

Общероссийский математический портал

А. А. Абрамов, С. В. Курочкин, Высокоточное вычисление радиальных сфероидальных функций, *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 2006, том 46, номер 6, 996–1001

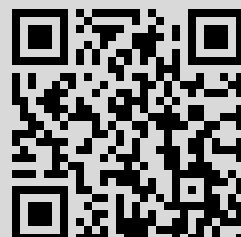
Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 193.233.212.50

24 марта 2015 г., 13:37:30



УДК 519.6:517.589

ВЫСОКОТОЧНОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ РАДИАЛЬНЫХ СФЕРОИДАЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ¹⁾

© 2006 г. А. А. Абрамов, С. В. Курочкин

(119991 Москва, ул. Вавилова, 40, ВЦ РАН)

e-mail: alalabr@ccas.ru, kuroch@ccas.ru

Поступила в редакцию 11.10.2005 г.

Переработанный вариант 10.01.2006 г.

Предлагается и исследуется новый метод вычисления радиальных сфероидальных функций I рода для значений аргументов, превосходящих по абсолютной величине единицу. В уточненном виде используется одно известное представление таких функций; дополнительные конструкции, предлагаемые в работе, и программная реализация позволяют эффективно вычислять значение функций с требуемой точностью в широком диапазоне изменения параметров. Библ. 10.

Ключевые слова: радиальные сфероидальные функции, рекуррентные формулы, численная устойчивость, вычислительные алгоритмы.

1. Вопросам вычисления сфероидальных функций посвящено много работ (см., в частности, [1]–[8]). В настоящей работе (она является продолжением работы [8]) мы рассматриваем задачу вычисления радиальных сфероидальных функций I рода. Все утверждения разд. 1 взяты из [1]–[3].

Сфероидальная функция I рода определяется как решение задачи на собственные значения (СЗ) для дифференциального уравнения в комплексной плоскости:

$$\frac{d}{dz} \left((1-z^2) \frac{du}{dz} \right) + \left(\lambda + 4\theta(1-z^2) - \frac{m^2}{1-z^2} \right) u = 0. \quad (1.1)$$

Здесь m – заданное неотрицательное целое число; θ – заданное вещественное число; λ – спектральный параметр, выбираемый так, чтобы уравнение (1.1) имело нетривиальное решение $u(z)$, ограниченное при $z \rightarrow \pm 1$. Такие значения λ вещественны. При нечетном m для функции $u(z)$ точки ± 1 являются точками ветвления второго порядка, $u(z)$ – целая функция при четном m . Решения задачи (1.1), рассматриваемые на отрезке $[-1, 1]$, называются угловыми сфероидальными функциями I рода. Решения (1.1), рассматриваемые на $[1, +\infty)$ при $\theta > 0$ и на неотрицательной мнимой полуоси (т.е. при $z = i\tilde{z}$, где $0 \leq \tilde{z} < +\infty$) при $\theta < 0$, – радиальными сфероидальными функциями I рода (вытянутыми при $\theta > 0$, сплюснутыми при $\theta < 0$); мы берем однозначную ветвь этих функций в комплексной плоскости с разрезом $[-1, 1]$. Значению $\theta = 0$ соответствуют так называемые сферические функции, в этом случае решение задачи – присоединенная функция Лежандра; далее этот случай мы не рассматриваем.

Мы ограничиваемся задачей вычисления радиальных сфероидальных функций при $|z| > 1$.

Случаи $\theta > 0$ и $\theta < 0$ рассматриваются отдельно; сначала рассмотрим случай $\theta > 0$.

При $\theta > 0$ имеет место представление²⁾

$$u_l(z) = \frac{(1-1/z^2)^{m/2}}{z} \left[A(z) \cos \left(cz - \frac{l+1}{2} \pi \right) + B(z) \sin \left(cz - \frac{l+1}{2} \pi \right) \right], \quad (1.2)$$

где $c = 2\sqrt{\theta}$, l – номер рассматриваемой функции, $l = m, m+1, \dots$,

$$A(z) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{a_{2s}}{z^{2s}}, \quad B(z) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{a_{2s+1}}{z^{2s+1}}. \quad (1.3)$$

¹⁾Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 05-01-00257).

²⁾Формула (1.2) взята из [3], где она приведена с ошибкой; здесь ошибка исправлена.

Если l четное, то $u_l(z)$ – четная функция, если l нечетное, то $u_l(z)$ – нечетная функция. О сходимости рядов (1.3) будет сказано далее.

Если положить $u_l(z) = (1 - z^2)^{m/2} v_l(z)$, то $v_l(z)$ – целая функция, удовлетворяющая уравнению

$$(1 - z^2)v'' - 2(m + 1)zv' + [\lambda - m^2 - m + c^2(1 - z^2)]v = 0. \tag{1.4}$$

2. Используя (1.2), (1.4) и приравнявая нулю коэффициенты при $\cos[cz - (l + 1)\pi/2]$ и $\sin[cz - (l + 1)\pi/2]$, получаем соотношения

$$\begin{aligned} (1 - z^2)A'' + 2c(1 - z^2)B' - 2(m + 1)zA' - 2(m + 1)czB + (\lambda - m^2 - m)A &= 0, \\ (1 - z^2)B'' - 2c(1 - z^2)A' - 2(m + 1)zB' + 2(m + 1)czA + (\lambda - m^2 - m)B &= 0. \end{aligned} \tag{2.1}$$

Подставив (1.3) в (2.1), приходим к уравнениям

$$\begin{aligned} (2s + m - 1)(2s + m)a_{2s-2} - 2c(2s + m)a_{2s-1} + \\ + [-(2s + m + 1)(2s + m + 2) + 2(m + 1)(2s + m + 1) + \lambda - m^2 - m]a_{2s} + 2c(2s + 1)a_{2s+1} &= 0, \end{aligned} \tag{2.2}$$

$$\begin{aligned} (2s + m)(2s + m + 1)a_{2s-1} + 2c(2s + m + 1)a_{2s} + \\ + [-(2s + m + 2)(2s + m + 3) + 2(m + 1)(2s + m + 2) + \lambda - m^2 - m]a_{2s+1} - 2c(2s + 2)a_{2s+2} &= 0. \end{aligned} \tag{2.3}$$

Формулы (2.2) и (2.3) имеют полный вид при $s \geq 1$; при $s = 0$ нужно в (2.2) опустить первые два слагаемых, а в (2.3) – первое слагаемое.

Здесь $\lambda = \lambda_l$ есть l -е СЗ, вещественное число; его вычисляют обычно в процессе вычисления соответствующей угловой сфероидальной функции (см., в частности, [7], [8]).

Совокупность формул (2.2) и (2.3) – четырехчленная рекуррентная формула для последовательности a_0, a_1, \dots . Ее спецификой является то, что ее коэффициенты даются выражениями, различающимися на четных и нечетных шагах. Отметим это, написав пару формул:

$$a_{2s+1} = \alpha_s a_{2s} + \beta_s a_{2s-1} + \gamma_s a_{2s-2}, \tag{2.4}$$

$$a_{2s+2} = f_s a_{2s+1} + g_s a_{2s} + h_s a_{2s-1}. \tag{2.5}$$

3. Изучим поведение величин a_s , определяемых формулами (2.2) и (2.3), при больших s . Для этого напишем при больших s характеристическое уравнение совокупности этих рекуррентных формул. То, что (2.2) и (2.3) задаются отличающимися выражениями, может быть преодолено

следующим образом. Составим 2-столбцы $\mathbf{a}_s = \begin{pmatrix} a_{2s+1} \\ a_{2s+2} \end{pmatrix}$; тогда

$$\mathbf{a}_{s+2} + M_s \mathbf{a}_{s+1} + N_s \mathbf{a}_s = \mathbf{0}, \tag{3.1}$$

где элементы 2×2 -матриц M_s и N_s записываются единообразно для всех s . Однако нет нужды в вычислении матриц M_s, N_s и характеристического уравнения $\det(\sigma^2 I + \sigma M_s + N_s) = 0$. Действительно, (2.4) и (2.5) дают (см. (3.1))

$$a_{2s} = \sigma a_{2s-2}, \quad a_{2s+1} = \sigma a_{2s-1}, \quad a_{2s+2} = \sigma^2 a_{2s-2}, \tag{3.2}$$

откуда

$$\begin{aligned} (\gamma_s + \sigma \alpha_s) a_{2s-2} + (\beta_s - \sigma) a_{2s-1} &= 0, \\ (\sigma g_s - \sigma^2) a_{2s-2} + (h_s + \sigma f_s) a_{2s-1} &= 0. \end{aligned}$$

Так как из $a_{2s-2} = a_{2s-1} = 0$ следует (см. (3.2)), что $a_{2s} = a_{2s+1} = a_{2s+2} = 0$ и, таким образом, вся последовательность a_0, a_1, \dots нулевая, то для ненулевой последовательности a_0, a_1, \dots получаем

$$\begin{vmatrix} \gamma_s + \sigma \alpha_s & \beta_s - \sigma \\ \sigma g_s - \sigma^2 & h_s + \sigma f_s \end{vmatrix} = 0.$$

Беря для больших s только главные по s части коэффициентов в (2.2) и (2.3), получаем

$$\begin{vmatrix} -\frac{s}{c} + \sigma \frac{s}{c} & 1 - \sigma \\ \sigma - \sigma^2 & \frac{s}{c} - \sigma \frac{s}{c} \end{vmatrix} = -(1 - \sigma)^2 \left(\frac{s^2}{c^2} + \sigma \right) = 0.$$

Поэтому для больших s три корня характеристического уравнения таковы:

$$\sigma_1 \approx 1, \quad \sigma_2 \approx 1, \quad \sigma_3 \approx -s^2/c^2. \quad (3.3)$$

Если λ есть СЗ задачи (1.1), то в последовательности a_0, a_1, \dots отсутствует компонента, соответствующая корню $-s^2/c^2$, что эквивалентно сходимости рядов (1.3) для достаточно больших $|z|$. Для выделения совокупности нужных нам последовательностей используем метод, предложенный в [9]. Опуская рассуждения и выкладки, приводим окончательно получающуюся вычислительную схему. Нужное нам двумерное пространство последовательностей выделяется для больших s соотношением

$$a_{s+2} - a_s = \xi_s a_{s+1} + \eta_s a_s, \quad (3.4)$$

где $\xi_s \rightarrow 0$ и $\eta_s \rightarrow 0$ при $s \rightarrow \infty$.

Подставляя (3.4) в (2.4) и (2.5), получаем

$$\begin{aligned} \xi_{2s-1} &= \frac{1 + \eta_{2s} - g_s}{f_s - \xi_{2s}}, & \eta_{2s-1} &= -1 - \frac{h_s}{f_s - \xi_{2s}}, \\ \xi_{2s-2} &= \frac{1 + \eta_{2s-1} - \beta_s}{\alpha_s - \xi_{2s-1}}, & \eta_{2s-2} &= -1 - \frac{\gamma_s}{\alpha_s - \xi_{2s-1}}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

По формулам (3.5) счет ведем справа налево, положив при $s = \infty$ (т.е. для практических расчетов при s достаточно большом) $\xi_s = \eta_s = 0$. Этот счет численно устойчив для достаточно больших s .

Если вычисления по формулам (3.5) реализуемы до $s = 1$, то получим соотношение

$$a_2 - a_0 = \xi_0 a_1 + \eta_0 a_0.$$

Тем самым (см. (2.4) и (2.5)) получим три соотношения:

$$\begin{aligned} a_1 &= \alpha_0 a_0, \\ a_2 &= f_0 a_1 + g_0 a_0, \\ a_2 - a_0 &= \xi_0 a_1 + \eta_0 a_0. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Нетривиальная совместность системы (3.6) эквивалентна равенству

$$\begin{vmatrix} \alpha_0 & -1 & 0 \\ g_0 & f_0 & -1 \\ 1 + \eta_0 & \xi_0 & -1 \end{vmatrix} = 0. \quad (3.7)$$

Условие, что λ есть СЗ задачи (1.1), эквивалентно условию (3.7) (ср. со способом вычисления СЗ в случае угловых сфероидальных функций, приведенном в [8]). Поэтому, вычислив заранее λ , можно использовать (3.7) в качестве контроля.

Возьмем нетривиальное решение системы (3.6); с точностью до множителя оно единственно; выбор такого решения определяется заданной нормировкой функции $u_l(z)$; о нормировке речь пойдет ниже. Используя формулу (3.4), слева направо вычисляем нужные нам значения a_3, a_4, \dots ; отметим, что счет численно устойчив.

Непосредственный счет по формулам (2.4) и (2.5), если отправляться от какого-либо a_0 , неудачен: такой счет численно неустойчив ввиду наличия в совокупности последовательностей, удовлетворяющих (2.4) и (2.5), сильно растущих последовательностей. Даже очень малые погрешности в значении λ и погрешности реализации арифметических операций очень быстро нарастают.

Вычислительная схема, рассмотренная выше, предполагала, что счет по формуле (3.5) реализуем до $s = 1$. Однако возможно, что для какого-либо s (не являющегося большим) возникнут сингулярности в решениях, т.е. получится $\xi_{2s-1} \approx \alpha_s$ или $\xi_{2s} \approx f_s$. В этом случае возможно следующее продолжение процесса вычислений. Возьмем какое-либо $a_0 \neq 0$, вычислим по (2.2) и (2.3) значения $a_1, a_2, \dots, a_{2s+2}$, а затем используем формулу (3.4) и уже вычисленные $\xi_{s'}$ и $\eta_{s'}$ при $s' \geq 2s$. Совпадение значений a_{2s+2} , вычисленных по (2.3) и (3.4), является контролем того, что λ вычислено точно. Возможно также для переноса условия, что последовательность не содержит компоненты, соответствующей большому корню характеристического уравнения, использовать не формулы (3.5), а метод, изложенный в [9]. Этот метод реализуется более громоздкими, чем (3.5), формулами, но гарантирует реализуемость процесса до $s = 1$.

Выше было указано, что счет по формулам (3.5) справа налево и по формулам (3.4) слева направо устойчив для больших s . Точнее, из (3.3) следует, что счет устойчив при больших s/c . Если c велико, то, как показали численные эксперименты, численно устойчивой является схема, рекомендованная выше для случая $\xi_{2s-1} \approx \alpha_s$ или $\xi_{2s} \approx f_s$; рекомендуется взять $2s$ порядка c .

Для построенной последовательности a_0, a_1, \dots ряды (1.3) сходятся при $|z| > 1$, так как $\lim_{s \rightarrow \infty} a_{s+2}/a_s = 1$; последнее соотношение является следствием соотношения (3.3).

Подчеркнем, что так как λ вещественно, то для вещественных значений z во всех выкладках разд. 2 и 3 используются только вещественные числа.

4. Рассмотрим теперь те изменения, которые возникают, если вычисляется не вытянутая, а сплюснутая сфероидальная функция.

Здесь $\sqrt{\theta}$ – чисто мнимое число, но и z – число мнимое, поэтому после соответствующих преобразований формул разд. 2 и 3 приходим к формулам, в которых фигурируют только вещественные числа. Мы ограничимся тем, что приведем только окончательные формулы.

Далее, считаем, что вычисление значений $u_l(z)$ проводится для аргумента iz , $1 < z < +\infty$, $c = 2\sqrt{-\theta} > 0$.

Нужную функцию $u_l(z)$ представляем в виде

$$u_l(z) = \frac{(1 + 1/z^2)^{m/2}}{z} \left[A(z) \cos\left(cz - \frac{l+1}{2}\pi\right) + B(z) \sin\left(cz - \frac{l+1}{2}\pi\right) \right],$$

$$A(z) = \sum_{s=0}^{\infty} a_{2s} z^{-2s}, \quad B(z) = \sum_{s=0}^{\infty} a_{2s+1} z^{-2s-1}.$$

Мы не затрагиваем изменения в формулах (2.2) и (2.3), они будут учтены ниже.

По тем же формулам, что и для вытянутых радиальных сфероидальных функций, вычисляем $\alpha_s, \beta_s, \gamma_s, f_s, g_s, h_s$.

Для рекуррентного (справа налево) вычисления ξ_k и η_k вместо (3.5) берем

$$\xi_{2s-1} = \frac{g_s + \eta_{2s} - 1}{f_s - \xi_{2s}}, \quad \eta_{2s-1} = 1 + \frac{h_s}{f_s - \xi_{2s}},$$

$$\xi_{2s-2} = \frac{\beta_s + \eta_{2s-1} - 1}{\alpha_s - \xi_{2s-1}}, \quad \eta_{2s-2} = 1 + \frac{\gamma_s}{\alpha_s - \xi_{2s-1}}.$$

Вместо (3.6) получаем

$$\begin{aligned} a_1 &= \alpha_0 a_0, \\ a_2 &= f_0 a_1 - g_0 a_0, \\ a_2 + a_0 &= \xi_0 a_1 + \eta_0 a_0. \end{aligned} \tag{4.1}$$

Вместо (3.7) получаем

$$\begin{vmatrix} \alpha_0 & -1 & 0 \\ g_0 & -f_0 & 1 \\ -1 + \eta_0 & \xi_0 & -1 \end{vmatrix} = 0.$$

Берем нетривиальное решение системы (4.1) и проводим вычисления так же, как и для вытянутых сфероидальных функций, используя вместо (3.4) формулу

$$a_{s+2} + a_s = \xi_s a_{s+1} + \eta_s a_s.$$

5. В разд. 2–4 не была зафиксирована нормировка вычисляемой радиальной функции. Существуют различные способы задать такую нормировку. Наиболее принята нормировка

$$u_l(z) \sim \frac{1}{cz} \cos\left(cz - \frac{l+1}{2}\pi\right) \text{ при } z \rightarrow +\infty,$$

что эквивалентно условию

$$a_0 = 1/c$$

(и для разд. 2–3, и для разд. 4).

6. Опишем дополнительные вопросы, явления и результаты, полученные на этапе программной реализации метода.

Схема вычисления значений радиальных сфероидальных функций была следующей.

1. Нужное СЗ рассматриваемой задачи вычисляется методом, предложенным в [8]. Количество значащих цифр первоначально берется с небольшим запасом (6 цифр) против требуемого пользователем и, если требуется, впоследствии увеличивается (п. 8).

2. Выбирается начальный номер s для счета по (3.5). Критерием является требование, чтобы коэффициенты a_s соотношений (2.2), (2.3) были близки к своему предельному поведению (3.4). Анализ асимптотик и численные эксперименты показали, что достаточным является значение $s = 2\max(l, \sqrt{\theta})$.

3. Осуществляется счет по (3.5) до $s = 1$.

4. Вычисляется невязка в (3.7). Расчеты показали, что условие (3.7) является существенным для контроля точности. В отсутствие прямых аналитических зависимостей между левой частью (3.7) и итоговой ошибкой было в результате численных экспериментов установлено, что от определителя (3.7) необходимо требовать абсолютного порядка малости, приблизительно совпадающего с требуемой (относительной) точностью ответов. Проверка соответствующих условий производится в п. 8.

5. Ряды (1.3) вычисляются по (2.2), (2.3) до номера, выбранного в п. 2. При этом осуществляется учет потери значащих цифр, возникающей при суммировании величин разных знаков, путем одновременного суммирования соответствующих рядов абсолютных значений и сравнения порядков получившихся сумм.

6. Оцениваются остатки рядов (1.3) с учетом их асимптотического поведения как геометрических прогрессий. Оценивается ошибка от отбрасывания остатка ряда с заменой его на его асимптотическое представление.

7. Оценивается потеря знаков при суммировании двух слагаемых в (1.2). При некоторых значениях параметров она оказывалась существенной.

8. Оценивается итоговая ошибка. В случае необходимости, добавляется нужное число знаков мантиссы и/или количество членов в (3.5) и (1.3). Цикл 1–8 повторяется. Для определения вклада вычислительных погрешностей, произошедших от разных источников, в конечный результат потребовалось разработать схему их комплексного учета на основе полного анализа механизма сложения и/или взаимного поглощения всех перечисленных выше ошибок.

Полученные программы позволили вычислять значения вытянутых и сплюснутых радиальных волновых сфероидальных функций для значений аргумента в области $z > 1$ в широком диапазоне значений параметров. Расчеты проводились для c до 100, m и l до 100, количество верных знаков результата до 100. Для первичной сверки использовались таблицы из [10], более подробные и точные, чем в [2]. Приведенные в [10] результаты воспроизводились с их точностью

(15 знаков мантиссы). Отметим, что в [10] диапазон значений аргумента ограничивался небольшими значениями $1 < z \leq 1.8$, что связано с использованным там методом, а параметр c менялся в пределах от 0 до 8. Напротив, описанный здесь метод работает тем лучше, чем больше значение z , а значения z , близкие к 1, являются наиболее сложными для счета. В качестве основного метода проверки полученных результатов использовалось сравнение одного и того же значения функции, вычисленного с различным числом значащих цифр.

7. Рассматриваемый в разд. 2–5 метод вычисления радиальных сфероидальных функций может быть использован для вычисления при комплексных значениях z , $|z| > 1$. Далее обсуждаем случай, когда z вещественно. Метод особенно эффективен для больших и “средних” значений z , требует большого числа операций при $1 < z \wedge z \approx 1$ и неприемлем для вычисления сплюснутых радиальных функций при $0 \leq z < 1$. Особенно огорчительно последнее из перечисленных обстоятельств (напомним (см. разд. 1): вытянутые радиальные сферические функции вычисляются при $1 \leq z < +\infty$, сплюснутые – при $0 \leq z < +\infty$). В этих неподходящих для излагаемого метода случаях, по-видимому, наиболее эффективным является вычисление разложением рассматриваемой функции в степенной ряд в окрестности удачно выбранной точки. Однако заметим, что подобное вычисление неэффективно для больших значений z , а именно этот случай является наиболее сложным для вычислений.

Авторы благодарны рецензенту статьи, М.К. Керимову и Н.Б. Конюховой за сделанные ими полезные замечания.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бейтман Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Т. 1–3. М.: Наука, 1967.
2. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами / Под ред. М. Абрамовица, И. Стиган. М.: Наука, 1979.
3. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М.: Наука, 1976.
4. Абрамов А.А., Дышко А.Л., Конюхова Н.Б., Левитина Т.В. Вычисление радиальных волновых функций для сфероидов и трехосных эллипсоидов модифицированным методом фазовых функций // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1991. Т. 31. № 2. С. 212–234.
5. Levitina T., Brändas E. Computational techniques for prolate spheroidal wave functions in signal processing // J. Comput. Meth. in Sci. and Engng. 2001. V. 1. № 2s–3s. P. 287–313.
6. Воицинников Н.В., Фарафонов В.Г. Вычисление вытянутых радиальных сфероидальных волновых функций с использованием разложения Яффе // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2003. Т. 43. № 9. С. 1353–1363.
7. Скороходов С.Л. Квазиавтомодельность собственных значений сфероидальных волновых функций // Spectral and Evolution Problems. Proc. XV Crimean Math. School (KROMSH-2004). Simferopol, 2005.
8. Абрамов А.А., Курочкин С.В. Высокоточное вычисление угловых сфероидальных функций // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2006. Т. 46. № 1. С. 12–17.
9. Абрамов А.А. Выделение медленно растущих последовательностей, члены которых удовлетворяют заданным рекуррентным соотношениям // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2005. Т. 45. № 4. С. 678–685.
10. Таблицы сфероидальных волновых функций и их первых производных. Т. 1, 2. Минск.: Наука и техн., 1976.