

La funzione di errore come trucco di integrazione

Abstract

La *funzione di errore*, comunemente chiamata *error function*, $\text{erf}(x)$, rappresenta una funzione statistica ma può essere utilizzata come trucco di integrazione nel caso di esponenziali complesse, che si presentano con una certa frequenza nello studio della fisica, ad esempio nelle equazioni differenziali della propagazione del calore. Ma anche nella meccanica quantistica per la descrizione delle particelle rappresentate da una funzione d'onda o in astrofisica per l'analisi spettroscopica delle righe spettrali, come negli esempi che si analizzano in dettaglio.

Definizione e significato statistico

La *funzione di errore* è definita dall'integrale:

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \quad (1)$$

Il suo significato statistico è rappresentare la probabilità che una variabile casuale con distribuzione normale (ovvero gaussiana, con media 0 e varianza 1/2) cada nell'intervallo $[-x, x]$. Ha come valori notevoli:

$$\text{erf}(0) = 0, \text{erf}(\infty) = 1, \text{erf}(-\infty) = -1 \quad (2)$$

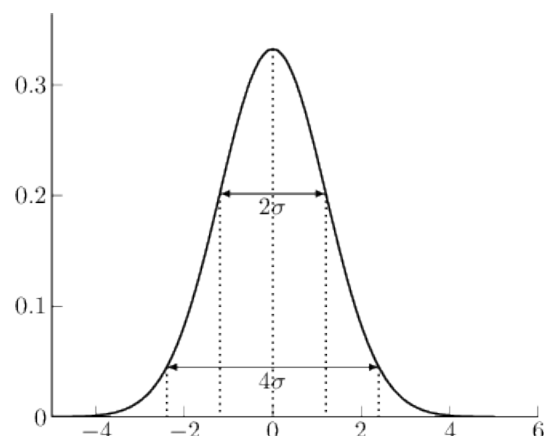
Naturalmente $2/\sqrt{\pi}$ rappresenta il fattore di normalizzazione, che garantisce che la probabilità totale sia 1, mentre la funzione determina l'area compresa tra la curva gaussiana di distribuzione compresa in $[-x, x]$.

La *funzione di densità di probabilità* (curva a campana, vedi Figura 1), che dà il valore nel punto x , è definita dalla classica *equazione di Gauss*:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2} \quad (3)$$

dove μ è la media che determina il centro della campana e σ è la deviazione standard che determina la larghezza della campana.

Figura 1 - curva gaussiana



La *funzione di distribuzione normale* $F(x)$ rappresenta l'area totale a sinistra di un punto x , ovvero la probabilità che un valore sia minore o uguale a x , ed è definita sulla base della (3) come:

$$F(x) = P(X \leq x) = \int_{-\infty}^x \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-\mu}{\sigma}\right)^2} dt . \quad (4)$$

La (3) si può semplificare nella formulazione cosiddetta *standard* (indicata abitualmente con la lettera Φ), considerando $\mu = 0$ e $\sigma = 1$, ottenendo:

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} . \quad (5)$$

Ecco quindi che si può legare la funzione di errore alla probabilità di una distribuzione normale standard, con la formula, derivata dalla (1) e dalla (5):

$$\Phi(x) = \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right) \right] . \quad (6)$$

In altre parole, dalla (6) si può ricavare direttamente la probabilità che un evento cada entro x deviazioni standard dalla media, cioè $|Z| \leq x$, utilizzando la funzione:

$$P(|Z| \leq x) = \Phi(x) - \Phi(-x) = 2\Phi(x) - 1 = \operatorname{erf}(x/\sqrt{2}) , \quad (7)$$

ottenendo ad esempio i classici valori:

$$68.27 \% \text{ per } \sigma = 1 , 97.73 \% \text{ per } \sigma = 2 , 99.87 \% \text{ per } \sigma = 3 .$$

Utilizzo come trucco di integrazione

Un esempio classico di integrazione sfruttando la (1) è dato dalla integrazione della funzione gaussiana, che si può risolvere come :

$$\int e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(x) + \text{const} , \quad (8)$$

trasformando un integrale irrisolvibile in funzione nota, che anche i calcolatori riconoscono.

Veniamo al trucco oggetto dell'approfondimento, il caso di un integrale del tipo:

$$\int e^{-(x^2+2x)} dx , \quad (9)$$

che capita non di rado nello studio della fisica.

Riscrivendo l'esponente della (9) come $-(x+1)^2 + 1$, applicando la (8) l'integrale diventa:

$$e^1 \int e^{-(x+1)^2} dx = e \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(x+1) + \text{const} , \quad (10)$$

eventualmente facendo sostituzioni di variabili nei casi più complessi.

Senza la *funzione di errore* non potremmo scrivere in modo esatto il risultato di questo integrale.

E quando accade che il risultato sia parte di una funzione più complessa (nel senso di complicata) da analizzare, si sa che si tratta di un numero finito, se $x \in \mathbb{R}$, compreso nell'intervallo $[-1, 1]$, salvo coefficienti che possano scalare il valore.

Esempio di utilizzo in meccanica quantistica

Una particella libera, ad esempio un elettrone, è descritta da una funzione d'onda che si può immaginare di forma gaussiana. Per descriverne la posizione ci si trova a dover risolvere un integrale del tipo:

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(ax^2 + bx)} dx, \quad (11)$$

dove x è la posizione, a è legato alla larghezza del pacchetto d'onda dalla relazione $\Delta x \approx 1/\sqrt{a}$ e b è legato alla velocità (al momento) della particella.

Applicando il trucco visto nella (10), l'esponente della (11) si può riscrivere come:

$$(ax^2 + bx) = a \left(x^2 + \frac{b}{a} x \right), \quad (12)$$

quindi dalla (12) ottenere una forma quadratica:

$$a \left(x^2 + \frac{b}{a} x + \frac{b^2}{4a^2} - \frac{b^2}{4a^2} \right) = a \left(x + \frac{b}{2a} \right)^2 - \frac{b^2}{4a^2}. \quad (13)$$

Sostituendo la (13) nell'equazione (11), portando fuori dall'integrazione le costanti, si ottiene:

$$I = e^{\frac{b^2}{4a^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a \left(x + \frac{b}{2a} \right)^2} dx. \quad (14)$$

Applicando la *funzione di errore* si può integrare direttamente la (14) che è una gaussiana traslata, ricordando i valori (2), ottenendo:

$$I = e^{\frac{b^2}{4a^2}} \sqrt{\frac{\pi}{a}}. \quad (15)$$

Nota quantistica

La (15) suggerisce che nel caso di un pacchetto d'onda molto stretto, ovvero di una posizione iniziale nota con precisione, nel tempo questo si allargherà molto, come prevede il *principio di indeterminazione di Heisenberg*.

Matematicamente, per passare dalla posizione alla velocità della particella (il momento p), si utilizza la trasformata di Fourier e la funzione di densità di probabilità legata alla posizione:

$$\Psi(x) \propto e^{-ax^2}, \quad (16)$$

per il momento p è individuata dall'integrale:

$$\Psi(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} e^{-ipx} dx. \quad (17)$$

Risolvendo la (17) col trucco visto del completamento del quadrato, si ottiene una gaussiana nella variabile p :

$$\Psi(p) \propto e^{-\frac{p^2}{4a}}. \quad (18)$$

Poiché l'esponente è negativo e il valore di a è ipotizzato grande (posizione ben definita), ecco che la funzione di densità di probabilità (18) si allarga tendendo a zero molto lentamente (grande dispersione quindi grande imprecisione della velocità), coerentemente con il *principio di indeterminazione*.

Esempio di utilizzo per l'analisi spettroscopica delle righe spettrali

Per effettuare l'analisi spettroscopica delle righe spettrali, che presentano sempre una certa larghezza, si considera una convoluzione delle componenti di *allargamento naturale* (profilo lorentziano) e di *allargamento Doppler* (profilo gaussiano), che porta a una funzione, detto *profilo di Voigt* (vedi Figura 2), che è descritto da un integrale piuttosto complicato:

$$V(x; \sigma, \gamma) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(t; \sigma) L(x - t; \gamma) dt$$

dove x rappresenta la distanza dal punto centrale, $G(x; \sigma) \equiv \frac{e^{-x^2/2\sigma^2}}{\sigma\sqrt{2\pi}}$ è il profilo centrato

gaussiano e $L(x; \gamma) \equiv \frac{\gamma}{\pi(\gamma^2 + x^2)}$ è il profilo centrato lorentziano.

Risolverlo è off topic per questo approfondimento ma con il trucco visto del completamento del quadrato si ottiene che la riga spettrale è una curva di tipo gaussiano centrata sulla frequenza spostata, la cui larghezza dipende dalla temperatura; per questa ragione si chiama *allargamento termico*.

Figura 2 - Profili di allargamento delle righe spettrali

