ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРОИЗВОДНЫХ ВЕСОВОЙ ФУНКЦИИ В МЕТОДЕ ГОПКИНСА ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ДИФРАКЦИОННЫХ ИНТЕГРАЛОВ

С. А. РОДИОНОВ

Известный метод Гопкинса для вычисления дифракционных интегралов развивается на случай непостоянной весовой функции и произвольного числа переменных. Приводятся рабочие формулы для численного интегрирования, учитывающие первую и вторую производные весовой функции в узлах интегрирования.

В теории дифракции почти всегда возникает задача вычисления определенных интегралов вида:

$$I = \iint\limits_{\Omega} q(x,y)\exp[if(x,y)]dxdy. \tag{1}$$

Подобные выражения часто называют дифракционными интегралами. В технической оптике аналогичным интегралом выражается оптическая передаточная функция (ОПФ) – одна из наиболее важных характеристик оптических систем.

Обычные методы численного интегрирования мало пригодны для вычисления интегралов (1), так как даже при весьма медленно меняющемся аргументе $f(x,y)$ подынтегральная функция $\exp[if(x,y)]$ является быстроосциллирующей и для получения удовлетворительной погрешности необходимо громадное количество узлов интегрирования.

К настоящему времени наиболее удачным, по-видимому, является метод Гопкинса [1] для вычисления интегралов вида (1) при постоянной весовой функции $q(x,y) = const$, специально разработанной им, кстати, исходя из задачи вычисления ОПФ. Разлагая функцию $f(x,y)$ в окрестности каждого узла интегрирования x_m, y_m в ряд Тейлора не выше первой степени, Гопкинс получил:

$$I = \frac{V_\Omega}{N}\sum_m\sum_n \exp[if_0]\mathrm{sinc}(X)\mathrm{sinc}(Y), \tag{2}$$

где $\mathrm{sinc}(\alpha) = \dfrac{\sin(\alpha)}{\alpha}$; $f_0 = f(x_m, y_n)$; $X = \Delta x\dfrac{\partial f(x_m,y_n)}{\partial x}$; $Y = \Delta y\dfrac{\partial f(x_m,y_n)}{\partial y}$; N – общее количество узлов; $x_m = m2\Delta x$; $y_n = n2\Delta y$ – узлы интегрирования; V_Ω – объем (площадь) области интегрирования.

Как показывает практика, метод Гопкинса, благодаря учету первых производных функции $f(x,y)$ более эффективен, чем обычные методы. Было полезно развить метод Гопкинса на случай непостоянной весовой функции $q(x,y)$ и произвольного числа переменных, тем более, что, хотя интегралы вида (1) встречаются во многих и неоптических приложениях, метод Гопкинса, по-видимому, остается мало известным.

Запишем (1) для общего случая p переменных:

$$I = \int \underset{\Omega}{\dots} \int q(x_1 \dots x_p) \exp[if(x_1 \dots x_p)] dx_1 \dots dx_p. \qquad (3)$$

Разобьем область интегрирования Ω на $N = N_1, N_2 ... N_p$ ячеек – гиперпараллелепипедов размерами $2\Delta x_1, 2\Delta x_2 ... 2\Delta x_p$ с центрами в узлах интегрирования $x_1^{(m1)}, x_2^{(m2)} ... x_p^{(mp)}$.

$$q(x_1 \dots x_p) = q_0 + \sum_{j=1}^{p} q'_f u_j + \tfrac{1}{2} \sum_{j=1}^{p} \sum_{k=1}^{p} q''_{jk} u_j u_k, \qquad (4)$$

Разложим $q(x_1 \dots x_2)$ и $f(x_1 \dots x_2)$ в ряды Тейлора в окрестности каждого узла $x_1^{(m1)} \dots x_p^{(mp)}$:

$$f(x_1 \dots x_p) = f_0 + \sum_{j=1}^{p} f'_j u_j, \qquad (5)$$

где

$$q''_{jk} = \frac{\partial^2 q(x_1^{(m1)}, \dots, x_p^{(mp)})}{\partial x_j \partial x_k}; \; f_0 = f(x_1^{(m1)}, \dots, x_p^{(mp)})$$

$$f'_j = \frac{\partial f(x_1^{(m1)}, \dots, x_p^{(mp)})}{\partial x_j}; \; u_j = x_j - x_j^{(mj)}$$

$$q_0 = q(x_1^{(m1)}, \dots, x_p^{(mp)}); \; q'_j = \frac{\partial q(x_1^{(mp)}, \dots, x_p^{(mp)})}{\partial x_j}$$

Напишем выражение для интеграла (3) в пределах одной ячейки с учетом (4) и (5):

$$dI = \int_{-\Delta x_1}^{\Delta x_1} \dots \int_{-\Delta x_p}^{\Delta x_p} \left(q_0 + \sum_{j=1}^{p} q'_j u_j + \tfrac{1}{2} \sum_{j=1}^{p} \sum_{k=1}^{p} q''_{jk} u_j u_k \right) \exp\left[i \left(f_0 + \sum_{j=1}^{p} f'_j u_j \right) \right] du_1 \dots du_p =$$
$$= \exp[if_0](dI_0 + dI_1 + dI_2), \qquad (6)$$

где

$$dI_0 = \int_{-\Delta x_1}^{\Delta x_1} \dots \int_{-\Delta x_p}^{\Delta x_p} q_0 \exp\left[i \sum_{j}^{p} f'_j u_j \right] du_1 \dots du_p, \qquad (7)$$

$$dI_1 = \int_{-\Delta x_1}^{\Delta x_1} \dots \int_{-\Delta x_p}^{\Delta x_p} \sum_{j=1}^{p} q'_j u_j \exp\left[i \sum_{k=1}^{p} f'_k u_k \right] du_1 \dots du_p, \qquad (8)$$

$$dI_2 = \int_{-\Delta x_1}^{\Delta x_1} \dots \int_{-\Delta x_p}^{\Delta x_p} \sum_{j=1}^{p} \sum_{k=1}^{p} q''_{jk} u_j u_k \exp\left[i \sum_{l=1}^{p} f'_l u_l \right] du_1 \dots du_p. \qquad (9)$$

Интеграл dI_0 находится так же, как в методе Гопкинса:

$$dI_0 = q_0 \prod_{j=1}^{p} \int_{-\Delta x_j}^{\Delta x_j} \exp\left[if'_j u_j\right] du_j = q_0 \prod_{j=1}^{p} 2\Delta x_j \sin\mathrm{c}(f'_j \Delta x_j). \tag{10}$$

Обозначив

$$a_j = \sin\mathrm{c}(f'_j \Delta x_j), \tag{11}$$

запишем:

$$dI_0 = q_0 \prod_{j=1}^{p} 2\Delta x_j \alpha_j \tag{12}$$

Рассмотрим интегралы dI_1 и dI_2. Преобразуя (8), получим

$$dI_1 = \sum_{j=1}^{p} q'_j \prod_{k=1}^{p} \int_{-\Delta x_p}^{\Delta x_p} u_j^{\delta_{jk}} \exp\left[if'_k u_k\right] du_k, \tag{13}$$

где $\delta_{jk} = \begin{cases} 1 & \text{при } j = k \\ 0 & \text{при } j \neq k \end{cases}$ – символ Кронекера.

В выражение (13) входит произведение интегралов двух различных видов. В случае $j \neq k$, $u_j^{\delta_{jk}} = 1$ имеем интеграл того же вида, что и в (10):

$$dI_{k0} = \int_{-\Delta x_p}^{\Delta x_p} \exp\left[if'_k u_k\right] du_k = 2\Delta x_k \alpha_k, \tag{14}$$

где a_k – из (11).

В случае $j = k$ соответствующий интеграл имеет следующий вид:

$$dI_{k1} = \int_{-\Delta x_k}^{\Delta x_k} u_k \exp[if'_k u_k] du_k. \tag{15}$$

Оценивая этот интеграл, получим:

$$dI_{k1} = -i2\Delta x_k^2 \frac{\cos(f'_k \Delta x_k) - \sin\mathrm{c}(f'_k \Delta x_k)}{f'_k \Delta x_k}. \tag{16}$$

Для упрощения выражений введем обозначение для следующей функции:

$$\mathrm{csc}(x) = \frac{\sin\mathrm{c}(x) - \cos(x)}{x^2} = \frac{2}{3!} - \frac{4}{5!} x^2 + \frac{6}{7!} x^4 - \ldots - (-1)^n \frac{n+1}{(n+2)!} x^{n-1}. \tag{17}$$

Тогда

$$dI_{k1} = i2\Delta x_k^2 f'_k \Delta x_k \, \mathrm{csc}(f'_k \Delta x_k) = 2\Delta x_k \beta_k, \tag{18}$$

где $\beta_k = \Delta x_k f'_k \Delta x_k \, \mathrm{csc}\left(f'_k \Delta x_k\right)$.

Для интеграла dI_2 из (9) получаем аналогично:

$$dI_2 = \sum_j \sum_k q''_{jk} \prod_l \int_{-\Delta x_l}^{\Delta x_l} u^{\delta}_{j\,jl} u^{\delta}_{k\,kl} \exp[if'_i u_l] du_l,$$

где в произведение входят интегралы трех различных видов: при $j \neq l$, $k \neq l$, затем при $j = l$, $k \neq l$ или $j \neq l$, $k = l$, и, наконец, при $j = l$, $k = l$, первые два есть dI_{k0} и dI_{k1} рассмотренные выше, а третий:

$$dI_{k2} = \int_{-\Delta x_k}^{\Delta x_k} u_k^2 \exp[if'_k u_k] du_k = 2\Delta x_k^3 \left[\sin c(f'_k \Delta x_k) + 2 \frac{\cos(f'_k \Delta x_k) - \sin c(f'_k \Delta x_k)}{(f'_k \Delta x_k)^2} \right] =$$

$$= 2\Delta x_k^3 [\sin c(f'_k \Delta x_k) - 2 \csc(f'_k \Delta x_k)]$$

или

$$dI_{k2} = 2\Delta x_k \gamma_k, \tag{19}$$

где $\gamma_k = \Delta x_k^3 [\sin c(f'_k \Delta x_k) - 2 \csc(f'_k \Delta x_k)]$.

Подставив выражения для интегралов в (6), получим:

$$dI = \left(\prod 2\Delta x\right) \exp(if_0) \left(q_0 \prod_j \alpha_j + i \sum_k q'_k \beta_k \prod_{j \neq k} \alpha_j + \tfrac{1}{2} \sum_k q''_{kk} \gamma_k \prod_{j \neq k} \alpha_j - \tfrac{1}{2} \sum_k \sum_l \beta_k \beta_l \prod_{\substack{j \neq k \\ j \neq l}} \alpha_j \right). \tag{20}$$

Произведя суммирование по всем ячейкам интегрирования, получим выражение для интеграла по всей области:

$$I = \frac{V_\Omega}{N} \sum \left\{ \exp(if_0) \left(q_0 \prod_j \alpha_j + i \sum_k q'_k \beta_k \prod_{j \neq k} \alpha_j + \tfrac{1}{2} \sum_k q''_{kk} \gamma_k \prod_{j \neq k} \alpha_j - \tfrac{1}{2} \sum_k \sum_l \beta_k \beta_l \prod_{\substack{j \neq k \\ j \neq l}} \alpha_j \right) \right\}. \tag{21}$$

Предыдущее выражение является комплексным. Для практических вычислений его необходимо представить в виде каких-либо вещественных выражений, например, в алгебраической форме:

$$I = C + iS. \tag{22}$$

Тогда действительная C и мнимая S части вычисляются но формуле:

$$\begin{matrix} C \\ S \end{matrix} = \frac{V_\Omega}{N} \sum \left\{ \begin{matrix} \cos f_0 \\ \sin f_0 \end{matrix} \left(q_0 \prod_j \alpha_j + \tfrac{1}{2} \sum_k q''_{kk} \gamma_k \prod_{j \neq k} \alpha_j - \tfrac{1}{2} \sum_k \sum_l \beta_k \beta_l \prod_{\substack{j \neq k \\ j \neq l}} \alpha_j \right) \begin{matrix} -\sin f_0 \\ +\cos f_0 \end{matrix} \sum_k q'_k \beta_k \prod_{j \neq k} \alpha_j \right\}, \tag{23}$$

где верхняя часть формулы (там, где она разветвляется), относится к C, а нижняя – к S. Полученное выражение и является основной рабочей формулой для численного интегрирования (3) в общем случае при любых функциях q и f и любого числа переменных, α, β, γ находятся из выражений (11), (18), (19).

Полезно рассмотреть, какой вид принимает общая формула (23) в некоторых простых частных случаях.

Для случая двух переменных *x, y*:

$$\frac{C}{S}=\frac{V_\Omega}{N}\sum_m\sum_n\left\{\begin{matrix}\cos f_0\\ \sin f_0\end{matrix}\left[q_0\alpha_x\alpha_y+\tfrac{1}{2}(q''_{xx}\gamma_x\alpha_y+q''_{yy}\gamma_y\alpha_x)-q''_{xy}\beta_x\beta_y\right]\begin{matrix}-\sin f_0\\ +\cos f_0\end{matrix}(q'_x\beta_x\alpha_y+q'_y\beta_y\alpha_x)\right\},$$

где $\alpha_x=\operatorname{sinc}(X)$; $\beta_x=\Delta x X\operatorname{csc}(X)$; $\gamma_k=\Delta x_k^3[\sin\mathrm{c}(f'_k\Delta x_k)-2\operatorname{csc}(f'_k\Delta x_k)]$;
$X=f'_x\Delta x$; α_y, β_y, γ_y – аналогичны.

Для случая трех переменных *x*, *y*, *z* (когда *q* есть функция только одной переменной *x*):

$$\frac{C}{S}=\frac{V_\Omega}{N}\sum_m\sum_n\sum_p\left[\begin{matrix}\cos f_0\\ \sin f_0\end{matrix}\left(q_0\alpha_x+\tfrac{1}{2}q''\gamma_x\right)\begin{matrix}-\sin f_0\\ +\cos f_0\end{matrix}q'\beta_x\right],$$

где обозначения аналогичны.

1. ЛИТЕРАТУРА

1. Hopkins H.H. *Proc. Phys. Soc*. B. 70, p. 1002, 1957.