

УДК 519.6

АППРОКСИМАЦИЯ ИНТЕГРАЛОВ С ПЕРЕМЕННЫМИ ПРЕДЕЛАМИ. ВЫЧИСЛЕНИЕ ФУНКЦИИ ДЕБАЯ ТРЕТЬЕГО ПОРЯДКА

В. Г. Елисеев, Г. М. Елисеев
(Санкт-Петербургский ГУ, РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Предлагается алгоритм построения аппроксимации функций, представляющих собой произведение интеграла с переменными пределами и другой, более простой функции, эрмитовыми интерполяционными в среднем локальными полиномиальными сплайнами четвертой степени. С помощью пакета Maple получены формулы для построения сплайна. В качестве примера построена пятизначная сплайн-аппроксимация функции Дебая третьего порядка. Дается текст программ на Фортране для расчета значений функции Дебая.

Введение

На практике возникает потребность вычисления значений функций, в представление которых входит в качестве сомножителя сходящийся интеграл с переменным верхним пределом:

$$F(x) = \Phi(x) \int_a^x f(t) dt. \quad (1)$$

Вообще говоря, нет никаких препятствий для рассмотрения функций, у которых оба предела интегрирования переменные. Тем не менее для простоты ограничимся только функциями вида (1), которые обычно встречаются на практике. Большое количество таких функций табулировано, например в книге [1], но часто непосредственно использовать таблицы на ПЭВМ затруднительно.

В данной статье рассматривается задача о построении сплайн-аппроксимации функций вида (1) и их производных при всех значениях аргумента x . Будем предполагать, что определение сплайна и некоторые простейшие свойства его читателю известны (см., например, [2], [3]). Производные функции $F(x)$ выражаются через нее саму. Например, для первой производной имеем

$$F'(x) = \Phi'(x) \int_a^x f(t) dt + \Phi(x) f(x). \quad (2)$$

Пусть функция $\Phi(x)$ имеет достаточно простое аналитическое выражение, тогда для вычисления значений и функции, и производных требуется построить аппроксимацию лишь интегрального множителя $I(x) = \int_a^x f(t) dt$. Если функция $F(x)$ имеет асимптотики, которые просты в вычислительном отношении, то задача сводится к построению сплайн-аппроксимации $I(x)$ на некотором конечном интервале. Для аппроксимации будем использовать полиномиальные сплайны как самые дешевые в смысле затрат времени центрального процессора. Простейший подход — применить классические интерполяционные кубические сплайны [2, 3]. Так, например, в [4] с их помощью построена сплайн-аппроксимация функции Дебая

$$D_k(x) = \frac{k}{x^k} \int_0^x \frac{t^k dt}{e^t - 1} \quad (3)$$

третьего порядка ($k = 3$).

Наличие интеграла в (1) наводит на мысль использовать при построении сплайна условия интерполяции в среднем [4, 5], когда на некоторой сетке

$$\pi : \quad x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n \quad (4)$$

задана гистограмма функции

$$S_i = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(t) dt, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (5)$$

Порядок аппроксимации сплайна можно существенно повысить, если на сетке (4) дополнительно задать таблицу функции $f(x)$ и нескольких ее первых производных (задача интерполяции по Эрмиту):

$$y_i^{(k)} = f^{(k)}(x_i), \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad k = 0, 1, \dots, K. \quad (6)$$

Тогда на каждом частичном интервале $\pi_i = [x_{i-1}, x_i]$ будем иметь $2(K + 1) + 1$ условий интерполяции и, следовательно, порядок сплайна не может быть ниже $2(K + 1)$. Если взять в простейшем случае $K = 1$, то можно построить *интерполяционный в среднем эрмитов сплайн четвертой степени* $S_4(x)$. Поскольку на каждом π_i задано пять условий аппроксимации и полином четвертой степени имеет пять коэффициентов, этот сплайн *локальный*.

В качестве примера опишем построение сплайн-аппроксимации функции Дебая третьего порядка с использованием сплайна $S_4(x)$. Эта функция часто встречается в приложениях, например при описании термодинамических свойств конденсированных тел. Авторам известны две недавние работы [6] и [7], в которых были построены аппроксимации функции Дебая третьего порядка. В [6] достигнута относительная точность $\sim 7 \cdot 10^{-2}$, в [7] $\sim 10^{-3}$. Относительная точность сплайн-аппроксимации с пятью узлами, построенной в настоящей работе, на порядок выше. Если увеличить количество узлов сплайна, можно на порядки повысить точность аппроксимации.

Формулы, необходимые для построения сплайна $S_4(x)$, выведены с помощью программы *Spl_Mapl*, написанной на языке пакета Maple [8]. Чтобы обеспечить расчет производной по формуле (2), фактически построена сплайн-аппроксимация приведенной функции Дебая $d_3(x) = \int_0^x \frac{t^k dt}{e^t - 1}$ — интегрального множителя в (3).

1. Сплайны четвертой степени

В работе [9] дана классификация регулярных задач аппроксимации сплайнами третьего и четвертого порядков. Задача аппроксимации (5), (6) сплайнами при $K = 1$ имеет номер 24 (см. табл. 3 в [9]). Выведем необходимые формулы.

В соответствии с методом, впервые кратко изложенном в [4], запишем сплайн в *представлении заданных величин*, т. е. в выражении для сплайна на каждом π_i явно выделим заданные величины (5) и (6):

$$S_4(x) = y_{i-1}P_{1i}(x) + y_iP_{2i}(x) + y'_{i-1}P_{3i}(x) + y'_iP_{4i}(x) + S_iP_{5i}(x). \quad (7)$$

Функции $P_{ji}(x)$ ($j = 1, 2, \dots, 5$), очевидно, являются полиномами четвертой степени:

$$P_{ji}(u_i) = \sum_{k=0}^4 a_{kji} u_i^k,$$

где $u_i = x - x_{i-1}$. Если вместо x_i в качестве аргумента берется разность u_i , промежуточные выкладки и окончательные формулы несколько проще. Сплайн локален, поэтому построение его сводится к определению коэффициентов a_{kji} . Значения этих коэффициентов в силу представления сплайна (7) никак не зависят от вида аппроксимируемой функции.

Рассмотрим условие интерполяции $S_4(x_{i-1}) = y_{i-1}$ на левом конце i -го интервала π_i . Это равенство должно быть верным при любом значении y_{i-1} , что возможно, если только функции $P_{ji}(u_i)$ будут удовлетворять следующим условиям:

$$P_{1i}(0) = 1; \quad P_{2i}(0) = 0; \quad P_{3i}(0) = 0; \quad P_{4i}(0) = 0; \quad P_{5i}(0) = 0. \quad (8)$$

Получены первые пять уравнений для определения коэффициентов полиномов $P_{ji}(u_i)$. Остальные четыре условия аппроксимации (5), (6) на π_i дадут еще по пять уравнений типа (8). Все эти системы можно кратко записать в виде

$$P_{ji}(0) = \delta_{1j}; \quad P_{ji}(h_i) = \delta_{2j}; \quad P'_{ji}(0) = \delta_{3j}; \quad P'_{ji}(h_i) = \delta_{4j}; \quad \int_{x_{i-1}}^{x_i} P_{ji}(x) dx = \delta_{5j}, \quad (9)$$

где δ_{kj} — символ Кронекера. Полагая $j = 1, 2, \dots, 5$, получаем пять систем линейных алгебраических уравнений для определения коэффициентов функций $P_{ji}(u_i)$.

Авторы получили решение системы (9) с помощью программы *Spl_Mapl*, написанной на языке пакета выполнения аналитических выкладок Maple. В программе *Spl_Mapl* система (9) генерируется и решается автоматически. Некоторые результаты вычислений с помощью *Spl_Mapl* получены в виде следующих формул:

$$\det A = \det \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ h^4 & h^3 & h^2 & h & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 4h^3 & 3h^2 & 2h & 1 & 0 \\ \frac{1}{5}h^5 & \frac{1}{4}h^4 & \frac{1}{3}h^3 & \frac{1}{2}h^2 & h \end{pmatrix} = -\frac{1}{30}h^9. \quad (10)$$

$$\begin{aligned} P_1(u) &= -\frac{15u^4}{h^4} + \frac{32u^3}{h^3} - \frac{18u^2}{h^2} + 1; & P_2(u) &= -\frac{15u^4}{h^4} + \frac{28u^3}{h^3} - \frac{12u^2}{h^2}; \\ P_3(u) &= -\frac{5u^4}{2h^3} + \frac{6u^3}{h^2} - \frac{9u^2}{2h} + u; & P_4(u) &= \frac{5u^4}{2h^3} - \frac{4u^3}{h^2} + \frac{3u^2}{2h}; \\ P_5(u) &= \frac{30u^4}{h^5} - \frac{60u^3}{h^4} + \frac{30u^2}{h^3}. \end{aligned} \quad (11)$$

В формулах (10), (11) индекс i опущен. Полиномы $P_j(u)$ в (11) записаны по убывающим степеням u .

Очевидно, что определитель (10) с указанным значением является определителем системы (9) при всех j . Он отличен от нуля, поэтому решение неоднородной системы (9) при всех j существует и единственно. Соответственно форма записи сплайна в представлении заданных величин тоже существует и единственна.

Таким образом, функциональный вид локального интерполяционного в среднем полиномиального эрмитова сплайна четвертой степени установлен.

2. Асимптотики функции Дебая

Асимптотики функции Дебая при всех $k > 0$ при малых значениях аргумента можно получить следующим образом.

Разложим экспоненту под знаком интеграла в (3) в ряд, сократим на t и используем биномиальный ряд $(1+x)^m$ при $m = -1$. Получим

$$D_k(x) = \frac{k}{x^k} \int_0^x t^{k-1} \left(1 - \frac{t}{2} + \frac{t^2}{12} - \frac{t^4}{720} + \dots \right) dt.$$

Проинтегрировав, найдем требуемую асимптотику:

$$D_k(x) = 1 - \frac{k}{k+1} \frac{x}{2} + \frac{k}{k+2} \frac{x^2}{12} - \frac{k}{k+4} \frac{x^4}{720} + \dots \quad (12)$$

Из формулы (12) видно, что при $k > 0$ существует предел $\lim_{x \rightarrow 0} D_k(x) = 1$, т. е. функция Дебая при $x \rightarrow 0$ имеет устранимую особенность $D_k(0) = 1$.

Получим асимптотику при больших значениях аргумента: $x \rightarrow \infty$.

Интеграл в (3) разобьем на два слагаемых:

$$\int_0^x f(t) dt = \int_0^\infty f(t) dt - \int_x^\infty f(t) dt. \quad (13)$$

Первый интеграл в правой части при $k > 0$ равен произведению гамма- и дзета-функций, которые при целых нечетных значениях k дают

$$J_{2k-1} = \int_0^\infty f(t) dt = (-1)^{k+1} \frac{(2\pi)^{2k}}{4\pi} B_{2k}.$$

Здесь B_{2k} — числа Бернулли. В частности, при $k = 2$ имеем $J_3 = \pi^4/15$, что дает асимптотику нулевого приближения.

Получим формулу для вычисления второго интеграла в правой части (13). Дробь под знаком интеграла разложим в биномиальный ряд по степеням экспоненты:

$$\int_x^\infty \frac{t^k dt}{e^t - 1} = - \int_x^\infty e^{-t} t^k (1 + e^{-t} + e^{-2t} + \dots) dt.$$

Интегрируя почленно, получаем сумму интегралов вида

$$\int_x^\infty t^k e^{-nt} dt = \frac{1}{n^{k+1}} \Gamma(k+1, nx), \quad (14)$$

где $\Gamma(k+1, nx)$ — дополнительная неполная гамма-функция. При целых k выражение (14) упрощается:

$$\int_x^\infty t^k e^{-nt} dt = e^{-nx} \left[\frac{x^k}{n} + \sum_{m=1}^k \frac{k(k-1)\dots(k-m+1)}{n^{m+1}} x^{k-m} \right].$$

В частности, для функции Дебая третьего порядка (при $k = 3$) получим

$$D_3(x) = \frac{\pi^4}{5x^3} - 3 \sum_{n=1}^\infty \frac{e^{-nx}}{n} \left[1 + \frac{3}{nx} + \frac{6}{(nx)^2} + \frac{6}{(nx)^3} \right]. \quad (15)$$

3. F-таблица функции Дебая третьего порядка

Опорные таблицы величин (5), (6) функции $d_3(x)$ и таблицы (6) функции $D_3(x)$ сосчитаны с десятью значащими цифрами в интервале $[0,5; 10]$ с шагом 0,05. Точность расчета значений $D_3(x)$ была проконтролирована по шестизначной таблице [1, с. 788].

Авторы поставили задачу построить аппроксимацию с точностью расчета значений функции Дебая и производных не менее пяти значащих цифр. В асимптотике (12) учтены члены до четвертого порядка, а в (15) — слагаемые с экспонентой первой и второй степени. По опорной таблице функции Дебая найдено, что области определения асимптотик $d_3(x)$ и $D_3(x)$ при малых значениях x — отрезки $[0; 1]$ и $[0; 0,85]$ соответственно, а при больших аргументах — $[4,45; +\infty]$ и $[4,2; +\infty]$. Таким образом, на отрезке $[0,85; 4,45]$ надо построить сплайн, т. е. найти узлы неравномерной сетки (4) так, чтобы точность расчета значений функции по сплайну составляла пять знаков. Абсолютная погрешность сплайн-аппроксимации обеих функций должна быть меньше 0,000005.

Подбор узлов локального сплайна был выполнен с помощью программы *Opt_Sp1_Loc*, написанной на Фортране. Алгоритм подбора прост.

Узел $x_0 = 0,85$ сетки (4), в котором происходит "склейка" сплайна и асимптотики, фиксирован. Берем следующий пробный узел $x_1 = x_0 + 0,1$ со сдвигом на два шага опорной таблицы. По значению функции Дебая в пропущенном табличном узле $x_0 + 0,05$ вычисляем абсолютную погрешность аппроксимации. Если она меньше 0,000005, делаем сдвиг на шаг опорной таблицы вправо и повторяем расчет. Движемся вправо по оси абсцисс, пока погрешность не превысит предельную. Узел x_1 с предыдущего шага приписываем сетке (4). Затем подбираем третий узел, полагая сначала $x_2 = x_1 + 0,1$. И так далее, пока на последнем интервале $[x_{n-1}, x_n]$ узел x_n не окажется равным 4,45. На этом подбор узлов прекращается.

Сплайн удалось построить на сетке с пятью узлами. На самом деле пришлось ограничиться абсолютной погрешностью 0,000006, чтобы не добавлять лишнего, шестого узла.

На Фортране написана F-таблица [10] функции Дебая (с одинарной точностью) `function Deb3_S4 (X, Deb3_S4_m)`, текст которой вместе с необходимыми подпрограммами дается в Приложении. В программе в списках операторов DATA хранятся коэффициенты сплайна в представлении заданных величин, в массиве `x_s` — узлы сетки (4), в `Yi` — значения интегралов (5), в `Y` и в `YD1` — значения подынтегральной функции (3) и ее производной соответственно.

Сплайн построен по гистограмме, а функция $d_3(x)$ вычисляется с накоплением. Отметим, что в точке x , попадающей в некоторый интервал π_i , по сплайну вычисляется интеграл $\int_{x_{i-1}}^x f(t)dt$. К

нему надо добавить число $\int_0^{x_{i-1}} f(t)dt$, чтобы получить значение первообразной $d_3(x)$. Интегралы на интервалах $[0, x_{i-1}]$ хранятся в массиве `FD_c`. Расчет значений первообразных делается в подпрограмме `S4_H1_I`, а в подпрограмме-функции `lim3ab` выполняется поиск интервала, в который попало текущее значение x .

Функция `Deb3_S4` возвращает значение $D_3(x)$ в точке x , а в качестве одного из ее параметров `Deb3_S4_m` передается значение функции $d_3(x)$. Поэтому программа тривиально реализует расчет производных по формуле (2).

Приложение. F-таблица функции Дебая третьего порядка

```
function Deb3_S4 (X,Deb3_S4_m)
dimension X_s(5),Yi(5),Y(5),YD1(5),FD_c(5)
data x_s/0.85, 1.60, 2.40, 3.30, 4.45/
data Yi /0.00000000E+0,5.69020033E-1,9.89780843E-1, 1.26604247E+0,
, 1.40889335E+0/
data Y /4.58423108E-1,1.03616655E+0,1.37920356E+0, 1.37623012E+0,
, 1.04128933E+0/
data YD1/8.17343771E-1,6.44526303E-1,2.07199380E-1,-1.77815422E-1,
```

```

,      -3.51600945E-1/
dataFD_c/1.46789879E-1,7.15809882E-1,1.70559072E+0, 2.97163320E+0,
,      4.38052654E+0/
if (X.lt.0.85) go to 501
if (X.gt.4.45) go to 503
call S4_H1_I (X_s,Yi,Y,YD1,FD_c,X,Deb3_S4_m,5)
go to 555
501 X2=X*X
   Deb3_S4_m=-((((-3.6743092e-6*x2+1.98412698e-4)*x2-0.0166666667)*x
+      +0.1250000)*x -0.3333333333)*x2*x
   go to 555
503 X2=X*X
   ex=EXP(-X)
   Deb3_S4_m= 6.49393940-(((x+3.00)*x+6.)*x+6.)
+      +(((0.5*x+0.75)*x+0.75)*x+0.375)*ex)*ex
555 Deb3_S4 =Deb3_S4_m *3./(x*x*x)
   return
   end

subroutine S4_H1_I (X,Yi,Y,YD1,FD_c,x0,R,N)
dimension X(N),Yi(N),Y(N),YD1(N),FD_c(N)
common /N2S3E8/ XT,YT,IT,JT,JJ1
I1 =LIM3AB (X,X0,N,IT)-1
H =X(IT)-X(I1)
HI =1./H
HI2=HI*HI
U =(X0-X(I1))*HI
U2 =U*U
H2 =H*H
P1i=((-3.0*U+8.0)*U-6.0)*U2+1.)*U*H
P2i= ((-3.0*U+7.0)*U-4.0)*U*U2*H
P3i=((-0.5*U+1.5)*U-1.5)*U+0.5)*U2*H2
P4i= ((+0.5*U-1.0)*U+0.5)*U*U2*H2
P5i= ((+6.0*U-15.)*U+10.)*U*U2
R=P1i*Y(I1)+P2i*Y(IT)+P3i*YD1(I1)+P4i*YD1(IT)+P5i*Yi(IT)+FD_c(I1)
return
end

function lim3ab (x,x0,n,i3)
dimension x(n)
if (i3.le.1 .or. i3.gt.n) i3=2
10 do 20 i=i3,n
   if (x(i)-x0) 20,20,30
20 continue
   i=n
30 if (i.eq.2 .or. x(i-1).le.x0) go to 40
   i3=2
   go to 10
40 i3=i
   lim3ab=i3
return
end

```

Список литературы

1. Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица, И. Стигана. М.: Наука, 1979.
2. Алберг Дж., Нильсон Э., Уолли Дж. Теория сплайнов и ее приложения. М.: Мир, 1972.
3. Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошниченко В. Л. Методы сплайн-функций. М.: Наука, 1980.
4. Елисеев Г. М. L-сплайны, порождаемые уравнениями с постоянными коэффициентами // Физическая механика неоднородных сред. Новосибирск: СО АН СССР, ИТПМ, 1984. С. 146—153.
5. Елисеев Г. М. Построение интерполяционных в среднем сплайнов второй степени // Числ. методы мех. спл. среды. 1978. Т. 9, № 6. С. 63—68.
6. Лабутин С. А. Пугин М. В. Приближенные формулы для вычисления функции Дебая // Изв. высших учеб. заведений. Физика. 1996. № 2. С. 103—104.
7. Прут В. В. Полуэмпирическая модель уравнения состояния конденсированных сред // Теплофизика высоких температур. 1995. Т. 45, № 5. С. 713—726.
8. Матросов А. Марле 6. Решение задач высшей математики и механики. С.-Пб.: БХВ-Петербург, 2001.
9. Елисеев Г. М. Термодинамическая согласованность и сплайн-уравнение состояния // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 1993. Вып. 1. С. 35—45.
10. Елисеев Г. М. О табулировании функций и создании архивов данных. Сплайн для комптоновских сечений // Там же. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1979. Вып. 4(6). С. 64—69.

Статья поступила в редакцию 18.05.06.
