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:

$$F\left(x\right)=\Phi\left(x\right)\int\limits_{a}^{x}f\left(t\right)dt. \tag{1}$$

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

$$F^{'}\left(x\right)=\Phi^{'}\left(x\right)\int\limits_{a}^{x}f\left(t\right)dt+\Phi\left(x\right)f\left(x\right). \tag{2}$$

Пусть функция $\Phi(x)$ имеет достаточно простое аналитическое выражение, тогда для вычисления значений и функции, и производных требуется построить аппроксимацию лишь интегрального множителя $I(x)=\int\limits_{a}^{x}f(t)dt$. Если функция $F(x)$ имеет асимптотики, которые просты в вычислительном отношении, то задача сводится к построению сплайн-аппроксимации $I\left(x\right)$ 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

$$D_k(x) = \frac{k}{x^k}\int\limits_0^x \frac{t^k dt}{e^t - 1} \tag{3}$$

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

$$\pi: \qquad x_0 < x_1 < x_2 < ... < x_n \tag{4}$$

задана гистограмма функции

$$S_i = \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} f(t)\,dt, \qquad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{5}$$

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):

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

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 $d_3(x) = \int\limits_0^x \dfrac{t^k dt}{e^t - 1}$ — 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):

$$S_4(x) = y_{i-1}P_{1i}(x) + y_i P_{2i}(x) + y'_{i-1}P_{3i}(x) + y'_i P_{4i}(x) + S_i P_{5i}(x). \tag{7}$$

Функции $P_{ji}(x)$ $(j = 1, 2, \ldots, 5)$, 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:

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

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

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

где δ_{kj} — символ Кронекера. Полагая $j = 1, 2, \ldots, 5$, 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:

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

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

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

$$D_k(x)=\frac{k}{x^k}\int\limits_0^x t^{k-1}\left(1-\frac{t}{2}+\frac{t^2}{12}-\frac{t^4}{720}+\ldots\right)dt.$$

Проинтегрировав, найдем требуемую асимптотику:

$$D_k(x)=1-\frac{k}{k+1}\frac{x}{2}+\frac{k}{k+2}\frac{x^2}{12}-\frac{k}{k+4}\frac{x^4}{720}+\ldots. \tag{12}$$

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

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

Интеграл в (3) разобьем на два слагаемых:

$$\int\limits_0^x f(t)\,dt=\int\limits_0^\infty f(t)\,dt-\int\limits_x^\infty f(t)\,dt. \tag{13}$$

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

$$J_{2k-1}=\int\limits_0^\infty f(t)\,dt=(-1)^{k+1}\frac{(2\pi)^{2k}}{4\pi}B_{2k}.$$

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:

$$\int\limits_x^\infty \frac{t^k dt}{e^t-1}=-\int\limits_x^\infty e^{-t}t^k\left(1+e^{-t}+e^{-2t}+\ldots\right)dt.$$

Интегрируя почленно, получаем сумму интегралов вида

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

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

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

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

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

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;+∞] и [4,2;+∞]. 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 $\int\limits_{x_{i-1}}^{x} f(t)dt$. К нему надо добавить число $\int\limits_{0}^{x_{i-1}} f(t)dt$, 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., Уолш 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.* Maple 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.