誤差関数は様々な分野で現れる関数だが, その精度保証付き数値計算は実数でしか実装されていないのが現状である (INTLAB Version 9 にも誤差関数の実装はあるが, 実変数にしか対応していない)
kv ライブラリを用いて複素変数での誤差関数の精度保証付き数値計算を試みた.

1　アルゴリズムと C++ による実装

$\mathrm{erf}(z)$ の被積分関数 e^{-z^2} は正則関数なので以下が適用できる.

定義 (正則性)

領域 $\mathcal{D}$ で定義された関数 $f(z)$ が正則 (holomorphic) であるとは, 関数 $f(z)$ が複素関数として微分可能[a] であること, つまり,

$$\lim_{h\to 0}\frac{f(z+h)-f(z)}{h}$$

が存在するということである.

[a] 関数 $f(z)=u(x,y)+\mathrm{i}v(x,y)$ $(z=x+\mathrm{i}y)$ が複素関数として微分可能であることは $\Re f(z)$, $\Im f(z)$ が実関数の意味で微分可能かつ Cauchy-Riemann の関係式

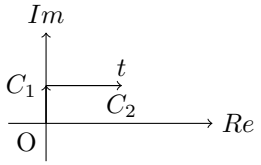
$$\frac{\partial u}{\partial x}(x,y)=\frac{\partial v}{\partial y}(x,y),\ \ \frac{\partial u}{\partial y}(x,y)=-\frac{\partial v}{\partial x}(x,y)$$

が成り立つことと同値である.

積分路変形原理

被積分関数が正則なら積分路を自由に変形して良い (積分路を変形しても積分値は変わらない)

以下のように原点を始点とし, 終点を $t=a+\mathrm{i}b(a,b\in\mathbb{R})$ とする L 字型の経路を考える[*1].



$\int_{C_1} e^{-z^2}\mathrm{d}z$, $\int_{C_2} e^{-z^2}\mathrm{d}z$ をそれぞれ計算していく.

$z=x+\mathrm{i}y(x,y\in\mathbb{R})$ とおくと,

$$\mathrm{d}z=\mathrm{d}x+\mathrm{i}\mathrm{d}y.$$

さらに,

$$\begin{aligned}e^{-z^2}=&e^{-(x+\mathrm{i}y)^2}\\=&e^{-x^2+y^2}\times e^{-2xy\mathrm{i}}\\=&e^{-x^2+y^2}(\cos 2xy-\mathrm{i}\sin 2xy).\end{aligned}$$

[*1] 以下の図は作画専用 TeX パッケージ TikZ を用いて作成した.

となる. よって,

$$\int_{C_1} e^{-z^2}\mathrm{d}z = \mathrm{i}\int_0^b e^{y^2}\mathrm{d}y$$
$$\int_{C_2} e^{-z^2}\mathrm{d}z = e^{b^2}\int_0^a e^{-x^2}(\cos 2bx - \mathrm{i}\sin 2bx)\mathrm{d}x.$$

$\int_C e^{-z^2}\mathrm{d}z = \int_{C_1} e^{-z^2}\mathrm{d}z + \int_{C_2} e^{-z^2}\mathrm{d}z$ とおくと,

$$\Re(\int_C e^{-z^2}\mathrm{d}z) = e^{b^2}\int_0^a e^{-x^2}\cos 2bx\mathrm{d}x$$
$$\Im(\int_C e^{-z^2}\mathrm{d}z) = \int_0^b e^{y^2}\mathrm{d}y - e^{b^2}\int_0^a e^{-x^2}\sin 2bx\mathrm{d}x.$$

kv ライブラリは有限区間 ($\mathbb{R}$ 上) の積分を精度保証付きで数値計算をできるので, これを用いて $\int_C e^{-z^2}\mathrm{d}z$ の実部と虚部をそれぞれ精度保証付き数値計算することで, 複素変数の誤差関数を精度保証付きで数値計算することができる.

2 虚数誤差関数の実装

虚数誤差関数:

$$\mathrm{erfi}(t) := \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^t e^{z^2} = -i\,\mathrm{erf}(iz)dz$$

も同じように複素変数で精度保証付き数値計算を実装できる.
誤差関数の計算をした時と同じ積分経路 (C_1, C_2) を使って考える.

$z = x + \mathrm{i}y \quad (x, y \in \mathbb{R})$ とおくと,

$$dz = dx + \mathrm{i}dy.$$

さらに,

$$\begin{aligned} e^{z^2} =& e^{(x+\mathrm{i}y)^2} \\ =& e^{x^2-y^2} \times e^{2xy\mathrm{i}} \\ =& e^{x^2-y^2}(\cos 2xy + \mathrm{i}\sin 2xy) \end{aligned}$$

となる. よって,

$$\int_{C_1} e^{z^2}dz = \mathrm{i}\int_0^b e^{-y^2}\mathrm{d}y$$
$$\int_{C_2} e^{z^2}dz = e^{-b^2}\int_0^a e^{x^2}(\cos 2bx + \mathrm{i}\sin 2bx)\mathrm{d}x.$$

$\int_C e^{z^2}dz = \int_{C_1} e^{z^2}dz + \int_{C_2} e^{z^2}\mathrm{d}z$ とおくと,

$$\Re(\int_C e^{z^2}dz) = e^{-b^2}\int_0^a e^{x^2}\cos 2bx\mathrm{d}x$$
$$\Im(\int_C e^{z^2}dz) = \int_0^b e^{-y^2}dy - e^{-b^2}\int_0^a e^{x^2}\sin 2bx\mathrm{d}x.$$

kv ライブラリは有限区間 ($\mathbb{R}$ 上) の積分を精度保証付きで数値計算をできるので, これを用いて $\int_C e^{z^2}\mathrm{d}z$ の実部と虚部をそれぞれ精度保証付き数値計算することで, 複素変数の虚数誤差関数を精度保証付きで数値計算することができる.

3　一般化された誤差関数 (超誤差関数) の実装

次に以下の関数を複素変数で精度保証付き数値計算することを考える.

一般化された誤差関数 (超誤差関数)

誤差関数の一般化の一つとして以下が知られている. (超誤差関数ともよばれる)

$$\mathrm{erf}(n,t) := \frac{1}{\Gamma(1+1/n)} \int_0^t e^{-z^n} \mathrm{d}z,\ n \in \mathbb{Z}.$$

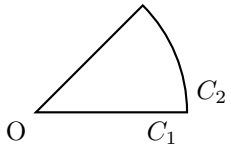
上の関数は $n = 2$ のとき, 通常の誤差関数になる.

被積分関数を実部と虚部に分けやすくするため, $z = re^{\mathrm{i}\theta}$ というように z を極座標表示して経路積分を考える.

まず, 被積分関数を次のように変形する.

$$\begin{aligned}
\exp(-z^n) &= \exp(-r^n \exp(\mathrm{i}n\theta)) \\
&= \exp(-r^n(\cos n\theta + \mathrm{i}\sin n\theta)) \\
&= \exp(-r^n \cos n\theta)\exp(-\mathrm{i}r^n \sin n\theta) \\
&= \exp(-r^n \cos n\theta)(\cos(r^n \sin n\theta) - \mathrm{i}\sin(r^n \sin n\theta)).
\end{aligned}$$

極座標表示された関数を積分する都合上, 以下のような扇形の経路を考える.



すると,

$$\int_{C_1} e^{-z^n} dz = \int_0^r e^{-r^n} dr$$

$$\begin{aligned}
&\int_{C_2} e^{-z^n} dz \\
&= (\mathrm{i}\int_0^\theta e^{-r^n \cos n\theta} \cos(r^n \sin(n\theta)) e^{\mathrm{i}\theta} d\theta + \int_0^\theta e^{-r^n \cos n\theta} \sin(r^n \sin(n\theta)) e^{\mathrm{i}\theta} d\theta) r \\
&= \mathrm{i}r \int_0^\theta e^{-r^n \cos n\theta} \cos(r^n \sin(n\theta)) \cos\theta d\theta \\
&\quad -r \int_0^\theta e^{-r^n \cos n\theta} \cos(r^n \sin(n\theta)) \sin\theta d\theta \\
&\quad +r \int_0^\theta e^{-r^n \cos n\theta} \sin(r^n \sin(n\theta)) \cos\theta d\theta \\
&\quad +\mathrm{i}r \int_0^\theta e^{-r^n \cos n\theta} \sin(r^n \sin(n\theta)) \sin\theta d\theta
\end{aligned}$$

となる. kv ライブラリを用いて実部と虚部をそれぞれ精度保証付きで計算し, gamma 関数の値も精度保証付きで求めることで超誤差関数の精度保証付き数値計算を実装できる.