

Н.Н. Белов

РАСЧЕТ ФУНКЦИИ РИККАТИ–БЕССЕЛЯ ВОСХОДЯЩЕЙ РЕКУРСИЕЙ

Построены критерии оценки длины корректно рассчитанной последовательности функций Риккати–Бесселя первого рода (ФРБ1). Рассмотрены длины последовательностей, корректно рассчитанные с помощью восходящей рекурсии при использовании одинарной, двойной и четверной точности представления комплексных чисел. Предложены алгоритмы контроля точности расчетов ФРБ1, обеспечивающие численные исследования по теории Ми без резервирования оперативной памяти для массивов ФРБ1, что дает возможность проведения расчетов по теории Ми до рекордно больших значений параметра дифракции аэрозольных частиц ($\sim 10^6$ и более).

Взрыв частиц аэрозоля в мощных световых пучках, возникновение в твердых частицах внутренних напряжений, зарождение плазменного микроочага в объеме частиц определяются численным моделированием распределения интенсивности излучения в частице по теории Ми [1]. Члены рядов Ми являются функционалами, в которые входят функции $\varphi_k(z)$ Риккати–Бесселя первого рода (ФРБ1). Расчет ФРБ1 комплексного аргумента вызывает особые затруднения [2], [3]. В связи с этим стандартные программы расчета ФРБ1 комплексного аргумента до настоящего времени отсутствуют. Увеличение возможностей расчета ФРБ1 при переходе от одинарной точности к двойной проанализировано в [4]. В настоящей статье проведен анализ возможности использования восходящей рекурсии вида [5]–[7]

$$f_{l+1}(z) = \frac{2l+1}{z} f_l(z) - f_{l-1}(z), \quad (1)$$

которая справедлива для всех функций Риккати–Бесселя. При этом учитывается, что первые две функции $\varphi_0(z)$ и $\varphi_1(z)$ равны [5], [7]

$$\varphi_0(z) = \sin z, \quad (2)$$

$$\varphi_1(z) = \frac{\sin z}{z} - \cos z. \quad (3)$$

Ошибки расчета по (1) связаны с накоплением погрешности расчета $\varphi_l(z)$ по мере увеличения l . На рис. 1 приведены результаты расчета действительной (рис. 1, а) и мнимой (рис. 1, б) частей последовательностей функций Риккати–Бесселя первого рода комплексного аргумента $z = 10 - i10$ по восходящей рекурсии (1) с одинарной (кривая 1), с двойной (кривая 2) и с четверной (кривая 3) точностью. По оси абсцисс отложен номер нижнего индекса функций. Из рис. 1 видно, что на начальных этапах расчета восходящей рекурсии результаты расчета не зависят от точности представления числа. Однако, начиная с номера l_1 , расчет с одинарной точностью приводит к экспоненциальному нарастанию ошибки. При этом расчеты с двойной точностью не приводят к заметным ошибкам и при больших значениях l , вплоть до l_2 , которое превосходит l_1 . Номера l_1 и l_2 , характеризующие длины последовательностей ФРБ1, которые можно рассчитать с приемлемой точностью с помощью одинарной и двойной точности представления комплексного числа, определяются значениями действительной r и мнимой μ частей комплексного аргумента $z = r + i\mu$. Знаки r и μ не влияют на длины l_1 и l_2 последовательностей ФРБ1. Например, $l_1 = 14$ и $l_2 = 25$ для всех комплексных аргументов вида $z_1 = 10 + i10$, $z_2 = 10 - i10$, $z_3 = -10 + i10$ и $z_4 = -10 - i10$. Аналогично, если $|r| = 1$, а $|\mu| = 10$, то независимо от знаков r и μ длина $l_1 = 8$, а длина $l_2 = 16$.

На рис. 2, а приведены зависимости l_1 (кривые 1, 3, 5–7) и l_2 (2, 4, 6, 8, 9) от величины действительной части $|r|$ аргумента при фиксированном значении мнимой части $|\mu| = 10^{-2}$ (кривые 1 и 2); 30 (3, 4); 50 (5, 6); 100 (7, 8); 160 (6, 9). На рис. 2, б приведены зависимости от $|\mu|$ величин l_1 (кривые (1, 3, 5, 7)) и l_2 (2, 4, 6, 8) при фиксированном значении $|r| = 10^{-2}$ (1, 2); 1 (3, 4); 30 (5, 6) и 50 (7, 8).

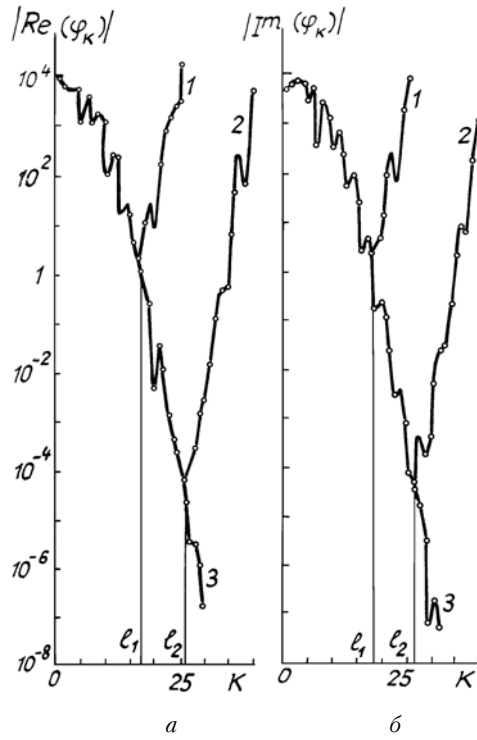


Рис. 1. Модуль действительной (рис. 1, а) и мнимой (рис. 1, б) частей последовательностей функций Риккати—Бесселя первого рода

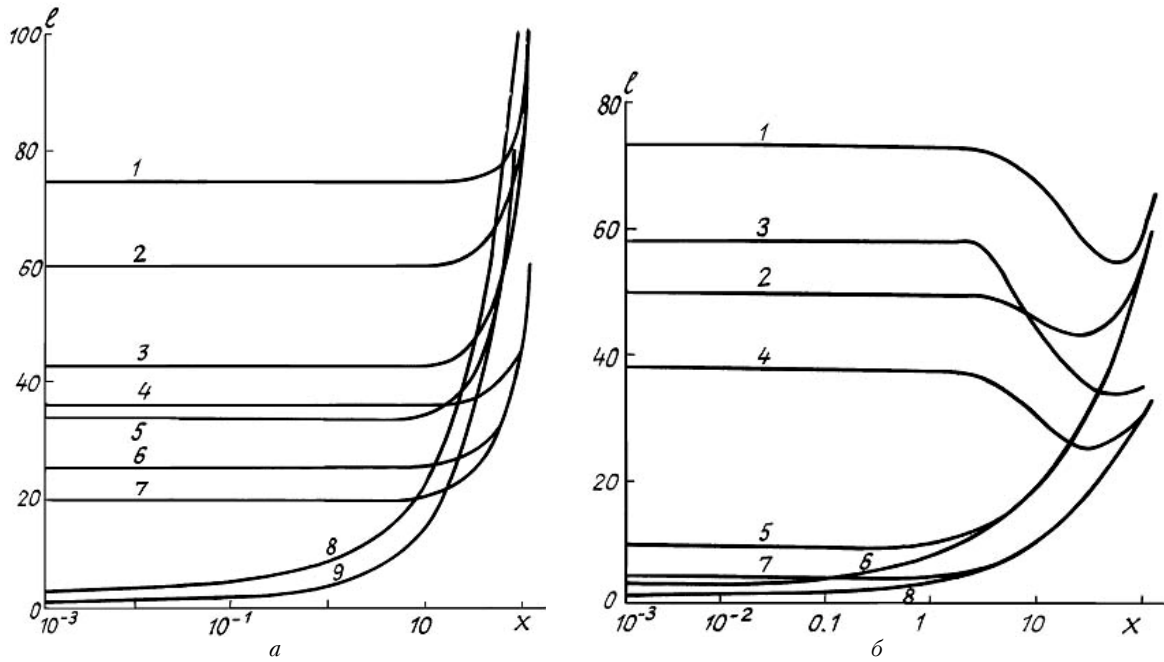


Рис. 2. Длины l_1 и l_2 последовательностей функций Риккати—Бесселя первого рода, корректно рассчитанные при использовании одинарной и двойной точности представления комплексных чисел

Обозначим через x значение варьируемой величины аргумента (в случае рис. 2, а это $|r|$, рис. 2, б — $|\mu|$), а через p — значение параметра (рис. 2, а — $|\mu|$, рис. 2, б — $|r|$). Из рис. 2, а, б видно, что при $x \leq p$ величины, l_1 и l_2 , не зависят от x и определяются величиной p :

$$l_1 \approx c_1 |p| + 1, \tag{4}$$

$$l_2 \approx c_2 |p| + 3, \tag{5}$$

где $c_1 \approx 0,5-0,8$; а $c_2 \approx 1$. Исключение составляет область существования минимума $l_1(z)$ и $l_2(z)$ при $|\mu| \geq 10$ (см. рис. 2, б). В области $x > p$ значения l_1 и l_2 перестают зависеть от величины параметра. Из рис. 2, а, б видно, что при больших x все кривые l_1 и l_2 имеют тенденцию к слиянию в две группы. Расчеты ФРБ1 методом восходящей рекурсии возможно проводить до $|r| \leq \pi \cdot 2^{18}$ и $|\mu| \leq 8,08$ (одинарная точность), $|r| \leq \pi \cdot 2^{50}$ и $|\mu| \leq 17,3$ (двойная точность) и $|r| \leq 2^{100}$ и $|\mu| \leq 37,4$ (четверная). Ограничение на $|r|$ налагается допустимым значением аргументов синуса и косинуса, а второе — характерно для расчета экспоненты. Величина l_1 в большинстве случаев недостаточна для расчетов по теории Ми. Величина l_2 , наоборот, достаточна в большинстве случаев. Однако целесообразно предусмотреть возможность использования последовательности ФРБ1, длина которой существенно превышает l_2 . Такую возможность дают расчеты ФРБ1 по (1) с четверной точностью. Действительно, раз переход от одинарной точности к двойной увеличил длину корректно вычисленной последовательности почти вдвое (см. рис. 1), то переход к четверной точности приведет к дальнейшему увеличению этой длины. При этом на первый план встает задача определения длины l_4 последовательности ФРБ1, которая корректно рассчитана по (1) с использованием четверной точности представления комплексных чисел. Из-за отсутствия возможности дальнейшего увеличения точности представления комплексных чисел (например, перехода к восьмерной точности) для проверки точности расчета ФРБ1 целесообразно использовать стремление к нулю с ростом l следующих функций:

$$F_1(l) = \sum_{\kappa=0}^l (2\kappa + 1) \left(\frac{\varphi_{\kappa}(z)}{z} \right)^2 - 1; \quad (6)$$

$$F_2(l) = \sum_{\kappa=0}^l (-1)^{\kappa} (2\kappa + 1) \frac{2\varphi^2(z)}{z \sin(2z)} - 1; \quad (7)$$

$$F_3(l) = \xi_l(z) \varphi'_l(z) - \xi'_l(z) \varphi_l(z) - i; \quad (8)$$

$$F_4(l) = \varphi_{l-1}(z) \eta_l(z) - \varphi_l(z) \eta_{l-1}(z) - 1; \quad (9)$$

$$F_5(l) = \varphi_{l-1}(z) \eta_{l+1}(z) - \varphi_{l+1}(z) \eta_{l-1}(z) - \frac{2l+1}{z}; \quad (10)$$

$$F_6(l) = \varphi_l(z) + i\eta_l(z) - \xi_l(z), \quad (11)$$

где $\eta_l(z)$ и $\xi_l(z)$ — функции Риккати—Бесселя второго и третьего рода, $\varphi'_l(z)$ и $\xi'_l(z)$ — производные ФРБ1 и ФРБ3, рассчитываемые по формуле [5], [7],

$$f'_l(z) = f_{l-1}(z) - \frac{l}{z} f_l(z).$$

Расчет ФРБ2 и ФРБ3 по (1) не вызывает существенных погрешностей. Формулы для первых двух функций $\eta_l(z)$ и $\xi_l(z)$, необходимые для (1), имеют вид [7]

$$\eta_0(z) = \cos z; \quad \eta_1(z) = \sin z + \frac{\cos z}{z};$$

$$\xi_0(z) = i \exp(-iz); \quad \xi_1(z) = \left(\frac{i}{z} - 1 \right) \exp(-iz).$$

Выражения (6) и (7) представляют собой модификации формул для бесконечных рядов ФРБ1 [5]

$$\sum_{\kappa=0}^{\infty} (2\kappa + 1) \left(\frac{\varphi_{\kappa}(z)}{z} \right)^2 = 1;$$

$$\sum_{\kappa=0}^{\infty} (-1)^{\kappa} (2\kappa + 1) \frac{\varphi_{\kappa}^2(z)}{z} = \frac{\sin 2z}{2},$$

удобные для проверки сходимости рядов. Формулы (8)–(11) получены алгебраическими преобразованиями известных свойств ФРБ [5], [7]. При малых $|\mu| < 1$ все критерий (6)–(10) показывают резкое возрастание функций $F_1(l)$, $F_2(l)$, ..., $F_5(l)$, начиная с близких значений l , наименьшее из которых можно принять за длину l_4 последовательности ФРБ1, корректно вычисленной по (1). Формула (11) пригодна для оценки l_4 лишь при очень малых $|\mu| \leq 10^{-4}$. С ростом $|\mu|$ применимость соотношений (8)–(11) ухудшается. Например, при $|\mu| = 50$ эти формулы вовсе не пригодны для оценки l_4 . Расчеты,

проведенные по (6) и (7) в широком диапазоне $|\mu|$ (от 10^{-3} до 50), показали, что минимумы зависимостей $F_1(l)$ и $F_2(l)$ всегда соответствуют близким значениям l , меньшее из которых дает надежную оценку l_4 . Необходимо отметить, что при малых $l < l_2$ зависимости $F_1(l)$ и $F_2(l)$ могут иметь некоторые пульсации. Поэтому поиск минимумов $F_1(l)$ и $F_4(l)$ целесообразно начинать с $l > l_2$. Проведенное исследование открывает широкие перспективы для расчетов по теории Ми. Без каких-либо массивов, содержащих промежуточные данные, по (1) можно выполнить расчеты ФРБ1 для столь больших значений аргумента, как $(4, 10^5 - i100)$. Встречная рекурсия потребовала бы слишком большие объемы оперативной памяти для результатов промежуточных расчетов, которые необходимо откорректировать на последнем шаге.

На ЕС-1046 расчет указанным выше методом сечений ослабления и рассеяния частицы с параметром дифракции 10^6 и показателем преломления $1,33 - i10^{-6}$ занимает несколько часов процессорного времени и требует оперативную память в несколько десятков килобайт. Таким образом, предлагаемый метод снимает ограничение на размер частицы, позволяет широкое использование персональных ЭВМ для расчетов по теории Ми, а в достижении рекордно больших параметров дифракции, для которых выполнены расчеты по теории МИ, теперь могут участвовать не только супер-ЭВМ с гигантской оперативной памятью, но и любая ЭВМ с достаточной разрядной сеткой представления комплексного числа.

1. Белов Н. Н. Оптический разряд в аэрозоле в условиях острой фокусировки излучения. / Дис. на соискание уч. степ. докт. ф-м. н. М., 1989. 386 с.
2. Дейрменджан Д. Рассеяние электромагнитного излучения сферическими полидисперсными частицами. М.: Мир, 1971. 164 с.
3. Хюлст Г. Ван де. Рассеяние света малыми частицами. М.: ИЛ, 1961. 536 с.
4. Лукашевич Н. Л., Шарп В. П. Численный расчет характеристик рассеяния света полидисперсными сферическими частицами. М., 1977, 62 с. (Препринт / Ин-т прикл. мат. им. М.В. Келдыша, № 83).
5. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1972. 828 с.
6. Акулинин А. А. Обзор некоторых схем расчета оптических характеристик рассеяния электромагнитного излучения одиночной однородной сферической частицей. Деп. ВИНТИ № 3388-B87 от 16.4.87.
7. Шифрин К. С. Рассеяние света в мутной среде. М.—Л., 1951. 272 с.

Научно-исследовательский физико-химический институт им. Л. Я. Карпова,
Москва

Поступила в редакцию
9 октября 1991 г.

N. N. Belov. Computation of Riccati—Bessel Function by Rising Recursion Method.

The criteria are constructed to evaluate the length of correct computed sequence for Riccati—Bessel function of the first kind (FRB1). The length of the correct computed sequences are studied by rising recursion method using the single, double and quadruple precision for representation of the complex numbers. The algorithms for computations of FRB1 and for precision control are proposed. They allow the numerical investigations by Mie theory to be conducted without reserving on-line working storage for FRB1 -values. The algorithms also enable one to make computations by the Mie theory for the aerosol particle diffraction parameter up to 10^6 and above.