ЗАНЯТИЕ 7. 18.10.02

Интерполяция и экстраполяция
0. Нумерология констант
1. Склейка асимптотик
2. Два исторических примера

Приведем еще один пример эффективной интерполяционной формулы. В связи с предсказанием Менделеева (занятие 6, ★04) мы касались вопроса о возможности определения масс стабильных изотопов элемента #31. На такой вопрос в ядерной физике отвечают с помощью эмпирической формулы Вайцзекера - Ферми

$$M(A,Z) = 0.99391A - 0.00085Z + 0.014A^{2/3} + 0.000627\frac{Z^2}{A^{1/3}} + \\ + 0.083\frac{1}{A}\left(\frac{A}{2} - Z\right)^2 - (-1)^Z\left[\frac{1+(-1)^A}{2}\right]0.036A^{-3/4} \tag{1}$$

[1, с.52]. Первые четыре члена имеют наглядную интерпретацию: основной вклад в массу атома пропорционален числу нуклонов; второй член отвечает за разность масс нейтрона и протона с электроном $\left(m_n - \left(m_p + m_e\right) \approx 0.78\ \text{МэВ}\right)$; третий описывает поверхностную энергию, а четвертый - энергию кулоновского отталкивания протонов.

Для интересующих нас стабильных изотопов галлия формула дает значения, приведенные во втором столбце следующей таблицы.

Табл. 0

	"теор"	эксп [*Ga]	δ
Ga_{31}^{69}	68.9506019	68.925580 (3)	$3.6\cdot10^{-4}$
Ga_{31}^{71}	70.9504957	70.9247005 (25)	$3.6\cdot10^{-4}$

Они совпадают с экспериментальными с погрешностью $\delta \approx 0.04\%$. Третий член формулы (1) предоставляет экспериментальные данные для сравнения с ответом задачи P12 (из числа летних задач). Заметим, что формула (1) содержит всего шесть параметров, а описывает с хорошей точностью массы атомов более чем тысячи известных изотопов. ■

§0. Нумерология констант

Особый интерес представляет интерпретация фундаментальных изолированных чисел - безразмерных комбинаций фундаментальных констант, которых мы насчитали три (см. занятие 1):

Табл. 1 Безразмерные комбинации

название	*выражение*	*обозначение*	*значение*
Постоянная тонкой структуры	$\frac{e^2}{\hbar c}$	α	$7.36 \cdot 10^{-3} = \frac{1}{137}$
Отношение масс	$\frac{m}{m_p}$	ζ	$5.44 \cdot 10^{-4} = \frac{1}{1836}$
Большая постоянная	$\frac{e^2}{m^2 G}$	Ω	$4.16 \cdot 10^{42}$

Наибольшее число попыток вызвала постоянная тонкой структуры α. Некоторые подходы приведены в таблице 2.

Табл. 2 Нумерология α^{-1}

№	*автор*	*год*	*формула для α^{-1}*	*значение*
1	Дж. Джинс	1913	$16\pi^2$	157.9
2	А. Эддингтон	1920	$\frac{D^2(D^2+1)}{2}$ при $D=4$	136
3	Р.О. ди Бартини	1963	$\frac{e^7}{8}$	137.079
4	А.К. Лоренц	1974	$\frac{1}{4}\left(e^{2\pi} + 2e^{-\pi} + 4\pi\right)$	137.0361135
5	эксперимент	1973		137.036036(118)
6	эксперимент	1986		137.0359895(64)

Для отношения масс - параметра ζ - мне известно только одно предложение, ставшее популярным в физическом фольклоре в 1967 г.

Табл. 3 Нумерология ζ^{-1}

№	автор	год	формула для ζ^{-1}	значение
1	?	1967	$6\pi^5$	1836.118
2	эксперимент	1973		1836.15(2)
3	эксперимент	1986		1836.152701(37)

"Большая константа" настолько велика, что обычно предполагается, что с другими константами связан ее логарифм. В частности, соотношение

$$\ln\Omega \approx \frac{5}{7}\alpha^{-1} \qquad (2)$$

выполняется с точностью $\delta \approx 2\cdot 10^{-3}$.

§1. Склейка асимптотик

1. Определение. Функция $g(x)$ из класса эталонных функций называется *асимптотикой* $f(x)$ при $x \to 0$ (малых x) или при $x \to \infty$ (больших x), если

$$\lim_{x\to 0,\infty} \frac{f(x)}{g(x)} = 1$$

В класс эталонных входят степенные функции, экспонента (и логарифм) и тригонометрические функции.

Попросту говоря, асимптотика есть простая приближенная форма точного решения в узкой области значений аргумента.

В теоретической физике расчеты функции $f(x)$ часто ведутся с помощью методов, основанных на малости параметра x, позволяя определить асимптотику $g(x)$ искомой функции при малых x. Если одновременно известна асимптотика $G(x)$ при больших x, то приближенный вид $f(x)$ при произвольных значениях аргумента может быть найден построением ***простой*** функции $F(x)$, имеющей те же асимптотики $g(x)$, $G(x)$. Эту родственную интерполяции процедуру будем называть **склейкой асимптотик.**

Попросту говоря, принимается, что простая функция, имеющая правильные асимптотики, не сильно отличается от точного решения.

В теоретической физике именно склейку асимптотик и называют интерполяцией.

УПРАЖНЕНИЯ

№	g	G	F
1	x	x^2	$x+x^2$
2	x	$\frac{1}{x}$	$\frac{x}{1+x^2}$
3	$\frac{1}{x}$	$\frac{1}{x^2}$	$\frac{1}{x+x^2}$
4	1	$-\frac{1}{x^2}$	$\frac{1-x^2}{1+x^4}$ или $\frac{1}{1-x^2}$
5	$\frac{1}{x}$	e^{-x}	$\frac{1}{e^x-1}$

P28. В теоретической физике кубические уравнения вида

$$x^3+px+q=0$$

не принято решать по формулам Кардано: обычно ограничиваются асимптотическими выражениями для одного вещественного корня. Например, при $q\to 0$ $x\approx -q/p$, а при $q\to\infty$ $x\approx(-q)^{1/3}$. Склейкой асимптотик построить простую формулу для вещественного корня кубического уравнения, пригодную при любых p и q, и оценить ее точность.

§2. Два исторических примера

Разберем два выдающихся примера склейки асимптотик в теоретической физике.

★01. УРАВНЕНИЕ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСА (1873)

Уравнение состояния идеального газа запишем в виде

$$pv=T \tag{3}$$

где p - давление, v - объем, приходящийся на одну молекулу, T - абсолютная температура в энергетических единицах ($T\equiv k_B T$).

Ван - дер - Ваальс предложил его модификацию. В качестве отправной он принял атомную гипотезу в формулировке Фейнмана (см. занятие 1): "*все тела состоят из атомов - маленьких телец, которые находятся в непрерывном движении, притягиваются на небольшом расстоянии, но отталкиваются, если одно из них прижать к другому.*" [2] Следуя нашим целям и моде XIX века, будем называть маленькие тельца молекулами.

Ход рассуждений ВдВ был таков:

— Считая молекулы бесконечно жесткими, мы должны принять, что при большом давлении $p \to \infty$ объем вещества останется конечным (и равным b на одну молекулу). Поэтому в левой части надо заменить v на $(v - b)$.

— Наличие сил притяжения уменьшит давление газа: если энергия взаимодействия притягивающихся молекул - ε, то плотность такой энергии (а такую размерность имеет давление) пропорциональна энергии ε, объему u, в котором действуют силы притяжения, и квадрату концентрации молекул $n^2 = v^{-2}$: поправка к давлению есть $\Delta p = -av^{-2}$, где $a \propto \varepsilon u$. Поэтому в левой части надо заменить p на $\left(p + \dfrac{a}{v^2}\right)$.

Так ВдВ в 1873 г. получил носящее его имя уравнение

$$\left(p + \frac{a}{v^2}\right)(v - b) = T. \tag{4}$$

По современным ВдВ представлениям, он шел проторенным путем. Идея модификации уравнения состояния идеального газа $pv = T$ заменой множителей в левой части на асимптотически эквивалентные выражения была хорошо известна. Замена $v \to (v - b)$ была предложена Д. Бернулли (1738). Замена $p \to \left(p + av^{-2}\right)$ была предложена Э. Риттером (1846) и Дж. Ранкином (1854). Наконец, одновременное введение поправок и к v, и к p в форме уравнения состояния $(p + a)(v - b) = T$ было предложено Д. Гирном (1865). [3, с.210,211] Поправка Гирна по Риттеру - Ранкину не сулила новых результатов.

По сегодняшним представлениям, ВдВ правдоподобно аргументировал форму первой поправки к уравнению состояния идеального газа, то есть нашел второй член разложения уравнения состояния по степеням v^{-1},

$$p = \frac{T}{v} + \frac{bT - a}{v^2} + \sum_{k=3}^{\infty} \frac{?_k}{v^k}, \tag{5}$$

Первых двух членов совершенно недостаточно для описания при высоких плотностях (больших значениях v^{-1}).

Рассуждения ВдВ подвергались критике: отмечалось, что как притяжение, так и отталкивание молекул описываются одним потенциалом взаимодействия $U(r)$ - и потому нет оснований помещать поправки в разные члены.

Все это так. Но уравнение ВдВ, представляющее необоснованную и нелогичную интерполяцию уравнения состояния между областями малой и большой плотности именно в промежуточной области оказалось наиболее эффективным.

Интерпретация немонотонных изотерм газа ВдВ при низких температурах позволила описать фазовый переход газ-жидкость, включая наличие критической температуры (в то время это была новинка: открыта Т. Эндрюсом в 1861 г.)

С другой стороны, записанное в переменных, отнесенных к параметрам критической точки: $\tilde{p} = p/p_c$, $\tilde{v} = v/v_c$, $\tilde{T} = T/T_c$, уравнение ВдВ имеет одинаковый вид для всех газов:

$$\left(\tilde{p} + \frac{3}{\tilde{v}^2}\right)\left(\tilde{v} - \frac{1}{3}\right) = \frac{8}{3}\tilde{T}. \tag{6}$$

Этот *закон соответственных состояний* (1879) выполняется даже точнее, чем само уравнение ВдВ.

В 1910 году Ван дер Ваальсу была присуждена Нобелевская премия по физике. ■

★02. СПЕКТРАЛЬНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ АБСОЛЮТНО ЧЕРНОГО ТЕЛА - ФОРМУЛА ПЛАНКА (1900)

Абсолютно черное тело - модель, в которой тело считается полностью поглощающим все падающее на него излучение (Кирхгоф, 1860).

Отношение плотности энергии Δw_ν электромагнитных волн, имеющих частоты в интервале от ν до $\nu + \Delta\nu$, к величине элементарного спектрального интервала $\Delta\nu$, называется спектральным распределением энергии излучения:

$$B_\nu = \frac{\Delta w_\nu}{\Delta\nu}. \tag{7}$$

Функция B_ν была введена Вином (1894) для описания распределения энергии в спектре излучения (в полости внутри) абсолютно черного тела. Исключительность модели АЧТ именно в том, что она абсолютна и универсальна.

Рассматривая мысленный эксперимент, Вин доказал, что функция B_ν должна иметь форму

$$B_\nu = \nu^3 F\left(\frac{\nu}{T}\right), \tag{8}$$

где ν - частота, а T - температура (будем считать, в энергетических единицах).

Отсюда, в частности, сразу следует закон Стефана - Больцмана (см. занятие 2):

$$J = \int_0^\infty B_\nu d\nu = \int_0^\infty \nu^3 F\left(\frac{\nu}{T}\right) d\nu = T^4 \int_0^\infty x^3 F(x) dx \tag{9}$$

в предположении, что интеграл имеет конечное значение. Из эксперимента известно, что значение конечно: следовательно, функция $F(x)$ не может быть степенной - ее аргумент должен быть безразмерен и потому иметь структуру вида $\beta\nu/T$, где β - фундаментальная константа с размерностью $[\beta] = ET^{-1}$ - размерностью действия.

Исходя из произвольного предположения, что частота излучения молекулы газа и его интенсивность зависят только от скорости молекулы (по сегодняшним воззрениям это чушь), на основании закона распределения молекулярных скоростей Максвелла Вин пришел к формуле (закон излучения Вина, 1896)

$$B_\nu = \alpha\nu^3 \exp\left(-\frac{\beta\nu}{T}\right) \qquad (10)$$

которая хорошо согласовалась со всеми известными на тот момент данными.

Новые экспериментальные данные (Рубенс, Курльбаум, 1900) в области низких частот и высоких температур лучше согласовались с формулой

$$B_\nu = \gamma\nu^2 T, \qquad (11)$$

в пользу которой говорили и некоторые теоретические соображения.

P29. Оценить частоты ν, на которых могли проводиться эти измерения.

Планк объединил законы (10) и (11) (см. последнюю строчку в таблице упражнений по склейке асимптотик) формулой

$$B_\nu = \frac{\alpha\nu^3}{\exp\left(\frac{\beta\nu}{T}\right) - 1} \qquad (12)$$

(обнародована 19 октября 1900 г.) которая и поныне носит его имя и считается точной.

P30. Оценить границы применимости формулы Планка.

Параметр β Планк обозначил h; это обозначение сохранилось и поныне - h называется постоянной Планка.

▲ Часто (например, почти повсеместно в Интернете) историю открытия закона Планка связывают с формулой Релея - Джинса и "ультрафиолетовой катастрофой", излагая ее примерно так: "*Релей и Джинс в конце XIX века вывели из классической физики формулу, из которой следовала бесконечная полная мощность излучения из-за обилия высокочастотных - ультрафиолетовых - компонент. Эта ультрафиолетовая катастрофа была трагедией для физики, но Планк успешно ее ликвидировал.*" Против этой сказки говорит многое.

1) Эксперименту была прежде всего доступна именно ВЧ область, для которой имелся закон Вина (10), хорошо описывавший данные измерений.

2) Планк в первую очередь исходил из экспериментальных данных, работая в контакте с лучшими современными ему экспериментаторами. В этой ситуации чьи-либо теоретические измышления не могли на него серьезно повлиять.

3) Может быть, и не влияли вообще: Релей опубликовал свой вывод формулы типа (11) в июне 1900 г. Летом в университетах каникулы и отпуска: вряд ли Планк видел работу Релея до октября.

4) Вывод Релея был основан на предположении о равнораспределении энергии по степеням свободы. То, что такое распределение не универсально, было в то время известно - значения теплоемкостей многоатомных газов с ним не совмещались.

5) Релей вывел формулу типа (10) с ошибкой в числовом факторе (лишний множитель 8), что делало ее непригодной для описания экспериментальных данных. Ошибка была исправлена Джинсом в 1905 г. - много позже работ Планка.

6) О "катастрофе в ультрафиолетовой области" впервые сказал Эренфест в 1911 г. [4, с.28]]

▼ Для точности: Планк имел дело не непосредственно со спектральной плотностью B_ν, а с некоторой функцией температуры, которая для закона Вина (10) (малых x) имела вид $\Phi \sim x^{-1}$, а для закона (11) (больших x) вид $\Phi \sim x^{-2}$. Планк интерполировал асимптотики формулой (см. третью строчку таблицы упражнений по склейке асимптотик)

$$\Phi = \frac{a}{x(x+b)} ,$$

преобразование которой и дало формулу (12).

Историк пишет: "Эта интерполяция, незначительный математический прием, была одним из наиболее значительных и важных вкладов в науку, когда-либо сделанных в истории физики." [4, с.29].

В 1919 году Планку была присуждена Нобелевская премия по физике. ■

ЛИТЕРАТУРА

[1] Маляров В.В. Основы теории атомного ядра. - М.: Наука - Физматгиз, 1967. - 512 с.

[2] Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. В 9-ти тт. Т. 1 - М., Мир. 1965 - 208 с. - с. 23.

[3] Кипнис А.Я., Явелов Б.Е. Иоганнес Дидерик Ван-дер-Ваальс. -Л.: Наука, Л/О - 1985. - 309 с.

[4] Джеммер М. Эволюция понятий квантовой механики. - М.: Наука, 1985. - 334 с.

[*Ga] www.webelements.com/webelements/elements/text/Ga/isot.html

☯