

Н.Н. Белов

ЛОГАРИФМИЧЕСКАЯ ПРОИЗВОДНАЯ ФУНКЦИЙ РИККАТИ–БЕССЕЛЯ ПЕРВОГО РОДА В РАСЧЕТАХ ПО ТЕОРИИ МИ

Предложены критерии оценки точности расчета логарифмической производной A_n функций Риккати–Бесселя первого рода в численных исследованиях по теории Ми. Предложен комбинированный алгоритм расчета A_n , позволяющий многократно снизить требования к оперативной памяти и обеспечить возможность проведения расчетов оценки частицы с параметром дифракции 10^6 и более на персональных ЭВМ.

1. Введение

Результаты численных исследований оптики аэрозоля по теории Ми широко используются в экологии при изучении дисперсных загрязнений атмосферы и воды; в астрофизике для диагностики параметров межзвездного вещества, атмосфер планет и комет; в микробиологии, химии, технологии полимеров для определения размеров и концентрации макромолекулярных образований; в физике плазмы и оптике – для определения параметров неоднородностей [1–4]. Основные трудности таких вычислений представляет нахождение логарифмической производной A_n функций Риккати–Бесселя первого рода комплексного аргумента $z = r + i\mu$ [5].

В данной статье сопоставлены известные методы расчета A_n и предложены критерии оценки точности их. Новый метод расчета A_n позволяет многократно снизить требования к оперативной памяти и несколько уменьшить время счета. При этом впервые появилась возможность проведения расчетов оптики частицы с параметром дифракции 10^6 и более на персональных ЭВМ.

Использование логарифмической производной A_n функции Риккати–Бесселя первого рода (ФРБ1) существенно расширило область применимости численных исследований по теории Ми на современных ЭВМ [5]. Для расчета значений A_n широко используется нисходящая рекурсия вида [6–8]

$$A_{n-1} = n/z - [1/(A_n + n/z)]. \quad (1.1)$$

При этом расчет начинается с некоторого $N > |z|$, при котором полагают [6, 7]

$$A_N = 0. \quad (1.2)$$

Предложение (1.2) не согласуется с асимптотическим поведением A_n , которое имеет вид [6]

$$A_N \approx (N + 1) z^{-1} \quad (1.3)$$

и указывает на существенное возрастание A_n с ростом n . Несмотря на это, подстановка (1.2) в (1.1) позволяет найти корректные значения A_n для $n = 1, 2, \dots, l$, где величина l несколько меньше исходного номера N , с которого начато вычисление последовательности A_n . Это обеспечивает принципиальная устойчивость процедуры вычислений по (1.1) [6]. Недостаток этой процедуры состоит в необходимости удержания в оперативной памяти ЭВМ всех рассчитанных значений A_n . Кроме того, длина l корректно рассчитанной подпоследовательности A_n должна быть достаточной для суммирования ряда Ми.

Отсутствие методов оценки точности расчетов A_n исключает возможность оперативного контроля выполнения условий сходимости ряда Ми в пределах длины l корректно рассчитанной

последовательности. В настоящей статье изучены возможности восходящей рекурсии. Показана целесообразность расчета A_n по значению соответствующей непрерывной дроби при $n \geq 0,3|z| + 1$. Построен комбинированный алгоритм расчета A_n , он позволяет отказаться от удержания в оперативной памяти всего массива A_n , кроме одного-двух текущих значений. В результате появляется возможность производить расчеты по теории Ми на персональных ЭВМ, затрачивая на это не более 50 Кбайт оперативной памяти независимо от величины параметра дифракции частицы (до 10^6 и выше) и коэффициента поглощения света веществом частицы.

2. Критерии точности расчета A_n

Расчеты по (1.1) и (1.2) дают последовательность A_n , $n = 1, 2, \dots, N$, начальная часть которой ($n = 1, 2, \dots, l$) рассчитана корректно, а завершающая часть ($n = l+1, \dots, N$) характеризуется недопустимо высокой погрешностью. Оценки значения l проводятся, как правило, на интуитивном уровне, поскольку критерии точности расчета последовательности A_n отсутствуют. В то же время такие критерии можно получить из соотношений между функциями Риккати–Бесселя первого φ_n , второго χ_n и третьего ξ_n родов [9, 10]:

$$\xi_n \varphi'_n - \xi'_n \varphi_n = i; \quad (2.1)$$

$$\varphi_n \chi_{n-1} - \varphi_{n-1} \chi_n = z^4; \quad (2.2)$$

$$\varphi_{n+1} \chi_{n-1} - \varphi_{n-1} \chi_{n+1} = (2n+1)z^5. \quad (2.3)$$

Производные φ'_n и $\xi'_n(z)$ определены соотношением вида [10]

$$f'_n = f_{n-1} - (n/z)f_n. \quad (2.4)$$

Подставляя (2.4) в формулу, выражающую определение логарифмической производной ФРБ1 [5],

$$A_n = \varphi'_n \varphi_n^{-1}, \quad (2.5)$$

Имеем

$$A_n = \varphi_{n-1} \varphi_n^{-1} - (n/z). \quad (2.6)$$

Запишем соотношения (2.1)–(2.3) в виде

$$(\xi_n \varphi'_n - \xi'_n \varphi_n) / (\xi_{n-1} \varphi'_{n-1} - \xi'_{n-1} \varphi_{n-1}) = 1; \quad (2.7)$$

$$(\varphi_n \chi_{n-1} - \varphi_{n-1} \chi_n) / (\varphi_{n-1} \chi_{n-2} - \varphi_{n-2} \chi_{n-1}) = 1; \quad (2.8)$$

$$(\varphi_{n+1} \chi_{n-1} - \varphi_{n-1} \chi_{n+1}) / (\varphi_{n+2} \chi_n - \varphi_{n+2} \chi_n) = (2n+1)/(2n+3). \quad (2.9)$$

Подставляя (2.6) в (2.7)–(2.9) и используя связь между ФРБ1 [10]

$$\varphi_{n+2} = [(2n+3)/z] \varphi_{n+1} - \varphi_n, \quad (2.10)$$

получаем следующие соотношения:

$$F_1(l) = A_l (\xi_l - A_{l-1} \xi_{l-1} + \xi'_{l-1}) - (l/z) A_{l-1} \xi_{l-1} - \xi'_l + \xi'_{l-1} (l/z), \quad (2.11)$$

$$F_2(l) = (A_l + l/z)^{-1} \chi_{l-1} - \chi_l - \chi_{l+2} + [A_{l-1} + (l-1)/z] \xi_{l-1}, \quad (2.12)$$

$$F_3(l) = \frac{\xi_{l-1} - (A_l + l/z) [A_{l+1} + (l+1)/z] \xi_{l+1}}{[(2l+3)/z] \xi_l - (\xi_l + \xi_{l+2}) [A_{l+1} + (l+1)/z]} - \frac{2l+1}{2l+3}, \quad (2.13)$$

Критерием точности расчета значений сферических функций и $A_n(z)$ является близость нулю функций $F_1(l)$, $F_2(l)$ и $F_3(l)$.

Еще одним критерием точности расчета $A_n(z)$ является соотношение, вытекающее из (2.5) и (2.6),

$$F_4(n) = A_n - (\alpha(z) - n) z^{-1}, \quad (2.14)$$

где $\alpha(z)$ – непрерывная дробь вида [11]

$$\alpha(z) = 2n + 1 - \frac{z^2}{2n + 3 - \left\{ \frac{z^2}{2n + 5 - (z^2/\dots)} \right\}}, \quad (2.15)$$

равная отношению ФРБ1 вида [11]

$$\alpha(z) = z (\varphi_{n-1} / \varphi_n). \quad (2.16)$$

Процедура расчета $\alpha(z)$ обсуждена ниже. Резкое увеличение $F_1(l)$, ..., $F_4(l)$ с ростом l является указанием на возможность недопустимого возрастания ошибки. Расчеты $F_1(l)$, ..., $F_4(l)$ для последовательности A_n , рассчитанной по (1.1)–(1.3) при $z = 10 - i10$, начиная с $N = 40$, показали следующее. Использование при расчете A_n вместо одинарной точности четверной точности представления комплексных чисел не увеличивает скорость сходимости нисходящей последовательности. В рассматриваемом случае переход от (1.2) к (1.3) приводит к увеличению на один шаг длины l последовательности $A_n(z)$, рассчитанной с точностью до третьего знака после запятой. При использовании (1.2) $l = 37$, для (1.3) $l = 38$. С ростом модуля мнимой части z возрастает отличие от нуля стартовых значений $F_1(l)$, ..., $F_4(l)$. Переход с одинарной точности к четвертой обеспечивает снижение абсолютной величины стартовых значений $F_1(l)$, ..., $F_4(l)$. Таким образом, в нисходящей рекурсии предпочтительно начинать счет с асимптотического значения A_n , а не с нуля. Глубину корректно рассчитываемой последовательности можно определять по (2.11)–(2.14).

3. Расчет последовательности значений логарифмической производной ФРБ1 с помощью восходящей рекурсии

$$A_n = -n/z + [(n/z) - A_{n-1}]^{-1}. \quad (3.1)$$

Начальное значение $A_0(z)$, подставляемое в (3.1) для инициирования цепочки расчетов $A_n(z)$, равно [5–7]

$$A_0 = \operatorname{ctg} z. \quad (3.2)$$

Формула для котангенса комплексного числа имеет вид [6]

$$\operatorname{tg} z = \frac{\sin(r) \cos(r) + i \operatorname{sh}(\mu) \operatorname{ch}(\mu)}{\sin^2(r) \operatorname{sh}^2(\mu)}.$$

При высоких μ вместо (3.2) во избежание ошибок переполнения целесообразно использовать асимптотическое значение котангенса

$$A_0 = \begin{cases} (0, i) & \text{при } \mu \leq -\beta, \\ (0, -i) & \text{при } \mu \geq \beta, \end{cases} \quad (3.3)$$

где $\beta \approx 170$ [6]. Однако величина A_0 становится равной своему асимптотическому значению (3.3) при $\beta \ll 170$. Это достигается тем раньше, чем меньше число разрядов используется для представления действительного числа. Поэтому оптимальный выбор значения β , начиная с которого выполняется (3.3), зависит от разрядности представления действительных и комплексных чисел на используемой ЭВМ. В случае одинарной точности (*real*4* и *complex*8*) целесообразно выбирать $\beta \approx 8,08$, для *real*8* и *complex*16* величина $\beta \approx 17,3$, а для четверной точности (*real*16* и *complex*32*) $\beta \approx 37,4$. Использование восходящей рекурсии (3.1) позволяет отказаться от удержания в оперативной памяти всех значений A_n , кроме двух последних. Этот выигрыш сопровождается опасностью возникновения ошибок накопления, характерных для (3.1).

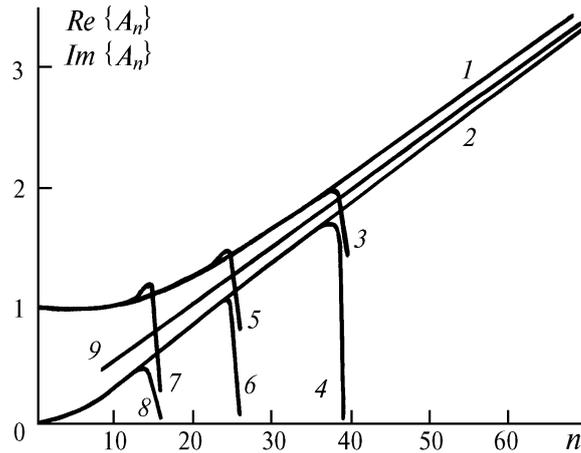


Рис. 1. Результаты расчета последовательности $Re\{A_n\}$ (кривые 2,4,6,8,9) и $Im\{A_n\}$ (1,3,5,7,9) для $z = 10 - i10$ с одинарной (кривые 7 и 8), двойной (5 и 6) и четверной (3 и 4) точностью по восходящей рекурсии (3.1). Кривые 1 и 2 рассчитаны по непрерывной дроби, см. (4.1). Прямая 9 показывает результат асимптотической оценки $Re\{A_n\}$ и $Im\{A_n\}$.

Расчет по (3.1) приводит к существенным ошибкам при $n \gtrsim |z|$ [5–7]. Этим объяснены ошибки расчета по теории Ми факторов эффективности для металлических частиц с параметром дифракции ...к $\rho... > 30$ [5]. Шаг, на котором в последовательности A_n возникает ошибка, зависит от числа разрядов в представлении машинного числа. На рис. 1 даны результаты расчета последовательности $Re\{A_n\}$ (кривые 2, 4, 6, 8) и $Im\{A_n\}$ (1, 3, 5, 7) для $z = (10, -10)$ с одинарной (кривые 7 и 8), двойной (5 и 6) и четверной (3 и 4) точностью представления комплексных чисел. При малых n все результаты расчетов A_n совпадают между собой. С ростом n накопление ошибок, характерное для восходящей последовательности, приводит к тому, что расчеты с одинарной точностью (кривые 7 и 8), начиная с $l_1 = 15$, характеризуются недопустимо большой ошибкой. Использование двойной точности при поиске последовательности A_n по (3.1) $z = 10 - i10$ дает корректные результаты вплоть до $l_2 = 24$, а четверной – вплоть до $l_3 = 38$.

На рис. 2 приведены результаты расчета l_1, l_2 и l_3 в зависимости от значений действительной r (а) и мнимой (б) частей комплексного аргумента $z = r + i\mu$. (На рис. 2, а по оси ординат отложены модули отрицательных значений μ .) Обозначим через x значения варьируемой величины аргумента z (рис. 2, а – это r , рис. 2, б – $|\mu|$), а через p – значение параметра (рис. 2, а $|\mu|$, а рис. 2, б – r). Таким образом, при $x \leq p$ значения l_1, l_2 и l_3 зависят не от x , а от p :

$$\begin{aligned} l_1 &\approx 2|p| + 2, \\ l_2 &\approx 4|p| + 4, \\ l_3 &\approx 6|p| + 6. \end{aligned}$$

Исключение составляет область существования минимума $l_1 - l_3$ при $\mu \in (10, 100)$. В области $x > p$ значения $l_1 - l_3$ перестают зависеть от параметра p . Из рис. 2 видно, что при больших x все кривые l_1, l_2 и l_3 имеют тенденцию к слиянию в три группы.

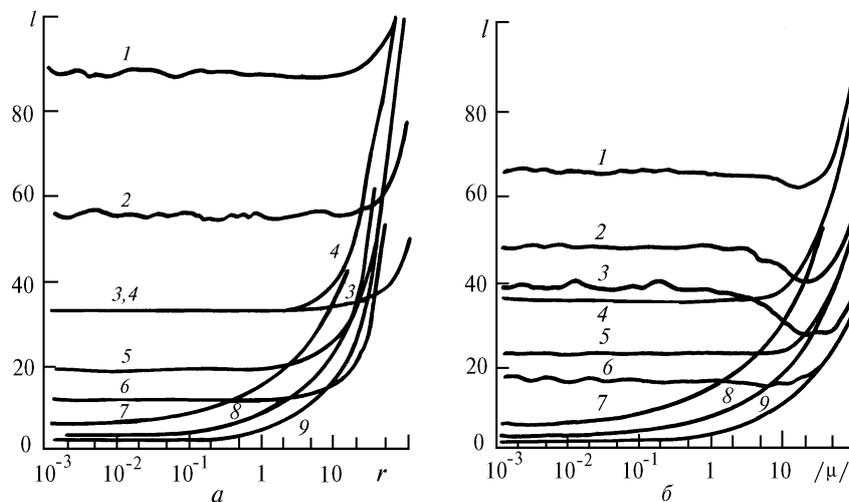


Рис. 2. Длины l_1, l_2, l_3 последовательностей логарифмических производных ФРБ1, корректно рассчитанные при использовании одинарной (кривые 3, 6, 9), двойной (2, 5, 8) и четверной (1, 4, 7) точности представления комплексного числа. По оси абсцисс отложены значения действительной части r аргумента (a) и модуль отрицательной величины μ (b) a – кривые 1–3 получены при $\mu = -100$, 4–6 – $\mu = -10$ и 7–9 – $\mu = -10^{-2}$; b – кривые 1–3 получены при $r = 30$, 4–6 – $r = 10$ и 7–9 – $r = 10^{-2}$

4. Использование непрерывной дроби для нахождения A_n

Подставляя (2.15), (2.16) в (2.6), имеем соотношение

$$A_n = (\alpha(z) - n) z^{-1}, \quad (4.1)$$

которое можно использовать для расчета значения A_n без удержания в оперативной памяти предыдущих значений $A_k, k < n$ [7]. Известны два алгоритма расчета непрерывных дробей – прямой рекуррентный алгоритм (FR -алгоритм) и обратный (BR -алгоритм) [12]. Применительно к (2.15) FR -алгоритм выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} b_k &= 2n + 2k + 1, \\ P_k &= b_k P_{k-1} - z^2 P_{k-2}, \\ Q_k &= b_k Q_{k-1} - z^2 Q_{k-2}, \\ \alpha_k &= P_k Q_k^{-1}, \quad k = 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (4.2)$$

где $P_{-1} = 1, P_0 = 2n + 1, Q_{-1} = 0, Q_0 = 1$. Расчет по FR -алгоритму прекращается, если модуль приращения мнимой и действительной частей α_k при переходе к α_{k+1} не превышает заданного малого значения $\varepsilon > 0$:

$$|\operatorname{Re}(\alpha_k - \alpha_{k+1})| < \varepsilon |\operatorname{Re}(\alpha_{k+1})|, \quad (4.3)$$

$$|\operatorname{Im}(\alpha_k - \alpha_{k+1})| < \varepsilon |\operatorname{Im}(\alpha_{k+1})|. \quad (4.4)$$

Однако существует и вторая причина прекращения расчетов по (4.2) – возникновение переполнения при вычислении P_k до того, как будут выполнены условия (4.3) и (4.4). Для даль-

нейшего расчета $\alpha(z)$ целесообразно использовать *BR*-алгоритм, который в рассматриваемом случае (2.15) имеет вид

$$\begin{aligned} G_{k+1}^j &= 0, \quad b_k = 2n + 2k + 1, \\ G_k^j &= -z^2 (b_k + G_{k+1}^j)^{-1}; \quad k = n, n-1, \dots, 1, \\ \alpha_j &= b_0 + G_1^j. \end{aligned} \tag{4.5}$$

Расчет по (4.5) повторяется для $j = m + 1, m + 2, \dots$, до тех пор, пока не будут выполнены условия (4.3) и (4.4). Недостаток *BR*-алгоритма состоит в отсутствии возможности использования в дальнейших расчетах каких-либо промежуточных значений. Отметим, что использование четверной точности при суммировании непрерывной дроби (2.15) не дает каких-либо преимуществ до тех пор, пока ε не выходит из разрядной сетки представления действительного числа. Поэтому для $\varepsilon \gtrsim 10^{-6}$ целесообразно суммировать (2.15) с одинарной точностью. Предлагаемая комбинированная последовательность вычислений $\alpha(z)$ обеспечивает возможность использования в последующих расчетах ранее вычисленных величин (в рамках использования *FR*-алгоритма) и отсутствие переполнения при расчете промежуточных величин при переходе к *BR*-алгоритму. В то же время этот метод позволяет максимально снизить влияние недостатков, присущих каждому из этих алгоритмов и позволяет многократно увеличить скорость расчетов α , особенно при высоких значениях $|z|$, малых n и ε . При малых отношениях $n|z|^{-1}$ расчеты $\alpha(z)$ требуют большого количества итераций даже при использовании предлагаемого комбинированного метода расчета $\alpha(z)$. Таким образом, выигрыш в требованиях к оперативной памяти сопровождается существенным проигрышем во времени счета при $n|z|^{-1} \ll 1$.

На рис. 1 приведены результаты расчета $\operatorname{Re}\{A_n\}$ (кривая 1) и $\operatorname{Im}\{A_n\}$ (кривая 2), рассчитанные по непрерывной дроби (4.1). Видно, что кривые 1 и 2 совпадают с данными для A_n , рассчитанными по восходящей рекурсии (1.3). Более того, при $n|z|^{-1} \gg 1$ кривые 1 и 2 стремятся к асимптотическим значениям $\operatorname{Re}\{A_n\}$ и $\operatorname{Im}\{A_n\}$, рассчитанным по (1.3) и отмеченным на рис. 1 прямой 9.

5. Заключение

В расчетах последовательности значений логарифмической производной $A_n(z)$ по нисходящей рекурсии (1.1) в качестве стартового значения лучше использовать асимптотическое значение (1.3) вместо (1.2). Для снижения оперативной памяти вместо нисходящей рекурсии (1.1) целесообразно использовать восходящую (3.1)–(3.3). Ошибки накопления, возникающие для расчетов с четверной точностью по (3.1)–(3.3), заметны только после того, как суммирование рядов Ми завершено.

Корректность вычисленных значений логарифмической производной следует оценивать по (2.11)–(2.14). Расчеты с четверной точностью существенно увеличивают время счета. Кроме того, они не реализованы в трансляторах, предыдущих *FORTRAN-77*. Вычисление корректной последовательности A_n при использовании одинарной точности представления числа обеспечивает комбинированный алгоритм, согласно которому при $n < 0,3|z| + 1$ используется восходящая последовательность (3.1)–(3.3), а при $n \gtrsim 0,3|z| + 1$ – нахождение A_n по значению непрерывной дроби (4.1)–(4.5). Формулы (4.1)–(4.5) позволяют производить расчет любых значений A_n , однако с уменьшением $n|z|^{-1}$ суммирование непрерывной дроби (2.15) требует все большего числа итераций. В то же время при малых $n|z|^{-1}$ восходящая рекурсия обеспечивает необходимую точность расчета A_n . При вычислении значения непрерывной дроби (2.15) оптимально использовать комбинированный *FR-BR*-алгоритм. При этом расчет (2.15) следует начинать с (4.2) на каждом шаге, контролируя выполнение условий (4.3), (4.4) и превышение модулем $|P_k|$ значения 10^{70} . Если на шаге m значение $|P_m| > 10^{70}$, то расчеты значения непрерывной дроби продолжают, начиная с $m + 1$ по *BR*-алгоритму (4.5). Выполнение условий (4.3) и (4.4) указывает на достижение заданной точности расчета значений непрерывной дроби.

Проведенная разработка снимает все ограничения на расчеты логарифмических производных сферических функций Риккати–Бесселя комплексного аргумента и обеспечивает возможность проведения расчетов по теории Ми для любых мыслимых параметров дифракции частиц и коэффициентов поглощения света частицами при использовании оперативной памяти не более 50 Кбайт.

1. Борен К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами. М.: Мир, 1986. 660 с.
2. Хюлст Г. Ван де. Рассеяние света малыми частицами. М.: ИЛ, 1961. 536 с.
3. Шифрин К.С. Рассеяние света в мутной среде. М.; Л.: ГИФТЛ, 1951. 272 с.
4. Белов Н.Н. // ЖТФ. 1989. Т.59. N 5. С.14–19.
5. Дейрменджан Д. Рассеяние электромагнитного излучения сферическими полидисперсными частицами. М.: Мир, 1971. 164 с.
6. Лукашевич Н.Л., Шари В.П. Численный расчет характеристик рассеяния света полидисперсными сферическими частицами. М. 1977. 62 с. (Препринт / Ин-т прикл. мат. им. М.В. Келдыша, N 83).
7. Акулинин А.А. Обзор некоторых схем расчета оптических характеристик рассеяния электромагнитного излучения одиночной однородной сферической частицей. Деп. ВИНТИ N 3388–B87 от 16.4.87.
8. Захарова В.А., Немченко И.А., Сидько Ф.Я. Таблицы по светорассеянию малыми мягкими сферическими частицами. Новосибирск: Наука, 1976. 171 с.
9. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979. 828 с.
10. Шифрин К.С. Введение в оптику океана. Л.: Гидрометиздат, 1983. 278 с.
11. Попов Б.А., Теслер Г.С. Вычисление функций на ЭВМ. Киев: Наукова думка, 1984. 598 с.
12. Джоунс У., Трон В. Непрерывные дроби: Аналитическая теория и приложения. М.: Мир, 1985. 414 с.

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

Поступила в редакцию
28 декабря 1992 г.

N. N. Belov. Logarithmic derivative of Riccati-Bessel function of the first kind in calculations by Mie theory.

A criterion for estimation of the computation precision for the logarithmic derivative A_n of Riccati-Bessel function of the first kind in calculations by Mie theory is proposed. A combined algorithm of computations of A_n is described. It allows one to reduce the volume of the operative memory sufficient for providing a possibility of estimating optical properties of particles with the diffraction parameter of 10^6 and higher using a PC.