигрыш для всех трех способов. Таким образом, метод нечетного продолжения с гиперболическим усечением матрицы коэффициентов дает огромный выигрыш в точности при одинаковом числе используемых параметров.

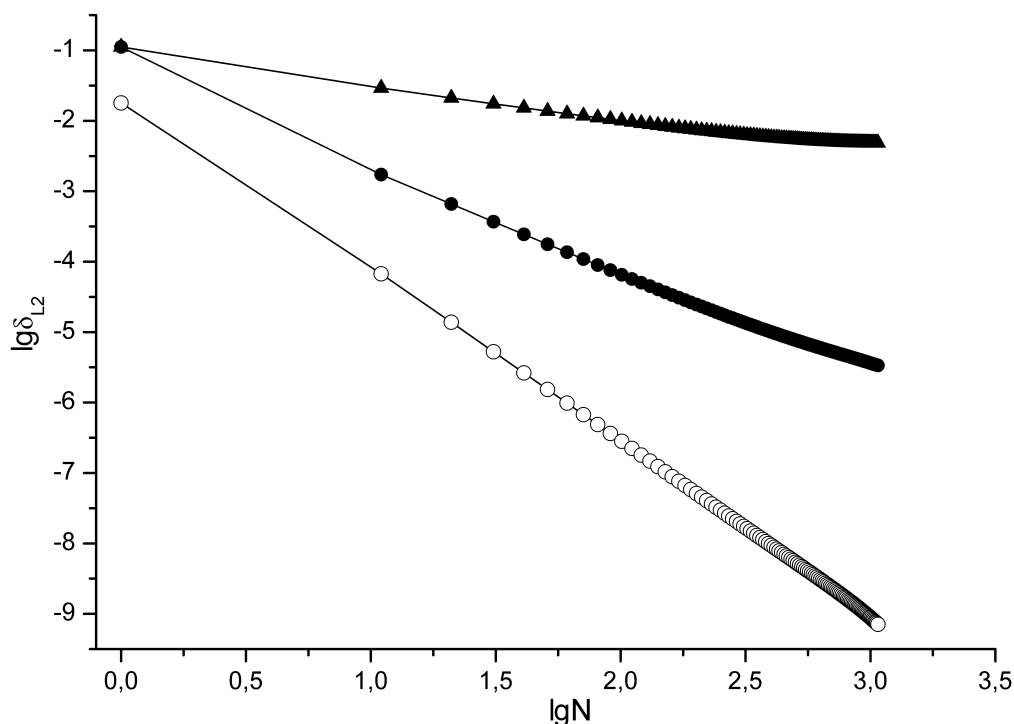


Рис. 5.9. Зависимость погрешности одномерной аппроксимации в норме L_2 от числа параметров N . \blacktriangle — классическая фурье-аппроксимация; \bullet — разложение по косинусам четного продолжения; \circ — метод нечетного продолжения.

5.5.3. Обобщения.

Улучшение гладкости. Пусть дополнительно заданы граничные значения производных $u^{(k)}(0)$ и $u^{(k)}(\pi)$ для $k = 0, 1, \dots, q$; $q \leq (p - 1)$. Построим такую $q + 1$ раз дифференцируемую функцию $r(x)$, что $r^{(k)}(x) = u^{(k)}(x)$ для $0 \leq k \leq q$ при $x = 0$ и $x = \pi$. Например, можно использовать многочлен степени $2q + 1$. Тогда функция $v(x) = u(x) - r(x)$ на границах обращается в нуль вместе со своими производными до $v^{(q)}(x)$ включительно.

Продолжим $v(x)$ на отрезок $[-\pi; \pi]$ нечетно при четном q , и четно при нечетном q . Это периодическое продолжение будет иметь $q + 1$ непрерывных производных. Оно разлагается в ряд по $\sin nx$ при четном q и по $\cos nx$ при нечетном q . В качестве показателя гладкости во все формулы надо ставить $p = q + 2$.

Формально такое продолжение можно применять для любой многократно дифференцируемой $u(x)$: если задана функция, то могут быть вычислены ее производные. Однако на практике метод можно применять лишь в том случае, когда есть простой способ вычисления значений производных на границах достаточно точно.

Данное обобщение распространяется на случай двух и более переменных. При этом формулы исключения граничных значений производных становятся громоздкими.

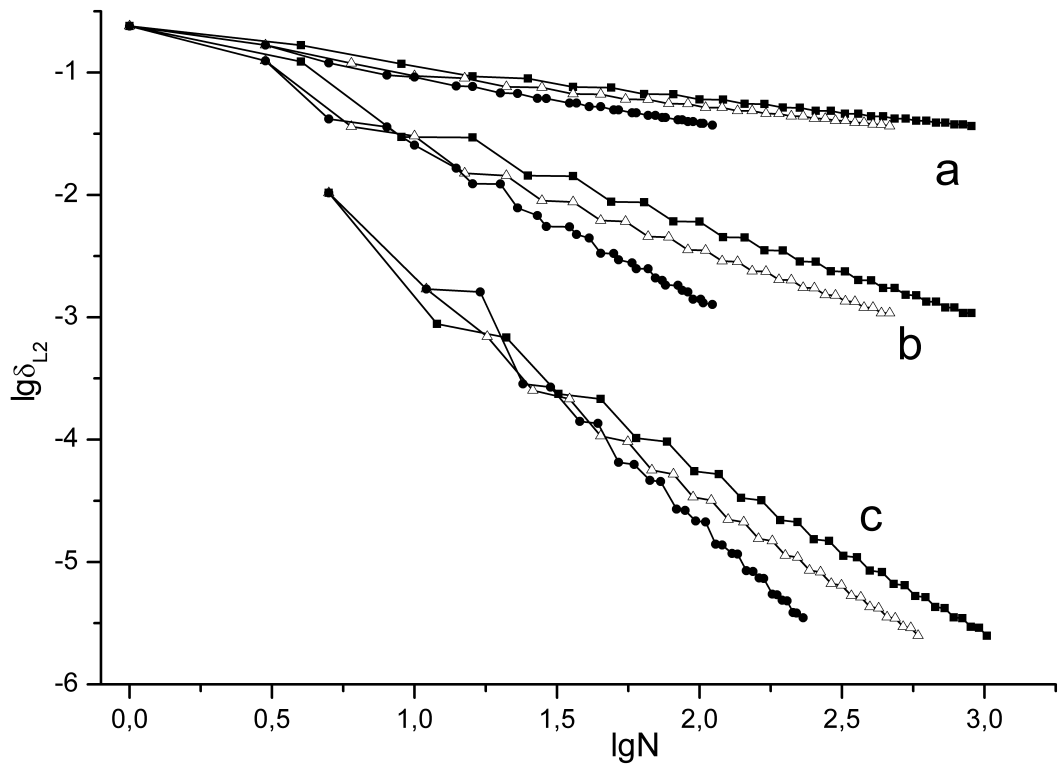


Рис. 5.10. Зависимость погрешности двумерной аппроксимации в норме L_2 от числа параметров N при различном усечении матрицы коэффициентов. Буквы на графике: **a** — классическая фурье-аппроксимация; **b** — разложение по косинусам четного продолжения; **c** — метод нечетного продолжения. Маркеры соответствуют различным усечениям: \blacksquare — квадратная матрица коэффициентов; \triangle — треугольно усеченная матрица коэффициентов; \bullet — гиперболическое усечение.

Сеточная функция. Пусть $u(x)$ задана не во всех точках отрезка, а лишь в узлах равномерной сетки $x_i, 0 \leq x_i \leq \pi$. Тогда скалярное произведение нужно понимать не в смысле интегралов, а в смысле сумм по узлам сетки, соответствующих формуле трапеций. Система тригонометрических функций ортогональна в смысле таких скалярных произведений; при этом полное число базисных функций не должно превышать числа узлов сетки. В этом случае в обычную сумму Фурье разложения четного продолжения по косинусам и нечетного по синусам строятся аналогично описанному в п. 5.5.1.

Благодаря ортогональности базиса, эти разложения легко обобщаются на двумерные и трехмерные функции. Трудоемкость не возрастает при увеличении числа коэффициентов.

Неравномерные сетки. Если сетка неравномерная, семейство тригонометрических функций будет почти ортогональным. Следует заменить интегралы в скалярном произведении квадратурной формулой трапеций. Недиagonальные элементы матрицы Грама составляют при этом $O(h^2)$. Показано [107], что система линейных уравнений при этом остается хорошо обусловленной; однако трудоемкость вычисле-

ний существенно возрастает, так как приходится решать линейную систему с плотно заполненной матрицей.

Двумерное обобщение приводит к матрице порядка N^2 . Трудоемкость метода возрастает настолько, что он становится малоэффективным.

Гистограммы. Функция $u(x, y)$ может быть задана гистограммой. Это обычно имеет место при записи изображения ПЗС матрицей. Для таких матриц ступеньки гистограммы имеют одинаковую ширину. В этом случае базисные функции $\sin nx, \cos nx$ также надо задавать в виде гистограммы. Можно показать, что такой базис будет ортогональным, если ступеньки гистограммы одинаковой ширины. Следовательно, одномерная и многомерные аппроксимации не вызывают затруднений.

5.6 Аппроксимация термодинамических функций методом двойного периода

Методом двойного периода были построены аппроксимации электронных термодинамических функций, рассчитанных по модели Томаса-Ферми с квантовой и обменной поправками. Функции заданы таблицами, описанными в п. 3.3.8. Отдельно строились аппроксимации температурных функций, то есть двумерных таблиц, и одномерных таблиц холодных кривых.

Все аппроксимации построены для водорода ($Z = 1$). Переход к произвольному Z производится известными соотношениями подобия (3.13) модели ТФП.

5.6.1. Нулевые изотермы. Были построены аппроксимации всех термодинамических величин P, E, μ и поправок к ним $DP, DE, D\mu$ при $T = 0$ (энтропия и поправка к ней естественно обращаются в нуль при $T \rightarrow 0$).

Поскольку все величины меняются на несколько порядков, то для построения аппроксимаций использовались не сами величины, а десятичные логарифмы их модулей. Функции подробно табулированы в диапазоне значений объемов $\lg V \in [-4; 11]$.

С учетом асимптотического характера исходных данных и характера тригонометрических функций, дополнительно было проведено такое преобразование, чтобы левый и правый асимптотические наклоны были одинаковы по модулю, но имели разные знаки:

$$\lg f^* = \lg f - \frac{\tau_{V \rightarrow 0} + \tau_{V \rightarrow \infty}}{2} \lg V. \quad (5.41)$$

Здесь f — соответствующая термодинамическая величина, f^* — ее преобразованное значение, а $\tau_{V \rightarrow 0}$ и $\tau_{V \rightarrow \infty}$ — соответствующие асимптотические наклоны на левом ($V \rightarrow 0$) и правом ($V \rightarrow \infty$) концах. Результаты преобразования представлены на рис. 5.11.

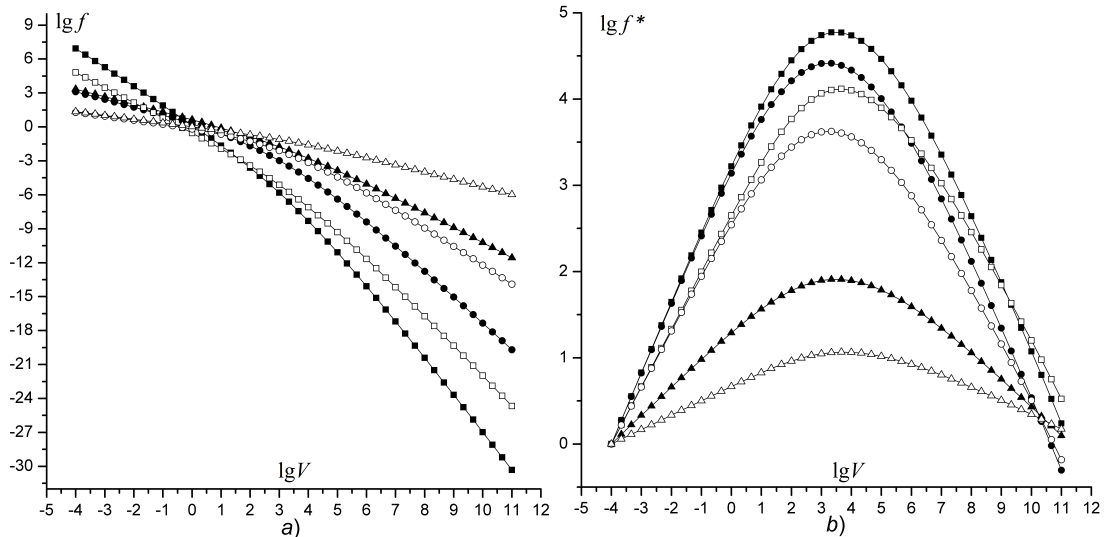


Рис. 5.11. Графики термодинамических кривых P (квадраты), E (круги), μ (треугольники), DP (полые квадраты), DE (полые круги), $D\mu$ (полые треугольники) до (а) и после (б) преобразования (5.41).

Таблица 5.5. Относительная погрешность аппроксимации нулевых изотерм методом двойного периода в нормах C и L_2 при $N = 5$, $M = 4$.

| Функция | P | E | μ | DP | DE | $D\mu$ |
|----------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| δ_C | $8.53E-5$ | $1.59E-4$ | $5.83E-5$ | $1.54E-4$ | $9.26E-5$ | $6.44E-5$ |
| δ_{L_2} | $5.77E-5$ | $6.11E-5$ | $2.65E-5$ | $1.10E-4$ | $4.54E-5$ | $4.31E-5$ |

Для определения оптимальных параметров аппроксимаций каждой функции были произведены расчеты большого числа вариантов. Самыми выгодными оказались $N = 5$ и $M = 4$. Таким образом, необходимо хранить лишь $2N + M + 1 = 15$ коэффициентов аппроксимации для каждой функции. В табл. 5.5 приведены результаты аппроксимации с этими параметрами: относительная погрешность аппроксимации в нормах C и L_2 . Видно, что для всех величин относительная погрешность аппроксимации логарифмических значений не превышает $2 \cdot 10^{-4}$ в обеих нормах. Этому соответствует относительная погрешность самих величин на уровне 0.05%. В табл. 5.6 приведены сами коэффициенты разложения по подсистемам метода двойного периода при этих параметрах.

5.6.2. Температурные таблицы. Аппроксимировались таблицы термодинамических функций водорода в диапазоне $-4 \leq \lg V \leq 11$ и $-5 \leq \lg T \leq 3$. Поскольку все термодинамические величины и их аргументы меняются на много порядков, аналогично нулевым изотермам, аппроксимация производилась в логарифмических

Таблица 5.6. Коэффициенты разложения в методе двойного периода нулевых изотерм водорода при оптимальном числе параметров: $N = 5, M = 4$. Каждый столбец таблицы соответствует одной из аппроксимируемых функций. В первом столбце указаны базисные функции, к которым относятся коэффициенты.

| | P | E | M | DP | DE | $D\mu$ |
|------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 1 | -3.01382E+00 | -3.03650E+00 | -6.37050E-01 | -2.93286E+00 | -2.84609E+00 | -5.64350E-01 |
| $\sin 2x$ | 5.49186E-02 | 4.53156E-02 | 2.20047E-02 | 6.52521E-02 | 7.25346E-02 | 2.52543E-02 |
| $\cos 2x$ | -4.77226E-02 | 3.87427E-02 | -1.74818E-02 | 4.06762E-02 | -4.84135E-03 | 1.30773E-02 |
| $\sin 4x$ | 1.55976E-03 | -4.74287E-03 | 6.33515E-04 | 1.45002E-03 | -6.35909E-04 | 2.57360E-03 |
| $\cos 4x$ | 3.46398E-02 | 3.91967E-02 | 1.40789E-02 | 5.14147E-02 | 3.44739E-02 | 1.56683E-02 |
| $\sin 6x$ | -6.62191E-03 | -5.10902E-03 | -2.65026E-03 | -8.41453E-03 | -5.88763E-03 | -2.29827E-03 |
| $\cos 6x$ | 6.31438E-03 | 2.43845E-03 | 2.50358E-03 | 6.56158E-03 | 2.64028E-03 | 2.25469E-03 |
| $\sin 8x$ | -8.57660E-04 | -6.98746E-04 | -3.41313E-04 | -1.57597E-03 | -8.06351E-04 | -4.97894E-04 |
| $\cos 8x$ | 4.29184E-04 | 4.83387E-04 | 1.77783E-04 | 6.03854E-04 | 3.68757E-04 | 3.27743E-04 |
| $\sin 10x$ | -2.46359E-04 | -4.96587E-05 | -9.80978E-05 | -3.74998E-04 | -1.20008E-04 | -1.63757E-04 |
| $\cos 10x$ | -1.35016E-04 | -1.42846E-04 | -5.69982E-05 | -3.41085E-04 | -1.67681E-04 | -7.96963E-05 |
| $\sin x$ | 6.89461E-02 | -2.17128E-01 | 2.75504E-02 | 2.19549E-01 | -1.64305E-01 | 7.34055E-02 |
| $\cos x$ | 4.56231E+00 | 4.36425E+00 | 1.82254E+00 | 3.63627E+00 | 3.60579E+00 | 9.15771E-01 |
| $\sin 3x$ | -5.03143E-02 | -6.46421E-02 | -2.01535E-02 | -4.09675E-02 | -7.25672E-02 | -1.26769E-02 |
| $\cos 3x$ | 1.78448E-01 | 1.13673E-01 | 7.06004E-02 | 1.24629E-01 | 1.09796E-01 | 3.07733E-02 |

Таблица 5.7. Параметры и точность аппроксимации термодинамических функций модели ТФП в нормах C и L_2 .

| Функция | Число парам. | δ_C | δ_{L_2} | N_V | M_V | N_T | M_T |
|---------|--------------|------------|----------------|-------|-------|-------|-------|
| P | 756 | 9.5E-4 | 2.0E-4 | 16 | 3 | 8 | 4 |
| E | 851 | 3.3E-3 | 4.2E-4 | 16 | 4 | 9 | 4 |
| S | 858 | 5.3E-4 | 1.0E-5 | 14 | 4 | 11 | 3 |
| DP | 770 | 1.5E-3 | 2.2E-4 | 15 | 4 | 9 | 3 |
| DS | 744 | 4.1E-3 | 2.7E-4 | 13 | 4 | 10 | 3 |
| $D\mu$ | 888 | 6.4E-3 | 4.0E-4 | 16 | 4 | 10 | 3 |

переменных: $z = \lg |\text{терм. функц.}|$, $y = \lg V$, $x = \lg T$. Такую аппроксимацию можно проводить только для знакопостоянных функций: $P, E, S, DP, DS, D\mu$. Вопрос о знакопеременных функциях μ и DE обсудим далее.

Для каждой из 6 функций проводилась аппроксимация методом двойного периода с различными значениями числа базисных тригонометрических функций по каждой переменной: N_T, M_T, N_V, M_V . Оптимальные числа параметров оказались неодинаковыми для разных термодинамических функций. Оптимальные значения N и M по разным переменным также были неодинаковы.

Значения оптимальных параметров приведены в табл. 5.7. Там же указаны полные числа коэффициентов и погрешности логарифма термодинамической функции в нормах C и L_2 . Напомним, что погрешности логарифма Δ соответствует относительная погрешность самой величины в процентах, равная $\sim 230\Delta$.

Обсудим достигнутую точность. Для величин модели Томаса-Ферми: P , E , S — максимальная погрешность (норма C) не превосходит 1%, а среднеквадратичная погрешность (норма L_2) — 0.1%. Для квантово-обменных поправок: DP , DS , $D\mu$ — максимальная погрешность несколько больше и составляет 1.5%, а средняя также не хуже 0.1%. Эти погрешности существенно меньше, чем физическая погрешность самой модели. Поэтому построенные аппроксимации в большинстве практических приложений можно использовать вместо прямых расчетов.

Двумерные аппроксимации содержат большое число коэффициентов Фурье. Оно доходит до ~ 900 . Чтобы при вычислении такой суммы Фурье окончательная точность с учетом ошибок округления не превышала 0.0001, сами коэффициенты нужно записывать с 6-7 верными знаками. Это большой объем информации, поэтому коэффициенты не приводятся.

Вычисление μ . Химический потенциал μ — это знакопеременная функция, связанная с давлением соотношением

$$P = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2} T^{\frac{5}{2}} I_{\frac{3}{2}}\left(\frac{\mu}{T}\right). \quad (5.42)$$

Соотношение (5.42) можно рассматривать как уравнение для определения μ по вычисленному $P(T, V)$. Это уравнение легко решается методом Ньютона. Для функции $I_{\frac{3}{2}}(\xi)$ используются аппроксимации из п. 3.2.2. Для вычисления производной в правой части следует воспользоваться соотношением $I_{\frac{3}{2}}(\xi)' = (3/2)I_{\frac{1}{2}}(\xi)$, где функция $I_{\frac{1}{2}}(\xi)$ также вычисляется по аппроксимациям из п. 3.2.2.

Поскольку функция $I_{\frac{3}{2}}(\xi)$ монотонно возрастающая и вогнутая (так как ее вторая производная больше 0), то метод Ньютона сходится при любом нулевом приближении. Если нулевое приближение лежит справа от корня, то сходимость монотонная. Если нулевое приближение взято слева, то первая итерация дает переброс вправо за корень, а дальнейшая сходимость монотонна. Таким образом, данный алгоритм безотказен.

Вычисление DE . Непосредственно общим способом его сделать не удастся. Следует вычесть из DE его холодную кривую. Оставшаяся тепловая часть будет знакопостоянной. Ее логарифм можно аппроксимировать указанным выше способом. Но для такого вычитания все расчеты первичных таблиц необходимо выполнять не с 64-битовыми числами, а со 128-битовыми числами. Иначе невозможно избежать катастрофических ошибок округления при $V \rightarrow 0$, $T \rightarrow 0$. В данной работе этого не было сделано.

5.7 Специальная аппроксимация нулевых изотерм

Отметим два недостатка метода двойного периода. Во-первых, этот метод является формальным и не принимает во внимание априорные сведения о качественном поведении функции. Во-вторых, этот метод предназначен для функций, имеющих $M - 1$ непрерывную производную и кусочно-непрерывную M -ю производную. При этом погрешность аппроксимации составляет $O(N^{-M})$ в норме C и $O(N^{-M-1/2})$ в норме L_2 . Лучшая гладкость функции не приводит к уменьшению погрешности (то есть это метод с насыщением). Термодинамические функции бесконечно дифференцируемы, но при аппроксимации методом двойного периода это не дает повысить точность. Поэтому для холодных кривых целесообразно разработать специализированный метод аппроксимации.

Выбор формул основан на том, что при стремлении объема атомной ячейки к нулю справедливо приближение однородного электронного газа, когда все термодинамические функции разлагаются в ряды по степеням радиуса атомной ячейки $R \sim V^{\frac{1}{3}}$. В [108] были получены аналитические выражения для асимптотик всех термодинамических кривых при $V \rightarrow 0$ и умеренных температурах.

Аналитическое выражение для асимптотик холодных кривых при $V \rightarrow \infty$ неизвестно. Однако графики всех величин в логарифмическом масштабе очень близки в этом случае к прямым. Благодаря более точным и надежным расчетам, проведенным в данной работе, удалось с хорошей точностью установить фактические асимптотики при $V \rightarrow \infty$. Их также удобно представить как разложение по степеням $V^{\frac{1}{3}}$. В табл. 5.8 приведены примерные наклоны соответствующих термодинамических функций.

Таблица 5.8. Степени при V в асимптотических разложениях холодных кривых на левом ($V \rightarrow 0$) и правом ($V \rightarrow \infty$) концах кривых.

| | $V \rightarrow 0$ | $V \rightarrow \infty$ |
|--------|-------------------|------------------------|
| P | $-5/3$ | $-10/3$ |
| E | $-2/3$ | $-7/3$ |
| μ | $-2/3$ | $-4/3$ |
| DP | $-4/3$ | $-8/3$ |
| DE | $-1/3$ | $-5/3$ |
| $D\mu$ | $-1/3$ | $-2/3$ |

Благодаря такому представлению в [108] было предложено следующее разложение

для кривой холодного давления:

$$\frac{1}{P(V)} = V^{m/3} \sum_{k=0}^n a_k V^{k/3}, \quad m = 5, \quad n = 5. \quad (5.43)$$

Аналогично (5.43) представимы и другие кривые. Однако для P и E удастся взять 5 свободных коэффициентов, а для остальных функций существенно меньше, поэтому при аппроксимации точность будет значительно хуже. Такая точность совершенно недостаточна для практики.

В данной работе были предложены такие формы аппроксимации, где число свободных членов больше. Зависимость погрешности от числа коэффициентов была подробно исследована на примере всех холодных термодинамических кривых P , E , μ , DP , DE , $D\mu$. Кроме того, введен дополнительный параметр L , позволяющий увеличивать число свободных коэффициентов.

Будем строить аппроксимации в виде ряда:

$$\frac{1}{f} = V^{m/3} \left(a_0^{L/n} + \sum_{l=1}^L a_l V^{l/3} \right)^{n/L}, \quad L \geq n. \quad (5.44)$$

Здесь f — аппроксимируемая термодинамическая функция, а параметры m , n , a_0 определяются из известных асимптотик холодных кривых. Они приведены в табл. 5.9.

Таблица 5.9. Параметры разложений холодных термодинамических кривых в ряд (5.44).

| f | P | E | μ | DP | DE | $D\mu$ |
|------------|-----------------------------|------------------------------|-----------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|
| m | 5 | 2 | 2 | 4 | 1 | 1 |
| n | 5 | 2 | 2 | 4 | 4 | 1 |
| L | ≥ 5 | ≥ 5 | ≥ 2 | ≥ 4 | ≥ 4 | ≥ 1 |
| a_0^{-1} | $\frac{1}{5}(3\pi^2)^{2/3}$ | $\frac{3}{10}(3\pi^2)^{2/3}$ | $\frac{1}{2}(3\pi^2)^{2/3}$ | $\frac{11}{36}(3/\pi)^{1/3}$ | $\frac{11}{12}(3/\pi)^{1/3}$ | $\frac{19}{18}(3/\pi)^{1/3}$ |

Выбирая достаточно большое L , можно получать много свободных параметров, при этом не нарушая асимптотического характера, описанного в табл. 5.8. Для функции давления P при $L = 5$, $n = L$ формула (5.44) превращается в (5.43). Таким же образом, беря минимальное n из табл. 5.9 и $n = L$, получаем разложения аналогичные (5.43). Значения коэффициентов $\{a_l, 1 \leq l \leq L\}$ в формулах типа (5.43), (5.44) определяются методом наименьших квадратов так, чтобы лучшим образом описать табулированные значения термодинамических функций. Коэффициент a_0 берется из теоретического асимптотического разложения. Поскольку необходимо было найти высокоточные аппроксимации при наименьшем числе свободных коэффициентов разложения, приведем наиболее успешные результаты и соответствующие им оптимальные параметры n и L в табл. 5.10. В табл. 5.11 приведены сами коэффициенты разложения (5.44) при выбранных оптимальных параметрах.

Таблица 5.10. Оптимальные параметры разложения (5.44). δ_{L_2} — относительная погрешность аппроксимации в норме L_2 (ошибка в норме C больше примерно в $\sqrt{2}$ раз).

| f | P | E | μ | DP | DE | $D\mu$ |
|----------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| L | 11 | 10 | 10 | 11 | 10 | 9 |
| n | 6 | 7 | 3.5 | 5 | 6.5 | 1.25 |
| δ_{L_2} | 1.76E-04 | 3.95E-04 | 1.41E-03 | 1.08E-03 | 2.33E-04 | 2.87E-03 |

Видно, что по сравнению с [108] удалось взять больше членов ряда, тем самым повысить точность аппроксимации на 1 – 2 порядка. При этом вид аппроксимации остается достаточно простым, а число членов ряда умеренно: 7 – 11. Эти параметры хорошо подходят для практического использования аппроксимаций.

Исследовалась также поточечная ошибка полученных аппроксимаций. Поскольку аппроксимация среднеквадратичная, то профиль ошибки осциллирующий (и при L свободных параметрах имеет не менее $L - 1$ нулей). Амплитуда осцилляций примерно одинакова на всем интервале аппроксимации.

Таблица 5.11. Коэффициенты разложения в ряд (5.44) холодных кривых при параметрах из табл. 5.10.

| | P | E | μ | DP | DE | $D\mu$ |
|----------|-------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| a_1 | 1.41780E-01 | 1.59460E-01 | 3.38980E-03 | 7.99110E-03 | 5.41110E-01 | -3.72070E-02 |
| a_2 | 4.57453E-02 | 4.47930E-02 | 6.94780E-04 | 1.29910E+00 | 1.30310E-01 | 3.77820E-02 |
| a_3 | 6.74636E-03 | 7.61790E-03 | 5.84110E-05 | -5.23580E-02 | 1.52240E-02 | -5.62450E-04 |
| a_4 | 8.65123E-04 | 6.41750E-04 | 2.59620E-06 | 1.87330E-02 | 1.03570E-03 | 1.63760E-04 |
| a_5 | 5.86448E-05 | 3.36600E-05 | 5.92590E-08 | -1.69080E-04 | 3.27960E-05 | 2.42300E-06 |
| a_6 | 2.77625E-06 | 8.16680E-07 | 1.82810E-10 | 3.19910E-05 | 3.48810E-07 | 7.46800E-08 |
| a_7 | 8.07781E-08 | 6.82480E-09 | -6.68340E-14 | 1.92170E-07 | 4.68580E-11 | 5.33030E-10 |
| a_8 | 1.16951E-09 | 5.55970E-13 | 2.72730E-17 | 5.70650E-09 | -4.61900E-15 | 7.51430E-14 |
| a_9 | 6.48165E-12 | 8.17920E-18 | -5.55210E-21 | 8.81600E-12 | 1.46930E-18 | 1.70320E-18 |
| a_{10} | 4.67399E-16 | -7.06870E-22 | 4.33860E-25 | -4.21300E-16 | -1.40360E-22 | |
| a_{11} | 2.15754E-20 | | | 9.01700E-20 | | |

5.7.1. Сравнение с другими методами. Помимо специальных аппроксимаций (5.44) и аппроксимаций методом двойного периода, описанных в п. 5.6.1, для холодных кривых были также построены аппроксимации многочленами Чебышева первого рода.

Разложение по многочленам Чебышева, в отличие от метода двойного периода, позволяет эффективно использовать любую гладкость функции (это метод без насыщения). Решение уравнений модели ТФП имеет любое число непрерывных производных, поэтому для него целесообразно также исследовать разложение по многочленам Чебышева.

Для сравнения с предыдущими методами в табл. 5.12 приводится относительная

погрешность аппроксимации δ в нормах C и L_2 при числе многочленов 14 и 21. На рис. 5.12 показана зависимость этой погрешности в норме L_2 от числа многочленов для всех шести функций. Видно, что высокая степень гладкости термодинамических функций допускает увеличение точности за счет увеличения числа многочленов N .

Таблица 5.12. Относительная погрешность аппроксимации δ в нормах C и L_2 при аппроксимации полиномами Чебышева степени N .

| f | P | E | μ | DP | DE | $D\mu$ |
|------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| $\delta_C, N = 14$ | 8.34E-04 | 4.33E-04 | 3.32E-04 | 1.14E-03 | 4.88E-04 | 4.75E-04 |
| $\delta_{L_2}, N = 14$ | 5.09E-04 | 2.75E-04 | 2.03E-04 | 7.91E-04 | 3.57E-04 | 3.10E-04 |
| $\delta_C, N = 21$ | 2.47E-05 | 6.97E-05 | 4.58E-05 | 3.70E-05 | 5.89E-05 | 2.16E-05 |
| $\delta_{L_2}, N = 21$ | 3.51E-05 | 3.04E-05 | 1.80E-05 | 7.26E-05 | 3.04E-05 | 2.86E-05 |

При сравнении методов на данном наборе функций была достигнута достаточная точность при использовании всех методов, однако число параметров и характер полученных аппроксимаций существенно различны. Непосредственно для получения прецизионной аппроксимации холодных кривых при небольшом числе параметров наиболее удобно воспользоваться предложенным разложением по асимптотикам (5.44).

При необходимости повысить точность хорошо подошел метод двойного периода. Для получения той же точности с использованием полиномов Чебышева приходится брать больше свободных параметров и вычислять полиномы более высоких степеней; это неудобно. Также полиномы не позволяют даже малейшей экстраполяции.

Для задачи недалекой экстраполяции вправо хорошо подойдет метод двойного периода. К тому же метод двойного периода используется для построения многомерных аппроксимаций термодинамических кривых при высоких температурах.

5.8 Важнейшие результаты главы

1. Исследована обусловленность метода двойного периода, позволяющего аппроксимировать гладкие непериодические функции рядом Фурье. Найдено оптимальное соотношение между числом функций одинарного и двойного периодов. Получены оценки предельно достижимой точности. Произведено обобщение метода двойного периода на случай двух переменных. Теоретические оценки подтверждены примерами численных расчетов.
2. Для аппроксимации непериодических гладких функций одной и двух переменных рядами Фурье предложены методы четно-нечетного продолжения разных порядков. Этот метод сохраняет ортогональность полученных рядов, что поз-

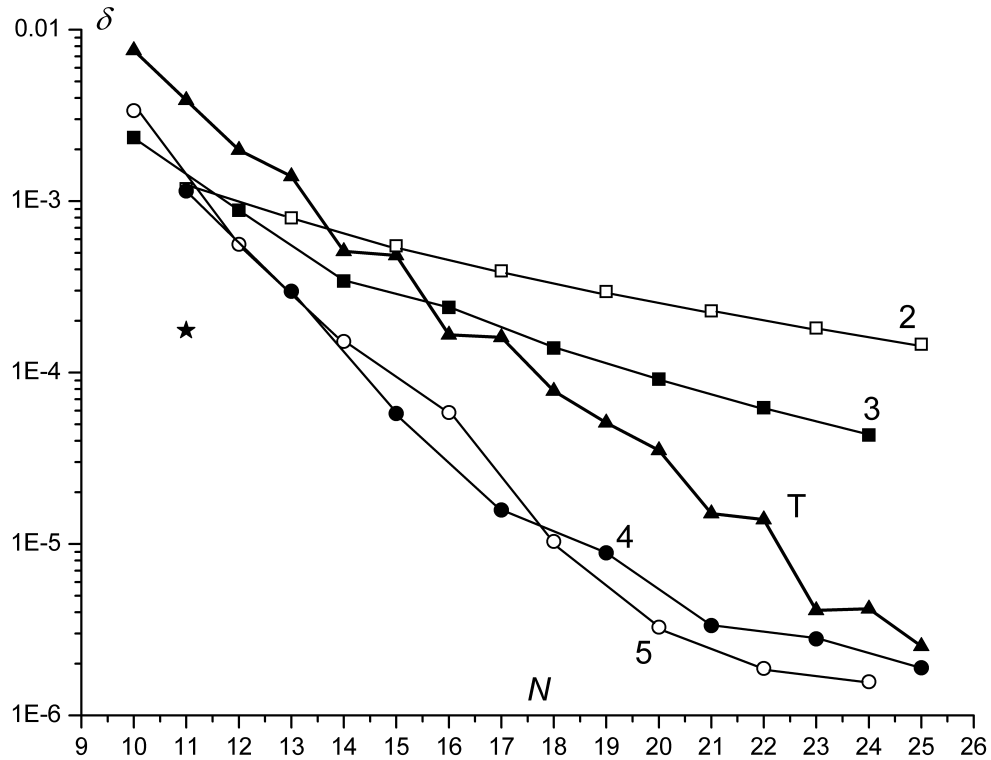


Рис. 5.12. Относительная среднеквадратичная погрешность аппроксимации δ холодной кривой давления в логарифмическом масштабе в зависимости от количества базисных функций N . \triangle — полиномы Чебышева, \star — разложение по асимптотикам, остальные линии — метод двойного периода при $M = 2$ (\square), $M = 3$ (\blacksquare), $M = 4$ (\bullet), $M = 5$ (\circ).

воляет пренебречь ошибками округления (что особенно важно в двумерном случае). Для функций двух переменных найден оптимальный способ усечения двойных сумм, обеспечивающий многократное уменьшение числа хранимых коэффициентов Фурье.

3. Методом двойного периода построены аппроксимации универсальных таблиц термодинамических функций (двух переменных) в статистической модели атома Томаса-Ферми с квантовой и обменной поправками. Эти таблицы обеспечивают относительную погрешность 0.05% и рекомендуются как справочные данные.
4. Построены специальные аппроксимации нулевых изотерм той же модели, обеспечивающие точность от 0.1% до 0.01%. Они содержат небольшое число коэффициентов (от 9 до 11), правильно передают асимптотики при $V \rightarrow \infty$ и рекомендуются как справочные данные.

6. Программный комплекс ТЕФИС

Как было показано в предыдущих главах, в прикладных задачах требуются широкодиапазонные данные о свойствах веществ. Для разных диапазонов подходят разные модели вещества. К сожалению, для некоторых диапазонов адекватных моделей до сих пор построить не удается, а именно — для диапазонов малых давлений и температур. В этих условиях основным источником знаний были и остаются эксперименты.

В промежуточных областях остается проблема сопряжения моделей. Кроме того, нам нужны методы, позволяющие проводить склейку теоретически рассчитанных кривых с результатами экспериментов. Эта задача была решена в гл. 4.

Помимо того, необходимо создать хранилище и программный комплекс к нему, где могли бы храниться модели, результаты расчета по ним и результаты экспериментов.

6.1 Программный комплекс

Создание подобной базы — это весьма трудоемкий проект. Одной из таких реализаций является база данных Института Теплофизики Экстремальных Состояний [109]. В эту базу уже включена большая часть данных из большинства существующих в открытом доступе источников. Однако при проведении сверок с последними редакциями оригинальных компендиумов [89, 90, 91] выяснилось наличие пробелов в данных, ошибок и просто опечаток. Подобного рода недочеты могут влиять на результаты последующих обработок.

Для решения поставленных задач при участии автора была разработана база ТЕФИС (**ТЕ**пло-**ФИ**зические **С**войства).

Ударно волновой раздел базы ТЕФИС включил в себя доступные на сегодняшний день компендиумы, устранив недочеты базы ИТЭС, позволяя вести расчеты в широчайшем диапазоне условий для огромного количества веществ.

6.1.1. Архитектура комплекса ТЕФИС. База ТЕФИС проектировалась как полный комплекс, позволяющий с большой степенью автоматизации проводить исследования теплофизических свойств веществ. Реализация этого подхода потребовала

значительных усилий на разработку и совершенствование моделей и алгоритмов, использованных в этом комплексе. Более того, как упоминалось в вводной части, одна из основных составных частей ТЕФИС — база данных, содержащая в себе наибольшее количество экспериментальных данных в области экстремальных состояний вещества, что потребовало весьма кропотливой работы для сбора этих данных, в том числе и из бумажных источников. Эта работа была проделана в [110].

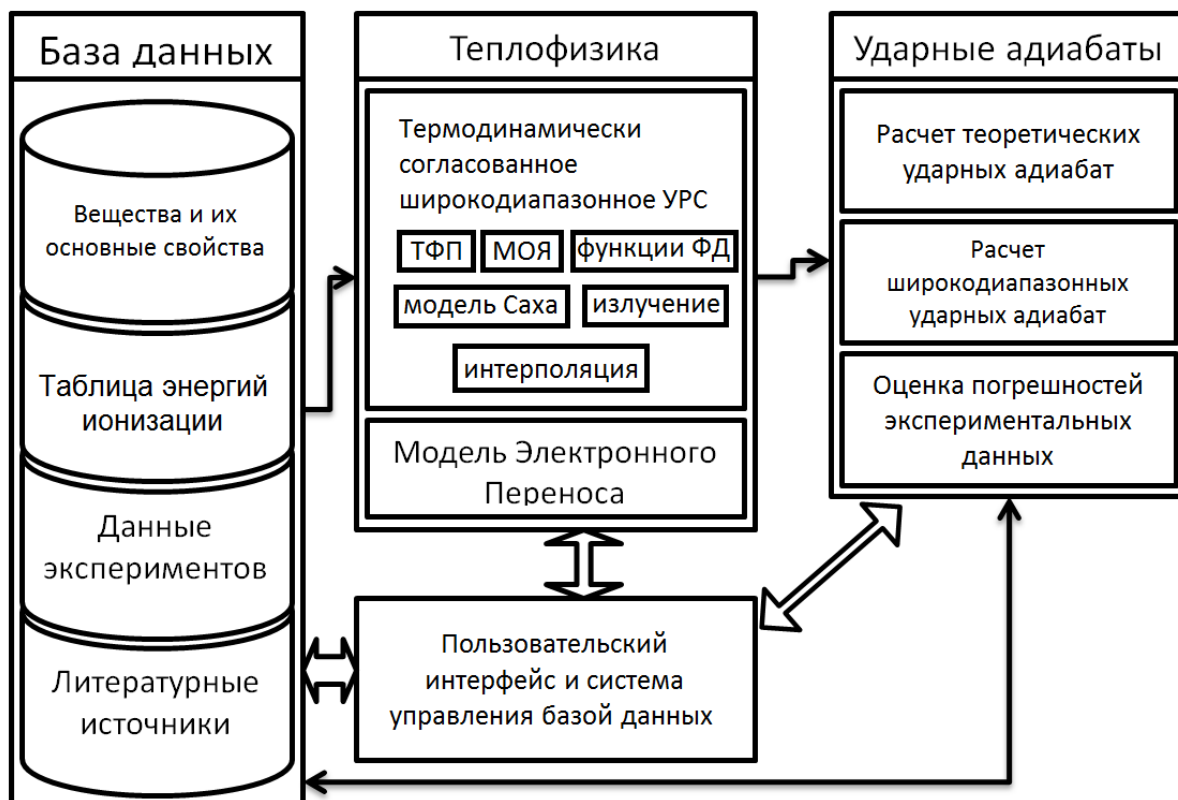


Рис. 6.1. Компонентная диаграмма программного комплекса ТЕФИС

Таким образом комплекс ТЕФИС включает в себе следующие компоненты (см. рис. 6.1):

1. База данных с описаниями основных свойств веществ и элементов.
2. База данных с результатами экспериментальных исследований по ударным сжатиям веществ.
3. База данных с энергиями ионизации для 105 элементов периодической системы.
4. Программы, реализующие математические модели, рассматриваемые в данной работе и позволяющие рассчитывать термодинамические величины для любого заданного вещества:
 - (а) ★ Модель Томаса-Ферми с квантовой и обменной поправками.
 - (б) ★ Модель осциллирующих ядер.
 - (с) ★ Модель Саха.
 - (д) ★ Модель термодинамически согласованной интерполяции газовой и жид-

кой плазмы.

- (e) ★ Прецизионный расчет специальных функций Ферми-Дирака.
 - (f) ★ Аппроксимации термодинамических таблиц газовой и жидкой плазмы.
 - (g) Модель электронного переноса для расчетов теплопроводности и электропроводности, выполненная в [111].
5. ★ Программы расчета теоретических ударных адиабат на основе термодинамических величин.
 6. Программы по совместной обработке теоретических ударных адиабат разной пористости.
 7. Программы по совместной обработке теоретических ударных адиабат и экспериментальных данных, рассчитывающие широкодиапазонные ударные адиабаты.
 8. Программы, проводящие статистическую обработку экспериментальных данных.
 9. Программы, аппроксимирующие экспериментальные и рассчитанные таблицы данных.
 10. Пользовательский интерфейс, интегрирующий в себя все возможности программного комплекса по расчетам и анализу результатов. Помимо прочего с его помощью можно редактировать содержимое базы данных.

Знаком ★ отмечены программы, которые были реализованы в рамках данной работы. Реализация каждой из перечисленных задач — это уже достаточно сложная проблема. Но, как разобренный набор модулей, это решение не будет представлять серьезного интереса. Большим преимуществом ТЕФИС является совместность всех модулей в одном комплексе. В нем была создана модульная целостная полнофункциональная расширяемая среда.

6.1.2. Реализация моделей. Для реализации алгоритмов вычисления моделей из гл. 2, в комплексе ТЕФИС применяются разные языки программирования: Основной задачей при выборе языков реализации алгоритмов являлись:

1. высокая производительность;
2. наглядность реализации алгоритма;
3. легкая переносимость.

Под такие критерии подходят несколько языков, и были выбраны языки Matlab и C++.

Язык программирования C++, наиболее подходящий для программ высокой производительности, использовался для всех основных термодинамических расчетов.

Расчет транспортных коэффициентов, аппроксимация данных были реализованы на Matlab. Основным преимуществом платформы Matlab является простота управ-

ления памятью и максимальная простота полученного кода. Другим важным преимуществом Matlab являются его средства визуализации табличных данных.

Во всех расчетах используются 64-битные типы с плавающей точкой. Это дает существенно высокую производительность. Кроме того, это желательно для сохранения преемственности кода и результатов в случае переноса программного комплекса на другую платформу.

Для связки модулей реализации алгоритмов и основной управляющей программы ТЕФИС используется Matlab Compiler, который позволяет компилировать m-файлы и создает механизмы оберток к внешним функциям в виде динамически подключаемых библиотек.

Использование Matlab Compiler позволило решить еще одну весьма важную проблему — проблему развертывания системы как единого целого. Ведь для запуска m-файлов нужна среда Matlab. Использование откомпилированных моделей позволило избежать этого требования. Таким образом, из системных требований комплекса выпадает требование о наличии системы Matlab.

Для визуализации расчетов и построения графиков также используется Matlab либо его аналог GNU Octave [43, 44]. Помимо этого часто оказалось удобным использовать графическую библиотеку matplotlib [45, 46]. С её помощью можно строить сложные графики в интерактивной среде с использованием высокоуровневого языка Python.

6.2 Программный пакет Gas-Liquid Plasma

Для проведения термодинамических расчетов на языке C++ были написаны библиотеки, решающие конкретные узкие задачи. Они могут быть использованы как вместе в программном комплексе ТЕФИС, так и независимо друг от друга. С помощью написанных автором программ были получены все расчеты, результаты которых приводятся в диссертации. Приведем интерфейсы этих библиотек.

6.2.1. Библиотека SEq. Библиотека **Saha Equations** написана для расчета термодинамики по модели Саха. Ее интерфейс представлен в лист. 6.1. Он состоит из функции вычисления термодинамических свойств для заданных условий а также включает расчет радиусов ионизации сжатием. Дополнительно библиотека экспортирует справочные данные о потенциалах ионизации для всех $Z \leq 103$.

```
1 #pragma once
2
3 #include <stdexcept>
4 #include <vector>
5
```

```

6 namespace saha
7 {
8
9     // Точка расчёта по модели Саха.
10    struct Point
11    {
12        unsigned int Z;    // атомный номер элемента
13        double lgT;        // температура, а. е.
14        double lgV;        // объём атомной ячейки, а. е.
15        double lgP;        // давление, а. е.
16        double lgE;        // энергия, а. е.
17        double lgS;        // энтропия, а. е.
18        double M;          // химический потенциал, а. е.
19        double F;          // свободная энергия, а. е.
20        double Xe;         // Ионизация
21
22        double lgKappa;    // объёмная доля электронных остовов, б/р
23        double dLgKdLgV;   // производная lgKappa по lgV
24        double dLgKdLgT;   // производная lgKappa по lgT
25    };
26
27    // Функция расчёта термодинамических величин по модели Саха.
28    // Рекомендуется производить серию расчётов при фиксированном
29    // lgT изменяя значение lgV от больших к меньшим.
30    //
31    // Z - атомный номер элемента
32    // lgT - температура, а. е.
33    // lgV - объём электронной ячейки, а. е.
34    //
35    /// В случае ошибки выбрасывается исключение std::exception.
36    Point Calculate(unsigned int Z, double lgT, double lgV);
37
38    // Определение среднего заряда остова
39    struct AvgChargeMode
40    {
41        enum Value
42        {
43            Holzmark,    // по Хольцмарку
44            Debay,       // по Дебаю
45        };
46    };
47
48    // Вычисление радиусов ионизации сжатием.
49    //
50    // Z - атомный номер элемента
51    // mode - определение среднего заряда

```

```

52 //
53 // Возвращает массив радиусов ионизации в атомных переменных
54 std::vector<double> ColdPressureIonizationRadius(unsigned int Z,
55           AvgChargeMode::Value mode);
56
57 // Таблица потенциалов ионизации
58 std::vector<std::vector<double>> IonizationPotentials();
59
60 } // namespace

```

Листинг 6.1. Интерфейс библиотеки SEq

6.2.2. Библиотека LiP. Библиотека Lip (**L**iquid **P**lasma) написана для расчета термодинамики жидкой плазмы. Для расчета термодинамики электронов используется модель ТФП. Функции расчета электронных термодинамических функций приведены в лист. 6.2. Реализация алгоритмов расчета нулевых изотерм существенно отличаются от температурных расчетов, поэтому эти функции разделены. Кроме того, поскольку выгодно переносить результаты вычислений предыдущего узла таблицы в качестве начального приближения для расчета следующего узла, алгоритмы имеют состояние, которое имплементировано с помощью классов C++.

Наиболее эффективно рассчитывать точки не отдельно, а серией, вызывая соответствующие функции библиотеки CalculateColdTFPTable и CalculateHotTFPTable.

```

1 #pragma once
2
3 #include <vector>
4
5 namespace tfp
6 {
7     // Энергия связи электронов.
8     const static double E0 = -7.6874512421364e-001;
9
10    // Квантово-обменная поправка к E0.
11    const static double DE0 = -2.69900169992e-001;
12
13    // Точка расчета термодинамики электронов по модели ТФП для Z=1.
14    struct tff
15    {
16        double p; // давление, а. е.
17        double e; // энергия, а. е.
18        double s; // энтропия, а. е.
19        double m; // химический потенциал, а. е.
20        double dp; // квантово обменная поправка к давлению, а. е.
21        double de; // квантово обменная поправка к энергии, а. е.

```



```

22     double ds; // квантово обменная поправка к энтропии, а. е.
23     double dm; // квантово обменная поправка к хим. потенциалу , а. е.
24     double f; // свободная энергия, а. е.
25     double x; // ионизация, а. е.
26 };
27
28 // Результат расчета на сгущающихся сетках с экстраполяцией по Ричардсону.
29 struct tff_r
30 {
31     double lgV; // Объем атомной ячейки, а. е.
32     double lgT; // Температура, а. е.
33     size_t N; // Максимальный размер сетки, используемый при
34 // сгущениях для достижения ма
35     tff values; // Значения электронных термодинамических функций
36     tff lgErrors; // Логарифмы погрешностей values
37 };
38
39 // Интерфейс класса инкапсулирующего реализацию холодной модели ТФП,
40 // используемой, для расчета нулевых изотерм.
41 // Рассчитывается автомодельное решения для  $Z = 1$ .
42 class ColdTFPModel
43 {
44 public:
45     // Расчет термодинамики электронов при заданных условиях
46     // на сетке размера N
47     // V - объем атомной ячейки, а. е.
48     // N - количество узлов сетки, используемой для решения уравнений ТФП
49     tff::tff Calculate(double V, size_t N);
50
51     // Расчет термодинамики электронов при заданных условиях
52     // на сгущающихся сетках
53     // T - температура, а. е.
54     // V - объем атомной ячейки, а. е.
55     tff::tff_r CalculateRefined(double V);
56 };
57
58 // Интерфейс класса инкапсулирующего реализацию температурной модели ТФП.
59 // Рассчитывается автомодельное решения для  $Z = 1$ .
60 class HotTFPModel
61 {
62 public:
63     // Расчет термодинамики электронов при заданных условиях
64     // на сетке размера N
65     // T - температура, а. е.
66     // V - объем атомной ячейки, а. е.
67     // N - количество узлов сетки, используемой для решения уравнений ТФП

```

```

68     tfp :: tff Calculate(double T, double V, size_t N);
69
70     // Расчет термодинамики электронов при заданных условиях
71     // на сгущающихся сетках
72     // T - температура, а. е.
73     // V - объем атомной ячейки, а. е.
74     tfp :: tff_r CalculateRefined(double T, double V);
75 };
76
77
78     // Расчет таблицы электронных термодинамических функций модели ТФП при T=0
79     // Рассчитывается автомодельное решения для Z = 1.
80     //
81     // lgVFrom, lgVTo - Диапазон расчетов по объему, а. е.
82     // lgVStep - Шаг таблицы, а. е.
83     std :: vector<tfp :: tff_r> CalculateColdTFPTable(
84         double lgVFrom,
85         double lgVTo,
86         double lgVStep);
87
88     // Расчет температурной строки таблицы электронных термодинамических
89     // функций модели ТФП для заданного T.
90     // Рассчитывается автомодельное решения для Z = 1.
91     //
92     // lgT - Температура, а. е.
93     // lgVFrom, lgVTo - Диапазон расчетов по объему, а. е.
94     // lgVStep - Шаг таблицы, а. е.
95     std :: vector<tfp :: tff_r> CalculateHotTFPTable(
96         double lgT,
97         double lgVFrom,
98         double lgVTo,
99         double lgVStep);
100
101
102 } // namespace tfp

```

Листинг 6.2. Типы, функции и классы расчета термодинамики электронов библиотеки LiP

Интерфейс для расчета вклада ядер в термодинамику приведен в лист. 6.3.

```

1 #pragma once
2
3 namespace nucleus
4 {
5     // Точка расчета ядерных термодинамических функций
6     struct Point

```

```

7  {
8    unsigned int Z;    // Атомный номер
9    double p;         // Давление
10   double e;         // Энергия
11   double s;         // Энтропия
12  };
13
14  // Вычисление вклада ядер в термодинамику по модели ИГЯ.
15  // Z - атомный номер
16  // lgT - температура
17  // lgV - объём атомной ячейки
18  Point CalculateING(unsigned int Z, double lgT, double lgV);
19
20  // Вычисление вклада ядер в термодинамику по модели МОЯ.
21  // Z - атомный номер
22  // lgT - температура
23  // lgV - объём атомной ячейки
24  //  $\mu_i$  - значение электронного химического потенциала для заданных T и V
25  // D $\mu_i$  - квантово-обменная поправка к  $\mu_i$ 
26  Point CalculateMON(unsigned int Z, double T, double V,
27                    double  $\mu_i$ , double D $\mu_i$ );
28
29  // Вычисление вклада ядер в термодинамику по модифицированной модели МОЯ.
30  // Z - атомный номер
31  // lgT - температура
32  // lgV - объём атомной ячейки
33  //  $\mu_i$  - значение электронного химического потенциала для заданных T и V
34  // D $\mu_i$  - квантово-обменная поправка к  $\mu_i$ 
35  Point CalculateModifiedMON(unsigned int Z, double T, double V,
36                             double  $\mu_i$ , double D $\mu_i$ );
37
38  };

```

Листинг 6.3. Типы и функции библиотеки LiP для расчета термодинамики ядер

6.2.3. Библиотека IEOS. Библиотека IEOS (Interpolated thermodynamically consistent equation of state) содержит алгоритмы вычисления широкодиапазонного термодинамически согласованного уравнения состояния газовой и жидкой плазмы. По такому УРС разработана реализация специализированного алгоритма вычисления широкодиапазонных ударных адиабат. Реализована возможность учета вклада излучения в термодинамику. Основные интерфейсы приводятся в лист. 6.4

```

1 #pragma once
2 #include <vector>
3

```

```

4 namespace ieos
5 {
6     struct PhysPoint
7     {
8         double P; // давление, бар
9         double E; // энергия, Дж
10        double S; // энтропия
11        double V; // объём атомной ячейки, см³
12        double T; // температура, эВ
13    };
14
15    // Функция расчета широкодиапазонной термодинамики
16    // вещества с атомным номером Z при заданных условиях lgT и lgV.
17    // includeRadiation - включение термодинамику учет излучения
18    // kappa0 - параметр интерполяции
19    PhysPoint CalculateWiderangeThermodynamics(
20        double lgT,
21        double lgV,
22        double Z,
23        bool includeRadiation,
24        double kappa0)
25
26    // Вычисление массовой скорости на ударной адиабате
27    double Uspeed(double E, double E0, double P, double P0)
28    {
29        return sqrt(2.0*(E-E0)*(P-P0)/(P+P0));
30    }
31
32    // Вычисление скорости ударной волны на ударной адиабате
33    double Dspeed(double P, double P0, double rho0, double Uspeed)
34    {
35        return (P - P0) / rho0 / Uspeed;
36    }
37
38    // Точка ударной адиабаты
39    struct AdiabaticPoint
40    {
41        int Z; // атомный номер
42        double rho_r0; // сжатие
43        double lgRho; // плотность, г/см³
44        double lgT; // температура, эВ
45        double lgP; // давление, бар
46        double lgE; // энергия, Дж
47        double lgS; // энтропия
48        double D; // скорость ударной волны, км/с
49        double U; // массовая скорость, км/с

```

```

50 };
51
52 typedef std::vector<AdiabaticPoint> AdiabaticPoints;
53
54 // Расчет главной ударной адиабаты вещества с атомным номером Z
55 // по широкодиапазонному термодинамическому уравнению состояния.
56 //
57 // includeRadiation - включение термодинамику учет излучения
58 // kappa0 - параметр интерполяции
59 AdiabaticPoints CalculateShockAdiabats(
60     int Z,
61     bool includeRadiation,
62     double kappa0);
63 }

```

Листинг 6.4. Функции и типы библиотеки IEOS

6.2.4. Библиотека FDSF. Библиотека FDSF (**F**ermi **D**irac **s**pecial **f**unctions) позволяет надежно вычислять специальные функции Ферми-Дирака с высокой точностью. Они приведены в лист. 6.5. На данный момент реализованы функции полуцелых индексов $1/2$, $-1/2$, $3/2$ и их некоторые комбинации используемые в термодинамических расчетах.

```

1 #pragma once
2
3 namespace fdsf
4 {
5     // Возвращает значение  $0.5 * fd\_half * fd\_mhalf + 6/4 * fdJmhalf2$ 
6     double fd_H(double x);
7
8     // Возвращает значение  $7/4 * fd\_mhalf^2 - 0.25fd\_half * fd3mhalf$ 
9     double fd_dH(double x);
10
11     // Вычисляет интегральную функцию  $\Phi_D \int_{-\infty}^x fd\_mhalf^2$ 
12     double fd_Jmhalf2(double x);
13
14     // Возвращает величину абсолютной погрешности вычисления  $fd\_Jmhalf2$ 
15     double fd_Jmhalf2_abs_error(double x);
16
17     // Вычисляет значение функции  $\Phi_D$  с индексом  $-1/2$ 
18     double fd_mhalf(double x);
19
20     // Вычисляет значение функции  $\Phi_D$  с индексом  $1/2$ ;
21     double fd_half(double x);
22

```

```
23 // Вычисляет значение функции ФД с индексом 3/2
24 double fd_3half(double x);
25
26 // Вычисляет вторую производную от fd_half.
27 double fd_d2_half(double x);
28 } // namespace fdfs
```

Листинг 6.5. Функции библиотеки FDSF

7. Заключение

- Построена и обоснована новая модель взаимодействия заряженных частиц в плазме. Ее включение в обобщенное уравнение ионизационного равновесия позволило далеко расширить область применимости модели газовой плазмы в сторону низких температур и сверхвысоких плотностей и разумно количественно описать явление ионизации сжатием при нулевой температуре.
- Разработан сверхбыстрый специализированный алгоритм решения уравнений Томаса-Ферми с квантовыми и обменными поправками. На его основе написана программа для расчета таблиц термодинамических функций жидкой плазмы.
- Разработан метод интерполяции по разным моделям, сохраняющий строгую термодинамическую согласованность давления, энергии и энтропии. С его помощью построено широкодиапазонное термодинамическое уравнение состояния, одновременно описывающее газовую и жидкую плазму. Разработан алгоритм для расчета такого уравнения состояния и ударных адиабат. Выполнены расчеты ударных адиабат некоторых металлов и получено хорошее согласие с экспериментами при давлениях $P \geq 20$ Мбар.
- Разработано два метода для аппроксимации гладких неперiodических функций одного и двух аргументов рядами Фурье. Это метод двойного периода и метод четно-нечетных продолжений. Найдены оптимальные параметры этих методов. Построены аппроксимации термодинамических функций жидкой плазмы, рекомендуемые в качестве справочных данных, имеющие точность до 0.1%.
- Составлены программы для решения уравнений статистической модели атома с квантовой и обменной поправками. Модернизированы программы для решения обобщенных уравнений ионизационного равновесия в газовой плазме. Составлены программы для расчета широкодиапазонного уравнения состояния, а также программы расчета ударных адиабат. Эти программы объединены в автоматизированный программный комплекс.

Список иллюстраций

| | | |
|-----|--|----|
| 1.1 | Диаграмма состояний. Сплошные линии — фазовые переходы. | 7 |
| 1.2 | «Лоскутное одеяло» моделей SESAME согласно [42]. Штриховые линии разбивают фазовую плоскость на области разных моделей. | 16 |
| 2.1 | Потенциальная энергия модели Дебая в ячейке, отнесенная к $z^2\xi$ | 33 |
| 2.2 | Кривые холодной ионизации Cu. Жирная линия — ТФП, маркеры — модель Саха: кружок полый — заряд z_H , точка — заряд z_D , сплошные линии — поправка (2.19), пунктир — поправка (2.18) с коэффициентом $9/10$ | 36 |
| 2.3 | Изолинии параметра неидеальности для Cu. На линиях указаны значения $lg\gamma$ | 37 |
| 2.4 | Изолинии $lg\kappa$ для Cu. На линиях указаны значения $lg\kappa$. Жирной линией показана кривая «испарения» θ из (3.25с). Фон указывает отличие моделей Саха и ТФП. Белый — до 1.2 раза. Светлый — от 1.2 до 2.5 раз, темный — свыше 2.5 раз. | 38 |
| 3.1 | Относительная погрешность вычислений функции (3.35) по асимптотикам. На каждой кривой написано соответствующее значение x | 56 |
| 3.2 | Мажорантная оценка относительной погрешности метода расчета функции $\mathcal{J}(x)$ | 58 |
| 4.1 | То же, что и рис. 1.1. Пунктир — границы применимости широкодиапазонного уравнения состояния плазмы. | 77 |
| 4.2 | Нарушение термодинамического соотношения (4.9) в библиотеке SESAME на примере Cu. Нарушение менее 3% — белый фон, 3–10% светло серый, 10–30% — серый, свыше 30–100% — темно серый, свыше 100% — черный. | 80 |
| 4.3 | Главная ударная адиабата Cu. Тонкая сплошная линия — модель ТФП, тонкий пунктир — модель Саха. Жирная линия — интерполяция с $\kappa_0 = 0.1$. Жирный пунктир — учет излучения. Кружками маркирована линия испарения θ из (3.25с). | 84 |

| | | |
|------|--|-----|
| 4.4 | Главная ударная адиабата Fe. Тонкая сплошная линия — модель ТФП, тонкий пунктир — модель Саха. Жирная линия — интерполяция с $\kappa_0 = 0.1$. Жирный пунктир — учет излучения. Кружками маркирована линия испарения θ из (3.25с). | 84 |
| 4.5 | Главная ударная адиабата Al. Тонкая сплошная линия — модель ТФП, тонкий пунктир — модель Саха. Жирная линия — интерполяция с $\kappa_0 = 0.1$. Жирный пунктир — учет излучения. Кружками маркирована линия испарения θ из (3.25с). | 85 |
| 4.6 | Главная ударная адиабата Pb. Тонкая сплошная линия — модель ТФП, тонкий пунктир — модель Саха. Жирная линия — интерполяция с $\kappa_0 = 0.1$. Жирный пунктир — учет излучения. Кружками маркирована линия испарения θ из (3.25с). | 85 |
| 4.7 | Главная ударная адиабата Cu в скоростных переменных. Кривая — данная теория. Эксперименты на взрывчатках — жирные точки, в ядерных взрывах — светлые кружки, в лазерных взрывах — крестики. | 87 |
| 4.8 | Главная ударная адиабата Fe в скоростных переменных. Кривая — данная теория. Эксперименты на взрывчатках — жирные точки, в ядерных взрывах — светлые кружки. | 88 |
| 4.9 | Главная ударная адиабата Al в скоростных переменных. Кривая — данная теория. Эксперименты на взрывчатках — жирные точки, в ядерных взрывах — светлые кружки. | 88 |
| 4.10 | Главная ударная адиабата Al в скоростных переменных. Кривая — данная теория. Эксперименты на взрывчатках — жирные точки, в ядерных взрывах — светлые кружки. | 89 |
| 5.1 | Эмпирический критерий обусловленности. Точки с разбросами — численные расчеты ошибок округления коэффициентов разложения (при 64-разрядных вычислениях); сплошные линии — их теоретические оценки; штриховые линии — оценки самих коэффициентов. N — ось абсцисс, M — цифры около кривых | 97 |
| 5.2 | То же, что и рис. 5.1. Добавлены толстые линии — ошибки округления, рассчитанные по угловому критерию обусловленности. | 99 |
| 5.3 | Экстраполяция функции $u(x) = x$ методом двойного периода. Заданный отрезок — жирная линия; экстраполяция — тонкие линии, около них указаны значения M | 101 |
| 5.4 | Зависимость ошибки аппроксимации сильно осциллирующей функции по методу двойного периода (белые точки) и многочленам Чебышева первого рода (черные кружки) в нормах C (верхний набор точек) и L_2 (нижний набор точек) от количества параметров (ось абсцисс). | 103 |

| | | |
|------|---|-----|
| 5.5 | Сравнение аппроксимации сильно осциллирующей функции методом двойного периода (пунктир) и многочленами Чебышева (сплошная линия) при одинаковом числе параметров 25. Точки — аппроксимируемый материал. | 104 |
| 5.6 | Сравнение аппроксимации сильно осциллирующей функции методом двойного периода (пунктир) и многочленами Чебышева (сплошная линия) при одинаковом числе параметров 35. Точки — аппроксимируемый материал. | 105 |
| 5.7 | Средняя мера недиагональности первой клетки матрицы Грама на неравномерной сетке | 106 |
| 5.8 | Аппроксимация и экстраполяция двумерной функции $f(x, y) = x + y$ двумерным методом двойного периода при $N = 7$ и различных M . $M = 0$ — самая светлая поверхность, $M = 6$ — самая темная, между ними аппроксимации при $M = 2$ и $M = 4$. Сплошной линией обведена область аргументов задания $f(x, y)$, пунктиром — область экстраполяции. | 107 |
| 5.9 | Зависимость погрешности одномерной аппроксимации в норме L_2 от числа параметров N . ▲ — классическая фурье-аппроксимация; ● — разложение по косинусам четного продолжения; ○ — метод нечетного продолжения. | 112 |
| 5.10 | Зависимость погрешности двумерной аппроксимации в норме L_2 от числа параметров N при различном усечении матрицы коэффициентов. Буквы на графике: a — классическая фурье-аппроксимация; b — разложение по косинусам четного продолжения; c — метод нечетного продолжения. Маркеры соответствуют различным усечениям: ■ — квадратная матрица коэффициентов; △ — треугольно усеченная матрица коэффициентов; ● — гиперболическое усечение. | 113 |
| 5.11 | Графики термодинамических кривых P (квадраты), E (круги), μ (треугольники), DP (полые квадраты), DE (полые круги), $D\mu$ (полые треугольники) до (a) и после (b) преобразования (5.41). | 115 |
| 5.12 | Относительная среднеквадратичная погрешность аппроксимации δ холодной кривой давления в логарифмическом масштабе в зависимости от количества базисных функций N . △ — полиномы Чебышева, ★ — разложение по асимптотикам, остальные линии — метод двойного периода при $M = 2$ (□), $M = 3$ (■), $M = 4$ (●), $M = 5$ (○). | 122 |
| 6.1 | Компонентная диаграмма программного комплекса ТЕФИС | 124 |

Список таблиц

| | | |
|------|--|-----|
| 1.1 | Используемые физические величины и их обозначения | 24 |
| 1.2 | Используемые физические константы и их обозначения | 25 |
| 1.3 | Связь атомных единиц с физическими. | 25 |
| 1.4 | Атомные единицы. | 26 |
| 3.1 | Энергия связи электронов в атоме водорода. | 71 |
| 5.1 | Общая структура матрицы скалярных произведений Грама. | 94 |
| 5.2 | Матрица Грама для $N = 2, M = 3$ | 94 |
| 5.3 | Коэффициенты $C_{\infty, M}$ при аппроксимации погрешности формулой (5.17) с тем числом знаков, которые надежно устанавливаются в процессе расчета. | 100 |
| 5.4 | Погрешность аппроксимации кривых холодного сжатия в нормах C и L_2 . Здесь $\varepsilon = (-\partial E/\partial V - P)/P$ | 101 |
| 5.5 | Относительная погрешность аппроксимации нулевых изотерм методом двойного периода в нормах C и L_2 при $N = 5, M = 4$ | 115 |
| 5.6 | Коэффициенты разложения в методе двойного периода нулевых изотерм водорода при оптимальном числе параметров: $N = 5, M = 4$. Каждый столбец таблицы соответствует одной из аппроксимируемых функций. В первом столбце указаны базисные функции, к которым относятся коэффициенты. | 116 |
| 5.7 | Параметры и точность аппроксимации термодинамических функций модели ТФП в нормах C и L_2 | 116 |
| 5.8 | Степени при V в асимптотических разложениях холодных кривых на левом ($V \rightarrow 0$) и правом ($V \rightarrow \infty$) концах кривых. | 118 |
| 5.9 | Параметры разложений холодных термодинамических кривых в ряд (5.44). | 119 |
| 5.10 | Оптимальные параметры разложения (5.44). δ_{L_2} — относительная погрешность аппроксимации в норме L_2 (ошибка в норме C больше примерно в $\sqrt{2}$ раз). | 120 |

| | |
|--|-----|
| 5.11 Коэффициенты разложения в ряд (5.44) холодных кривых при параметрах из табл. 5.10. | 120 |
| 5.12 Относительная погрешность аппроксимации δ в нормах C и L_2 при аппроксимации полиномами Чебышева степени N | 121 |

Список литературы

- [1] Тиман Л. Б. Влияние взаимодействия ионов на их равновесные концентрации в случае многократной термической ионизации газа. *ЖЭТФ*, 27:708, 1954.
- [2] Ликальтер А. А. Взаимодействие атомов с электронами и ионами в плазме. *Журнал экспериментальной и теоретической физики*, 56(1):240, 1969.
- [3] Hansen J. P., Pollok E. L. Statistical mechanics of dense ionized matter. *Phys. Rev. A*, 8(6):3096–3122, 1973.
- [4] Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Модели неидеальности плазмы. *Препринт ИПМ АН СССР*, 16, 1989.
- [5] Калиткин Н. Н., Козлитин И. А. Модель квазинезависимых частиц для плазменного микрополя. *Доклады Академии Наук*, 418(5):614–618, 2008.
- [6] Thomas L. H. The calculation of atomic fields. *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, 23(5):542–548, 1927.
- [7] Fermi E. Un metodo statistico per la determinazione di alcune proprieta dell'atomo. *Rend. Accad. Naz. Lincei*, 6:602–607, 1927.
- [8] Feynman R. P., Metropolis N., Teller E. Equations of State of Elements Based on the Generalized Fermi-Thomas Theory. *Phys. Rev.*, 75(10):1561–1573, 1949.
- [9] Brachman, Malcolm K. Thermodynamic Functions on the Generalized Fermi-Thomas Theory. *Phys. Rev.*, 84(6):1263, 1951.
- [10] Latter R. Temperature Behavior of the Thomas-Fermi Statistical Model for Atoms. *Phys. Rev.*, 99(6):1854–1870, 1955.
- [11] Fermi E., Amaldi E. Le orbite ∞ s degli elementi. *Mem. Accad. Italia (Fis.)*, 6:119, 1934.
- [12] Dirac P. A. M. Note on exchange phenomena in the Thomas atom. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 26(03):376–385, 1930.

- [13] Jensen H. Uber die existenz negativer ionen im rahmen des statistischen modells. *Zeitschrift fur Physik A Hadrons and Nuclei*, 101(3):141–163, 1936.
- [14] Jones W., Young W. H. Density functional theory and the von weizsacker method. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 4:1322, 1971.
- [15] Фок В. А. *Начала квантовой механики*. Изд-во ЛКИ М., 2007.
- [16] Киржниц Д. А. Квантовые поправки к уравнению Томаса-Ферми. *ЖЭТФ*, 32(1):115–123, 1957.
- [17] Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Кривые холодного сжатия при больших давлениях. *ФТТ*, 13(8):2314–2318, 1971.
- [18] Калиткин Н. Н. Модель атома Томаса-Ферми с квантовыми и обменными поправками. *ЖЭТФ*, 38(5):1534–1540, 1960.
- [19] Калиткин Н. Н. Вещества при высоких энергиях. *Диссертация. Москва, ИМП АН СССР*, 1975.
- [20] Аврорин Е. Н., Водолага Б. К., Симоненко В. А. Фортов В. Е. "Мощные ударные волны и экстремальные состояния вещества". *Успехи физических наук*, 163(5):1, 1993.
- [21] Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии. Препринт 35. *М:ИИМ АН СССР*, с. 76, 1975.
- [22] Воропинов А. И., Гандельман Г. М., Подвальный В. Г. Электронные энергетические спектры и уравнение состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. *Успехи физических наук*, 100(2), 1970.
- [23] Liberman D. A. Self-consistent field model for condensed matter. *Physical Review B*, 20(12):4981, 1979.
- [24] Liberman. *J. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 27(3):335, 1982.
- [25] Slater J. C. A simplification of the Hartree-Fock method. *Physical Review*, 81(3):385, 1951.
- [26] Perrot F. Gradient correction to the statistical electronic free energy at nonzero temperatures: Application to equation-of-state calculations. *Phys. Rev. A*, 20(2):586–594, Aug 1979.

- [27] Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Уваров В. Б. Модифицированная модель Хартри-Фока-Слэтера для вещества с заданной температурой и плотностью. *Вопр. атомн. науки и техн., Сер. Методики и программы*, с. 6, 1979.
- [28] Калиткин Н. Н., Ритус И. В. Гладкая аппроксимация функций Ферми-Дирака. *ЖВМиМФ*, 26(3):461–465, 1986.
- [29] Gupta U., Rajagopal A. K. Inhomogeneous electron gas at nonzero temperatures: Exchange effects. *Physical Review A*, 21:2064–2068, 1980.
- [30] Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. *Энциклопедия низкотемпературной плазмы*, том VII-1, chapter Модели вещества в экстремальном состоянии, сс. 451–486. М: ФИЗМАТЛИТ, 2008.
- [31] Rozsnyai V. F. Relativistic Hartree-Fock-Slater calculations for arbitrary temperature and matter density. *Physical Review A*, 5(3):1137, 1972.
- [32] Синько Г. В. Использование метода самосогласованного поля для расчета термодинамических функций электронов в простых веществах. *Теплофизика высоких температур*, 21(6):1041–1052, 1983.
- [33] Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas. *Physical review*, 136(3B):B864, 1964.
- [34] Zink J. W. Shell structure and the thomas-fermi equation of state. *Physical Review*, 176(1):279, 1968.
- [35] Шпатаковская Г. В. Препринт ФИАН. *Physical Review*, (61), 1973.
- [36] Андрияш А. В., Симоненко В. А. Оценка влияния оболочечных эффектов на термодинамические свойства простых веществ. *Nauki Tekh. Ser. Teor. Prikl. Fiz*, 2(2):52, 1984.
- [37] Копышев В. П. О термодинамике ядер одноатомного вещества. *IV Всесоюзная школа-семинар по моделям механики сплошной среды*, 1977.
- [38] Копышев В. П. О термодинамике ядер одноатомного вещества. *Численные методы механики сплошной среды*, 8(6):54–67, 1977.
- [39] Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Модель осциллирующих ядер. *Чис. мет. мех. сплош. среды*, 8(6):46–53, 1977.
- [40] Ashcroft N. W., Stroud D. Theory of the thermodynamics of simple liquid metals. *Solid State Physics*, 33:1–81, 1978.

- [41] Lyon, Stanford P and Johnson, James D. Sesame: the los alamos national laboratory equation of state database. *Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, LA-UR-92-3407*, 1992.
- [42] Калиткин Н. Н. Уравнения состояния. *Матем. моделирование*, 4(12):160–188, 1992.
- [43] Eaton J. W., Bateman D., Hauberg S. *Gnu Octave: A high-level interactive language for numerical computations*. SoHo Books, 2007.
- [44] Gnu octave. Интернет-ресурс: <https://www.gnu.org/software/octave>.
- [45] Hunter, John D. Matplotlib: A 2d graphics environment. *Computing in science and engineering*, 9(3):90–95, 2007.
- [46] matplotlib: python plotting. Интернет-ресурс: <http://matplotlib.org>.
- [47] Mohr P. J., Taylor B. N., Newell D. B. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2006. *Reviews of modern physics*, 80(2):633–730, 2008.
- [48] Баско М. М. Уравнение состояния металлов в приближении среднего иона. *М.:Препр. ИТЭФ*, (57):44, 1982.
- [49] Калиткин Н. Н., Ритус И. В., Миронов А. М. Ионизационное равновесие с учетом вырождения электронов. *М.: Препр. ИПМ*, (46):27, 1983.
- [50] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Статистическая физика. Часть 1*. «Теоретическая физика», том V. М.: НаукаТ, 1964.
- [51] Эбелинг В., Крефт В., Кремп Д. *Теория связанных состояний и ионизационного равновесия в плазме и твердом теле. Пер. с англ.* М.: Мир, 1979.
- [52] Фортов В. Е., Якубов И. Т. *Неидеальная плазма*. М.: Энергоатомиздат, 1994.
- [53] Broyles A. A. Stark fields from ions in plasmas. *Phys. Rev. A*, 100:1181–1190, 1955.
- [54] Грим Г. *Уширение спектральных линий в плазме*. М.: Мир, 1978.
- [55] Калиткин Н. Н., Козлитин И. А. Микрополевая модель квазинезависимых частиц и неидеальная плазма. *Физика плазмы*, 36(12):1–11, 2010.
- [56] Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Квантово-статистическое уравнение состояния. *Физика плазмы*, 2(5):858–868, 1976.

- [57] Калиткин Н. Н., Луцкий К. И. Обобщение уравнений Саха на жидкую плазму. *ДАН Физика*, 457(2):1–6, 2014.
- [58] Born M., Oppenheimer R. Zur quantentheorie der molekeln. *Annalen der Physik (Leipzig)*, 4(84):457–484, 1927.
- [59] Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*. Наука, 1966.
- [60] Трунин Р. Ф. *Ударные волны и экстремальные состояния вещества*, chapter Ударные адиабаты металлов, сс. 76–106. М: Наука, 2000.
- [61] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*. Курс теоретической физики. М.:ФИЗМАТЛИТ, 2004.
- [62] Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Уваров В. Б. *Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселандовых пробегов и уравнений состояния*. М.:Физико-математическая литература, 2000.
- [63] Кузьмина Л. В. *Численный расчет термодинамических функций веществ в статистической модели атома с квантово-обменными поправками*. Кандидатская диссертация, ИПМ АН СССР, 1978.
- [64] Киржниц Д. А. Экстремальные состояния вещества. *УФН*, 104(3):439–508, 1971.
- [65] Brush S. G., Sahlin H. L., Teller E. Monte carlo study of a one-component plasma. *J. Chem. Phys.*, 45(6):2102–2118, 1966.
- [66] Stroud D., Ashcroft N. W. Comment on the thermodynamics of a classical one-component plasma. *Phys. Rev. A*, 13(4):1660–1663, 1976.
- [67] Яненко Н. Н. *Избранные труды*, chapter Асимптотические и приближенные формулы для давления и внутренней энергии вещества в обобщенной модели атома Томаса-Ферми [Работа 1958 года], сс. 317–352. М.: Наука, 1991.
- [68] Garoni T. M., Frankel N. E., Glasser M. L. Complete asymptotic expansions of the fermi–dirac integrals. *Journal of Mathematical Physics*, 42(4):1860–1868, 2001.
- [69] Cloutman L. D. Numerical evaluation of the fermi-dirac integrals. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 71:677, 1989.
- [70] McDougall J., Stoner E. C. The computation of fermi-dirac functions. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 237(773):67–104, 1938.

- [71] MacLeod A. J. Algorithm 779: Fermi-dirac functions of order-1/2, 1/2, 3/2, 5/2. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 24(1):1–12, 1998.
- [72] Cody W. J., Thacher Jr H. C. Rational chebyshev approximations for fermi-dirac integrals of orders-1/2, 1/2 and 3/2. *Mathematics of Computation*, сс. 30–40, 1967.
- [73] Kim R., Lundstrom M. Notes on fermi-dirac integrals. *Arxiv preprint arXiv:0811.0116*, 2008.
- [74] Калиткин Н. Н. О вычислении функций Ферми-Дирака. *Журнал вычислительной математики и математической физики*, 8(1):173–175, 1968.
- [75] Goano M. Algorithm 745: computation of the complete and incomplete fermi-dirac integral. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 21(3):221–232, 1995.
- [76] Голованов Р. В., Луцкий К. И. Вычисление интегральной функции Ферми-Дирака. *Математическое моделирование*, 24(2):129–138, 2012.
- [77] Galassi M., Davies J., Theiler J. et al. *GNU scientific library*. Network Theory Ltd., 2002.
- [78] Gilvarry J. J. Thermodynamics of the thomas-fermi atom at low temperature. *Physical Review*, 96(4):934, 1954.
- [79] Gilvarry J. J. Solution of the temperature-perturbed thomas-fermi equation. *Physical Review*, 96(4):944, 1954.
- [80] Гамбош П. *Статистическая теория атома и её применения*. ИЛ М., 1951.
- [81] Горбачева Г. Ф., Ельяшевич, М. А. Романов и др. Расчет термодинамических свойств вещества по модели атома Томаса-Ферми. *Вестник Белорусского университета*, 1(2):62–67, 1974.
- [82] Калиткин Н. Н. Решение задач на собственные значения методом дополненного вектора. *Журнал вычислительной математики и математической физики*, 5(6):1107–1115, 1965.
- [83] Richardson L. F. The deferred approach to the limit. *Phil. Trans.*, 226:299–349, 1927.
- [84] Марчук Г. И., Шайдуров В. В. *Повышение точности решений разностных схем*. Наука, 1979.
- [85] Калиткин Н. Н. *Численные методы*. Наука, 1978.

- [86] Куропатенко В. Ф. Уравнения состояния. Макро и микро подходы. *Межотраслевой тематический семинар, посвященный 100-летию юбилею Л. В. Алтшулера. 12 ноября 2013, Саров, 2013.*
- [87] Калиткин Н. Н., Луцкий, К. И. Широкодиапазонное уравнение состояния газовой и жидкой плазмы. *Математическое моделирование*, 27(4):31–49, 2015.
- [88] Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В., Фунтиков А. И. Главные ударные адиабаты 10 металлов. *Математическое моделирование*, 14(10):27–42, 2002.
- [89] Marsh S. P. *LASL shock Hugoniot data*. University of California Press, Berkley, 1980.
- [90] M. van Thiel (ed.). *Compendium of shock wave data*. University of California Press, Livermore, 1977.
- [91] Трунин Р. Ф. (ред.). *Свойства конденсированных веществ при высоких давлениях и температурах*. Арзамас-16, 1992.
- [92] Сеге Г., Виденский В. С., Геронимус Я. Л. *Ортогональные многочлены*. Государственное издательство физико-математической литературы, 1962.
- [93] Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Аппроксимация и экстраполяция табулированных функций. *Доклады академии наук*, 374(4):464–468, 2000.
- [94] Калиткин Н. Н., Луцкий К. И. *Сборник трудов X Всероссийской школы-семинара “Современные проблемы математического моделирования”, под редакцией Л. А. Крукиера*, chapter Аппроксимация и экстраполяция функций, заданных на неравномерной сетке. Метод двойного периода., сс. 156–161. 2004.
- [95] Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В., Луцкий К. И. Анализ и подбор параметров метода двойного периода. *Тезисы докладов второй Всероссийской конференции памяти А. Ф. Сидорова «Актуальные проблемы прикладной математики и механики», Абрау-Дюрсо*, сс. 49–50, 2004.
- [96] Калиткин Н. Н., Луцкий К. И. *Сборник трудов XI Всероссийской школы-семинара “Современные проблемы математического моделирования”, chapter Выбор параметров метода двойного периода.*, сс. 181–187. 2005.
- [97] Калиткин Н. Н., Луцкий, К. И. Оптимальные параметры метода двойного периода. *Математическое моделирование*, 19(1):57–68, 2007.
- [98] Луцкий К. И. Обусловленность метода двойного периода. *Математическое моделирование*, 23(8):89–96, 2011.

- [99] Калиткин Н. Н., Луцкий К. И. Аппроксимация гладких поверхностей методом двойного периода. *Математическое моделирование*, 22(2):64–68, 2010.
- [100] Гончаров В. Л. *Теория интерполирования и приближения функций*. Гостехиздат, 1954.
- [101] Калиткин Н. Н., Юхно Л. Ф., Кузьмина Л. В. Критерий обусловленности систем линейных алгебраических уравнений. *Доклады Академии наук*, 434(4), 2010.
- [102] Калиткин Н. Н., Луцкий К. И. Метод нечётного продолжения для фурье-аппроксимации непериодических функций. *Доклады академии наук. Информатика.*, 441(1):19–23, 2011.
- [103] Голованов Р. В., Калиткин Н. Н., Луцкий К. И. Нечётное продолжение для фурье-аппроксимации непериодических функций. *Математическое моделирование*, 25(5):67–84, 2013.
- [104] Зигмунд А. *Тригонометрические ряды*, том 1. М.: Мир, 1965.
- [105] Ланцош К. *Практические методы переходного анализа*. М.: Физматгиз, 1961.
- [106] Ахмед Н., Рао К. *Ортогональные преобразования при обработке цифровых сигналов: Пер. с англ.* М.: «Связь», 1980.
- [107] Калиткин Н. Н., Юхно Л. Ф., Кузьмина Л. В. Количественный критерий обусловленности систем линейных алгебраических уравнений. *Математическое моделирование*, 23(2):3–26, 2011.
- [108] Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Аппроксимация квантово-статистических кривых холодного сжатия. *ИПМ РАН, Препринт № 87, г. Москва*, 1981.
- [109] База данных Института Теплофизики Экстремальных Состояний. Интернет-ресурс: <http://www.ihed.ras.ru/rusbank>.
- [110] Иванченко Е. С. *Прецизионные модели ударных адиабат и база ТЕФИС*. Кандидатская диссертация, ИПМ РАН, 2010.
- [111] Панин И. А. *Прецизионный расчет электронного переноса в неидеальной плазме*. Кандидатская диссертация, ИПМ РАН, 2009.