Eur. Phys. J. D **10**, 307–308 (2000)

THE EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL D
EDP Sciences

Approximation rationnelle simplifiée des fonctions de Holtsmark et connexes

A. Poquérusse[a]

Laboratoire pour l'Utilisation des Lasers Intenses[b] (LULI), École Polytechnique, 91128 Palaiseau Cedex, France

Reçu le 25 août 1999

Abstract. A single rational fraction, valid for any value of the electric field, closely approximates the Holtsmark distribution. This also applies to its derivative and its cumulative.

Résumé. Une fraction rationnelle, unique pour toutes les valeurs du champ électrique, approche avec une grande précision la distribution de Holtsmark, ainsi que sa dérivée et sa cumulée.

PACS. 32.70.Jz Line shapes, widths, and shifts – 05.70.Ce Thermodynamic functions and equations of state – 52.25.Kn Thermodynamics of plasmas

1 Introduction

Dans les plasmas très denses, la forte proximité des différents noyaux ioniques peut imposer une approche multicentrique pour étudier les états liés électroniques. En particulier, la caractérisation des quasi-molécules transitoires à deux centres [1] constitue une étape appropriée. À l'inverse, dans les plasmas suffisamment ténus dont, comme les précédents, toute la gamme se rencontre aussi bien au laboratoire qu'en astrophysique, l'image d'atomes individualisables, plongés dans le micro-champ électrique dû au bain ionique environnant, conserve toute sa pertinence. Dans la limite où les corrélations entre particules deviennent négligeables, ce micro-champ obéit à la distribution de probabilité bien connue de Holtsmark [2]. Outre qu'elle intervient dans la théorie standard de l'élargissement Stark des raies spectrales [3], il se révèle utile de connaître sa cumulée pour estimer les effets assimilables à un abaissement de l'énergie d'ionisation [4] et influant sur la fonction de partition atomique, ainsi que l'équation d'état et d'autres fonctions thermodynamiques [5], qui font de plus appel à sa dérivée. Le présent article a pour objet de présenter des approximations analytiques simples et précises des trois fonctions ainsi distinguées.

[a] e-mail: `poq@greco2.polytechnique.fr`

[b] UMR 7605 CNRS-CEA-École Polytechnique-Université Paris 6.

2 Notations et survol des types d'approximation

Pour simplifier la suite, nous adopterons les notations systématiques suivantes :

$$H_2(x) = (2/\pi)x \int_0^\infty \mathrm{d}t\; t \sin xt \; \mathrm{e}^{-t^{3/2}} \tag{1}$$

pour la fonction de Holtsmark,

$$H_1(x) = \mathrm{d}H_2/\mathrm{d}x \tag{2}$$

pour sa dérivée, et

$$H_3(x) = \int_0^x \mathrm{d}t\, H_2(t) \tag{3}$$

pour sa cumulée.

Les approximations données par [4] mériteraient sans doute de gagner quelque peu en simplicité, mais peuvent se révéler suffisantes pour un certain nombre d'applications et ont l'avantage d'étendre le domaine d'emploi à des particules de charge unitaire modestement corrélées. Les approximations de [6] sont beaucoup plus précises et vont nous inspirer pour les formules présentées ci-dessous. En effet, les deux approximations rationnelles distinctes (en x^2 et $x^{3/2}$), de part et d'autre d'une abscisse de commutation, seront ici remplacées par une fraction rationnelle unique en $x^{1/2}$ sur tout le demi-axe réel, joignant sans heurt les deux régimes de bas et haut champ.

Tableau 1. Exposants et coefficients à introduire dans la formule (4).
[Common exponents and specific coefficients introduced in equation (4) for, respectively, the derivative, the function itself and the cumulative of the Holtsmark distribution.]

n	A_n	C_{1n}	C_{2n}	C_{3n}
1	0	44 987 796	73 423 480	2 372 000
2	4	−5 991 955,8	3 253 057	−11 455,265
3	8	−3 523 756,5	632 822,5	1 991,225 7
4	12	−248 928,52	30 860,96	477,989 01
5	15	−36 234,808	4 569,02	1 068,397 3
6	18	−4 218,163	458,696	78,370 666 2
7	21	−470,293 46	102,264 4	60,915 074 1
8	24	−30,557 928	0	0
9	27	−3,740 083 8	1,496 033 55	1
10	0	53 000 000	173 000 000	16 766 680
11	4	42 021 592	87 768 390	4 577 077
12	8	15 271 497	20 921 115	404 721
13	12	3 433 238	3 120 395	8 458
14	15	0	0	7 441
15	16	531 652	335 104	0
16	18	0	0	2 476
17	20	61 548	27 366	0
18	21	0	0	1 387
19	24	5 046	2 429	150
20	27	357	−29	64,456 2
21	30	94	80	0,997 356
22	33	0	−5,106 47	1
23	36	1	1	0

3 Les présents résultats

Les trois cas $i = 1$ à 3 se traduisent par la formule :

$$H_i(x) = x^i \frac{\sum_{n=1}^{9} C_{\mathrm{in}} x^{A_n/2}}{\sum_{n=10}^{23} C_{\mathrm{in}} x^{A_n/2}} + E_i(x). \tag{4}$$

Le tableau 1 donne les exposants choisis et les coefficients associés, qui ont été obtenus par optimisation non linéaire et suppression des décimales superflues. Les bornes d'erreur sont :

$$|E_1(x)| \leq 6{,}0 \times 10^{-8} H_2(x)/x, \tag{5}$$
$$|E_2(x)| \leq 8{,}4 \times 10^{-9} H_2(x), \tag{6}$$
$$|E_3(x)| \leq 9{,}2 \times 10^{-10} H_3(x), \tag{7}$$

soit en résumé une précision "relative" meilleure que 10^{-6-i}, compte tenu du changement de signe de H_1.

Tableau 2. Valeurs pour un contrôle éventuel.
[Values allowing a numerical check (with E_i set to 0).]

	exact	(4) sans E_i
$H_1(3)$	−0,138 487 053 76	−0,138 487 054 48
$H_2(3)$	0,176 062 927 235 6	0,176 062 926 999 7
$H_3(3)$	0,707 747 851 183 7	0,707 747 850 905 5

On arrive donc à la même précision que [6] avec trois fois moins de coefficients numériques, l'erreur étant bien sûr étalée un peu partout au lieu d'être très concentrée autour de l'abscisse de commutation. On remarque aussi qu'en opposition à la méthode systématique cherchant les approximants de Padé, il a fallu ici "deviner" la configuration des puissances, sans garantie d'être effectivement parvenu à la meilleure, ni d'ailleurs aux coefficients réellement optimaux à configuration donnée.

Les valeurs exactes ayant servi à établir (5–7) résultent des développements en séries rappelés en [6] : convergente calculée en quadruple précision (32 décimales) si $x < 6{,}4$; sinon asymptotique (divergente tronquée au terme non nul minimal en valeur absolue, avec 16 décimales). Ceci assure une précision, "relative" comme plus haut, de l'ordre de 10^{-12} pour H_1 et 10^{-14} pour les deux autres. Afin de faciliter d'éventuelles vérifications, le tableau 2 fournit un échantillon de valeurs numériques, dont les décimales seraient évidemment surabondantes pour employer (4) en pratique.

4 Conclusion

En étudiant des plasmas peu denses (enveloppes stellaires, décharges en tous genres avec ou sans confinement magnétique, zones détendues en confinement inertiel...), on peut avoir besoin d'une bonne précision pour calculer la fonction de Holtsmark, sa dérivée ou sa cumulée. Les approximations présentées ici constituent alors un choix particulièrement simple et économique.

Bibliographie

1. P. Gauthier, P. Sauvan, P. Angelo, S. Alexiou, E. Leboucher-Dalimier, A. Poquérusse, A. Calisti, B. Talin, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **58**, 597 (1997).
2. J. Holtsmark, Ann. Physik **58**, 577 (1919).
3. H.R. Griem, *Spectral line broadening by plasmas* (Academic Press, New York, 1974)
4. L.G. D'yachkov, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **59**, 65 (1998).
5. W. Däppen, D. Mihalas, D.G. Hummer, B. Weibel-Mihalas, Astrophys. J. **332**, 261 (1988).
6. D.G. Hummer, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **36**, 1 (1986).