Física Numérica

Tarea #2

D. A. Vázquez Gutiérrez

Escuela Superior de Física y Matemáticas, Instituto Politécnico Nacional,Unidad Profesional .ᴬdolfo López Mateos”, Zacatenco, Edificio 9, Col. San Pedro Zacatenco, C.P. 07730 del. Gustavo A. Madero, Ciudad de México, México

email: dvazquezg1600@alumno.ipn.mx

26 de marzo de 2024

1. Cancelación Sustractiva

Las distintas formas en que podemos representar matemáticamente una expresión pueden tener un gran impacto en la estabilidad numérica y la precisión de los cálculos, especialmente cuando trabajamos con números cercanos entre sí o cuando nos acercamos a ciertos límites, como lo es el caso del cero.

Una de las razones por las cuales ciertas expresiones pueden funcionar mejor que otras numéricamente es la cancelación sustractiva .

Recordando que en general el numero mas pequeño que la computadora puede almacenar es mucho menor que la precision de maquina ya que como recordemos de los resultados nuestra la tarea anterior, nuestro limite de *underflow* calculado es:

$$l_{ufw} = 4{,}940656 \times 10^{-324} \tag{1}$$

Mientras que nuestra precision de maquina es:

$$\epsilon_m = 1{,}11023 \times 10^{-16} \tag{2}$$

Por lo tanto la cancelación numérica puede ocurrir cuando restamos cantidades muy cercanas entre sí, siendo estas irreconocibles para la maquina . Al reescribir una expresión de una manera que evite esta resta directa, como usar identidades trigonométricas o factorización, podemos evitar la cancelación numérica y obtener resultados más precisos.

Ahora mostraremos como reescribir algunas expresiones para evitar la cancelación para los argumentos indicados.

(a) $\sqrt{x+1} - 1, x \approx 0$

Entonces comenzamos multiplicando ambas partes por un uno en forma de $\sqrt{x+1}+1$ sobre si mismo.

$$\begin{aligned}(\sqrt{x+1}-1)\cdot 1 &= (\sqrt{x+1}-1)\cdot\frac{\sqrt{x+1}+1}{\sqrt{x+1}+1}\\ &= \frac{(x+1)-1}{\sqrt{x+1}+1}\\ &= \frac{x}{\sqrt{x+1}+1}\end{aligned}$$

De tal forma que :

$$\sqrt{x+1}-1 = \frac{x}{\sqrt{x+1}+1} \tag{3}$$

Donde por mas que $x \approx 0$, mientras (3) no llegue a *underflow* no habrá ceros inesperados al evitar sustracciones.

(b) $senx - seny, x \approx y$

Partimos recordando lo siguiente :

$$sin(a \pm b) = sin(a)cos(b) \pm cos(a)sin(b)$$

$$\Rightarrow sin(a+b) - sin(a-b) = 2cos(a)sin(b)$$

Entonces resolviendo $a+b=x$ y $a-b=y$ obtenemos:

$$senx - seny = 2cos(\frac{x+y}{2})sin(\frac{x-y}{2}) \quad (4)$$

Donde aun teniendo una sustracción en el termino del seno , y suponiendo que x y y sean menores que la precision de maquina, este tomaría el valor de x que aun que muy pequeño , es distinto de cero , evitándonos la cancelación.

(c) $x^2 - y^2, x \approx y$

Notemos que podemos factorizar esta expresión , obteniendo :

$$x^2 - y^2 = (x+y)(x-y) \quad (5)$$

Una pregunta que nos podríamos hacer es , ¿Por que esta forma es efectiva si aun tenemos una raíz con sustracción $x-y$? Esto es debido a que aun se conserva la diferencia entre ellos , y aun que puede haber perdida de precision en la diferencia , esta es menor que si se representara directamente como $x^2 - y^2$.

(d) $\frac{1-cosx}{senx}, x \approx 0$

Recordando lo siguiente :

$$1 - cosx = 2sin^2(\frac{x}{2})$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{1-cosx}{senx} &= \frac{2sin^2(\frac{x}{2})}{sinx} \\ &= 2sin(\frac{x}{2}) \cdot \frac{sin(\frac{x}{2})}{sinx} \end{aligned}$$

Sin embargo también tenemos la siguiente propiedad trigonométrica:

$$sen(a) = 2sen(\frac{a}{2})cos(\frac{a}{2})$$

Por lo tanto

$$\frac{1-cosx}{senx} = 2\frac{sin(\frac{x}{2})}{cos(\frac{x}{2})} \quad (6)$$

En este caso nos deshacemos de todo tipo de sustracción, y mientras $x/2$ no provoque un *underflow* , aun para cantidades muy pequeñas , la forma de la ecuación debe funcionar perfectamente.

(e) $c = (a^2 + b^2 - 2a \cdot b \cdot cos\theta)^{1/2}, a \approx b, |\theta| \ll 1$

Intentemos hacer una expansión de Taylor de la función coseno alrededor de $\theta = 0$:

$$cos\theta \approx cos(0) - sin(0)\theta - \frac{cos''(0)}{2!}\theta^2 + \frac{cos'''(0)}{3!}\theta^3 - ...$$

Dado que el θ es muy pequeño , entonces, para potencias mayores que 2 , las consideramos cero, esto nos da como resultado .

$$cos\theta \approx 1 - \frac{\theta^2}{2!}$$

Sustituyamos esta ecuación en la ecuación principal y nos da

$$\begin{aligned} c &= (a^2 + b^2 - 2a \cdot b \cdot cos\theta)^{1/2} \\ &\approx (a^2 + b^2 - 2a \cdot b \cdot (1 - \frac{\theta^2}{2!}))^{1/2} \\ &= (a^2 + b^2 - 2ab + ab\theta^2))^{1/2} \\ &= ((a-b)^2 + ab\theta^2))^{1/2} \end{aligned}$$

Por lo tanto

$$(a^2 + b^2 - 2a \cdot b \cdot cos\theta)^{1/2} = ((a-b)^2 + ab\theta^2))^{1/2} \quad (7)$$

Aquí podemos notar que aunque θ sea muy pequeña , no implica que se cancele toda la expresión , por otra parte $a-b$ da un valor distinto de cero , o por lo menos con una precision mayor que la expresión anterior, perdiendo asi la posibilidad de cancelación por sustracción.

2. Funciones de Bessel esféricas

2.1. Up & Down

Nos piden escribir un programa de tal forma que utilizando las formulas de recursión hacia arriba *(up)* y hacía abajo *(down)* para cacular $j_l(x)$ para los primeros 25 valores de l para $x = 0{,}1, 1, 10$, donde sabemos que estas relaciones de recurrencia son :

$$j_{l+1}(x) = \frac{2l+1}{x} j_l(x) - j_{l-1}(x), up$$

$$j_{l-1}(x) = \frac{2l+1}{x} j_l(x) - j_{l+1}(x), down$$

Sin embargo haremos una modificacion a estas, en primera instancia , dado que nos interesan sobre todo los resultados , pondremos la funcion up y down en funcion de un r final , esto es:

$$j_r(x) = \frac{2r-1}{x} j_{r-1}(x) - j_{r-2}(x), up$$

$$j_r(x) = \frac{2l+3}{x} j_{r+1}(x) - j_{r+2}(x), down$$

En el caso del la función recursiva up, basta con conocer el valor de j_0 y de j_1 , estos , por nuestras clases de métodos matemáticos sabemos que son:

$$j_0(x) = \frac{senx}{x}$$

$$j_1(x) = \frac{senx}{x^2} - \frac{cosx}{x}$$

A partir de estas deberíamos de ser capaces de calcular hacia arriba cualquier otra función esférica de Bessel

Por otro lado, hay una modificación importante que hacerle a la función recursiva down, ya que partimos de un valor que desconocemos j_L^N, el cual al suponerlo , nos llevara a resultados aceptables, pero con un cierto error.

Esto lo podemos corregir aparir del algoritmo de Miller , sea $j_l^C(x)$ el valor numérico calculado como aproximación de $j_l(x)$; sabemos que $j_0^C(x) \neq j_0(x)$, aparir de esta premisa, utilizamos el mecanismo de Miller

$$j_l^N(x) = j_l^C(x) \times \frac{j_0(x)}{j_0^C(x)}$$

De tal forma , conseguimos el siguiente programa :

```
import numpy as np

def bessel_up(l, x):
    if l == 0:
        return np.sin(x) / x
    elif l == 1:
        return (np.sin(x) / x**2) - (np.cos(x) / x)
    else:
        return ((2*l - 1) / x) * bessel_up(l-1, x) - bessel_up(l-2, x)
"""
Se anade el ajuste para el up
"""
def bessel_down_a(l, x):
    if l == 24:
        return 0
    elif l == 23:
        return 1
    else:
        return ((2*l +3 ) / x) * bessel_down_a(l+1, x) - bessel_down_a(l+2, x)
"""
 Primeraparte  de algoritmo de miller conseguimos  la version con errores
 para despues conseguir una normalizacion respecto a la base  jC0
 """
def bessel_down(l, x):
    if l == 24:
        return 0*((np.sin(x) / x)/bessel_down_a(0,x))
    elif l == 23:
        return 1*((np.sin(x) / x)/bessel_down_a(0,x))
    else:
```

```python
        return (((2*l +3) / x) *
    bessel_down_a(l+1, x) - bessel_down_a(
    l+2, x))*((np.sin(x) / x)/
    bessel_down_a(0,x))
"""
Se anade el ajuste para el down
"""

x_values = [0.1, 1, 10]
for x in x_values:
    print(f"Para x = {x}:")
    for l in range(25):
        j_l_up = bessel_up(l, x)
        j_l_down = bessel_down(l, x)
        Error_l= abs(j_l_up-j_l_down)/(abs
    (j_l_up)+abs(j_l_down))
        print(f"J_{l}({x}) (Up): {j_l_up},
    J_{l}({x}) (Down): {j_l_down} ,
    Error_{l} :{Error_l}")
#Escribe y compara los mismos balores de
    la ecuacion esferica de bessel up y
    down
```

Código 1: Programa que obtiene la funcion mediante la funcion de recurrencia up y down . NOMBRE : ”Bessel1.py”

Entonces , como vemos en las figuras 1 - 3, notamos que la función Up y Down, tomamos el primer y segundo valor como 0 y 1 respectivamente, al compararlas,tiene un buen comportamiento para l pequeño, así como para valores de x altos , mientras que al crecer , las cancelaciones sustractivas perjudican cada vez mas los resultados .

Figura 1: Compilación del Código 1. Comparación Up y Down . x=.1

2.2. Ajuste del programa

Ahora veamos si uno de los metodos que empleamos , el Up y el Down, da ”buenos ”valores,

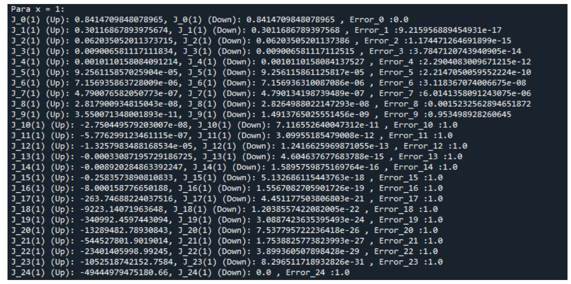

Figura 2: Compilación del Código 1. Comparación Up y Down . x=1

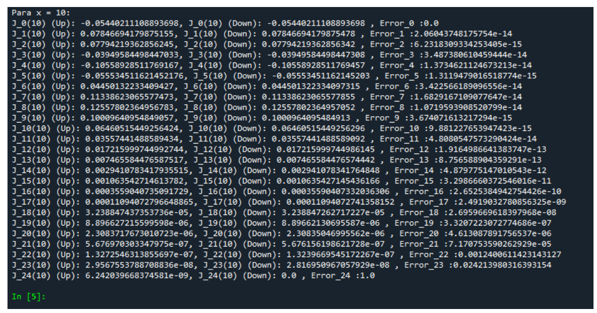

Figura 3: Compilación del Código 1. Comparación Up y Down . x=10

esto es , un error relativo de 10^{-10} , entonces, usaremos la siguiente tabla de valores estandar de funciones de Bessel .

x	$j_3(x)$	$j_5(x)$	$j_8(x)$
0.1	$+9.518\,519\,719 \times 10^{-6}$	$+9.616\,310\,231 \times 10^{-10}$	$+2.901\,200\,102 \times 10^{-16}$
1	$+9.006\,581\,118 \times 10^{-3}$	$+9.256\,115\,862 \times 10^{-05}$	$+2.826\,498\,802 \times 10^{-08}$
10	$-3.949\,584\,498 \times 10^{-2}$	$-5.553\,451\,162 \times 10^{-02}$	$+1.255\,780\,236 \times 10^{-01}$

Figura 4: Valores estandar de la funcion de Bessel

Donde , contrastándolo con los valores del programa de 2.1, conseguimos la Cuadro 1.

Notemos que el método por medio del Up tiene serios problemas de errores con l grandes y x pequeñas , esto debido a que estas características hacen que se acrecienten la precision por cancelación sustractiva en la forma que esta definido,

Cuadro 1: Comparación entre valor aceptado de las funciones esféricas de Bessel en contraste con los resultados obtenidos con los dos métodos diferentes de la parte 2.1

	Método Up		Método Down		Valor Real
	Valor	Error relativo	Valor	Error relativo	
$j_3(0{,}1)$	$9{,}52 \times 10^{-06}$	$2{,}57038 \times 10^{-07}$	$9{,}52 \times 10^{-06}$	$1{,}95994 \times 10^{-10}$	$9{,}52 \times 10^{-06}$
$j_5(0{,}1)$	$-1{,}45 \times 10^{-08}$	16,03381574	$9{,}62 \times 10^{-10}$	$1{,}9929 \times 10^{-10}$	$9{,}62 \times 10^{-10}$
$j_8(0{,}1)$	$-3{,}31 \times 10^{-02}$	$1{,}13972 \times 10^{14}$	$2{,}90 \times 10^{-16}$	$1{,}82748 \times 10^{-10}$	$2{,}90 \times 10^{-16}$
$j_3(1)$	$9{,}01 \times 10^{-03}$	$9{,}86134 \times 10^{-11}$	$9{,}01 \times 10^{-03}$	$9{,}85379 \times 10^{-11}$	$9{,}01 \times 10^{-03}$
$j_5(1)$	$9{,}26 \times 10^{-05}$	$5{,}37385 \times 10^{-10}$	$9{,}26 \times 10^{-05}$	$9{,}44445 \times 10^{-11}$	$9{,}26 \times 10^{-05}$
$j_8(1)$	$2{,}82 \times 10^{-08}$	0,003041879	$2{,}83 \times 10^{-08}$	$7{,}59667 \times 10^{-11}$	$2{,}83 \times 10^{-08}$
$j_3(10)$	$-3{,}95 \times 10^{-02}$	$1{,}13184 \times 10^{-10}$	$-3{,}95 \times 10^{-02}$	$1{,}13252 \times 10^{-10}$	$-3{,}95 \times 10^{-02}$
$j_5(10)$	$-5{,}55 \times 10^{-02}$	$2{,}61476 \times 10^{-11}$	$-5{,}55 \times 10^{-02}$	$2{,}61459 \times 10^{-11}$	$-5{,}55 \times 10^{-02}$
$j_8(10)$	$1{,}26 \times 10^{-01}$	$3{,}94711 \times 10^{-10}$	$1{,}26 \times 10^{-01}$	$3{,}94735 \times 10^{-10}$	$1{,}26 \times 10^{-01}$

mientras que en el dawn se penso directamente en evitar este problema , razon por la cual tiene un valor tan preciso, para darnos una idea, los promedios de error del metodo Up y del Down son:
.

$$\overline{\epsilon_{r_{up}}} = 1{,}26636 \times 10^{13} \tag{8}$$

$$\overline{\epsilon_{r_{Down}}} = 1{,}53457 \times 10^{-10} \tag{9}$$

Entonces indudablemente es mejor metodo el Down.

2.3. Comparación de Formulas de recursión

Cuadro 2: Datos de la función de Bessel para varios valores de x y l , x=0.1

x	l	j_l^{up}	j_l^{down}	$\frac{\lvert j_l^{\mathrm{up}}-j_l^{\mathrm{down}}\rvert}{\lvert j_l^{\mathrm{up}}\rvert+\lvert j_l^{\mathrm{down}}\rvert}$
0.1	0	0.998334166	0.998334166	0
0.1	1	0.033300012	0.033300012	2.44841E-14
0.1	2	0.000666191	0.000666191	3.67781E-11
0.1	3	9.51852E-06	9.51852E-06	1.28617E-07
0.1	4	1.05601E-07	1.05772E-07	0.000810631
0.1	5	-1.4457E-08	9.61631E-10	1
0.1	6	-1.69587E-06	7.39754E-12	1
0.1	7	-0.000220448	4.93189E-14	1
0.1	8	-0.033065578	2.9012E-16	1
0.1	9	-5.620927895	1.52699E-18	1
0.1	10	-1067.943234	7.27151E-21	1
0.1	11	-224262.4583	3.16158E-23	1
0.1	12	-51579297.47	1.26465E-25	1
0.1	13	-12894600104	4.68395E-28	1
0.1	14	-3.48149E+12	1.61517E-30	1
0.1	15	-1.00962E+15	5.21029E-33	1
0.1	16	-3.12979E+17	1.57889E-35	1
0.1	17	-1.03282E+20	4.51115E-38	1
0.1	18	-3.61484E+22	1.21924E-40	1
0.1	19	-1.33748E+25	3.12627E-43	1
0.1	20	-5.21613E+27	7.62509E-46	1
0.1	21	-2.1386E+30	1.77329E-48	1
0.1	22	-9.19593E+32	3.94066E-51	1
0.1	23	-4.13815E+35	8.38437E-54	1
0.1	24	-1.94492E+38	0	1

Cuadro 3: Datos de la función de Bessel para varios valores de x y l , x=1

x	l	j_l^{up}	j_l^{down}	$\frac{\lvert j_l^{\mathrm{up}}-j_l^{\mathrm{down}}\rvert}{\lvert j_l^{\mathrm{up}}\rvert+\lvert j_l^{\mathrm{down}}\rvert}$
1	1	0.301168679	0.301168679	9.21596E-17
1	2	0.062035052	0.062035052	1.17447E-15
1	3	0.009006581	0.009006581	3.78471E-14
1	4	0.001011016	0.001011016	2.29041E-12
1	5	9.25612E-05	9.25612E-05	2.21471E-10
1	6	7.15694E-06	7.15694E-06	3.11837E-08
1	7	4.79008E-07	4.79013E-07	6.01414E-06
1	8	2.8179E-08	2.8265E-08	0.001523256
1	9	3.55007E-11	1.49138E-09	0.953498928
1	10	-2.75045E-08	7.11655E-11	1
1	11	-5.7763E-07	3.09955E-12	1
1	12	-1.3258E-05	1.24166E-13	1
1	13	-0.000330872	4.60464E-15	1
1	14	-0.008920285	1.58958E-16	1
1	15	-0.258357389	5.13269E-18	1
1	16	-8.000158777	1.55671E-19	1
1	17	-263.7468822	4.45118E-21	1
1	18	-9223.14072	1.20386E-22	1
1	19	-340992.4597	3.08874E-24	1
1	20	-13289482.79	7.5378E-26	1
1	21	-544527801.9	1.75388E-27	1
1	22	-23401405999	3.89936E-29	1
1	23	-1.05252E+12	8.29651E-31	1
1	24	-4.9445E+13	0	1

Cuadro 4: Datos de la función de Bessel para varios valores de x y l, , x=10

x	l	j_l^{up}	j_l^{down}	$\frac{\lvert j_l^{\mathrm{up}} - j_l^{\mathrm{down}}\rvert}{\lvert j_l^{\mathrm{up}}\rvert + \lvert j_l^{\mathrm{down}}\rvert}$
10	0	-0.054402111	-0.054402111	0
10	1	0.078466942	0.078466942	2.06044E-14
10	2	0.077942194	0.077942194	6.23183E-15
10	3	-0.039495845	-0.039495845	3.48738E-14
10	4	-0.105589285	-0.105589285	1.37346E-14
10	5	-0.055534512	-0.055534512	1.31195E-15
10	6	0.044501322	0.044501322	3.42257E-14
10	7	0.113386231	0.113386231	1.68292E-14
10	8	0.125578024	0.125578024	1.07196E-14
10	9	0.10009641	0.10009641	3.67407E-15
10	10	0.064605154	0.064605154	9.88123E-15
10	11	0.035574415	0.035574415	4.80805E-14
10	12	0.017216	0.017216	1.9165E-13
10	13	0.007465584	0.007465584	8.75659E-13
10	14	0.002941078	0.002941078	4.87978E-12
10	15	0.001063543	0.001063543	3.29867E-11
10	16	0.000355904	0.000355904	2.65254E-10
10	17	0.000110941	0.000110941	2.4919E-09
10	18	3.23885E-05	3.23885E-05	2.69597E-08
10	19	8.89663E-06	8.89662E-06	3.32072E-07
10	20	2.30837E-06	2.30835E-06	4.61309E-06
10	21	5.67697E-07	5.67616E-07	7.17075E-05
10	22	1.32725E-07	1.32397E-07	0.001240061
10	23	2.95676E-08	2.81695E-08	0.02421398
10	24	6.24204E-09	0	1