

**stichting
mathematisch
centrum**



LR 3.5

augustus 1971

SPECIALE FUNCTIES

RA

2e boerhaavestraat 49 amsterdam

Printed at the Mathematical Centre, 49, 2e Boerhaavestraat, Amsterdam.

The Mathematical Centre, founded the 11-th of February 1946, is a non-profit institution aiming at the promotion of pure mathematics and its applications. It is sponsored by the Netherlands Government through the Netherlands Organization for the Advancement of Pure Research (Z.W.O), by the Municipality of Amsterdam, by the University of Amsterdam, by the Free University at Amsterdam, and by industries.

0.1. Lijst van pagina's

Om na te gaan of een exemplaar al dan niet volledig is, kan gebruik gemaakt worden van onderstaande tabel.

LR 3.5.1	bestaat uit 3 blz.	[AUG 1971]
LR 3.5.2	bestaat uit 3 blz.	[AUG 1971]
LR 3.5.3	bestaat uit 3 blz.	[APRIL 1972]
LR 3.5.4	bestaat uit 3 blz.	[APRIL 1972]
LR 3.5.5	bestaat uit 3 blz.	[APRIL 1972]
LR 3.5.6	bestaat uit 3 blz.	[AUG 1972]
LR 3.5.7	bestaat uit 4 blz.	[AUG 1972]

Deze blz. zal bij elke aanvulling en/of wijziging worden vervangen.

0.2. Inhoudsopgave

0. Algemeen

0.1. Lijst van pagina's

0.2. Inhoudsopgave

LR 3.5.1	gamma	door N.M. Temme
LR 3.5.2	erf	door N.M. Temme
LR 3.5.3	incongam	door N.M. Temme
LR 3.5.4	k0	door N.M. Temme
LR 3.5.5	incbeta	door N.M. Temme en R. Hofhuis
LR 3.5.6	gam	door N.M. Temme
LR 3.5.7	ka	door N.M. Temme

Voor $|x| < 35$ is de relatieve nauwkeurigheid kleiner dan 10^{-10} ;
voor $35 \leq |x| \leq 306$ kleiner dan 10^{-8} .

Het is niet zinvol de procedure te gebruiken voor $|x| > 306$, aangezien in dat geval gamma (x) groter is dan het op de EL X-8 grootst mogelijke, nog voorstelbare getal (ongeveer 10^{+628}).

Voor $x = 0, -1, -2, -3, \dots$ wordt als resultaat 10^{+628} afgeleverd.

Literatuur

Abramowitz, M. and Stegun, I.A. ;
Handbook of Mathematical Functions.
National Bureau of Standards.

Algoltekst:

```

real procedure gamma(x); value x; real x;
begin if x < .5 then gamma:= if x = entier(x) then  $\frac{1}{x+628}$  else
 $\frac{3.1415}{92653} \frac{590}{\gamma(1-x)/\sin(3.1415 \frac{92653}{590} x)}$  else
begin real y,v,w,sum; integer k,n;
k:= if x > 6 then 0 else -entier(x-6);
y:= x + (if k > 0 then k else 0);
v:= y × y; sum:=  $-.29550 \frac{65359}{477} \frac{1}{y}$ ;
for w:=
 $\frac{.64102}{.84175} \frac{56410}{08417} \frac{256}{508} \frac{1}{y^2}, -.19175 \frac{26917}{80952} \frac{527}{381} \frac{1}{y^2},$ 
 $\frac{.79365}{.83333} \frac{07936}{33333} \frac{508}{333} \frac{1}{y^3}, -.27777 \frac{77777}{778} \frac{1}{y^2},$ 
do
sum:= sum/v + w; w:= 1;
for n:= k-1 step -1 until 0 do w:= (n+x)×w;
gamma:=  $\exp((y-.5) \times \ln(y) + \frac{\text{sum}}{y - y} + .91893 \frac{85332}{047})/w$ 
end
end gamma;

```

erf

auteur: N.M. Temme (MC)

Onderwerp

berekening van de errorfunctie $\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$ en de complementaire errorfunctie $\text{erfc}(x) = 1 - \text{erf}(x)$ voor reële waarden van x .

Gebruiksaanwijzing:

deklaratie: real procedure erf(x, erfc, toler);
 value x, toler; real x, toler;

parameters:

x: het argument van de errorfuncties;

toler: de gewenste relatieve nauwkeurigheid;
 de waarde van toler mag niet kleiner zijn dan de machine-
 nauwkeurigheid ($2 \uparrow (-40) \simeq 10 \uparrow (-12)$ voor de EL X-8).

erfc: < variable > ;
 krijgt de waarde van erfc(x);

erf : krijgt de waarde van erf(x);

Gebruikte procedures: geen.Voorbeeld van een aanroep:

p: = erf (1, q, $10 \uparrow (-12)$); r: = erf (5, s, $10 \uparrow (-12)$);
geeft als resultaat

$p = + . 84270 \quad 07929 \quad 513; \quad q = + . 15729 \quad 92070 \quad 487;$
 $r = + . 99999 \quad 99999 \quad 982; \quad s = + . 15374 \quad 59794 \quad 424_{10}^{-11};$

Methode en prestaties

Voor $|x| < 1$ wordt eerst $\text{erf}(x)$ berekend d.m.v. een Taylor ontwikkeling van deze functie.

Voor $|x| > 1$ wordt eerst $\text{erfc}(x)$ berekend d.m.v. een kettingbreuk ontwikkeling van deze functie.

Voor details wordt verwezen naar de literatuur, waarin eveneens een FORTRAN-programma staat vermeld.

De nauwkeurigheid hangt naast de op te geven waarde van toler , voornamelijk af van de precisie waarmee de exponentiële functie wordt berekend. Voor grote waarden van x wordt de opgegeven nauwkeurigheid niet behaald. Met $\text{toler} = 10^{-12}$ kan echter altijd een relatieve precisie van 10^{-10} worden behaald, tenzij $x > 37.6$; voor deze laatste waarden van x wordt $\text{erf} = 1$, $\text{erfc} = 0$ afgeleverd, aangezien dan $\text{erfc}(x)$ kleiner is dan het op de EL X-8 kleinst mogelijke, nog voorstelbare positieve getal.

Literatuur

Irene A. Stegun and Ruth Zucker

Automatic Computing Methods for Special Functions.

Journal of Res. of NBS - B Vol. 74 B, No.3.

Algoltekst:

```

real procedure erf(x,erfc,toler); value x,toler; real x,erfc,toler;
begin   if x = 0      then begin erf:= 0; erfc:= 1 end else
        if x > 37.6   then begin erf:= 1; erfc:= 0 end else
        if x < -5.06  then begin erf:= -1; erfc:= 2 end else
        begin   real bn,d,f,fn,fnm1,fnm2,gn,gnm1,gnm2,prev,pwr;
                integer an,wn;
                pwr:= 2 × x × x; d:= exp(-pwr/2) × 1.1283 79167 096;
                if abs(x) < 1 then
                begin   f:= 0; gn:= 1;
                        for wn:= 3,2 + wn while gn > toler do
                        begin gn:= pwr × gn / wn; f:= f + gn end;
                        f:= erf:= (1 + f) × x × d; erfc:= 1 - f
                    end else
                begin   fnm2:= prev:= 0; f:= gnm2:= 1; fnm1:= 2 × x;
                        gnm1:= 1 + pwr; f:= fnm1 / gnm1; bn:= 4 + gnm1;
                        for wn:= 1, 2 + wn while 1 - prev / f > toler do
                        begin   an:= wn × wn + wn;
                                fn:= bn × fnm1 - an × fnm2;
                                gn:= bn × gnm1 - an × gnm2;
                                prev:= f; f:= fn/gn; fnm2:= fnm1; gnm2:= gnm1;
                                fnm1:= fn; gnm1:= gn; bn:= 4 + bn
                            end;
                        erfc:= (if prev < f then f else prev) × d / 2 +
                                (if x < 0 then 2 else 0); erf:= 1 - erfc
                    end
                end
        end erf; end

```

auteur: N.M. Temme (MC)

incomgam

Onderwerp:

berekening van de incomplete gammafuncties.

$$\gamma(a,x) = \int_0^x e^{-t} t^{a-1} dt \quad \text{en} \quad \Gamma(a,x) = \int_x^\infty e^{-t} t^{a-1} dt$$

voor reële waarden van a en x ; $x \geq 0$, $a > 0$.

$$\gamma(a,x) + \Gamma(a,x) = \Gamma(a)$$

Gebruiksaanwijzing:

deklaratie : procedure incomgam (x, a, klgam, grgam, gam, eps);
value x, a, eps; real x, a, klgam, grgam, gam, eps;
 <procedure body>;

parameters :

x, a : zie definitie van $\gamma(a,x)$ en $\Gamma(a,x)$;
 klgam : <variable>; krijgt de waarde $\gamma(a,x)$;
 grgam : <variable>; krijgt de waarde $\Gamma(a,x)$;
 gam : <expression>; hiervoor dient de waarde van $\Gamma(a)$ ingevuld te worden (zie eventueel LR 3.5.1.);
 eps : de gewenste relatieve nauwkeurigheid; de waarde van eps mag niet kleiner zijn dan de machine-nauwkeurigheid
 ($2 \uparrow (-40) \approx 10^{-12}$ voor de ELX 8);

Gebruikte procedures: geenVoorbeeld van een aanroep:

incomgam (3, 4, klgam, grgam, 6, 2↑ (-40)) geeft als resultaat

$$\text{klgam} = .211\ 660\ 866\ 731\ 5 \times 10^{+1}$$

$$\text{grgam} = .388\ 339\ 133\ 268\ 5 \times 10^{+1}$$

(de werkelijke waarde van grgam is

$$\Gamma(3,4) = .388\ 339\ 133\ 269\ 3\ 4 \dots \times 10^{+1}).$$

Methode en prestaties

Voor $x \leq (\text{if } a < 3 \text{ then } 1 \text{ else } a)$ wordt eerst $\gamma(a,x)$ berekend en daarna $\Gamma(a,x) = \Gamma(a) - \gamma(a,x)$;

voor grotere waarden van x wordt eerst $\Gamma(a,x)$ berekend en daarna $\gamma(a,x) = \Gamma(a) - \Gamma(a,x)$.

De functies worden berekend m.b.v. rationale approximaties; voor kleine x via de Padé-approximatie die correspondeert met de Taylor ontwikkeling van $\gamma(a,x)$; voor grotere waarden van x via de Padé-ontwikkeling die correspondeert met de asymptotische ontwikkeling van $\Gamma(a,x)$ voor $x \rightarrow \infty$. Voor details wordt verwezen naar de literatuur.

De nauwkeurigheid hangt, naast de op te geven waarde van eps , eveneens af van de nauwkeurigheid waarmee $\text{gam} (= \Gamma(a))$ en de exponentiele functie worden berekend.

Voor al voor grote waarden van a en x wordt de nauwkeurigheid eps niet behaald.

Literatuur:

Y.L. Luke, Evaluation of the gammafunction by means of Padé approximations. SIAM Journal Math. Anal. Vol. 1, No. 2 (1970)

Algoltekst :

```

procedure incomgam(x,a,klgam,grgam,gam,eps);
value x,a,eps; real x,a,klgam,grgam,gam,eps;
begin   real c0, c1, c2, d0, d1, d2, x2, ax, p, q, r, s, r1, r2;
        integer n;
        s:=exp(-x + a × ln(x));
        if x < (if a < 3 then 1 else a) then
        begin   x2:= x × x; ax:= a × x; d0:= 1; p:= a; c0:= s;
                d1:=(a+1)×(a+2-x); c1:=((a+1) × (a+2)+x) × s;
                r2:= c1/d1;
                for n:=1, n+1 while abs((r2-r1)/r2) > eps do
                begin   p:= 2 + p; q:=(p+1) × (p×(p+2)-ax);
                        r:= n × (n+a) ×(p+2) ×x2;
                        c2 := (q×c1 + r×c0)/p; d2:=(q×d1 +r×d0)/p;
                        r1:=r2; r2:=c2/d2;
                        c0:=c1; c1:=c2; d0:=d1; d1:=d2
                end; klgam:= r2/a; grgam:= gam - klgam
        end else
        begin   c0:=a×s; c1:=(1+x)× c0; q:= x + 2 - a;
                d0:= x; d1:= x × q; r2:= c1/d1;
                for n:=1, n+1 while abs((r2-r1)/r2)>eps do
                begin   q:= 2 + q; r:= n × (n+1-a);
                        c2:= q×c1-r×c0; d2:= q×d1-r×d0;
                        r1:=r2; r2:=c2/d2;
                        c0:=c1; c1:=c2; d0:=d1; d1:=d2
                end; grgam:= r2/a; klgam:= gam - grgam
        end
end incomgam;

```

k0

auteur: N.M. Temme (MC)

Onderwerp:

Berekening van de gemodificeerde Besselfuncties $K_0(x)$ en $K_1(x)$ voor reële positieve waarden van het argument.

Gebruiksaanwijzing:

deklaratie: real procedure k0(x, k1); value x; real x, k1; <body>;

parameters:

x : het argument van de Besselfuncties;

k1 : <variable>;

krijgt de waarde van $K_1(x)$;

k0 : krijgt de waarde van $K_0(x)$.

Gebruikte procedures: geen.

Voorbeeld van een aanroep:

K [0] := k0(1, K[1]) geeft als resultaat

K [0] = .421 02443 82402;

K [1] = .601 90723 01970.

Methode en prestaties:

Voor $0 < x \leq 2.5$ worden K_0 en K_1 berekend via een reeksontwikkeling (zie Abramowitz formule 9.6.11). Voor $x > 2.5$ worden de functies berekend met behulp van een recurrente betrekking (13.4.15) voor de confluyente hypergeometrische functies. K_0 en K_1 kunnen als dergelijke functies opgevat worden (13.6.21). De hypergeometrische functies $U(k + \frac{1}{2}, 1, x)$ kunnen voor $k = 0, 1, 2, \dots$ berekend worden met terugwaartse recursie (methode van Miller) via (13.4.15). Als normeringsrelatie wordt gebruikt

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k+\frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{1}{2})} \frac{\Gamma(k+\frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{1}{2})k!} U(k+\frac{1}{2}, 1, x) = x^{-\frac{1}{2}}.$$

Als $U(\frac{1}{2}, 1, x)$ en $U(3/2, 1, x)$ bekend zijn kunnen K_0 en K_1 gevonden worden door gebruik te maken van enkele recurrente betrekkingen voor $U(a, b, x)$. De methode van berekening wordt voor een soortgelijke klasse van functies uitvoerig beschreven in een TW-rapport "Numerical evaluation of functions arising from transformations of formal series", dat binnenkort zal verschijnen.

De relatieve nauwkeurigheid is kleiner dan 10^{-11} .

De tijdsduur voor de ELX8 bedraagt maximaal 0.05 seconde.

De overige gemodificeerde Besselfuncties $K_n(x)$ kunnen voor $n \geq 2$ berekend worden uit

$$K_{n+1}(x) = K_{n-1}(x) + \frac{2n}{x} K_n(x)$$

Deze recursie (met toenemende n) is numeriek stabiel.

Literatuur:

(voor nadere omschrijving van deze Besselfuncties)

Abramowitz, M. and Stegun, I.A.
Handbook of Mathematical Functions,
National Bureau of Standards.

Algoltekst:

```

real procedure k0(x,k1); value x; real x,k1;
begin   real c,d,r,s,sum0,sum1,t,term,t0,t1;
        integer k,nu;
        if x < 2.5 then
          begin   sum0:= d:= ln(2/x) - .5772 15664 9015;
                  sum1:= c:= -1 - 2 × d; r:= term:= 1; t:= x × x/4;
                  for k:= 1,k+1 while abs(t0/sum0) + abs(t1/sum1) > 10-12 do
                    begin   term:= t × term × r × r; d:= d + r; c:= c - r;
                            r:= 1/(k+1); c:= c - r;
                            t0:= term × d; t1:= term × c × r;
                            sum0:= sum0 + t0; sum1:= sum1 + t1
                    end;
                  k0:= sum0; k1:= (1 + t × sum1) / x
          end else
            begin   t:= 2 × x; c:= 1; nu:= entier(10 + 65 / x);
                    for k:= 1 step 1 until nu do
                      c:= c × ((2 × k - 1) ↑ 2) / k / 4;
                      r:= s:= 0; d:= (2 × nu + 1) ↑ 2;
                      for k:= nu step -1 until 1 do
                        begin   t0:= -4 × (2 × k + t) / d; t1:= 4 / d;
                                r:= -t1 / (r + t0); s:= r × (c + s);
                                d:= d - 8 × k; c:= c × k × 4 / d
                        end;
                      c:= k0:= 1.7724 53850 9055 × exp(-x)/sqrt(2 × x)/(1+s);
                      k1:= c × (1 + t - r / 2) / t
            end
          end k0;

```


auteurs: R. Hofhuis (MC)
N.M. Temme (MC)

incbeta

Onderwerp:

berekening van de incomplete betafunctie

$$I_x(a, b) = \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a) \cdot \Gamma(b)} \int_0^x t^{a-1} (1-t)^{b-1} dt.$$

Gebruiksaanwijzing:

deklaratie: real procedure incbeta (x, a, b, eps);
value x, a, b, eps; real x, a, b, eps;
<body>;

parameters:

x, a, b: <expression>;

x, a, b zijn de variabelen van de incomplete betafunctie,
die de volgende waarden mogen aannemen:

$0 \leq x \leq 1$, $a > 0$, $b > 0$;

eps : <expression>;

eps is de relatieve precisie;

de waarde van eps mag niet kleiner zijn dan de machine-
nauwkeurigheid.

$(2 \uparrow (-40) \approx 10 \uparrow (-12))$ voor de ELX -8).

Gebruikte procedures: gamma (zie LR 3.5.1).

Voorbeeld van aanroep:

y: = incbeta (.3, 5, 10, 10^{-10}); geeft als resultaat y = +.3761 4607 2947.

Methode en prestaties:

$I_x(a,b)$ wordt berekend d.m.v. een kettingbreukrepresentatie die, zoals
uit de literatuur blijkt, de beste resultaten geeft als $x \leq$ grens is.

grens:= if $a > 1 \wedge b > 1$ then $(a-1)/(a+b-2)$ else $a/(a+b)$;

In het andere geval ($x > \text{grens}$) wordt gebruik gemaakt van de betrekking
 $I_x(a,b) = 1 - I_{1-x}(b,a)$

De nauwkeurigheid waarmee de kettingbreuk berekend wordt, is bepaald door eps. De precisie van $I_x(a,b)$ is mede afhankelijk van de precisie van gamma (LR 3.5.1). In verband hiermee is het mogelijk dat de opgegeven relatieve nauwkeurigheid niet behaald wordt als $a+b > 35$.

Als $a < 100$ en $b < 100$ dan is echter altijd een relatieve nauwkeurigheid van 10^{-9} te bereiken. De gebruiker wordt met nadruk gewezen op de beperkte range van de parameters:

$0 \leq x \leq 1, a > 0, b > 0.$

Literatuur:

Abramowitz, M. and Stegun, I.A.;
Handbook of Mathematical Functions,
National Bureau of Standards.

Algoltekst:

```

real procedure incbeta(x,a,b,eps); value x,a,b,eps; real x,a,b,eps;
begin   integer n; real grens, g, f, fn, fn1, fn2, gn, gn1, gn2, dn;
        boolean n even;
        grens:= if a>1  $\wedge$  b>1 then (a-1)/(a+b-2) else a/(a+b);
        if x>grens then incbeta:= 1-incbeta(1-x,b,a,eps) else
        begin   g:= fn2:= 0;  f:= fn1:= gn1:= gn2:= 1; n even:= false;
                for n:= 1,n+1 while abs((f-g)/f) > eps do
                begin   dn:= if n even then .5xnx(b-.5x)/((a+n-1)x(a+n))
                        else -x(a+.5x(n-1))x(a+b+.5x(n-1))/((a+n-1)x(a+n));
                        g:=f; fn:= fn1+dnxfn2;  gn:= gn1+dnxgn2;
                        n even:= $\neg$  n even; f:= fn/gn;
                        fn2:= fn1;  fn1:= fn;  gn2:= gn1;  gn1:= gn
                end;   incbeta:= f  $\times$  xa  $\times$  (1-x)b  $\times$  gamma(a+b) /
                        (gamma(a+1)  $\times$  gamma(b))
        end
end incbeta

```

gam

auteur: N.M. Temme (MC)

Onderwerp:berekening van de gammafunctie $1/\Gamma(1-a)$ voor $|a| \leq .5$.Gebruiksaanwijzing:

deklaratie : real procedure gam(a, odd, even);
 value a; real a, odd, even;
 < body >;

parameters:

a : < expression >;
 het argument van de gammafunctie;
 de range van a is: $|a| \leq .5$;

odd : < variable >;
 krijgt de waarde $(1/\Gamma(1-a) - 1/\Gamma(1+a))/(2a)$;

even : < variable >;
 krijgt de waarde $(1/\Gamma(1-a) + 1/\Gamma(1+a))/2$;

gam : de waarde van $1/\Gamma(1-a)$
 (gam = a × odd + even).

Gebruikte procedures: geen.Voorbeeld van een aanroep:

p:= gam(0,q,r); a:= gam(.5,b,c);
 geeft als resultaat

p = +.10000 00000 002 ₁₀ 1;	(0.2 ₁₀ -11)
q = -.57721 56649 027 ₁₀ 0;	(0.12 ₁₀ -11)
r = +.10000 00000 002 ₁₀ 1;	(0.2 ₁₀ -11)
a = +.56418 95835 470 ₁₀ 0;	(.8 ₁₀ -12)
b = -.56418 95835 479 ₁₀ 0;	(.2 ₁₀ -12)
c = +.84628 43753 214 ₁₀ 0;	(.2 ₁₀ -12)

(tussen haakjes staat de absolute fout vermeld).

Methode en prestaties:

De berekening geschiedt door middel van een Chebyshev-ontwikkeling in de vorm

$$1/\Gamma(1-a) = \sum_{k=0}^{11} b_k T_k(2a),$$

($\sum'$ betekent dat de eerste term van de reeks gehalveerd moet worden). De coëfficiënten b_k zijn berekend via de coëfficiënten c_k , gedefinieerd door

$$1/\Gamma(z) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k.$$

Deze coëfficiënten staan getabelleerd in [1, p. 256]. Door z^k door een combinatie van Chebyshev-polynomen te vervangen, kan men de Chebyshev-ontwikkeling van $1/\Gamma(z)$ verkrijgen (en dan ook die van $1/\Gamma(1-z)$ via $\Gamma(1-z) = -z\Gamma(1-z)$). Voor deze methode en voor de sommatie van Chebyshev-reeksen wordt verwezen naar [2], (p. 4 en 9 respectievelijk).

Voor algemeen gebruik is het niet erg interessant dat het even en oneven gedeelte (t.o.v. a) apart uitgerekend wordt

$$(\text{even} = \sum_{k=0}^5 b_{2k} T_{2k}(2a), a \times \text{odd} = \sum_{k=0}^5 b_{2k+1} T_{2k+1}(2a)).$$

Van deze gedeelten wordt echter een essentieel gebruik gemaakt in een procedure voor Besselfuncties (zie LR 3.5.7.).

Voor waarden van a buiten het interval $[-1/2, 1/2]$ kan de gammafunctie berekend worden door (eventueel herhaald) toepassen van de recursie-formule $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$. Voor grote waarden van a kan echter beter LR 3.5.1. gebruikt worden.

De procedure is getest door na te gaan of voldaan is aan de betrekking

$$\Gamma(1-a) \times \Gamma(1+a) = a\pi / \sin a\pi.$$

Voor $a = 0.002$ (0.002) $.5$ bleek het verschil $1 - \text{gam}(a, b, c) \times \text{gam}(-a, b, c) \times a \times (\pi) / \sin(a \times (\pi))$ in absolute waarde hoogstens $.73 \times 10^{-11}$ te zijn.

Literatuur:

- [1] M. Abramowitz and I.A. Stegun (eds)
: Handbook of Mathematical Functions.
National Bureau of Standards.
- [2] C.W. Clenshaw : Chebyshev series for mathematical functions.
Nat. Phys. Lab. Math. Tables, vol. 5.
H.M. Stationery Office, London. (1962)

Algoltekst:

```

real procedure gam(a,odd,even); value a; real a,odd,even;
begin   real p,q,r,x; integer n; boolean first; array b[0:5];
        first:= true; x:=16xaxa-2;
        b[0]:= -2.8387 65422 760 10-1; b[1]:= 1.7063 050711 10-3;
        b[2]:= 7.6309 5976 10-5; b[3]:= -8.6592 08 10-7;
        b[4]:= 1.7451 10-9; b[5]:= 9.2 10-12;
label:  q:= r := 0;
        for n:= 5 step -1 until 0 do
        begin   p:= xxq-r+b[n];
                if n $\neq$ 0 then begin r:= q; q:= p end
        end; if first then
        begin   odd:= 2x(p-q); first:= false;
                b[0]:= 1.8437 40587 301; b[1]:= -7.6852 840845 10-2;
                b[2]:= 1.2719 27137 10-3; b[3]:= -4.9717 37 10-6;
                b[4]:= -3.3126 10-8; b[5]:= 2.42 10-10;
                goto label
        end else q:= (p-r)/2;
        gam:= oddxa+q; even:= q
end gam;

```

ka

auteur: N.M. Temme (MC)

Onderwerp:

berekening van de gemodificeerde Besselfuncties $K_a(x)$ en $K_{a+1}(x)$ voor $0 \leq a \leq 1$ en $x > 0$.

Gebruiksaanwijzing:

deklaratie : real procedure ka(a,x,ka1);
 value a,x; real a,x,ka1;
 < body >;

parameters:

a : < expression >;
 de orde van de Besselfunctie;

x : < expression >;
 het argument van de Besselfunctie;

ka1 : < variable >;
 krijgt de waarde van $K_{a+1}(x)$;

ka : : krijgt de waarde van $K_a(x)$.

Gebruikte procedures: gam; zie LR 3.5.6.

Voorbeeld van een aanroep:

p:= ka(0,1,q); geeft als resultaat (vergelijk LR 3.5.4.)
 p = .421 02443 82407;
 q = .601 90723 01988.

Methode en prestaties:

Voor $x > 3$ is de berekening analoog aan die van $K_0(x)$ en $K_1(x)$ voor $x > 2.5$ (zie LR 3.5.4.). Als normering wordt hier gebruikt

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\Gamma(a+\frac{1}{2}+n)}{\Gamma(a+\frac{1}{2}-n)} U(a+n+\frac{1}{2}, 2a+1, x) = (x)^{-a-\frac{1}{2}}.$$

Voor $0 < x \leq 3$ is de berekening eveneens analoog, maar voor $a = 0$ is deze veel eenvoudiger. De berekening verloopt als volgt. Uitgangspunt is de formule

$$K_a(x) = \frac{\pi}{2} \frac{I_{-a}(x) - I_a(x)}{\sin(a\pi)},$$

waarin $I_a(x)$ een gemodificeerde Besselfunctie is, die gedefinieerd kan worden door

$$I_a(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^a \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{1}{4}x^2\right)^k}{k! \Gamma(a+k+1)}.$$

Hieruit volgt voor $K_a(x)$ dan

$$K_a(x) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k,$$

$$f_0 = \frac{\pi}{2\sin(a\pi)} \left\{ \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^{-a}}{\Gamma(1-a)} - \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^a}{\Gamma(1+a)} \right\},$$

$$f_1 = \left[f_0 + \frac{a\pi}{2\sin(a\pi)} \left\{ \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^{-a}}{\Gamma(1-a)} + \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^a}{\Gamma(1+a)} \right\} \right] / (1-a^2),$$

en

$$f_k = \frac{1}{4} x^2 \frac{(k-1)(2k-1)}{k(k-1)(k^2-a^2)} f_{k-1} - \frac{1}{4} x^2 f_{k-2}, \quad k = 2, 3, 4, \dots$$

Voor $K_{a+1}(x)$ vinden we

$$K_{a+1}(x) = A + \sum_{k=0}^{\infty} g_k,$$

$$A = \frac{a\pi}{2\sin a\pi} \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^{-a-1}}{\Gamma(1-a)},$$

$$g_0 = -\frac{x}{2} (f_0 + A \frac{x}{2}) / (a+1)$$

$$g_k = \frac{x}{2} \left\{ -f_k + \frac{x}{2} \frac{g_{k-1} + \frac{x}{2k} f_{k-1}}{a+k+1} \right\} / (k+1)$$

voor $k = 1, 2, 3, \dots$

Het lastige punt van de berekening betreft f_0 . Als deze term bekend is volgt de rest zonder moeite. Rechtstreekse berekening van f_0 levert

moeilijkheden op voor kleine waarden van a , d.w.z. voor die waarden van a , waarvoor de termen tussen de accolades nagenoeg gelijk zijn aan elkaar. Hoewel de limiet voor $a \rightarrow 0$ bestaat, levert rechtstreekse numerieke evaluatie voor $a \rightarrow 0$ een grote relatieve fout op door wegvallen van significante cijfers. De term f_0 kan echter als volgt geschreven worden,

waarmee het gevaar voor cijferverlies is opgeheven.

$$f_0 = \frac{a\pi}{\sin a\pi} \left\{ g_1(a) \operatorname{ch}\left(a \ln\left(\frac{2}{x}\right)\right) + g_2(a) \ln\left(\frac{2}{x}\right) \frac{\operatorname{sh}\left(a \ln\left(\frac{2}{x}\right)\right)}{a \ln\left(\frac{2}{x}\right)} \right\}$$

waarin

$$g_1(a) = \left\{ \frac{1}{\Gamma(1-a)} - \frac{1}{\Gamma(1+a)} \right\} / (2a); \quad g_2(a) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{\Gamma(1-a)} + \frac{1}{\Gamma(1+a)} \right\},$$

(g_1 en g_2 zijn respectievelijk odd en even uit LR 3.5.6.).

Het is voldoende deze algorithmen te beschouwen voor $|a| \leq 1/2$, aangezien $K_{-a}(x) = K_a(x)$ en $K_{a+1}(x) = K_{a-1}(x) + (2a/x)K_a(x)$.

Voor $a = 1/2$ zijn de Besselfuncties overigens elementair, namelijk

$$K_{\frac{1}{2}}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x}, \quad K_{\frac{3}{2}}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x} \left(1 + \frac{1}{x}\right).$$

Voor waarden van a buiten het interval $[0, 1]$ kunnen de Besselfuncties $K_a(x)$ berekend worden uit $K_a(x) = K_{-a}(x)$ en uit de recurrente betrekking

$$K_{a+k+1}(x) = K_{a+k-1}(x) + \frac{2(a+k)}{x} K_{a+k}(x),$$

$k = 1, 2, 3, \dots$. Voor toenemende k is deze recursie numeriek stabiel.

De real procedure $ka(a, x, ka1)$ is getest door na te gaan of voldaan is aan de betrekking

$$K_{a+1}(x) I_a(x) + K_a(x) I_{a+1}(x) = \frac{1}{x}.$$

De Besselfuncties $I_a(x)$ en $I_{a+1}(x)$ kunnen voor $0 \leq a < 1$ en $x > 0$ berekend worden met behulp van Iaplnsn (algorithme 236 uit [2], p 479 ev).

Voor 1250 random-waarden voor a en x in de intervallen $[0, 1]$, $[0, 10]$ bleek het verschil

$$1 - x \{K_{a+1}(x) I_a(x) + K_a(x) I_{a+1}(x)\}$$

in absolute waarde hoogstens $.85_{10^{-10}}$ te zijn.

Literatuur:

- [1] M. Abramowitz and I.A. Stegun (eds)
: Handbook of Mathematical Functions.
National Bureau of Standards.
- [2] W. Gautschi : Comm. ACM, 7 (1964).

Algoltekst:

```

real procedure ka(a,x,ka1); value a,x; real a,x,ka1;
begin real a0,a2,x1,x2,y,sinapi,og,eg,sh,ch,f0,f1,f2,
      g0,g1,sum0,sum1; integer n,nu;
      procedure hyp function(x,sh,ch); value x; real x,sh,ch;
      begin real y; y:=exp(x); ch:=(y+1/y)/2;
        if abs(x) > .1666 then sh:=(y-1/y)/2/x else
        begin y:=xxx; sh:=(42.023 14452 751 + yx(
          6.0038 57420 809 + 0.18352 62841 200xy))
          /(42.023 14452 751 -y)
        end
      end
    endhf;
    if x<3 ^ abs(a-.5)>10-11 then
    begin x1:=2/x; if a<.5 then
      begin y:=xxx/4; a2:=axa; a0:=4xa*arctan(1);
        x2:=ln(x1); sinapi:=if abs(a0)<10-4
        then 1+a0xa0/6 else a0/sin(a0);
        f2:=gam(a,og,eg)x1*axsinapi/2;
        hyp function(axx2,sh,ch);
        f0:=sinapi*(ogxch+egxx2xsh);
        g0:=- (f0+f2)/x1/(a+1);
        f1:=y*(f0+sinapi*(egxch+a2xx2xogxsh))/
        (1-a2); sum0:=f0+f1; sum1:=g0+x1xf2;
        for n:=2,n+1 while
        abs(f2/sum0)+abs(g0/sum1)>10-13 do
        begin f2:=yx((n-1)x(2xn-1)xf1-yxf0)/
          n/(n-1)/(nxn-a2);
          g0:=(-f1/x1+yx(g0+f0/x1/(n-1))/(a+n))/n;
          sum0:=sum0+f2; sum1:=sum1+g0;
          f0:=f1; f1:=f2
        end; ka:=sum0; ka1:=sum1
      end else
      begin g0:=ka(a-1,x,g1); ka:=g1;
        ka1:=g0+x1xaxg1
      end
    end else
    begin x2:=2xx; if abs(a-.5)<10-11 then
      begin g1:=0; g0:=1+1/x; goto half end;
      nu:=entier(10+75/x); a2:=4xaxa; a0:=1;
      for n:=1 step 1 until nu do
      a0:=((2xn-1)2-a2)xa0/n/4;
      g0:=g1:=0; y:=(2xnu+1)2-a2; f0:=4/y;
      for n:=nu step -1 until 1 do
      begin f1:=-(2xn+x2)xf0; g0:=-f0/(f1+g0);
        g1:=g0x(a0+g1); y:=y-8xn;
        f0:=4/y; a0:=f0xnxa0
      end;
      g0:=((a2-1)xg0/2+1+2xa+x2)/x2;
      half: y:=ka:=1.7724538509055xexp(-x)/sqrt(x2)/(1+g1);
      ka1:=yxg0
    end
  end
end ka;

```