

Научная статья

УДК 372.853,536.11

DOI 10.25205/2541-9447-2025-20-1-75-93

**Численное решение уравнений, содержащих неизвестную
под знаком интеграла.
Применение к решению физических задач**

Петр Васильевич Пипич

Высший колледж информатики Новосибирского государственного университета
Новосибирск, Россия

pipich.petr@mail.ru

Аннотация

Рассматривается решение уравнений, содержащих неизвестную под знаком интеграла с помощью систем компьютерной математики. Предложено рациональное решение уравнения в задаче определения примесей с помощью лазерного зондирования атмосферы. Показано, как численно определять энергетический спектр квантовых систем в квазиклассическом приближении с использованием условия квантования Бора – Зоммерфельда. Приведены решения уравнений, содержащих функции Бесселя в интегральном представлении в задачах: о дифракции света на непрозрачном диске, о диффузии магнитного поля в полом цилиндре, об определении критического размера ядерного реактора. Найден спектр ридберговских состояний атома водорода в электрическом поле. Предложен способ определения термодинамических свойств релятивистского ферми-газа.

Ключевые слова

системы компьютерной математики, уравнения, содержащие неизвестную под знаком интеграла, определение потенциала рассеивающего поля, лазерное зондирование атмосферы, квазиклассическое приближение, диффузия магнитного поля, критический размер ядерного реактора, релятивистский ферми-газ

Для цитирования

Пипич П. В. Численное решение уравнений, содержащих неизвестную под знаком интеграла. Применение к решению физических задач // Сибирский физический журнал. 2025. Т. 20, № 1. С. 75–93. DOI 10.25205/2541-9447-2025-20-1-75-93

**Numerical Solution of Equations Containing an Unknown
under the Integral Sign.
Application to the Solution of Physical Problems**

Petr V. Pipich

Higher College of Informatics of Novosibirsk State University
Novosibirsk, Russian Federation

pipich.petr@mail.ru

Abstract

The solution of equations containing an unknown under the integral sign with the help of computer mathematics systems is considered. A rational solution of the equation in the problem of determining impurities by means of laser sensing of the atmosphere is proposed. It is shown how to numerically determine the energy spectrum of quantum systems in the

© Пипич П. В., 2025

quasi-classical approximation using the Bohr-Sommerfeld quantization condition. Solutions of equations containing Bessel functions in integral representation in the following problems are given: about diffraction of light on opaque disk, about diffusion of magnetic field in hollow cylinder, about determination of critical size of nuclear reactor. The spectrum of Rydberg states of hydrogen atom in electric field is found. A method for determining the thermodynamic properties of relativistic fermi-gas is proposed.

Keywords

computer mathematics systems, equations containing unknown under the sign of integral, determination of scattering field potential, laser sensing of atmosphere, quasi-classical approximation, diffusion of magnetic field, critical size of nuclear reactor, relativistic fermi-gas

For citation

Pipich P. V. Numerical solution of equations containing an unknown under the integral sign. Application to the solution of physical problems. *Siberian Journal of Physics*, 2025, vol. 20, no. 1, p. 75–93. (in Russ.) DOI 10.25205/2541-9447-2025-20-1-75-93

Введение

В физике встречается немало случаев, когда необходимо решить уравнение, содержащее неизвестную под знаком интеграла, что может представить самостоятельную проблему.

В системах компьютерной математики есть эффективные функции для численного решения уравнений, которые можно использовать для решения обозначенной задачи. Для определенности в дальнейшем будет применяться система компьютерной математики MathCAD, которая обладает низким порогом вхождения и понятным интерфейсом. В MathCAD математические операции дифференцирование, интегрирование и т. д. записываются в естественном виде, к которому пользователь привык при изучении математики. Кроме того, поскольку MathCAD является самым «младшим» среди Maple, Mathematica, MATLAB, то всё, что делает MathCAD, «умеют», в основном, и его более мощные конкуренты. Поэтому полученные результаты можно воспроизвести на более продвинутых платформах.

Основным оператором, который будет использоваться в дальнейшем, является оператор для численного решения уравнений **root**. Он работает по следующей схеме: предположим, необходимо решить уравнение $f(x) = 0$ (справа от знака « \Leftarrow » ноль, слева – всё остальное). Записываем под знаком оператора **root** левую часть уравнения, т. е. $f(x)$, через запятую указываем букву, обозначающую неизвестную, в нашем случае это x , затем через запятую, левую границу интервала, на котором находится корень, а затем через запятую правую границу. Скобка закрывается, и после знака $=$ появляется значение корня. Таким образом, процедура решения уравнения будет сводиться к написанию:

$$\text{root}(f(x), x, a, b) =, \quad \text{или} \quad X := \text{root}(f(x), x, a, b) \quad X =$$

При решении системы уравнений используется блок **Given – Find**. Предположим, необходимо решить систему уравнений: $f(a, b) = 0, g(a, b) = 0$ относительно неизвестных a, b . Процедура решения сводится к следующему. Сначала записываются с помощью оператора присваивания $:=$ предполагаемые решения, например $a := 3.2, b := 5.4$. Затем пишется **Given**, после записываются уравнения в естественном виде $f(a, b) = 0, g(a, b) = 0$, но с использованием специального жирного знака $=$, а после пишется **Find(a, b) =** с нормальным знаком $=$. На рис. 1 представлены примеры решения уравнений, содержащих неизвестные под знаком интеграла.

Решить уравнение относительно неизвестной b

$$\int_0^3 e^{b \cdot x} \cdot \sqrt{2 + \cos(x)} \, dx = 10$$

Решение с помощью функции **root**

$$\text{root}\left(\int_0^3 e^{b \cdot x} \cdot \sqrt{2 + \cos(x)} \, dx - 10, b, 0, 1\right) = 0.55548 \quad \text{Проверка} \quad \int_0^3 e^{0.55548 \cdot x} \cdot \sqrt{2 + \cos(x)} \, dx = 9.99996$$

Решить систему уравнений относительно a, b

$$\int_0^\pi e^{-a \cdot x} \cdot \sin(2\sqrt{x}) \, dx + \int_0^2 \frac{\sin(\sqrt{x})}{b + x} \, dx = 3$$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{1 - a^2 \cdot \sin(y)^2} \, dy - \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\sqrt{1 - b^2 \cdot \sin(y)^2}} \, dy = -0.5$$

Решение с помощью блока **Given - Find****a := -0.6** **b := 0.9** - предполагаемое решение

$$\text{Given} \quad \int_0^\pi e^{-a \cdot x} \cdot \sin(2\sqrt{x}) \, dx + \int_0^2 \frac{\sin(\sqrt{x})}{b + x} \, dx = 3 \quad \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{1 - a^2 \cdot \sin(y)^2} \, dy - \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\sqrt{1 - b^2 \cdot \sin(y)^2}} \, dy = -0.5$$

$$\text{Find}(a, b) = \begin{pmatrix} -0.54687 \\ 0.77232 \end{pmatrix}$$

Проверка

$$\int_0^\pi e^{-(-0.54687) \cdot x} \cdot \sin(2\sqrt{x}) \, dx + \int_0^2 \frac{\sin(\sqrt{x})}{0.77232 + x} \, dx = 3$$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{1 - (-0.54687)^2 \cdot \sin(y)^2} \, dy - \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\sqrt{1 - 0.77232^2 \cdot \sin(y)^2}} \, dy = -0.5$$

Рис. 1. Примеры решений уравнений с помощью функции **root** и блока **Given – Find**Fig. 1. Examples of equation solutions using the **root** function and **Given – Find** block**Восстановление потенциальной энергии $U(r)$ по зависимости угла рассеяния χ от прицельного расстояния ρ**

В ряде случаев, исследуя рассеяние частиц, можно установить вид потенциальной энергии $U(r)$ налетающей частицы в поле рассеивающего центра. Это становится возможным, если известна зависимость угла отклонения χ от прицельного расстояния ρ , т. е. известна формула для $\chi(\rho)$.

Построить графики зависимости потенциальной энергии $U1(r)$ и $U2(r)$ от расстояния по известной зависимости угла отклонения частицы от прицельного расстояния $\chi1(\rho)$ и $\chi2(\rho)$.

$E := 30$ - энергия налетающей частицы

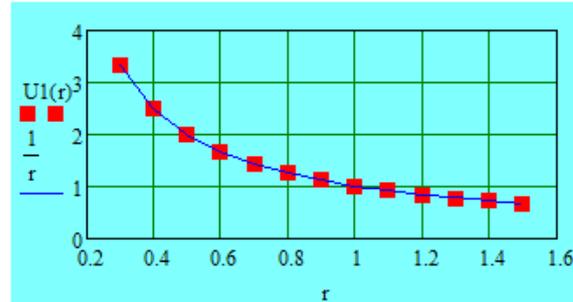
$r := 0.3, 0.4.. 1.5$ - совокупность расстояний между частицей и рассеивающим центром

$$\chi1(\rho) := 2 \cdot \text{atan}\left(\frac{1}{2 \cdot \rho \cdot E}\right) \quad w1(r) := \text{root}\left[\pi \cdot \ln(w) + \int_{r \cdot w}^{100} \frac{\chi1(\rho)}{\sqrt{\rho^2 - (r \cdot w)^2}} d\rho, w, 0.03, 4.5\right] \quad U1(r) := E \cdot (1 - w1(r)^2)$$

$U1(r)$ - потенциальная энергия рассеивающего центра выраженная через вспомогательную функцию $w1(r)$, являющуюся решением соответствующего интегрального уравнения.

$U1(r) =$

| |
|-------|
| 3.327 |
| 2.494 |
| 1.993 |
| 1.661 |
| 1.422 |
| 1.244 |
| 1.105 |
| 0.994 |



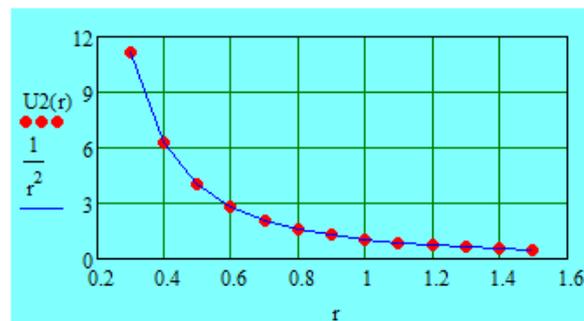
Значения потенциальной энергии $U1(r)$ вычисленные по решению интегрального уравнения и модельная потенциальная энергия r^{-1}

$$\chi2(\rho) := \pi \cdot \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{E \cdot \rho^2}}}\right) \quad w2(r) := \text{root}\left[\pi \cdot \ln(w) + \int_{r \cdot w}^{100} \frac{\chi2(\rho)}{\sqrt{\rho^2 - (r \cdot w)^2}} d\rho, w, 0.03, 4.5\right] \quad U2(r) := E \cdot (1 - w2(r)^2)$$

$U2(r)$ - потенциальная энергия рассеивающего центра выраженная через вспомогательную функцию $w2(r)$, являющуюся решением соответствующего интегрального уравнения

$U2(r) =$

| |
|--------|
| 11.111 |
| 6.25 |
| 4 |
| 2.778 |
| 2.041 |
| 1.563 |
| 1.235 |
| 1 |
| 0.826 |



Значения потенциальной энергии $U2(r)$ вычисленные по решению интегрального уравнения и модельная потенциальная энергия r^{-2}

Рис. 2. Верификация численного решения задачи об определении потенциальной энергии
Fig. 2. Verification of the numerical solution of the problem of potential energy determination

Формальное решение этой задачи приведено в [1] и сводится к решению интегрального уравнения для вспомогательной функции $w(r)$, с помощью которой находится $U(r)$. Решение интегрального уравнения в неявном виде определяет $w(r)$, а следовательно, и $U(r)$:

$$w = \exp\left(-\frac{1}{\pi} \cdot \int_{r \cdot w}^{\infty} \frac{\chi(\rho) d\rho}{\sqrt{\rho^2 - r^2 \cdot w^2}}\right), \quad \text{или} \quad \pi \cdot \ln(w) + \int_{r \cdot w}^{\infty} \frac{\chi(\rho) d\rho}{\sqrt{\rho^2 - r^2 \cdot w^2}} = 0, \quad w = \sqrt{1 - \frac{U}{E}}$$

Уравнение для $w(r)$ будет предметом тестирования излагаемого метода решений уравнений. Рассмотрим два случая, если зависимость поля от r имеет вид $1/r$ и $1/r^2$:

$$\chi_1(\rho) = 2 \cdot \operatorname{arctg}\left(\frac{\alpha}{2 \cdot \rho \cdot E}\right), \quad \chi_2(\rho) = \pi \left[1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha}{\rho^2 \cdot E}}} \right], \quad \alpha = 1,$$

где энергия частицы $E=30$ Дж. Результаты численного решения будем обозначать как $U1(r)$ и $U2(r)$. Построим графики зависимости $U1(r)$ и $1/r$, $U2(r)$ и $1/r^2$ для $0,3 < r < 1,5$ м и сравним численный расчет с аналитической зависимостью. Результаты представлены на рис. 2.

Лазерное зондирование атмосферы

Для изучения химического и аэрозольного состава атмосферы применяется метод сравнительного поглощения, основанный на использовании лазерных локаторов – лидаров [2].

Атмосфера зондируется импульсами на близких частотах ν_1 и ν_2 . Частота ν_1 почти совпадает с центром линии поглощения ν_a исследуемого вещества, а ν_2 лежит вне ее. Отношение величины принимаемых сигналов на частотах ν_1 , ν_2 будет определяться поглощением лазерного излучения в спектральной линии исследуемого вещества на частоте ν_1 и дается выражением:

$$T = \frac{P_1}{P_2} = \frac{\int_0^\infty K_\lambda^1(\nu) \exp\{-\mu_a K_a(\nu)m\} d\nu}{\int_0^\infty K_\lambda^2(\nu) d\nu},$$

где μ_a – процентное содержание рассматриваемой компоненты вещества, m – масса поглощающего вещества на пути лазерного импульса.

Реальный контур линии поглощения близок к лоренцевскому:

$$K_a(\nu) = \frac{J_0}{\pi} \frac{\gamma_a}{\gamma_a^2 + (\nu - \nu_a)^2},$$

где J_0 – интенсивность линии; γ_a – полуширина.

Частотная зависимость линии лазерного излучения описывается подобным контуром:

$$K_\lambda^i(\nu) = \frac{P_0}{\pi} \frac{\gamma}{\gamma^2 + (\nu - \nu_i)^2},$$

где P_0 – мощность излученного импульса, $i = 1, 2$.

После некоторых преобразований формула для T будет иметь вид:

$$T = T(z, a, \delta) = \frac{ae^{-z}}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\exp(-z \cos(t)) dt}{1 + a^2(1 + \delta^2) + [1 - a^2(1 - \delta^2)] \cos(t) + 2a^2 \delta \sin(t)},$$

где

$$z = \frac{J_0 m \mu_a}{2\pi \gamma_a}, \quad a = \frac{\gamma_a}{\gamma}, \quad \delta = \frac{\nu_a - \nu_1}{\gamma}.$$

Если из экспериментальных данных известно $T = P_1/P_2$, то, решая уравнение $T = T(z, a, b)$, содержащее неизвестную z под знаком интеграла, можно определить через z концентрацию μ_a примеси.

В качестве примера решения уравнения, содержащего неизвестную под знаком интеграла, вычислим значения z при заданных значениях T . Результаты решения приведены на рис. 3.

Найти корни уравнений $Tz(1,0,z)=T$, $Tz(1,1,z)=T$, в неявном виде определяющих зависимость величины z , пропорциональной концентрации поглощающей примеси, от $T=P_1/P_2$ - отношения величин принимаемых сигналов на частоте, близкой к центру линии поглощения и на частоте, лежащей за пределами линии поглощения. T пробегает значения от 0.25 до 0.95

$$Tz(a, \delta, z) := \frac{a \cdot e^{-z}}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{-z \cdot \cos(t)}}{1 + a^2 \cdot (1 + \delta^2) + [1 - a^2 \cdot (1 - \delta^2)] \cdot \cos(t) + 2a^2 \cdot \delta \cdot \sin(t)} dt$$

Формула в неявном виде определяет зависимость z - величины пропорциональной концентрации примеси от T - соотношения сигналов P_1/P_2

$$z1(T) := \text{root}(Tz(1,0,z) - T, z, 0.05, 5)$$

- корни уравнения при совпадении частоты зондирующего сигнала с центром линии поглощения примеси.

$$z2(T) := \text{root}(Tz(1,1,z) - T, z, 0.05, 5)$$

- корни уравнения, когда частота зондирующего сигнала отстоит от центра линии поглощения на полуширину линии поглощения

$$T := 0.25, 0.3 \dots 0.95$$

- соотношения сигналов P_1/P_2 в центре линии поглощения и за ее пределами.

$z1(T) =$

| |
|-------|
| 2.855 |
| 2.095 |
| 1.625 |
| 1.302 |
| 1.063 |
| 0.877 |
| 0.725 |
| 0.598 |
| 0.49 |
| 0.395 |
| 0.312 |
| 0.237 |
| 0.17 |
| 0.108 |
| 0.052 |

$z2(T) =$

| |
|-------|
| 3.727 |
| 2.782 |
| 2.165 |
| 1.729 |
| 1.403 |
| 1.15 |
| 0.945 |
| 0.775 |
| 0.631 |
| 0.506 |
| 0.397 |
| 0.301 |
| 0.214 |
| 0.136 |
| 0.065 |

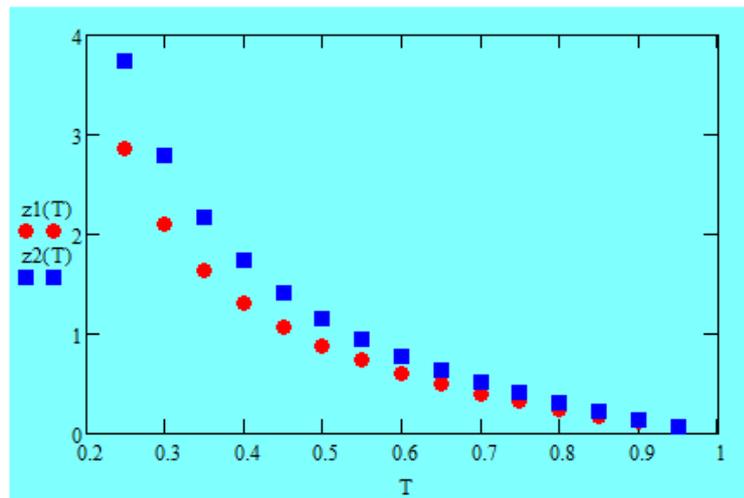


Рис. 3. Решение уравнения, возникающего в связи с задачей о лазерном зондировании атмосферы
Fig. 3. Solution of the equation arising in connection with the problem of laser sensing of the atmosphere

Решение уравнения, возникающего в задаче о дифракции света

При определении радиуса первого темного кольца в задаче о дифракции света на непрозрачном диске [3] необходимо решить уравнение $J_1(z) - 0,5J_1(0,5z) = 0$, где $J_1(z)$ – функция Бесселя первого рода 1-го порядка. Если использовать интегральное представление для $J_1(z)$, то решение этого уравнения может служить примером рассматриваемого метода решения уравнений, содержащих неизвестную под знаком интеграла. На рис. 4 показано решение рассматриваемого уравнения при различных значениях параметра α в виде таблицы и конкретное решение для $\alpha = 0,5$, чтобы можно было сравнить с решением в [3].

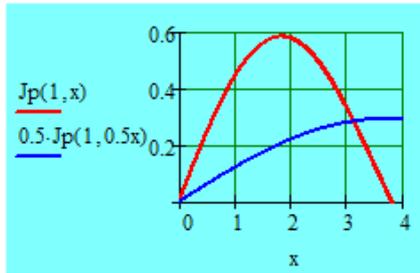
Решить уравнение $J_1(z) - \alpha J_1(\alpha z) = 0$ возникающее в задаче о дифракции на непрозрачном диске. Составить таблицу решений для α , пробегая значения от 0 до 1. Выделить решение для $\alpha=0,5$.

$$J_p(n, x) := \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(x \cdot \sin(\phi) - n \cdot \phi) d\phi$$

-функция пользователя для интегрального представления функции Бесселя первого рода целочисленного порядка. Обозначение $J_p(n, x)$ использовано для того чтобы отличать от встроенной в Mathcad функции.

$Z(\alpha) := \text{root}(J_p(1, z) - \alpha \cdot J_p(1, \alpha \cdot z), z, 1, 5)$ -формула для корней уравнения при различных α $\alpha := 0, 0.1.. 1$

$Z(0.5) = 3.144$ - решение уравнения для $\alpha=0.5$



-графическое представление первого и второго слагаемых левой части уравнения. При необходимости можно определить координату x точки пересечения графиков и сравнить графическое и численное решения.

| $Z(\alpha) =$ | α |
|---------------|----------|
| 0 | 0 |
| 3.832 | 0.1 |
| 3.786 | 0.2 |
| 3.665 | 0.3 |
| 3.501 | 0.4 |
| 3.323 | 0.5 |
| 3.144 | 0.6 |
| 2.974 | 0.7 |
| 2.814 | 0.8 |
| 2.667 | 0.9 |
| 2.53 | 1 |

Рис. 4. Решение уравнения $J_1(z) - \alpha J_1(\alpha z) = 0$, содержащего неизвестную под знаком интеграла
Fig. 4. Solution of the equation $J_1(z) - \alpha J_1(\alpha z) = 0$ containing the unknown under the sign of the integral

При рассмотрении задач с краевыми условиями решение часто выражается в виде разложения по собственным функциям. Если задача обладает аксиальной симметрией, то собственными функциями являются функции Бесселя. Хотя формальная схема решения понятна, но определение коэффициентов разложения – не всегда простая задача. В сборниках задач по математической физике и в книгах, в которых используются уравнения с частными производными, очень часто решение задач записывается в виде ряда, в котором коэффициенты являются решением некоторого трансцендентного уравнения. Определение корней уравнения считается тривиальной задачей и предоставляется читателю. Следующие примеры с диффузией магнитного поля и ядерным реактором хорошо иллюстрируют подобную ситуацию.

Определение корней функции в задаче о диффузии магнитного поля в полый цилиндр

Магнитное поле в полости полого цилиндрического проводника, внешний радиус которого b , а внутренний a , определяется формулой [4]:

$$H_z(a, t) = H_0 - 4H_0 \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-\kappa_1 \alpha_n^2 t) \frac{J_2(\alpha \alpha_n) \cdot J_0(b \alpha_n)}{(\alpha \alpha_n)^2 [J_0^2(b \alpha_n) - J_2^2(\alpha \alpha_n)]},$$

где κ_1 – коэффициент диффузии; α_n – корни уравнения

$$J_0(b \alpha) Y_2(\alpha) - Y_0(b \alpha) J_2(\alpha) = 0;$$

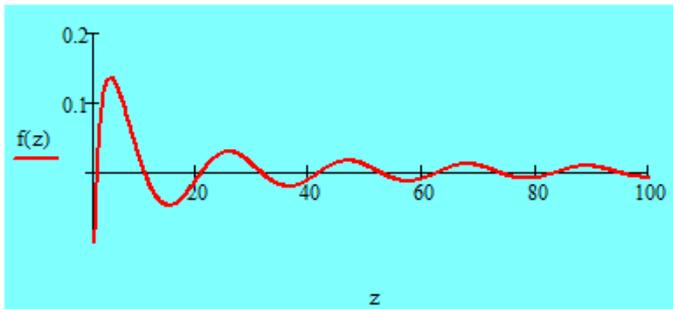
J, Y – функции Бесселя первого и второго рода и порядка $n = 0, 2$.

Определить первые 10 корней $Z(n)$ функции $f(z)$ встречающейся в задаче о диффузии магнитного поля в полый проводник, внешний радиус которого b , а внутренний a . Применить вместо встроенных функций Бесселя 1-го рода 0-го и 2-го порядков $J_n(0,z)$ и $J_n(2,z)$ функции пользователя $Ju(0,x)$, $Ju(2,x)$ использующих представление функции Бесселя в виде определенного интеграла.

$b := 1$ $a := 0.7$ - частные значения внешнего и внутреннего радиуса полого цилиндра, в который диффундирует магнитное поле

$Ju(n,x) := \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(x \sin(\phi) - n \cdot \phi) d\phi$ - функция пользователя представляющая функцию Бесселя 1-го рода в виде определенного интеграла

$f(z) := Ju(0, b \cdot z) \cdot Y_n(2, a \cdot z) - Ju(2, a \cdot z) \cdot Y_0(b \cdot z)$ - функция, корни которой используются в формуле определяющей магнитное поле в полом цилиндре



-график функции $f(z)$ при значениях аргумента $2 < z < 100$

Программа для определения корней функции $f(z)$, таблица значений первых 10 корней $f(z)$ и значение первого корня

```
Z(n) :=
  j ← 0
  x ← 1
  while j < n
    if sign(f(x)) ≠ sign(f(x + 1))
      Z_j ← root(f(z), z, x, x + 1)
      j ← j + 1
    x ← x + 1
  Z
```

| | |
|---|--------|
| | 0 |
| 0 | 2.963 |
| 1 | 11.297 |
| 2 | 21.38 |
| 3 | 31.711 |
| 4 | 42.11 |
| 5 | 52.538 |
| 6 | 62.98 |
| 7 | 73.431 |
| 8 | 83.888 |
| 9 | 94.346 |

$Z(10)_0 = 2.963$

Рис. 5. Вычисление корней уравнения $f(z) = 0$, содержащего неизвестную под знаком интеграла
 Fig. 5. Calculating the roots of the equation $f(z) = 0$ containing the unknown under the sign of the integral

Воспользуемся этим примером для демонстрации заявленной возможности решения уравнения, содержащего неизвестную под знаком интеграла. Для этого введем функции пользователя $Ju(n, x)$ ($n = 0, 2$), представляющие функции Бесселя первого рода определенным интегралом, поскольку автору неизвестно, каким образом разработчики MathCAD определили встроенные функции Бесселя, а в контексте данной статьи необходимо именно интегральное представление хотя бы $J_n(x)$. Рассмотрим функцию, в которой вместо a будем использовать z (a похожа на a):

$$f(z) = J_0(bz)Y_2(az) - Y_0(bz)J_2(az).$$

Алгоритм определения корней функции $f(z)$ заключается в проверке знака $f(z)$ при ближайших целочисленных значениях аргумента z . Аргумент z последовательно пробегает целочисленные значения от 1 до 100. Если знаки $f(z)$ и $f(z+1)$ противоположны, то ищется корень

$f(z)$ на отрезке $(z, z + 1)$ с помощью функции **root**. Эти корни и подставляются в разложение для $H_2(a, t)$.

Конкретная реализация этого метода представлена на рис. 5.

Определение критических размеров гомогенного цилиндрического ядерного реактора с отражателем нейтронов

Иногда преподаватели математической физики в качестве иллюстрации методов решения уравнений эллиптического типа рассматривают уравнение диффузии нейтронов в ядерном реакторе, более конкретно – задачу об определении критических размеров. Далее будет обсуждаться решение критического уравнения для цилиндрического реактора, которое представляет интерес в контексте данной статьи, поскольку неизвестный критический радиус содержится в неявном виде под знаком интеграла в уравнении, содержащем различные функции Бесселя. Прототипом реактора для данной задачи был гомогенный реактор сферической формы, построенный в Лос-Аламосе в 1944 г. Из описания этого реактора [5] взяты необходимые константы для цилиндрической модели, а метод получения формулы для критического радиуса описан в [6].

Рассматриваемый реактор имеет вид цилиндра. Активная зона, радиус которой надо определить, заполнена водным раствором сульфата уранила UO_2SO_4 . Отношение ^{238}U к ^{235}U равно примерно 6 : 1. В радиальном направлении активная зона окружена отражателем из окиси бериллия. Толщина отражателя будет варьироваться с целью выяснения влияния отражателя на критический радиус активной зоны. Торцевые поверхности не закрыты отражателем, поскольку в этом случае уравнение диффузии нейтронов можно решить методом разделения переменных.

Вкратце опишем получение формулы, выражающей условие критичности и являющейся объектом приложения предлагаемого метода решения уравнений с неизвестной под знаком интеграла. Подробности ее вывода в [6].

Уравнения для потока нейтронов $\Phi(r, z)$ в активной зоне и в отражателе имеют вид:

$$\Delta\Phi_1(r, z) + B_1 \cdot \Phi_1(r, z) = 0, \quad \Delta\Phi_2(r, z) + B_2 \cdot \Phi_2(r, z) = 0, \quad \text{где } \Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Ввиду аксиальной симметрии зависимость от угла опущена, B_1 и B_2 – константы.

Уравнения для потока нейтронов $\Phi(r, z)$ решаются в цилиндрической системе координат r, z методом разделения переменных, т. е. предполагается, что:

$$\Phi_1(r, z) = f_1(r) \cdot \cos\left(\frac{\pi \cdot z}{H}\right), \quad \Phi_2(r, z) = f_2(r) \cdot \cos\left(\frac{\pi \cdot z}{H}\right).$$

Соответствующие граничные условия на торцевых поверхностях цилиндра имеют вид:

$$\Phi_1\left(r, \pm \frac{H}{2}\right) = 0, \quad \Phi_2\left(r, \pm \frac{H}{2}\right) = 0,$$

H – высота цилиндра.

Уравнения для радиальной части оператора Лапласа для активной зоны и для отражателя имеют вид:

$$\Delta f_1(r) + \kappa^2 f_1(r) = 0, \quad \kappa^2 = \frac{k_\infty - 1}{M_1^2} - \left(\frac{\pi}{H}\right)^2,$$

$$\Delta f_2(r) - v^2 f_2(r) = 0, \quad v^2 = \frac{1}{M_2^2} + \left(\frac{\pi}{H}\right)^2.$$

где M_1^2 и M_2^2 – площадь миграции нейтронов в активной зоне и в отражателе. Площадь миграции есть 1/6 среднего квадрата смещения нейтрона от точки, где он родился быстрым, до точки, где он поглотился тепловым. k_∞ – коэффициент размножения в бесконечной среде.

Решение этих уравнений имеет вид:

$$f_1(r) = A_1 \cdot J_0(\kappa \cdot r) + A_2 \cdot Y_0(\kappa \cdot r),$$

$$f_2(r) = C_1 \cdot I_0(v \cdot r) + C_2 \cdot K_0(v \cdot r).$$

Поскольку $Y_0(\kappa \cdot r)$ имеет в начале координат особенность, то нужно считать, что $A_2 = 0$. Поэтому

$$f_1(r) = A_1 \cdot J_0(\kappa \cdot r).$$

Граничные условия на поверхности раздела активной зоны и отражателя

$$\Phi_1 = \Phi_2, \quad D_1 \cdot \nabla \Phi_1 = D_2 \cdot \nabla \Phi_2$$

приводит к уравнению, выражающему условие критичности:

$$\frac{\kappa \cdot J_1(\kappa \cdot R)}{J_0(\kappa \cdot R)} = v \cdot \frac{D_2}{D_1} \cdot \left\{ \frac{I_1(v \cdot R) \cdot K_0[v \cdot (R+T)] + K_1(v \cdot R) \cdot I_0[v \cdot (R+T)]}{K_0(v \cdot R) \cdot I_0[v \cdot (R+T)] - I_0(v \cdot R) \cdot K_0[v \cdot (R+T)]} \right\},$$

где D_1 и D_2 – коэффициенты диффузии активной зоны и отражателя соответственно. Незвестная R и будет критическим радиусом, который нужно найти.

Приведем данное выражение к общему знаменателю и введем обозначения для левой $g(R, T)$ и правой $d(R, T)$ частей равенства, чтобы последующие формулы были менее громоздкими:

$$g(R, T) = \kappa \cdot D_1 \cdot J_1(\kappa \cdot R) \cdot \{K_0(v \cdot R) \cdot I_0[v \cdot (R+T)] - I_0(v \cdot R) \cdot K_0[v \cdot (R+T)]\},$$

$$d(R, T) = v \cdot D_2 \cdot J_0(\kappa \cdot R) \cdot \{I_1(v \cdot R) \cdot K_0[v \cdot (R+T)] + K_1(v \cdot R) \cdot I_0[v \cdot (R+T)]\}.$$

Тогда уравнение критичности будет иметь вид:

$$g(R, T) - d(R, T) = 0.$$

Дальнейшие вычисления представлены на рис. 6. Результаты вычислений представлены на графике зависимости критического радиуса активной зоны R от толщины отражателя T .

$$K0u(z) := \int_0^{20} e^{-z \cdot \cosh(\phi)} d\phi$$

$$K1u(z) := \frac{1}{2} \int_{-20}^{20} e^{-z \cdot \cosh(\phi) + \phi} d\phi$$

- интегральное представление функций Макдональда. Бесконечные пределы интегрирования заменены на конечные, ввиду быстрой сходимости интегралов.

$$I0u(z) := \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{\cosh(z \cdot t)}{\sqrt{1-t^2}} dt$$

$$I1u(z) := \frac{z}{\pi} \int_{-1}^1 \sqrt{1-t^2} \cdot \cosh(z \cdot t) dt$$

- интегральные представления модифицированных функций Бесселя.

$$J0u(z) := \frac{1}{2 \cdot \pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(z \cdot \sin(\phi)) d\phi$$

$$J1u(z) := \frac{1}{2 \cdot \pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(z \cdot \sin(\phi) - \phi) d\phi$$

- интегральные представления функций Бесселя первого рода. Буква u отличает функции пользователя от встроенных

$H := 35$ - высота цилиндра, см $k := 1.47$ - коэффициент размножения

$M1 := 5.87$ $M2 := 30$ - длина миграции в активной зоне и отражателе, см

$$\kappa := \sqrt{\frac{k-1}{M1^2} - \left(\frac{\pi}{H}\right)^2}$$

$$v := \sqrt{\frac{1}{M2^2} + \left(\frac{\pi}{H}\right)^2}$$

- явные выражения коэффициентов в уравнениях диффузии для активной зоны $\Delta f1(r) + \kappa^2 f1(r) = 0$ и для отражателя $\Delta f2(r) - v^2 f2(r) = 0$

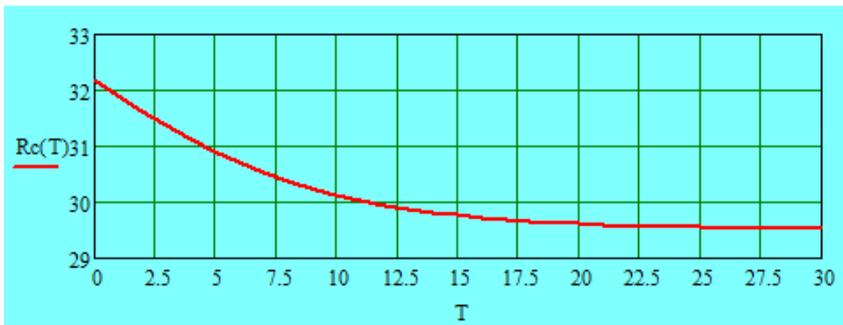
$D1 := 0.163$ $D2 := 0.56$ - коэффициенты диффузии в активной зоне и отражателе, см

$g(T, R) := \kappa \cdot D1 \cdot J1u(\kappa \cdot R) \cdot [K0u(v \cdot R) \cdot I0u[v \cdot (R + T)] - K0u[v \cdot (R + T)] \cdot I0u(v \cdot R)]$ - левая и правая часть условия критичности

$d(T, R) := v \cdot D2 \cdot J0u(\kappa \cdot R) \cdot [I1u(v \cdot R) \cdot K0u[v \cdot (R + T)] + K1u(v \cdot R) \cdot I0u[v \cdot (R + T)]]$ $g(T, R) = d(T, R)$

$T := 0..30$ - толщина отражателя, см

$Rc(T) := \text{root}(g(T, R) - d(T, R), R, 20, 40)$ - численное решение уравнения для определения радиуса активной зоны Rc как функции толщины отражателя T



- график зависимости радиуса активной зоны Rc (см) от толщины отражателя T (см). Как и следовало ожидать, критический радиус уменьшается с увеличением толщины отражателя, но до определенного предела.

Рис. 6. Вычисление критического радиуса реактора
Fig. 6. Calculating the critical radius of the reactor

Вычисление энергетического спектра частицы в потенциальной яме с помощью правила квантования Бора – Зоммерфельда

Рассматриваемый метод решения уравнений, содержащих неизвестную под знаком интеграла, можно эффективно применять для определения энергетического спектра в квазиклассическом приближении. Правило квантования Бора – Зоммерфельда имеет вид

$$\oint p dx = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{или} \quad \int_a^b \sqrt{2m(E - U(x))} dx = \pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Определить уровни энергии электрона $E3(n)$ в поле с потенциальной энергией $U(x)$ рассматривая энергию E как неизвестную в условии Бора-Зоммерфельда. Использовать для решения функцию `root`. Вычислить $E2(n)$ применяя формулу для энергии полученную путем аналитического вычисления интеграла в условии определяющем квазиклассический спектр энергии. Сравнить полученные результаты с точными собственными значениями оператора энергии $E1(n)$

$m := 9.1 \cdot 10^{-28}$ г - масса электрона

$U0 := 1.6 \cdot 10^{-11}$ эрг - параметры определяющие ширину и глубину потенциальной ямы

$h := 6.63 \cdot 10^{-27}$ эрг с - постоянная Планка

$\alpha := 10^7$ см⁻¹

$TOL := 10^{-15}$ - системная переменная определяющая точность вычислений

$U(x) := \frac{-U0}{\cosh(\alpha \cdot x)^2}$ - потенциальная энергия электрона

$$E1(n) := \frac{-1}{8 \cdot m} \cdot \left(\frac{h \cdot \alpha}{2 \cdot \pi} \right)^2 \cdot \left[-(1 + 2 \cdot n) + \sqrt{1 + \frac{8 \cdot m \cdot U0}{(\alpha \cdot h)^2} \cdot (2 \cdot \pi)^2} \right]^2$$

$$E2(n) := \frac{-(h \cdot \alpha)^2}{8 \cdot m \cdot \pi^2} \left[\sqrt{\frac{8 \cdot m \cdot \pi^2 \cdot U0}{(h \cdot \alpha)^2} - \left(n + \frac{1}{2} \right)^2} \right]^2$$

$$E3(n) := \text{root} \left[\begin{array}{l} \frac{1}{\alpha} \cdot \text{acosh} \left(\sqrt{\frac{-U0}{En}} \right) \\ - \frac{1}{\alpha} \cdot \text{acosh} \left(\sqrt{\frac{-U0}{En}} \right) \end{array} \int \sqrt{2 \cdot m \cdot (En - U(x))} dx - \frac{h}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right), En, -(1.35 \cdot 10^{-11}), -(2.5 \cdot 10^{-14}) \right]$$

$n := 1..10$ - номера значений энергии

$ORIGIN := 1$ - системная переменная определяющая начало отсчета номера значений

| E1(n) = | | E2(n) = | | E3(n) = | |
|---------|--------------------------|---------|--------------------------|---------|--------------------------|
| | 1 | | 1 | | 1 |
| 1 | -1.318·10 ⁻¹¹ | 1 | -1.317·10 ⁻¹¹ | 1 | -1.317·10 ⁻¹¹ |
| 2 | -1.145·10 ⁻¹¹ | 2 | -1.144·10 ⁻¹¹ | 2 | -1.144·10 ⁻¹¹ |
| 3 | -9.836·10 ⁻¹² | 3 | -9.824·10 ⁻¹² | 3 | -9.824·10 ⁻¹² |
| 4 | -8.346·10 ⁻¹² | 4 | -8.335·10 ⁻¹² | 4 | -8.335·10 ⁻¹² |
| 5 | -6.978·10 ⁻¹² | 5 | -6.968·10 ⁻¹² | 5 | -6.969·10 ⁻¹² |
| 6 | -5.732·10 ⁻¹² | 6 | -5.723·10 ⁻¹² | 6 | -5.723·10 ⁻¹² |
| 7 | -4.609·10 ⁻¹² | 7 | -4.601·10 ⁻¹² | 7 | -4.601·10 ⁻¹² |
| 8 | -3.608·10 ⁻¹² | 8 | -3.601·10 ⁻¹² | 8 | -3.601·10 ⁻¹² |
| 9 | -2.73·10 ⁻¹² | 9 | -2.723·10 ⁻¹² | 9 | -2.724·10 ⁻¹² |
| 10 | -1.974·10 ⁻¹² | 10 | -1.968·10 ⁻¹² | 10 | -1.969·10 ⁻¹² |

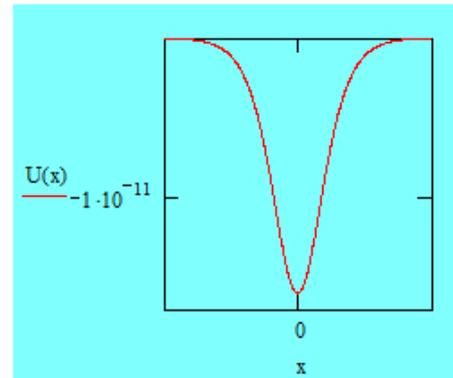


Рис. 7. Вычисление энергетического спектра электрона в потенциальной яме
Fig. 7. Calculation of the energy spectrum of an electron in a potential well

Если потенциальная энергия $U(x)$ известна, то это уравнение в неявном виде определяет энергию E при заданных целочисленных значениях n . Рассмотрим несколько примеров, иллюстрирующих возможности метода. Сначала рассмотрим движение электрона в поле

$$U(x) = \frac{-U_0}{ch(\alpha x)^2}.$$

Известно точное решение этой задачи [7] и решение в квазиклассическом приближении [8]. Эти решения использовались для сравнения с результатами численного расчета, представленными на рис. 7: $E1(n)$ – значения энергии, полученные из точного решения задачи, $E2(n)$ – значения энергии, полученные с помощью аналитического вычисления интеграла в условии Бора – Зоммерфельда, $E3(n)$ – значения энергии, полученные с помощью численного решения.

Следующий пример несколько более сложен, поскольку необходимо решать уравнения для определения точек остановки, т. е. численно определять пределы интегрирования (рис. 8). Кроме того, интеграл не вычисляется аналитически. Определим энергетический спектр, если частица движется в поле

$$U(x) = x \cdot \text{arctg}(x).$$

Для простоты будем считать, что $2m = \hbar = 1$, т. е. правило Бора – Зоммерфельда имеет вид

$$\int_a^b \sqrt{E - U(x)} dx = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Вычислить первые 10 значений энергии $E_x(n)$ в поле $U(x) = x \cdot \text{arctg}(x)$.

$$E_x(n) := \text{root} \left[\int_{\text{root}(E-x \cdot \text{atan}(x), x, -10, 0)}^{\text{root}(E-x \cdot \text{atan}(x), x, 0, 10)} \sqrt{E - x \cdot \text{atan}(x)} dx - \pi \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right), E, 0, 12 \right]$$

Для простоты масса $m=0.5$, а постоянная Планка $\hbar/(2\pi)=1$

$n := 1..10$

| E _x (n) = | |
|----------------------|--------|
| | 0 |
| 0 | 2.35 |
| 1 | 3.562 |
| 2 | 4.639 |
| 3 | 5.626 |
| 4 | 6.546 |
| 5 | 7.414 |
| 6 | 8.241 |
| 7 | 9.033 |
| 8 | 9.795 |
| 9 | 10.531 |

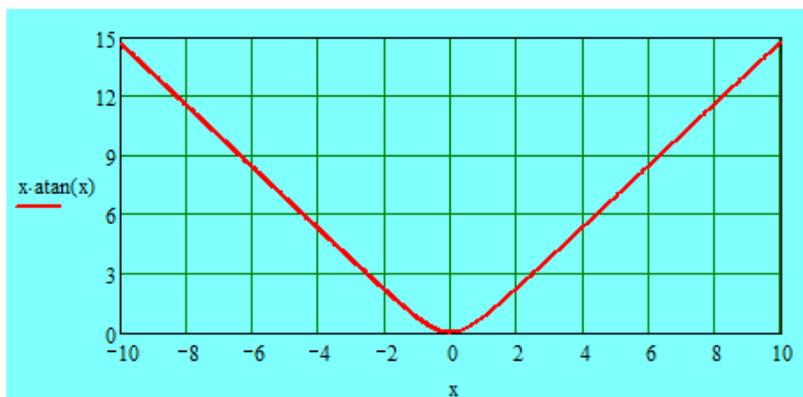


Рис. 8. Вычисление энергетического спектра в поле $U(x) = x \cdot \text{arctg}(x)$
 Fig. 8. Calculation of energy spectrum in the field $U(x) = x \cdot \text{arctg}(x)$

Эффект Штарка в атоме водорода

Рассмотрим вычисление энергии атома водорода в электрическом поле с использованием квазиклассического приближения. При больших значениях главного квантового числа n не выполняется критерий применимости метода возмущений, а метод ВКБ, напротив, тем точнее, чем больше значение главного квантового числа n . Следуя [7], опишем получение формул для определения спектра ВКБ. Для упрощения формул используются атомные единицы, т. е. полагаем, что масса электрона $m = 1$, заряд электрона $e = 1$, постоянная Планка $\hbar = 1$. Единицей энергии будет $me^4 / \hbar^2 = 27,21$ эВ, напряженности боровский радиус $a = \hbar^2 / (me^2) = 5,29 \cdot 10^{-9}$ см будет единицей длины, а единицей электрического поля будет напряженность поля, создаваемого протоном на расстоянии, равном боровскому радиусу $e/a^2 = 5,142 \cdot 10^9$ В/м. Напряженность поля будет обозначаться буквой F . Ввиду аксиальной симметрии целесообразно использовать параболические координаты ξ, η, ϕ . Уравнение Шредингера для электрона в атоме водорода в параболических координатах имеет вид:

$$\frac{4}{\xi + \eta} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{1}{\xi \eta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{4}{\xi + \eta} \psi - F(\xi - \eta) \psi = -2E\psi.$$

Это уравнение допускает разделение переменных, в результате которого получаем

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{df_1}{d\xi} \right) + \left(\frac{E}{2} \xi - \frac{m^2}{4\xi} - \frac{F}{4} \xi^2 \right) f_1 &= -\beta_1 f_1, \\ \frac{d}{d\eta} \left(\eta \frac{df_2}{d\eta} \right) + \left(\frac{E}{2} \eta - \frac{m^2}{4\eta} + \frac{F}{4} \eta^2 \right) f_2 &= -\beta_2 f_2, \\ \beta_1 + \beta_2 &= 1. \end{aligned}$$

С помощью подстановки

$$f_1 = \frac{\chi_1}{\sqrt{\xi}}, \quad f_2 = \frac{\chi_2}{\sqrt{\eta}}$$

получаем уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \chi_1}{d\xi^2} + \left(\frac{E}{2} + \frac{\beta_1}{\xi} - \frac{m^2 - 1}{4\xi^2} - \frac{F}{4} \xi \right) \chi_1 &= 0, \\ \frac{d^2 \chi_2}{d\eta^2} + \left(\frac{E}{2} + \frac{\beta_2}{\eta} - \frac{m^2 - 1}{4\eta^2} + \frac{F}{4} \eta \right) \chi_2 &= 0. \end{aligned}$$

Каждое из этих уравнений имеет вид одномерного уравнения Шредингера, в котором роль полной энергии выполняет $E/4$, а потенциальные энергии представлены как

$$U_1(\xi) = -\frac{\beta_1}{2\xi} + \frac{m^2 - 1}{8\xi^2} + \frac{F}{8} \xi, \quad U_2(\eta) = -\frac{\beta_2}{2\eta} + \frac{m^2 - 1}{8\eta^2} - \frac{F}{8} \eta.$$

В этих формулах в дальнейшем будут использованы обозначения: $\beta_1 = \beta$, $\beta_2 = 1 - \beta$. Кроме того, вместо $m^2 - 1$ будем писать m^2 , поскольку в примечании к соответствующему параграфу [7] отмечается, что подробное исследование приводит к выводу о том, что такая замена дает более точные результаты. Окончательно

$$U_1(\xi) = U1(\xi) = -\frac{\beta}{2\xi} + \frac{m^2}{8\xi^2} + \frac{F}{8} \xi, \quad U_2(\eta) = U2(\eta) = -\frac{1 - \beta}{2\eta} + \frac{m^2}{8\eta^2} - \frac{F}{8} \eta.$$

Согласно правилу квантования Бора – Зоммерфельда имеем:

$$\int_{\xi_1}^{\xi_2} \sqrt{2 \left(\frac{E}{4} - U1(\xi) \right)} d\xi = \left(n1 + \frac{1}{2} \right) \pi, \quad \int_{\eta_1}^{\eta_2} \sqrt{2 \left(\frac{E}{4} - U2(\eta) \right)} d\eta = \left(n2 + \frac{1}{2} \right) \pi.$$

Эти формулы будут объектом приложения рассматриваемой методики решения уравнений для нахождения E и константы разделения β .

Для решения системы из двух уравнений с двумя неизвестными используем блок Given – Find, описанный во введении.

Кроме того, верхние и нижние пределы интегрирования ξ_1 , ξ_2 , η_1 , η_2 зависят от энергии E и для нахождения диапазона изменения ξ и η необходимо использовать решения уравнений

$E/4 - U1(\xi) = 0$, $E/4 - U2(\eta) = 0$, т. е. на верхнем и нижнем пределах интегрирования должны быть написаны выражения типа

$$\text{root}\left(\frac{E}{4} - U1(\xi), \xi, \xi1, \xi2\right), \text{root}\left(\frac{E}{4} - U2(\eta), \eta, \eta1, \eta2\right).$$

$$U1(\beta, m, F, \xi) := \frac{-\beta}{2 \cdot \xi} + \frac{m^2}{8 \cdot \xi^2} + \frac{F}{8} \cdot \xi \quad U2(\beta, m, F, \eta) := \frac{-(1-\beta)}{2 \cdot \eta} + \frac{m^2}{8 \cdot \eta^2} - \frac{F}{8} \cdot \eta$$

- функции выполняющие роль потенциальной энергии

$m := 1$ - азимутальное квантовое число $n1 := 2$ $n2 := 2$ - параболические квантовые числа

$F := 0$ - напряженность поля, поле отсутствует $n := n1 + n2 + m + 1$ - главное квантовое число

$\beta := 0.45$ $E := -0.015$ - предполагаемые значения корней системы уравнений, константы разделения и энергии

Given

$$\int_{\text{root}\left(\frac{E}{4} - U1(\beta, m, F, \xi), \xi, 0.2, 1\right)}^{\text{root}\left(\frac{E}{4} - U1(\beta, m, F, \xi), \xi, 1, 155\right)} \sqrt{2\left(\frac{E}{4} - U1(\beta, m, F, \xi)\right)} d\xi = \pi \cdot \left(n1 + \frac{1}{2}\right)$$

$$\int_{\text{root}\left(\frac{E}{4} - U2(\beta, m, F, \eta), \eta, 0.2, 1\right)}^{\text{root}\left(\frac{E}{4} - U2(\beta, m, F, \eta), \eta, 1, 125\right)} \sqrt{2\left(\frac{E}{4} - U2(\beta, m, F, \eta)\right)} d\eta = \pi \cdot \left(n2 + \frac{1}{2}\right)$$

Find(β, E) = $\begin{pmatrix} 0.5 \\ -0.01389 \end{pmatrix}$ - вычисленные значения константы разделения и энергии в отсутствии внешнего поля, значение энергии при $n=6$ по точной формуле $E = -1/(2n^2) = -1/72 = -0.01389$

$F := 0.00002$ - значение напряженности поля, $F \sim 10^5$ В/см

Given

$$\int_{\text{root}\left(\frac{E}{4} - U1(\beta, m, F, \xi), \xi, 0.2, 1\right)}^{\text{root}\left(\frac{E}{4} - U1(\beta, m, F, \xi), \xi, 1, 155\right)} \sqrt{2\left(\frac{E}{4} - U1(\beta, m, F, \xi)\right)} d\xi = \pi \cdot \left(n1 + \frac{1}{2}\right)$$

$$\int_{\text{root}\left(\frac{E}{4} - U2(\beta, m, F, \eta), \eta, 0.2, 1\right)}^{\text{root}\left(\frac{E}{4} - U2(\beta, m, F, \eta), \eta, 1, 125\right)} \sqrt{2\left(\frac{E}{4} - U2(\beta, m, F, \eta)\right)} d\eta = \pi \cdot \left(n2 + \frac{1}{2}\right)$$

Find(β, E) = $\begin{pmatrix} 0.50964 \\ -0.01391 \end{pmatrix}$ - вычисленные значения константы разделения и энергии при значении напряженности поля $F \sim 10^5$ В/см

$$E_p := \frac{-1}{2 \cdot n^2} + \frac{3}{2} \cdot F \cdot n \cdot (n1 - n2) - \frac{F^2}{16} \cdot n^4 \cdot [17 \cdot n^2 - 3 \cdot (n1 - n2)^2 - 9 \cdot m^2 + 19] \quad E_p = -0.01391$$

- энергия по теории возмущений

Рис. 9. Вычисление энергии электрона в атоме водорода при отсутствии поля и при наличии электрического поля.

Для сравнения приведен результат, полученный по теории возмущений

Fig. 9. Calculation of the electron energy in the hydrogen atom in the absence of a field and in the presence of an electric field. The result obtained by perturbation theory is given for comparison

На рис. 9 вначале представлено решение для небольших значений n_1 и n_2 при отсутствии поля, из которого следует, что вычисленное значение энергии E соответствует значениям, полученным из точной формулы $E = -1/(2n^2)$. Второй этап тестирования заключается в сравнении результатов, полученных для энергии E в присутствии поля по теории возмущений и с помощью квазиклассического приближения. Результаты вычислений совпадают. Наконец, на рис. 10 приведены результаты вычислений для ридберговских состояний при наличии поля, т. е. состояния с большим значением главного квантового числа $n = 82$. Из полученных результатов можно сделать вывод о работоспособности метода.

$$U_1(\beta, m, F, \xi) := \frac{-\beta}{2 \cdot \xi} + \frac{m^2}{8 \cdot \xi^2} + \frac{F \cdot \xi}{8} \quad U_2(\beta, m, F, \eta) := \frac{-(1 - \beta)}{2 \cdot \eta} + \frac{m^2}{8 \cdot \eta^2} - \frac{F \cdot \eta}{8}$$

- функции выполняющие роль потенциальной энергии в одномерном уравнении Шредингера

$m := 1$ - азимутальное квантовое число

$n_1 := 35$ $n_2 := 45$ - параболические квантовые числа

$n := n_1 + n_2 + m + 1$ $n = 82$ - главное квантовое число

$E_n := \frac{-1}{2 \cdot n^2}$ $E_n = -7.436 \times 10^{-5}$ - величина энергии в отсутствии внешнего поля $F=0$ соответствующая значению $n=82$

$F := 2 \cdot 10^{-9}$ - напряженность поля, $F \sim 10$ В/м

$E_w := -7 \cdot 10^{-5}$ $\beta_w := 0.5$ - предполагаемые значения корней системы уравнений

Given

$$\int_{\text{root}\left(\frac{E}{4} - U_1(\beta, m, F, \xi), \xi, 0.2, 1\right)}^{\text{root}\left(\frac{E}{4} - U_1(\beta, m, F, \xi), \xi, 1, 25000\right)} \sqrt{2\left(\frac{E}{4} - U_1(\beta, m, F, \xi)\right)} d\xi = \pi \cdot \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)$$

$$\int_{\text{root}\left(\frac{E}{4} - U_2(\beta, m, F, \eta), \eta, 0.2, 1\right)}^{\text{root}\left(\frac{E}{4} - U_2(\beta, m, F, \eta), \eta, 1, 25000\right)} \sqrt{2\left(\frac{E}{4} - U_2(\beta, m, F, \eta)\right)} d\eta = \pi \cdot \left(n_2 + \frac{1}{2}\right)$$

Find(β, E) = $\begin{pmatrix} 0.473 \\ -7.82 \times 10^{-5} \end{pmatrix}$ - значения константы разделения и энергии при напряженности поля $F \sim 10$ В/м

Рис. 10. Пример вычисления энергии ридберговского состояния $n = 82$ при наличии электрического поля с помощью правила квантования Бора – Зоммерфельда

Fig. 10. Example of calculation of the energy of the Rydberg state $n=82$ in the presence of an electric field using the Bohr – Sommerfeld quantization rule

Вычисление параметров релятивистского ферми-газа

Для определения значений энергии E и давления p релятивистского газа фермионов используются формулы [9]:

$$E = 8\pi V \frac{m^4 c^5}{h^3} \int_0^\infty \frac{sh^2\theta \cdot ch^2\theta d\theta}{e^{\beta(mc^2 ch\theta - \mu)} + 1}, \quad p = \frac{8\pi}{3} \frac{m^4 c^5}{h^3} \int_0^\infty \frac{sh^4\theta d\theta}{e^{\beta(mc^2 ch\theta - \mu)} + 1}.$$

Здесь

$$\varepsilon = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} = mc^2 \operatorname{ch} \theta, \quad \beta = \frac{1}{kT},$$

где θ – параметр, а остальные обозначения общеприняты. Специфика проблемы в том, что, как и в нерелятивистском случае, для вычисления E и p необходимо знать химический потенциал μ , который зависит от количества частиц N в объеме V и температуры T и выражается в неявном виде посредством формулы:

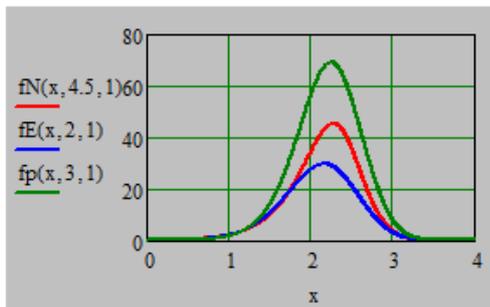
$$N = 8\pi V \left(\frac{mc}{h} \right)^3 \int_0^\infty \frac{sh^2 \theta \cdot ch \theta d\theta}{e^{\beta(mc^2 ch \theta - \mu)} + 1}.$$

$m := 9.1 \cdot 10^{-28}$ г - масса электрона $h := 6.63 \cdot 10^{-27}$ эрг с - постоянная Планка $c := 3 \cdot 10^{10}$ см/с - скорость света

$$fN(x, \mu, T) := \frac{\sinh(x)^2 \cdot \cosh(x)}{e^{\frac{\cosh(x) - \mu}{T}} + 1}$$

$$fE(x, \mu, T) := \frac{\sinh(x)^2 \cdot \cosh(x)^2}{e^{\frac{\cosh(x) - \mu}{T}} + 1}$$

$$fp(x, \mu, T) := \frac{\sinh(x)^4}{e^{\frac{\cosh(x) - \mu}{T}} + 1}$$



$$fN(4, 4.5, 1) = 2.528 \times 10^{-6}$$

$$fE(4, 2, 1) = 5.667 \times 10^{-6}$$

$$fp(4, 3, 1) = 1.538 \times 10^{-5}$$

- графики подынтегральных функций и значения этих функций на верхнем пределе интегрирования иллюстрирующие возможность замены на верхнем пределе интегрирования бесконечности конечным числом, например $x=4$

$N(\mu, T, V) := 8 \cdot \pi \cdot V \cdot \left(\frac{m \cdot c}{h} \right)^3 \cdot \int_0^4 fN(x, \mu, T) dx$ - формула связывающая количество частиц N в объеме V с температурой T и химическим потенциалом μ . Если заданы N , V , T , то она в неявном виде определяет μ .

$N := 3.5 \cdot 10^{30}$ - число электронов в объеме V $V := 1$ см³ - объем $T := 0.3$ - температура в ед. mc^2

$$\mu := \operatorname{root} \left[\int_0^4 8 \cdot \pi \cdot V \cdot \left(\frac{m \cdot c}{h} \right)^3 \cdot fN(x, \mu, 0.3) dx - N, \mu, 1, 5 \right]$$

$$\mu = 1.905$$

-вычисление химического потенциала μ в ед. mc^2 с помощью функции root при заданных температуре T и концентрации частиц N/V .

$$E(\mu, T) := 8 \cdot \pi \cdot V \cdot \frac{m^4 \cdot c^5}{h^3} \cdot \int_0^4 fE(x, \mu, T) dx$$

$$p(\mu, T) := \frac{8}{3} \cdot \pi \cdot \frac{m^4 \cdot c^5}{h^3} \cdot \int_0^4 fp(x, \mu, T) dx$$

- вычисление энергии E и давления ферми-газа p при заданных температуре T и количестве частиц N , а также определенного значения μ

$$E(\mu, T) = 5.604 \times 10^{24} \text{ эрг}$$

$$p(\mu, T) = 1.344 \times 10^{24} \text{ дин/см}^2$$

Рис. 11. Вычисление энергии E и давления p релятивистского газа электронов при заданных температуре T и концентрации N/V

Fig. 11. Calculation of energy E and pressure p of relativistic electron gas at given temperature T and concentration N/V

Если газ ультрарелятивистский $\varepsilon = pc$ или вырожденный, то можно получить более простые формулы [10]. Но для конкретных значений N , V , T удобно вычислять химический потенциал μ как корень уравнения, содержащего неизвестную под знаком интеграла, т. е. применить рассматриваемый метод. Для удобства будем в показателе экспоненты под знаком интеграла выражать энергию ε химический потенциал μ и kT в единицах mc^2 , т. е. введем обозначения:

$$\varepsilon \rightarrow \frac{mc^2 ch\theta}{mc^2} = ch\theta, \quad \frac{\mu}{mc^2} \rightarrow \mu, \quad \frac{kT}{mc^2} \rightarrow T, \quad \beta(mc^2 ch\theta - \mu) \rightarrow \frac{ch\theta - \mu}{T}.$$

Кроме того, при численном вычислении интеграла бесконечность заменяется конечным числом, например 1000. Но в нашем случае верхний предел не будет превышать 4, поскольку в знаменателе стоит экспонента с гиперболической функцией в показателе, т. е. экспонента в экспоненциальной степени и при относительно небольших значениях параметра θ знаменатель может превысить 10^{308} – предельное число, с которым может работать MathCAD. На рис. 11 приведены графики подынтегральных функций, из которых можно оценить значение верхнего предела интегрирования. Значения температуры T и концентрации электронов N/V взяты достаточно произвольно, хотя и близко к характерным значениям для массивных звезд на заключительных этапах эволюции.

Выводы

Приведенные примеры продемонстрировали эффективность методов решения уравнений, содержащих неизвестную под знаком интеграла. Помимо того, что представленный материал может быть использован для семинарских занятий, ряд примеров имеет самостоятельное значение. Имеется в виду определение спектра ВКБ квантовых систем, вычисление химического потенциала релятивистского газа Ферми – Дирака.

Список литературы

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика. М.: Наука, 1973. С. 69–70.
2. Никифоров А. Ф., Уваров В. В. Специальные функции математической физики. М.: Наука 1984. С. 301–304.
3. Руссо М., Матье Ж. П. Задачи по оптике. М.: Мир, 1976. 177 с.
4. Кнопфель Г. Сверхсильные импульсные магнитные поля. М.: Мир, 1972. 87 с.
5. Стефенсон Р. Введение в ядерную технику. М.: ГИТТЛ, 1956. С. 135, 136, 227.
6. Бартоломей Г. Г. и др. Основы теории и методы расчета ядерных энергетических реакторов. М.: Энергоатомиздат, 1982. С. 206, 207.
7. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1989. С. 99, 100, 348, 349.
8. Гольдман И. И. и Кривченков В. Д. Сборник задач по квантовой механике. М.: ГИТТЛ, 1957. С.57, 58.
9. Кубо Р. Статистическая механика М.: Мир, 1968. С. 310, 311.
10. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. М.: Наука, 1976. Ч. 1. С. 199–201.

References

1. Landau L. D., Lifshits E. M. Mechanics. Moscow, Nauka publ., 1973, p. 69, 70. (in Russ.)
2. Nikiforov A. F., Uvarov V. V. Special Functions of Mathematical Physics. Moscow, Nauka publ., 1984, pp. 301–304. (in Russ.)
3. Rousseau M., Mathieu J. P. Tasks on optics. Moscow, Mir publ., 1976, p. 177. (in Russ.)
4. Knopfel G. Pulsed high magnetic fields. Moscow, Mir publ., 1972, p. 87. (in Russ.)

5. **Stephenson R.** Introduction to nuclear engineering. Moscow, GITTL, 1956, p.135, 136, 227. (in Russ.)
6. **Bartolomei G. G. et al.** Fundamentals of Theory and Methods of Calculation of Nuclear Power Reactors. Moscow, Energoatomizdat, 1982, p. 206, 207. (in Russ.)
7. **Landau L. D., Lifshits E. M.** Quantum Mechanics. Moscow, Nauka publ., 1989, p. 99, 100, 348, 349. (in Russ.)
8. **Goldman I. I. and Krivchenkov V. D.** Collection of Problems on Quantum Mechanics. Moscow, GITTL, 1957, p. 57, 58. (in Russ.)
9. **Kubo R.** Statistical Mechanics Moscow, Mir publ., 1968, p. 310, 311. (in Russ.)
10. **Landau L. D., Lifshits E. M.** Statistical Physics. Moscow, Nauka publ., 1976, ch. 1, p. 199–201. (in Russ.)

Сведения об авторе

Пипич Петр Васильевич, преподаватель

Information about the Author

Petr V. Pipich, Lecturer

*Статья поступила в редакцию 04.09.2024;
одобрена после рецензирования 30.09.2024; принята к публикации 10.10.2024*

*The article was submitted 04.09.2024;
approved after reviewing 30.09.2024; accepted for publication 10.10.2024*