УДК 519.6

РАСЧЕТ МНОГОГРУППОВЫХ РОССЕЛАНДОВЫХ И ПЛАНКОВЫХ ПРОБЕГОВ ФОТОНОВ ПО СТИЛТЬЕСУ

Г. М. Елисеев, В. Г. Елисеев, Н. Н. Жильникова, П. Г. Кузнецов, А. В. Тихонов
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Дается описание метода вычисления квадратур произведения двух функций с интегрированием по Стилтьесу. Функция интегрирования по Стилтьесу представляется в виде риманова интеграла одной из функций с переменным верхним пределом. Она аппроксимируется полиномиальным эрмитовым интерполяционным в среднем локальным сплайном четвертого порядка.

Применение метода для расчета многогрупповых пробегов фотонов в веществе с весовыми функциями Росселанда и Планка сокращает время расчета примерно на 30 %. Приводятся тексты программ на Фортране для вычисления значений интегралов этих весовых функций.

Введение

На практике часто приходится вычислять интеграл произведения двух функций

$$A = \int_a^b g\,(x)\, f\,(x)\, dx. \qquad (1)$$

Оба или один предел интегрирования могут быть конечными или бесконечными. Одну из функций в (1) считают весовой функцией (*весом*). Весовая функция обеспечивает сходимость интеграла и позволяет построить высокоточные квадратуры [1]. Весовая функция может иметь некоторый особый физический или математический смысл. Например, в теории вероятностей, если x — случайная величина, то $f(x)$ — дифференциальный закон ее распределения на интервале $[a, b]$.

Риманов интеграл (1) можно переписать в виде интеграла Стилтьеса

$$A = \int_a^b g\,(x)\, dF\,(x), \qquad (2)$$

тогда функция $F(x)$ будет интегральным законом распределения

$$F\,(x) = \int_a^x f\,(x)\, dx.$$

Дальнейшее рассмотрение имеется, например, в учебнике [2] (гл. 3).

Если весовая функция $f(x)$ постоянно используется и имеет сложное в вычислительном отношении выражение, то может оказаться полезной ее аппроксимация. В настоящей статье поставлена и решена задача о вычислении интегралов (1) с использованием сплайн-аппроксимации $F(x)$. Показано, что применение аппроксимации $F(x)$ экономичнее по времени счета, чем $f(x)$. Преимущество такого подхода показано на примере двух весовых функций, которые используются при задании матриц пробегов фотонов l в веществе при численном решении уравнения переноса лучистой энергии.

Пробег фотонов l зависит от частоты x, температуры T, плотности вещества ρ. Будем интересоваться только зависимостью от частоты. Пусть задана некоторая сетка по частоте

$$\pi: \qquad x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n. \tag{3}$$

В многогрупповом приближении численного решения уравнения переноса необходимо задать трехмерные таблицы (матрицы) пробегов фотонов в веществе — таблицы интегралов Римана вида

$$l_i(T,\rho) = \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} l(T,\rho,x)\, f(x)\, dx \Bigg/ \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\, dx, \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{4}$$

Конкретизировать сетки по температуре и плотности, на которых заданы матрицы l_i, не требуется. Эти переменные далее указывать не будем. В качестве веса в (4) используем функции Планка или Росселанда [3]

$$f_P(x) = \frac{x^3 \exp(-x)}{1 - \exp(-x)}; \quad f_R(x) = \frac{x^4 \exp(-x)}{(1 - \exp(-x))^2}. \tag{5}$$

Пробег фотонов с ростом частоты возрастает пропорционально кубу частоты. Поэтому весовые функции за счет экспоненты в числителе обеспечивают сходимость интегралов по частоте от нуля до бесконечности. Соответствующие значения называют средними пробегами по Росселанду или Планку.

Выражение (4) для многогрупповых пробегов фотонов l_i^R с осреднением по Росселанду можно переписать, используя интеграл Стилтьеса (2):

$$l_i^R = \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} l(x)\, dR(x) \Bigg/ \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} dR(x) = \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} l(x)\, dR(x) \Bigg/ (R(x_i) - R(x_{i-1})). \tag{6}$$

С весовой функцией Планка усредняют обратные пробеги. По Стилтьесу

$$l_i^P = (P(x_i) - P(x_{i-1})) \Bigg/ \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{dP(x)}{l(x)}. \tag{7}$$

В [4] таблицы l_i^P, l_i^R названы гистоспектрами Планка и Росселанда соответственно. В настоящей статье приводятся F-таблицы[1] аппроксимации с помощью полиномиальных сплайнов интегралов, которые являются функциями интегрирования в (6), (7):

$$P(x) = \int\limits_0^x \frac{t^3 \exp(-t)\, dt}{1 - \exp(-t)}, \quad R(x) = \int\limits_0^x \frac{t^4 \exp(-t)\, dt}{(1 - \exp(-t))^2}. \tag{8}$$

Преимущества расчета гистоспектров в форме (6), (7) по сравнению с классическим (4) через интеграл Римана таковы. Пробеги $l(x)$ являются разрывными, быстро осциллирующими функциями [3, 4], поэтому $l(x)$ всегда задают на сетке $\tilde{\pi}$ по частоте с шагом, существенно меньшим, чем минимальный шаг сетки π. Все интегралы Римана вычисляются с помощью формулы трапеций на сетке $\tilde{\pi}$, но в (6), (7) используется на одну квадратуру меньше. Если построена, например, полиномиальная сплайн-аппроксимация функций (8), то вычисление интегралов $l(x)$ по квадратуре Стилтьеса экономичнее, чем по Риману, поскольку расчет по полиномиальному сплайну быстрее, чем по формулам (5).

[1] F-таблицей называется подпрограмма на Фортране, в списках операторов `DATA` которой задается табулируемая информация [5]. В ней же могут быть записаны необходимые фортранные операторы (см. также [6]).

Идея аппроксимации функций (8) проста [6]. Находим асимптотики функции (8) при больших и малых значениях аргумента, а в промежуточной области используем сплайн-аппроксимацию. Ранее в технологии MIXER [7] расчет многогрупповых пробегов выполнялся с интегрированием по Риману. Теперь реализована возможность использования F-таблиц с интегрированием по Стилтьесу.

Интерполяционные в среднем эрмитовы сплайны

Использование дополнительной табличной информации о приближаемой функции повышает точность аппроксиманта. Поставим задачу аппроксимации так. Пусть на сетке (3) заданы таблицы

$$y_i^{(k)} = f^{(k)}(x_i), \qquad i = 0, 1, \ldots, n, \qquad k = 0, 1 \tag{9}$$

и гистограмма

$$S_i = \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} f(t)dt, \qquad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{10}$$

На каждом частичном интервале $\pi_i = [x_{i-1}, x_i]$ имеем пять условий аппроксимации. По таким данным можно построить эрмитов интерполяционный в среднем сплайн четвертой степени [6]. Такой сплайн локальный, поскольку для определения коэффициентов его звена на некотором интервале π_i не требуется информации с соседних интервалов. В статье [6] описана процедура построения сплайна в *представлении заданных величин*:

$$S_4\left(x\right) = y_{i-1}P_{1i}\left(x\right) + y_i P_{2i}\left(x\right) + y_{i-1}^{'}P_{3i}\left(x\right) + y_i^{'}P_{4i}\left(x\right) + S_i P_{5i}\left(x\right). \tag{11}$$

Здесь P_{ji} — полиномы четвертой степени. На каждом π_i явно выделены величины (9), (10), поэтому полиномы P_{ji} имеют некоторый стандартный вид, никак не зависящий от вида приближаемой функции. Коэффициенты этих полиномов были найдены и приведены в [6], поэтому здесь выписывать их не будем.

Асимптотики интегралов весовых функций

Асимптотики при малых значениях аргумента получим, интегрируя разложение функций (5) в ряд Тэйлора. Учитывая первые четыре слагаемые, получаем

$$P\left(x\right) \approx \frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{8}x^4 + \frac{1}{60}x^5 - \frac{1}{5040}x^7; \quad R\left(x\right) \approx \frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{60}x^5 + \frac{1}{1680}x^7 - \frac{1}{54432}x^9.$$

Для получения асимптотик интегралов (8) при больших значениях аргумента надо переписать их в виде

$$F_2\left(x\right) = \int\limits_0^\infty f\left(t\right)dt - \int\limits_x^\infty f\left(t\right)dt. \tag{12}$$

Первый интеграл является числом, равным $\pi^4/15$ для интеграла Планка и числом $4\pi^4/15$ для интеграла Росселанда. Во втором интеграле (12) разложим в подынтегральных функциях (5) дробь по степеням экспоненты и проинтегрируем. Получим, учитывая слагаемые с квадратом экспоненты,

$$P\left(x\right) \approx \left(-6 - 6x - 3x^2 - x^3\right)e^{-x} + \left(-\frac{3}{8} - \frac{3}{4}x - \frac{3}{4}x^2 - \frac{1}{2}x^3\right)e^{-2x}; \tag{13}$$

$$R\left(x\right) \approx \left(-24 - 24x - 12x^2 - 4x^3 - x^4\right)e^{-x} + \left(-\frac{3}{2} - 3x - 3x^2 - 2x^3 - x^4\right)e^{-2x}. \tag{14}$$

Области определения асимптотик авторы определили следующим образом. Были сосчитаны восьмизначные таблицы интегралов (8) на отрезке по безразмерной частоте от 0,5 до 30 с шагом 0,05. Аналогичные таблицы были сосчитаны по асимптотикам. Табличные значения функций (8) и асимптотик совпадают с точностью в пять значащих цифр на интервалах $[0; 1{,}0]$ и $[4{,}6; +\infty)$ для $P(x)$; $[0; 1{,}2]$ и $[4{,}7; +\infty)$ для $R(x)$.

При $x > 7{,}80$ для $P(x)$ и $x > 8{,}15$ для $R(x)$ годятся асимптотики с одним слагаемым.

На отрезках

$$[1{,}0; 4{,}6],\ [1{,}2; 4{,}7] \quad \text{или} \quad [1{,}0; 7{,}8] \quad \text{и} \quad [1{,}2; 8{,}15] \tag{15}$$

надо построить сплайны.

Пятизначные *F*-таблицы интегралов функций Планка и Росселанда

Построение сплайн-аппроксимаций в представлении заданных величин обеих функций (расстановка узлов сплайна) в интервалах $[1{,}0; 4{,}6]$ и $[1{,}2; 4{,}7]$ выполнено с помощью программы OPT_SP1_Loc (см. [6], где содержится краткое описание программы и алгоритма подбора узлов). Точность аппроксимации обоих интегралов в пять знаков была достигнута на следующих сетках π с четырьмя узлами: $1{,}0; 1{,}8; 3{,}0; 4{,}6$ для $P(x)$; $1{,}2; 2{,}2; 3{,}5; 4{,}7$ для $R(x)$.

С точки зрения обеспечения точности аппроксимации задача решена. Здесь не приводятся тексты соответствующих F-таблиц, поскольку, как показали тесты, время расчета значений функций по ним не меньше, чем по формулам с интегрированием по Риману.

Уменьшить время счета по F-таблицам можно двумя способами. В представлении заданных величин для вычисления значений функций (8) приходится вычислять значения интегралов полиномов P_{ji} из (11), т. е. значения пяти полиномов пятой степени. Сплайн можно переписать в *кусочно-полиномиальном представлении*, т. е. в виде одного полинома пятой степени, если в (11) раскрыть скобки и привести подобные члены. Время счета тогда сократится примерно впятеро.

В формулах (5) и (13), (14) приходится вычислять одно значение экспоненты. Но время счета по асимптотикам с двумя слагаемыми в 1,5—2 раза больше, чем по формулам (5). По асимптотикам с одним слагаемым время счета несколько меньше, чем по (5) за счет отсутствия в (13), (14) операции деления. Поэтому авторы построили сплайн-аппроксимацию функций (8) в интервалах (15), вплоть до частот применимости асимптотик с одним слагаемым.

Как показали тестовые расчеты во всех трех спектральных интервалах время счета с квадратурой Стилтьеса меньше, чем с интегрированием по Риману. А именно, время в 1,5—2 раза меньше в области асимптотики малых частот, примерно втрое меньше в области частот сплайн-аппроксимации, примерно на 25 % меньше в области асимптотики больших частот. Общее время расчета матриц пробегов в рамках технологии MIXER [7] тоже уменьшается примерно на 30 %. Величина уменьшения зависит от того, как много групп попадает в область расчета по асимптотике больших частот и какова их длина.

В обеих F-таблицах границы асимптотик 7,8 и 8,2 заменены на 8,1 и 8,7 (см. условные операторы перехода на метку 502), так как в интервале сдвижки экстраполяция по сплайну чуть точнее, чем расчет по (13), (14).

Текст F-таблицы интеграла Планка:

```
 function F_T_Plank_S4 (X)
 dimension x_s(6),A(5),B(5),C(5),D(5),E(5),F(5)
 data x_s/1.0E0, 1.7E0, 2.8E0, 4.2E0, 5.9E0, 7.8E0 /
 data A / 0.10412229D-1, 0.40811875D-2, -0.53895450D-3,
,         -0.91787871D-3,-0.16680075D-3/
 data B /-0.46375964D-1,-0.78840099D-2, 0.13270175D-1,
,          0.77881101D-2, 0.13211071D-3/
 data C /-0.70700592D-2,-0.87722518D-1, -0.75174150D-1,
,         -0.11698491D-1, 0.15458581D-1/
 data D / 0.41262826D+0, 0.29714975D+0, 0.47481209D-2,
,         -0.16971496D+0,-0.13942681D+0/
```

```
      data E / 0.58197671D+0, 0.10981354D+1, 0.14213339D+1,
     ,         0.11279058D+1, 0.56416994D+0/
      data F / 0.22480519D+0, 0.82256681D+0, 0.22683379D+1,
     ,         0.41093140D+1, 0.55308175D+1/
      if (X.lt.x_s(1)) go to 501
      if (X.gt.8.1) go to 502
      i=lim3ab(x_s,X,6,i3)
      i=i-1
      u=X-x_s(i)
      F_T_Plank_S4=((((A(i)*u+B(i))*u+C(i))*u+D(i))*u+E(i))*u+F(i)
      return
  501 X2=X*X
      F_T_Plank_S4=(((-1.98412698 e-4 *X2+0.0166666667e+0)*X-0.125e+0)*X
     + +0.333333333e+0)*X2*X
      return
  502 X2=X*X
      EX=EXP(-X)
      F_T_Plank_S4=6.493939405e+0 -(((X+3.E+0)*X+6.E+0)*X+6.E+0)*EX
      return
      end
```

Текст F-таблицы интеграла Росселанда:

```
      function F_T_Ros_S4 (X)
      dimension x_s(6),A(5),B(5),C(5),D(5),E(5),F(5)
      data x_s/1.2E0, 2.2E0, 3.5E0, 4.7E0, 6.5E0, 8.2E0/
      data A / 0.46574300D-2, 0.93832693D-2, 0.22786071D-2,
     ,        -0.20816267D-2, -0.11542564D-2/
      data B /-0.76184110D-1, -0.46162055D-1, 0.15525162D-1,
     ,         0.27250902D-1, 0.70387387D-2/
      data C / 0.13451770D+0, -0.12252315D+0, -0.20714585D+0,
     ,        -0.10221848D+0, 0.27027020D-1/
      data D / 0.94087553D+0, 0.93389827D+0, 0.19412519D+0,
     ,        -0.37808821D+0, -0.52171093D+0/
      data E / 1.27896488D+0, 3.28281975D+0, 4.81808853D+0,
     ,         0.45200534D+1, 0.26918209D+1/
      data F / 0.53656983D+0, 2.81940126D+0, 8.29916763D+0,
     ,         0.14040329D+2, 0.20602016D+2/
      if (X.lt.x_s(1)) go to 501
      if (X.gt.8.7) go to 502
      i=lim3ab(x_s,X,6,i3)
      i=i-1
      u=X-x_s(i)
      F_T_Ros_S4=((((A(i)*u+B(i))*u+C(i))*u+D(i))*u+E(i))*u+F(i)
      return
  501 X2=X*X
      F_T_Ros_S4=(((-1.83715461E-5 *X2+5.95238095E-4)*X2-0.0166666667E+0)*X2
     + +0.333333333E0)*X2*X
      return
  502 X2=X*X
      EX =EXP(-X)
      F_T_Ros_S4=25.97575762E0 -((((X+4.0E0)*X+12.E0)*X+24.E0)*X+24.E0)*EX
      return
      end
```

Заключение

В работе описан метод вычисления квадратур с интегрированием по Стилтьесу. Для этого применяются полиномиальные эрмитовы интерполяционные в среднем локальные сплайны. Метод требует заметной предварительной работы по построению сплайн-аппроксимации функции интегрирования по Стилтьесу. Поэтому такой подход будет, по-видимому, эффективен, если применять его для вычисления постоянно используемых функций.

Работа выполнена при поддержке МНТЦ (код проекта 2264).

Список литературы

1. *Крылов В. И.* Приближенное вычисление интегралов. М.: Физматгиз, 1959.
2. *Боровков А. А.* Курс теории вероятностей. М.: Наука, 1972.
3. *Франк-Каменецкий Д. А.* Физические процессы внутри звезд. М.: Физматгиз, 1959.
4. *Дегтяренко Н. Н., Елисеев Г. М.* О фрактальности и сплайн-спектре сечений поглощения фотонов // Фракталы в прикладной физике. / Под ред. А. Е. Дубинова. Арзамас-16: ВНИИЭФ, 1995. С. 175—216.
5. *Елисеев Г. М.* О табулировании функций и создании архивов данных. Сплайн для комптоновских сечений // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1979. Вып. 4. С. 64—69.
6. *Елисеев В. Г., Елисеев Г. М.* Аппроксимация интегралов с переменными пределами. Вычисление функции Дебая третьего порядка // Там же. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2006. Вып. 3. С. 59—65.
7. *Bycovnikova N. V., Degtyarenko N. N., Eliseev G. M.* Photon absorbtion cross-section in substance mixtures using data for components // GSI Annual Report. High Energy Density in Matter Produced by Heavy Ion Beams. 2000. P. 96.

Статья поступила в редакцию 07.04.08.