Numeryczne obliczanie całek Fermiego-Diraca kwadraturą *Tanh-Sinh*.

Andrzej Odrzywołek

Zakład Teorii Względności i Astrofizyki, Instytut Fizyki UJ

20 listopada 2013

Streszczenie

Znajomość uogólnionych funkcji Fermiego-Diraca pozwala na eleganckie operowanie wielkościami fizycznymi pojawiającymi się w termodynamicznym opisie gazu elektronowego. Powszechnie stosowaną metodą całkowania numerycznego są kwadratury Gaussa, skuteczne dla dodatnich indeksów całkowitych i połówkowych. W sytuacji, gdy funkcja podcałkowa nie może być przybliżana wielomianami, ale jest analityczna, lepszą metodą okazuje się zamiana zmiennych typu x=exp(exp(t)), zaproponowana w połowie lat 70-tych (Takahasi & Mori 1974), w połączeniu ze wzorem Eulera-Maclaurina (metodą trapezów). Na wykładzie przedstawię motywację astrofizyczną, podstawy teoretyczne i testy metody oraz trudności implementacji, będące przyczyną wciąż małej popularności tego godnego uwagi algorytmu.

Postawienie problemu

Uogólniona całka Fermiego-Diraca (*typ G*)

$$G_n^{\pm}(\alpha,\beta) = \frac{1}{\alpha^{3+2n}} \int_{\alpha}^{\infty} \frac{x^{2n+1}\sqrt{x^2-\alpha^2}}{1+\exp(x \pm \beta)}\, dx,$$

$$\alpha = \frac{m_e}{kT}, \quad \beta = \frac{\mu_e}{kT}$$

Uogólniona całka Fermiego-Diraca (*typ F*)

$$F_k(\eta,\theta) = \int_0^{\infty} \frac{t^k \sqrt{1+\frac{t}{2\alpha}}}{1+\exp\left(t-\eta\right)}$$

$$\theta = 1/\alpha, \quad \eta = -\alpha \pm \beta$$

Przykłady zastosowania

Częstość plazmowa

Nietrywialny przykład: dla $n = -3$ funkcja G nie jest redukowalna fo funkcji F, ponadto zachowanie funkcji podcałkowej jest typu $1/x$.

$$\omega_0 = m_e \frac{\alpha}{4\pi} \left(G^-_{-1} - \frac{1}{3} G^-_{-3} + G^+_{-1} - \frac{1}{3} G^+_{-3} \right)$$

Inne ważne przykłady

- Funkcje $M^{nm}_{\pm}$ zdefiniowane w Misiaszek *et. al*, Phys. Rev. D 74, 043006 (2006), pozwalające wyrazić momenty widma energetycznego neutrin z anihilacji par $e^+e^- \to \nu\bar{\nu}$.
- równanie stanu gazu elektronowego w symulacjach astrofizycznych
- ...

Relacja funkcji typu F i G

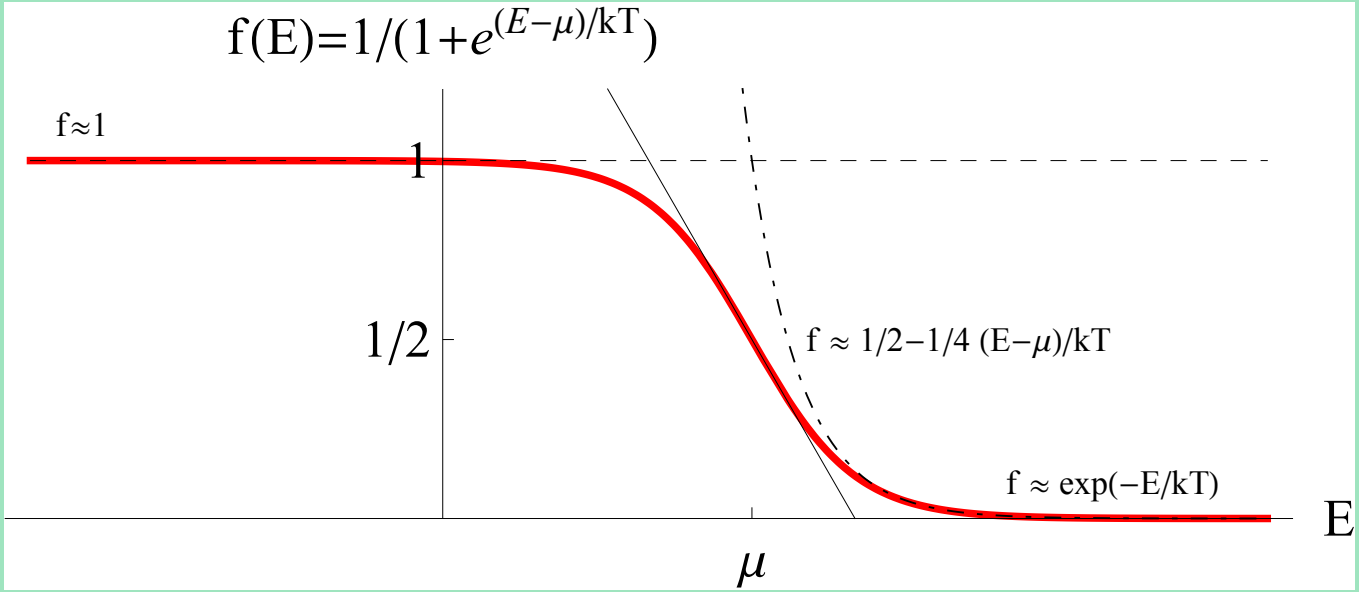
Dotychczasowy sposób obliczania funkcji G

$$G_n^{\pm}(\alpha,\beta) = \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \sum_{i=0}^{2n+1} \alpha^i \binom{2n+1}{i} F_{2n+3/2-i}(-\alpha \mp \beta, 1/\alpha) \quad (1)$$

Powyższy wzór pozwala zamienie używać niektórych funkcji o indeksach połówkowych i całkowitych.

Istota trudności obliczania całek F-D

Rozkład Fermiego-Diraca



1. Dwa „reżimy”: wielomianowy z wagą 1 lub e^{-x} wymuszają rozbicie przedziału całkowania na co najmniej dwa i zastosowanie różnych algorytmów: Gaussa i Gaussa-Laguerra.
2. obecność $\sqrt{x}$ omijamy podstawiając $x = t^2$
3. algorytm tego typu doskonale działa dla dodatnich indeksów połówkowych, ale zawodzi dla $-1 < k < -1/2$ ($n < -1/2$)

Alternatywa dla klasycznych kwadratur typu Gaussa

Skalowanie kwadratury (*rendering 1D*)

Dla każdej *pojedynczej* wartości η możemy wyznaczyć kwadraturę typu Gaussa:

$$\int_0^\infty \frac{W_{2n-1}(x)}{1+e^{x-\eta}}dx = \sum_{i=1}^{n} w_i(\eta) f[x_i(\eta)].$$

Dokonując interpolacji, otrzymujemy algorytm działający dla dowolnego η [Odrzywolek, CPC, 182 (2011) 2533].

Inne sposoby

- tablicowanie i interpolacja
- rozwinięcia asymtotyczne, szeregi
- sieci neuronowe i regresja symboliczna

Skąd wiemy ile NAPRAWDĘ wynoszą wartości całek F-D ?

Metody weryfikacji

1. całkowanie adaptywnym algorytmem w arytmetyce dowolnej precyzji, często w *Mathematice*
2. przypadki specjalne (np: $\mu = 0$), oraz graniczne
3. oszacowania całki z góry i z dołu
4. code-to-code verification
5. relacje rekurencyjne pomiędzy pochodnymi (Gonga et. al. Computer Physics Communications, 136 (2001) 294–309)

Praktyka pokazuje, że sposób (1) jest niezwykle czasochłonny, chyba że zastosujemy metodę `"DoubleExponential"`.

Algorytm Tanh-Sinh

Zamiana zmiennych

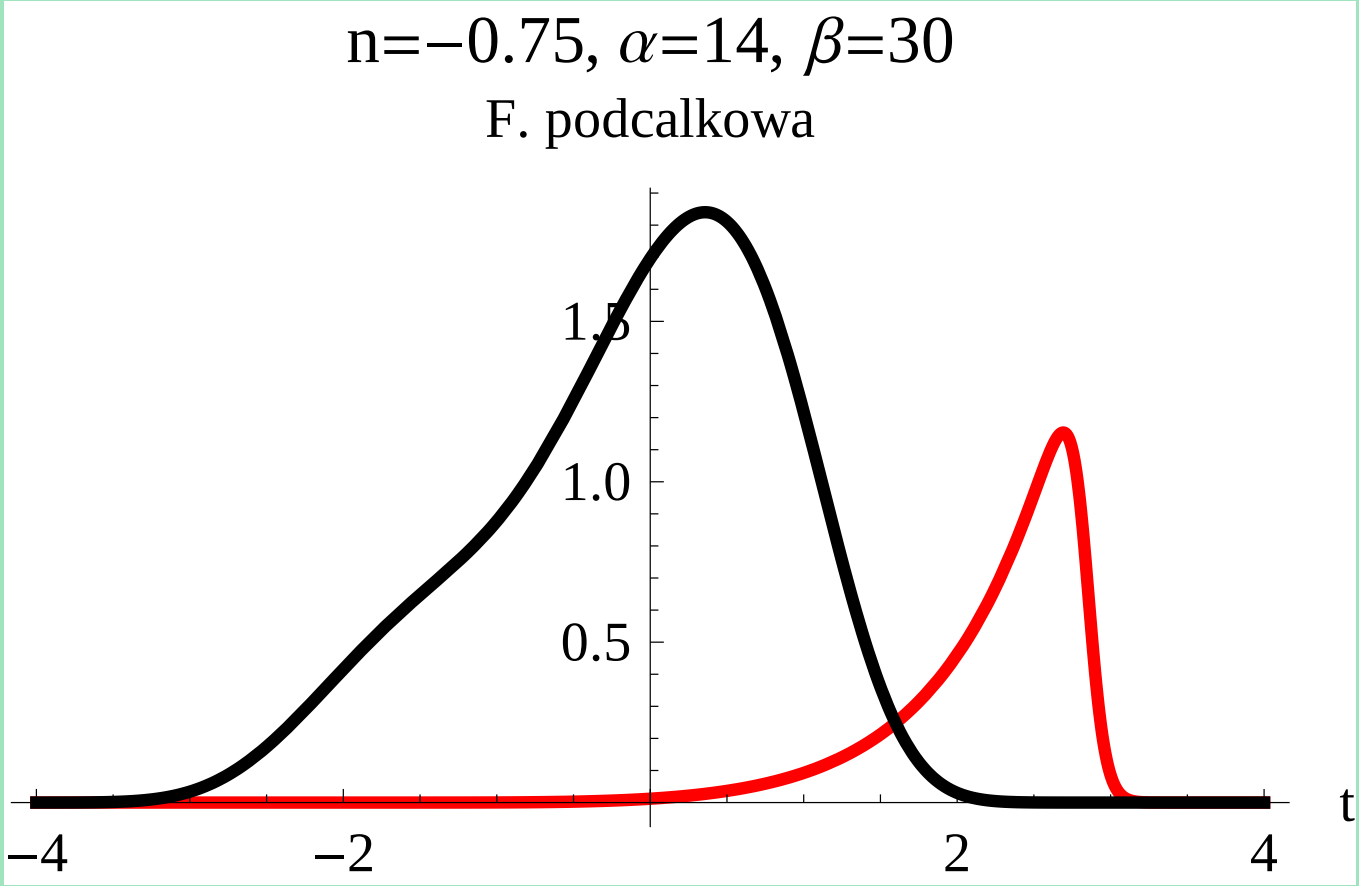
Takahashi & Mori (1974) znaleźli *optymalną* zamianę zmiennych:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \to x = \operatorname{tgh}\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right) \tag{2a}$$

$$\int_{0}^{\infty} f(x)\,dx \to x = \exp\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right) \tag{2b}$$

$$\int_{0}^{\infty} f(x)e^{-x}\,dx \to x = \exp\left(t - e^{-t}\right) \tag{2c}$$

Teraz funkcja podcałkowa oraz *jej wszystkie pochodne* dążą do zera dla $t \to \pm\infty$ **podwójnie eksponencjalnie** ($\sim e^{-e^{t}}$).



Dla powyższej funkcji stosujemy wzór Eulera-Maclaurina:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t)dt = \sum_{k=-N}^{N} w_k f(hk) + \Delta$$

Oszacowanie błędu (reszty we wzorze E.-M.)

Reszta wzoru Eulera-Maclaurina

$$\Delta = \sum_{n=1}^{p} h^{2n} \frac{B_{2n}}{(2n)!} \left[f^{(2n-1)}(-hN) - f^{(2n-1)}(hN) \right] + R$$

gdzie p - dowolnie duża liczba, oraz:

$$R = 2N\, h^{2p+3} \frac{B_{2p+2} f^{(2p+2)}(\zeta)}{(2p+2)!}, \quad \zeta \in (-Nh, Nh).$$

WNIOSEK

Jeżeli na końcach przedziału (dla $x \to \pm\infty$) **wszystkie** pochodne dążą do zera, a wewnątrz przedziału funkcja jest „dostatecznie gładka" to błąd całkowania numerycznego w podany sposób maleje szybciej niż jakakolwiek potęga kroku całkowania h.

Skuteczność algorytmu

1. dwa błędy: dyskretyzacji (h) i obcięcia (N)
2. w praktyce liczba cyfr znaczących **podwaja się** przy zmniejszeniu h dwukrotnie
3. działa dla „większości" funkcji analitycznych, z dowolnymi osobliwościami na końcach przedziału
4. algorytm to *de facto* metoda trapezów; typowe ćwiczenie dla studentów I roku

Jeżeli jest tak dobrze, to skąd brak poularności?

- algorytm relatywnie nowy, opublikowany w mało znanym czasopiśmie PM. RIMS, Kyoto Univ. **9** (1974), 721-741
- w *Numerical Recipes*, pojawia się dopiero w ostatnim wydaniu, 3 edycja, 2007 („wypychając" rozdział o kwadrarturze Gaussa)
- $\exp(e^x)$ dla typu `double` przekracza zakres dla $x \geqslant 6.5$
- dla f. analitycznej z odpowiednio rozłożonymi miejscami zerowymi algorytm jest całkowicie błędny

Szczegóły implementacji

Naiwny kod

```
double x = exp( t-exp(-t) );
dx = x*( 1.0+exp(-t) );
fermi = pow(x,k)
*sqrt(1.0+0.5*theta*x)/(1.0 + exp(x-eta))*dx;
```

Dobry kod

```
double x = exp( t-exp(-t) );
dx =  1.0+exp(-t);
fermi = exp( (k+1.0)*(t-exp(-t) )
*sqrt(1.0 + 0.5*theta*x)/(1.0 + exp(x-eta))*dx;
```

Porównanie implementacji (10^5 wywołań, random input)

Implemtacja	dfermi.f (F77)	libfermidirac (C)
Kod	∼1000 linii	∼100 linii
Algorytm	Gauss + splitting	Tanh-Sinh
Dokładność	Szacowana z góry	Testowana w locie
Strategia	Krok ustalony	Rekursja
Autor	F. X. Timmes	A. O.
	Fermi „F”	
$k = \sqrt{2}$	2.9 s	6.9 s
$k = -2/3$	2.9 s	7.9 s
$k = 2$	1.9 s	6.7 s
	Fermi „G”	
$n = 0.5$	8.8 s	2.5 s
$n = 1.5$	14.9 s	3.9 s

Podsumowanie

- kwadratura Tanh-Sinh okazała się najskuteczniejszą z wypróbowanych metod obliczania całek Fermiego-Diraca
- jedynie metoda Gaussa z podziałem przedziału całkowania ma podobną wydajność numeryczną
- jest **jedyną** metodą pozwalającą na obliczanie wartości dla dowolnych indeksów ($k \to -1$ oraz $n < 0$)
- działa dla typów F i G
- łatwa w implementacji, ale wymaga starannego kodowania i zrozumienia rachunku liczb zmiennoprzecinkowych
- algorytm powinien być demonstrowany studentom, zaraz po metodzie trapezów

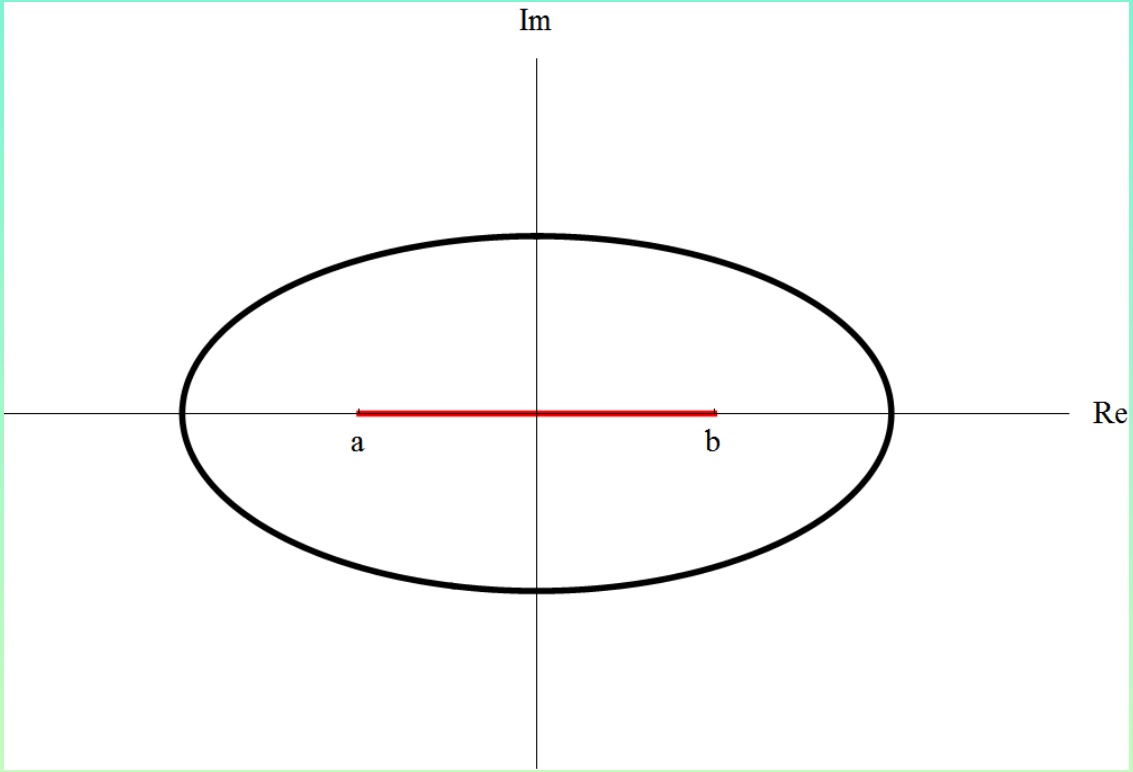
Dziękuję za uwagę !

Referencje

1. Hidetosi TAKAHASI and Masatake MORI, *Double Exponential Formulas for Numerical Integration*, PM. RIMS, Kyoto Univ. **9** (1974), 721-741.
2. Numerical Recipes in C++, Sect. 4.5 *Quadrature by Variable Transformation*, p. 173-179; Sect. 6.10 *Generalized Fermi-Dirac Integrals*.
3. *Mathematica* 8 manual, *Example Implementation of Double Exponential Quadrature*
4. M. Mori, *Discovery of the Double Exponential Transformation and Its Developments*, Publ. RIMS, Kyoto Univ. **41** (2005) 897-935.

Slajdy dodatkowe

Całka konturowa



$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_C \ln\left(\frac{z-a}{z-b}\right) f(z)\,dz$$