01 - AIRYJEVI FUNKCIJI

Matematično-fizikalni praktikum, oktober 2023
Luka Skeledžija, 28201079

1. Uvod

Airyjevi funkciji Ai in Bi se v fiziki pojavljata predvsem v optiki in kvantni mehaniki. Definirani sta kot neodvisni rešitvi enačbe

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

ki je znana kot Airyjeva oz. Stokesova enačba. To je najenostavnejša linearna diferencialna enačba drugega reda z obratno točko (tj. točko, kjer se značaj rešitev spremeni iz oscilatornega v eksponentni). Neodvisni rešitvi enačbe sta predstavljivi v integralski obliki kot

$$\mathrm{Ai}(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos(t^3/3 + xt)\,\mathrm{d}t\,,$$

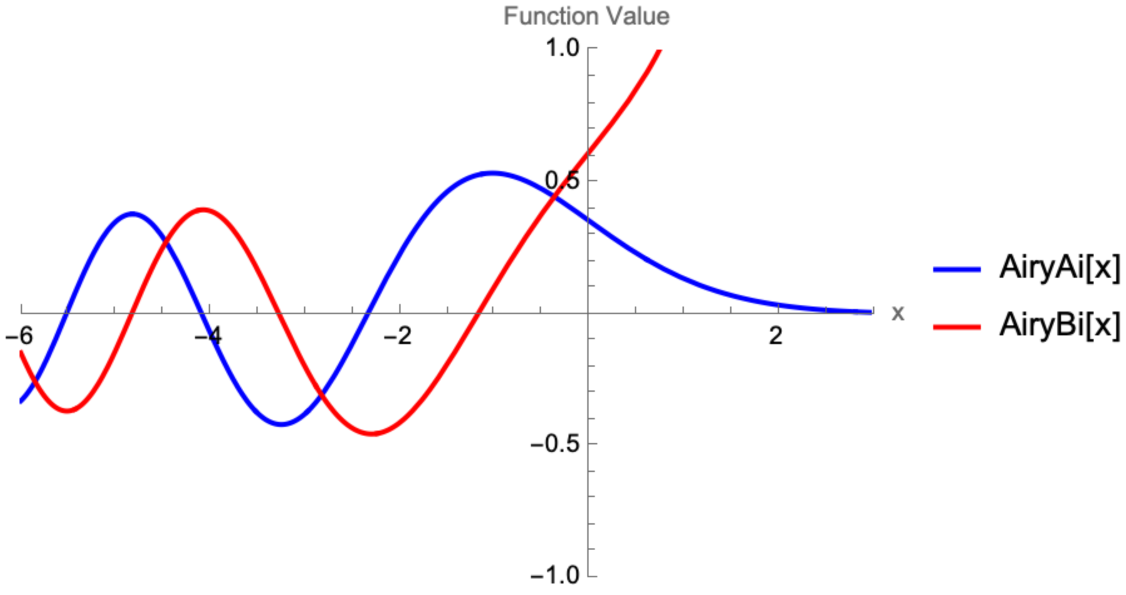
$$\mathrm{Bi}(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \left[\mathrm{e}^{-t^3/3+xt} + \sin(t^3/3 + xt)\right]\,\mathrm{d}t\,.$$

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.

3. Lastnosti Airyjevih funkcij

Funkciji Ai in Bi sta definirani na celotni realni osi. Za vrednosti $x \in \mathbb{R}^-$ sta obe funkciji oscilatorni in omejeni. Za $x \in \mathbb{R}^+ \cup \{0\}$ pa je funkcija Ai omejena, medtem ko Bi narašča čez vse meje.



> Graf funkcij Ai in Bi

3.1. Matematični pristop in potencialne težave

Za izračun vrednosti funkcij integralov ne bomo neposredno izvrednotili, temveč bomo funkcije razvili v Maclaurinovo in asimptotsko vrsto. Pri tem bomo pazili, da formule implementiramo rekurzivno in tako čim bolj zmanjšamo število potrebnih računskih operacij. Na grobo ocenimo, da z uporabo rekurzivnih formul zmanjšamo časovno zahtevnost programa iz $O(n^2)$ na $O(n)$, kar v računalniškem lingu razume kot "iz zelo počasi v precej hitro".

Za natančnost bomo poskrbeli z ustreznim izborom števila členov v Maclaurinovi oz. asimptotski vrsti. Ker ena vrsta podaja dober približek za zelo majhne vrednosti x, druga pa za zelo velike, bomo vrste v točkah x_- in x_+ zlepili. Točke bomo določili na podlagi števila členov, ki jih potrebuja ena in druga vrsta za doseganje tolerirane napake.

Potencialne težave bodo (in tudi so) predstavljale predvsem: omejitve podatkovnega tipa `float`, iskanje zanesljive referenčne vrednosti za oceno napak in iskanje minimuma napake glede na število členov asimptotske vrste.

4. Ustreznost referenčne funkcije

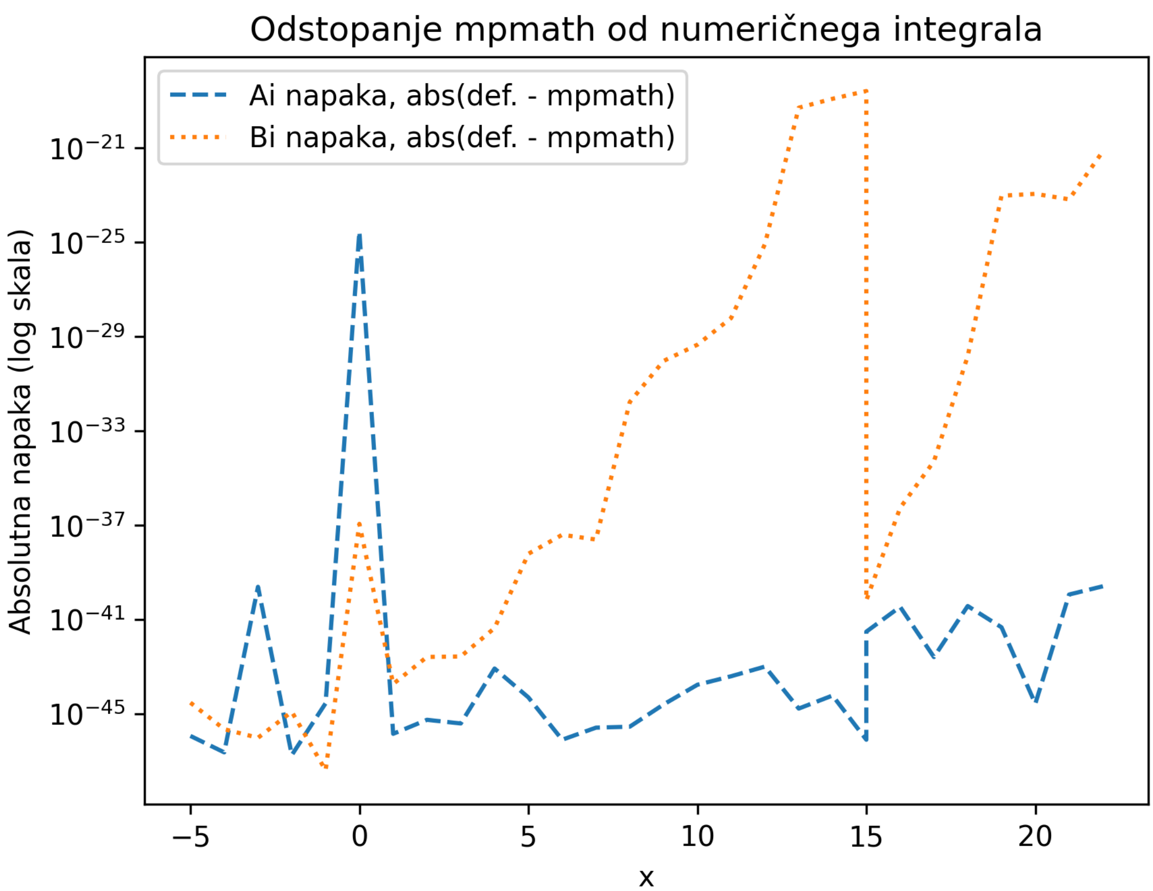
Za primerjavo naših vrst z referenčno vrednostjo lahko uporabimo funkciji `mpmath.airyai()` in `mpmath.airybi()` iz Pythonskega paketa `mpmath`. Ker bo to naša osnova za nadaljevanje, je smiselno preveriti, če ti dve funkciji dejansko delujeta pravilno oz. dovolj natančno glede na definicijo Airyjevih funkcij.

Z uporabo programa `Wolfram Mathematica` numerično integriramo definiciji funkcij Ai in Bi v nekaj testnih točkah s sledečimi nastavitvami:

```
xValues = Table[x, {x, -5, 15, 1}];
results = {};

integrandA[t_, x_] := Cos[t^3/3 + x*t];
integrandB[t_, x_] := Exp[-t^3/3 + x*t] + Sin[t^3/3 + x*t];
```

```
For[i = 1, i <= Length[xValues], i++, x = xValues[[i]];
 resultA =
  NIntegrate[integrandA[t, x], {t, 0, Infinity}, PrecisionGoal
-> 22,
   AccuracyGoal -> 22, WorkingPrecision -> 60];
 resultB =
  NIntegrate[integrandB[t, x], {t, 0, Infinity}, PrecisionGoal
-> 22,
   AccuracyGoal -> 22, WorkingPrecision -> 60];
 results = AppendTo[results, {x, resultA / Pi, resultB /
Pi}];]

xValues = Table[x, {x, 15, 22, 1}];

For[i = 1, i <= Length[xValues], i++, x = xValues[[i]];
 resultA =
  NIntegrate[integrandA[t, x], {t, 0, Infinity}, PrecisionGoal
-> 20,
   AccuracyGoal -> 20, WorkingPrecision -> 60];
 resultB =
  NIntegrate[integrandB[t, x], {t, 0, Infinity}, PrecisionGoal
-> 30,
   AccuracyGoal -> 30, WorkingPrecision -> 60];
 results = AppendTo[results, {x, resultA / Pi, resultB /
Pi}];]
```

Rezultate primarjamo s funkcijama `mpmath.airyai()` in `mpmath.airybi()`, ki ju prav tako nastavimo na 60 decimalk.



Odstopanje mpmath od numeričnega integrala: Primerjanih skupno 27 točk. Pri $x = 15$ povečamo Precision in AccuracyGoal. Izkaže se, da je v Mathematici

> dobro targetirati PrecisionGoal in AccuracyGoal vsaj 5 redov višje, saj napaka v primerjavi pada.

Iz grafa razberemo, da `mpmath.airyai()` in `mpmath.airybi()` odstopada od *dovolj natančno* izračunanega integrala za manj kot 10^{-10}. Torej lahko za primerjavo napak uporabimo kar ti dve funkciji, saj delujeta bistveno hitreje od numerične integracije.

5. Maclaurinov približek

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

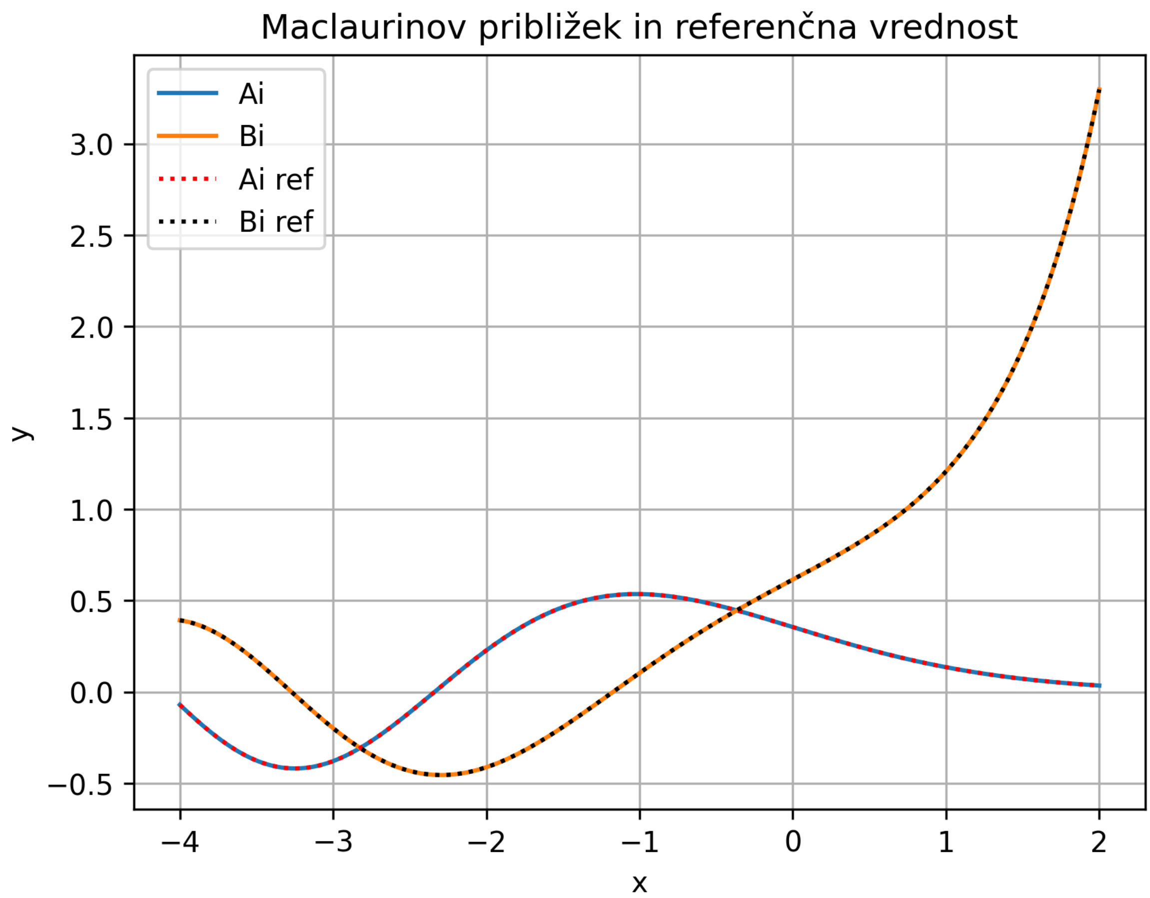
$$\mathrm{Ai}(x) = \alpha f(x) - \beta g(x)$$

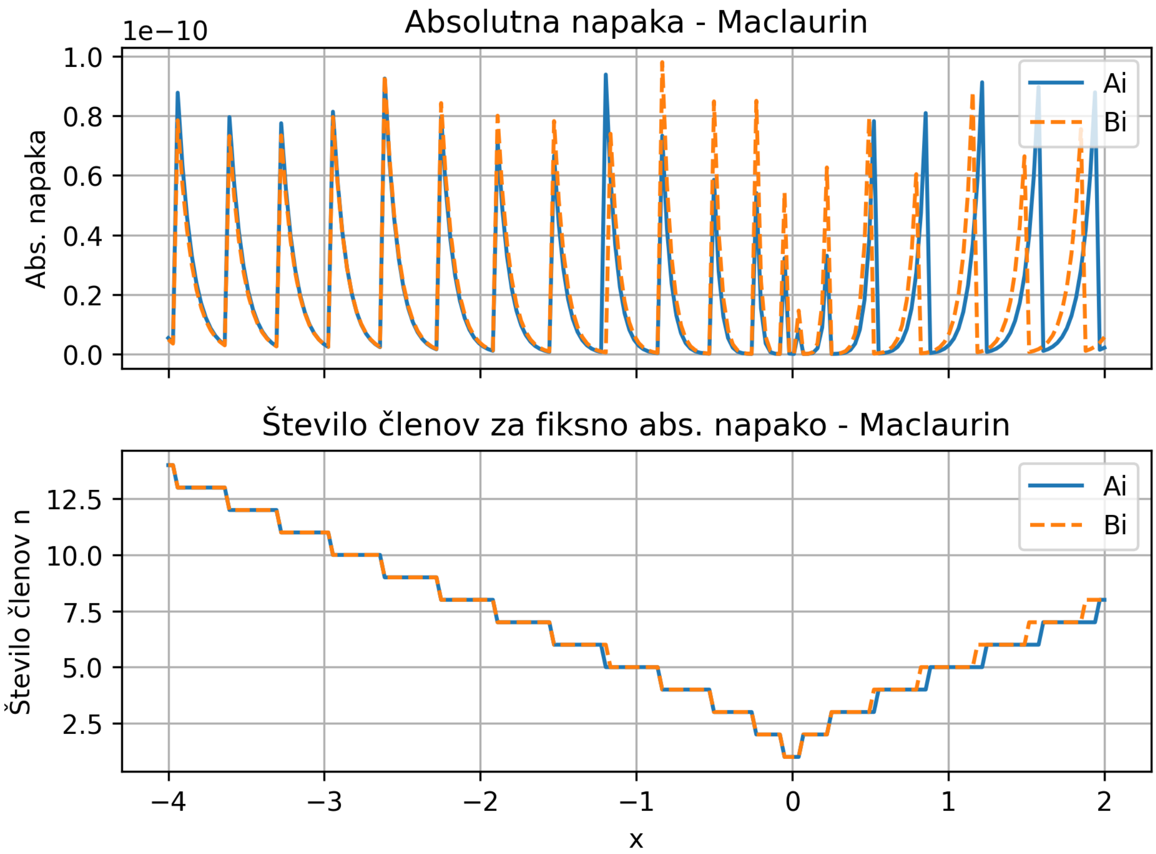
$$\mathrm{Bi}(x) = \sqrt{3}\left[\alpha f(x) + \beta g(x)\right]$$

kjer v $x = 0$ velja $\alpha = \mathrm{Ai}(0) \approx 0.3550\ldots$ in $\beta = -\mathrm{Ai}'(0) \approx 0.2588\ldots$ Vrsti za f in g zapišemo rekurzivno in n-ti člen izračunamo kot produkt prejšnjega člena in količnika:

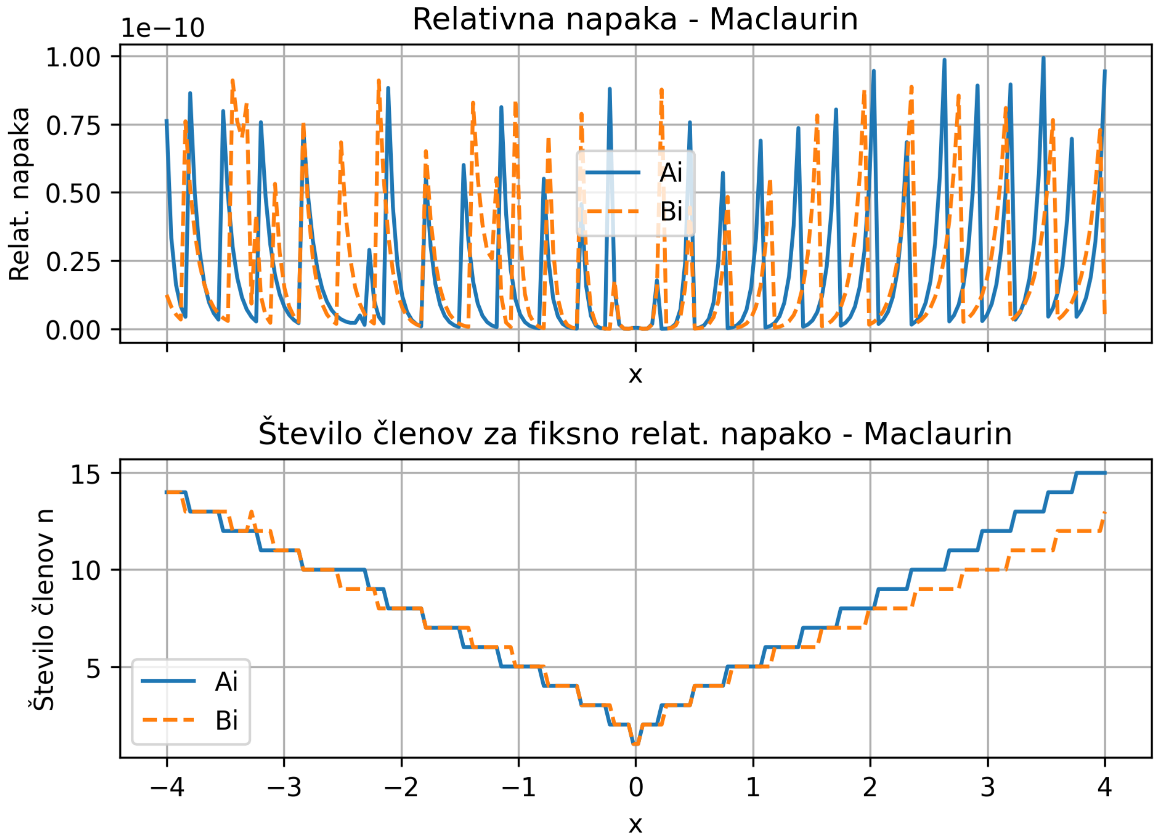
$$f_n = f_{n-1} \cdot \frac{f_n}{f_{n-1}} = f_{n-1} \cdot \frac{x^3}{(3n-1)\,3n}, \qquad f_0 = 1$$

$$g_n = g_{n-1} \cdot \frac{g_n}{g_{n-1}} = g_{n-1} \cdot \frac{x^3}{(3n+1)\,3n}, \qquad g_0 = x$$





> **Absolutna napaka:** Iz grafov lahko opazimo, da absolutna napaka narašča z večanjem absolutne vrednosti x. Tik preden bi presegla mejo 10^{-10}, se vrsti doda še en člen, ki napako zopet zmanjša.



> **Relativna napaka:** Tudi tukaj opazimo podobno stvar. Tik preden bi relativna napaka presegla mejo 10^{-10}, se vrsti doda še en člen, ki napako zopet zmanjša.

6. Asimptotski približek

Asimptotska vrsta lahko divergira ali konvergira. Napaka, ki jo naredimo pri krajšanju vrste za fiksen x pri redu n se ne zmanjšuje z večanjem reda n, kar pomeni, da se točki $x < \infty$ ne moremo poljubno približati z večanjem števila členov. Napaka se zmanjšuje proti nič šele, ko pri fiksnem n povečujemo $x \to \infty$.

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

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

s koeficienti

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

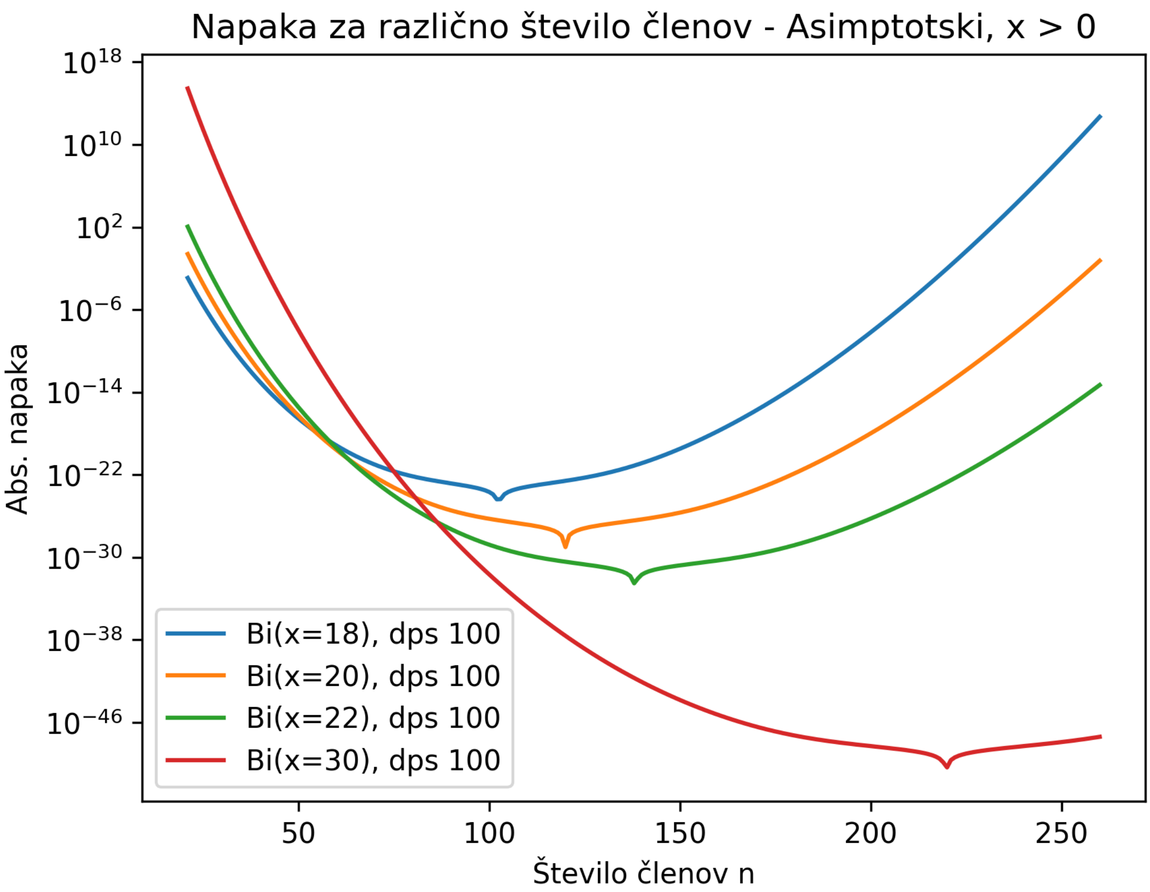
Za velike pozitivne x izrazimo

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

za po absolutni vrednosti velike negativne x pa

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

Funkcije L, P in Q ponovno implementiramo rekurzivno.



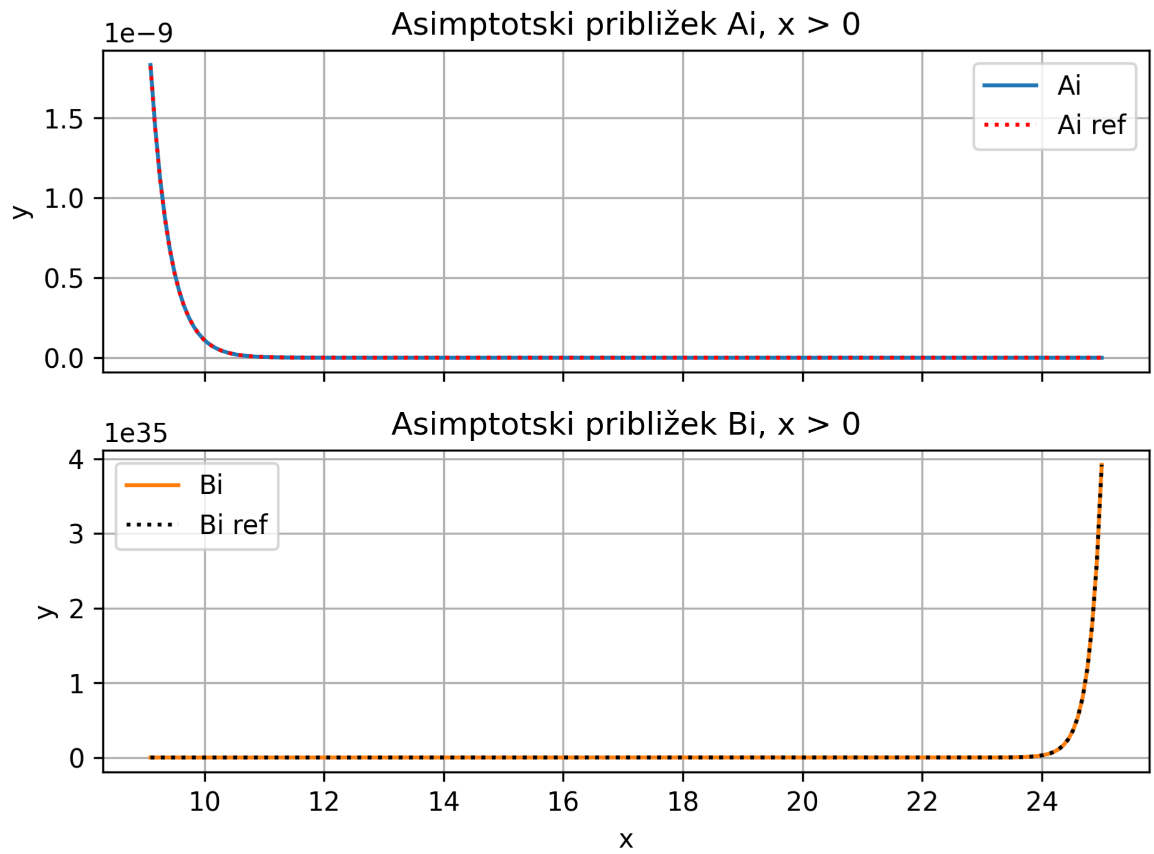
> **Napaka za različno število členov**: Asimptotskemu razvoju v našem primeru pada absolutna napaka samo do nekega končnega števila členov. Zato v nadaljevanju naloge jemljemo nove člene le, če so le-ti po absolutni vrednosti manjši od naslednjega.

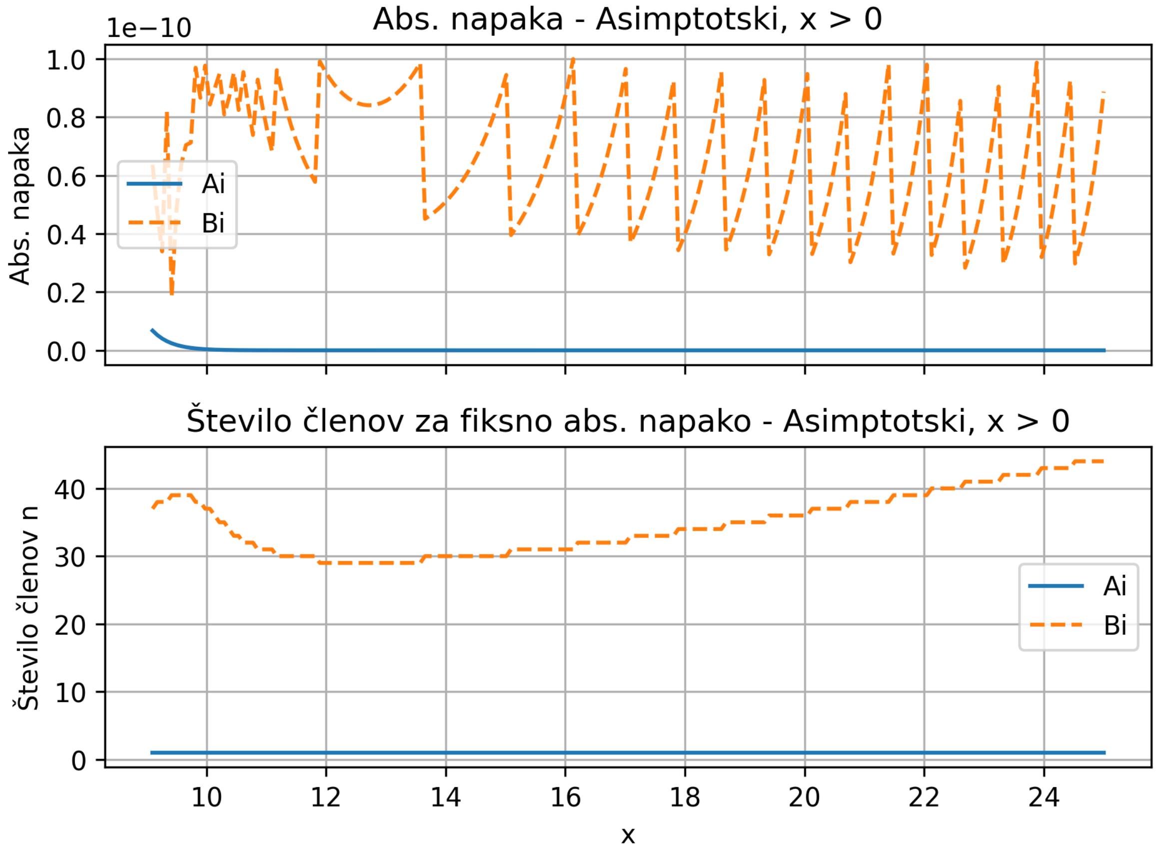
6.1. Za velike pozitivne x

Za velike pozitivne x implementiramo funkcijo $L(z)$ rekurzivno kot vsoto členov l_n za $n \in \mathbb{N}$

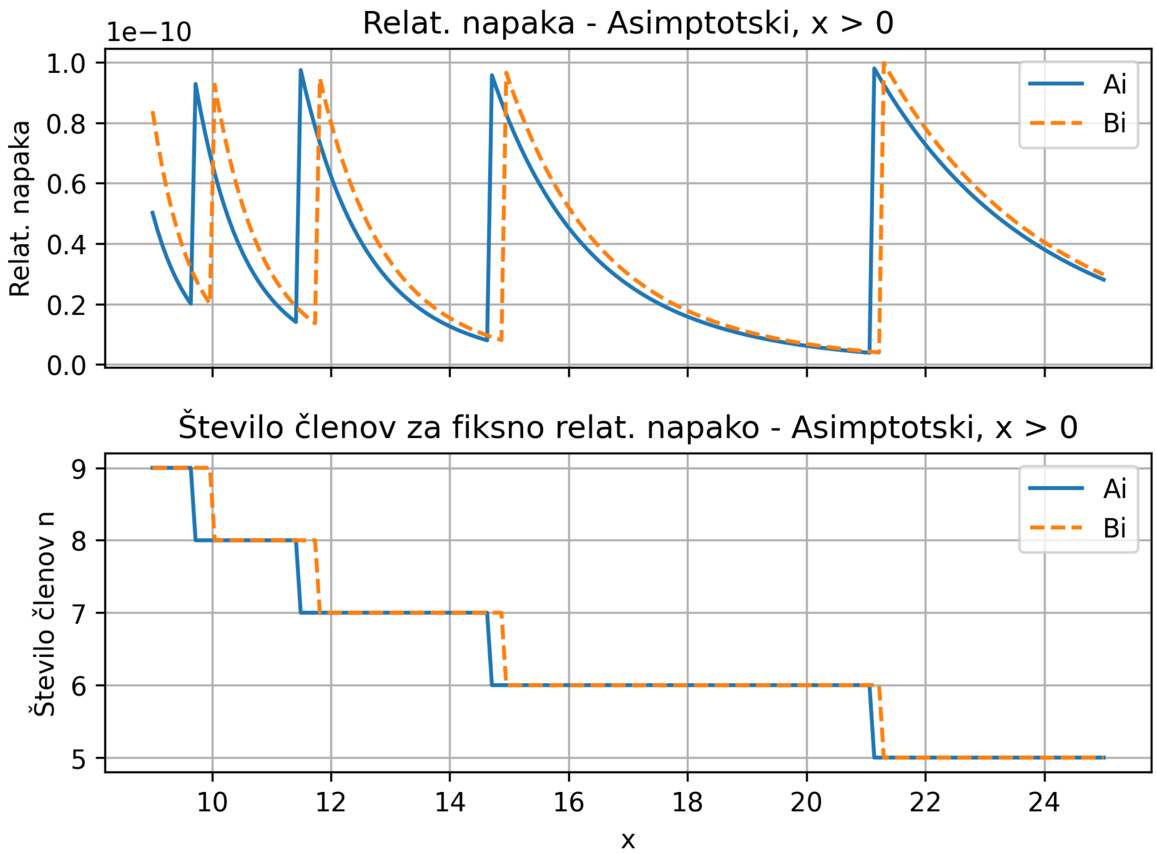
$$l_n = l_{n-1} \cdot \frac{l_n}{l_{n-1}} = l_{n-1} \cdot \frac{(3n + \frac{5}{3})(3n + \frac{1}{2})}{(n+1)\,18\,z}, \quad l_0 = 1.$$

Izračunane vrednosti primerjamo z referenčno funkcijo. Pri računanju z rekurzivno formulo povečujemo število členov dokler ne dosežemo najmanjšega razdalje do reference.





> **Absolutna napaka:** Podobno kot pri prejšnjem razvoju opazimo stopničastost pri padcih napake. Število členov za doseganje ustrezne absolutne napake pri Bi narašča. Vendar so tudi vrednosti funkcije ekstremne; Bi izjemno hitro narašča, Ai pa postaja zelo majhna.



> **Relativna napaka:** Zanimivo, za doseganje ustrezne relativne napake potrebujemo vse manj členov, saj pri večjih vrednostih x manjšo vlogo igrajo decimalke. Ta argument je smiseln za Bi, funkcija Ai pa ima že sama po sebi pri tako velikih x vrednost blizu 10^{-9}, kar je skoraj znotraj iskanega intervala.

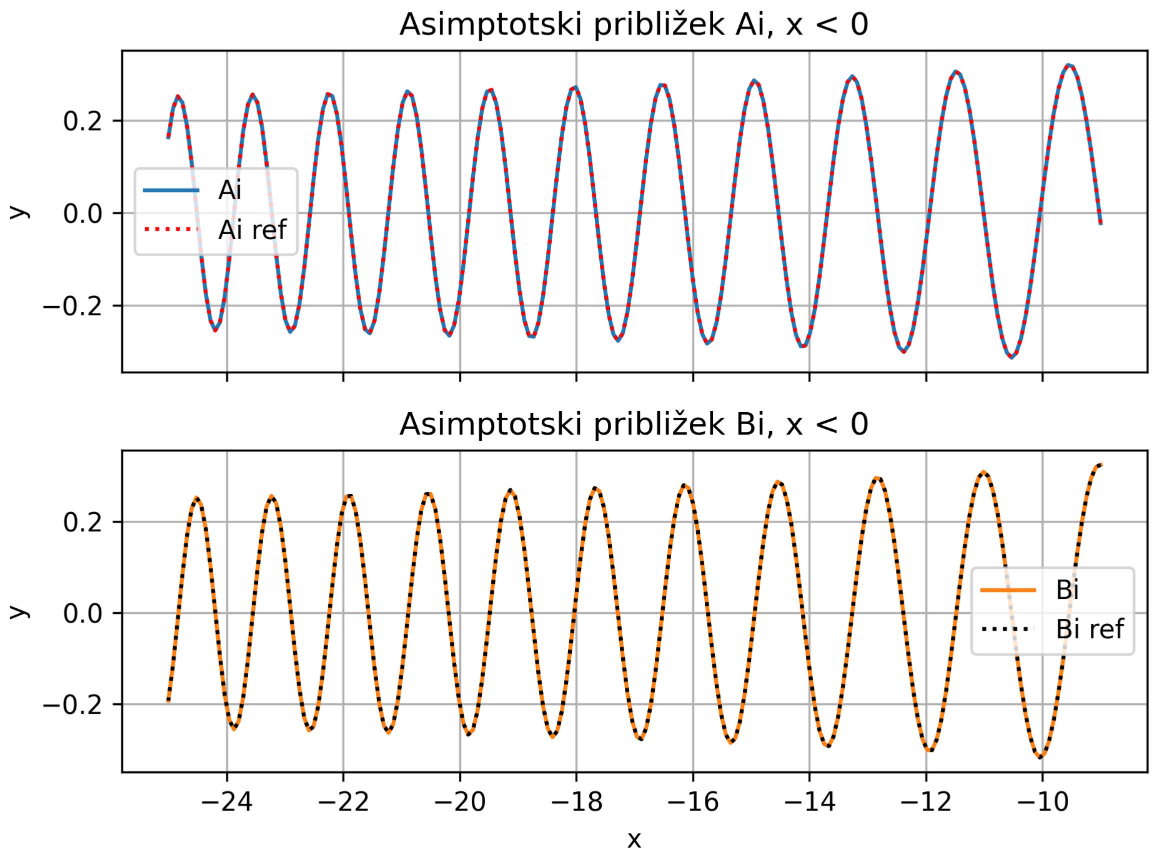
6.1. Za po absolutni vrednosti velike negativne x

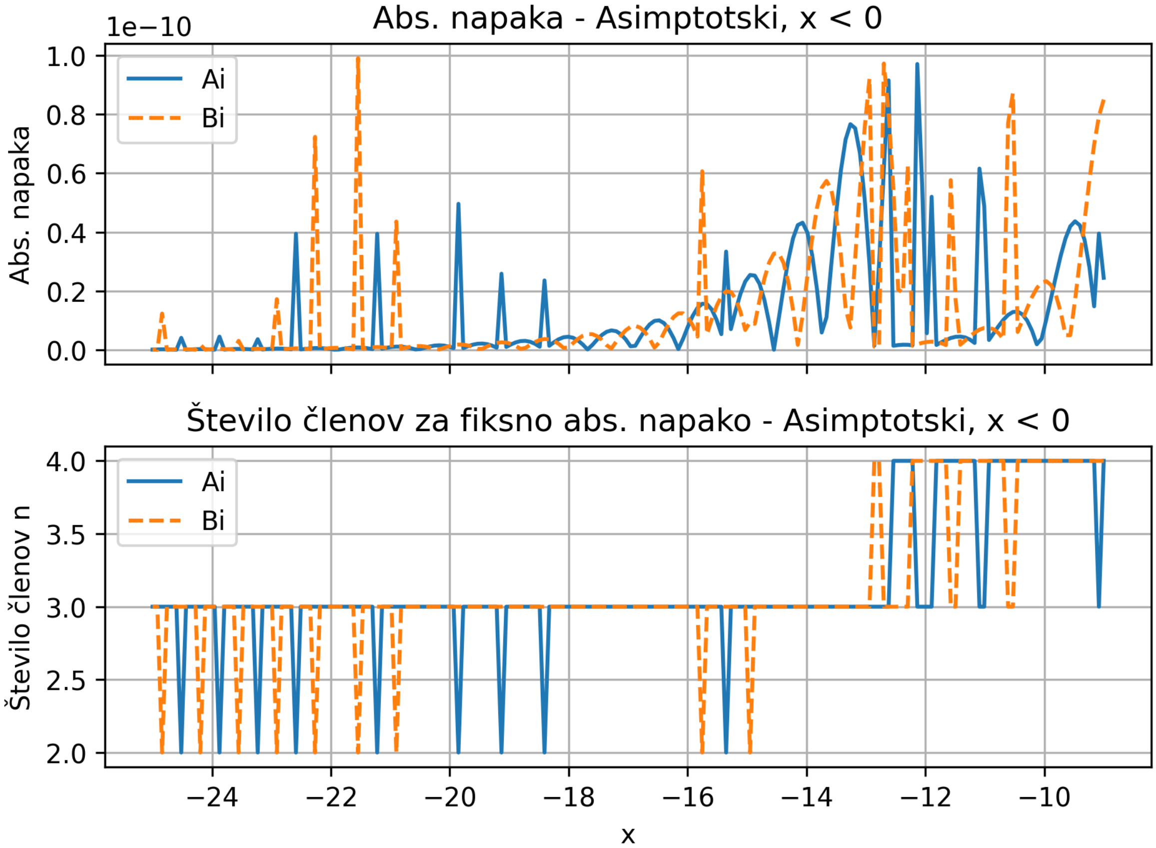
Za po absolutni vrednosti velike negativne x implementiramo funkciji $P(z)$ in $Q(z)$ rekurzivno kot vsoto členov p_n oz. q_n za $n \in \mathbb{N}$

$$p_n = p_{n-1} \cdot \frac{p_n}{p_{n-1}} = p_{n-1} \cdot -\frac{(6n - \frac{1}{2})(6n - \frac{5}{2})(6n - \frac{7}{2})(6n - \frac{11}{2})}{(2n-1)(2n)\, 18^2\, z^2}, \quad p_0 = 1$$

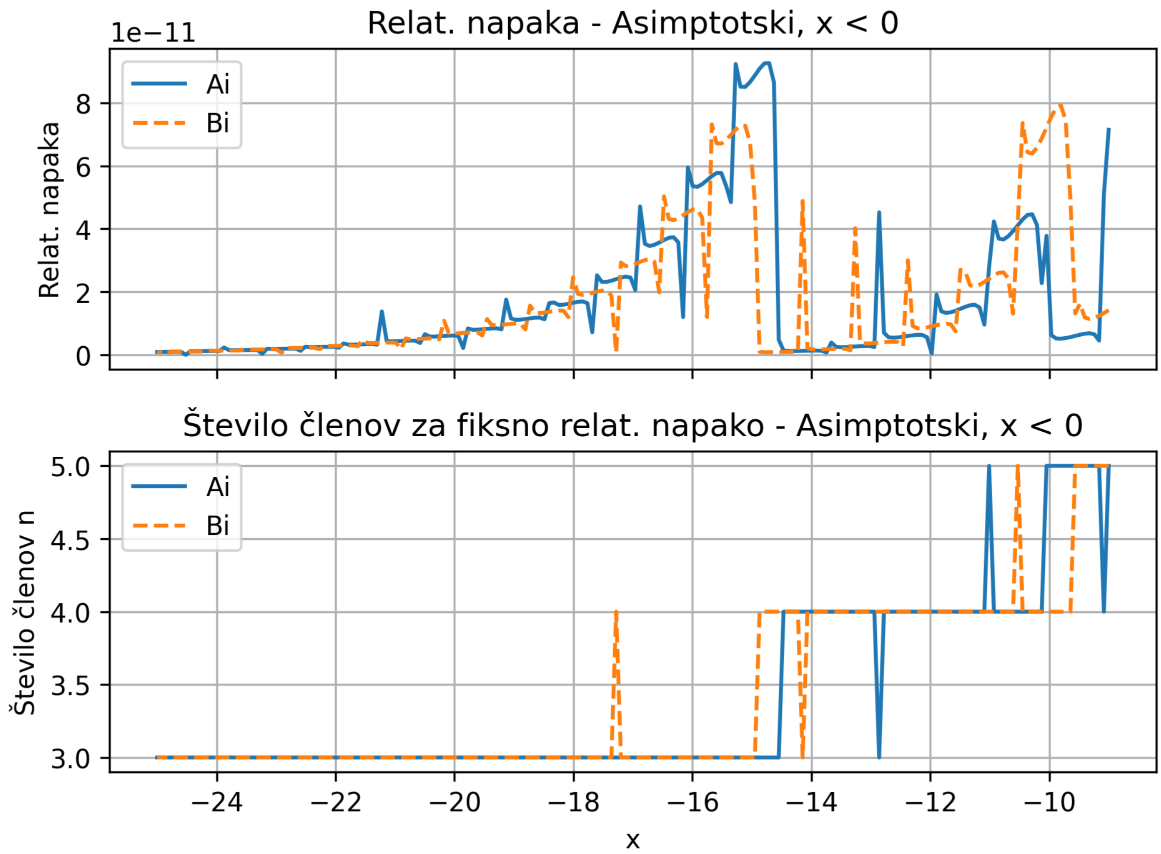
$$q_n = q_{n-1} \cdot \frac{q_n}{q_{n-1}} = q_{n-1} \cdot -\frac{(6n - \frac{1}{2})(6n - \frac{5}{2})(6n + \frac{1}{2})(6n + \frac{5}{2})}{(2n+1)(2n)\, 18^2\, z^2}, \quad q_0 = \frac{5}{72z}.$$

Izračunane vrednosti primerjamo z referenčno funkcijo. Pri računanju z rekurzivno formulo število členov povečujemo dokler ne dosežemo najmanjšega razdalje do reference.





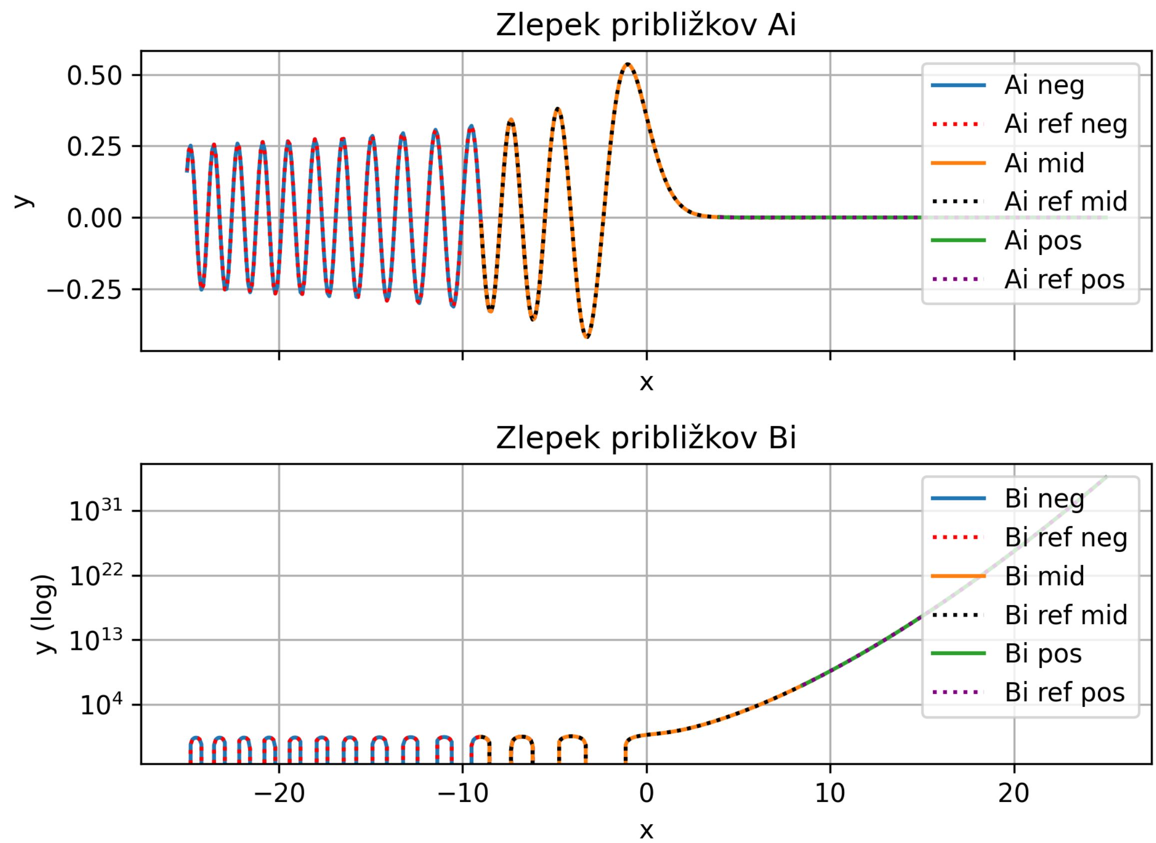
Absolutna napaka: Absolutna napaka je ustrezna, število členov z manjšanjem x pada.

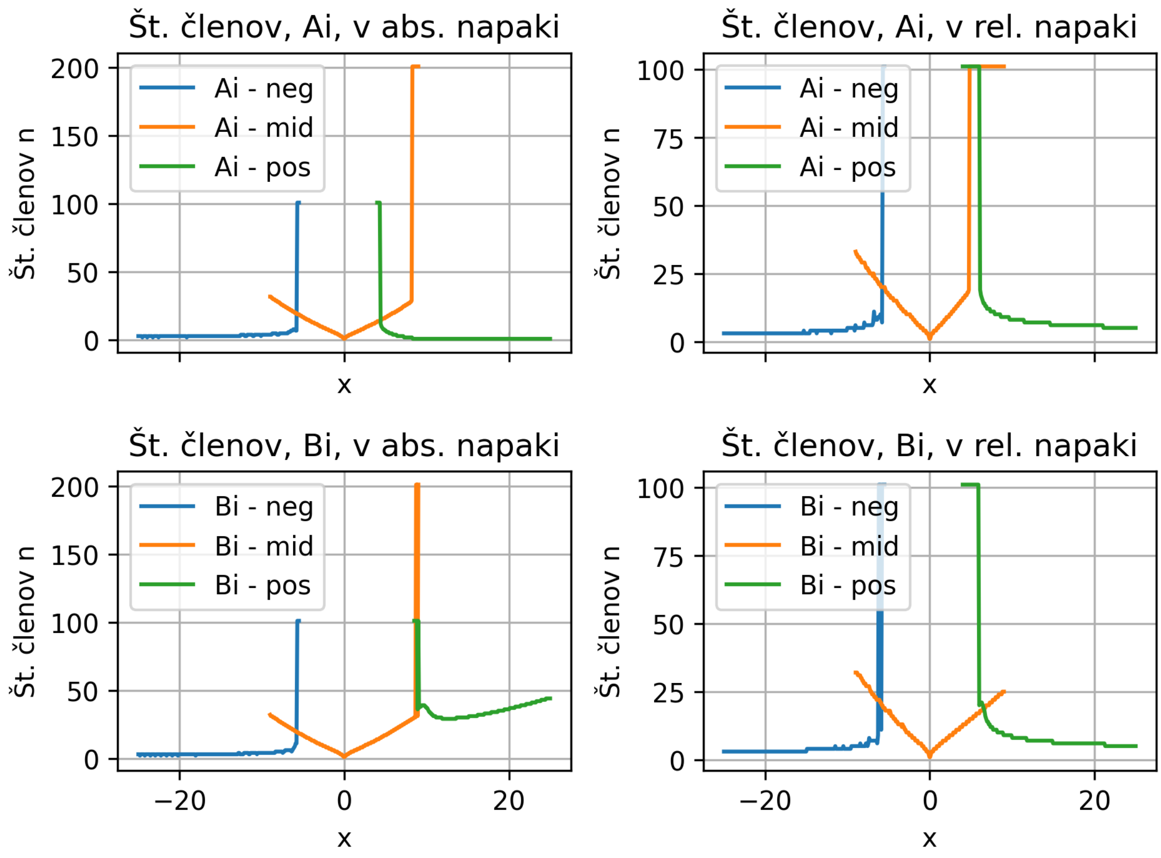


> **Relativna napaka:** Relativna napaka je ustrezna, število členov in tudi relativna napaka z manjšanjem x pada.

7. Zlepek približkov

V nadaljevanju bomo naše vrste zlepili in tako dobili Python funkcije, ki lahko učinkovito izračunajo Ai in Bi v okviru absolutne in relativne napake za celotno realno os.





> **Število členov v zlepkih**: Na grafih prikažemo potrebno število členov za doseganje absolutne in relativne napake manjše od 10^{-10} za zlepke Ai in Bi. Vsi dobljeni zlepki so relativno učinkoviti (potrebujejo majhno število členov) z izjemo zgornjega desnega grafa. Tam imamo v bližini $x = 4$ težave z doseganjem ciljane napake, saj število členov tako za Maclaurinovo in asimptotsko vrsto podivja (>500).

8. Dodatno: Ničle funkcij

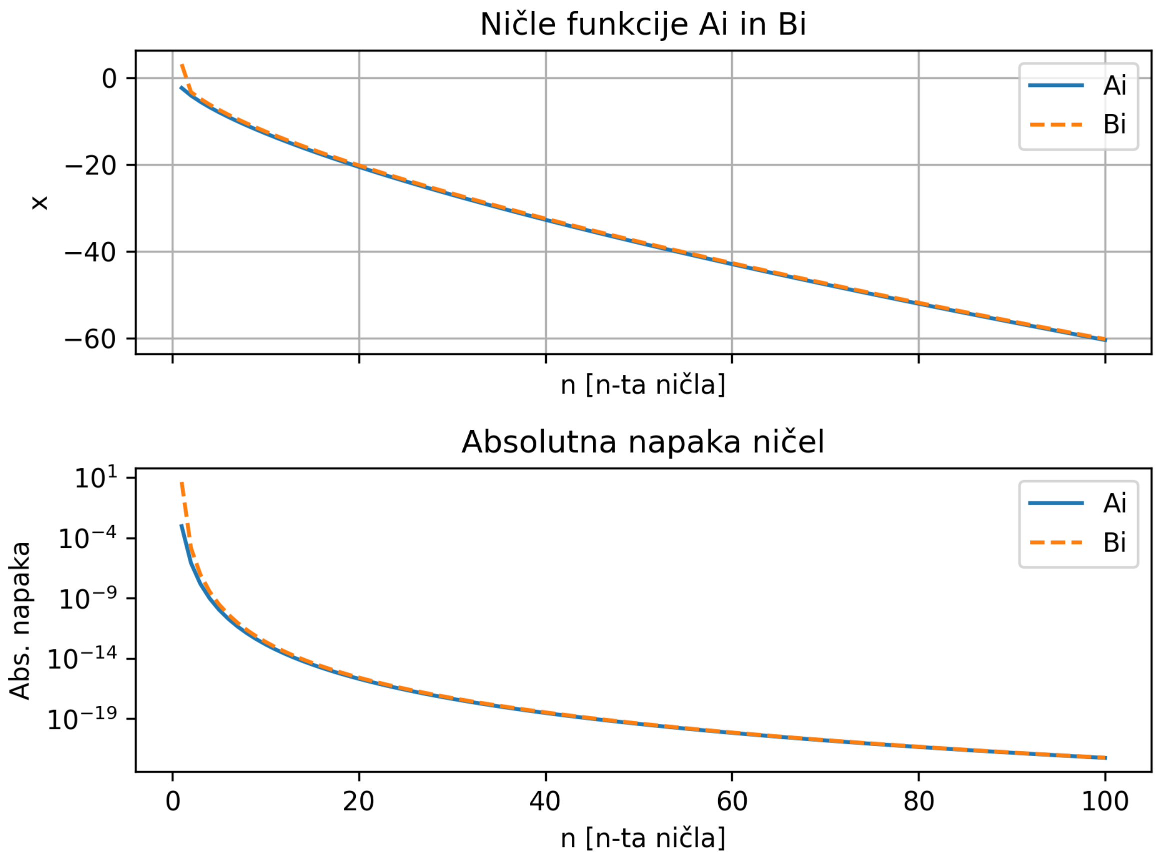
Ničle funkcije Ai pogosto srečamo v matematični analizi pri določitvi intervalov ničel specialnih funkcij in ortogonalnih polinomov ter v fiziki pri računu energijskih spektrov kvantnomehanskih sistemov.

V nadaljevanju poiščemo prvih sto ničel $\{a_s\}_{s=1}^{100}$ Airyjeve funkcije Ai in prvih sto ničel $\{b_s\}_{s=1}^{100}$ funkcije Bi pri $x < 0$. Za izračun uporabimo knjižnico `mpmath` in vgrajeni funkciji `airyaizero` in `airybizero`. Dobljene vrednosti primerjamo s formulama

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

kjer ima funkcija f asimptotski razvoj

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



> **Ničle Airyjevih funkcij:** Iz rezultatov potrdimo, da zgornja asimptotska vrsta znotraj intervalov napak ustreza ničlam Airyjevih funkcij. Absolutna napaka se z večanjem n manjša.

9. Zaključek

Tekom tega poročila nam je uspelo poiskati učinkovit način za izračun Airyjevih funkcij z absolutno napako manjšo od 10^{-10}. Tipično število potrebovanih členov vrste je manjše od 25. Potencialne težave imamo le pri funkciji Bi za velike x, saj tam število potrebnih členov izgleda kot da počasi narašča. Vendar v tem območju funkcija presega vrednosti 10^{100}, tako da se nam doseganje absolutne napake manjše od 10^{-10} ne zdi pretirano praktično uporabno. Podoben uspeh smo dosegli tudi za relativno napako manjšo od 10^{-10}, kjer sta funkciji učinkoviti na celotni realni osi z izjemo okolice $x = 4$ pri funkciji Ai. Tam število potrebovanih členov strmo naraste (na več kot 500) za asimptotsko in Maclaurinovo vrsto, posledično v tej okolici za majhno število členov ciljane relativne napake ne dosežemo.

Za konec smo izračunali še prvih 100 ničel obeh Airyjevih funkcij in jih primerjali z asimptotskim razvojem. Pričakovano, se absolutna napaka manjša z manjšanjem x (negativna vrednost) oz. večanjem n (tj. indeksa, ki označuje ničle na negativni polosi).

Luka Skeledžija, Github source 🔗 , 2023