1. naloga: Airyjevi funkciji

Rok Mlinar Vahtar - 28211126

November 2023

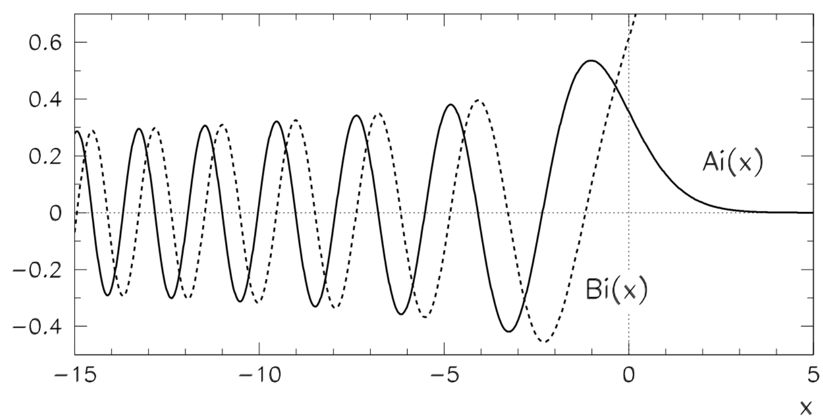
1 Navodilo

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

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

in sta predstavljivi v integralski obliki

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



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.

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

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

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

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

kjer je

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

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

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

s koeficienti

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

za velike pozitivne x izrazimo

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

za po absolutni vrednosti velike negativne x pa

$$Ai(x) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-x)^{1/4}} \Big[\quad \sin(\xi - \pi/4)\, Q(\xi) + \cos(\xi - \pi/4)\, P(\xi) \Big] \,, \tag{1}$$

$$Bi(x) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-x)^{1/4}} \Big[-\sin(\xi - \pi/4)\, P(\xi) + \cos(\xi - \pi/4)\, Q(\xi) \Big] \,. \tag{2}$$

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 ter v fiziki pri računu energijskih spektrov kvantnomehanskih sistemov. 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

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

kjer ima funkcija f asimptotski razvoj

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

2 Rešitev

Za izračun približka za Airyevi funkciji bomo uporabili programski jezik Python in knjižnjico mpmath, ki nam omogoča računanje z poljubno natančnostjo, kar je pomembno, saj se lahko v postopku drugače začnejo seštevati napake zaradi reprezentacije števil z plavajočo vejico.

Prva resnična naloga, ki jo moramo opraviti, je efektiven izračun Taylorjevih in asimptotskih vrst. Čeprav imamo formule za posamezne člene eksplicitno podane, je njihov najbolj direkten izračun zelo zamuden. V najslabšem primeru bi lahko celo gama funkcijo v vsakem koraku reševali preko numerične integracije, kar bi ne le prineslo nepotrebne napake v rezultat, ampak tudi pomenilo, da bi končne grafe računalnik risal še naslednjih nekaj mesecev. To računanje pa na srečo večinoma lahko preskočimo, pri čemer nam pomaga naslednja zveza:

$$\Gamma(x+1) = x \cdot \Gamma(x) \tag{3}$$

ki v našem primeru poenostavi specialno gama funkcijo v končen produkt racionalnih števil.

2.1 Taylorjev razvoj okrog 0

Da dobimo Taylorejva razvoj funkcij Ai in Bi, moramo izračunati vsoti vrst za f(x) in g(x) iz uvoda. V obeh nastopa člen oblike $(z)_n$, ki ga lahko na prej omenjeni način poenostavimo.

$$(z)_n = \Gamma(z+n)/\Gamma(z) = \prod_{k=0}^{n}(z+k) \tag{4}$$

Opremljeni z to poenostavitvjo, lahko zdaj opazimo, da vsak naslednji člen v vrsti dobimo tako, da modificiramo prejšnjega. Za $f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k$ to pomeni:

$$c_k = c_{k-1} \cdot \frac{(1/3+k-1)\cdot 3 \cdot x^3}{(3k)\cdot(3k-1)\cdot(3k-2)} \qquad c_0 = 1 \tag{5}$$

kar seveda izkoristimo in ne računamo $\left(\frac{1}{3}\right)_k \frac{3^k x^{3k}}{(3k)!}$ za vsak k od začetka. Podobno velja tudi za $g(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k$.

$$c_k = c_{k-1} \cdot \frac{(2/3+k-1)\cdot 3 \cdot x^3}{(3k+1)\cdot(3k)\cdot(3k-1)} \qquad c_0 = x \tag{6}$$

2.2 Asimptotske vrste

Tudi pri izračunu asimptotskih vrst lahko proces na podoben način pospešimo. To bom nakazal na funkciji L(z), saj je za preostali dve postopek praktično enak in razviden iz priložene programske kode. Kot prvo moramo poenostaviti naslednji izraz:

$$\frac{\Gamma(3s+\frac{1}{2})}{\Gamma(s+\frac{1}{2})} = \prod_{k=s}^{3s-1}(k+\frac{1}{2}) = \alpha_s \tag{7}$$

Ker se zdaj pomika tudi spodnja meja v produktu, bomo morali v vsakem koraku ne le pomnožiti z novimi členi, ampak tudi deliti, da izničimo starega.

Za vsak člen v vrsti $L(z) = \sum_{s=0}^{\infty} c_s$ tako velja:

$$c_s = c_{s-1} \cdot \frac{(3s-3+1/2)(3s-2+1/2)(3s-1+1/2)}{54 \cdot s \cdot z \cdot (s-1+1/2)} \qquad c_0 = 1 \tag{8}$$

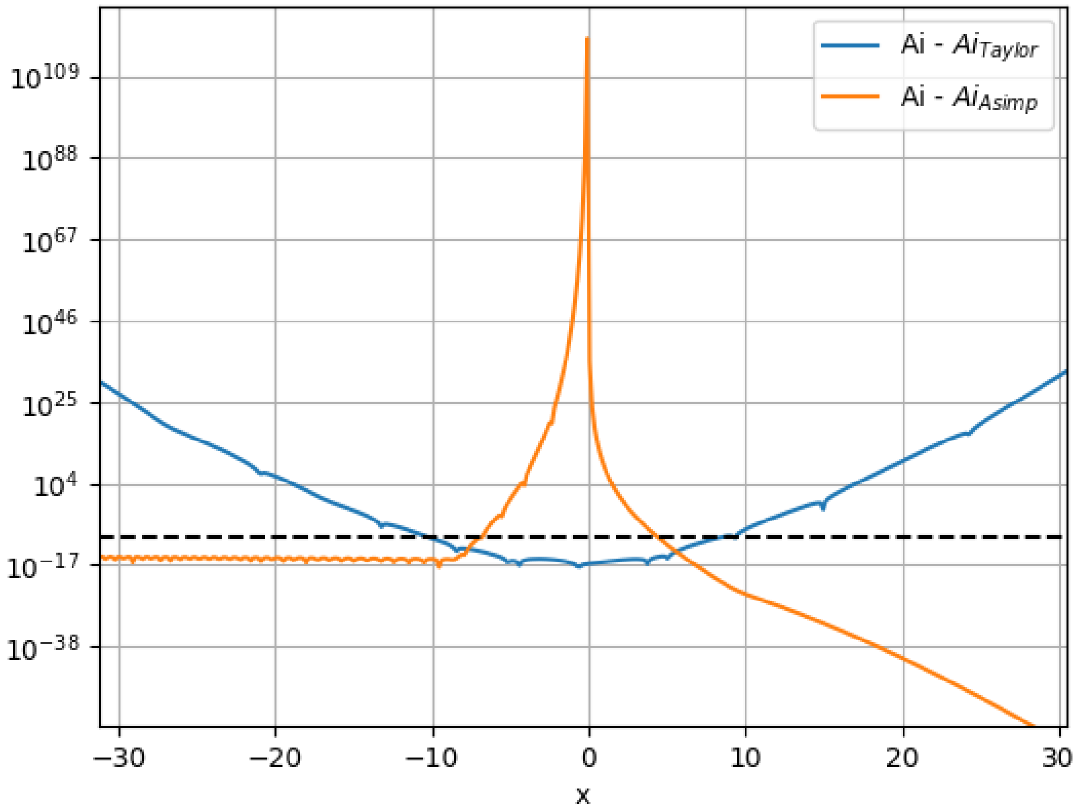
Podobno zoped velja tudi za $P(z) = \sum_{s=0}^{\infty} p_s$ in $Q(z) = \sum_{s=0}^{\infty} q_s$

$$p_s = -p_{s-1} \cdot \frac{\prod_{k=0}^{5}(6(s-1)+k+1/2)}{54^2 \cdot (2s)(2s-1) \cdot z^2 \cdot (2s-2+1/2)(2s-1+1/2)} \qquad p_0 = 1 \tag{9}$$

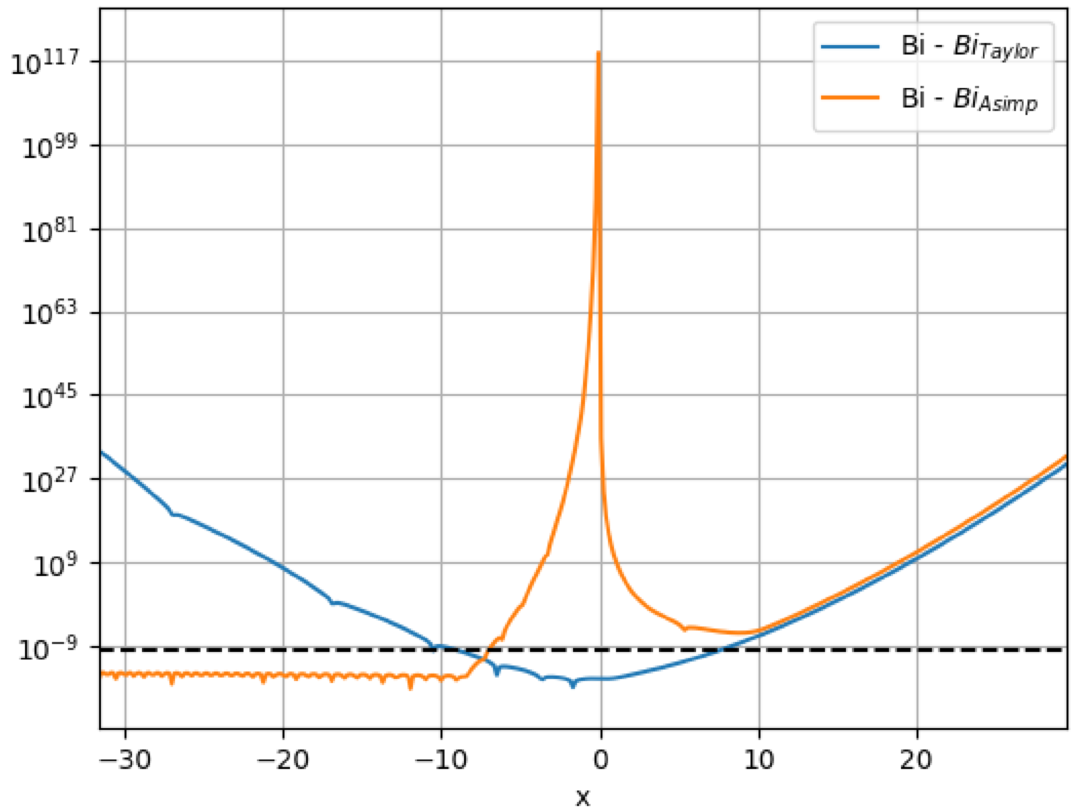
$$q_s = -q_{s-1} \cdot \frac{\prod_{k=-3}^{3}(6s+k+1/2)}{54^2 \cdot (2s+1)(2s) \cdot z^2 \cdot (2s-2+1/2)(2s-1+1/2)} \qquad q_0 = (1+1/2)(2+1/2)\frac{z}{54} \tag{10}$$

2.3 Absolutna napaka

Zdaj, ko imamo program, ki nam izračuna vrednost Airyevih funkcij, moramo preveriti če sploh deluje. To bomo storili tako, da si bomo ogledali razliko med razultatom z našo metodo in vgrajenima metodama *mpmath.airyai* in *mpmath.airybi*



Slika 2: Absolutna napaka za izračun Ai

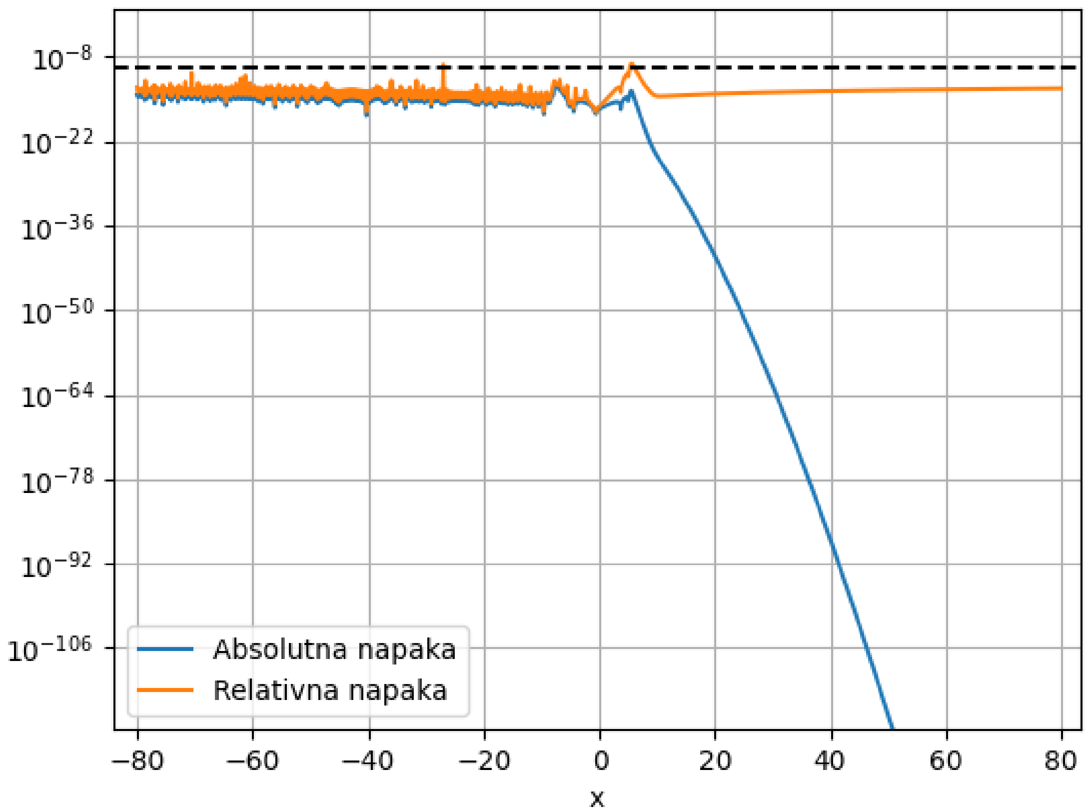


Slika 3: Absolutna napaka za izračun Bi

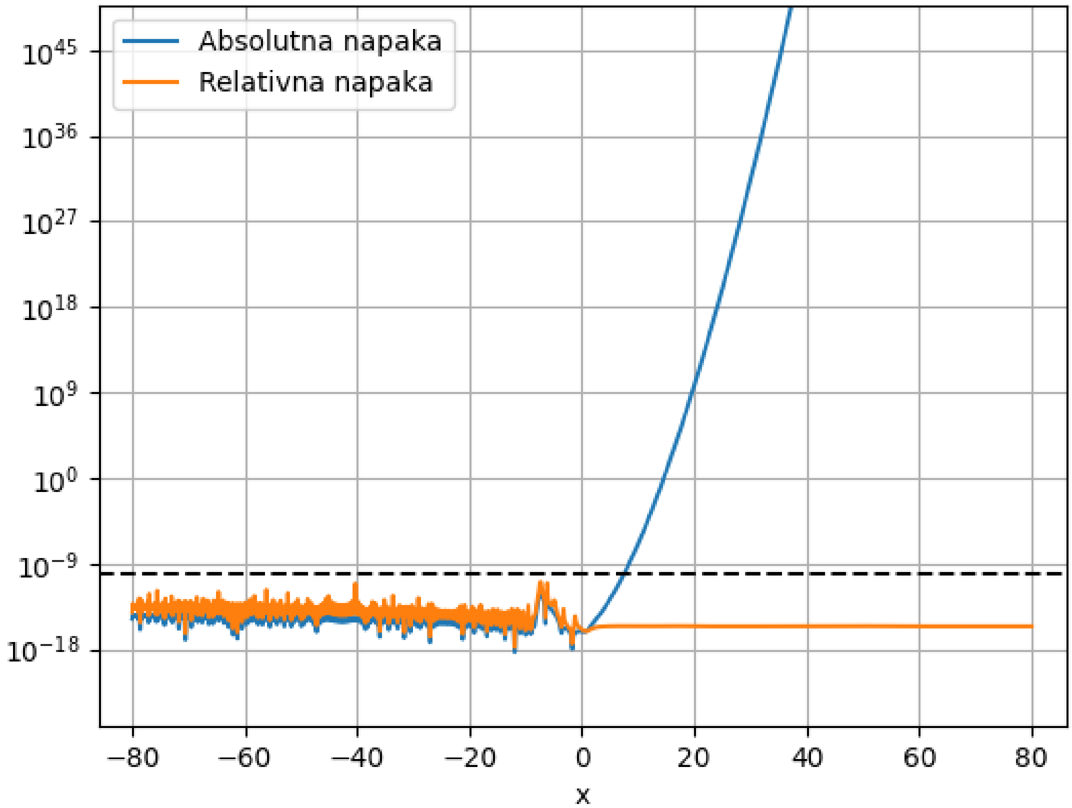
Vidimo, da z zlepkom obeh vrst lahko zagotovimo, da je napaka pri izračunu Ai manjša od 10^{-10}, saj je za vse x vsaj en izmed grafov pod črtkano črto. Podobno lahko rečemo tudi za Bi, vendar le za $x < 8$. To je najverjetneje zato, ker Bi začne nad $x = 0$ eksponentno rasti preko vseh meja, kar je očitno preveč tudi za MPMATH, saj vsaj izgleda, kot da se obe aproksimaciji zadeneta ob enako oviro. Dvomim tudi v to, da je vgrajena verzija funkcije s katero primerjamo naš rezultat točna za takšne vrednosti.

2.4 Relativna napaka

Če zdaj sestavimo zlepljeno funkcijo in narišemo še relativno napako vidimo, da ta izgleda dosti bolje. V resnici nam je vsaj zanjo uspelo, da je omejena na manj kot 10^{-10}.



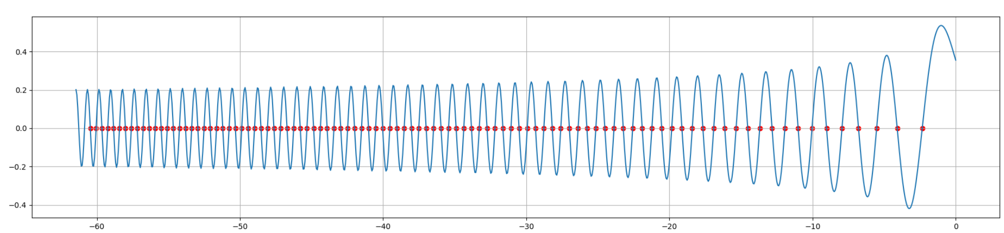
Slika 4: Napake za izračun Ai



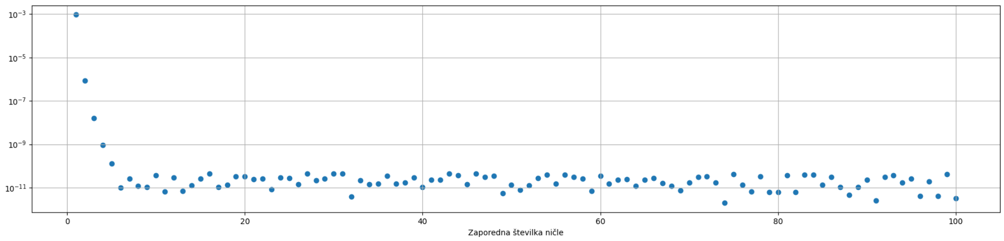
Slika 5: Napake za izračun Bi

3 Ničle Airyevih funkcij

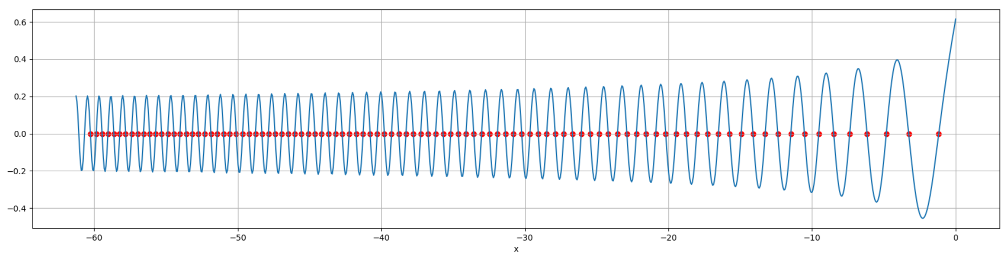
Dodatna naloga zahteva, da poiščemo prvih 100 ničel Aiyevih funkcij in preverimo, kako točna je podaja aproksimacija. Za računanje teh ničel sem se odločil za metodo bisekcije, saj so vse ničle lihe in približno enakomerno oddaljene, tako da zagotovo ne bomo zgrešili kakšne od ničel z še vedno relativno velikim korakom.



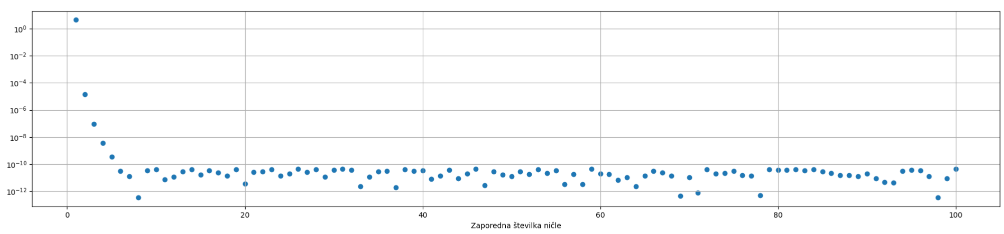
Slika 6: Ničle Ai



Slika 7: Napake za izračun ničel Ai preko zaporedja



Slika 8: Ničle Bi



Slika 9: Napake za izračun ničel Bi preko zaporedja

4 Zaključek

Cilj naloge je bil čim efektivneje in čim bolj natančno izračunati vrednosti Airyevih funkcij. Prvo izmed teh smo dosegli tako, da smo zaporedne člene neskončnih vsot zapisali z rekurzivno zvezo, kar nam je omogočilo, da smo se izognili večkratnem računanju zamudnih operacij, kot sta fakulteta in eksponenciacija. Natančnost pa smo dosegli preko uporabe knjižnjice MPMATH, ki nas reši napak, ki jih povzroča reprezentacija števil z plavajočo vejico. Za funkcijo Ai nam je uspelo doseči oba cilja, tako absolutna in relativna napaka sta bili omejeni pod 10^-10. Pri Bi pa smo pri absolutni napaki naleteli na težave, ko je $x > 6$, kar povzroča sama velikost te funkcije za takšne x. Tu pa nas seveda rešuje to, da je vsaj relativna napaka omejena pod željeno mejo.