Riv. Mat. Univ. Parma (2) 11 (1970), 103-110

ALDO ASCARI (*)

Sul calcolo numerico degli integrali iterati della funzione degli errori. (**)

1. - Gli integrali iterati della funzione degli errori costituiscono una delle molte successioni di funzioni speciali obbedienti a relazioni di ricorrenza a tre termini. Si è sempre cercato di trarre profitto da queste relazioni per generare nel calcolo automatico le corrispondenti funzioni, eventualmente fronteggiando gli inconvenienti di instabilità numerica con espedienti vari, a partire dall'uso della ricorrenza a ritroso, introdotto da MILLER per le funzioni di BESSEL $J_n(x)$ [1]. GAUTSCHI ha dedicato estese ricerche a questo tema, giungendo ad una sistemazione pressochè definitiva [2]; gli integrali iterati della funzione degli errori sono uno dei casi da lui studiati più a fondo.

In questo lavoro è proposto, per tale famiglia di funzioni, uno schema di calcolo numerico non direttamente subordinato all'uso della ricorrenza, e quindi esente dalle relative difficoltà. Non si può peraltro escludere che esso dia luogo ad altri inconvenienti di carattere numerico; non si è potuta compiere alcuna esperienza in proposito, ed un confronto con l'algoritmo di GAUTSCHI potrebbe certo risolversi a tutto vantaggio di quest'ultimo. Tuttavia lo studio può presentare qualche altro motivo d'interesse: oltre a suggerire un ordine di idee forse applicabile in casi consimili, esso perviene a stabilire, per la famiglia di funzioni in esame, proprietà analitiche che non sembra siano state finora segnalate.

(*) Indirizzo: Montecatini Edison, Milano, Italia.
(**) Lavoro eseguito nell'ambito del Contratto di Ricerca n. 115.3050.0.5189 del C.N.R. (Analisi numerica e Calcolo automatico). — Ricevuto: 1-XII-1970.

2. – L'integrale iterato della funzione degli errori è designato generalmente con la notazione

$$i^n \operatorname{erfc} x ,$$

introdotta da HARTREE, al quale è dovuto un primo studio sistematico di questa famiglia di funzioni [3]. Tale notazione è però piuttosto ingombrante e sarà qui sostituita con il più semplice simbolo $F_n(x)$. La definizione da cui la generica funzione prende il nome è:

$$F_n(x) = \int_x^\infty F_{n-1}(\xi)\, d\xi \qquad (n = 0, 1, \ldots) , \tag{1}$$

per $x \geqslant 0$, con

$$F_{-1}(x) = 2\pi^{-1/2} \exp(-x^2) , \tag{2}$$

e quindi

$$F_0(x) = 2\pi^{-1/2} \int_x^\infty \exp(-\xi^2)\, d\xi = 1 - \operatorname{erf} x = \operatorname{erfc} x . \tag{3}$$

La normalizzazione è naturalmente arbitraria; quella adottata è la consueta, coerente con la definizione di $\operatorname{erf} x$.

La ricorrenza a tre termini cui F_n obbedisce è

$$F_{n+1}(x) + \frac{x}{n+1} F_n(x) - \frac{1}{2(n+1)} F_{n-1}(x) = 0 . \tag{4}$$

Consideriamo ora i polinomi ordinari di HERMITE, definibili ad esempio mediante l'appropriata formula di RODRIGUES:

$$H_n(x) = (-1)^n \exp x^2 \frac{d^n}{dx^n} \exp(-x^2) \qquad (n = 0, 1, \ldots), \tag{5}$$

da cui

$$H_0(x) = 1 , \qquad H_1(x) = 2x , \qquad \ldots ; \tag{6}$$

per essi vale invece la ricorrenza

$$H_{n+1}(x) - 2x H_n(x) + 2n H_{n-1}(x) = 0 . \tag{7}$$

Il legame fra le F_n e le H_n (intuibile anche dal confronto fra la (4) e la (7)) è posto in luce dall'osservazione che le due famiglie di funzioni costituiscono, insieme, il caso particolare della funzione del cilindro parabolico (di WHITTAKER) $D_\nu(z)$, per ν intero qualunque. Si ha infatti:

$$H_n(x) = 2^{n/2}\exp(-x^2/2)\,D_n(\sqrt{2}\,x) \qquad (n = 0, 1, \dots)\,, \tag{8}$$

$$F_n(x) = 2^{-(n-1)/2}\pi^{-1/2}\exp(-x^2/2)\,D_{-n-1}(\sqrt{2}\,x) \qquad (n = -1, 0, 1, \dots). \tag{9}$$

Ci proponiamo ora di ricavare fra le H_n e le F_n una relazione formale, e precisamente un sistema di forme bilineari mediante il quale il calcolo delle F_n (per $n \geqslant 1$, perchè naturalmente F_{-1} e F_0 devono essere calcolate a parte, come sarebbe necessario anche usando la (4)) può ricondursi a quello delle H_n e alla risoluzione di un sistema lineare.

Muoviamo a tale scopo dalle seguenti trasformate di LAPLACE rispetto alla variabile t:

$$\mathfrak{L}\left\{(4t)^{n/2}F_n\left(\frac{z}{2\sqrt{t}}\right)\right\} = p^{-1-(n/2)}\exp(-z\sqrt{p}) \qquad (n = 0, 1, \dots), \tag{10}$$

$$\mathfrak{L}\left\{\exp(t-z)\,F_0\left(\frac{z}{2\sqrt{t}} - \sqrt{t}\right)\right\} = \frac{\exp(-z\sqrt{p})}{p - \sqrt{p}}\,. \tag{11}$$

Si ha, formalmente,

$$\sum_{n=0}^{\infty} p^{-1-(n/2)}\exp(-z\sqrt{p}) = \frac{\exp(-z\sqrt{p})}{p-\sqrt{p}}\,,$$

e per antitrasformazione termine a termine secondo le (10) e (11):

$$\sum_{n=0}^{\infty}(4t)^{n/2}F_n\left(\frac{z}{2\sqrt{t}}\right) = \exp(t-z)\,F_0\left(\frac{z}{2\sqrt{t}} - \sqrt{t}\right)\,,$$

ossia, ponendo $u = 2\sqrt{t}$, $x = z/(2\sqrt{t})$,

$$\exp\big((1/4)u^2 - ux\big)F_0(x - \tfrac{1}{2}u) = \sum_{n=0}^{\infty} F_n(x)\,u^n. \tag{12}$$

Si è così ottenuta la funzione generatrice delle $F_n(x)$; prima di servircene, verifichiamone la validità. Dalla (9) si ricava

$$\frac{F_{n-1}(x)}{F_n(x)} = \sqrt{2}\,\frac{D_{-n}(\sqrt{2}\,x)}{D_{-n-1}(\sqrt{2}\,x)}\,;$$

il limite di questo rapporto per $n \to +\infty$ si può determinare mediante lo sviluppo asintotico di $D_\nu(z)$, dovuto a CHERRY (cfr., per esempio, [4]), valido per $|z|$ limitato, $|\nu| \to \infty$, $\operatorname{Re}\nu < 0$: si ottiene

$$\log \frac{D_{-n}(z)}{D_{-n-1}(z)} \sim \frac{1}{2}\,[(n+1)\log(n+1) - n\log n] - \frac{1}{2} + z\left(\sqrt{n+1} - \sqrt{n}\right) =$$

$$= \log(n+1) + \log\left(1 + \frac{1}{n}\right)^n - \frac{1}{2} + \frac{z}{\sqrt{n+1} + \sqrt{n}}\,,$$

che tende a $+\infty$ con n, in virtù del primo termine (il limite della somma degli altri tre è $1/2$). Dunque

$$\lim_{n\to\infty} \frac{F_{n-1}(x)}{F_n(x)} = +\infty\,,$$

e quindi la serie a secondo membro della (12) è una funzione intera di u, per ogni $x \geqslant 0$. E poichè il primo membro è egualmente una funzione intera, e la (12) è palesemente verificata per $u = 0$, lo sviluppo (12) è valido senza restrizioni. In particolare per $u = 1$ esso dà

$$\sum_{n=0}^{\infty} F_n(x) = \exp\big((1/4) - x\big)\cdot F_0\left(x - \frac{1}{2}\right),$$

e questo a sua volta per $x = 0$ dà

$$\sum_{n=0}^{\infty} F_n(0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n\,\Gamma\big((n/2)+1\big)} = \exp(1/4)\cdot F_0\left(-\frac{1}{2}\right) = \exp(1/4)\cdot\left(1 + \operatorname{erf}\frac{1}{2}\right),$$

risultato deducibile anche dallo sviluppo di $\operatorname{erf} x$.

Consideriamo ora la funzione generatrice dei polinomi di HERMITE:

$$\exp\big(ux - (1/4)\,u^2\big) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n\,n!} H_n(x)\,u^n\,. \tag{13}$$

Il confronto fra i primi membri delle (12) e (13) suggerisce di eseguire il prodotto (secondo CAUCHY) delle serie a secondo membro: si ottiene

$$F_0\left(x - \frac{1}{2}\,u\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(x)\,u^n, \tag{14}$$

con

$$\varphi_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{2^k k!} H_k(x) F_{n-k}(x) . \tag{15}$$

D'altra parte, mediante sviluppo di TAYLOR si ottiene

$$F_0\left(x - \frac{1}{2} u\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{1}{2} u\right)^n \frac{\mathrm{d}^n F_0(x)}{\mathrm{d}x^n}$$

e poichè $\mathrm{d}F_0/\mathrm{d}x = -F_{-1}$ (cfr. le (2) e (3)):

$$F_0\left(x - \frac{1}{2} u\right) = F_0(x) - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{1}{2} u\right)^n \frac{\mathrm{d}^{n-1} F_{-1}(x)}{\mathrm{d}x^{n-1}} =$$

$$= F_0(x) + 2\pi^{-1/2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \frac{1}{2^n n!} \frac{\mathrm{d}^{n-1} \exp(-x^2)}{\mathrm{d}x^{n-1}} u^n$$

cioè, per la formula di RODRIGUES (5) dei polinomi di HERMITE,

$$F_0\left(x - \frac{1}{2} u\right) = F_0(x) + 2\pi^{-1/2} \exp(-x^2) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} H_{n-1}(x) u^n. \tag{16}$$

Dal confronto fra la (14) e la (15) si trae

$$\varphi_0(x) = F_0(x) , \tag{17}$$

$$\varphi_n(x) = 2\pi^{-1/2} \exp(-x^2) \cdot \frac{1}{2^n n!} H_{n-1}(x) \qquad (n = 1, 2, \ldots) . \tag{18}$$

Per $n = 0$ la (15) si riduce infatti alla (17). Per $n \geqslant 1$, identificando la (15) con la (18) si ottiene

$$\sum_{k=0}^{n} \frac{1}{2^k k!} H_k(x) F_{n-k}(x) = 2\pi^{-1/2} \exp(-x^2) \cdot \frac{1}{2^n n!} H_{n-1}(x) . \tag{19}$$

Questa è l'annunciata relazione bilineare fra i polinomi di HERMITE H_n e gli integrali iterati della funzione degli errori F_n. Ricordando ancora la (2) si può riscriverla (omettendo l'argomento x)

$$\sum_{k=0}^{n} \frac{1}{2^k k!} H_k F_{n-k} = \frac{1}{2^n n!} H_{n-1} F_{-1} \tag{20}$$

od anche, tornando mediante le (8) e (9) alla funzione del cilindro parabolico,

$$\sum_{k=0}^{n} \frac{1}{k!} D_k D_{k-n-1} = \frac{1}{n!} D_0 D_{n-1} . \tag{21}$$

3. – Per il calcolo numerico delle F_n conviene anzitutto riscrivere la (20) così:

$$\sum_{k=0}^{n-1} \frac{1}{2^k k!} H_k F_{n-k} = \frac{1}{2^n n!} (H_{n-1} F_{-1} - H_n F_0) . \tag{22}$$

Questa relazione, scritta per $n = 1, 2, \ldots, N$, dà luogo a un sistema di N equazioni lineari nelle N incognite $F_1, F_2, \ldots, F_N$, riguardo al quale si può osservare:

I. Per valutare i termini noti è necessario, come si è già notato, valutare indipendentemente, per l'argomento x assegnato, F_{-1} ed F_0 (cioè la funzione esponenziale e la funzione degli errori ordinaria).

II. Per valutare coefficienti e termini noti è inoltre necessario valutare i polinomi di HERMITE fino al grado N. Ciò può essere fatto agevolmente, ad esempio, con la ricorrenza (7) (e i valori iniziali (6)), che non dà luogo ad instabilità numerica, perchè H_n non ne è una soluzione « distinta », secondo PINCHERLE (cfr., per esempio, [2]).

III. Il sistema è triangolare: la matrice dei coefficienti può essere scritta

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ a_1 & 1 & 0 & \ldots & 0 \\ a_2 & a_1 & 1 & \ldots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{N-1} & a_{N-2} & a_{N-3} & \ldots & 1 \end{bmatrix}$$

(e quindi $\det A = 1$), con

$$a_k = \frac{1}{2^k k!} H_k .$$

Nonostante tale semplicità, la sua risoluzione numerica può riuscire assai delicata, per la fondamentale difficoltà costituita dal rapido decremento di $|F_n(x)|$ al crescere di n. In particolare, la sua risoluzione per sostituzione progressiva (facendo nella (22) $n = 1$ e ricavandone F_1, indi facendovi $n = 2$ e ricavandone F_2, e così via) coinciderebbe essenzialmente con l'uso della ricorrenza (4) per n crescente, e quindi sarebbe soggetta alle stesse difficoltà. Si deve cercare una risoluzione che dia $F_1 \ldots, F_N$ simultaneamente, oppure in ordine inverso. Potrebbe riuscire vantaggioso un procedimento fondato sull'inversione della matrice A; infatti, scritta questa nella forma

$$A = I + L ,$$

con I unitaria, risulta

$$A^{-1} = I - L + L^2 - \ldots + (-1)^{N-1} L^{N-1}, \tag{23}$$

essendo $L^n = 0$ per $n \geqslant N$. La (23) può essere costruita con una iterazione di HORNER:

$$M_j = I - LM_{j-1} \qquad (j = 1, 2, \ldots, N-1), \tag{24}$$

partendo da $M_0 = I$, oppure da $M_1 = I - L = 2I - A$. Si avrà $M_{N-1} = M_N = \ldots = A^{-1}$, ciò che offre la possibilità di raffinare il risultato protraendo la (24) fino al raggiungimento di una soddisfacente convergenza numerica. Infatti, viceversa, se la (24) converge ad una matrice M, è necessariamente $M = I - LM$, cioè

$$M = (I + L)^{-1} = A^{-1}.$$

Dal punto di vista numerico, è probabilmente favorevole la circostanza che, per una disuguaglianza di CRAMER (cfr., per esempio, [5]), risulta

$$|a_k| < (11/10)\{\exp(x^2/2)\}/(2^{k/2}\sqrt{k!}) .$$

IV. La matrice A^{-1} è della stessa forma di A, cioè

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ b_1 & 1 & 0 & \ldots & 0 \\ b_2 & b_1 & 1 & \ldots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ b_{N-1} & b_{N-2} & b_{N-3} & \ldots & 1 \end{bmatrix},$$

con $b_1 = -a_1$, $b_2 = a_1^2 - a_2$, ... Noti $b_1, \ldots, b_N$, e posto per uniformità $b_0 = 1$, avendo presente il termine noto della (22), si ottiene

$$F_n = b_n F_0 + \frac{1}{2} F_{-1} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{1}{n-k} a_{n-k-1} b_k \qquad (n = 1, \ldots, N),$$

che rappresenta, formalmente, la soluzione dell'equazione alle differenze finite (4) con le condizioni iniziali (2) e (3).

Bibliografia.

[1] *Bessel Functions*, Part. II: *Functions of Positive Integer Order*, Brit. Ass. Advanc. Sci., Math. Tables X, Cambridge Univ. Press, Cambridge 1952.

[2] W. Gautschi, *Computational aspects of three-term recurrence relations*, Siam Rev. **9** (1967), 24-82.

[3] D. R. Hartree, *Some properties and applications of the repeated integrals of the error function*, Mem. Proc. Manchester Lit. Philos. Soc. **80** (1936), 85-102.

[4] A. Erdélyi, *Higher Trascendental Functions*, Vol. 2, McGraw-Hill, New York 1953 (cfr. p. 123).

[5] G. Sansone, *Sviluppi in Serie di Funzioni Ortogonali*, 3ª edizione, Zanichelli, Bologna 1952 (cfr. p. 353).

Riassunto.

Il calcolo numerico degli integrali iterati della funzione degli errori presenta difficoltà se eseguito mediante la ricorrenza cui tale famiglia di funzioni soddisfa. Si propone un procedimento alternativo, non ricorrente, basato su una relazione bilineare fra queste funzioni e i polinomi di Hermite dedotta nel presente lavoro.

Abstract.

A method is proposed for the numerical evaluation of the repeated integrals of the error function, which avoids the use of the three-term recurrence relation. The method is based on a bilinear relation, derived in the paper, between these functions and the Hermite polynomials.

* * *