Computation of Special Functions

特殊函数计算手册

张善杰　金建铭　著

南京大学出版社

Computation of Special Functions

特殊函数计算手册

张善杰　金建铭　著

南京大学出版社

内容简介

本书较系统地阐述了各种特殊函数的定义、数学性质、算法、数表和程序. 由特定微分方程的解定义的特殊函数有正交多项式(如 Chebyshev、Laguerre 和 Hermite 多项式), Legendre 函数类, Bessel 函数(如球 Bessel、变型 Bessel、Ricatti-Bessel 函数等), Kelvin 函数, Airy 函数, Struve 函数, 超几何函数, 抛物柱函数, 椭圆柱函数和旋转椭球函数; 而由特定积分定义的特殊函数有 Gamma 函数、Beta 函数、误差函数、Fresnel 积分、变型 Fresnel 积分、余弦和正弦积分、三类完全和不完全椭圆积分、Jacobi 椭圆函数, 以及指数积分等. 各种特殊函数计算源程序给在所附光盘中.

本书可供从事物理学、力学、应用数学、大气科学, 电磁场工程、航空航天工程等学科的工程技术和研究人员, 以及高等院校理工科本科生、研究生和教师参考.

图书在版编目(CIP)数据

特殊函数计算手册 / 张善杰, 金建铭著. — 南京 : 南京大学出版社, 2011. 8

ISBN 978-7-305-08714-1

Ⅰ. ①特… Ⅱ. ①张… ②金… Ⅲ. ①特殊函数—计算—手册 Ⅳ. ①O174.6—62

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2011)第 163402 号

出版发行 南京大学出版社
社　　址 南京市汉口路 22 号　　邮　　编 210093
网　　址 http://www.NjupCo.com
出 版 人 左　健

书　　名 特殊函数计算手册
著　　者 张善杰　金建铭
责任编辑 薛志红　　编辑热线 025-83597141

照　　排 南京南琳图文制作有限公司
印　　刷 南京爱德印刷有限公司
开　　本 720×1000　1/16　印张 26.5　字数 580 千
版　　次 2011 年 8 月第 1 版　　2011 年 8 月第 1 次印刷
ISBN 978-7-305-08714-1
定　　价 95.00 元(含光盘)

发行热线 025-83594756　83686452
电子邮箱 Press@NjupCo.com
Sales@NjupCo.com(市场部)

序　言

特殊函数在工程和科学的几乎各个领域都具有重要应用.当要求给出分析的数值结果时,往往就会遇到有关特殊函数的计算.由于大多数特殊函数具有无穷级数或无穷积分的形式,因而其计算并非轻而易举.数十年来,曾有许多数学家和科学家致力于这方面的工作,他们的丰富研究成果部分地反映在著名的 *Handbook of Mathematical Functions* 一书(1964 年美国国家标准局首次出版,由 Milton Abramowitz 和 Irene A. Stegun 主编,共有 28 位科学家参加编写),以及几个知名的商用软件包中.

本书是作者所著 *Computation of Special Functions* 一书(美国 John Wiley & Sons Inc.,1996 年 10 月出版)的中文版.故书中的函数符号及其表达采用原版格式.

M. Abramowitz 和 I. A. Stegun 的手册基本上是对有关特殊函数的公式、曲线和数表的汇编,这确实是一本理想的手册和研究参考书.然而,它并没有涉及到使用计算机的数值计算问题.本书的内容主要是讨论特殊函数的程序计算,其中还包含有 130 个程序组成的较为广泛、完整的特殊函数软件包(附光盘),其中不乏计算复杂、编程难度高的程序,例如 Mathieu 函数、抛物柱函数和旋转椭球波函数等.现今,本书给出的 Fortran 特殊函数软件包已部分(或全部)被译成 C、C++和 Matlab 相应软件包.需要说明的是,与商用软件包不同,本书所提供的并非"黑盒子"式的执行程序,而是具有算法说明的源程序,因而使用者可以方便地灵活使用这些程序,包括直接调用、对程序进行改造和将它们有机地与使用者的主程序相联接;或者译成自己所使用的工作语言.我们希望本书能成为在工程、物理、化学,以及其他领域的科学家们在特殊函数计算方面的一本方便、实用的工具书.

本书共 20 章,前 19 章均由三部分组成.第一部分包含所讨论特殊函数的引言,主要数学性质,以及计算所需的重要公式,其中还包括算

法说明.这一部分可自成体系.第二部分是算法和 Fortran - 77 程序,所有程序全为作者编写,编程中对算法的稳定性、计算精度和效率均给予了特别注意,并仔细校核过.所有特殊函数计算源程序汇集在本书所附光盘中,为方便读者应用,每个程序均有范例.第三部分是特殊函数典型数表,给出它们出于两个目的,首先是为了使我们从中可以很快了解到函数的性态,其次是利用它们可对计算结果进行校验.

下面对各章作一简单介绍:

第 1 章讨论 Bernoulli 和 Euler 多项式及其计算.

第 2 章叙述正交多项式,包括第一类和第二类 Chebyshev 多项式、Laguerre 多项式和 Hermite 多项式,并给出了它们及其导数的计算程序,以及它们在数值积分中的应用.

第 3 章是叙述 Gamma 函数和与之相关的 Beta 函数,以及 Psi 函数.Gamma 函数在计算分数阶 Bessel 函数、Struve 函数、合流超几何函数以及抛物柱函数等函数中具有重要应用.Psi 函数在计算 Bessel 函数,以及分数阶缔合 Legendre 函数等函数中也将会遇到.

第 4 章讨论第一类和第二类 Legendre 函数和缔合 Legendre 函数及其程序计算,对实宗量、复宗量以及具有分数次(Degree)的缔合 Legendre 函数等各种情形均有介绍.

第 5 章介绍计算第一类和第二类 Bessel 函数及其导数,它们是在数学物理方程中最常遇到的特殊函数.本章较详细地讨论各种情形 Bessel 函数的算法和数值计算,诸如零阶和一阶、整数阶、分数阶、实宗量和复宗量的 Bessel 函数.此外还讨论了 Bessel 函数的零点计算,以及 Lambda 函数的数值计算.

第 6 章讨论了第一类和第二类变型 Bessel 函数,它们与 Bessel 函数具有密切关系.本章给出了各种情形变型 Bessel 函数的算法和数值计算,诸如零阶和一阶、整数阶、分数阶、实宗量以及复宗量情形.本章中还讨论了 Hankel 函数的程序计算.

第 7 章叙述涉及 Bessel 函数的几个简单积分的数值计算,给出两组算法,一组基于多项式近似式法,另一组基于级数表示式和渐近展开式.

第 8 章讨论了第一类和第二类球 Bessel 和变型球 Bessel 函数及其

数值计算,这些函数可用初等函数以闭式表示.本章中还讨论了与之有关的 Ricatti-Bessel 函数及其数值计算.

第 9～11 章分别叙述与 Bessel 函数有关的三类函数:Kelvin 函数,Airy 函数和 Struve 函数;给出了这些函数及其导数和积分的程序计算.此外,还给出了 Kelvin 函数和 Airy 函数的零点计算程序.

第 12 章讨论超几何函数和合流超几何函数.由于许多初等函数和特殊函数可以由参数取某些特定值的超几何函数或合流超几何函数给出,因此这是很重要的一类函数.然而,由于它们分别含有三个和两个参量,要给出适用参变量范围宽且又收敛的通用计算程序是困难的.因而,本章仅给出参变量为某些特殊情形时的超几何函数和合流超几何函数的计算程序.

第 13 章讨论了抛物柱函数的定义、主要数学性质及其数值计算,它是在抛物柱坐标系中用分离变量法求解 Helmholtz 波动方程时的解.

第 14 章中介绍 Mathieu 函数(又称椭圆柱函数),给出了计算第一类 Mathieu 函数,以及第一、二类变型 Mathieu 函数的算法和程序.第二类 Mathieu 函数因其在实际中极少应用,而未予讨论.本章中还给出较为丰富的数表,包括特征值、展开式系数和 Mathieu 函数的零点表.

第 15 章讨论长旋转椭球和扁旋转椭球函数,包括其角函数和第一、二类径函数.首先介绍了旋转椭球坐标系,继而讨论了在此坐标系中波动方程的解;较详细地讨论了长旋转椭球函数和扁旋转椭球函数的算法和程序,包括它们的特征值和展开式系数,并给有较为丰富的数表.

第 16～19 章介绍由特定积分定义的特殊函数,它们中有实宗量和复宗量误差函数、Fresnel 余弦和正弦积分、变型 Fresnel 积分、余弦和正弦积分、第一类和第二类完全和不完全椭圆积分、Jacobi 椭圆函数,以及指数积分等.此外,还讨论了误差函数和 Fresnel 余弦和正弦积分复零点.

最后,第 20 章是对特殊函数计算常用的几种方法所作的简要综述,以使读者对这一问题有一清晰和较全面的了解.

作为补充材料,书末附有两个附录.附录 A 是几个微分方程的推导,它们是在各种正交曲线坐标系中采用分离变量法求解 Helmholtz 波动方程时得到的.附录 B 介绍求解非线性方程的根的三种简单方法:

Newton 迭代法、改进的 Newton 迭代法和弦截法. 这些方法常被用来计算特殊函数的零点.

热诚欢迎读者对书中错误不吝给予批评和指正，在此作者表示衷心感谢. 作者深切感谢南京大学电子科学与工程学院吴培亨院士、施毅教授、许伟伟教授、陈健教授和冯一军教授给予的热情关心、支持，以及赵俊明博士和中国电子科技集团公司第十四研究所（南京）孙军博士的技术帮助.

本书的出版得到南京大学“211 工程”建设项目的资助.

张善杰(Shanjie Zhang)
金建铭(Jianming Jin)
2011 年 2 月

目　录

第 1 章　Bernoulli 和 Euler 数

1.1　Bernoulli 数

Bernoulli 和 Euler 数常出现在某些特殊函数的级数展开式中，本章讨论它们的数值计算.

Bernoulli(伯努利)多项式 $B_n(x)$ 由如下展开式定义[1]：

$$\frac{te^{xt}}{e^t-1}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}B_n(x)\quad(|t|<2\pi)\tag{1.1.1}$$

式中左边函数称为 $B_n(x)$ 的生成函数. 当 $x=0$ 时，它退化为

$$\frac{t}{e^t-1}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}B_n(0)\tag{1.1.2}$$

式中，$B_n(0)$ 称为 Bernoulli 数，记为 B_n. Bernoulli 多项式可直接用 Bernoulli 数表示为

$$B_n(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{n!}{k!\ (n-k)!}B_kx^{n-k}\tag{1.1.3}$$

Bernoulli 数 $B_n(n=2,3,\cdots)$ 可应用初值 $B_0=1$ 和 $B_1=-1/2$，由递推公式

$$\sum_{k=0}^{n-1}\frac{1}{k!\ (n-k)!}B_k=0\quad(n\geqslant 2)\tag{1.1.4}$$

依次计算. 为便于计算，可将(1.1.4)式重写成

$$\begin{aligned}B_n&=-\sum_{k=0}^{n-1}\frac{n!}{k!\ (n-k+1)!}B_k\\&=-\left(\frac{1}{n+1}B_0+B_1\right)-\sum_{k=2}^{n-1}\left(\prod_{j=2}^{k}\frac{j+n-k}{j}\right)B_k\quad(n\geqslant 2)\end{aligned}\tag{1.1.5}$$

如此得到的前几个 Bernoulli 数为

$B_0=1$	$B_1=-1/2$
$B_2=1/6$	$B_4=-1/30$
$B_6=1/42$	$B_8=-1/30$
$B_{10}=5/66$	$B_{12}=-691/2730$
$B_{14}=7/6$	$B_{16}=-3617/510$
$B_{18}=43867/798$	$B_{20}=-174611/330$
$B_{2n+1}=0$	$(n=1,2,\cdots)$

将这些 Bernoulli 数代入(1.1.3)式,可得前 10 个 Bernoulli 多项式为

$$B_0(x)=1 \qquad B_5(x)=x^5-\frac{5}{2}x^4+\frac{5}{3}x^3-\frac{1}{6}x$$

$$B_1(x)=x-\frac{1}{2} \qquad B_6(x)=x^6-3x^5+\frac{5}{2}x^4-\frac{1}{2}x^2+\frac{1}{42}$$

$$B_2(x)=x^2-x+\frac{1}{6} \qquad B_7(x)=x^7-\frac{7}{2}x^6+\frac{7}{2}x^5-\frac{7}{6}x^3+\frac{1}{6}x$$

$$B_3(x)=x^3-\frac{3}{2}x^2+\frac{1}{2}x \qquad B_8(x)=x^8-4x^7+\frac{14}{3}x^6-\frac{7}{3}x^4+\frac{2}{3}x^2-\frac{1}{30}$$

$$B_4(x)=x^4-2x^3+x^2-\frac{1}{30} \qquad B_9(x)=x^9-\frac{9}{2}x^8+6x^7-\frac{21}{5}x^5+2x^3-\frac{3}{30}x$$

Bernoulli 多项式的数学性质可见文献[1]. Bernoulli 多项式和 Bernoulli 数常见于含三角函数的一些级数展开式或求和式中,例如[2]

$$\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\cos kx}{k^{2n}}=(-1)^{n-1}\frac{(2\pi)^{2n}}{2(2n)!}B_{2n}\left(\frac{x}{2\pi}\right)$$
$$(n=1,2,3,\cdots;\ 0\leqslant x\leqslant 2\pi) \tag{1.1.6}$$

$$\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\sin kx}{k^{2n-1}}=(-1)^{n}\frac{(2\pi)^{2n-1}}{2(2n-1)!}B_{2n-1}\left(\frac{x}{2\pi}\right)$$
$$(n=1,0<x<2\pi;\ n>1,0\leqslant x\leqslant 2\pi) \tag{1.1.7}$$

特别地,有

$$\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\cos kx}{k^2}=\frac{\pi^2}{6}-\frac{\pi}{2}x+\frac{1}{4}x^2 \quad (0\leqslant x\leqslant 2\pi) \tag{1.1.8}$$

$$\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\cos kx}{k^4}=\frac{\pi^4}{90}-\frac{\pi^2}{12}x^2+\frac{\pi}{12}x^3-\frac{1}{48}x^4 \quad (0\leqslant x\leqslant 2\pi) \tag{1.1.9}$$

$$\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\sin kx}{k}=\frac{1}{2}(\pi-x) \quad (0<x<2\pi) \tag{1.1.10}$$

$$\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\sin kx}{k^3}=\frac{\pi^2}{6}x-\frac{\pi}{4}x^2+\frac{1}{12}x^3 \quad (0\leqslant x\leqslant 2\pi) \tag{1.1.11}$$

$$\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\sin kx}{k^5}=\frac{\pi^4}{90}x-\frac{\pi^2}{36}x^3+\frac{\pi}{48}x^4-\frac{1}{240}x^5 \quad (0\leqslant x\leqslant 2\pi) \tag{1.1.12}$$

其他例子有[1]

$$\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\cos kx}{k}=-\ln\left(2\sin\frac{x}{2}\right) \quad (0<x<2\pi) \tag{1.1.13}$$

$$\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\sin kx}{k^2}=x(1-\ln|x|)+\sum_{k=1}^{\infty}(-1)^{k-1}\frac{B_{2k}}{(2k+1)2k(2k)!}x^{2k+1}$$
$$(0\leqslant x\leqslant \pi/2) \tag{1.1.14}$$

$$\sum_{k=1}^{\infty}(-1)^{k-1}\frac{\sin kx}{k^2}=x\ln 2-\sum_{k=1}^{\infty}(-1)^{k-1}\frac{(2^{2k}-1)B_{2k}}{(2k+1)2k(2k)!}x^{2k+1}$$
$$(\pi/2<x<\pi) \tag{1.1.15}$$

Bernoulli 数可以采用递推公式(1.1.5)计算，当用此递推公式编程运行时，可观察到一个有趣现象：我们先没有利用 $B_{2n+1}=0(n\geqslant 1)$ 这一结果，而直接按(1.1.5)式编程计算(记为算法 1)，此时所得计算结果给在 1.4 节中表 1.1 第二列中，除得出了正确的 B_{2n} 的值，同时也得出了异于零的 $B_{2n+1}=0(n\geqslant 1)$ 的值；由于 $B_{2n+1}=0(n\geqslant 1)$ 乃 Bernoulli 数的基本性质，故在这一计算最后 B_{2n+1} 应赋予零值. 另一方面，当又按(1.1.5)式连同所述基本性质进行编程计算(即在编程中略去包含 B_{2n+1} 各项)时，然与原指望有更好结果相反，所得结果却很不精确，特别是对 n 较大时的 B_{2n} 值，如表 1.1 第三列所示，这是递推过程中有效数字出现了严重丢失之故. 因此，计算 Bernoulli 数的最佳算法是基于采用算法 1，而在算出 Bernoulli 数后再赋值 $B_{2n+1}=0(n\geqslant 1)$；按此算法编写的程序见光盘中 BERNOA.

此外，Bernoulli 数亦可采用如下级数展开式更有效地进行计算：

$$\begin{aligned}B_{2n}&=(-1)^{n-1}\frac{2(2n)!}{(2\pi)^{2n}}\left(1+\frac{1}{2^{2n}}+\frac{1}{3^{2n}}+\cdots\right)\\&=(-1)^{n-1}2\left(1+\frac{1}{2^{2n}}+\frac{1}{3^{2n}}+\cdots\right)\prod_{m=1}^{2n}\frac{m}{2\pi}\quad(n=1,2,3,\cdots)\end{aligned} \tag{1.1.16}$$

此式可由(1.1.6)式令其中 $x=0$ 得出，它对大 n 收敛很快. 按此算法编写的程序见光盘中 BERNOB.

1.2 Euler 数

Euler(欧勒)多项式 $E_n(x)$ 由如下展开式定义[1]：

$$\frac{2e^{xt}}{e^t+1}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}E_n(x)\quad(|t|<\pi) \tag{1.2.1}$$

式中左边函数称为 $E_n(x)$ 的生成函数. 当 $x=1/2$ 时，它退化为

$$\frac{2e^{t/2}}{e^t+1}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}E_n\left(\frac{1}{2}\right) \tag{1.2.2}$$

这里，记 Euler 数为 E_n，并定义它为

$$E_n=2^nE_n(1/2)$$

由于(1.2.2)式的左边是 t 的偶函数，当 n 为奇数时，显然有 $E_n(1/2)=0$，即当 $n=1,3,5,\cdots$ 时，$E_n=0$. Euler 多项式可以直接用 Euler 数表示为

$$E_n(x)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{n!\ E_k}{2^kk!\ (n-k)!}(x-1/2)^{n-k} \tag{1.2.3}$$

Euler 数 E_n 可以采用初值 $E_0=1$ 和递推公式

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(2n)!}{(2k)!\ (2n-2k)!}E_{2k}=0\quad(n\geqslant 1)\tag{1.2.4}$$

依次计算. 为便于计算,可将(1.2.4)式重写成

$$\begin{aligned}E_{2n}&=-\sum_{k=0}^{n-1}\frac{(2n)!}{(2k)!\ (2n-2k)!}E_{2k}\\&=-\left[E_0+\sum_{k=1}^{n-1}\left(\prod_{j=1}^{2k}\frac{2n-2k+j}{j}\right)E_{2k}\right]\end{aligned}\tag{1.2.5}$$

如此得到的前几个 Euler 数为

$$\begin{array}{ll}E_0=1 & E_2=-1\\ E_4=5 & E_6=-61\\ E_8=1385 & E_{10}=-50521\\ E_{12}=2702765 & E_{14}=-199360981\\ E_{16}=19391512145 & E_{18}=-2404879675441\\ E_{20}=370371188237525 & E_{2n+1}=0(n=1,2,\cdots)\end{array}$$

将这些 Euler 数代入(1.2.3)式,可得前 10 个 Euler 多项式为

$$\begin{array}{ll}E_0(x)=1 & E_5(x)=x^5-\frac{5}{2}x^4+\frac{5}{2}x^2-\frac{1}{2}\\ E_1(x)=x-\frac{1}{2} & E_6(x)=x^6-3x^5+5x^3-3x\\ E_2(x)=x^2-x & E_7(x)=x^7-\frac{7}{2}x^6+\frac{35}{4}x^4-\frac{21}{2}x^2+\frac{17}{8}\\ E_3(x)=x^3-\frac{3}{2}x^2+\frac{1}{4} & E_8(x)=x^8-4x^7+14x^5-28x^3+17x\\ E_4(x)=x^4-2x^3+x & E_9(x)=x^9-\frac{9}{2}x^8+21x^6-63x^4+\frac{153}{2}x^2-\frac{31}{2}\end{array}$$

Euler 多项式的数学性质亦可见文献[1]. Euler 多项式和 Euler 数常见于含三角函数的一些级数展开式或求和式中,例如[2]

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\cos(2k+1)x}{(2k+1)^{2n}}=(-1)^n\frac{\pi^{2n}}{4(2n-1)!}E_{2n-1}\left(\frac{x}{\pi}\right)$$
$$(n=1,2,3,\cdots;\ 0\leqslant x\leqslant\pi)\tag{1.2.6}$$

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\sin(2k+1)x}{(2k+1)^{2n+1}}=(-1)^n\frac{\pi^{2n+1}}{4(2n)!}E_{2n}\left(\frac{x}{\pi}\right)$$
$$(n=0,0<x<\pi;\ n>0,0\leqslant x\leqslant\pi)\tag{1.2.7}$$

特别地,有

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\cos(2k+1)x}{(2k+1)^2} = \frac{\pi}{4}\left(\frac{\pi}{2} - x\right) \quad (0 \leqslant x \leqslant \pi) \tag{1.2.8}$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\cos(2k+1)x}{(2k+1)^4} = \frac{\pi}{24}\left(x^3 - \frac{3\pi}{2}x^2 + \frac{\pi^3}{4}\right) \quad (0 \leqslant x \leqslant \pi) \tag{1.2.9}$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\sin(2k+1)x}{2k+1} = \frac{\pi}{4} \quad (0 < x < \pi) \tag{1.2.10}$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\sin(2k+1)x}{(2k+1)^3} = \frac{\pi}{8}x(\pi - x) \quad (0 \leqslant x \leqslant \pi) \tag{1.2.11}$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\sin(2k+1)x}{(2k+1)^5} = \frac{\pi}{96}x(x^3 - 2\pi x^2 + \pi^3) \quad (0 \leqslant x \leqslant \pi) \tag{1.2.12}$$

Euler 数可采用递推公式(1.2.5)计算，相应计算子程序见光盘中 EULERA (方法 1). 此外，Euler 数还可采用如下级数表示式更有效地进行计算：

$$\begin{aligned} E_{2n} &= (-1)^n \frac{2^{2n+2}(2n)!}{\pi^{2n+1}}\left(1 - \frac{1}{3^{2n+1}} + \frac{1}{5^{2n+1}} - \cdots\right) \\ &= (-1)^n \frac{4}{\pi}\left(1 - \frac{1}{3^{2n+1}} + \frac{1}{5^{2n+1}} - \cdots\right) \prod_{m=1}^{2n} \frac{2m}{\pi} \quad (n = 1, 2, 3, \cdots) \end{aligned} \tag{1.2.13}$$

此式可由(1.2.7)式令其中 $x=\pi/2$ 得出，它对大 n 收敛很快. 按此算法编写的计算程序见光盘中 EULERB(方法 2).

Bernoulli 和 Euler 数的列表见下节表 1.2.