ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, 2017, том 473, № 4, с. 401–403

МАТЕМАТИКА

УДК 519.95

КВАДРАТУРНЫЕ ФОРМУЛЫ С ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОЙ СХОДИМОСТЬЮ И ВЫЧИСЛЕНИЕ ФУНКЦИЙ ФЕРМИ–ДИРАКА

© 2017 г. Член-корреспондент РАН Н. Н. Калиткин[1,*], С. А. Колганов[2]

Поступило 04.10.2016 г.

Получен класс функций, для которого формула трапеций имеет сверхстепенную сходимость: это неограниченно дифференцируемые функции, у которых все нечётные производные на левой и правой границах отрезка равны. Найдена эвристическая закономерность: эта сходимость экспоненциально зависит от числа узлов, а показатель экспоненты равен отношению длины отрезка интегрирования к расстоянию от этого отрезка до ближайшего полюса подынтегральной функции. На основе полученных формул предложен способ вычисления функций Ферми–Дирака полуцелого индекса, существенно превосходящий по экономичности все известные способы вычисления. Попутно найдена асимптотика чисел Бернулли.

DOI: 10.7868/S0869565217100024

1. Проблема. Ограничимся задачей вычисления интегралов от функций $u(x)$, имеющих сколь угодно высокие непрерывные производные на отрезке интегрирования (см., например, [1–3]). Чаще всего на практике берут равномерные или сводящиеся к равномерным сетки $\omega_N = \{x_n,\ n = 0, 1, \ldots, N\}$ и используют простейшие квадратурные формулы трапеций, средних, Симпсона и т.п. Погрешность подобных формул имеет оценку $\delta < \mathrm{const} \cdot M_p \cdot h^p = O(h^p) = O(N^{-p})$, где p есть порядок точности формулы, а $M_p = \max\left|u^{(p)}(x)\right|$. Это степенная сходимость. Она довольно медленная, и для получения высокой точности требуется большое N. Такие квадратуры довольно трудоемки.

Квадратуры Гаусса–Кристоффеля дают гораздо более быструю сходимость. Например, классическая формула Гаусса для интегрирования на отрезке [–1, 1] с весом $\rho(x) = 1$ имеет погрешность (после упрощения факториальных множителей)

$$\delta \prec \sqrt{\frac{\pi}{N}} \frac{b-a}{4} \left(e \frac{b-a}{8N} \right)^{2N} M_{2N}. \qquad (1)$$

Квадратура Эрмита для отрезка [–1, 1] с весом $\rho(x) = (1 - x^2)^{-1/2}$ имеет погрешность

$$\delta \le \sqrt{\frac{\pi}{N}} \left(\frac{e}{2\sqrt{2}N} \right)^{2N} M_{2N}. \qquad (2)$$

Формулы (1), (2) с точностью до логарифмически малых членов можно записать в виде $\delta \sim \alpha \cdot \exp(-\beta N)$, поэтому такая сходимость близка к экспоненциальной. Трудоемкость подобных формул несравненно меньше, чем у квадратур со степенной сходимостью. Однако узлы и веса квадратур Гаусса–Кристоффеля найдены лишь для отдельных отрезков и весов $\rho(x)$ интегрирования. При этом только для квадратур Эрмита эти веса и узлы найдены в виде простых формул для произвольных N. Для остальных случаев узлы и веса точно вычисляются (через радикалы) лишь для $N \le 3$ или $N = 5$. Это сильно ограничивает возможности практического использования таких квадратур.

В данной работе показано, что если $u(x)$ чётно продолжается через обе границы отрезка, то формула трапеций на равномерной сетке даёт экспоненциальную сходимость. При этом коэффициент β в экспоненте определяется расстоянием до ближайшего полюса в комплексной плоскости. Это открывает новые возможности для построения квадратур малой трудоёмкости. Дан интересный для задач квантовой механики пример – вычисление функций Ферми–Дирака с полуцелым индексом. Попутно найдена асимптотика чисел Бернулли.

2. Случай экспоненциальной сходимости. Пусть $u^{(p)}(x)$ существуют и непрерывны на $[a; b]$ при любых p. Требуется вычислить интеграл

$$U = \int_a^b u(x)\,dx. \qquad (3)$$

[1] Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской Академии наук, Москва
[2] Национальный исследовательский университет «МИЭТ», Зеленоград, Москва
*E-mail: kalitkin@imamod.ru

Введём равномерную сетку ω_N с $x_0 = a$, $x_N = b$ и воспользуемся формулой Эйлера–Маклорена, базирующейся на формуле трапеций [4]:

$$U_N = h\left(\frac{u_0}{2} + u_1 + u_2 + \ldots + u_{N-1} + \frac{u_N}{2}\right) + \\ + \sum_{p=1} (-1)^p a_p h^{2p} (u_N^{(2p-1)} - u_0^{(2p-1)}), \quad a_p \sim M_{2p-1}. \tag{4}$$

Если оборвать эту сумму на члене P, то первый отброшенный член будет остаточным. Его величина есть $\delta_P \sim O(h^{2P+2})$. В этом случае формула (4) имеет степенную сходимость.

Пусть $u(x)$ такова, что все её нечётные производные на правой и левой границах одинаковы: $u^{(2p-1)}(a) = u^{(2p-1)}(b)$. Тогда в (4) сумма обращается в нуль. Оставшаяся часть квадратур является просто формулой трапеций. Из этого следуют

Утверждение. *Если $u^{(2p-1)}(a) = u^{(2p-1)}(b)$ при любых p, то формула трапеций на равномерной сетке имеет сходимость выше степенной.*

Частный случай. Утверждение справедливо, если $u(x)$ чётно продолжается через обе границы отрезка:

$$u^{(2p-1)}(a) = u^{(2p-1)}(b) = 0.$$

Таким образом, установлен класс функций, для которого формула трапеций имеет сверхстепенную сходимость. Остаётся найти закон этой сходимости. Эвристически получим закон на тестовом примере:

$$U(r,q) = \int_0^{\pi} \frac{(c^2-1)\cdot c^r \cos(rx)}{(c^2 - 2c\cos x + 1)^q} dx, \quad c > 1. \tag{5}$$

Подынтегральное выражение имеет полюсы порядка q в точках

$$x^* = 2\pi m \pm i\ln(c), \quad -\infty < m < +\infty. \tag{6}$$

На отрезке интегрирования $[0; \pi]$ существуют непрерывные $u^{(p)}(x)$ любых порядков, а на границах выполняются условия чётности. Для $q = 1$ известно точное значение этого интеграла: $U(r,1) = \pi$.

На рис. 1 показаны результаты расчёта теста (5) для $q = 1$, $r = 0$ для разных c. Расчёт проводился с повышенной разрядностью: 45 десятичных знаков. Погрешность δ_N вычислялась непосредственно по известному точному ответу. Видно, что зависимость $\ln\delta_N$ от N оказывается прямолинейной. Это означает экспоненциальную сходимость формулы трапеций для такой функции.

Видно, что при небольшом числе узлов уже достигается очень высокая точность. Это показывает практическую ценность описанного метода.

Наклоны прямых на рис. 1 зависят от c, причем погрешность хорошо описывается соотношением

$$\ln\delta_N = \alpha - \beta N, \quad \beta = \text{const}\cdot\ln c. \tag{7}$$

Нетрудно видеть, что наклон β пропорционален расстоянию между точками отрезка интегрирования и ближайшим полюсом (6). Заметим, что в это соотношение никак не входят нормы производных $u(x)$, в отличие от оценок погрешности формул Гаусса–Кристоффеля.

Такие же результаты (но с более медленным выходом линий на прямые) получились для расчётов с $r = 1, 2, \ldots$, а также для случая двукратного полюса $q = 2$. Поэтому полученные эвристические закономерности имеют общий характер.

Замечание. Полученная сходимость является чисто экспоненциальной. Это позволяет построить апостериорные асимптотически точные оценки погрешности по расчётам с двумя разными N по аналогии с методом Ричардсона для степенной сходимости. Сходимость формул Гаусса–Кристоффеля [1, 2] даже немного быстрее экспоненциальной, однако там

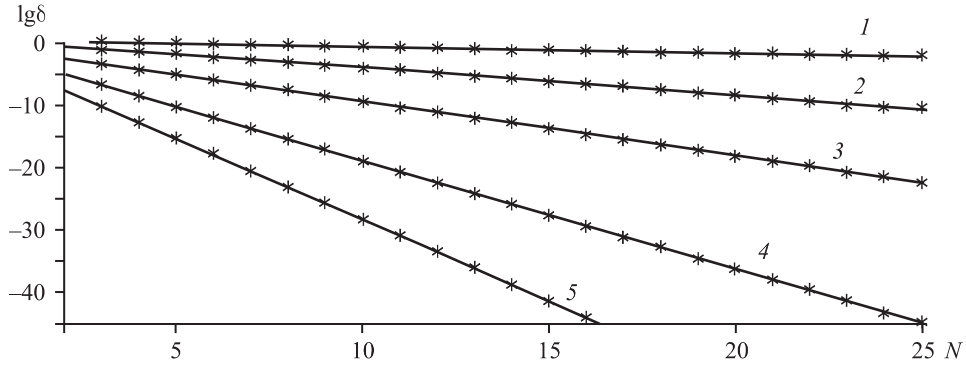

Рис. 1. Погрешность квадратуры трапеций для (5) при $r = 0$, $q = 1$. Цифры около линий – величины c (*1* – 1,10; *2* – 1,75; *3* – 2,72; *4* – 7,39; *5* – 20,09).

получить апостериорные оценки погрешности по расчётам с разными N нельзя. Поэтому для выполнения расчётов с гарантированной точностью предложенный метод удобнее формул Гаусса–Кристоффеля.

3. В ы ч и с л е н и е ф у н к ц и й Ф е р м и – Д и р а к а п о л у ц е л о г о и н д е к с а. Функции Ферми–Дирака возникают в задачах квантовой механики. Они являются моментами импульса для фермиевского распределения. Их определяют как [5]

$$I_k(x) = \int_0^{\infty} \frac{t^k}{1+e^{t-x}} dt, \quad k > -1, \quad -\infty < x < +\infty. \quad (8)$$

В квантовой механике используют только целые и полуцелые значения k. Для целых k проблема вычисления с 17 десятичными знаками решена в [6]. Полуцелым k посвящено много работ, позволяющих вычислить функции с 15 десятичными знаками; но предложенные там способы недостаточно экономичны. Ниже предложен высокоэффективный способ вычисления соответствующих квадратур (8).

Подынтегральная функция в (8) при $t = 0$ и полуцелом k имеет особую точку, а сам промежуток интегрирования бесконечен. Устраним обе трудности, делая замену переменных $t = \gamma\xi^2(1-\xi^2)^{-1}$, $0 \le \xi \le 1$, $\gamma = \text{const} > 0$. Тогда (8) принимает вид

$$I_k(x) = \int_0^1 \frac{2\gamma^{k+1}\xi^{2k+1} d\xi}{\{1+\exp[\gamma\xi^2(1-\xi^2)^{-1} - x]\}(1-\xi^2)^{k+2}}, \quad (9)$$

$$k = -\frac{1}{2}, \ \frac{1}{2}, \ \frac{3}{2}, \ \ldots$$

При полуцелом k показатель степени при t в числителе чётен. Нечётные производные подынтегральной функции по ξ равны нулю на обеих границах: при $\xi = 0$ в силу чётности, при $\xi = 1$ благодаря экспоненте в знаменателе. Поэтому (9) соответствует требованиям раздела, и формула трапеций на равномерной сетке обеспечивает экспоненциальную сходимость.

Константу γ выбираем из требования, чтобы максимум подынтегрального выражения располагался при $\xi = \frac{1}{2}$. Это даёт соотношение

$$1 + \exp\left(x - \frac{\gamma}{3}\right) = \frac{\gamma}{3\left(k + \frac{7}{8}\right)}. \quad (10)$$

Корень $\gamma(x)$ уравнения (10) легко вычисляется для каждого x методом Ньютона.

Квадратура трапеций для (9) с выбором γ по (10) является самым быстрым алгоритмом для прямого вычисления $I_k(x)$ с полуцелым k. Для получения 16 десятичных знаков при $x < 0$ достаточно сетки $N = 32$. При возрастании x число узлов увеличивается, но даже при $x = 50$ и $k = \frac{7}{2}$ достаточно $N = 1024$. Это намного экономичнее всех ранее известных квадратур.

С х о д и м о с т ь. Полюсы подынтегрального выражения (9) образуют последовательности, сходящиеся к точкам $\xi = \pm 1$. Точка $\xi = 1$ есть конец отрезка интегрирования. Это не укладывается в эвристическую закономерность о скорости сходимости из раздела 2. Причина в том, что данный случай более сложен: все производные при $\xi \to +1$ стремятся к нулю очень быстро из-за экспоненты в знаменателе. Поэтому сходимость остается экспоненциальной, хотя вопрос о ее коэффициенте требует более сложного исследования.

4. А с и м п т о т и к а ч и с е л Б е р н у л л и. В ходе данной работы был получен один интересный результат. Функции Ферми–Дирака при $x > 0$ имеют асимптотическое разложение по степеням x^{-2}. Коэффициенты этого разложения выражаются через числа Бернулли. Для этих коэффициентов была получена эвристическая асимптотика для больших индексов. Из неё следует точное выражение для чисел Бернулли:

$$B_{2m} = (-1)^{m-1} \frac{(2m)!}{\pi^{2m} 2^{2m-1}} A_n, \quad A_n = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p^{2m}}. \quad (11)$$

Это выражение удобно для вычисления чисел Бернулли с большими индексами, поскольку $A_n \to 1$ при $n \to \infty$. Выражение (11) получено для чётных коэффициентов Бернулли; но напомним, что все нечётные коэффициенты равны нулю за исключением B_1.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда 16–11–10001.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М.* Численные методы. 3-е изд. М.: БИНОМ / Лаб. знаний, 2004.
2. *Калиткин Н. Н.* Численные методы. 2-е изд. СПб.: БХВ-Петербург, 2011.
3. *Калиткин Н. Н., Альшина Е. А.* Численные методы. Кн. 1. Численный анализ. М.: Академия, 2013.
4. *Белов А. А.* О коэффициентах квадратурных формул Эйлера–Маклорена // Мат. моделирование. 2013. Т. 25. № 6. С. 72–79.
5. *Stoner E. C., McDougall J.* The Computation of Fermi–Dirac Functions // Philos. Trans. Royal Soc. London. Ser. A, Math. and Phys. Sci. 1938. V. 237 (773). P. 67–104.
6. *Калиткин Н. Н., Колганов С. А.* Прецизионные аппроксимации функций Ферми–Дирака целого индекса // Мат. моделирование. 2016. Т. 28. № 3. С. 23–32.