Н. Н. Калиткин, О вычислении функций Ферми–Дирака, *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 1968, том 8, номер 1, 173–175

имеет решением числа $x_1 = x_2 = 1$. Система

$$\frac{110}{111} x_1 + 10 x_2 = 11,$$
$$x_1 + 10.1 x_2 = 11.1,$$

отличающаяся от исходной только коэффициентом при x_1, имеет решением числа $x_1 = 11.1$, $x_2 = 0$.

Поскольку

$$x_1 = \begin{vmatrix} b_1 & a_{12} \\ b_2 & a_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}^{-1}, \qquad x_2 = \begin{vmatrix} a_{11} & b_1 \\ a_{21} & b_2 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}^{-1},$$

получаем

$$\frac{\partial x_1}{\partial a_{11}} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}^{-2} \left\{ - \begin{vmatrix} 1 & a_{12} \\ 0 & a_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} b_1 & a_{12} \\ b_2 & a_{22} \end{vmatrix} \right\} = \frac{1}{0.01} \{-10.1 \cdot 0.1\} = -101,$$

$$\frac{\partial x_2}{\partial a_{11}} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}^{-2} \left\{ \begin{vmatrix} 1 & b_1 \\ 0 & b_2 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & a_{12} \\ 0 & a_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} a_{11} & b_1 \\ a_{21} & b_2 \end{vmatrix} \right\} =$$

$$= \frac{1}{0.01} \{11.1 \cdot 0{,}1 - 10.1 \cdot 0.1\} = 10,$$

и поэтому производные в направлении $\alpha_{11} = -{}^1/_{111}$ будут

$$\frac{\partial x_1}{\partial \alpha_{11}} = 101, \qquad \frac{\partial x_2}{\partial \alpha_{11}} = -10,$$

т. е. при переходе от первой системы ко второй x_1 возрастает, а x_2 убывает (что и наблюдается в действительности).

Рассмотренные примеры подтверждают эффективность прогнозирования перемещения точек сосредоточения масс и перераспределения масс в точках сосредоточения при флюктуации элементов последовательностей.

Поступила в редакцию
1.11.1966

Цитированная литература

1. М. Г. Крейн. Идеи П. Л. Чебышева и А. А. Маркова в теории предельных величин интегралов и их дальнейшее развитие. Успехи матем. наук, 1951, 6, вып. 4 (44), 3—123.
2. В. А. Варюхин, С. А. Касьянюк. Об одном методе решения нелинейных систем специального вида. Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1966, 6, № 2, 347—352.

УДК 518:517.564

О ВЫЧИСЛЕНИИ ФУНКЦИЙ ФЕРМИ — ДИРАКА

Н. Н. КАЛИТКИН

(Москва)

Функции Ферми — Дирака определяются следующим образом:

$$I_\nu(x) = \int_0^\infty \frac{y^\nu \, dy}{1 + \exp(y - x)}, \qquad -\infty < x < \infty, \quad \nu > -1. \tag{1}$$

Легко проверить, что имеет место соотношение

$$I_\nu'(x) = \nu I_{\nu-1}(x). \tag{2}$$

Посредством (2) функции Ферми — Дирака доопределяются для всех не целых $\nu < -1$.

Эти функции возникают в задачах квантовой механики при изучении системы фермионов (например, электронов в атоме, металле или плазме), когда различные степени импульса усредняются по распределению Ферми — Дирака *). В [1, 2] изложены свойства этих функций и даны подробные таблицы для ряда индексов.

Для численного решения задач на ЭВМ задание функций таблицами неудобно; желательно иметь экономный алгоритм их вычисления. В настоящей работе (1) разлагается в ряд, быстросходящийся при $x \leqslant 0$.

Применим к подынтегральному выражению в (1) преобразование

$$\frac{1}{1+e^{y-x}} = \frac{2e^{-y}}{1+2e^{-x}}\left(1-\frac{1-2e^{-y}}{1+2e^{-x}}\right)^{-1} = \frac{2e^{-y}}{1+2e^{-x}}\sum_{m=0}^{\infty}\left(\frac{1-2e^{-y}}{1+2e^{-x}}\right)^{m}.$$

При допустимых значениях переменных ($-\infty < x < +\infty$, $0 \leqslant y < +\infty$) разложение в ряд здесь всегда возможно, так как $|(1-2e^{-y})/(1+2e^{-x})| < 1$. Теперь интеграл (1) легко вычисляется:

$$I_\nu(x) = 2\Gamma(\nu+1)\sum_{m=0}^{\infty}\frac{b_m^{(\nu)}}{(1+2e^{-x})^{m+1}}, \tag{3}$$

где

$$b_m^{(\nu)} = \frac{1}{\Gamma(\nu+1)}\int_0^\infty (1-2e^{-y})^m y^\nu e^{-y}\,dy = \sum_{p=0}^{m}\frac{(-1)^p 2^p m!}{p!(m-p)!(p+1)^{\nu+1}}. \tag{4}$$

Из интегрального определения коэффициентов видно, что $|b_m^{(\nu)}| \leqslant 1$; поэтому ряд (3) сходится при любом фиксированном x не медленней, чем геометрическая прогрессия. На любом ограниченном справа полубесконечном интервале эта сходимость будет равномерной. Практически при $x \leqslant 0$ сходимость достаточно быстрая и ряд (3) удобен для вычислений.

Для функций с целым индексом $\nu = k$ имеет место соотношение [2]

$$I_k(x) = (-1)^k I_k(-x) + \frac{x^{k+1}}{k+1}\left[1+\sum_{n=1}^{N} a_n^{(k)} x^{-2n}\right],$$

где

$$a_n^{(k)} = 2(1-2^{1-2n})(k+1)k\ldots(k+2-2n)\zeta(2n), \qquad N = \left[\frac{k+1}{2}\right]^{**)}.$$

Тем самым экономное вычисление этих функций при $x > 0$ также выполняется с помощью (3).

Сделаем два замечания. Во-первых, подставляя сумму (4) в (3), меняя порядок суммирования и свертывая внутреннюю сумму, приходим к известному ряду

$$I_\nu(x) = \Gamma(\nu+1)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(n+1)^{\nu+1}}e^{(n+1)x}.$$

Этот ряд при $x < 0$ сходится заметно медленней, чем (3), а при $x > 0$ расходится.

Во-вторых, сумма (4) неудобна для вычисления далеких коэффициентов ряда. Максимальный член в этой сумме легко оценивается по формуле Стирлинга; он имеет

*) В этих задачах ν принимает целые и полуцелые значения.

**) Скобки здесь обозначают целую часть числа.

порядок $3^{m+1}m^{-(\nu+3/2)}$, а сама сумма не больше единицы по модулю. Поэтому при больших m суммирование связано с сильной потерей точности.

Из (4) можно получить удобную рекуррентную формулу

$$b_m^{(\nu)} = \frac{1}{m+1}[b_m^{(\nu-1)} + mb_{m-1}^{(\nu)}] = \frac{1}{m+1}\sum_{q=0}^{m} b_q^{(\nu-1)}, \qquad b_0^{(\nu)} = 1. \tag{5a}$$

Она позволяет по коэффициентам для индекса ν находить коэффициенты для индексов $\nu+1$, $\nu+2, \ldots$ без заметной потери точности. Более того, ее можно обратить в сторону уменьшения ν на единицу:

$$b_m^{(\nu-1)} = (m+1)b_m^{(\nu)} - mb_{m-1}^{(\nu)}, \tag{5б}$$

и тем самым доопределить (3) для $\nu < -1$.

Для физических приложений важны целые и полуцелые индексы, причем небольшие. Преобразуя сумму (4), найдем

$$b_m^{(0)} = \frac{1+(-1)^m}{2(m+1)}.$$

Для $\nu = -1/2$ коэффициенты были получены численным интегрированием (4) с заданной точностью; они приведены в таблице. Имея эти две последовательности коэффициентов, по формулам (5) можно перейти к любому целому или полуцелому индексу.

m	$b_m^{(-1/2)}$	m	$b_m^{(-1/2)}$
0	1.0	11	−0.19269403
1	−0.41421356	12	0.20850413
2	0.48097395	13	−0.17934272
3	−0.31443746	14	0.19305733
4	0.35496974	15	−0.16845640
5	−0.26391470	16	0.18056387
6	0.29305220	17	−0.15935708
7	−0.23206013	18	0.17019276
8	0.25480910	19	−0.15160239
9	−0.20961508	20	0.16140658
10	0.22827198		

Поступила в редакцию
14.01.1967

Цитированная литература

1. A. C. Beer, M. N. Chase, P. F. Choquard. Extention of McDougall — Stoner tables of Fermi —Dirac functions. Helv. Phys. Acta, 1955, 28, № 5—6, 529—542.
2. P. Rhodes. Fermi — Dirac functions of integral order. Proc. Roy. Soc., 1950, A204, № 1078, 396—405.

УДК 518:517.392

ВЫЧИСЛЕНИЕ ИНТЕГРАЛОВ ОТ ОСЦИЛЛИРУЮЩИХ ФУНКЦИЙ ПРИ ПОМОЩИ ИНТЕРПОЛЯЦИИ ПО УЗЛАМ КВАДРАТУР ГАУССА

Н. С. БАХВАЛОВ, Л. Г. ВАСИЛЬЕВА

(Москва)

В работе предлагается новый способ вычисления интегралов

$$S_\omega(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\exp(i\omega x)\,dx \tag{1}$$

при $f(x)$ гладкой и ω большом.

Непосредственное вычисление рассматриваемых интегралов по квадратурным формулам Ньютона — Котеса представляется мало эффективным. При использовании таких формул подынтегральная функция, в данном случае $f(x)\exp(i\omega x)$, аппроксимируется полиномами. Поэтому для получения хорошей аппроксимации нужно, чтобы шаг интегрирования был меньше характерного отрезка изменения подынтегральной функции, имеющего порядок $2\pi/\omega$.