



Univerza v Ljubljani
Fakulteta za matematiko
in fiziko

Matematično-fizikalni praktikum

Prva naloga: Airyjevi funkciji

Simon Bukovšek, 28211067

Mainz, 11. oktober 2023

Profesor: prof. dr. Borut Paul Kerševan

Naloga: Airyjevi funkciji

Z uporabo kombinacije Maclaurinove vrste in asimptotskega razvoja poišči čim učinkovitejši postopek za izračun vrednosti Airyjevih funkcij A_i in B_i 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} .

1 Uvod

V tej nalogi se bomo ukvarjali z Airyjevim funkcijama Ai in Bi , ki sta definirani kot rešitvi Airyjeve diferencialne enačbe

$$y''(x) = xy(x).$$

Ta enačba se občasno pojavi v fiziki, predvsem pri študiju optike in kvantne mehanike. Za motivacijo si zamislimo enodimenzionalno stacionarno Schrödingerjevo enačbo za linearen potencial $V(x) = \alpha x$ (pri pogoju $\alpha > 0$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha x\psi = E\psi.$$

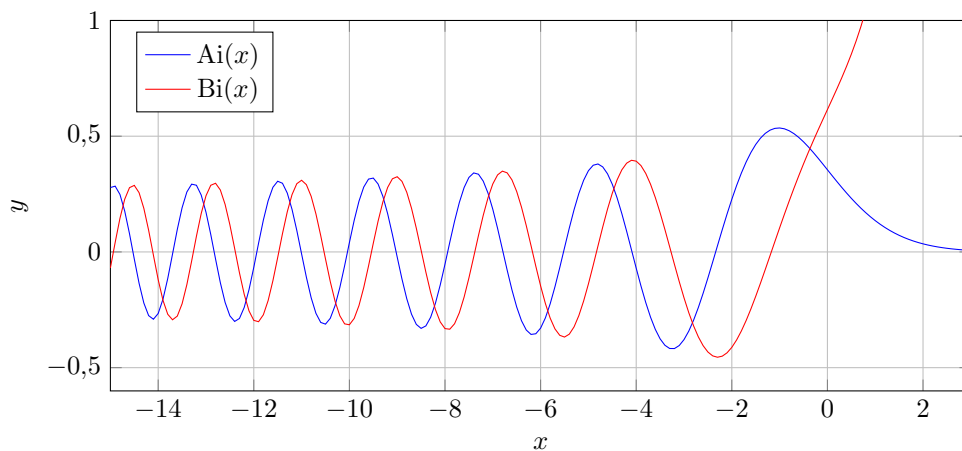
Če vpeljemo brezdimenzijsko spremenljivko $\xi = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2\alpha}}(\alpha x - E)$, dobimo

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \xi\psi.$$

Četudi se to zdi, kot da je ta primer pretirano preprost in umeten, se vseeno izkaže za zelo uporabnega, saj lahko vsako funkcijo lokalno aproksimiramo s premico. Eden pomembnejših primerov uporabnosti je povezava med klasičnim in neklasičnim območjem pri uporabi WKB aproksimacije.

Že iz primera pa lahko ugotovimo nekaj lastnosti rešitev te enačbe, ne da bi karkoli računali. Ker je enačba drugega reda, bo imela dve neodvisni rešitvi. Obnašanje funkcije v klasičnem območju ($\xi < 0$) bo oscilatorno za obe neodvisni rešitvi, v neklasičnem (prepovedanem) bo pa ena rešitev bolj kot eksponentno padajoča, druga pa bolj kot eksponentno naraščajoča.

Dve možni neodvisni rešitvi obravnavane enačbe sta Airyjevi funkciji Ai in Bi , ki sta prikazani na sliki 1.



Slika 1: Prikaz Airyjevih funkcij Ai in Bi na intervalu $[-15, 3]$. Njune lastnosti se ujema s predvidenimi.

Funkciji lahko zapišemo s pomočjo integralov s parametrom:

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

Druga možnost je razvoj v bodisi Maclaurinovo bodisi asimptotsko vrsto. Za majhne x lahko funkciji Ai in Bi izrazimo z Maclaurinovima vrstama

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

kjer v $x = 0$ veljata zvezi

$$\alpha = Ai(0) = Bi(0)/\sqrt{3} \approx 0,355\,028\,053\,887\,817\,239$$

in

$$\beta = -\text{Ai}'(0) = \text{Bi}'(0)/\sqrt{3} \approx 0,258\,819\,403\,792\,806\,798.$$

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 smo uporabili tako imenovan Pochamerjev simbol

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

Za velike vrednosti $|x|$ Airyjevi funkciji aproksimiramo z njunima asimptotskima razvojem. Uvedemo novo spremenljivko $\xi = \frac{2}{3}|x|^{3/2}$ in asimptotski vrsti

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

s koeficienti

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

Velja nekoliko enostavnejša rekurzivna zveza

$$u_s = \frac{(6s-5)(6s-1)}{72s} u_{s-1}$$

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

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

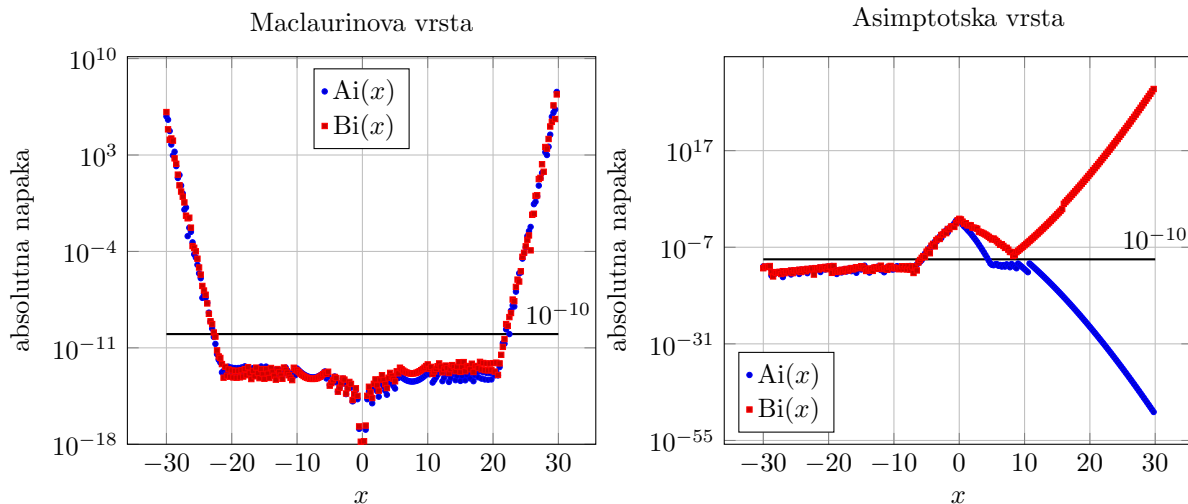
2 Izračuni

Vsi računi so bili izvedeni z numerično natančnostjo 10^{-40} s pomočjo `Wolfram Mathematica` in pythonove knjižnice `decimal`.

2.1 Absolutna napaka

V tem delu bomo obravnavali izračun Airyjevih funkcij s pomočjo vrst z absolutno napako, manjšo od 10^{-10} . Maclaurinova vrsta je bila za vsak x omejena na 10 000 členov, če ni popravek že prej po absolutni vrednosti znašal manj od 10^{-11} . Ob tem smo predpostavili, da se na območju vretenja $(-30, 30)$ pri vrednosti 10^{-11} prispevki le še zmanjšujejo s hitrostjo $\mathcal{O}(n^2)$. Enaki pogoji so veljali za asimptotske vrste, z dodatno omejitvijo, da se je vrsta zaključila, če so prispevki začeli naraščati. Na grafih 2a in 2b so prikazane absolutne napake za Ai in Bi za oba različna razvoja.

Grafa nam razkrivata mnogo podrobnosti, ki jih bomo komentirali vsako posebej. Začnimo z Maclaurinovim razvojem. Za majhne x je napaka zelo majhna, kar je pričakovano, saj je Taylorjev razvoj v okolici ničle zelo dober približek. V bližnji okolici ničle $(-21, 21)$ je napaka okrog 10^{-12} , kar je pričakovano, če razvoj ustavimo po prvem prispevku, ki je manjši od 10^{-11} . To pomeni, da je numerična natančnost dovolj velika, da z dovoljšnjim številom členov dosežemo zahtevano natančnost. Pri $|x| > 21$ pa se napaka začne eksponentno večati. To je seveda posledica zaokroževanja na štiridesetem decimalnem mestu. Zelo smiselno je tudi dejstvo, da je graf 2a simetričen okrog osi y , saj je hitrost konvergence pri Taylorjevem razvoju v obe smeri enaka.

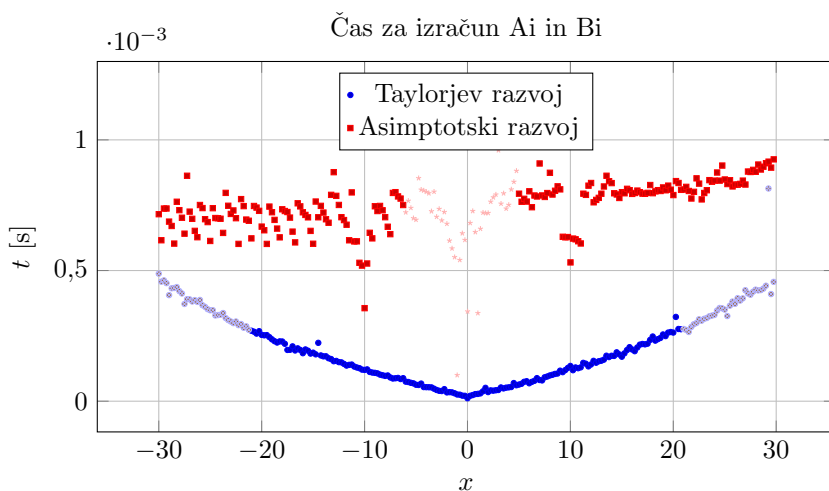


(a) Prikaz napak med izračunanimi vrednostmi Airyjevih funkcij s pomočjo Taylorjeve vrste in njunima točnima vrednostma. Napake za Ai in Bi so zelo podobne.

(b) Prikaz napak med izračunanimi vrednostmi Airyjevih funkcij s pomočjo asimptotskih vrst in njunima točnima vrednostma. Napake se za pozitivne vrednosti zelo razhajajo.

Slika 2: Prikaz absolutnih napak za Ai in Bi za oba razvoja.

Pogled na graf 2a pričakovano razkriva drugačno zgodbo. Natančnost v bližini ničle je zelo slaba, saj imata oba razvoja tam pole. Za Ai je pri $|x| > 7$ absolutna napaka zadovoljivo majhna, pri Bi pa to velja samo za negativne argumente. Asimptotske vrste so namreč dobri relativni približki, ne pa nujno absolutni. Ker je graf funkcije Ai povsod omejen in manjši od 1, dober relativen približek pomeni tudi dober absoluten približek. To velja še toliko bolj pri pozitivnih vrednostih x , saj so tam vrednosti funkcije izjemno majhne in posledično tudi absolutna napaka. Pri Bi pa je ravno obratna zgodba. Za $x > 0$ rastejo vrednosti funkcije še hitreje kot eksponentno, zato kljub dobremu relativnemu približku absolutna napaka narašča. Težava asimptotskega razvoja leži tudi v tem, da ne moremo vzeti poljubno mnogo členov, saj neskončna vsota divergira povsod.



Slika 3: Časi za izračun obeh vrednosti Ai in Bi hkrati. V modrem so prikazani časi za Taylorjev razvoj, v rdečem pa za asimptotskega. Tisti časi, ki niso dosegli želene natančnosti, so prikazani prosojno.

Vrnimo se k vprašanju, kako naj se lotimo izračunave Airyjevih funkcij, če želimo absolutno napako manjšo od 10^{-10} . Za Bi pri $x > 21$ nam ni pomoči (pri dani numerični natančnosti 10^{-40}), saj nobena metoda ne doseže želene natančnosti. Sicer pa bi bilo očitno najboljše v bližini ničle uporabiti Taylorjev

razvoj, v oddaljenosti od ničle pa asimptotskega. Večje vrpašanje je na vmesnem območju, kjer oba razvoja dosežeta želeno natančnost. Za to si pogledjmo čas, ki ga program porabi, da izračuna obe vrednosti Ai in Bi hkrati (glej sliko 3).

Kot je razvidno z grafa 3, je hitrost Taylorjevega razvoja hitrejša od asimptotskega, celo za vrednosti, ki so precej oddaljene od izhodišča. To je morda nekoliko nepričakovano, saj je za velike $|x|$ v asimptotskem razvoju potrebnih bistveno manj členov, kot v Taylorjevem. Morda tiči razlog v tem, da mora asimptotski razvoj računati negativne potence, Taylorjev pa pozitivne. Zanimiva opazka je tudi konsistentnost časov računanja za Taylorjev in nekonsistentnost časov za asimptotski razvoj. Učinkovitost le-tega bi najbrž lahko izboljšali, tako da bi prilagajali numerično natančnost glede na argument – lahko bi manjšali natančnost za večje $|x|$ in bi tako dobili hitrejšo izračune.

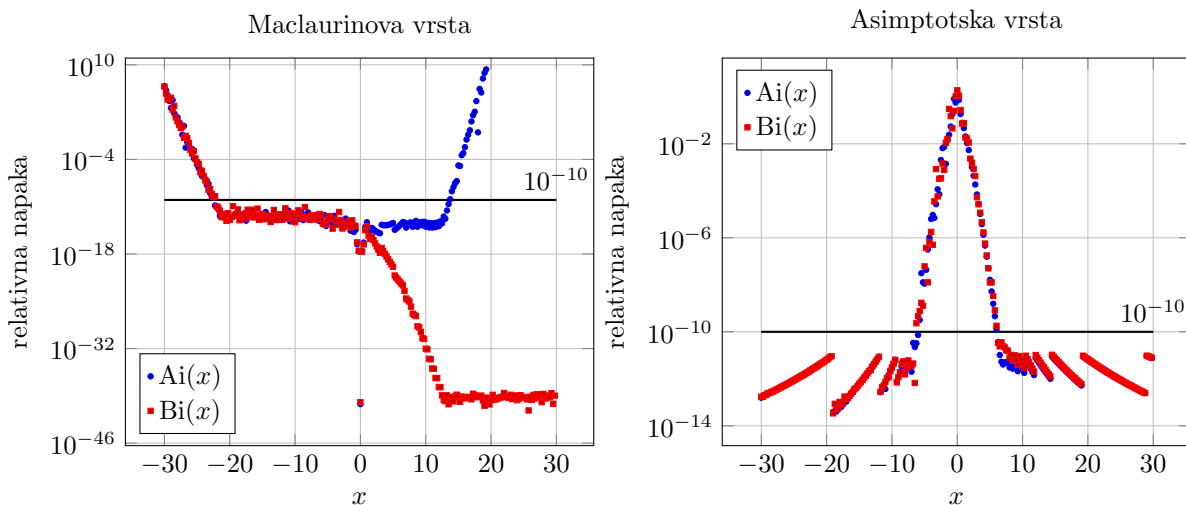
Pri približno $x = -21$ pa tudi 40 mestna natančnost ne zadošča za želeno natančnost pri Taylorjevem razvoju, tako da bi v tisti točki presedlali na asimptotski razvoj. Recept pri uporabi 40 decimalk je torej sledeč:

$$\text{Ai} : \begin{cases} x < -21 : & \text{asimptotski razvoj,} \\ -21 < x < 21 : & \text{Taylorjev razvoj,} \\ 21 < x : & \text{asimptotski razvoj.} \end{cases} \quad \text{Bi} : \begin{cases} x < -21 : & \text{asimptotski razvoj,} \\ -21 < x < 21 : & \text{Taylorjev razvoj,} \\ 21 < x : & \text{uporabi večjo natančnost.} \end{cases}$$

Kot že rečeno, program lahko močno izboljšamo z dinamično izbiro pomembnih decimalnih mest pri računanju. Če bi recimo uporabili 30 decimalk, bi se že pri $x = -15$ splačalo uporabiti asimptotski razvoj.

2.2 Relativna napaka

Podobno analizo kot v prejšnjem podpoglavju lahko naredimo tudi za relativne napake. Enakih ugotovitev ne bom ponavljal, lahko pa opazimo nekaj novih. Prikazi so na grafih 4.



(a) Prikaz relativnih napak med izračunanimi vrednostmi Airyjevih funkcij s pomočjo Taylorjeve vrste in njunima točnima vrednostma na intervalu $(-30, 30)$.

(b) Prikaz relativnih napak med izračunanimi vrednostmi Airyjevih funkcij s pomočjo asimptotskih vrst in njunima točnima vrednostima na intervalu $(-30, 30)$.

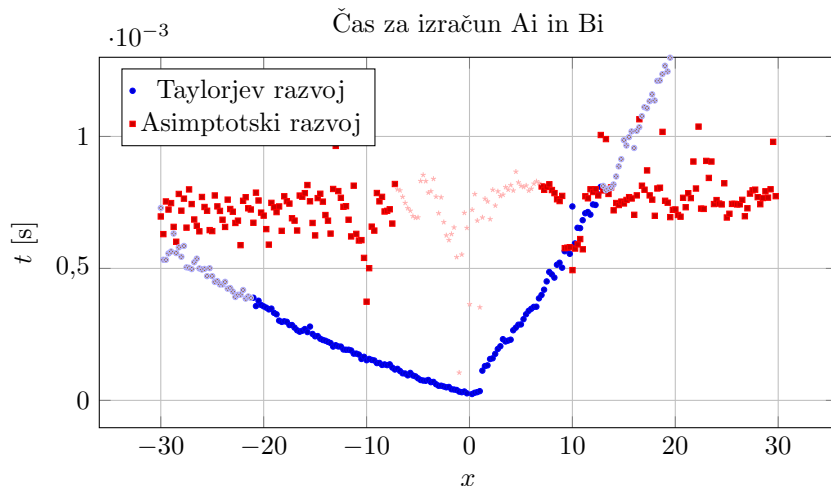
Slika 4: Prikaz relativnih napak za Ai in Bi za oba razvoja.

Najprej si oglejmo graf 4a. Za negativne vrednosti x je relativna napaka v skladu z absolutno za obe funkciji. V teoriji je relativna napaka okrog ničel neskončna, vendar nobena od vzorčnih točk ni pristala dovolj blizu kake ničle, da bi se poznala kakšna težava.

Pri pozitivnih vrednostih x pa je opaziti dve različni obnašanji. Za Ai relativna napaka tako rekoč eksplodira (pri $x = 30$ meri že 10^{56}), kar je seveda posledica nenatančnega absolutnega približka in ekstremno nizke prave vrednosti. Pri Bi pa je ravno zaradi ogromne prave vrednosti kljub enaki absolutni napaki kot pri Ai relativna napaka znotraj željene vrednosti 10^{-10} . Napaka pri Bi pade krepko pod 10^{-12} ,

saj se za obe funkciji uporablja isti razvoj, ki mora biti za A_i mnogo bolj natančen. Napaka se ustavi pri 10^{-40} , kolikor je numerična natančnost števil.

Če vse ugotovitve iz prejšnjih odstavkov uporabimo za graf 4b, je vse v okviru pričakovanj. Relativne napake za obe funkciji so dovolj nizke za $|x| > 7$. Časovna zahtevnost je prikazana na grafu 5. Za približno



Slika 5: Časi za izračun obeh vrednosti A_i in B_i hkrati. V modrem so prikazani časi za Taylorjev razvoj, v rdečem pa za asimptotskega. Tisti časi, ki niso dosegli želene natančnosti, so prikazani prosojno. Graf je nekoliko drugačen od grafa 3, saj so za relativno natančnost dani drugačni pogoji.

$x > 12$ je v tem primeru asimptotski razvoj hitrejši od Taylorjevega. Če bi hoteli računati samo B_i , to ne bi držalo, saj je pri tem lažje doseči zahtevano relativno natančnost kot pri A_i . Recept za izračun obeh funkcij pri zeleni relativni natančnosti je sledeč:

$$A_i : \begin{cases} x < -21 : & \text{asimptotski razvoj,} \\ -21 < x < 12 : & \text{Taylorjev razvoj,} \\ 12 < x & \text{asimptotski razvoj,} \end{cases} \quad B_i : \begin{cases} x < -21 : & \text{asimptotski razvoj,} \\ -21 < x < 12 : & \text{Taylorjev razvoj,} \\ 12 < x : & \text{asimptotski razvoj.} \end{cases}$$

Možne izboljšave so iste kot pri absolutni natančnosti.

2.3 Ničle Airyjevih funkcij

Dodatna naloga je bila preveriti sledečo formulo za izračun ničel Airyjevih funkcij:

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

kjer ima funkcija f asimptotski razvoj

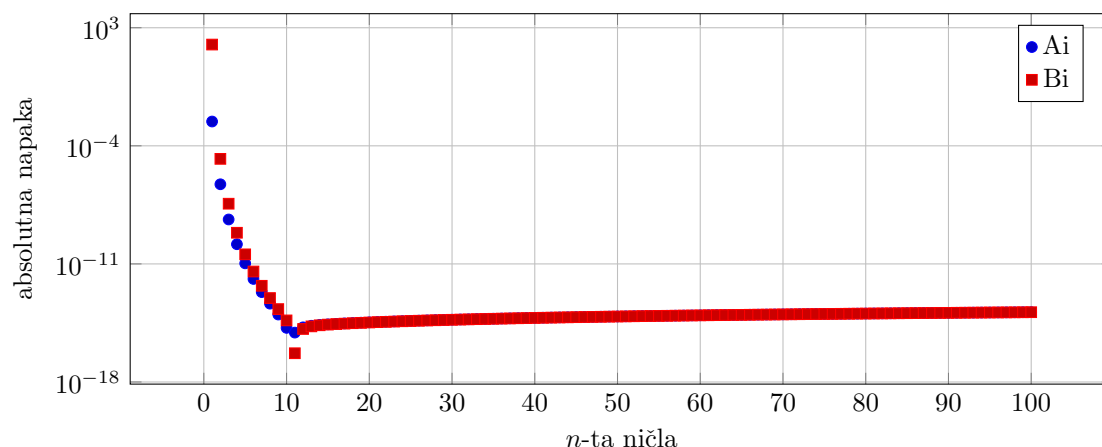
$$f(z) \sim z^{2/3} \left(1 + \frac{5}{48} z^{-2} - \frac{5}{36} z^{-4} + \frac{77\,125}{82\,944} z^{-6} - \frac{108\,056\,875}{6\,967\,296} z^{-8} + \frac{162\,375\,596\,875}{334\,430\,208} z^{-10} - \dots \right).$$

Natančnost iskanja ničel s pomočjo te formule je prikazana na grafu 6. Razvidno je, da absolutna natančnost že do 11. ničle pade na 10^{-14} in približno pri tej natančnosti tudi ostane. Napaka, ki ostane, pa ni posledica zaokroževanja v numeričnem računanju, temveč končnega števila členov v razvoju.

3 Zaključek

Cilj te naloge je bil aproksimirati Airyjeve funkcije z dvema različnima vrstama in ju smiselno zlepiti. Pri tem smo se osredotočili na absolutno in relativno napako, ki smo ju želeli omejiti na 10^{-10} . Pričakovano je bil Taylorjev razvoj v bližini izhodišča bolj natančen, bolj oddaljene točke pa je bilo lažje aproksimirati z

Napake pri izračunu Airyjevih ničel



Slika 6: Natančnost izračuna ničel Airyjevih funkcij s pomočjo formule 1.

asimptotskim razvojem. Za 40 mestno natančnost računa se je izkazalo, da sta optimalni točki za prehod med razvojema $x = -21$ in $x = 21$ pri absolutni napaki ter $x = -21$ in $x = 12$ pri relativni napaki. Ugotovili smo tudi, da za $x > 21$ pri uporabljeni numerični natančnosti ne moremo aproksimirati natančneje kot 10^{-10} . Dodatna naloga je zahtevala ugotoviti natančnost funkcije 1 za iskanje ničel Airyjevih funkcij. Ugotovili smo, da je absolutna napaka naprej od 11. ničle okrog 10^{-14} , kar je posledica končnega števila členov v razvoju.

Poleg samega iskanja optimalnega izračuna me je naloga prisilila v delo s števili z veliko decimalnimi mesti, torej z večjo natančnostjo, kot jo ponuja standard IEEE 754. Za to sem uporabili knjižnico `decimal` v Pythonu in nekaj `Mathematice`. Odkrivanje delovanja numeričnih metod je bilo zanimivo, poučno in vse prej kot enostavno, saj sem se srečal z mnogimi pastmi, ki jih numerično računanje prinaša, in z urami brezplodnega reševanja nenehno nastajajočih problemov. Večino problemov mi je k sreči uspelo rešiti. Če se na celotno nalogo ozremo s pozitivne strani, si lahko mislimo (če ne drugače, sebi v tolažbo), da vska rešena težava naredi človeka bolj izkušenega.