
Brieven

Over de erfc-functie in 'Van Edelman naar Bruggeman'

In het verhelderende en instructieve artikel van Theo Olsthoorn 'Van Edelman naar Bruggeman', in *Stromingen*, jrg 12, nr 1, pag 5–12, wordt een verband gelegd tussen de formules van Edelman en de n-de geïteerde errorfunctie ($i^n \text{erfc}$), zoals gegeven door Bruggeman (1999).

De functie $i^n \text{erfc}(u)$ kan door middel van een recurrente betrekking gebaseerd op $i^{n-1} \text{erfc}$ en $i^{n-2} \text{erfc}$ gevonden worden, door het verschil te nemen van deze twee functies, beide nog vermenigvuldigd met een factor (respectievelijk u/n en $1/(2n)$). Als startfunctie heeft men nodig $i^0 \text{erfc}(u) = \text{erfc}(u)$ en $i^{-1} \text{erfc}(u) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-u^2)$. Zoals Theo

Olsthoorn al verwoordt in de appendix is het nodig om over een nauwkeurige implementatie van de erfc-functie te beschikken. Hij gebruikt de bij velen bekende implementatie uit Abramowitz en Stegun (1964, (7.1.26)), met een *absolute* fout kleiner dan $1,5 * 10^{-7}$ over het gehele argument-bereik. Dat lijkt goed, maar het kan veel beter voor weinig meer rekenwerk. Vanuit de wiskundige literatuur over dit onderwerp wil ik hier de hydrologische gemeenschap attenderen op een numerieke implementatie van de erfc-functie met een *relatieve* fout kleiner dan $1,0 * 10^{-11}$, die ik zelf al vele jaren tot volle tevredenheid gebruik (Veling (1993)). Extra relatieve precisie is vooral van belang als men het verschil van twee erfc-functies nodig heeft, bijvoorbeeld bij de analytische oplossing van een convectie-diffusieprobleem met een blok-belasting op de rand, of bij inverse modellering waarbij waarnemingen in de staart meegenomen worden.

Ik verwijst hier naar de Fortran-code van

een numerieke approximatie die al lang geleden gegeven werd door Cody (Cody (1969)). Deze code zal op de website van de NHV, onder het kopje Stromingen worden weergegeven, en kan ook opgehaald worden via <http://www.hydrology.citg.tudelft.nl/ERRORF.TXT>.

Ook het programmapakket Matlab maakt gebruik van dit algoritme. Het algoritme bevat tevens een geschaalde versie van de erfc-functie, namelijk $\exp(-u^2) \text{erfc}(u)$, $u \geq 0$, en $\exp(-u^2)(2 - \text{erfc}(u))$, $u < 0$.

Op <http://gams.nist.gov/serve.cgi/ModuleComponent/9265/Fullsource/NETLI/B/erf> staat een nog uitgebreidere versie met een relative precisie van $1,0 * 10^{-18}$.

Dit soort implementaties kan gevonden worden via de website <http://www.netlib.no/netlib/master/readme.html> en ook via <http://www.nr.com> (*Numerical Recipes*). Meer informatie over methoden om de error-functie te berekenen kan worden gevonden in het boek van der Laan en Temme (1984).

Referenties

- Abramowitz, M. en I.A. Stegun (1964)** (red) Handbook of Mathematical Functions; National Bureau of Standards, Washington, D.C.
- Bruggeman, G.A. (1999)** Analytical Solutions of Geohydrological Problems; Elsevier, Amsterdam.
- Cody, W.J. (1969)** Rational Chebyshev Approximations for the Error Function; in: *Mathematics of Computation*, vol 23, pag 631–637.
- Olsthoorn, T.N. (2006)** Van Edelman naar Bruggeman; in: *Stromingen*, jrg 12, nr 1, pag 5–12.
- Laan, C.G. van der en N.M. Temme (1984)** Calculation of special functions: the gamma function, the exponential integral and error-like functions; CWI

Tract, vol 10; Centre for Mathematics and
Computer Science, Amsterdam.

Veling, E.J.M. (1993) ZEROCD and
PROFCD, Description of two programs to
supply quick information with respect to
the penetration of tracers into the soil;
Technical Report nr. 725206009, Natio-
nal Institute of Public Health and Envi-
ronmental Protection, Bilthoven, The
Netherlands.

E.J.M. Veling

Technische Universiteit Delft,
Faculteit van Civiele Techniek
en Geowetenschappen,
Vakgroep Watermanagement,
Postbus 5048, 2600 GA Delft

Reactie van T.N. Olsthoorn

Ik ben blij met deze aanvulling: het is altijd
goed om ook verder dan de 'bijbel' Abramo-
witz en Stegun te kijken.