

EVALUACION NUMERICA DE LA FUNCION DE APPELL F_2

G. Gasaneo y S. Otranto

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas

Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur
Av. Alem 1253, B8000CPB Bahía Blanca, Argentina

Key Words: Funciones de Appell, funciones Hipergeométricas

Abstract. *En este trabajo se estudia la evaluación numérica de la función de Appell $F_2(a, b, b', c, c', x, y)$. Distintas representaciones en serie de potencias y representaciones integrales son discutidas. Se estudian las regiones de convergencia de las mismas. Se comparan las distintas estrategias numéricas formuladas a partir de las representaciones mencionadas.*

1 INTRODUCCIÓN

En el área de la física atómica se estudia con frecuencia la excitación, la desexcitación y la ionización de distintos átomos. Esto puede ocurrir espontáneamente, debido a la influencia de otros átomos e iones, o por impacto de partículas cargadas o fotones. A fin de comparar diversos modelos teóricos para la descripción de dichos procesos con datos obtenidos experimentalmente, se calculan secciones eficaces de diverso grado de diferenciabilidad. Para ello, se requiere la evaluación de las matrices de transición de los mencionados procesos las cuales involucran el cálculo de integrales que incluyen las funciones de onda que representan los estados cuánticos inicial y final del sistema bajo estudio. Debido a que las funciones de ondas atómicas están dadas generalmente en términos de funciones de Kummer o casos particulares de ellas (tales como funciones de Laguerre, Bessels, etc), las integrales llevan a funciones hipergeométricas ya sea del tipo de Gauss o bien a funciones aun más complicadas como las funciones de Appell. El interés del estudio de las funciones de Appell surge por el hecho de que no solo aparecen en el contexto de la física atómica, sino también en diversas áreas de la física y la matemática. En el libro de Exton¹ pueden encontrarse algunas de las aplicaciones al área de la física estadística, la física de vibraciones, conducción del calor, la teoría de números, etc. En particular, las funciones introducidas por Appell^{2,3} en 1880 son

$$F_1(a, b, b', c, x, y) = \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{(a)_{m+n} (b)_m (b')_n}{(c)_{m+n} m!n!} x^m y^n \quad |x|, |y| < 1. \quad (1)$$

$$F_2(a, b, b', c, c', x, y) = \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{(a)_{m+n} (b)_m (b')_n}{(c)_m (c')_n m!n!} x^m y^n \quad |x| + |y| < 1. \quad (2)$$

$$F_3(a, a', b, b', c, x, y) = \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{(a)_m (a')_n (b)_m (b')_n}{(c)_{m+n} m!n!} x^m y^n \quad |x|, |y| < 1. \quad (3)$$

$$F_4(a, b, c, c', x, y) = \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{(a)_{m+n} (b)_{m+n}}{(c)_m (c')_n m!n!} x^m y^n \quad \sqrt{|x|} + \sqrt{|y|} < 1. \quad (4)$$

donde $(a)_m$ es el "Pochhammer" dado por $\Gamma(a+m)/\Gamma(a)$, y $\Gamma(x)$ es la función Gamma⁴.

En general ocurre que el valor de los argumentos que resulta en las distintas aplicaciones de estas funciones no es el especificado en las ecuaciones (1)-(4), sino que se encuentra fuera del radio de convergencia de las series de potencias. Ocurre, por otra parte, que dichas funciones son soluciones de sistemas de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales con varios puntos singulares regulares. Por lo cual, se hace necesario conocer detalladamente las propiedades analíticas de las funciones de manera de poder extenderlas y reexpandirlas alrededor de las distintas singularidades. La apropiada extensión analítica permite la evaluación de las funciones para valores arbitrarios de los argumentos. Para ello se utilizan distintas representaciones en serie así como también representaciones integrales.

En este trabajo se estudiará con cierto detalle a la función F_2 . A pesar de la frecuencia con que aparecen las funciones de Appell en distintas aplicaciones, no existe mucha bibliografía sobre las continuaciones analíticas de esta función. Esto es consecuencia del grado de dificultad que presenta el estudio completo de sus propiedades analíticas. Recientemente se han publicado códigos para evaluar a la función^{5,6} F_1 y también se ha incorporado esta función en programas comerciales como el Mathematica aun cuando se lo ha hecho de manera incompleta. En el trabajo de Colavecchia y Colavecchia y Gasaneo^{5,6}, solo se han considerado argumentos reales. Este trabajo es el primero de una serie destinados a generar códigos de evaluación de la función F_2 . En particular haremos énfasis en el estudio de un conjunto de representaciones que nos permite trabajar con argumentos puramente imaginarios. En la sección II se dará un breve resumen de las propiedades de la función F_2 . Luego, en la sección III se discutirán las representaciones a ser utilizadas en el diagrama numérico y se compararán los distintos resultados numéricos obtenidos. En la sección IV se hará un resumen de lo discutido a lo largo de este trabajo.

2 LA FUNCIÓN DE APPELL $F_2(A, B, B', C, C', X, Y)$

La serie de potencias de (2) es la definición original dada por Appell para la función F_2 . Esta función satisface el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales³:

$$\begin{aligned} \left[x(1-x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} - xy \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} + [c - (a+b+1)x] \frac{\partial}{\partial x} - by \frac{\partial}{\partial y} - ab \right] F_2 &= 0 \\ \left[y(1-y) \frac{\partial^2}{\partial y^2} - xy \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} + [c' - (a+b'+1)y] \frac{\partial}{\partial y} - b'x \frac{\partial}{\partial x} - ab' \right] F_2 &= 0 \end{aligned} \quad (5)$$

Los puntos singulares de éstas ecuaciones son: $x, y = 0$, $x, y = 1$, $x = y$, $x, y = \infty$. Un diagrama de cálculo numérico pensado a partir de las ecuaciones (5) implica el transformar el sistema de ecuaciones de segundo orden en un sistema de ecuaciones acopladas de primer orden. En este reporte no vamos a seguir esta línea de trabajo.

A partir de la serie de potencias dada por la ecuación (2) se pueden obtener rápidamente los siguientes resultados, conocidos como fórmulas de reducción:

$$\begin{aligned} F_2(a, b, b', c, c', x, 0) &= F_2(a, b, 0, c, c', x, y) = {}_2F_1(a, b, c, x) \\ F_2(a, b, b', c, c', 0, y) &= F_2(a, 0, b', c, c', x, y) = {}_2F_1(a, b', c', y). \end{aligned} \quad (6)$$

Vemos que la función F_2 se reduce a la función de Gauss en el caso en que alguno de los parámetros b , b' o los argumentos x o y se anule. Otras fórmulas de reducción resultan

cuando algunos de los parámetros son iguales,

$$F_2(a, b, b', b, b', x, y) = (1 - x - y)^{-a} \quad (7)$$

$$F_2(a, b, b', a, b', x, y) = (1 - y)^{b-a} (1 - x - y)^{-b} \quad (8)$$

$$F_2(a, b, b', b, a, x, y) = (1 - x)^{b'-a} (1 - x - y)^{-b'} \quad (9)$$

$$xF_2(1, 1, b', a, b', x, y) + yF_2(1, b, 1, b, a, x, y) = -\ln(1 - x - y). \quad (10)$$

Estas fórmulas son útiles en muchas situaciones para hacer testeos numéricos ya que permiten comparar la función a evaluar con funciones conocidas. En éste sentido también resultan de utilidad las siguientes formas de reducción que llevan a funciones de Gauss:

$$F_2(a, b, b', c, b', x, y) = (1 - y)^{-a} {}_2F_1\left(a, b, c, \frac{x}{1 - y}\right) \quad (11)$$

$$F_2(a, b, b', b, c', x, y) = (1 - x)^{-a} {}_2F_1\left(a, b', c', \frac{y}{1 - x}\right) \quad (12)$$

$$F_2(a, b, b', a, a, x, y) = (1 - x)^{-b} (1 - y)^{-b'} {}_2F_1\left(b, b', a, \frac{xy}{(1 - x)(1 - y)}\right) \quad (13)$$

Estas permiten definir un diagrama de comparación más sofisticado ya que involucran la evaluación de funciones no triviales. Existen otras relaciones conectando la función F_2 con otras funciones de Appell, por ejemplo

$$F_2(a, b, b', c, a, x, y) = (1 - y)^{-b'} F_1\left(b, a - b', b', c, x, \frac{x}{1 - y}\right) \quad (14)$$

$$F_2(a, b, b', a, c', x, y) = (1 - x)^{-b} F_1\left(b', b, a - b, c, \frac{y}{1 - x}, y\right). \quad (15)$$

Estas requieren de la evaluación de funciones de Appell F_1 . Para la evaluación de ésta función sólo contamos con rutinas numéricas que involucran argumentos reales^{5,6}, aun cuando cierto testeo numérico puede realizarse utilizando el programa Mathematica 5.0.

Distintos tipos de representaciones integrales pueden ser dados para la función F_2 . En particular, una de las posibles es la transformada de Euler,

$$\begin{aligned} F_2(a, b, b', c, c', x, y) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(c')}{\Gamma(b)\Gamma(b')\Gamma(c-b)\Gamma(c'-b')} \int_0^1 \int_0^1 u^{b-1} v^{b'-1} (1 - u)^{c-b-1} \\ &\quad \times (1 - v)^{c'-b'-1} (1 - ux - vy)^{-a} dudv \quad (16) \\ &Re(b) > 0, Re(b') > 0, Re(c - b) > 0, Re(c' - b') > 0 \end{aligned}$$

la cual puede ser convenientemente implementada en un esquema numérico debido a que involucra integrales definidas en intervalos de pequeña extensión. Sin embargo, una de

las restricciones que ésta definición presenta es que no admite parámetros puramente imaginarios. La extensión de la definición a parámetros puramente imaginarios implica el cambio de los intervalos de integración por un contorno en el plano complejo. Otras definiciones en términos de representaciones del tipo de Mellin-Barnes, o de productos de funciones de Gauss son conocidas, pero estas involucran contornos en el plano complejo. Por esta razón no resultan convenientes al momento de planificar un diagrama computacional de cálculo. En la siguiente sección daremos una definición integral que se convertirá en la forma más eficiente para la evaluación numérica de la función F_2 . Dejaremos la discusión de la misma para más adelante.

Distintos tipos de representaciones en serie pueden ser dadas para evaluar la función F_2 en términos de funciones conocidas. Algunas de ellas son:

$$F_2(a, b, b', c, c', x, y) = (1 - y)^{-a} \sum \frac{(a)_m (b)_m}{(c)_m m!} x^m (1 - y)^{-m} \times {}_2F_1\left(a + m, c' - b', c', \frac{y}{y - 1}\right) \tag{17}$$

$$= (1 - y)^{-b'} \sum \frac{(a)_m (b)_m}{(c)_m m!} x^m {}_2F_1\left(c' - a - m, b', c', \frac{y}{y - 1}\right) \tag{18}$$

$$= (1 - y)^{c' - a - b'} \sum \frac{(a)_m (b)_m}{(c)_m m!} x^m (1 - y)^{-m} \times {}_2F_1(c' - a - m, c' - b', c', y) \tag{19}$$

Expresiones similares pueden obtenerse intercambiando los parámetros b y c por los b' y c' y la variable x por la y . Las distintas representaciones dadas, son útiles en el caso en que x es pequeña. En la próxima sección discutiremos otras representaciones que serán utilizadas en el esquema numérico.

3 ESQUEMA DE CÁLCULO

Como ya mencionamos en la introducción, nos interesa la evaluación de la función F_2 en el caso en que los argumentos son complejos. En particular usaremos las siguiente definiciones para los parámetros

$$a = 1 + i \left(\frac{Z_1}{v_1} + \frac{Z_2}{v_2} \right) \quad b = i \frac{Z_1}{v_1} \quad b' = i \frac{Z_2}{v_2} \quad c = c' = 1$$

Esta forma particular, es la que se obtiene al estudiar la aut ionización de átomos por excitación producida por impacto de iones⁷. Para el caso particular de átomos de He, el rango de interés de las velocidades v_1 y v_2 es entre 0.2 y 1.8 mientras que las cargas Z_1 y Z_2 son del orden de la unidad.

Expansiones alternativas a la dadas en las ecuaciones (2), (16)-(19), son las siguientes:

$$F_2(a, b, b', c, c', x, y) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(a)_m (b)_m x^m}{m! (c)_m} {}_2F_1(a + m, b', c', y) \quad (20)$$

$$F_2(a, b, b', c, c', x, y) = \sum \frac{(a)_m (b)_m (b')_m}{m! (c)_m (c')_m} x^m {}_2F_1(a + m, b + m, c + m, y) \\ \times y^m {}_2F_1(a + m, b + m, c + m, x) \quad (21)$$

$$F_2(a, b, b', c, c', x, y) = \frac{1}{\Gamma(a)} \int_0^{\infty} e^{-t} t^{a-1} {}_1F_1(b, c, xt) {}_1F_1(b', c', ty) dt \quad (22)$$

La primera de ellas, (20), queda expresada en términos de una función de Gauss. La región de convergencia de esta representación es $|x| < 1$ e y irrestricto. Una representación similar puede obtenerse intercambiando las variable x por la y simultaneamente con el intercambio de los parámetros sin primar con los primados.

La representación dada por la ecuación (21) converge para todos los valores de los parámetros previendo que los argumentos sean complejos. En si, surgen restricciones mas fuertes cuando los argumentos se mueven sobre el plano complejo y en proximidades del eje real. En este trabajo nos restringiremos a argumentos imaginarios por lo que no nos preocuparemos de las mencionadas condiciones.

Una representación integral alternativa a la dada por (2) es la de la ecuación (22). Esta representación integral esta definida para $Re(a) > 0$ y no tiene restricciones sobre los argumentos. La mencionada restricción puede removerse cambiando la integración sobre el eje real y positivo por una integral en el plano complejo a lo largo de un contorno adecuado. Sin embargo, la integración en el plano complejo no es fácil de manejar en una estrategia de cálculo numérico. En nuestro caso, el parámetro a tiene parte real distinta de cero por lo cual estamos dentro de la definición dada por la ecuación (22).

En la Figura 1 se muestra los cálculos realizados con argumentos puramente imaginarios. En particular, se consideran cargas Z_1 y Z_2 idénticas $Z_1 = Z_2 = 1$. En la columna izquierda se considera $v_1 = v_2 = 0.6$ mientras que en la derecha el valor correspondiente es $v_1 = v_2 = 1.2$. Los valores de la variable x se fijan en 0.1, 0.5 y 1. En la figura se muestran las distintas representaciones para la función F_2 como función de iy , con y variando entre 0 y 4. Para los casos $|x| < 1$, puede verse que la serie de potencias resulta útil solo para valores extremadamente chicos de $|y|$. Para el caso $|x| = 1$ la serie de potencias ya no puede ser utilizada ya que resulta divergente para cualquier valor de $|y|$. En todos los casos presentados y en la región en que la serie de potencias converge se utilizaron entre 90 y 500 términos dependiendo esto de la región en que se realizó el cálculo. Puede verse que tanto la expansión dada por la ecuación (20), como las dadas por las ecuaciones (21) y (22) convergen. Esto puede hacerse evidente a partir de la utilización de una de las

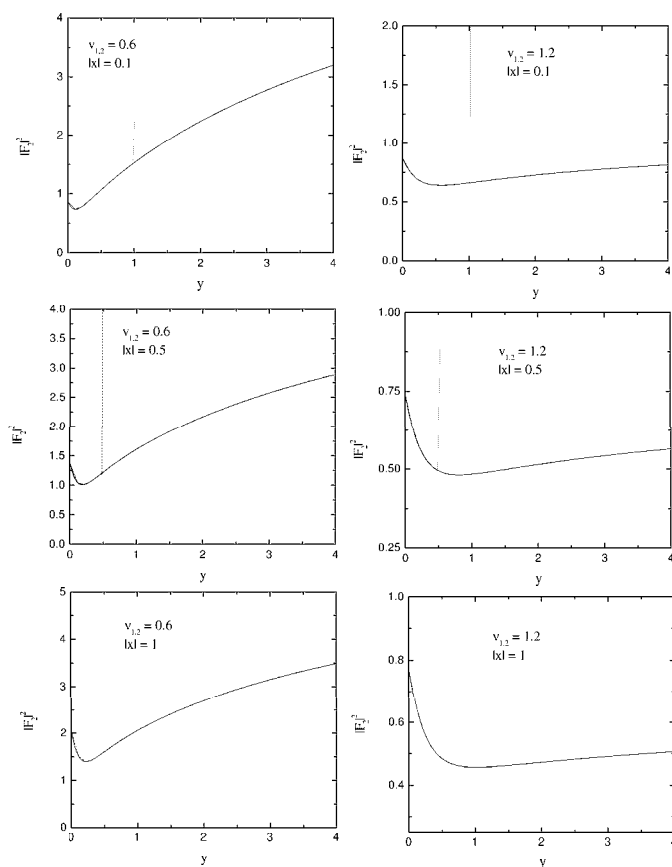


Figure 1: Modulo cuadrado de la función F_2 para valores fijos de los parámetros y $x=0.1$ i, 0.5 i, i y como función de y y con y variando entre 0 y 4 . Representaciones: puntos serie doble de potencias, punto y rayas: expansion en una función de Gauss, rayas: expansión en términos de dos funciones de Gauss, línea llena representación integral en términos de funciones de Kummer

continuaciones analíticas de la función de Gauss:

$$\begin{aligned}
 {}_2F_1(a, b, c, z) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)} (-z)^{-a} {}_2F_1(a, 1-c+a, 1-b+a, z^{-1}) \\
 &+ \frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)} (-z)^{-b} {}_2F_1(b, 1-c+b, 1-a+b, z^{-1}) \quad (23)
 \end{aligned}$$

con $a - b \neq \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ y $|\arg(-z)| < \pi$. El uso de esta relación en la ecuación (20) nos permite extender la validez de la serie a valores arbitrariamente grandes de $|y|$

$$\begin{aligned}
 F_2(a, b, b', c, c', x, y) &= \frac{\Gamma(c')}{\Gamma(b')} (-y)^{-a} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(a)_m (b)_m x^m \Gamma(b' - a - m)}{m! (c)_m \Gamma(c' - a - m)} \\
 &\quad \times (-y)^{-m} {}_2F_1(a, 1 - c' + a + m, 1 - b' + a, y^{-1}) \\
 &\quad + \frac{\Gamma(c') \Gamma(a - b')}{\Gamma(a) \Gamma(c' - b')} (-y)^{-b} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(a - b')_m (b)_m x^m}{m! (c)_m} \\
 &\quad \times {}_2F_1(b', 1 - c' + b', 1 - a - m + b', y^{-1})
 \end{aligned}$$

Sin embargo, no es posible, mediante esta representación, extender el rango de validez en la variable x más allá del 1. Cabe mencionar que para valores de x entre 0 y 0.9 bastan unos 40 términos para lograr la convergencia de la serie. Esto significa, que dentro de la región de validez la convergencia es muy rápida. Esto hace ésta definición muy ventajosa en comparación con la serie de potencias doble al momento de realizar cálculos numéricos.

Es posible usar la relación (23) en la ecuación (21). Esta nos lleva a un total de cuatro términos que nos permiten evaluar la función F_2 para valores arbitrariamente grandes de $|x|$ e $|y|$.

La diferencia observada en los cálculos presentados en la Figura 1 entre la integración numérica de la ecuación (22) y la expansión dada por la ecuación (21) es menor a un 2%. Para la evaluación numérica de la integral se eligió un método de tipo Gaussiano ya que es más rápido que un método adaptivo. La integral involucra la evaluación de la función de Kummer con argumento imaginario y parámetros complejos. Estas funciones oscilan a lo largo de todo el intervalo de integración por lo cual se probó con diferentes métodos de integración. Por una cuestión de eficiencia se optó por el método de Gauss ya que el mismo es más conveniente dado el gran número de evaluaciones de funciones involucradas. Para la evaluación de las funciones de Gauss se utilizaron rutinas en Fortran desarrolladas dentro de nuestro grupo de trabajo y se contrastaron nuestros resultados con los obtenidos a partir del uso del programa comercial Mathematica 5.0.

En la Figura 2 se muestran los resultados de los cálculos realizados para $|x| = 5, 10$ como función iy para valores de $|y|$ entre 0 y 4. Los mismos valores de v_1 y v_2 son considerados. Bajo estas condiciones de cálculo, la expansión dada por la ecuación (20) deja de ser válida pues $|x| > 1$. En este caso solo la expansión (21) y la representación integral (22) siguen siendo válidas. Cuando $v_1 = v_2 = 0.6$ y $|x| = 5$ puede apreciarse que la integral y la expansión en dos funciones de Gauss presentan una diferencia del orden de un 6%, siendo esta la mayor discrepancia encontrada durante la comparación. En los casos restantes, en los cuales v_1 y v_2 son más grandes, los resultados obtenidos mediante ambos métodos arrojan resultados que difieren en menos de un 1%.

Aun cuando no están incluidos en la Figura 2, se hizo un chequeo adicional que permite verificar la validez de las tres representaciones dadas en las ecuaciones (20), (21) y (22) así como su convergencia. Para valores de $|y|$ menores que 0.9 puede utilizarse una

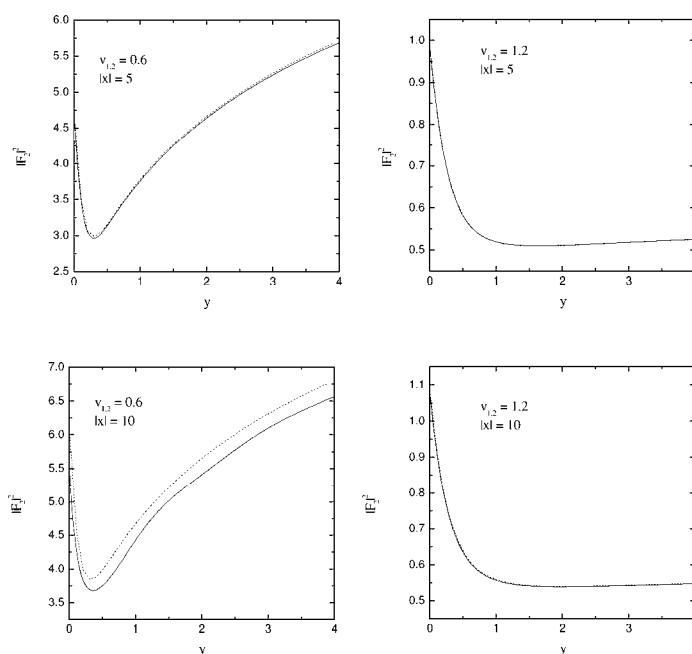


Figure 2: Modulo cuadrado de la función F_2 para valores fijos de los parámetros y $x=5$ i, 10 i y como función de y y con y variando entre 0 y 4. Representaciones: rayas: expansión en términos de dos funciones de Gauss, línea llena representación integral en términos de funciones de Kummer

representación del tipo (20) en la cual las variables x e y son intercambiadas, al igual que los parámetros. En este caso pueden obtenerse los valores de la función F_2 mediante tres representaciones diferentes. Las continuaciones analíticas de las funciones de Gauss son diferentes en los cálculos realizados con (20) y (21) y aun así el resultado obtenido por ambos métodos presenta una diferencia menor al 0.1 % con unos 40 términos para cada serie. Por otra parte estos resultados concuerdan con los obtenidos mediante la representación integral. El acuerdo observado presenta una diferencia menor del 1% para los cálculos $v_1 = v_2 = 1.2$ y $|x| = 5, 10$, del 2% para $v_1 = v_2 = 0.6$ y $|x| = 5$ y del 6% para $v_1 = v_2 = 0.6$ y $|x| = 10$.

4 CONCLUSIONES

Hemos discutido distintas representaciones existentes en la literatura matemática para la función de Appell F_2 . En particular hemos considerado rangos de valores para los parámetros de actual interés en física atómica. Para argumentos imaginarios, hemos encontrado que la expansión en términos de dos funciones de Gauss es la representación a utilizar, mientras que la serie de potencias y la expansión en términos de una función de Gauss pierden validez a medida que crecen los módulos de los argumentos.

Por otra parte, se estudió una representación integral por medio de una integración

numérica por un método Gaussiano. Como resultado, esta evaluación numérica probó ser muy eficaz y solo parece distorsionarse con el incremento del argumento. Posiblemente esto pueda corregirse mediante la implementación de un integrador adaptivo, a expensas de un mayor tiempo de cálculo.

Si bien en este trabajo se consideraron solo argumentos puramente imaginarios (situación a la que se llega mediante una notable simplificación en el proceso de autoionización de He por excitación por impacto de iones), el siguiente paso ahora se concentrará en la evaluación de argumentos complejos. En este caso, es de esperar que la expansión en términos de dos funciones de Gauss pierda validez ante determinados valores de parámetros y en las proximidades del eje real mayor que 1. Se estudiará entonces la posible validez de la representación integral como herramienta de cálculo en estas circunstancias. Por otra parte, bajo ciertas condiciones, las integrales obtenidas al modelar el proceso físico no coinciden de forma exacta con la Eq.(22), requiriéndose forzosamente una evaluación numérica. De esta manera, el presente estudio de la función de Appell F_2 puede servir de testigo para chequear que las rutinas de integración estén siendo correctamente implementadas.

5 AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido parcialmente pagado por el subsidio de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica PICT 99/03/06249 y PGI 24/F027 de la UNS.

6 REFERENCIAS

- [1] H. Exton, *Multiple hypergeometric functions and applications*, Ellis Horwood limited, NY (1976)
- [2] P. Appell and J. Kampé de Fériet, *Fonctions Hypergéométriques et Hypersphériques; Polynômes d' Hermite*, (Gauthier-Villars, Paris, 1926)
- [3] A. Erdelyi, W. Magnus, F. Oberhettinger y F. G. Tricomi, *Higher Transcendental Functions* Vol. I, II y III, McGraw-Hill, N.Y. (1953)
- [4] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover Publications Inc., New York, (1970)
- [5] F. D. Colavecchia, G. Gasaneo y J. E. Miraglia, *Comp. Phys. Comm.* **138**, 29 (2001)
- [6] F. D. Colavecchia y G. Gasaneo, *Comp. Phys. Comm.*, aceptado (2003)
- [7] S. Otranto and G. Gasaneo, *Jour. Phys. B*, enviado (2003); S. Otranto, C. R. Garibotti, F. D. Colavecchia y G. Gasaneo, *Phys. Rev. A*, **63**, 022713 (2001)