© АВТОМАТИКА И ПРОГРАММНАЯ ИНЖЕНЕРИЯ. 2014, №4(10)

Связь уравнений Томаса-Ферми и Риккати

В.А. Жмудь
ФГБОУ ВПО НГТУ, Новосибирск

***Аннотация*: Уравнение Томаса-Ферми [1] разработано для описания электронной структуры системы многих тел. Писатель Леонардо Шаша в [2] описывает поразительный случай с одним из молодых, рано ушедших из жизни физиков-теоретиков Этторе Майорана, учеником Э. Ферми. Этот молодой ученый якобы преобразовал уравнеие Томаса-Ферми в уравнение Риккати с целью расчета необходимых коэффициентов таблицы. В статье обсуждается вероятный источник родства этих уравнений.**

***Ключевые слова*: физика, теория автоматики, обратная связь, энерогетические уровни, уравнение Томаса-Ферми, уравнение Рикатти, Майорана, Ферми**

ВВЕДЕНИЕ

Не только ученых, но и просто любознательных людей всегда завораживают факты гениальных предсказаний, открытий «на кончике пера», отыскания простых решений сложных задач.

Тем более удивительным должен быть случай простого решения задачи, над которой ученые бьются более ста лет, и так и не могут найти красивого, ясного, полностью логически обоснованного и экспериментально доказанного решения задачи. Речь идет о задаче движения электронов в атомах. Это в равной степени относится к отдельным атомам, и к атомам, образующим систему, как в кристаллах твердых тел.

Одно из возможных теоретических решений этой задачи изложено в теории Томаса–Ферми [2]. Эта теория столь сложна, что далеко без владения сложнейшим математическим аппаратом ее можно понять лишь в общих чертах. Расчеты с помощью этой теории также чрезвычайно сложны.

Тем удивительней случай, который описывает Леонардо Шаша: «Ферми тогда работал над статистической моделью, названной позже моделью Томаса–Ферми. Он и Майорана сразу же заговорили о ведшихся в институте исследованиях; Ферми описал модель в общих чертах и показал Майоране выдержки из своих недавних работ на эту тему – в частности, сводную таблицу числовых значений так называемого потенциала Ферми. Майорана выслушал с интересом, кое-что попросил разъяснить и ушел, мыслей и намерений своих никак не обнаружив. На следующий день около полудня он снова явился в институт, прошел прямо в кабинет Ферми и без лишних слов попросил сводку, которую видел накануне всего несколько мгновений. Получив ее, он вынул из кармана листок с аналогичной таблицей, рассчитанной им дома за истекшие сутки; насколько помнит Сегре, нелинейное уравнение второго порядка Томаса–Ферми он преобразовал в уравнение Риккати, которое затем интегрировал численно. Майорана сличил таблицы, убедился, что они полностью совпадают, и сказал, что сводка Ферми верна…» То есть он пришел проверить не правильность таблицы, рассчитанной им за последние двадцать четыре часа (при том, что часть времени он потратил на сон), а правильность той, на которую у Ферми ушло бог знает сколько дней. К тому же неизвестно, пришла ли ему в голову идея преобразовать уравнение Томаса–Ферми в уравнение Риккати невольно, сама собой, или же ему пришлось еще над этим думать. Во всяком случае, после того, как Ферми выдержал испытание, Майорана перешел на физический факультет» [2].

Есть основания, что родство уравнения Риккати и уравнения Томаса–Ферми должны иметь связь, и эта связь не случайна, а именно: она основана на природе тех явлений, для описания которых используется уравнения Томаса–Ферми.

1. ПРЕДМЕТ, К КОТОРОМУ ОТНОСИТСЯ УРАВНЕНИЕ ТОМАСА–ФЕРМИ

Теория Томаса–Ферми имеет своим предметом движение электронов вокруг атомов. Эта теория относится к классу квантово-механических теорий. Она пытается описать структуру распределения электронов около атома на основе энергетических соображений. В теории используются понятия кинетической и потенциальной энергии электрона, а также полной энергии, равной сумме этих энергий.

Кинетическая энергия определяется скоростью электрона, она равна половине произведения его массы на квадрат скорости.

Потенциальная энергия определяется силой притяжения электрона к ядру или к нескольким ядрам. Наряду с электрическим притяжением имеет место гравитационное притяжение, которым, вероятно, можно пренебречь, хотя этот вопрос остается открытым. Существуют теории, в которых сделаны попытки вывести гравитационное притяжение из электромагнитного взаимодействия, существуют и иные теории, например, пытающиеся осуществить обратный переход. В настоящее время общепринятой теории, которая бы позволяла вывести один из видов указанного взаимодействия из другого, не существует.

Природа любого дифференциального уравнения в физике может быть объяснена через приращения обобщенных координат. Приращения, или вариации, легли в основу математического анализа и теории дифференциальных уравнений.

При этом можно составить картину состояния системы в фиксированный момент, как бы замороженной системы. Далее дается некоторое малое приращение во времени, по которому вычисляется малое приращение всех других параметров движения в системе, которые являются следствием действия сил в исходном состоянии. Далее вычисляется разница между новым состоянием и исходным, что называется «приращением». Это приращение делится на приращение во времени. Полученное выражение рассматриваем при условии сколь угодно малого уменьшения приращения во времени. То есть выводится математическое выражение для предела отношения приращения исследуемых величин к приращению времени при устремлении приращения времени к нулю.

2. ОДНА ИЗ ФОРМ УРАВНЕНИЯ РИККАТИ И ИСТОЧНИК ЕЕ ПОЯВЛЕНИЯ

Специалистам по автоматическому управлению уравнение Риккати известно из теории линейного оптимального управления [4].

Поскольку не оспаривается, что любое материальное тело (в том числе и электрон) может двигаться лишь с ограниченной скоростью, то и ускорение любого материального тела может быть лишь ограничено по величине. Из этого можно сделать вывод, что если фактическую траекторию электрона можно было бы знать и записать её как функцию времени, то производная этой траектории по времени также должна быть непрерывной, ограниченной по величине. Поэтому достаточно малому приращению времени будет соответствовать также малое приращение скорости и положения электрона. Если от этого приращения времени взять фиксированную долю, то приращение скорости и ускорения можно рассчитать как такую же долю от ранее вычисленных приращений скорости и ускорения. То есть в первом приближении любое небольшое перемещение электрона может быть описано линейной функцией. Это справедливо лишь для малого приращения времени и это никогда не справедливо для большого приращения времени.

Эту мысль можно распространить на очень многие явления в природе (возможно, что на все). А именно: для любой многих зависимостей, реализуемых в реальности, можно указать столь малые приращения времени, что эти зависимости можно описывать линейными функциями, и при этом для них же можно указать такие столь большие приращения времени, что эти зависимости уже никак нельзя описывать линейными функциями.

Теория автоматического управления рассматривает функционирование объектов вблизи равновесного состояния, то есть такое, когда отклонения выходной величины от предписанного значения невелики. В этих условиях, как правило, систему также можно считать линейной. Этим объясняется широкое распространение методов анализа линейных систем.

Аппарат анализа линейных систем может быть основан на дифференциальных уравнениях.

Например, уравнение объекта может быть записано в виде:

$$\dot{X} = AX + BU\,, \qquad (1)$$

$$Y = CX\,. \qquad (2)$$

Здесь X – вектор состояния, Y – вектор выходных величин, U – вектор управляющих сигналов, A, B, C – матричные передаточные функции.

Решение задачи управления состоит в отыскании управляющего воздействия U, которое бы обеспечило равенство выходной величины Y вектору предписанных значений V.

Используем символ дифференцирования s, тогда в операторной форме получим:

$$sX = AX + BU\,. \qquad (3)$$

Вычтем из обеих частей уравнения первое слагаемое правой части:

$$sX - AX = BU\,. \qquad (4)$$

Вынесем X за скобки. При этом при s остается множителем единичная матрица I той же размерности, что и матрица A:

$$(sI - A)X = BU\,. \qquad (5)$$

Вычислим из этого уравнения X, подставим в (2):

$$X = (sI - A)^{-1}BU\,. \qquad (6)$$

$$Y = C(sI - A)^{-1}BU\,. \qquad (7)$$

Приравняем Y к V, откуда можно вычислить U:

$$V = C(sI - A)^{-1}BU\,. \qquad (8)$$

Уравнение (8) является одной из форм уравнения Риккати.

Вывод 1. Уравнение Риккати появляется при описании поведения замкнутой динамической системы.

3. ПОЧЕМУ УРАВНЕНИЕ РИККАТИ МОЖЕТ ПОЯВЛЯТЬСЯ ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧИ ОПИСАНИЯ ДВИЖЕНИЯ ЭЛЕКТРОНА

Теория автоматического управления описывает системы, в которых имеются два обязательных признака:

1. Наличие отрицательной обратной связи.
2. Наличие динамических свойств, то есть зависимость отклика хотя бы одного элемента в контуре от времени.

Посмотрим, имеются ли указанные признаки в системе из электрона и, по меньшей мере, одного центра притяжения (ядра).

Для простоты рассмотрим задачу на плоскости. Пусть в центре системы координат расположено положительно заряженное ядро. Масса ядра в сравнении с массой электрона такова, что изменением положения ядра вследствие движения электрона можно пренебречь.

Пусть электрон движется со скоростью v в направлении, которое не совпадает с направлением на центр ядра, как показано на *Рис.* 1. При этом вектор скорости v и центр ядра лежат в одной плоскости. Проведем из центра ядра ось, обозначим ее ось X. Также из центра ядра проведем ось, ортогональную оси X, и обозначим ее Y. Проекции вектора ρ из центра ядра к электрону на оси X и Y обозначим, соответственно, x и y. В случае движения электрона эти проекции будут изменяться как функции времени t.

Положение электрона описывается координатами $\{x(t),\ y(t)\}$. Зададим бесконечно малое приращение времени Δt. Новые координаты равны сумме старого положения и приращения. Приращения равны произведению производных координат на приращение времени.

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \dot{x}(t)\Delta t\,. \qquad (9)$$

$$y(t + \Delta t) = y(t) + \dot{y}(t)\Delta t\,. \qquad (10)$$

Начальные значения скорости равны производным от координат, новые значения скорости равны сумме начальных значений и произведению их производных на приращение времени:

$$\dot{x}(t + \Delta t) = \dot{x}(t) + \ddot{x}(t)\Delta t\,. \qquad (11)$$

$$\dot{y}(t + \Delta t) = \dot{y}(t) + \ddot{y}(t)\Delta t\,. \qquad (12)$$

Вторая производная координаты, то есть первая производная скорости – это ускорение, которое равно силе, деленной на массу. В свою очередь сила обратно пропорциональна расстоянию в квадрате:

$$\ddot{x}(t) = \ddot{\rho}(t)\cos\alpha . \quad (13)$$

$$\ddot{y}(t) = \ddot{\rho}(t)\cos\alpha . \quad (14)$$

$$\ddot{\rho}(t) = a(t) = F(t)/m . \quad (15)$$

$$F(t) = \frac{f_0 k(t)}{x^2(t) + y^2(t)} . \quad (16)$$

Здесь f_0 – значение силы на единичном расстоянии при нулевой скорости электрона, $k(t)$ – введенный нами коэффициент, зависящий от скорости электрона [5]. При скорости электрона, равной скорости света *C*, этот коэффициент обращается в нуль, при нулевой скорости этот коэффициент равен единице.

$$k(t) = \sqrt{1 - \frac{\dot{x}^2(t) + \dot{y}^2(t)}{C^2}} . \quad (17)$$

Соотношение (17) справедливо лишь на достаточно больших расстояниях между электроном и ядром, так что размерами ядра можно пренебречь. В противном случае следует добавить коэффициент, уменьшающийся от единицы до нуля при уменьшении расстояния между электроном и центром ядра от величины радиуса ядра до нуля.

Очевидно, что уравнения (9) – (17) описывают замкнутый контур влияния величин, входящих в них, то есть координат, скоростей и ускорений. Действительно, координаты зависят от скорости, скорости зависят от ускорений, а ускорения зависят от координат и от скорости. Даже если бы не было зависимости ускорений от скорости (которую некоторые читатели могут оспорить), все равно замкнутый цикл остается.

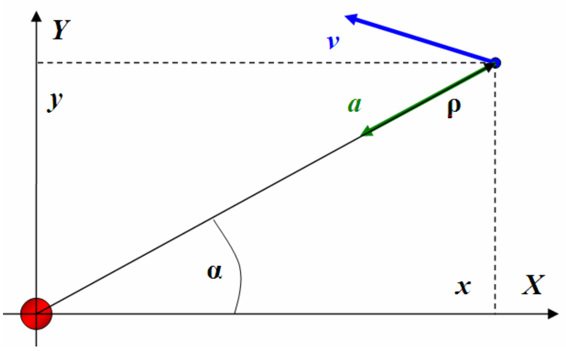

Рис. 1. Простейший пример расположения электрона и ядра, а также направление скорости и ускорения электрона

Вывод 2. Таким образом, можно сделать достаточно обоснованный вывод, что уравнения, описывающие движение электрона даже вблизи одного центра притяжения (ядра), имеют в первом приближении вид уравнений Риккати. Если от этих уравнений перейти к энергетическим соотношениям, они должны быть близки к уравнениям Томаса–Ферми в той мере, в какой эти уравнения в действительности соответствуют истинной природе рассматриваемых движений.

ОБСУЖДЕНИЕ

В теоретической физике зачастую уравнения, описывающие явления, не выводились на основании рассмотрения моделей явлений, а отыскивались на основании требуемых свойств решений этих уравнений.

В частности, известный заранее результат, который состоит в том, что решения уравнений должны быть дискретными, привел к предложению уравнений Шрёдингера. Шрёдингер отыскал требуемый математический аппарат в теоретических исследованиях, используемых в теории автоматического управления. Однако это не натолкнуло исследователей на идею о том, что теория движения электрона около ядра должна строиться с привлечением теории автоматического управления, которая детально исследует поведение замкнутых систем, в которых учитывается запаздывание и прочие динамические особенности элементов.

В данной статье показано, что именно эта теория должна использоваться при решении этих задач.

В теоретической физике, основанной на использовании теории автоматического управления, потенциально содержатся следующие преимущества:

1. Могут быть выявлены и рассчитаны условия, при которых движение отрицательно заряженной частицы около положительно заряженного ядра отличается от известных видов планетарных траекторий. Если набор планетарных траекторий содержит лишь параболу, гиперболу, спираль, эллипс и окружность, то набор траекторий, который может быть обоснован на базе теории автоматического управления, включает автоколебательные циклы, в которых амплитуда и частота колебаний не зависит от начальных условий.

2. Вследствие указанного отличия могут получаться дискретные решения задач вычисления траекторий электронов в атомах [5].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Указаны весомые основания для взаимосвязи уравнений Риккати с уравнениями Томаса–Ферми. Приведены аргументы для использования теории автоматического управления в развитии теоретической физики в области динамики элементарных частиц.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Теория Томаса–Ферми. Википедия. https://ru.wikipedia.org/wiki/Теория Томаса — Ферми

[2] Леонардо Шаша. Исчезновение Майораны - http://coollib.net/b/251730/read

[3] Уравнение Риккати. Википедия. https://ru.wikipedia.org/wiki/Уравнение_Риккати

[4] Линейные оптимальные системы управления – Х. Квакернаак, Р. http://www.vuzllib.su/books/6638-Линейные_оптимальные_системы_управления_–_Х._Квакернаак,_Р

[5] V.A. Zhmud, S.V. Bugrov. The modeling of the electron movements inside the atom on the base of the non-quantum physics. Proceedings of the 18th IASTED International Conference “Applied

Simulation and Modeling” (ASM 2009). Sept. 7-9, 2009. Palma de Mallorka, Spain. p.17–23.

Вадим Аркадьевич Жмудь – заведующий кафедрой Автоматики НГТУ, профессор, доктор технических наук. Область научных интересов и компетенций – теория автоматического управления, электроника, лазерные системы, оптимизация, измерительная техника.
E-mail: oao_nips@bk.ru

Connection of the Thomas-Fermi and Riccati

V.A. ZHMUD

Abstract. Thomas-Fermi equation [1] is designed to describe the electronic structure of many-body systems. Writer Leonardo Sciascia has [2] describes a striking case with one of the young scientists in the field of theoretical physicists, Ettore Majorana, a disciple Enrico Fermi. This yang scientist, who died early, allegedly transformed Eq uation of Thomas-Fermi into Riccati equation to calculate the required coefficients of the table. The article discusses the likely source of kinship of these equations.

Key words: physics, the theory of automation, feedback, enerogetic levels, the Thomas-Fermi equation, Riccati equation, Marjorana, Fermi.