

Стабильный и быстрый способ вычисления функций Бесселя в задаче расчета рассеяния света на частицах со сферической симметрией

Статья посвящена совершенствованию алгоритмов расчета рассеяния электромагнитной волны на частицах. Рассматривается проблема выбора метода решения задачи рассеяния света для таких многофакторных систем, каковой является естественная водная среда. Обсуждаются пути увеличения стабильности и повышения быстродействия расчета рассеяния и поглощения света на частицах со сферической симметрией. На основе анализа свойств рекуррентных соотношений в пределе сверхкрупных частиц предлагается простой и быстрый метод оценки числа итераций для функций Рикатти — Бесселя, рассчитываемых по методу обратной рекурсии. Затрагивается вопрос о нецелесообразности использования громоздких математических решений при исследовании природных сред оптическими методами. Высказывается мнение, что аналитическое решение имеет практическую ценность только в том случае, если существует стабильный алгоритм его численного расчета.

Основным инструментом расчета рассеяния света на частицах является теория Ми. Однако частицы в атмосфере и океане несферичны и могут иметь структурные неоднородности. Эти факторы влияют на индикатрису рассеяния и показатель обратного рассеяния, что представляет интерес для задач дистанционного зондирования моря.

В настоящее время существуют алгоритмы расчета рассеяния и поглощения света методом Т-матриц на однородных частицах правильной, но несферической формы [1]. Реализация их в виде стабильно работающего компьютерного кода сопряжена с рядом трудностей вычислительного характера. Во-первых, следует заметить, что не все аналитические выражения на компьютере могут вычисляться с требуемой точностью. Как следствие, формулы численного алгоритма отличаются от первоначально опубликованных аналитических выражений, хотя и являются математически эквивалентными. В качестве примера можно привести алгоритмы теории Ми — расчета рассеяния света на сферических частицах. Причем, несмотря на то, что формулы Ми известны с начала прошлого века, расчеты рассеяния на частицах с произвольными микрофизическими характеристиками стали возможны только в его конце [2, 3]. Во-вторых, существенным неудобством использования модели несферических частиц есть необходимость интегрирования по всевозможным ориентациям. Поскольку число точек интегрирования по каждому углу ориентации определяется степенью полинома, описывающего индикатрису рассеяния, а эта степень линейно зависит от параметра дифракции, то для крупных частиц расчеты методом Т-матриц будут крайне неэффективны. Кроме сверхзатрат ком-

пьютерного времени, практическая ценность для гидрооптики подробной детализации формы, по-видимому, сомнительна, поскольку при исследовании естественных сред мы имеем дело с плохо обусловленными обратными задачами, для которых добавление лишних параметров крайне нежелательно. Заметим, что с математической точки зрения понятие «несферичность» — это бесконечное, несчетное множество параметров. Касательно же реальных частиц можно сказать, что они не сферы, так же как и не эллипсоиды, и не диски и т.д.

С практической точки зрения под несферичностью частиц в атмосфере и океане следует подразумевать степень их несферичности, т. е. некоторое качественное понятие. Заменяв случайно ориентированную частицу ее телом вращения, можно в первом приближении определить влияние несферичности на индикатрису рассеяния. При этом задача сводится к расчету рассеяния света на частицах с радиально-симметричным распределением показателя преломления [4]. Однако даже в простейшем случае двухслойной частицы [5] соответствующий численный алгоритм работает только в узком диапазоне параметров [6].

Целью данной работы является повышение стабильности и быстродействия алгоритмов вычисления характеристик рассеяния и поглощения света частицами на основе анализа закономерностей сходимости функций Рикатти — Бесселя, рассчитываемых по методу обратной рекурсии.

Решение системы уравнений Максвелла для комплексных амплитуд рассеянной волны S_1 и S_2 в случае частиц со сферической симметрией имеет вид

$$\begin{aligned} S_1 &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \pi_n + b_n \tau_n), \\ S_2 &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \tau_n + b_n \pi_n), \end{aligned} \quad (1)$$

где π_n и τ_n — функции угла — присоединенные полиномы Лежандра, а коэффициенты a_n , b_n зависят от радиального распределения показателя преломления $m(r)$ и безразмерного параметра дифракции $x = \frac{2\pi}{\lambda} r$.

С формальной точки зрения выражение (1) не отличается от аналогичного для однородных сфер (теории Ми), различие состоит лишь в формулах для коэффициентов разложения по электромагнитным модам a_n и b_n . В наиболее удобной форме записи выражений теории Ми коэффициенты a_n и b_n содержат только одну функцию комплексного аргумента:

$$a_n = \frac{[D_n(mx)/m + n/x]\psi_n(x) - \psi_{n-1}(x)}{[D_n(mx)/m + n/x]\xi_n(x) - \xi_{n-1}(x)},$$

$$b_n = \frac{[mD_n(mx) + n/x]\psi_n(x) - \psi_{n-1}(x)}{[mD_n(mx) + n/x]\xi_n(x) - \xi_{n-1}(x)}.$$
(2)

Это так называемая логарифмическая производная $D_n(x)$ функции Рикатти – Бесселя $\psi_n(x)$:

$$D_n(x) = \frac{d}{dx} \ln \psi_n(x),$$

причем

$$\psi_n(x) = x j_n'(x),$$

где $j_n(x)$ — функция Бесселя первого рода полуцелого порядка. В выражении (2) m — комплексный показатель преломления вещества однородного шара относительно показателя преломления среды,

$$\xi_n(x) = \psi_n(x) - i\chi_n(x) = x j_n'(x) + i x y_n'(x) —$$

другая функция Рикатти — Бесселя, где $y_n(x)$ — функция Бесселя второго рода полуцелого порядка. В классической записи теории Ми и в более общем случае n -слойных сферических частиц в коэффициентах a_n и b_n функции Рикатти — Бесселя фигурируют как функции комплексного аргумента $m_i x_j$, где m_i — комплексный показатель преломления i -го слоя, а x_j — внешний радиус j -го. Основная цель численных схем состоит в обеспечении стабильности расчета функций Бесселя.

Числовой ряд функций Рикатти — Бесселя имеет в дискретном пространстве индексов два различных режима — осциллирующий и экспоненциальный. Когда индекс превышает определенное критическое значение n_{exp} , то как $\xi_n(x)$ и $\psi_n(x)$, так и $D_n(x)$ попадают в экспоненциальный режим. С ростом индекса функции $j_n(x)$, а следовательно, и $\psi_n(x)$ стремятся к нулю, а $y_n(x)$ и $\chi_n(x)$ — к бесконечности. Несмотря на то, что рекуррентные соотношения для $\xi_n(x)$, $y_n(x)$, $j_n(x)$, $\psi_n(x)$ совпадают:

$$z_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{x} z_n(x) - z_{n-1}(x),$$
(3)

в экспоненциальном режиме по формуле прямой рекурсии (3), принимая во внимание аналитическую запись начальных функций Бесселя

$$\begin{aligned} j_0(x) &= \frac{\sin x}{x}, & j_1(x) &= \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}; \\ y_0(x) &= -\frac{\cos x}{x}, & y_1(x) &= -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x}, \end{aligned} \quad (4)$$

можно рассчитывать только функцию $y_n(x)$. Результаты расчетов функции Рикатти — Бесселя $j_n(x)$ вследствие ошибок округления будут расходиться, так же как и для $\psi_n(x)$ и $D_n(x)$. Для стабильности алгоритма теории Ми было предложено использовать обратную рекурсию для $D_n(mx)$ [7]:

$$D_{n-1}(x) = \frac{n}{x} - \frac{1}{D_n(x) + n/x}. \quad (5)$$

Первая проблема алгоритмов обратной рекурсии состоит в определении области экспоненциального режима, т. е. надо найти значение индекса n_{exp} и провести достаточное количество итераций, чтобы вычислить $D_{n_{\text{exp}}}(x)$ с требуемой точностью. Другая сложность содержится в процедуре инициализации функций Бесселя $y_n(x)$ и $y_{n+1}(x)$ при использовании метода обратной рекурсии:

$$z_{n-1}(x) = \frac{2n+1}{x} z_n(x) - z_{n+1}(x). \quad (6)$$

Причина сходимости метода итераций та же, что и причина расходимости рекуррентных вычислений по (3) или (6). Численное представление функций Бесселя на компьютере имеет ограниченную точность. Поэтому для двух соседних значений функции Рикатти — Бесселя всегда существуют некоторые ошибки ε_{n-1} и ε_n . Эти ошибки можно представить в виде линейной комбинации функций Бесселя:

$$\begin{cases} \varepsilon_{n-1} = C_1 j_{n-1} + C_2 y_{n-1}, \\ \varepsilon_n = C_1 j_n + C_2 y_n. \end{cases} \quad (7)$$

Откуда ясно, что даже если дальнейшие вычисления будут проводиться без ошибок, в любой функции Бесселя, полученной из рекуррентного соотношения, существует доля другой. При этом относительная ошибка, например для функции $j_n(x)$, будет следующей:

$$\frac{\delta j_k}{j_k} = C_1 + C_2 \frac{y_k}{j_k}. \quad (8)$$

Начиная с определенных значений $k = n_{\text{exp}}$, функция y_k постоянно растет, а j_k уменьшается. Тогда для любого ненулевого значения C_2 , определяемого начальной ошибкой ε_i , существует такое k , что $|\delta j_k / j_k| > 1$. При условии $|y_k| \gg |j_k|$ из (8) видно, что $\delta j_k \approx C_2 y_k$, т. е. рекуррентные вычисления в

области расходимости функции Бесселя дают функцию Бесселя другого рода с некоторым неопределенным коэффициентом пропорциональности. Данное свойство позволяет получить функцию $j_n(x)$ методом обратной рекурсии. Пусть

$$\varepsilon_{n_0-1} = 10^{-300}, \varepsilon_{n_0} = 0, \quad (9)$$

причем n_0 такое, что $|j_{n_0}| \ll |y_{n_0}|$. Тогда должно выполняться условие $|C_2| \ll |C_1|$. Проводя вычисления для ε_{n-1} , ε_n по рекуррентному соотношению (6) при $n > n_{\text{exp}}$ имеем функцию

$$z_n = C_1(j_n - y_n \frac{j_{n_0}}{y_{n_0}}) \approx C_1 j_n(x). \quad (10)$$

Константа C_1 находится из (4) при $n = 0$ (или $n = 1$, если $\sin x \approx 0$). Из (10) следует критерий сходимости итераций функций Бесселя при $n > n_{\text{exp}}$ для чисел двойной точности:

$$\left| \frac{\psi_{n+\Delta n}}{\chi_{n+\Delta n}} \right| = \left| \frac{j_{n+\Delta n}}{y_{n+\Delta n}} \right| \approx 2,22 \cdot 10^{-16} \left| \frac{j_n}{y_n} \right|. \quad (11)$$

Для реализации алгоритма обратной рекурсии необходимо знать или иметь оценку сверху целочисленных значений n_{exp} и Δn .

Если аргумент функции Бесселя действительный, то оценку n_{exp} легко получить, переписав (3) в виде

$$z_{n+1}(x) - 2z_n(x) + z_{n-1}(x) = \left(\frac{2n+1}{x} - 2 \right) z_n(x). \quad (12)$$

В левой части выражения (12) стоит вторая производная по дискретной переменной n . Переход от осциллирующего решения (уравнение $\frac{\partial^2 z}{\partial n^2} = -\omega^2(n)z$)

к экспоненциальному (уравнение $\frac{\partial^2 z}{\partial n^2} = \omega^2(n)z$) происходит при $n = x - \frac{1}{2}$, то есть $n_{\text{exp}} \approx x$.

Асимптотическое поведение коэффициентов a_n , b_n в формуле (2) при $n \rightarrow \infty$ есть $\frac{j_n}{iy_n}$, и бесконечный ряд (1) можно оборвать при $n = n_{\text{exp}} + \Delta n$ в соответствии с условием (11). Согласно алгоритму Вискомба [8] для однородных сферических частиц, максимальное число членов рядов системы (1) n_{max} оценивается как

$$n_{\text{max}} = x + Lx^{1/3} + 2, \quad (13)$$

где x — параметр дифракции. Число 2 в формуле (13) выполняет роль погрешности оценки n_{max} . Значение L по литературным данным варьирует от

4 [6, 8] до 6 [8] и зависит от того, сколько точных знаков и какой функции хотелось бы получить. Собственные исследования показали, что для расчета сечения рассеяния с максимальной точностью достаточно, чтобы $L \approx 3,8$, в то время как для обратного рассеяния аналогичный критерий будет уже $L \approx 7$. В силу традиции расчета функции $\psi_n(x)$ по схеме прямой рекурсии в алгоритмах теории Ми авторы монографии [6] не рекомендуют использовать высокие значения константы L . Если же применять для $\psi_n(x)$ обратную рекурсию, то L можно задавать произвольно большим. Так как при $n > x \approx n_{\text{exp}}$ коэффициенты a_n, b_n уменьшаются как $\left| \frac{j_n}{y_n} \right| \approx j_n^2$, то в соответствии с уравнениями (11) и (13) число итераций для расчета функции $j_n(x)$ в диапазоне затухания есть $\Delta n \approx 7x^{1/3} + 2$. При действительном значении показателя преломления m величина $n_{\text{exp}} \approx mx$, поэтому число итераций n_{it} до того момента, пока индекс не станет равным n_{max} , записывается в виде

$$n_{\text{it}} = \begin{cases} (m-1)x + 7(mx)^{1/3} - 7x^{1/3} + 2; & m > 1; \\ 2; & m \leq 1. \end{cases} \quad (14)$$

Малое число итераций в случае $m < 1$ обусловлено тем обстоятельством, что при $n \approx n_{\text{max}}$ необходимо знать лишь первые значащие цифры коэффициентов a_n и b_n . Все значащие цифры функций Бесселя, а следовательно, и a_n и b_n станут известны при $n \approx x - 7(mx)^{1/3} + 7x^{1/3} > x$.

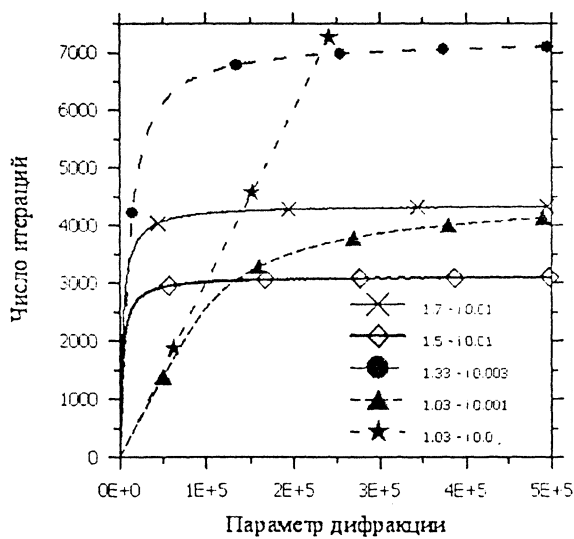
В алгоритмах теории Ми, в более общем случае комплексного показателя преломления $m = m_r - ik$, существует два подхода к инициализации алгоритма обратной рекурсии. Они применяются для вычисления логарифмической производной. Суть первого подхода [6, 7] состоит в завышенной оценке числа итераций. Если применить аналогичный метод для расчетов функций Бесселя, то в расчетах для крупных поглощающих частиц существует опасность переполнения разрядов процессора, так как для частиц с поглощением число итераций существенно меньше, чем $(m_r - 1)x$. Второй подход, предложенный Ленцем [9], заключается в использовании специального численного алгоритма инициализации. Помимо отсутствия аналогичного способа для расчетов функций Бесселя, к недостаткам метода Ленца можно отнести как возникновение неопределенности деления ноль на ноль при определенных параметрах m, x , согласно работе [2], так и неэффективность расчетов и дополнительное требование к системным ресурсам при малом поглощении.

Для ответа на вопрос оценки числа итераций оказалось достаточным исследовать поведение формул Ми в предельном случае сверхкрупных частиц ($x > 200\,000$). Численно проанализируем вид зависимости числа итераций логарифмической производной $D_{n_{\text{max}}}$ от параметра дифракции при $\text{Im}(m) \neq 0$. Вычислим ее значение при $n \approx x + 7x^{1/3}$, используя завышенную оценку n_{it} по формуле (14). Далее будем последовательно понижать значение n_{it} до тех пор, пока модуль разности вновь вычисленного значения D_n и величины $D_{n_{\text{max}}}$ не

станет больше заданного значения ε . Величина n_{it} соответствует математическому определению требуемого числа итераций. Как показывают результаты расчетов, приведенных на рис. 1, функциональная зависимость числа итераций n_{it} от параметра дифракции стремится к определенному асимптотическому значению $n_{it}^{as}(m)$ при $x \rightarrow \infty$ для всех $\text{Im}(m) \neq 0$. При малых x функция $n_{it}(x)$ ограничена сверху величиной числа итераций без поглощения $n_{it}^{na}(m_r, x)$, определяемой по формуле (14). Поскольку для эффективности работы программ простота алгоритма будет компенсировать точный, но медленный способ определения числа итераций, примем эту величину следующей:

$$n_{it}(x) = \min[n_{it}^{na}(m_r, x), n_{it}^{as}(m)], \tag{15}$$

где $n_{it}^{as}(m)$ — асимптотическое значение числа итераций как функция комплексного показателя преломления $m = m_r - ik$.



Р и с. 1. Зависимость числа итераций логарифмической производной $D_n(x)$ от параметра дифракции для различных показателей преломления

Асимптотическое поведение числа итераций с ростом параметра дифракции означает, что с определенного момента кривизна поверхности частицы не влияет на сходимость логарифмической производной и при $x \gg 1/k$ частицу можно рассматривать как бесконечно большую. Для анализа особенностей числа итераций обратимся к рекуррентным соотношениям для функций Бесселя с комплексным аргументом mx в окрестности $n \approx x$ при $x \gg 1/k$. Поскольку $n \gg 1$, то формула (12) допускает непрерывную интерпретацию

$$\frac{\partial^2 z}{\partial n^2} = \left(\frac{2}{m} - 2 \right) z. \tag{16}$$

В решении уравнения (16)

$$z = C_1 \exp\left[\sqrt{2(1/m-1)}n\right] + C_2 \exp\left[-\sqrt{2(1/m-1)}n\right]$$

нас интересует закон изменения амплитуды осцилляций, т. е. действительная часть коэффициента экспоненты:

$$\gamma = \sqrt{2} \operatorname{Re} \sqrt{\frac{1}{m_r - ik} - 1}. \quad (17)$$

Из соотношения (11) следует, что $\Delta n = \frac{\ln(1/\varepsilon)}{2\gamma}$, где ε — ошибка представления чисел с плавающей точкой. Для формата *double precision* $\varepsilon = 2,22 \cdot 10^{-16}$, а в десятибайтовом представлении $\varepsilon = 1,08 \cdot 10^{-19}$. Таким образом, при использовании стандарта *double precision*, асимптотическое число итераций расчета функции Бесселя $j_{n_{\max}}(mx)$ запишем в виде

$$n_{it}^{as}(m) = \frac{-\ln(2,22 \cdot 10^{-16})}{\sqrt{8} \operatorname{Re} \sqrt{\frac{1}{m_r - ik} - 1}}. \quad (18)$$

Закономерности поведения асимптотического числа итераций как функции комплексного показателя преломления частицы впервые исследовались эмпирическим путем в работе [10]. Было показано, что при малых k число итераций $n_{it}^{as}(m) \sim 1/k$, что совпадает с результатом разложения формулы (18).

Для того чтобы показать правомерность использования формулы (18) в качестве оценки числа итераций логарифмической производной

$D_n(x) = \frac{d}{dx} \ln \psi_n(x)$, проведем расчеты по этой формуле для $\operatorname{Re}(m) = 1,02;$

1,15; 1,5 и сравним их с результатами численного метода определения числа итераций. Результаты сопоставления даны на рис. 2. Совпадение представленных кривых свидетельствует об эквивалентности законов сходимости обратных рекурсий для логарифмической производной $D_n(mx)$ и функций Бесселя $\psi_n(mx)$, $j_n(mx)$. Из рисунка становится понятно, что формула (18) будет во всех случаях гарантировать оценку сверху максимального числа итераций.

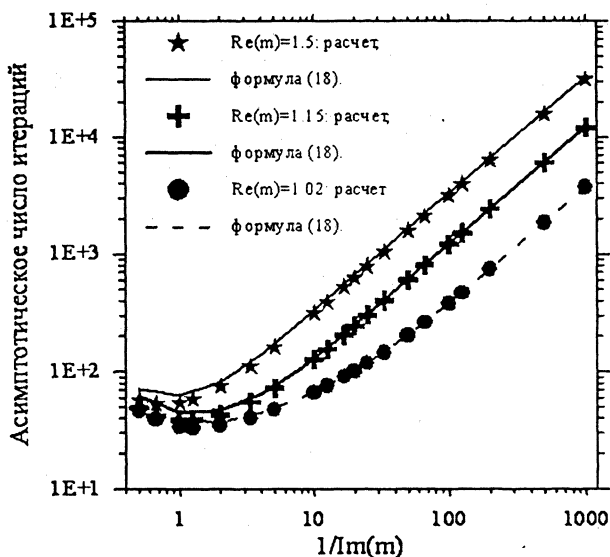
Окончательно число итераций n_{it} функции $D_n(mx)$ при $n = n_{\max}$, функции Рикатти — Бесселя $\psi_n(mx)$ и функции Бесселя $j_n(mx)$ при $n = n_{\max} - 1$ и $n = n_{\max}$ будет оцениваться как

$$n_{it} = \begin{cases} \min \left[(m_r - 1)x + 7(m_r x)^{1/3} - 7x^{1/3}, \frac{12,74}{\operatorname{Re} \sqrt{\frac{1}{m_r - ik}} - 1} \right] + 2; m_r > 1; \\ 2; m_r \leq 1. \end{cases} \quad (19)$$

Как показало дополнительное тестирование, формула (19) применима также и для экстремальных значений оптических констант:

— $m = 8,9$; $k = 0,69$ — показатель преломления воды на длине волны 10 см;

— $m = 37$; $k = 41$ — показатель преломления платины на длине волны 10 мкм.



Р и с. 2. Сравнение результатов численного эксперимента по определению числа итераций логарифмической производной $D_n(x)$ для экстремально крупных частиц ($x > 500\,000$) с аналитической зависимостью (18)

Таким образом, для всех параметров m и x оценка числа итераций может проводиться по формуле (19). Несмотря на то, что предлагаемый метод дает несколько завышенную оценку числа итераций, быстродействие процедуры расчета логарифмической производной будет более чем в 10 раз выше, чем быстродействие аналогичной процедуры в программе Вискомба [11]. Основным же преимуществом предложенного в работе подхода являются простота и наглядность формул, что становится существенным для обеспечения стабильности алгоритмов расчета рассеяния света на частицах.

Следует отчетливо представлять, что сведение проблемы рассеяния света в такой плотной среде как вода к задаче решения уравнений Максвелла для изолированной частицы пусть и произвольной формы есть уже существенная идеализация процессов взаимодействия света с веществом. Использование

нестабильных численных алгоритмов, являющихся решением физически приближенной задачи, нецелесообразно хотя бы потому, что в природе такое решение может и не наблюдаться вследствие неустойчивости. Поэтому стабильность численных схем расчета рассеяния на частицах должна быть главным требованием, предъявляемым к алгоритмам. Предлагаемый в работе метод обладает этим свойством и, следовательно, его можно рекомендовать в приложении к алгоритмам расчета рассеяния света на частицах со сферической симметрией.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Mishchenko M.L., Travis L.D., Mackowsky D.W.* T-matrix computations of light scattering by non-spherical particles. A review // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* – 1996. – № 55. – P. 535 – 575.
2. *Cachorro V.E., Salcedo L.L.* New Improvements for Mie Scattering Calculations // *J. Electromagnetic Waves and Applications.* – 1991. – 5, № 9. – P. 913 – 926.
3. *Haltrin V.I., Shybanov E.B., Stavn R.H. et al.* Light scattering coefficient by quartz particules suspended in seawater // *Proceeding of the International Geoscience and Remote Sensing Symposium, 1999, IEEE, Piscataway, NJ, USA.* – 1999. – P. 1420 – 1422.
4. *Шифин К.С., Перельман А.Я., Кокорин А.М.* Рассеяние света просветленной сферой // *Оптика моря и атмосферы.* – Л.: ГОИ АН СССР, 1984. – С. 98 – 99.
5. *Aden A.L., Kerker M.* Scattering of electromagnetic waves from two concentric spheres // *J. Appl. Phys.* – 1951. – 22. – P. 1242 – 1246.
6. *Борен К.Ф., Хафмен Д.Р.* Поглощение и рассеяние света малыми частицами. – М.: Мир, 1986. – 660 с.
7. *Dave J.V.* Scattering of electromagnetic radiation by a large, absorbing sphere // *IBM J. Res. Develop.* – 1969. – May, № 1. – P. 302 – 313.
8. *Wiscombe W.J.* Improved Mie Scattering Algorithm // *Appl. Opt.* – 1980. – 19. – P. 1505 – 1509.
9. *Lentz W.J.* Generating Bessel functions in Mie scattering calculations using continued fractions // *Ibid.* – 1976. – 15. – P. 668 – 671.
10. *Shybanov E.B.* The improved computational method of scattering calculation on spherical particles. // *Proc. of the International Conference «Current Problems in Optics of Natural Waters».* – St. Petersburg: Proceedings of S. Rozhdestvensky Optical Society, 2001. – P. 383 – 389.
11. *Wiscombe W.J.* Mie scattering calculations: advances in technique and fast, vector-speed computer codes / NCARTN-140+STR, National Center for Atmospheric Research, Boulder, Colo, 1979.

Морской гидрофизический институт НАН Украины,
Севастополь

Материал поступил
в редакцию 19.09.05
После доработки 08.11.05

ABSTRACT Advance of numerical algorithms for calculating scattering of electromagnetic waves is described. The choice of a computation method for solving the problem of light scattering is considered for such multi-factorial media as natural water. The ways of increase of the algorithm stability and decrease of time for calculating scattering and absorption of spherical particles are discussed. A simple and fast method for calculating Rikatti-Bessel functions in the scheme of backward recursion is proposed based on the analysis of the features of recurrence relations within the limits of huge particles. The problem of irrational use of mathematically intricate solutions in analyzing of natural media by the optical methods is considered. The conclusion that the analytical solution is of practical value only together with the corresponding numerical algorithm is drawn.