Известия Гомельского государственного университета
имени Ф. Скорины, №4(55), Ч2, 2009

УДК 553:548

Итерационная методика решения уравнений нормалей в гироанизотропных средах со сверхбыстрой сходимостью

С. С. Гиргель

В кристаллооптике анизотропных и гиротропных сред важную роль играет уравнение нормалей для векторов рефракции собственных плоских монохроматических волн. Относительно нормальных η_i компонент векторов рефракции [1, 2]

$$\mathbf{m}_i = \mathbf{b} + \eta_i \mathbf{q}, \ (i=1,2,3,4) \tag{1}$$

это уравнение является, вообще говоря, полным уравнением четвертой степени вида

$$\eta^4 + a_3\eta^3 + a_2\eta^2 + a_1\eta + a_0 = 0. \tag{2}$$

При решении задач наклонного падения и отражения света на границе раздела двух сред обычно приходится из уравнений нормалей определять нормальные составляющие η_i векторов рефракции [1]. В простейшем случае изотропных сред коэффициенты $a_1 = a_3 = 0$, а корни уравнения (2) $\eta_1 = \eta_3 = -\eta_2 = -\eta_4 = \eta_0$. При наличии же анизотропии и гиротропии, как правило, все коэффициенты $a_i \neq 0$.

В ряде случаев (для изотропных сред, одно- и двуосных кристаллов при совпадении плоскости падения света с плоскостью симметрии кристалла) уравнение нормалей разлагается на два множителя и легко решается. Однако при переходе к низкосимметричным двуосным, а также гиротропным кристаллам уравнение нормалей становится, вообще говоря, полным уравнением четвертой степени относительно компонент η_i. Решение уравнения (2) может быть найдено в радикалах, однако ввиду громоздкости такого аналитического решения актуальной задачей остается поиск эффективных итерационных методов вычисления его корней.

Поэтому Федоров для немагнитных сред в [1] предложил итерационную методику расчета векторов рефракции, отраженных и преломленных волн, использующую малость анизотропии и обладающую линейной сходимостью порядка анизотропии. Затем в работе [3] он получил новую ковариантную форму уравнения нормалей для анизотропных сред, характеризуемых симметричным тензором ε, и на ее основе предложил другой метод расчета коэффициентов η_i. Идея работы [3] о целесообразности выделения в уравнении нормалей двух множителей, дающих приближенные значения корней, была нами модифицирована и применена в [4–6] к гироанизотропным средам общего вида. В [4–6] был описан ряд итерационных методик для решения уравнений нормалей, также обладающих линейной сходимостью порядка анизотропии.

В настоящей работе будет предложена иная итерационная схема решения уравнений нормалей, обладающая сверхбыстрой сходимостью порядка α^3, где α – параметр анизотропии.

Прежде всего, оценим порядки величин, входящих в (2). Коэффициенты a_1, a_3 – порядка α, что далее будем обозначать как $a_1 \sim a_3 \sim \alpha$. Обычно $\alpha \sim 10^{-5} \div 10^{-2}$, поэтому это обстоятельство естественно использовать.

Наиболее эффективным подходом для итерационного решения уравнения нормалей (2) является следующий. Сначала подстановкой

$$x = \eta - a_3/4 \tag{3}$$

исключим коэффициент a_3 в уравнении (2) и приведем его к виду

$$x^4 - 2b_2x^2 + b_1x + b_0 = 0. \tag{4}$$

Теперь $b_2 \approx x_0^2$, $b_0 \approx x_0^4$, $b_1 \sim \alpha^2$, где x_0 – некоторый положительный корень уравнения (4). Чтобы разложить (4) на множители воспользуемся методом Феррари [8]. Представим (4) в форме

$$(x^2 + d)^2 = 4A^2 x^2 - b_1 x + d^2 - b_0^2, \tag{5}$$

где, для краткости, обозначено

$$A = \sqrt{(b_2 + d)/2}. \tag{6}$$

Подберем параметр d так, чтобы правая часть (5) представляла собой квадрат, т.е.

$$(x^2 + d)^2 = \left(2Ax - b_1/(4A)\right)^2. \tag{7}$$

Для этого параметр d должен удовлетворять кубической резольвенте уравнения (4), т.е.

$$d^2 - b_0 + b_1^2/(16A^2) = 0, \tag{8}$$

где A зависит от d согласно (6). Отсюда видно, что $d \approx x_0^2$, $A \approx x_0$. Так как $b_1^2 \sim \alpha^4$, то это наводит на мысль решать уравнение (8) относительно d по следующей итерационной формуле (***ИФ***):

$$\varphi_{i+1} \equiv d_{i+1} = \sqrt{b_0 + b_1^2/(8(d_i + b_2))}, \quad i = 0,1,2,\dots\,. \tag{9}$$

В качестве нулевого приближения для d естественно взять $d_0 = \sqrt{b_0}$.

Оценим сходимость *ИФ* (9). Согласно [9], для *ИФ* вида $x = \varphi(x)$ соотношением

$$\tilde{N}_i = \frac{|x^{(i+1)} - x|}{|x^{(i)} - x|} \tag{10}$$

вводится сходимость C_i. Параметр C_i показывает, во сколько раз уменьшается погрешность $|d_i - d|$ на каждой итерации (9). Сходимость C_i для метода простой итерации определяется [9], как $C_i = \varphi_{i+1}'$. Поэтому для *ИФ* (9) сходимость

$$C_i = \varphi_{i+1}' \approx b_1^2/(64 b_0). \tag{11}$$

Так как $b_1^2 \sim \alpha^4$, то видим, что *ИФ* (9) обладает линейной, но сверхбыстрой сходимостью $C \sim \alpha^4$.

Вычислив параметр d, находим из (6) A и затем из (7) сразу определяем все корни:

$$x_{1,3} = A \pm \sqrt{A^2 - d - b_1/(4A)}, \quad x_{2,4} = -A \pm \sqrt{A^2 - d + b_1/(4A)}. \tag{12}$$

Оценим скорость сходимости корней в (12). В (4) $x_1 \approx x_3 \approx -x_2 \approx -x_4 \approx x$ причем $|x| - x_0 \sim \alpha$. При этом $d \approx x_0^2$, $A \approx x_0$. Нетрудно видеть, что сходимость C_x значений корней в (12)

$$C_x \propto \tilde{N}/(4\alpha) \propto \alpha^3/256 \propto b_1^{3/2}/256. \tag{13}$$

Одновременно сходимость C_x показывает погрешность нулевого приближения корней x_i. Существенно также, что сходимость C_x является устойчивой, а ее скорость не зависит от кратности корней x_i. Кроме того, описанная методика пригодна и при наличии поглощения, когда корни x_i комплексные.

Отметим, что впервые идея *ИФ* (9) была реализована в [7], однако подстановка (3) не использовалась, что приводило к более слабой сходимости.

Для подтверждения высокой эффективности предложенной итерационной схемы проведем численный эксперимент. Рассмотрим сильно анизотропный кристалл, у которого нормированные корни x_i приведенного уравнения нормалей (4) следующие: $x_1 = 1{,}15$; $x_2 = -0{,}95$; $x_3 = 0{,}92$ $x_4 = -1{,}12$ Средняя анизотропия корней $\alpha \approx 10^{-1}$. Тогда коэффициенты уравнения (4) равны: $b_0 = 1{,}125712$; $b_1 = -0{,}01242$; $b_2 = 1{,}08145$; $b_3 = 0$.

Параметр нулевого приближения $d_0 = \sqrt{b_0} \approx 1,060996$ отличается от точного значения d на $\Delta d = d - d_0 \approx 4 \cdot 10^{-6}$, что соответствует оценке (11).

Корни нулевого приближения – $x_1^{(0)} \approx 1,150008$; $x_2^{(0)} \approx -0,949987$; $x_3^{(0)} \approx 0,919990$; $x_4^{(0)} \approx -1,120011$ – отличаются от точных значений x_i на $10^{-5} \div 10^{-6}$, что также соответствует оценке (13).

А уже первое приближение дает корни $x_i^{(1)}$ с погрешностями $\Delta x_i^{(1)} \approx 10^{-11}$, т.е. число верных значащих цифр удваивается!

Итак, предложена эффективная итерационная методика решения уравнений нормалей для гироанизотропных сред, которая обладает устойчивой сверхбыстрой сходимостью порядка куба анизотропии. Практически всегда достаточно нулевого приближения. Описанная схема не зависит от кратности корней и пригодна также для поглощающих кристаллов.

Abstract. The iterative procedure of solving equations of normals in gyro-anisotropic media which has inconvertible super-fast convergence is presented in the paper. The method does not depend on multiplicity of radicals and is also suitable for absorptive crystals.

Литература

1. Ф. И. Федоров, Оптика анизотропных сред, Мн., Изд–во АН БССР, 1958.
2. Ф. И. Федоров, Теория гиротропии, Мн., Наука и техника, 1976.
3. Ф. И. Федоров, Новая ковариантная форма уравнений нормалей для двухосных кристаллов, Журн. прикл. спектр., **37**, №6 (1982), 941–949.
4. Б. В. Бокуть, С. С. Гиргель, Новые формы уравнения нормалей для бианизотропных сред, Журн. прикл. спектр., **46,** №3 (1987), 470–473.
5. С. С. Гиргель, Показатели преломления и векторы рефракции собственных волн в оптически активных магнитоупорядоченных кристаллах, Опт. и спектр., **60**, №4 (1986), 777–780.
6. Б. В. Бокуть, С.С. Гиргель, Определение векторов рефракции из уравнения нормалей для линейных анизотропных и гиротропных сред, Ковариантные методы в теоретической физике. Оптика и акустика: сб. научн. тр., Мн., ИФ АН БССР, 1986, 30–32.
7. С. С. Гиргель, Кристаллооптика магнитоупорядоченных сред: дисс. д-ра физ.-мат. наук, Гомель, ГГУ, 1991.
8. Г. Корн, Справочник по математике для научных работников и инженеров, Москва, Наука, 1973.
9. Дж. Трауб, Итерационные методы решения уравнений, М., Мир, 1985.

Гомельский государственный
университет им. Ф. Скорины

Поступило 15.10.08