Math-Net.Ru
Общероссийский математический портал

Н. Н. Калиткин, И. А. Панин, О вычислении интегральной экспоненты, *Матем. моделирование*, 2008, том 20, номер 1, 87–91

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
http://www.mathnet.ru/rus/agreement

Параметры загрузки:
IP: 81.5.116.154
18 сентября 2022 г., 18:05:46

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ 2008 год, том 20, номер 1, стр. 87-91

О ВЫЧИСЛЕНИИ ИНТЕГРАЛЬНОЙ ЭКСПОНЕНТЫ

© *2008 г. Н.Н. Калиткин, И.А.Панин*

Институт математического моделирования РАН, Москва

Работа поддержана грантами РФФИ 05-01-200152 и 05-01-08006, НШ-5772.2006.1

Предложен простой алгоритм вычисления интегральной экспоненты с высокой точностью.
Он основан на представлении интегральной экспоненты в виде сходящегося ряда при небольших аргументах x, и асимптотически сходящейся дробью при больших x. Показано, что в качестве границы между этими представлениями целесообразно взять x=1.
При этом использование 18 членов ряда и 220 цепной дроби обеспечивает относительную погрешность менее $2 \cdot 10^{-15}$, что превосходит потребности практики.

ON THE EXPONENTIAL INTEGRAL COMPUTATION

N.N. Kalitkin, I.A. Panin

Institute for Mathematical Modeling of Rus.Acad.Sci., Moscow

New high-precision algorithm for exponential integral calculation was developed.
It is based on the representation of exponential integral in form of convergent series when x-argument is not large and in form of asymptotically convergent continued fraction when x is large. It was shown that the optimal bound between these representations is x=1.
At the same time using of 18 series members and 220 continued fraction members guarantees relative precision lower than $2 \cdot 10^{-15}$, that exceeds practical needs.

1. Проблема. Одна из специальных математических функций – интегральная экспонента – определяется следующим образом:

$$Ei(x) = \int_{-x}^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt . \tag{1}$$

Эта функция часто возникает в прикладных задачах теории переноса частиц (при решении кинетического уравнения для нейтронов, фотонов или других частиц, претерпевающих рассеяние ([1], стр. 486)). При этом часто используют обобщение интегральной экспоненты и несколько другую форму записи:

$$E_n(x) = \int_{1}^{\infty} \frac{e^{-xt}}{t^n} dt . \tag{2}$$

$E_1(x)$ отличается от (1) лишь знаками $E_1(x) = Ei(-x)$. В прикладных задачах x вещественно, причем $0 < x < +\infty$.

Как известно, существует разложение интегральной экспоненты в абсолютно сходящийся ряд:

$$E_1(x) = \lg\left(\frac{1}{x}\right) - C + \sum_{p=1}^{\infty} (-1)^{p-1} \frac{x^p}{p \cdot p!} , \tag{3}$$

где $C = 0.577\ 215\ 664\ 901\ 532\ 5$ есть константа Эйлера.

Для $E_n(x)$ существует рекуррентное соотношение, получаемое интегрированием по частям:

$$E_{n+1}(x) = \left[e^{-x} - xE_n(x) \right] / n . \tag{4}$$

Оно справедливо при любых x и из него следует $E_{n+1}(0) = 1/n$.

Последовательно переходя к функциям все меньших индексов, получим выражение произвольной функции через $E_1(x)$:

$$E_{n+1}(x) = \frac{1}{n!}\left[(-x)^n E_1(x) + e^{-x} \sum_{p=0}^{n-1} (n-p-1)!(-x)^p \right]. \tag{5}$$

Подставляя в (5) ряд (3), получим абсолютно сходящийся ряд для функции произвольного индекса.

Ряд (3) удобен для практического вычисления при x<<1, ибо тогда он быстро сходится. Вдобавок этот ряд знакопеременный. Поэтому погрешность частичной суммы не превышает первого отброшенного члена. Это позволяет надежно контролировать точность вычислений.

При x>1 сходимость ряда (3) становится медленной, и быстро ухудшается при увеличении x. При больших значениях x существует асимптотический ряд

$$E_n(x) = \frac{e^{-x}}{x} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (n+k-1)!}{(n-1)!\, x^k} . \tag{6}$$

Этот ряд также знакопеременный, поэтому его частичные суммы приближаются к функции с двух сторон. Это позволяет оценивать точность частичных сумм. Однако сходимость лишь асимптотическая. Поэтому, начиная с некоторого номера k, эти суммы перестают приближаться к $E_n(x)$. Нетрудно убедиться, что соответствующий номер быстро уменьшается при уменьшении x. Тем самым ряд (6) может дать хорошую точность лишь при настолько больших x, которые обычно неинтересны для практических вычислений.

Поэтому разными математиками для $E_n(x)$ строились аппроксимации с использованием рациональных функций: $E_n(x) \approx e^{-x} P(x)/Q(x)$. Многочлены $P(x)$ и $Q(x)$ подбирались так, чтобы получить возможно меньшую погрешность во всем диапазоне $1 < x < +\infty$. В ([2], стр.231) приведены некоторые такие аппроксимации, обеспечивающие точность 10^{-4} % и 10^{-6} %.

Указанная точность кажется очень высокой. Однако в задачах рассеяния возникают довольно трудные ситуации. Например, для решения задач переноса в газах широко используется метод Чепмена–Энскога [3]. В нем транспортные коэффициенты равны отношению неких определителей. Матричные элементы этих определителей являются комбинациями различных интегралов рассеяния, выражающихся через интегральную экспоненту. При вычислении определителей по матричным элементам происходит потеря точности, которая в некоторых диапазонах условий может стать очень большой. Иногда даже восьми верных знаков в интегральной экспоненте оказывается недостаточно. Такие ситуации действительно отмечались в расчетах транспортных коэффициентов газов (например, коэффициенты проводимости или теплопроводности оказывались отрицательными, что физически бессмысленно). Поэтому желательно иметь алгоритм гораздо более высокой точности.

2. Прецизионные вычисления. Основная трудность состоит в вычислении функции при x>1. Однако известно представление $E_n(x)$ в виде цепной дроби ([2], стр. 229):

$$E_n(x) = e^{-x} \cdot \cfrac{1}{x + \cfrac{n}{1 + \cfrac{1}{x + \cfrac{n+1}{1 + \cfrac{2}{x + \cfrac{n+2}{1 + \cfrac{3}{x + \cfrac{n+3}{\dots}}}}}}}} \tag{7}$$

Эта дробь является лишь асимптотически сходящейся. Однако все ее коэффициенты положительны. Поэтому четные и нечетные подходящие цепные дроби приближаются к $E_n(x)$ с разных сторон. Следовательно, фактическая ошибка вычислений не превышает разности соседних подходящих цепных дробей.

Проведем подробные исследования для наиболее важной функции $E_1(x)$. Для дроби (7) будем оценивать относительную погрешность как модуль разности соседних четной и нечетной подходящих дробей, деленной на их полусумму (истинная погрешность несколько меньше этой величины). Зависимость логарифма этой погрешности δ от числа членов дроби (7) при различных значениях x показана на рис.1. Видно, что при больших x дробь сходится быстро. Однако неплохая скорость сходимости сохраняется даже при небольших значениях x. Даже при очень малом $x = 0.1$ цепная дробь может обеспечивать не такую уж плохую точность. При $x \geq 1$ легко достигается точность, близкая к погрешности округления компьютера. Данные расчеты проводились с 64-х разрядными числами, и легко достигалась относительная погрешность 10^{-15}. При дальнейшем увеличении числа членов и сохранении разрядности чисел ход кривых становится неплавным; это влияние ошибок округления.

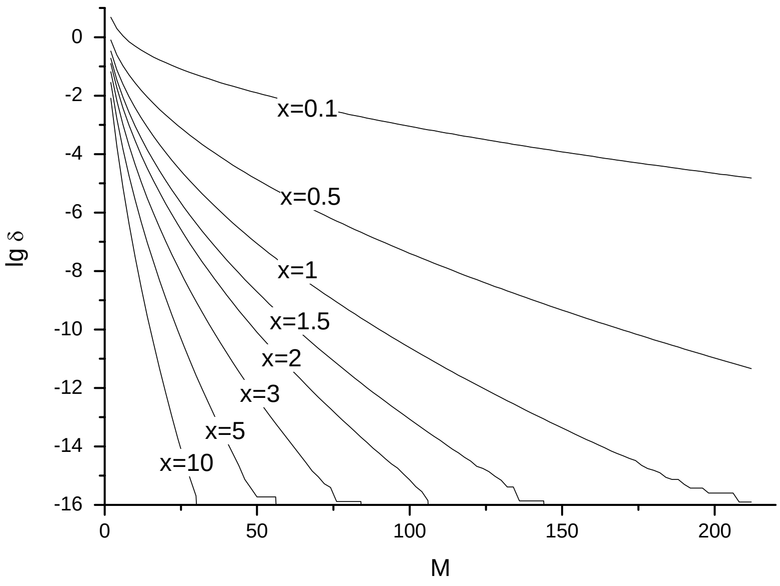

Рис.1. Зависимость относительной погрешности дроби (7) от числа членов *M*; около кривых указаны значения *x*

Аналогичные расчеты относительной погрешности были проведены для аппроксимации рядом (3) при довольно больших *x*. Их результаты показаны на рис.2. Видно, что этот ряд может дать высокую точность лучше 10^{-15} лишь при $x \le 1$. При увеличении *x* плавно идущие кривые начинают круто срываться вниз при больших погрешностях. Для $x = 5$ этот срыв происходит при погрешности 10^{-12}. Поясним причину этого.

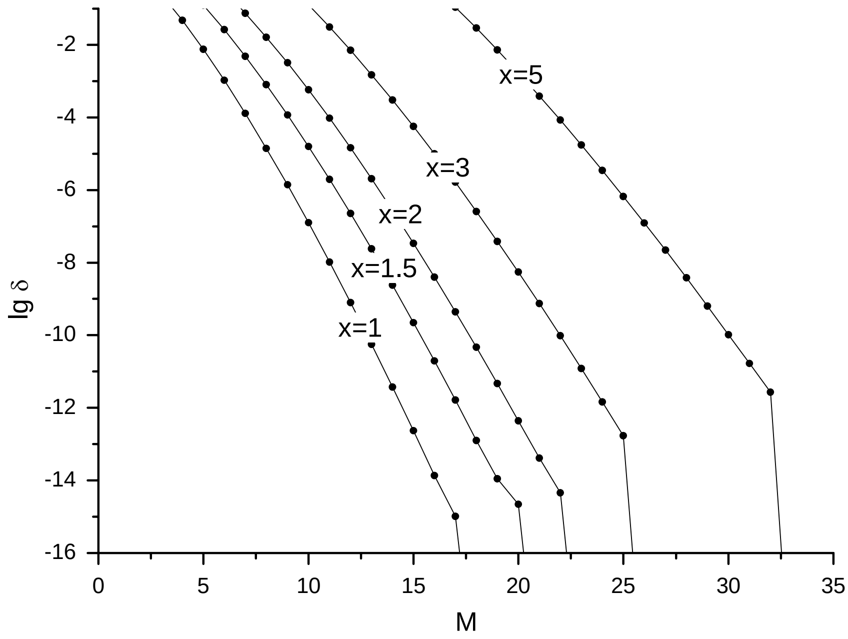

Рис.2. Зависимость относительной погрешности ряда (3) от числа членов *M*; около кривых указаны значения *x*

При таких значениях *x* абсолютная величина функции $E_n \approx e^{-x} / x$, то есть достаточно мала. При расчете по формуле (3) сумма первых двух членов $-\ln x - C$ отрицательна и не мала, а суммируемый ряд положителен. Поэтому при прибавлении ряда к первым членам происходит сокращение нескольких значащих цифр. Поэтому на 64-х разрядном компьютере следует ограничиться диапазоном $x \le 1$, взяв *M*=18 при суммировании ряда (3).

Видно, что в качестве границы раздела между рядом (3) и цепной дробью (7) удобно взять значение $x = 1$. При этом в ряде (3) следует взять *M*=18 членов, а в цепной дроби (7) 220 членов. Учитывая скорость современных персональных компьютеров такие числа членов не обременительны. При этом даже в самом худшем случае относительная ошибка не превышает $2 \cdot 10^{-15}$ (что дополнительно проверяется расчетом в точке $x = 1$ по обеим формулам). Это с избытком перекрывает потребности практики.

Заметим, что в этом алгоритме фиксировано число членов для суммирования ряда (3). В этом случае ряд выгодно вычислять по схеме Горнера:

$$\sum_{p=1}^{M} (-1)^{p-1} \frac{x^p}{p \cdot p!} = x\left(1 - \frac{x}{2^2}\left(1 - \frac{2x}{3^2}\left(1 - \frac{3x}{4^2}\left(1 - \ldots\left(1 - \frac{(M-1)x}{M^2}\right)\right)\right)\right)\right). \qquad (8)$$

При этом ошибки округления уменьшаются.

Для вычисления $E_n(x)$ можно использовать два способа. Первый – вычислить описанным алгоритмом $E_1(x)$ и подставить его в формулу (5). Последняя формула заведомо обеспечивает хорошую точность при малых *x*. Однако при $x \gg 1$ в (5) возможна значительная потеря точности; из сравнения асимптотических рядов (6) для произвольного *n* и *n*=1 видно, что главные значащие члены сокращаются. Поэтому для $x \gg 1$ может оказаться более выгодным представление в виде цепной дроби (7) для данного *n*. Вопрос о числе членов ряда (3) и цепной дроби (7) при этом требует дополнительного рассмотрения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Е.С Кузнецов*. Избранные научные труды. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003.
2. *M. Abramowitz, I.A. Stegun.* Handbook of mathematical functions. National Bureau of Standards. Applied Mathematics Series – 55. Issued June 1964. Tenth Printing, December 1972.
3. *С. Чепмен, Т. Каулинг.* Математическая теория неоднородных газов. – М.: Издательство иностранной литературы, 1960.

Поступила в редакцию 02.02.2007.