

1. naloga: Airyjevi funkciji

Gregor Žunič

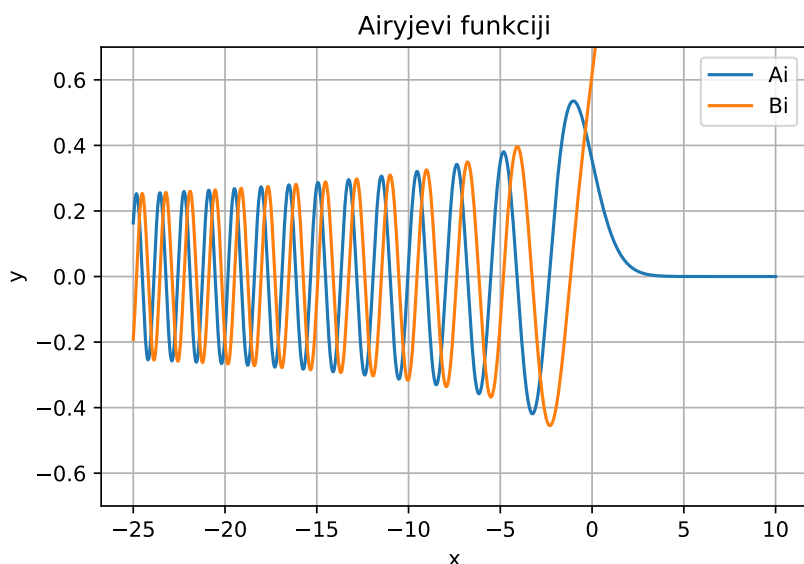
13.10.2021

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

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



Slika 1: Graf Airyjevih 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.

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

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

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

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

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 kvantno-mehanskih 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 formulama

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

kjer ima funkcija f asimptotski razvoj [4]

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

1 Reševanje

1.1 Airyjevi funkciji z Maclaurinovo vrsto

Skozi celotno reševanje bom označeval posamezne člene vrste K kot K_i (to pomeni, da K_i ni vsota do k vendar zgolj k -ti člen vsote), kar verjetno ni najbolj konvencionalno.

Preden začnemo računati, je fino postaviti natančnost našega programa na čimveč decimal, da nam to nebo povzročalo kakšnih numeričnih težav. Čeprav so seveda cifre od nekdaj naprej povsem irelevantne je vseeno fino postaviti število mest na 1000 (s paketom `Decimal` v Pythonu). Ta natančnost nam pomaga deliti tudi zelo velike cifre.

Najprej moramo namesto, da računamo formuli f in g z fakultetskimi vrednostmi, ki bodo zelo verjetno povzročale numerične težave uvesti rekurzivne formule.

Za rekurzivni formuli dobimo z vmesnimi členi zaporedja

$$f(x) = f_0 + f_1 + f_2 + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} f_{k-1} \frac{x^3(1 - \frac{2}{3k})}{(3k-1)(3k-2)}, \quad (1)$$

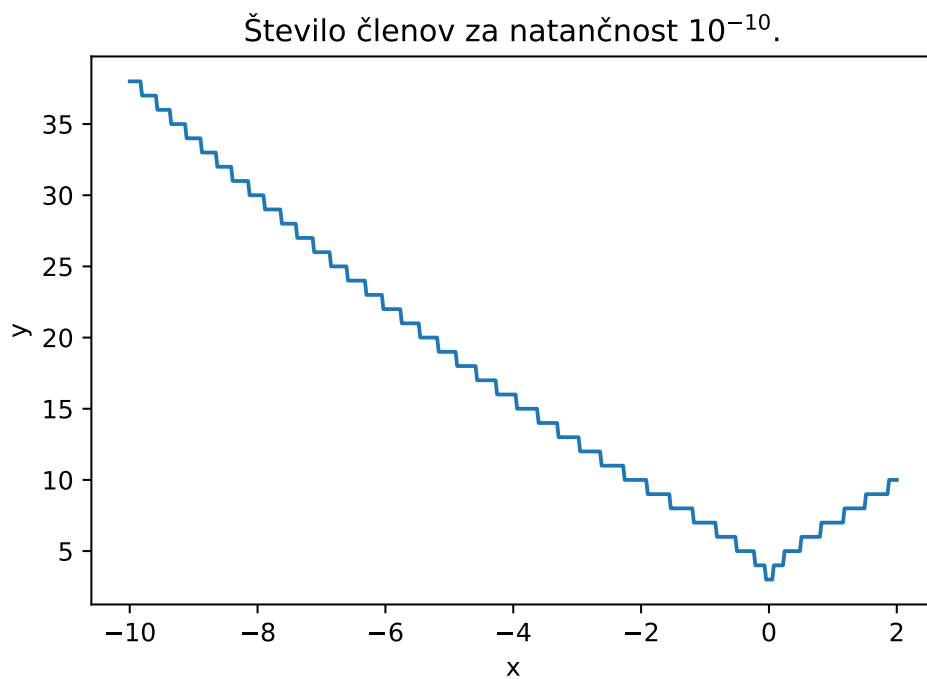
kjer je $f_0 = 1$. ter

$$g(x) = g_0 + g_1 + g_2 + \dots = x + \sum_{k=1}^{\infty} g_{k-1} \frac{x^3(1 - \frac{1}{3k})}{(3k+1)(3k-1)}, \quad (2)$$

Ker je $f(x)$ seveda vsota dveh vsot ju lahko združimo in napišemo novo vrsto, ki jo potem lahko implementiramo do poljubne natančnosti.

$$\text{Ai}(x) = \sum_{k=1}^K (\alpha f_k(x) - \beta g_k(x)), \quad \text{Bi}(x) = \sum_{k=1}^K (\sqrt{3} [\alpha f_k(x) + \beta g_k(x)]),$$

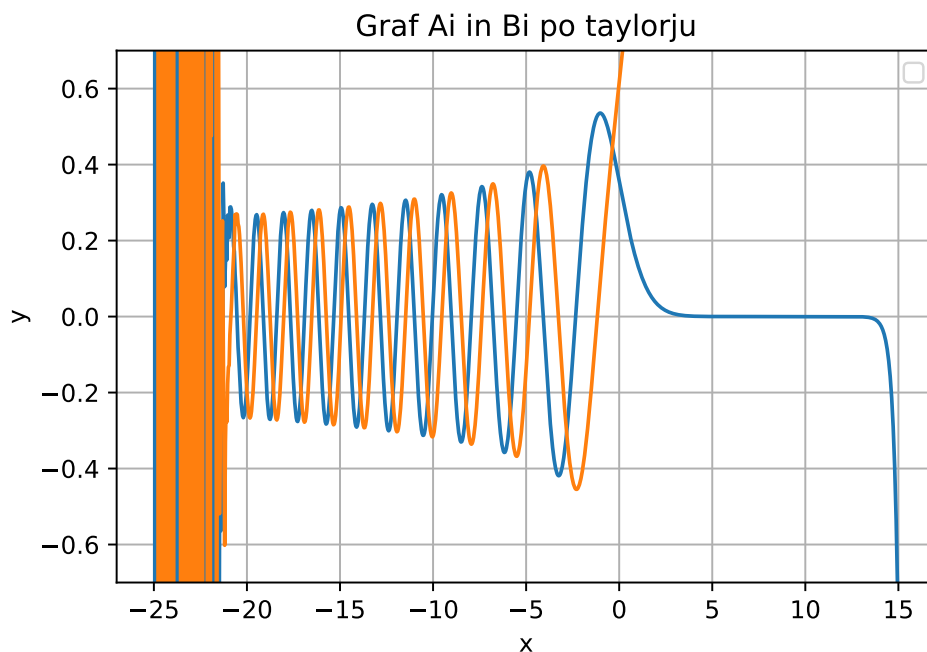
Za Natančnost Taylorjeve vrste, oziroma koliko členov (K) vzeti, lahko aproksimiramo kar z velikostjo ΔAi^k . Če nas zanima natančnost zgolj 10^{-10} je za to potrebno nekje med 5 in 35 členov. Ta predpostavka je upravičljiva ker vsi členi padajo hitro (vrsta konvergentna), ker pomeni, da je vsota od $k+1$ člena naprej približno enakega velikostnega razreda kot člen k (graf 2).



Slika 2: Število potrebnih členov, da dobimo natančnost absolutne napake 10^{-10} .

1.2 Funkciji in obnašanje okoli ničle

Sedaj lahko narišemo graf 3 obeh funkcij v okolici ničle. Čisto formalno bi lahko narisali graf povesod, vendar to ni ravno najbolj smiselno (vendar bi lahko precej premaknili mejo kjer funkciji začneta divjo divergirati). Kot bomo videli v poglavju 2 je vrednost zelo blizu implementaciji Scipy-ja.



Slika 3: Grafa A_i in B_i v okolici ničle. Vidimo da od neke vrednosti (po pričakovanju) divergirata.

1.3 Airyjevi funkciji z asimptotskimi vrstami

Asimptotske vrste so v tem kontekstu malenkost bolj zakomplicirane. Osnoven problem se zelo hitro pretvori v numerično nerešljivega z nekim smiselnim številom decimalk. Zato je treba formule za asimptotske vrste razpisati rekurzivno. Z malo izpeljave lahko dobimo, da so formule

$$L(z) \sim \sum_{s=0}^{\infty} L_{s-1} \left(s - \frac{5}{6} \right) \left(1 - \frac{1}{6s} \right) \frac{1}{2z}$$

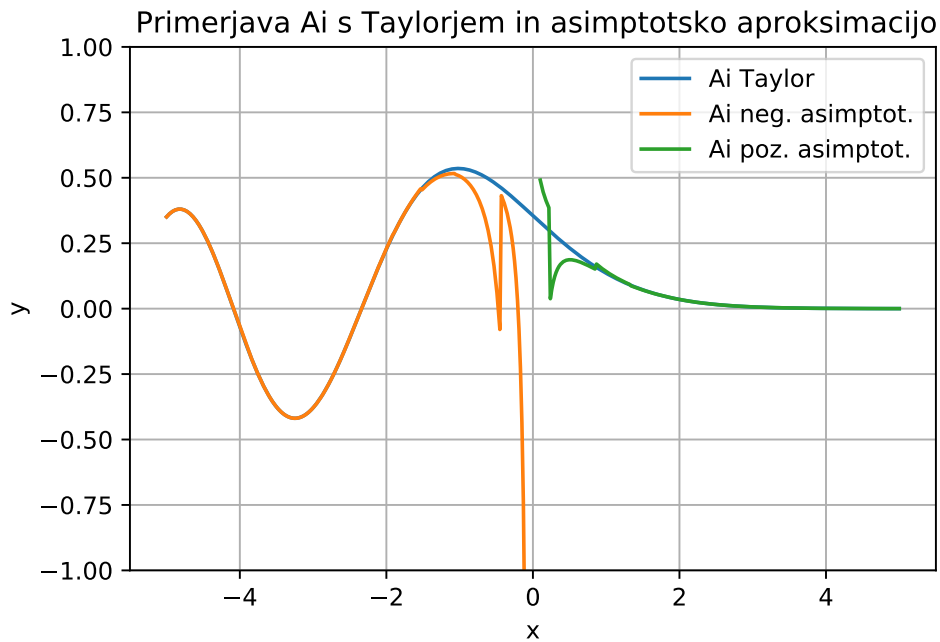
$$P(z) \sim \sum_{s=0}^{\infty} P_{s-1} \left[-\frac{1}{z^2} \frac{(6s - 6 + \frac{1}{2}) \dots (6s - 1 + \frac{1}{2})}{54^2 (2s - 1)(2s)(2s - 2 + \frac{1}{2})(2s - 1 + 1/2)} \right]$$

$$Q(z) \sim \sum_{s=0}^{\infty} Q_{s-1} \left[-\frac{1}{z^2} \frac{(6s - 3 + \frac{1}{2}) \dots (6s + 2 + \frac{1}{2})}{54^2 (2s)(2s + 1)(2s - 1 + \frac{1}{2})(2s + 1/2)} \right]$$

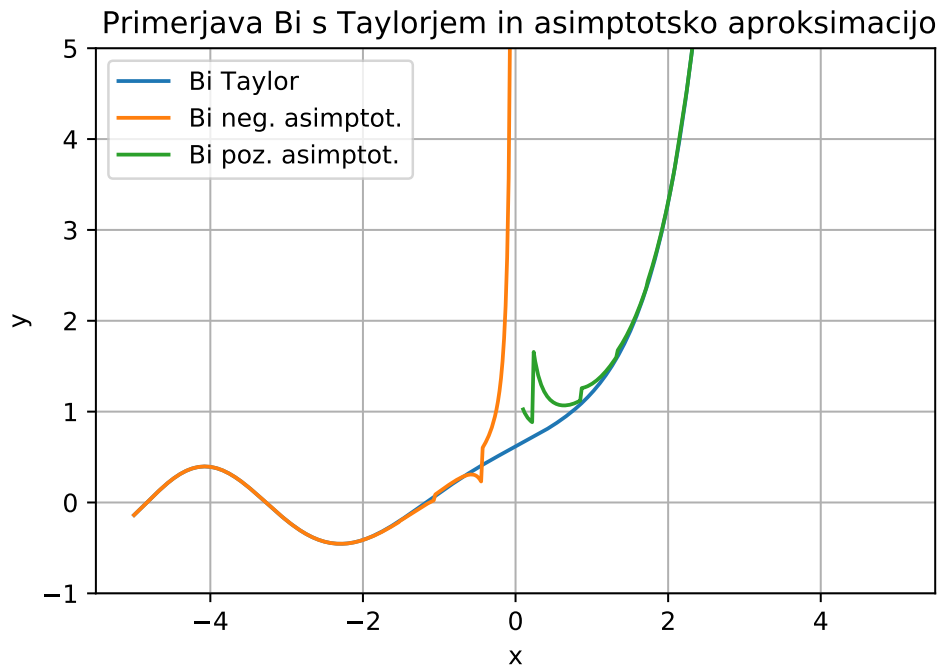
Ker so vrste asimptotske jih ne moremo kar poljubno sešteti. Člene seštevamo, dokler je absolutna vrednost faktorja c , vsote po $X_{i-1} * c$, manjša kot 1. Oziroma, dokler se členi po absolutni vrednosti manjšajo. To pomeni, da ne moremo izračunati vrednosti poljubno natančno.

Pri formulah za negativen x , se pojavita sinus in kosinus. Za velike vrednosti je smiselno vrednost normirati z deljenjem $z = /2\pi$.

Zdaj lahko zopet narišemo grafe v okolici ničle (kjer so zanimivi).



Slika 4: Graf Ai. Opazimo lahko, da je obnašanje asimptot v bližini ničle precej eksotično.



Slika 5: Graf Bi. Opazimo lahko, da je obnašanje asimptot v bližini ničle precej eksotično.

Srce nam lahko pogreje to, da se grafi zelo lepo prekrivajo pri vrednostih daleč stran od 0. Zdaj lahko te vrednosti združim v končen graf. Kje sem vrednosti združil bom napisal v poglavju 2.

2 Napake

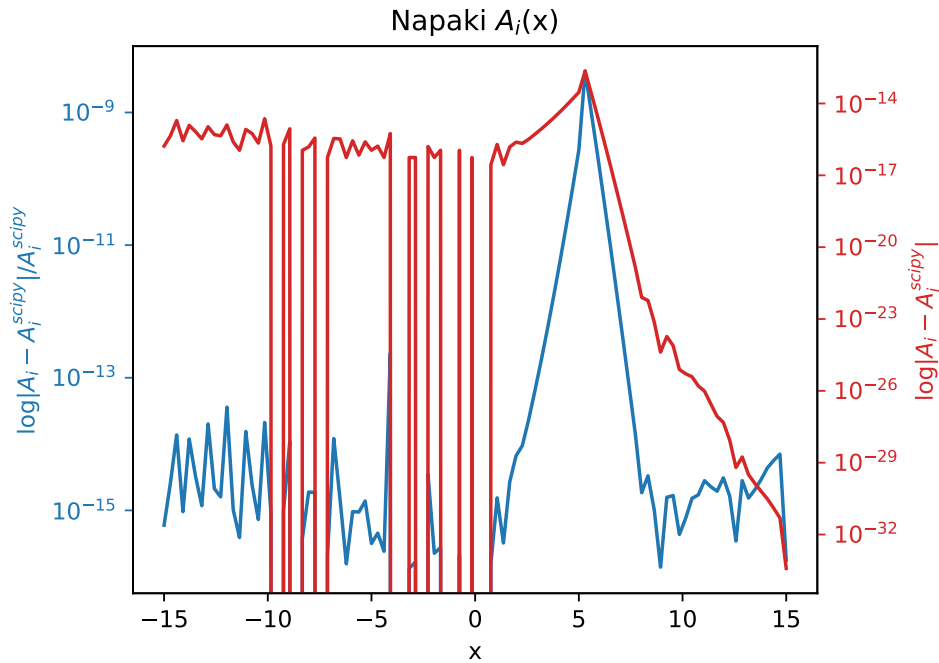
2.1 Referenčna vrednost Scipy in napaka napake

Najprej se moramo vprašati katero napako bomo zares spremljali skozi celotno nalogo. Napako sem definiral kot razliko med vrednostjo mojih funkcij in referenčne funkcije iz knjižnice Scipy. Tudi njihova verjetno ni čisto natančna, vendar jo je težko bolje implementirati kot je v knjižnici (<https://www.netlib.org/cephes/qlibdoc.html#qairy>). Z hitro analizo kode, je njihov pristop zelo podoben (asimptotska - taylor - asimptotska), vendar uporabljajo zeta funkcije. Njihovi parametri zamenjave pa so -2.09 in 8.3203353.

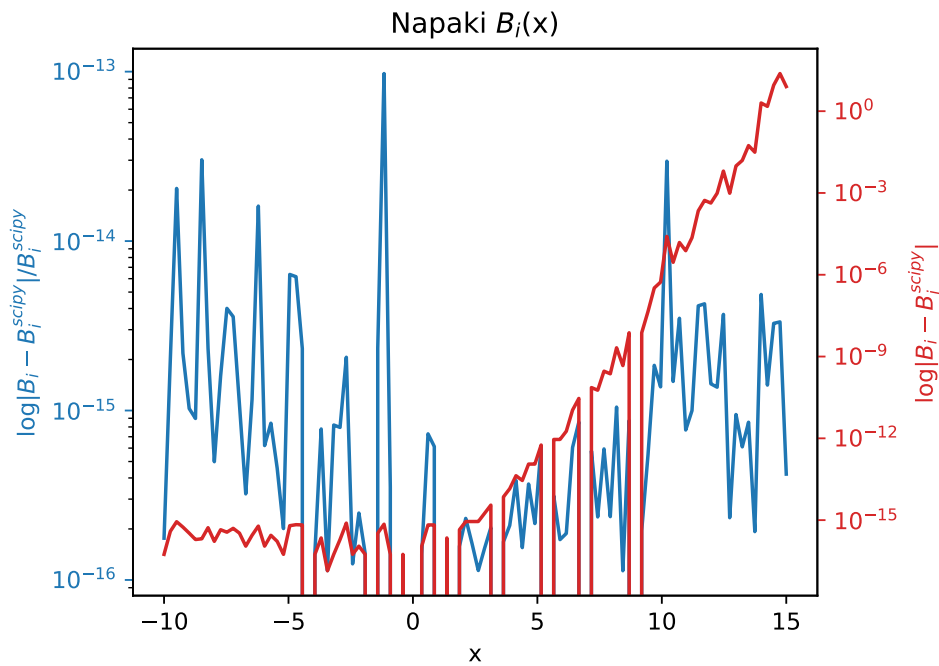
2.2 Napake končnih funkcij

Sedaj lahko narišem zlepljena območja grafov. Napaka pri Bi je zelo smiselna. Če bi hoteli izračunati absolutno napako Bi na 10^{-10} natančno bi morali imeti zelo veliko računskih mest pri Taylorju. Pri asimptotski vrednosti pa to ni mogoče. Zlomi se, ker vrednost same funkcije divergira.

Napaka pri Ai pa mi ostaja malo vprašljiva. Ne vidim razloga, zakaj nebi moral dobiti relativne napak dovolj natančne pri Taylorju, kar pomeni, da sem v kodi verjetno nekaj pozabil oziroma sem se zatipkal. Za popraviti, mi je zmanjkalo časa. Mislim, da se nekje v kodi pokvari na koliko mest Decimal računa. Še vedno pa tudi v območju med 3.3 in 6.5 napaka ni preveč daleč stran od 10^{-10} .



Slika 6: Napake A_i . Vidimo, da obstaja območje med 3.3 in 6.5 kjer relativna napaka ni pod 10^{-10} .



Slika 7: Napake B_i . Vidimo, da absolutna napaka pri velikih vrednostih divergira.

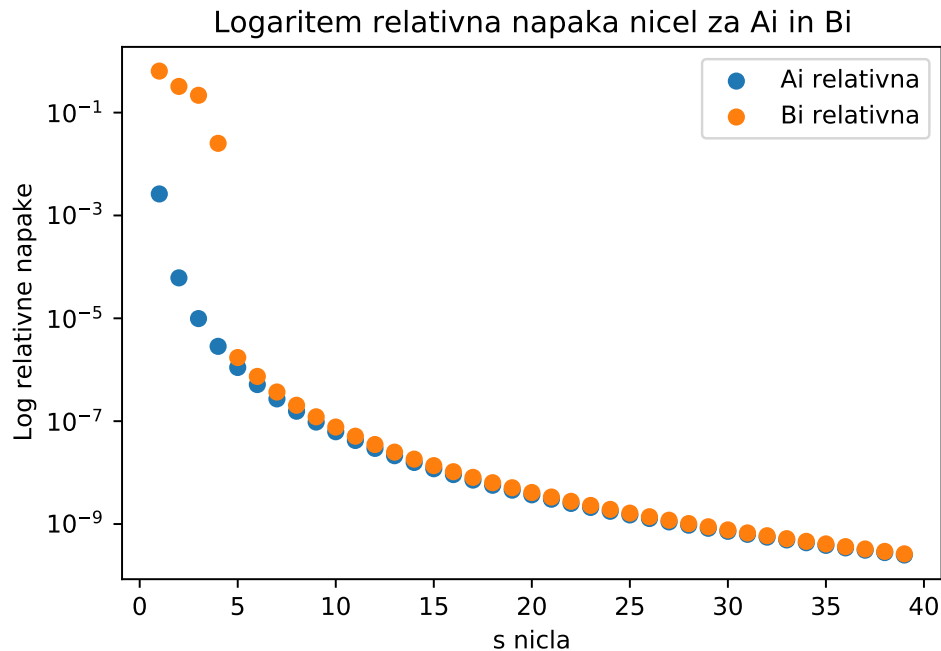
2.2.1 Kje zlepeti?

Za B_i je v bistvu precej vseeno kje zlepimo Taylorja in asimptote, ker je napaka ves čas pod željeno vrednostjo. Vrednosti morata biti samo dovolj stran od ničle. Izbral sem -5 na negativni in $8,3$ na pozitivni strani.

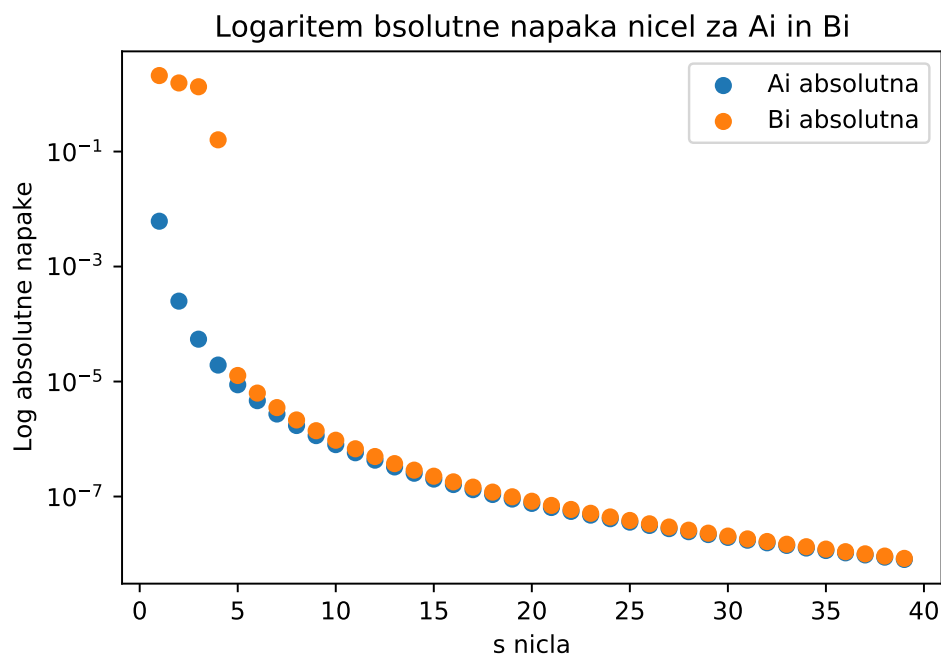
Za A_i sem zlepil pri -10 na negativni asimptoti in $5,3$ na pozitivni (ker tako minimiziramo preskok napake).

3 Iskanje ničel

Problem rešimo z bisekcijo. Edini problem je, da imamo v bistvu dvojno napako. Napaka je pri x in tudi pri vrednosti $f(x)$. To pomeni, da če poskušamo z bisekcijo najti ničle moramo upoštevati, da se ne moremo znebiti minimalne napake, ki nastane pri osi y . V praksi to pomeni, bisekcije ne splača izvesti bolj natančno po x , kot je napaka v y .



Slika 8: Logaritem relativnih napak razlike nicel. Vidimo, da vse lepo konvergira proti 0.



Slika 9: Logaritem absolutnih napak razlike nicel. Vidimo, da vse lepo konvergira proti 0.

Iz tega grafa lahko sklepam, da so funkcije za ničle pravilne.

4 Zaključek

Vrednosti Aeryjovih funkcij so zelo blizu vrednostim iz knjižnice Scipy. Tudi ničle lepo konvergirajo proti pravi vrednosti. Imel sme nekaj težav z numeriko.

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.