Problemas de estabilidad

Curso de Física Computacional

M. en C. Gustavo Contreras Mayén

Contenido

1. Estimando las funciones de Bessel por recurrencia.

Contenido

1. Estimando las funciones de Bessel por recurrencia.

Estimando las funciones de Bessel por recurrencia.

Las funciones de Bessel se presentan en un amplio conjunto de problemas de la física matemática: desde vibraciones de cueradas hasta dispersión en mecánica cuántica.

En el sistema de coordenadas esféricas, las funciones de Bessel esféricas representan la solución radial en problemas de mecánica cuántica con potenciales cuadrados y simetría esférica.

Es de especial relevancia el cálculo numérico de las funciones esféricas de Bessel, ya que ofrecen un ejemplo de las inestabilidades numéricas que se generan durante la iteración *hacia adelante* de ciertas relaciones de recurrencia.

Sin embargo, las inestabilidades se pueden evitar por la recursión*hacia atrás* (para órdenes decrecientes), resultando de este modo un proceso estable.

La ecuación diferencial de Bessel

La ecuación diferencial de las funciones esféricas de Bessel es:

$$x^2 \frac{d^2 f_n}{dx^2} + 2\, x\, f_n'(x) + \left[x^2 - n(n+1)\right] f_n(x) = 0, \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{1}$$

La ecuación diferencial de Bessel

La ecuación diferencial de las funciones esféricas de Bessel es:

$$x^2 \frac{d^2 f_n}{dx^2} + 2\,x\,f_n'(x) + \left[x^2 - n(n+1)\right] f_n(x) = 0, \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{1}$$

Que tiene soluciones reales, linealmente independientes y son llamadas las *funciones esféricas de Bessel* $j_n(x)$ (solución regular) y las *funciones esféricas de Neumann* $y_n(x)$ (solución irregular, que divergen en el origen)

Relación de recurrencia.

Tanto las funciones de Bessel como las de Neumann satisfacen la relación de recurrencia.

$$f_i(x) = \frac{2i-1}{x}\, f_{i-1}(x) - f_{i-2}(x) \tag{2}$$

Relación de recurrencia.

Tanto las funciones de Bessel como las de Neumann satisfacen la relación de recurrencia.

$$f_i(x) = \frac{2i-1}{x}\, f_{i-1}(x) - f_{i-2}(x) \tag{2}$$

Que se pueden utilizar convenientemente para evaluarlos para argumentos y órdenes dados, por la propagación delantera de los valores más bajos de la función a órdenes más altos.

Valores de $j_0(x)$ y $y_0(x)$

Las expresiones para los órdenes más bajos 0 y 1, para las funciones esféricas de Bessel y esféricas de Neumann, son:

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x} \tag{3}$$

$$j_1(x) = \frac{1}{x}\left[j_0(x) - \cos x\right] \tag{4}$$

$$y_0(x) = -\frac{\cos x}{x} \tag{5}$$

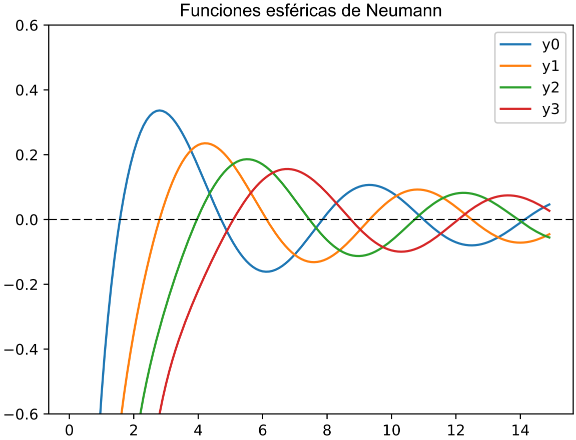
$$y_1(x) = \frac{1}{x}\left[y_0(x) - \sin x\right] \tag{6}$$

Para las funciones esféricas de Neumann $y_n(x)$, la relación de recurrencia hacia adelante, tomada de la ecuación (2) y que tiene por valores iniciales las expresiones (5) y (6) no presentan problemas de estabilidad y pueden calcularse directamente.

Código funciones esféricas de Neumann

```
def esfericasBessely(n, x):
    y0 = -cos(x) / x

    if (n == 0) : return y0

    y1 = (y0 - sin(x))/ x

    if (n==1): return y1

    for i in range(2, n+1):
        y = (2 * i - 1) / x * y1 - y0
        y0 = y1; y1 = y

    return y
```

Gráfica de las funciones esféricas de Neumann



Elementos adicionales para el código

```python
from math import cos, sin
from numpy import arange
import matplotlib.pyplot as plt

for i in range(4):
    x = []
    y = []
    for j in arange(0.1, 15., 0.1):
        x.append(j)
        y.append(esfericasBessely(i, j))
        plt.plot(x, y)

plt.ylim(-0.6,0.6)
plt.axhline(y=0, color='k', ls='dashed', lw=.75)
plt.show()
```

Funciones esféricas de Bessel.

En contraste con las funciones esféricas de Neumann, con las funciones esféricas de Bessel no se concede la estabilidad de la iteración directa en la relación de recurrencia (2).

Específicamente, con argumentos pequeños $|x| < n$ pueden causar una acumulación apreciable de errores de redondeo incluso para órdenes pequeños, haciendo que la recursión hacia adelante no sea aplicable.

Corrección de la inestabilidad.

Una manera eficaz de evitar estas inestabilidades se logra a través del algoritmo de Miller, que básicamente se basa en la estabilidad de la recurrencia hacia atrás (se disminuye el orden de la función)

$$j_i(x) = \frac{2i+3}{x} j_{i+1}(x) - j_{i+2}(x) \tag{7}$$

No podemos ocupar expresiones compactas para las funciones de Bessel de orden grande con esta recurrencia, pero esta situación puede ser superada considerando que, para un x dado, los valores absolutos de las funciones esféricas de Bessel de los orden

$$n > |x|$$

disminuyen a medida que sus órdenes aumentan y en algún momento, para algunos de orden suficientemente grande $N \gg n$, la función $j_N(x)$ se vuelve numéricamente insignificante.

Valores iniciales

Se puede considerar la siguiente propuesta de valores iniciales

$$\widehat{j}_N = 0 \qquad \widehat{j}_{N-1} = 1 \tag{8}$$

los cuales son consistentes con el carácter *homogéneo* de la ecuación diferencial (1)

Iterando con la ecuación (7)hacia atrás, el proceso termina con una secuencia de valores

$$\widehat{\jmath}_N, \widehat{\jmath}_{N-1}, \ldots, \widehat{\jmath}_n, \ldots, \widehat{\jmath}_1, \widehat{\jmath}_0$$

Iterando con la ecuación (7)hacia atrás, el proceso termina con una secuencia de valores

$$\widehat{j}_N, \widehat{j}_{N-1}, \ldots, \widehat{j}_n, \ldots, \widehat{j}_1, \widehat{j}_0$$

todos estos términos están "perturbados" por un mismo factor de escala k, en particular

$$\widehat{j}_0 = k\ j_0(x) \tag{9}$$

Utilizando la expresión conocida $j_0(x) = \sin x/x$, es posible encontrar el factor de escala y, por tanto el valor correcto para la función esférica de Bessel de orden n:

$$j_n = \frac{1}{k}\,\widehat{j}_n = \frac{j_0(x)}{\widehat{j}_0}\,\widehat{j}_n \tag{10}$$

Otro atractivo del algoritmo de Miller consiste en que también prescribe las condiciones bajo las cuales debe aplicarse la recursión hacia atrás y, en tal caso, proporciona una receta para elegir el orden N de inicio apropiado, para alcanzar la precisión deseada en la evaluación de $j_n(x)$.

Como ya se ha mencionado, la iteración hacia adelante es siempre estable, un método simple para determinar si se mantiene estable también para $|x| > n$ es mantener en el lado derecho de la relación de recurrencia (2) sólo el primer término, que es dominante para valores pequeños de x.

$$j_i(x) \simeq \frac{2i-1}{x}\, j_{i-1}(x) \tag{11}$$

Iniciando con el valor arbitrario $\widehat{j}_n = 1$ e iterando en órdenes crecientes $i = n + 1, n + 2, \ldots$, nos podemos dar cuenta del *incremento neto* de las funciones esféricas de Bessel con respecto a j_n

$$\prod_{i=1}^{N} \frac{2i - 1}{x} \tag{12}$$

Estabilidad del método

Si para ciertos orden N hacia adelante, este factor (12) excede un valor razonable (tipo $10e8$), la recurrencia hacia adelante resulta inestable y, por consiguiente, la recurrencia hacia atrás debe ser aplicada a partir de la N encontrada.

En la implementación concreta de la recursión hacia atrás, con el fin de disipar aún más el efecto de la elección particular de los valores iniciales (8), el orden de inicio se ha incrementado por encima del valor encontrado, normalemente $N + 10$.

Gráfica de las funciones esféricas de Bessel