

Matematično-fizikalni praktikum

Naloga 1

Luka Papež

10. oktober 2024

1 Naloga

Naloga: Z uporabo kombinacije Maclaurinove vrste in asimptotskega razvoja poišči čim učinkovitejši postopek za izračun vrednosti Airyjevih funkcij Ai in Bi na vsej realni osi z **absolutno** napako, manjšo od 10^{-10} . Enako naredi tudi z **relativno** napako in ugotovi, ali je tudi pri le-tej dosegljiva natančnost, manjša od 10^{-10} . Pri oceni napak si pomagaj s programi, ki znajo računati s poljubno natančnostjo, na primer z MATHEMATICO in/ali paketi MPMATH in DECIMAL v programskem jeziku PYTHON.

Dodatna naloga: Ničle funkcije Ai pogosto srečamo v matematični analizi pri določitvi intervalov ničel specialnih funkcij in ortogonalnih polinomov [2] ter v fiziki pri računu energijskih spektrov kvantnomehanskih sistemov [3]. Poišči prvih sto ničel $\{a_s\}_{s=1}^{100}$ Airyjeve funkcije Ai in prvih sto ničel $\{b_s\}_{s=1}^{100}$ funkcije Bi pri $x < 0$ ter dobljene vrednosti primerjaj s podanima formulama.

2 Uvod

Airyjevi funkciji Ai in Bi (slika 1) se v fiziki pojavljata predvsem v optiki in kvantni mehaniki [1]. Definirani sta kot neodvisni rešitvi enačbe

$$y''(x) - xy(x) = 0$$

in sta predstavljeni v integralni obliki

$$\text{Ai}(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos(t^3/3 + xt) dt, \quad \text{Bi}(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \left[e^{-t^3/3 + xt} + \sin(t^3/3 + xt) \right] dt.$$

Za majhne x lahko funkciji Ai in Bi izrazimo z Maclaurinovima vrstama

$$\text{Ai}(x) = \alpha f(x) - \beta g(x), \quad \text{Bi}(x) = \sqrt{3} \left[\alpha f(x) + \beta g(x) \right],$$

kjer v $x = 0$ veljata zvezi $\alpha = \text{Ai}(0) = \text{Bi}(0)/\sqrt{3} \approx 0.355028053887817239$ in $\beta = -\text{Ai}'(0) = \text{Bi}'(0)/\sqrt{3} \approx 0.258819403792806798$. Vrsti za f in g sta

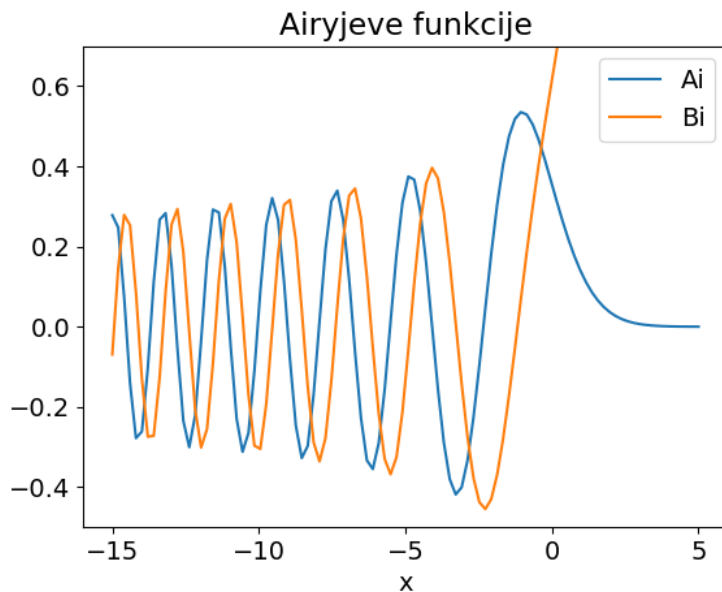
$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{1}{3} \right)_k \frac{3^k x^{3k}}{(3k)!}, \quad g(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{2}{3} \right)_k \frac{3^k x^{3k+1}}{(3k+1)!},$$

kjer je

$$(z)_n = \Gamma(z+n)/\Gamma(z), \quad (z)_0 = 1.$$

Za velike vrednosti $|x|$ Airyjevi funkciji aproksimiramo z njunima asimptotskima razvojem. Z novo spremenljivko $\xi = \frac{2}{3}|x|^{3/2}$ in asimptotskimi vrstami

$$L(z) \sim \sum_{s=0}^{\infty} \frac{u_s}{z^s}, \quad P(z) \sim \sum_{s=0}^{\infty} (-1)^s \frac{u_{2s}}{z^{2s}}, \quad Q(z) \sim \sum_{s=0}^{\infty} (-1)^s \frac{u_{2s+1}}{z^{2s+1}},$$



Slika 1: Graf Airyevih funkcij Ai in Bi za realne argumente. Funkcija Ai je povsod omejena, medtem ko Bi divergira na pozitivni polosi. Ničle imata le na negativni polosi.

s koeficienti

$$u_s = \frac{\Gamma(3s + \frac{1}{2})}{54^s s! \Gamma(s + \frac{1}{2})}$$

za velike pozitivne x izrazimo

$$\text{Ai}(x) \sim \frac{e^{-\xi}}{2\sqrt{\pi}x^{1/4}} L(-\xi), \quad \text{Bi}(x) \sim \frac{e^{\xi}}{\sqrt{\pi}x^{1/4}} L(\xi),$$

za po absolutni vrednosti velike negativne x pa

$$\begin{aligned} \text{Ai}(x) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-x)^{1/4}} \left[\sin(\xi - \pi/4) Q(\xi) + \cos(\xi - \pi/4) P(\xi) \right], \\ \text{Bi}(x) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-x)^{1/4}} \left[-\sin(\xi - \pi/4) P(\xi) + \cos(\xi - \pi/4) Q(\xi) \right]. \end{aligned}$$

3 Rešitev

3.1 Taylorjeva vrsta

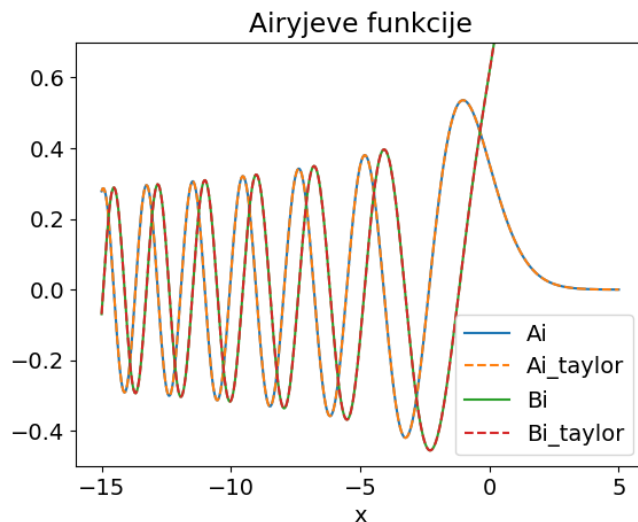
Za pristop k nalogi bomo najprej implementirali Taylorjevo vrsto, saj je ta precej enostavnejša kot asimptotska vrsta. Vrsta podana v uvodu je precej računsko intenzivna zato jo poskusimo najprej poenostaviti. Pogledamo funkciji f in g iz katerih sta sestavljeni funkciji Ai in Bi.

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\Gamma(k+1/3)}{\Gamma(1/3)} \right) \frac{3^k x^{3k}}{(3k)!}, \quad g(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\Gamma(k+2/3)}{\Gamma(2/3)} \right) \frac{3^k x^{3k+1}}{(3k+1)!},$$

Spomnimo se relacije $\Gamma(n+1) = n\Gamma(n)$. Iz tega lahko opazimo, da lahko člene f in g zapišemo v rekurzivni obliki. Označimo člene vrste f z a_k in člene vrste g z b_k . Potem velja:

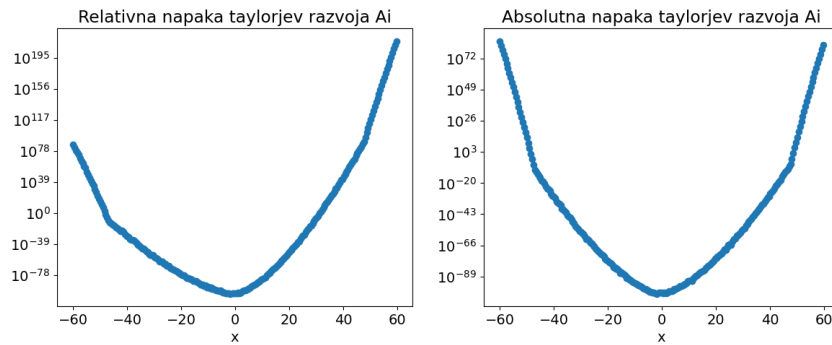
$$a_{k+1} = \frac{x^3}{(3k+3)(3k+2)} a_k, \quad b_{k+1} = \frac{x^3}{(3k+4)(3k+3)} b_k,$$

Za izračun vrste pa potrebujemo še prva elementa funkcij $a_0 = 1$ in $b_0 = x$. Najprej preverimo, če se naša vrsta vizualno ujema z vrednostmi funkcij Ai in Bi.

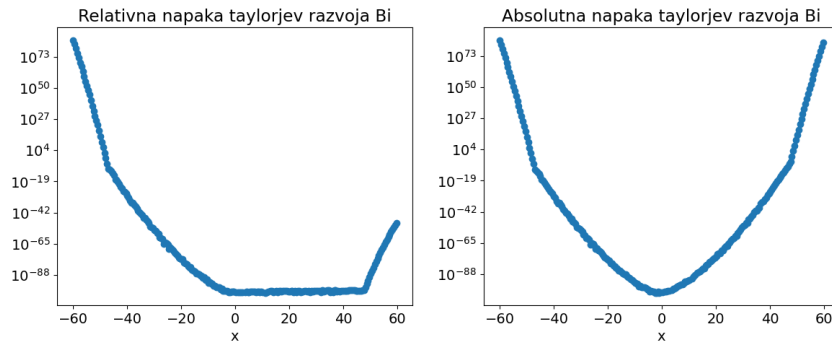


Slika 2: Primerjava Taylorjeve vrste in dejanskih vrednosti funkcij Ai in Bi

Naše vrste se dobro ujemajo z vrednostmi funkcij Ai in Bi za majhne vrednosti x . Zdaj narišemo grafa z relativno in absolutno napako s 300 členi taylorjeve vrste.

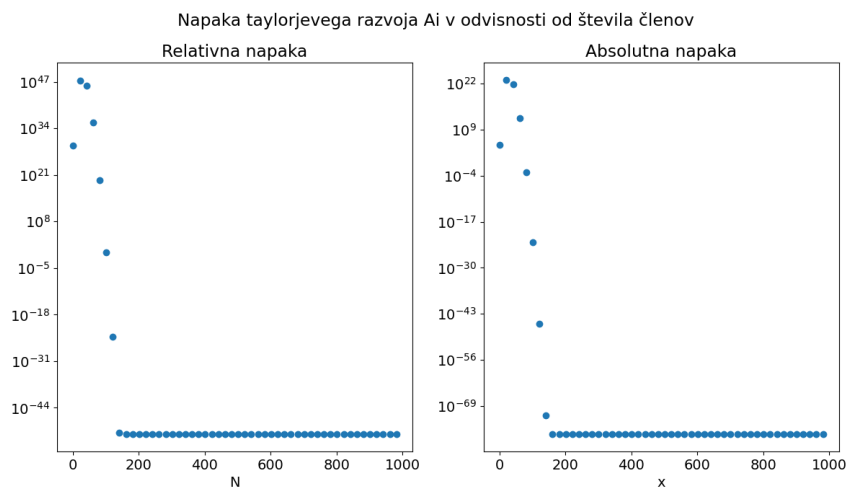


Slika 3: Napake Taylorjeve vrste pri izračunu funkcije Ai



Slika 4: Napake Taylorjeve vrste pri izračunu funkcije Bi

Absolutne napake so simetrične okoli ničle. Kar pa ne velja pri relativni napaki funkcije predvsem pri Bi. To odstopanje lahko pojasnimo z zelo hitro divergenco funkcije Bi na pozitivni polosi. Za zaključek o Taylorjevi vrsti si pogledjmo še kako se spreminja vsota napake na območje -20 do 20 s številom členov.



Slika 5: Napake Taylorjeve vrste pri N členih

Odvisnost napake od števila členov je lepo razvidna. Graf pa je praktično enak za obe funkciji zato je tukaj prikazan le za funkcijo Ai. Napaka pada do približno $N = 200$ potem pa se ustali zato bomo v nadaljevanju uporabljali 300 členov.

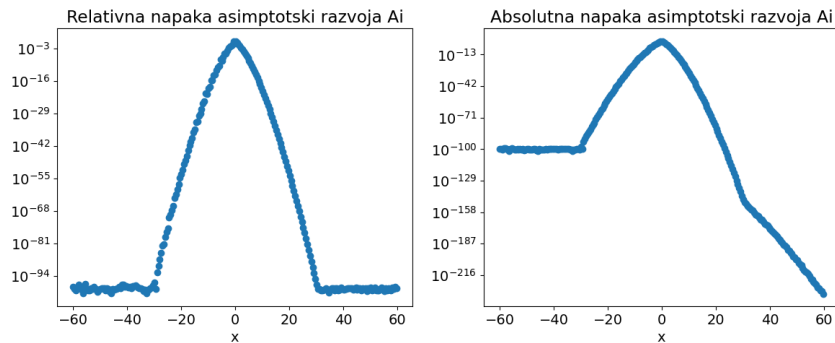
3.2 Asimptotska vrsta

Asimptotska vrsta je sestavljena iz treh vrst L , P in Q . Za izračun teh vrst potrebujemo koeficiente u_s . Poenostavimo koeficient u_s po postopku, ki smo ga že uporabili pri Taylorjevi vrsti.

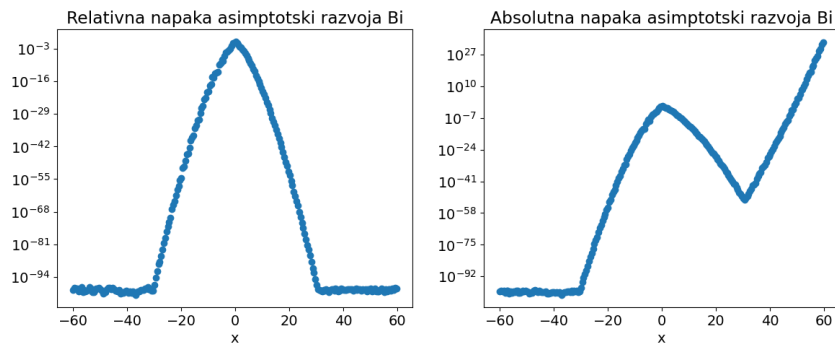
$$u_{s+1} = \frac{(6s+5)(6s+1)}{72} u_s$$

Pomembna opazka pa je tudi, da je koeficient u_s odvisen le od s . Zato lahko vse koeficiente izračunamo le enkrat in jih nato uporabljamo za izračun vseh treh vrst. Še eno pomembno dejstvo o asimptotskih vrstah pa je, da te divergirajo. Zato namesto vsot s fiksnim številom členov, v tem delu prištevamo člene dokler ti ne začnejo naraščati.

Zdaj bomo preskočili vizualno primerjavo in si le ogledali kako se obnašajo napake pri asimptotski vrsti.



Slika 6: Napake asimptotske vrste funkcije Ai

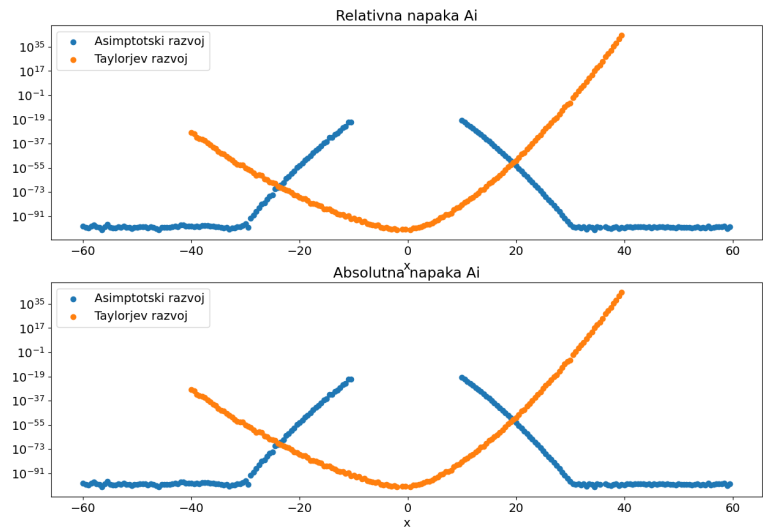


Slika 7: Napake asimptotske vrste funkcije Bi

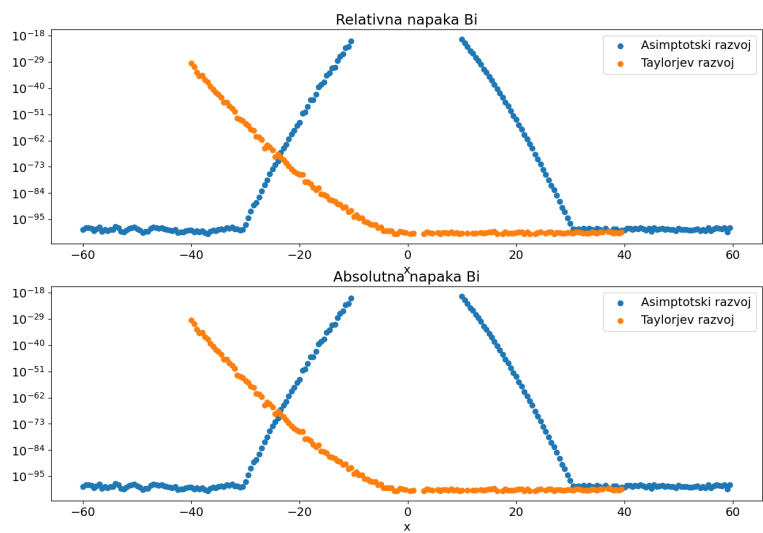
V tem primeru je relativna napaka precej ne zanimiva in po pričakovanjih narašča, ko preidemo v področje manjših števil. Pri absolutni napaki pa opazimo nenadne prelome na pozitivni polosi. To je posledica nastavljene velikosti števil v spominu. Saj se funkciji Bi zelo hitro začnejo povečevati števila in zato nima dovolj spomina, da bi se ohranila vse števke. Funkcija Ai pa konvergira k ničli in za razliko od Bi se števila in hkrati absolutna napaka zmanjšujejo.

3.3 Združitev obeh vrst

Zdaj ko imamo implementirani obe vrsti lahko njuni lastnosti uporabimo za natančnejši izračun vrednosti funkcij Ai in Bi. Za majhne vrednosti uporabimo Taylorjevo vrsto, za velike pa asimptotsko. Preostane nam le še določitev meje za prehod. Združimo grafa napak obeh vrst.



Slika 8: Napake pri izračunu funkcije A_i



Slika 9: Napake pri izračunu funkcije B_i

Iz zgornjih grafov je razvidno, da je najbolj primerna skupna meja za prehod $x = 30$. Iz vrednosti napak pa lahko tudi sklepamo, da smo dosegli zahtevano natančnost 10^{-10} . K temu zaključku spada še komentar, da jo lahko dosežemo le, če izberemo primerno natančnost števil glede na velikost števil s katerimi računamo (*dps* nastavitve v knjižnici *mpmath*).

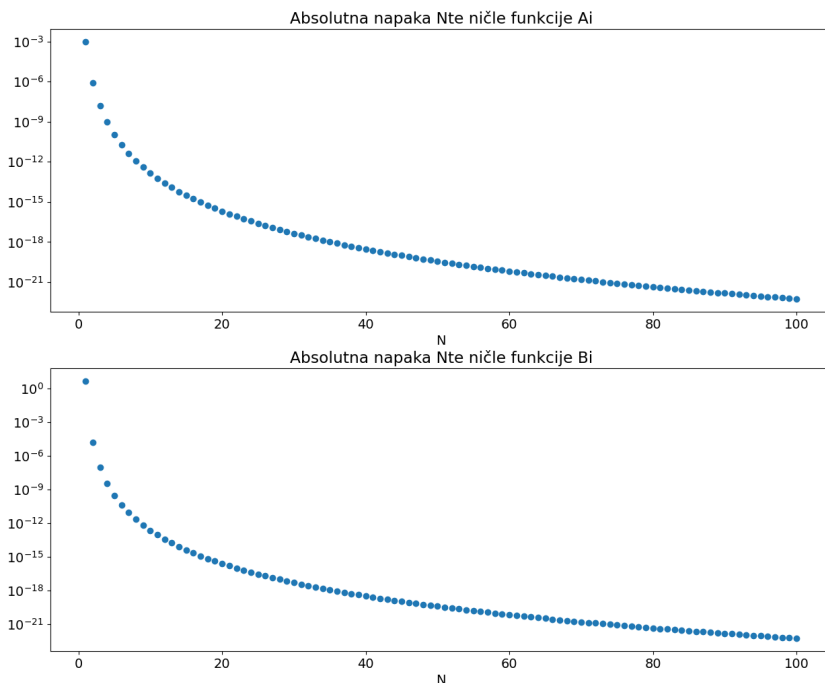
4 Dodatna naloga

V dodatni nalogi najprej uporabimo *in-built* funkcije za izračun ničel funkcij Ai in Bi . Nato pa uporabimo še podani formuli s pomočjo prvih petih členov asimptotske vrste funkcije f [4].

$$a_s = -f\left(\frac{3\pi(4s-1)}{8}\right), \quad b_s = -f\left(\frac{3\pi(4s-3)}{8}\right), \quad s = 1, 2, \dots,$$

$$f(z) \sim z^{2/3} \left(1 + \frac{5}{48} z^{-2} - \frac{5}{36} z^{-4} + \frac{77125}{82944} z^{-6} - \frac{108056875}{6967296} z^{-8} + \dots\right).$$

Za primerjavo formule in dejanskih vrednosti si oglejmo graf napak.



Slika 10: Napake pri izračunu ničel funkcije Ai s pomočjo vrste funkcije f

Absolutne napake padajo s številom ničle. To dejstvo lahko pričakujemo iz izgleda funkcij in dejstva, da smo uporabili asimptotsko vrsto. Saj imata Airyjevi funkciji ničle le na negativni polosi in napaka asimptotske vrste pada z naraščanjem števil.

5 Zaključek

Dosegli smo cilj naloge, ki je bil implementacija numeričnega računanja Airjevih funkcij z absolutnimi in relativnimi napakami manjšimi od 10^{-10} . Za doseg tega cilja smo uporabili kombinacijo Taylorjeve in asimptotske vrste. Ideja naloge mi je bila zanimiva, saj nisem imel prejšnjih izkušenj z zelo natančnim računanjem. Sem pa imel kar precej težav z implementacijo asimptotske vrste zaradi površnosti pri prepisovanju formul.

Literatura

- [1] O. Vallée, M. Soares, *Airy functions and applications to physics*, Imperial College Press, London 2004.
- [2] G. Szegő, *Orthogonal polynomials*, AMS, Providence 1939.
- [3] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Course in theoretical physics, Vol. 3: Quantum mechanics*, 3rd edition, Pergamon Press, Oxford 1991.
- [4] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of mathematical functions*, 10th edition, Dover Publications, Mineola 1972.
- [5] Procyon117, Schneelocke, *Airy function*, Wikipedia, 2024.
- [6] N. S. Manton, *Asymptotic methods*, Mathematical Tripos Part II, 2012