一个实用的 Fermi-Dirac 积分和修正 Fermi-Dirac 积分的数值方法及应用*

刘 全 丁 宁
(北京应用物理与计算数学研究所)

A PRACTICAL NUMERICAL METHOD FOR FERMI-DIRAC INTEGRALS AND APPLICATIONS

Liu Quan　Ding Ning
(*Beijing Institute of Applied Physics and Computational Mathematics*)

Abstract

In this paper, we present a simple and practical method to compute Fermi-Dirac integrals and modified Fermi-Dirac integrals. Moreover, we apply this method to compute the parameters $A_\perp^\alpha$ and $A_\perp^\beta$ in [5] and we get the desired result. The parameters are relevant to the dense plasma transport and are very important to the magnet confined plasma dynamics.

Key words: Fermi-Dirac integrals, numerical integral, transport coefficients

§1. 引　言

对于在高能激光或粒子束照射目标靶，以及磁场约束中产生的高密度等离子体的数值模拟研究中，输运系数常采用 Spitzer 和 Braginskii 的公式. 我们知道 Spitzer 和 Braginskii 的公式适合于完全电离的非简并等离子体，即低密度、高温等离子体. 对于高密度或低温简并等离子体，常给出不正确的结果，有时相差 10^2 的数量级 [5]. 因此在文献 [5] 中，作者从动力学理论的 Boltzmann 方程出发，推导输运系数，此时他们考虑了电磁场对电子分布的影响，进而修正输运系数. 由于只考虑稳态的输运过程， Boltzmann 方程为

$$\boldsymbol{v}\cdot\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}}-\frac{e}{m}(\boldsymbol{E}+\frac{\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}}{c})\cdot\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{v}}=-\frac{(f-f_0)}{\tau_c}, \tag{1}$$

这里 $\boldsymbol{v}$— 电子速度， e— 电子单位电荷量， m— 电子质量， $\boldsymbol{E}$— 电场， $\boldsymbol{B}$— 磁场， f_0— 局部平衡 Fermi-Dirac 分布， τ_c— 驰豫时间. 文献 [5] 详细地研究了磁场对于等离子体输运系数的影响，这些输运系数包括电导率及热传导系数和 Hall 系数、 Nernst 系数、

* 2002 年 12 月 23 日收到.

Leduc-Righi 系数等. 在本文中, 我们只计算电导率系数和热传导系数, 其余系数的计算是类似的.

文献 [5] 给出稠密等离子体垂直磁场的电导率系数和热传导系数为:

电导率系数

$$\sigma_{\perp} = (ne^2\tau/m)A_{\perp}^{\alpha}(\mu/kT, \omega_e\tau), \tag{2}$$

热传导系数

$$K_{\perp} = [nk(kT)\tau/m]A_{\perp}^{\beta}(\mu/kT, \omega_e\tau), \tag{3}$$

其中 e, m 同 (1) 式中的含义, τ 为平均电子驰豫时间, n— 电子数密度, k—Boltzmann 常数, T— 电子温度, μ— 化学势. 对于不同的物理现象及过程有相应的电子驰豫时间 [5]. 在本文中, 我们只考虑电导率系数和热传导系数中 $A_{\perp}^{\alpha}$ 和 $A_{\perp}^{\beta}$ 的计算, 一旦我们计算出 $A_{\perp}^{\alpha}$ 和 $A_{\perp}^{\beta}$ 后, $\sigma_{\perp}, K_{\perp}$ 的计算是显然的.

在公式 (2), (3) 中 $A_{\perp}^{\alpha}$ 和 $A_{\perp}^{\beta}$ 的表达式参见文献 [5], 其中涉及两类积分, F_j 和 $\tilde{F}_j$. $F_{\frac{1}{2}}$ 是指数为 $\frac{1}{2}$ 的 Fermi-Dirac 积分, $\tilde{F}_j$ 为修正的 Fermi-Dirac 积分, 其形式为

$$F_j(\alpha) = \int_0^{\infty} \frac{t^j}{1+exp(\alpha+t)}dt, \qquad j = \frac{1}{2}, \tag{4}$$

$$\tilde{F}_j(\alpha,\beta) = \int_0^{\infty} \frac{F^2F_{\frac{1}{2}}^2}{F^2F_{\frac{1}{2}}^2 + \frac{4}{9}\beta^2t^3} \times \frac{t^j exp(\alpha+t)}{[1+exp(\alpha+t)]^2}dt, \quad j = 3, 4, 5, \frac{9}{2}, \frac{11}{2}. \tag{5}$$

为方便, 这里记 $\alpha = -\mu/kT$, $\beta = \omega_e\tau$, $F = 1 + exp(\alpha)$.

在本文中, 我们采用截断的方法计算 Fermi-Dirac 积分和修正 Femri-Dirac 积分, 进而计算系数 $A_{\perp}^{\alpha}$ 和 $A_{\perp}^{\beta}$. 同时, 我们也采用积分函数自变量变换的方法, 将无穷区间的积分转化为有限区间的积分结合 Romberg 算法进行数值积分.

§2. 数值方法

传统的 Fermi-Dirac 积分采用的是级数逼近的思想, 如 Taylor 级数、 Padé 级数、有理 Chebyshev 级数等逼近的方法 [4,6]. 他们对 α 要采用分段处理, 一般比较烦琐, 要达到高精度逼近时, 须展开到很高阶的项. 另外一种方法就是采用 Gauss-Laguerre 求积公式, 该方法是针对形如 $\int_0^{\infty} e^{-x}f(x)dx$ 的积分. 我们数值实验时发现它对 Fermi-Dirac 积分不是一种有效的方法 (同时 Gauss-Laguerre 的误差估计中, 需要求被积函数的高阶导数, 并进行估计. 对于 Fermi-Dirac 积分、修正 Fermi-Dirac 积分中的被积函数不容易求出求高阶导数). 我们提出了一种实用的方法, 它的优点是简单, 逼近精度高.

注意到 Fermi-Dirac 积分以及修正后的 Fermi-Dirac 积分中的被积函数在定义域 $(0, \infty)$ 上属于速降函数空间, 它们有很好的性质: 无穷次光滑、速降 (乘以任一给定的多项式, 当自变量趋于无穷时, 被积函数和多项式的乘积趋于 0), 因此我们的想法是采用合理的截断, 将 Fermi-Dirac 积分和修正的 Fermi-Dirac 积分分成积分主项和积分余项, 使积分余项充

分小，然后利用高效的数值积分公式求积分主项. 在介绍此方法之前，先给出一种比较自然的方法.

首先，分析 Fermi-Dirac 积分中的被积函数的一些简单性质. 令

$$f(x)=\frac{x^{\frac{1}{2}}}{e^{\alpha+x}+1},$$

则

$$f'(x)=\frac{e^{\alpha+x}\Big(-x^{\frac{1}{2}}+\frac{1}{2}x^{-\frac{1}{2}}\Big)+\frac{1}{2}x^{-\frac{1}{2}}}{(e^{\alpha+x}+1)^2},\quad x\in(0,+\infty). \tag{6}$$

(i) 当 $\alpha>0$ 时， $f(x)$ 在区间 $(0,1)$ 之内存在最大值，且当 α 变大时，最大值点向 $x=1$ 点靠近. 同时 $f(x)$ 单调下降，当 $x\in[1,+\infty)$.

(ii) 当 $\alpha<0$ 时， $f(x)$ 在区间 $(0,-\alpha+1)$ 之内存在最大值，且当 α 变大时，最大值点向 $x=-\alpha+1$ 点靠近. 同时 $f(x)$ 单调下降，当 $x\in[-\alpha+1,+\infty)$ 时.

可将 Fermi-Dirac 积分分成两部分:

$$\begin{aligned}F_{\frac{1}{2}}(\alpha)&=\int_0^{\eta}\frac{x^{\frac{1}{2}}}{1+e^{\alpha+x}}dx+\int_{\eta}^{\infty}\frac{x^{\frac{1}{2}}}{1+e^{\alpha+x}}dx,\\&:=F^1_{\frac{1}{2}}(\alpha)+F^2_{\frac{1}{2}}(\alpha)\end{aligned} \tag{7}$$

其中当 $\alpha>0$ 时，取 $\eta=2.0$, 当 $\alpha<0$ 时，取 $\eta=-\alpha+2.0$. 这样的取法是将被积函数的最大值附近的区域归于一个积分区间内.

对于第二个积分 $F^2_{\frac{1}{2}}(\alpha)$, 采用积分变换的方法将无限区间变为有限区间，即

$$F_{\frac{1}{2}}(\alpha)=\int_{\eta}^{\infty}\frac{x^{\frac{1}{2}}}{1+e^{\alpha+x}}dx=\int_0^{\frac{1}{\eta}}\frac{\left(\frac{1}{t}\right)^{\frac{5}{2}}}{1+e^{\alpha+\frac{1}{t}}}dt. \tag{8}$$

对于 (8) 式，考虑到 $t=0$ 时，被积函数的奇性，数值积分采用中点求积公式

$$\int_a^b f(x)dx=h(f_{1/2}+f_{3/2}+\cdots+f_{(2N-1)/2}), \tag{9}$$

并且结合 Richarson 外推技巧, 其中在 (9) 式中， $h=(b-a)/N$, $f_{j/2}=f(a+j/2\times h)$.

接下来, 介绍截断的方法, 并利用针对被积函数是光滑函数的高效数值积分, 求解 Fermi-Dirac 积分. 将 Fermi-Dirac 积分分成积分主项和积分余项,

$$\begin{aligned}F_{\frac{1}{2}}(\alpha)&=\int_0^{\xi}\frac{x^{\frac{1}{2}}}{1+e^{\alpha+x}}dx+\int_{\xi}^{\infty}\frac{x^{\frac{1}{2}}}{1+e^{\alpha+x}}dx,\\&:=F^C_{\frac{1}{2}}(\alpha)+F^S_{\frac{1}{2}}(\alpha),\end{aligned} \tag{10}$$

选择合适的 ξ 使积分余项 $F^S_{\frac{1}{2}}(\alpha)$ 充分小 因

$$F^S_{\frac{1}{2}}(\alpha)=\int_{\xi}^{\infty}\frac{x^{\frac{1}{2}}}{1+e^{\alpha+x}}dx\le\int_{\xi}^{\infty}\frac{x}{1+e^{\alpha+x}}dx,\quad 当\quad \xi\ge1 时. \tag{11}$$

无论 α 取何值时，

$$
\begin{aligned}
\int_{\xi}^{\infty} \frac{x}{1+e^{\alpha+x}}dx &\le \int_{\xi}^{\infty} \frac{x}{e^{\alpha+x}}dx = \int_{\xi}^{\infty} xe^{-\alpha-x}dx, \\
&= e^{-\alpha}\int_{\xi}^{\infty} xe^{-x}dx = -e^{-\alpha}\left(xe^{-x}\Big|_{\xi}^{\infty} - \int_{\xi}^{\infty} e^{-x}dx\right), \\
&= e^{-(\alpha+\xi)}(\xi+1).
\end{aligned} \tag{12}
$$

假定要求积分余项控制在 $\varepsilon = e^{-\theta}$ 之内， θ 为一给定正数，我们可以根据

$$
e^{-(\alpha+\xi)}(\xi+1) = e^{-\theta} \tag{13}
$$

解出相应的 ξ 值. 由于方程 (13) 是一个超越方程，只能数值求解找出相应的 ξ 值. 我们可以给出一个较粗的估计，因

$$
\begin{aligned}
e^{-(\alpha+\xi)}(\xi+1) &\le 2\xi e^{-(\alpha+\xi)}, && \text{当} \quad \xi \ge 1 \quad \text{时}, \\
&\le e^{-\alpha-\xi}e^{\frac{\xi}{3}} = e^{-\alpha-\frac{2}{3}\xi}, && \text{当} \quad \xi \ge 9 \quad \text{时}, \\
&\le e^{-\theta}
\end{aligned}
$$

易见

$$
\xi \ge max(-\frac{3}{2}\alpha + \frac{3}{2}\theta, 9).
$$

注意到，当 α 为较大的正数时，虽然积分值很小，我们仍然取较大的 ξ 作为截断限，这是因为我们需要积分余项的值与原积分值相比是更高阶的小量. 在实际计算中，采用了如下形式的截断：

$$
\begin{aligned}
&\text{当 } \alpha \ge 0 \text{ 时，取 } \xi = 15.0, \\
&\text{当 } \alpha < 0 \text{ 时，取 } \xi = |\alpha| + 18.0.
\end{aligned}
$$

此时，我们用积分主项 $F^C_{\frac{1}{2}}(\alpha)$ 逼近 $F_{\frac{1}{2}}(\alpha)$ 的误差 $(error)$ 为

$$
\begin{aligned}
&\text{当 } \alpha \ge 0 \text{ 时，} \quad error \le 16.0e^{-(15.0+\alpha)}, \\
&\text{当 } \alpha < 0 \text{ 时，} \quad error \le (19.0 + |\alpha|)e^{-18.0}.
\end{aligned}
$$

在实际的物理过程中，α 的取值是有限的，一般地 $-20.0 < \alpha < 20.0$. 可以看出，随着 α 的变化，我们适时地调整了积分区间，使积分主项逼近原积分的误差充分小. 对于积分主项 $F^C_{\frac{1}{2}}(\alpha)$，采用 Romberg 求积方法，它是在复化梯形求积公式的基础上，应用 Richarolson 外推构造的一种算法，它非常适用于光滑函数在有限区间上的积分 [3,2]. 当然，也可以使用自适应 Simpson 求积方法，它是对 Romberg 求积方法的改进. 因为 Romberg 求积方法在达不到精度要求时，每次把整个的积分区间不加鉴别地都一分为二，这就可能增加函数值的计算次数. 自适应 Simpson 求积方法就是随时对函数的变化情况加以鉴别；只对需要进一步细分的子区间进行细分. 这样就可以减少计算函数值的次数，提高算法的效率. 它对于不光滑的被积函数或变化不规则的被积函数是十分有效的，但它会增加较多的判断语句. 对于 Fermi-Dirac 积分中的被积函数，它是光滑函数且变化平稳，故使用 Romberg 求积公式即可.

下面，讨论修正的 Fermi-Dirac 积分. 注意到，修正 Fermi-Dirac 积分的被积函数在定义域 $(0,\infty)$ 上也是属于速降函数空间的，且有如下的关系式成立：

$$\frac{F^2F_{\frac{1}{2}}^2}{F^2F_{\frac{1}{2}}^2+\frac{4}{9}\beta^2x^3}\times\frac{x^je^{\alpha+x}}{[1+e^{\alpha+x}]^2}\le\frac{x^j}{1+e^{\alpha+x}},\quad x\in[0,+\infty),\tag{14}$$

因此可以采用类似求 Fermi-Dirac 积分的方法求解修正 Fermi-Dirac 积分，这里不再累述.

§3. 数值实验

在这一部分，给出系数 $A_\perp^\alpha$ 和 $A_\perp^\beta$ 的文献 [5] 的结果和我们计算的数值结果.

表 1 文献 [5] 计算的 $A_\perp^\alpha(\mu/kT,\omega_e\tau)$

b\ a	0.001	0.101	0.201	0.301	0.401	0.501	0.601	0.701	0.801	0.901	0.990
0.001	3.39	3.04	2.69	2.42	2.20	2.01	1.84	1.67	1.50	1.31	1.07
0.101	3.24	2.93	2.60	2.35	2.15	1.96	1.80	1.64	1.47	1.29	1.06
0.201	3.07	2.80	2.50	2.27	2.08	1.91	1.75	1.60	1.44	1.27	1.06
0.301	2.87	2.64	2.39	2.17	2.00	1.84	1.69	1.55	1.41	1.25	1.05
0.401	2.63	2.46	2.24	2.06	1.90	1.76	1.62	1.50	1.37	1.22	1.05
0.501	2.37	2.24	2.07	1.91	1.78	1.66	1.54	1.43	1.31	1.19	1.04
0.601	2.06	1.98	1.86	1.74	1.63	1.53	1.43	1.34	1.25	1.15	1.03
0.701	1.71	1.67	1.60	1.52	1.45	1.37	1.30	1.23	1.17	1.09	1.02
0.801	1.36	1.35	1.32	1.28	1.24	1.20	1.15	1.11	1.07	1.04	1.01
0.901	1.09	1.08	1.08	1.07	1.06	1.05	1.03	1.02	1.01	1.00	1.00
0.960	1.01	1.01	1.01	1.01	1.01	1.01	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00

在文献 [5] 中，为了使插值基点的函数值变化平缓，以便插值. 他们将 α,β 自变量，改为 $\omega_e\tau/(1+\omega_e\tau),\xi/(1+\xi)$，这里 $\xi=ln[1+exp(\mu/kT)]$. 在表 1 中的 a,b 分别为 $a=\xi/(1+\xi)$, $b=\omega_e\tau/(1+\omega_e\tau)$, 以下雷同.

表 2 本文计算的 $A_\perp^\alpha(\mu/kT,\omega_e\tau)$

b\a	0.001	0.101	0.201	0.301	0.401	0.501	0.601	0.701	0.801	0.901	0.990
0.001	3.39309	3.03720	2.68960	2.42221	2.20242	2.01104	1.83605	1.66830	1.49821	1.30941	1.06765
0.101	3.24129	2.92603	2.60441	2.35317	2.14511	1.96316	1.79634	1.63616	1.47365	1.29342	1.06372
0.201	3.06737	2.79620	2.50435	2.27184	2.07746	1.90654	1.74931	1.59805	1.44450	1.27443	1.05906
0.301	2.86690	2.64311	2.38548	2.17487	1.99661	1.83874	1.69289	1.55225	1.40942	1.25157	1.05348
0.401	2.63469	2.46087	2.24262	2.05780	1.89869	1.75641	1.62423	1.49641	1.36658	1.22364	1.04671
0.501	2.36596	2.24260	2.06924	1.91485	1.77865	1.65518	1.53958	1.42742	1.31359	1.18912	1.03846
0.601	2.05602	1.98094	1.85754	1.73896	1.63010	1.52942	1.43411	1.34127	1.24736	1.14608	1.02836
0.701	1.70975	1.67457	1.60277	1.52449	1.44795	1.37457	1.30389	1.23482	1.16571	1.09359	1.01655
0.801	1.35671	1.34636	1.31840	1.28082	1.23932	1.19683	1.15476	1.11382	1.07446	1.03710	1.00511
0.901	1.08605	1.08467	1.07989	1.07136	1.05972	1.04629	1.03258	1.02001	1.00981	1.00291	1.00011
0.960	1.01279	1.01262	1.01200	1.01076	1.00885	1.00648	1.00410	1.00213	1.00083	1.00017	1.00000

接下来我们计算 $A_{\perp}^{\beta}$, 表 3 是文献 [5] 的结果,

表 3　文献 [5] 中的表 II

b\a	0.001	0.101	0.201	0.301	0.401	0.501	0.601	0.701	0.801	0.901	0.990
0.001	13.57	6.35	3.38	2.15	1.57	1.31	1.23	1.30	1.51	1.93	2.87
0.101	12.92	6.32	3.41	2.19	1.60	1.34	1.26	1.33	1.54	1.97	2.91
0.201	12.17	6.28	3.45	2.23	1.64	1.37	1.30	1.37	1.59	2.02	2.96
0.301	11.31	6.22	3.50	2.29	1.70	1.42	1.35	1.42	1.65	2.09	3.03
0.401	10.31	6.12	3.56	2.36	1.76	1.49	1.41	1.49	1.73	2.18	3.11
0.501	9.15	5.96	3.63	2.46	1.86	1.58	1.50	1.59	1.84	2.31	3.23
0.601	7.82	5.68	3.69	2.59	1.99	1.71	1.64	1.74	2.01	2.49	3.38
0.701	6.33	5.20	3.73	2.76	2.20	1.92	1.86	1.98	2.27	2.77	3.57
0.801	4.81	4.43	3.66	2.98	2.52	2.28	2.25	2.40	2.70	3.16	3.74
0.901	3.65	3.60	3.42	3.19	2.98	2.87	2.89	3.02	3.22	3.43	3.55
0.960	3.34	3.34	3.31	3.27	3.23	3.21	3.22	3.26	3.30	3.32	3.33

在文献 [5] 的表 II 中，系数 $A_{\perp}^{\beta}$ 乘以 $[1+(\omega_e\tau)^2]$ 是为了得到的数值结果变化平稳.

表 4　本文计算的结果

b\a	0.001	0.101	0.201	0.301	0.401	0.501	0.601	0.701	0.801	0.901	0.990
0.001	13.46406	6.34738	3.37766	2.15018	1.57030	1.30534	1.22971	1.29639	1.50551	1.92692	2.86557
0.101	12.81559	6.32073	3.41308	2.18696	1.60301	1.33545	1.25964	1.32854	1.54210	1.96960	2.90825
0.201	12.07243	6.28017	3.45462	2.23211	1.64375	1.37324	1.29734	1.36907	1.58817	2.02307	2.96086
0.301	11.21545	6.21715	3.50344	2.28864	1.69580	1.42197	1.34619	1.42166	1.64784	2.09183	3.02709
0.401	10.22237	6.11643	3.56040	2.36111	1.76438	1.48701	1.41179	1.49241	1.72790	2.18315	3.11241
0.501	9.14664	5.95965	3.62748	2.45777	1.85911	1.57832	1.50457	1.59263	1.84075	2.30995	3.22571
0.601	7.81682	5.67941	3.69273	2.58634	1.99393	1.71215	1.64239	1.74187	2.00743	2.49243	3.37620
0.701	6.32991	5.19635	3.73073	2.75992	2.19744	1.92356	1.86420	1.98223	2.27100	2.76675	3.56923
0.801	4.81404	4.43019	3.66261	2.97745	2.51545	2.28137	2.24987	2.39583	2.70161	3.16070	3.73892
0.901	3.65400	3.59742	3.42439	3.18678	2.97613	2.86593	2.88551	3.02070	3.22450	3.42966	3.55028
0.960	3.34331	3.33630	3.31193	3.27115	3.22853	3.20746	3.22102	3.25929	3.29939	3.32459	3.33181

从计算结果可以看出，我们所得到的数值结果和文献 [5] 的结果一致. 需要指出我们在程序中使用了统一误差控制，计算热传导系数时，当 a, b 很小，我们得到的数值结果与文献有较小误差. 当提高误差控制时可得到与文献 [5] 一致的结果，不再累述. 对于其它输运系数 (如：Hall 系数、Nernst 系数) 的数值计算结果是类似的.

§4. 结　论

我们针对文献 [5] 中，计算稠密等离子体输运系数时，所需的 Fermi-Dirac 积分和修正 Fermi-Dirac 积分提出了一种简单实用的方法，得到了与文献 [5] 一致的结果. 我们已经将本文提出的方法和计算结果应用到单丝等离子体形成的数值模拟程序中.

致谢：我们非常感谢杨震华研究员在物理方面的热情指导和有益帮助.

参 考 文 献

[1] 李世昌，高温辐射物理与量子辐射理论，科学出版社， 1992.

[2] 蒋长锦，科学计算和 C 程序集，中国科学技术大学出版社， 1998.

[3] 徐萃薇，计算方法引论，高等教育出版社， 1999.

[4] W. J. Cody & HC. Thacher, *Rational Chebyshev Approximations for Fermi-Dirac Integrals of Oders* $-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ *and* $\frac{3}{2}$, Mathematics of Computation, 21:97 (1967) 30-40.

[5] Y. T. Lee & R. M. More, *An electron conductivity model for dense plasmas*, Phys. Fluids 27:5 (1984) 1273-1286.

[6] M. Goano, *Series expansion of the Fermi-Dirac integral* $F_j(x)$ *over the entire domain of real* j *and* x, Solid-State Electronics, 36:2 (1993) 217-221.