

2018 年度 修士論文

q -特殊関数の精度保証付き数値計算と
零点探索

早稲田大学 基幹理工学研究科 数学応用数理専攻

5117A011-3 金泉大介

指導教員 丸野 健一 教授

2019 年 2 月

目次

1	はじめに	2
1.1	精度保証付き数値計算	2
1.2	Bessel 関数の精度保証付き数値計算	4
1.3	q -解析学と q -特殊関数	6
2	Jackson の第 2 種 q -Bessel 関数の精度保証付き数値計算法	9
2.1	交代級数を用いる方法	9
2.2	積分を用いる方法	10
2.3	二重指数関数型積分公式 (DE 公式) を用いる方法	11
2.4	漸近展開による方法	12
2.5	数値実験	14
2.6	本研究のまとめと今後の課題	15
3	Hahn-Exton の q -Bessel 関数の精度保証付き数値計算法	15
3.1	交代級数を用いる方法	15
3.2	q -超幾何関数を用いる方法	16
3.3	数値実験	17
3.4	まとめと今後の課題	17
4	いくつかの q -特殊関数に対して有効な DE 変換について	18
4.1	主定理の証明	19
4.2	補題の証明 (概略)	20
4.3	定数 C の評価と今後の課題	21
5	楕円超幾何関数の精度保証付き数値計算とその課題	23
5.1	誤差評価手法	23
5.2	今後の課題	27
6	q -特殊関数の零点探索	28
6.1	q -Krawczyk 法	28
6.2	q -区間 Newton 法	30
6.3	まとめと今後の課題	32
7	行列 q -特殊関数の精度保証付き数値計算	32
7.1	$(A; q)_{\infty}$ の精度保証付き数値計算	33
7.2	今後の課題	35
8	謝辞	36

1 はじめに

18 世紀から 19 世紀にかけての自然科学の発展の中で現実の問題を記述する微分方程式の解を特殊関数とよぶようになったようである．これらの特殊関数の多くは Gauss の超幾何関数 ${}_2F_1$ のパラメータが特殊な場合，あるいは極限として与えられることが分かり，漸化式，積分表示式，加法及び乗法公式，母関数，漸近展開などが研究されてきた [1, 2]．20 世紀になると微分方程式のモノドロミー群や Lie 群の表現などを用いて特殊関数に統一的な視点を与える理論が整備され [3–5]，Gauss の超幾何関数 ${}_2F_1$ を特殊な場合として含む新しい特殊関数が次々と生まれてきている [6–9]．また計算機の発達に伴って特殊関数を数値計算で扱う研究も進展している [10]．

おおざっぱには特殊関数は三角関数の高級な親戚といえるだろう．例えば Bessel 関数 $J_\nu(x)$ や超幾何関数 ${}_rF_s$ は三角関数を特別な場合として含んでいる．近年は整数論において Kurokawa 等によって三角関数の多重化である多重三角関数が研究されている．三角関数は古来より三角法として天文学や航海術に用いられ，近代以降 Fourier 級数理論の発達により，数学，物理学，工学の諸分野で様々な応用されている．特殊関数は三角関数よりもはるかに複雑な理論の上に成り立っているが，それだけ多様な性質を持ち，特殊関数を使いこなすことで理工学上の多くの問題に厳密な手法を与えることができる．今日の科学が三角関数抜きにしては成り立たないことは自明だが，特殊関数はそれ以上に有効な道具になるのである．

可積分系などの数理物理の世界には，多様な特殊関数が住んでいるが，それらの中には性質が十分に理解されていないものも多くある．多様な特殊関数の性質を探索する手段の一つとして，様々な力学系の問題に適用され強力なツールとなりつつある精度保証付き数値計算が考えられる．

精度保証付き数値計算とは近似値の計算をすると同時に計算結果の（数学的に）厳密な誤差評価も行う数値計算のことである [11, 12]．計算する際は数を区間に置き換えて計算し，真値を含む区間を結果として出力する．これにより真値が含まれる区間を知ることができるだけでなく，区間の幅から計算に混入した誤差を把握できる．

本論文では，可積分系などの数理物理で現れる様々な特殊関数（つまり可積分な微分方程式または差分方程式の解）の精度保証付き数値計算法の確立を目指し， q -特殊関数（特殊関数の q -類似）の精度保証付き数値計算についての研究結果を報告する．これまで様々な特殊関数の精度保証付き数値計算法が開発されてきたが [13–16]，可積分系などの数理物理で現れる q -特殊関数の精度保証付き数値計算法はまだない．

q -特殊関数の精度保証付き数値計算法を確立するため，可積分系で現れる q -Bessel 関数の精度保証付き数値計算法について研究を行なった．

1.1 精度保証付き数値計算

精度保証付き数値計算では”区間演算”という技術によって数値計算の際に生じる誤差を把握している [11, 12]．区間演算は 1950 年代に Sunaga によって体系的に研究され，Moore らの貢献によって広く知られるようになった．区間演算を行う際は数を閉区間に置き換えて下記のルールに従い計算している．

- 加算: $[x] + [y] = [\underline{x} + \underline{y}, \bar{x} + \bar{y}]$
- 減算: $[x] - [y] = [\underline{x} - \bar{y}, \bar{x} - \underline{y}]$
- 乗算: $[x] \times [y] = [\min(\underline{x}\underline{y}, \underline{x}\bar{y}, \underline{y}\bar{x}, \bar{x}\bar{y}), \max(\underline{x}\underline{y}, \underline{x}\bar{y}, \underline{y}\bar{x}, \bar{x}\bar{y})]$
- 除算: $[x]/[y] = [\min(\underline{x}/\underline{y}, \underline{x}/\bar{y}, \bar{x}/\underline{y}, \bar{x}/\bar{y}), \max(\underline{x}/\underline{y}, \underline{x}/\bar{y}, \bar{x}/\underline{y}, \bar{x}/\bar{y})]$
(ただし $[y]$ は 0 を含まない区間とする)

精度保証付き数値計算では主に次の誤差を扱う.

- 丸め誤差: 実数を計算機で表現可能な数に置き換えたことによる誤差
- 打ち切り誤差: 無限回やる操作を有限で打ち切ったことによる誤差
- 離散化誤差: 数理モデルを多項式や漸化式に変換した際の誤差

ただし, モデル誤差 (数理モデルそのものの誤差) は扱わない.

微分方程式のような連続な系を数値計算によって解くためには離散化が必要となりその際には離散化誤差が発生する. それによって幻影解が現れることもある. 離散化された問題の解が元の問題の解に対するよい近似にならない場合があるのだ. 例として領域 $\Omega = (0, a) \times (0, 1/a) (a > 0)$ の上で Emden 方程式の境界値問題:

$$-\delta u = u^2 \quad \text{in } \Omega, \quad u = 0 \quad \text{on } \partial\Omega. \quad (1.1)$$

を考える. Breuer-Plum-McKenna はこれをスペクトル法によって離散化して解き, 数値解を得た. ところがこの問題は Gidas-Ni-Nirenberg の理論的な解析手法によって存在しないことが証明されていた. つまり Breuer らが得た解は幻影解だったのだ. これは極めて珍しいものであるが非線型微分方程式の解の存在を厳密に検討するには数値解法によって得られた近似解を検証しなければならないことが分かる.

打ち切り誤差が計算に与える影響を調べた例 [12] を紹介しよう. $\sin x$ の Taylor 展開を用いて $\sin(\pi/6)$ を計算することを考えよう. また,

$$S(x) := x - x^3/3! + x^5/5! - x^7/7! + x^9/9! \quad (1.2)$$

とする. $S(\pi/6)$ を倍精度浮動小数点演算による区間演算で丸め誤差を考慮しながら計算すると

$$S(\pi/6) \in [0.50000000002027, 0.50000000002029]$$

が得られるが, 打ち切り誤差のために $\sin(\pi/6)$ の真値である $1/2$ を含んでいない. 剰余項を含んで区間演算を行うと

$$\sin(\pi/6) \in [0.499999999999, 0.500000000005]$$

のように数学的に厳密に $\sin(\pi/6)$ の真値を包含することが可能である.

丸め誤差が計算に与える影響を調べた例として Rump の例題が知られている. Rump は次のような関数を考案した.

$$f(x, y) = 333.75y^6 + x^2(11x^2y^2 - y^6 - 121y^4 - 2) + 5.5y^8 + \frac{x}{2y}. \quad (1.3)$$

$f(77617, 33096)$ を計算した結果, 次のようになった.

単精度: 1.172603...

倍精度: 1.1726039400531...

拡張精度: 1.172603940053178...

それぞれの精度において一見すると途中の桁まで正しい値が得られているように思われるが本当の値は -0.827386 であり、符号もあっていない間違っただけの結果となっている。丸め誤差の影響は侮れないのである。IEEE754-1985 浮動小数点演算規格の制定に尽力した Kahan は「浮動小数点演算によって得られた結果と真値に大きな差が生じることは非常にまれであり常に心配するにはあまりにもまれであるがだからといって無視できるほどまれなわけではない」と述べている。実にいい得て妙である。絶対に間違っただけとはいけないような計算をする場合には丸め誤差を無視してはいけない。ちなみに上記の例で区間演算すると $[-5.91, 4.73] \times 10^2$ という結果を得る。非常に区間幅が大きいという意味のある結果ではないが少なくとも真値を含んでいる。区間演算は間違っただけの答えを決して出さないものである。また、区間演算で得た区間幅が大きい結果を得たことにより深刻な丸め誤差が発生していることに気づくことができる。

しかし残念ながら区間演算を繰り返すと区間幅が増大するという弱点がある。そのため実数演算を単純に区間演算に置き換えただけでは意味のある結果を得られないことが多いことがわかっている。例えば連立一次方程式に対する区間 Gauss の消去法はその典型的な例である [12]。このような区間演算の振舞について丸め誤差解析で著名な Wilkinson は「区間演算は役に立たないわけではないが適用可能な状況に至るまで深刻な制限がある。一般に、代数的な計算に対して区間演算を有効な手段とするためにはその使用をできる限り後回しにすることが最良である」と述べている [12]。つまり通常の数値計算によって近似解を得た後に区間演算によって近似解の精度を保証するという考え方が重要である。

Kulisch らは、区間演算の概念を発展させ、誤差の入った行列演算などの科学計算に実用レベルで高い精度の保証を与える研究を行ってきた。その結果を利用し、IBM から ACRITH という名で精度保証付き数値計算ライブラリが提供されている。また、Kulisch らの研究に刺激を受け、精度を保証するという観点から数値計算法を全般に見直す動きが数値計算の各方面で起こっている。例えば微分方程式の分野では解の存在証明が困難な解析学上の問題に対する数値的アプローチが確立されつつある。特殊関数の分野も例外ではなく、その値を精度保証付きで求める研究がなされている [13–16]。精度保証付き数値計算は現代では Tucker らにより力学系の研究にも応用されており、有力な道具として注目されている。 q -特殊関数の精度保証付き数値計算により、 q -特殊関数に関する研究の前進が期待されている。

1.2 Bessel 関数の精度保証付き数値計算

Bessel 方程式

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dy}{dx} + \left(1 - \frac{n^2}{x^2}\right) y = 0 \quad (1.4)$$

は二つの基本解 $J_n(x), Y_n(x)$ を持つ。 $J_n(x), Y_n(x)$ はそれぞれ Bessel 関数、Neumann 関数とよばれる。Bessel 関数は物理の研究でしばしば扱われる。以下、そのような例を列挙する（他の例についてはアメリカ国立標準技術研究所が公開している Digital Library of Mathematical Functions が詳しい）

- ①: Bernoulli による重い鎖の振動問題に関する研究
- ②: Bessel による惑星の運動問題に関する研究 (この研究から関数の名前が来ている)
- ③: 電磁波に関する研究
- ④: 光の散乱に関する研究
- ⑤: 太鼓の音の解析

次数 n が自然数であるとき Bessel 関数は様々な性質を持つ [2].

$$\exp\left[\frac{z}{2}\left(t - \frac{1}{t}\right)\right] = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(z)t^n \quad (\text{母関数展開}), \quad (1.5)$$

$$J_0(z)^2 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} J_n(z)^2 = 1, \quad (1.6)$$

$$J_n(x+y) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} J_k(x)J_{n-k}(y) \quad (\text{加法定理}). \quad (1.7)$$

また, 次のように級数展開される:

$$J_n(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!(n+k)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{n+2k}. \quad (1.8)$$

次数 n が負の場合には

$$J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x) \quad (1.9)$$

とすればよい. 上述した無限級数の打ち切り誤差を評価できれば $J_n(x)$ の精度保証付き数値計算が可能になる. そこで,

$$d_k = \frac{(-1)^k}{k!(n+k)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{n+2k} \quad (1.10)$$

を考える. このとき,

$$d_k = \frac{x^2}{4k(n+k)} d_{k-1} \quad (1.11)$$

が成り立つ. 右辺の一部を

$$c_k = \frac{(n+2k)(n+2k-1)x^2}{4k(n+k)(n+2k)(n+2k-1)} \quad (1.12)$$

とおくと, $\{c_k\}$ は単調減少数列であることが分かる. よって

$$|d_k| \leq |d_{k-1}| \quad \forall k \geq K \quad (1.13)$$

が成り立つような自然数 K が存在し, $k \geq K$ では $\{d_k\}$ はその絶対値が単調減少する交代数列となる. そこで $J_n(x)$ の打ち切り誤差は以下のようなになる [15, 29].

$$\left| J_n(x) - \sum_{k=0}^K d_k \right| \leq |d_{K+1}| \quad (1.14)$$

以上の方法は x の絶対値が小さいときのみ有効である. x の絶対値が大きいときは次の漸近展開を使う [1, 14]:

$$J_\nu(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left(\cos \left(x - \frac{\pi}{4} - \frac{\nu\pi}{2} \right) \sum_{k=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^k \Gamma(\nu + 2k + 1/2)}{(2k)! \Gamma(\nu - 2k + 1/2)} \left(\frac{1}{2x} \right)^{2k} \right. \\ \left. + \sin \left(x - \frac{\pi}{4} - \frac{\nu\pi}{2} \right) \sum_{k=0}^{[(n-1)/2]} \frac{(-1)^k \Gamma(\nu + 2k + 3/2)}{(2k)! \Gamma(\nu - 2k - 1/2)} \left(\frac{1}{2x} \right)^{2k+1} + R_n \right). \quad (1.15)$$

R_n は

$$|R_n| \leq \left(\frac{\Gamma(\nu + n + 1/2)}{2(n-1)! \Gamma(\nu - n + 1)} \right) \left(\frac{1}{2x} \right)^n \quad (1.16)$$

と評価される.

漸近展開を使わずに, 数値積分を用いて精度保証付き数値計算することも可能である. [13] では合流型超幾何関数の積分表示から導き出せる Poisson の積分表示 [2]:

$$J_\nu(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \Gamma(\nu + \frac{1}{2})} \left(\frac{z}{2} \right)^\nu \int_0^\pi \cos(z \cos \theta) \sin^{2\nu} \theta d\theta, \quad \Re(\nu) > -\frac{1}{2} \quad (1.17)$$

を用いている.

1.3 q -解析学と q -特殊関数

q 類似とは, ある量, 関数または等式にパラメータ q を入れて一般化したものであり, q 類似は $q \rightarrow 1$ としたとき元の量, 関数または等式に戻る. 例えば, 自然数 n に対して

$$\frac{1 - q^n}{1 - q} = 1 + q + q^2 + \cdots + q^{n-1}$$

を考える時,

$$\lim_{q \rightarrow 1} \frac{1 - q^n}{1 - q} = \lim_{q \rightarrow 1} (1 + q + q^2 + \cdots + q^{n-1}) = n$$

となるので, $\frac{1-q^n}{1-q}$ は自然数 n の q 類似である. よって, 自然数 n の q 類似を

$$[n]_q := \frac{1 - q^n}{1 - q} \quad (1.18)$$

と書く. これを用いて, q -階乗

$$[n]_q! := [n]_q [n-1]_q \cdots [2]_q [1]_q \quad (1.19)$$

や, q -二項係数

$$\begin{bmatrix} n \\ k \end{bmatrix}_q := \frac{[n]_q [n-1]_q \cdots [n-k]_q}{[k]_q} \quad (1.20)$$

を定めることができる. ここで, $n, N \in \mathbb{N}$ に対して, $\begin{bmatrix} N+n \\ n \end{bmatrix}_q$ を q について展開して,

$$\begin{bmatrix} N+n \\ n \end{bmatrix}_q = \sum_k c(n, N, k) q^k \quad (1.21)$$

と表わすと, 係数 $c(n, N, k)$ は, " $k \in \mathbb{N}$ を高々 n 個の N 以下の自然数の和で表す場合の数" という組み合わせ論的な意味合いを持ち, q -二項係数はある種の母関数になっている [21]. この q -二項係数について q -二項定理

$$(1+z)(1+zq)\cdots(1+zq^{n-1}) = \sum_{k=0}^n q^{\frac{k(k-1)}{2}} \begin{bmatrix} n \\ k \end{bmatrix}_q z^k \quad (1.22)$$

が成り立つ. これらは組み合わせ論において頻繁に登場する.

q -階乗や q -二項係数を用いるといろいろな関数の q 類似を考えることができる. 例えば, q -指数関数

$$e_q(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{[k]_q!} \quad (1.23)$$

や q -三角関数

$$\cos_q(z) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{z^{2k}}{[2k]_q!} \quad (1.24)$$

$$\sin_q(z) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{z^{2k+1}}{[2k+1]_q!} \quad (1.25)$$

がある. 初等関数の q 類似以外にも, 特殊関数の q 類似である q -特殊関数も考えることができる. これらの関数の q 類似たちを舞台にして q -微分 (Jackson 微分, q -差分)

$$D_q f(x) := \frac{f(qx) - f(x)}{qx - x} \quad (1.26)$$

や q -積分 (Jackson 積分)

$$\int_0^1 f(x) d_q x := (1-q)x \sum_{k=0}^{\infty} q^k f(q^k x) \quad (1.27)$$

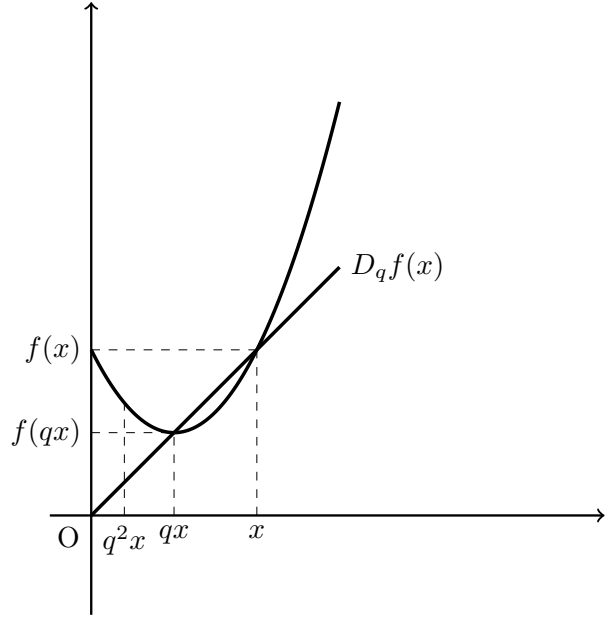
を導入し, 関数の q 類似の性質を調べるのが q -解析学である [1, 17, 18]. 特に q -微分は

$$\lim_{q \rightarrow 1} D_q f(x) = f'(x), \quad (1.28)$$

$$D_q x^n = [n]_q x^{n-1} \quad (1.29)$$

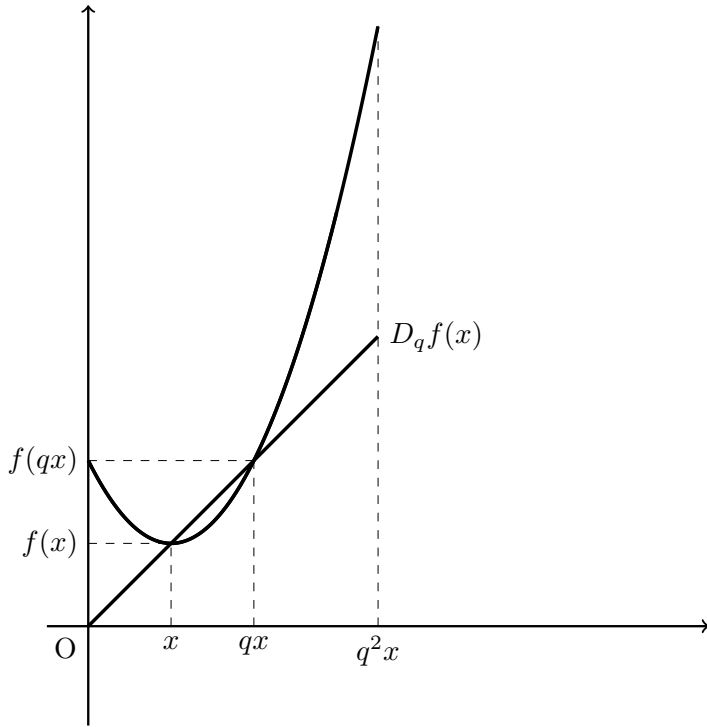
を満たすのみならず, 関数 $f(x)$ を等比間隔点列 $q^n x$ 上の点で定め, そこでの

$q < 1$ の場合



$f(x)$ の傾きを表している [19].

$q > 1$ の場合



q -特殊関数は次の q -Pochhammer 記号

$$(z; q)_n := \prod_{k=0}^{n-1} (1 - zq^k), \quad (z; q)_\infty := \lim_{n \rightarrow \infty} (z; q)_n, \quad z \in \mathbb{C}, \quad |q| < 1 \quad (1.30)$$

と超幾何関数の q 類似である q -超幾何関数

$${}_r\phi_s(\alpha_1, \dots, \alpha_r; \beta_1, \dots, \beta_s; q, z) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\prod_{i=1}^r (\alpha_i; q)_n \left[(-1)^n q^{\frac{n(n-1)}{2}} \right]^l z^n}{\prod_{j=1}^s (\beta_j; q)_n (q; q)_n}, \quad (1.31)$$

$$l = 1 + s - r.$$

を用いて定義されることが多い。通常の Pochhammer 記号では $(z)_\infty$ は発散してしまうため定義できないが、 $(z; q)_\infty$ は定義できる。特殊関数の q 類似では q 類似する前にはなかったものも現れるが、そのことが q -特殊関数の世界を豊穡にしているのである。 q -Pochhammer 記号と q -超幾何関数を用いて定義される q -特殊関数として Bessel 関数の q 類似である

$$J_\nu^{(2)}(x; q) = \frac{(q^{\nu+1}; q)_\infty}{(q; q)_\infty} \left(\frac{x}{2} \right)^\nu {}_0\phi_1 \left(-; q^{\nu+1}; q, -\frac{q^{\nu+1}x^2}{4} \right), \quad (x \in \mathbb{C}), \quad (1.32)$$

$$J_\nu^{(3)}(x; q) = \frac{(q^{\nu+1}; q)_\infty}{(q; q)_\infty} x^\nu {}_1\phi_1(0; q^{\nu+1}; q, qx^2), \quad (x \in \mathbb{C}). \quad (1.33)$$

が挙げられる。上から順に Jackson の第 2 種 q -Bessel 関数, Hahn-Exton の q -Bessel 関数とよばれている。

q -特殊関数は Euler による自然数の分割に関する研究などで初めて現れ [20, 21], 19 世紀から Jacobi らによって q -解析学の観点から研究されるようになった。これらの時代には q -特殊関数の数学的背景は不明であったが, 1980 年代に Drinfeld-Jimbo によって量子群の理論が導入され [22–24], q -特殊関数と q -解析学の本質が解明された。その後, 直交多項式を体系的にとらえる図式である Askey scheme [25, 26] 等, q -特殊関数を統一的に扱う枠組みが出来上がった。 q -解析学は様々な関数の q 類似の性質を理解するための道具であるだけでなく, “ q の世界” 以外の場所（例えば数理論理）でもしばしば登場し有益な結果をもたらしてくれるのである。

2 Jackson の第 2 種 q -Bessel 関数の精度保証付き数値計算法

本節では交代級数の性質を用いる方法 [15], 積分を用いる方法 [13], 二重指数関数型積分公式 (DE 公式) を用いる方法 [27] と漸近展開を用いる方法 [14] を提案し, その有効範囲を議論する。

2.1 交代級数を用いる方法

本手法は [15] の拡張に相当し, 交代級数に関する次の性質を用いる。これらの性質は交代級数の打ち切り誤差に関するものである。

定理 1. (Leibniz) [29] 数列 $\{p_n\}_{n=0}^\infty$ が $\lim_{n \rightarrow \infty} p_n = 0$ を満たす単調減少な正数列ならば, $\sum_{n=0}^\infty (-1)^n p_n$ は収束する。

系 2. (交代級数の打ち切り誤差) [29] $s := \sum_{n=0}^\infty (-1)^n p_n$, $s_N := \sum_{n=0}^N (-1)^n p_n$ とおくと次が成り立つ:

$$|s - s_N| \leq p_{N+1}.$$

Jackson の第 2 種 q -Bessel 関数:

$$J_\nu^{(2)}(x; q) := \frac{(q^{\nu+1}; q)_\infty}{(q; q)_\infty} \left(\frac{x}{2}\right)^\nu \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n q^{n(n-1)} \left(\frac{x^2 q^{\nu+1}}{4}\right)^n}{(q^{\nu+1}; q)_n (q; q)_n}$$

に現れる $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n q^{n(n-1)} \left(\frac{x^2 q^{\nu+1}}{4}\right)^n}{(q^{\nu+1}; q)_n (q; q)_n}$ に対しては,

$$\begin{cases} 0 < q < 1 \\ x, \nu \in \mathbb{R} \\ |q^\nu| < 1, \quad x^2 < 4q \end{cases} \quad (2.1)$$

に制限すれば系 2 が適用できる. 後は $\frac{(q^{\nu+1}; q)_\infty}{(q; q)_\infty}$ の打ち切り誤差を評価できれば Jackson の第 2 種 q -Bessel 関数を精度保証付き数値計算できる. 交代級数の性質が適用できるように $\frac{(q^{\nu+1}; q)_\infty}{(q; q)_\infty}$ を変形していく. ここで q -指数関数 [17]:

$$e_q(z) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{(q; q)_n} = \frac{1}{(z; q)_\infty}, \quad |z| < 1 \quad (2.2)$$

を補助的に使う. q -指数関数については次が成り立つ.

定理 3. (Karpelevich) [30] $|z| < 1$ のとき (2.3) が成り立つ:

$$\frac{(z; q)_\infty}{(q; q)_\infty} = 1 / \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n q^{n(n+1)/2}}{(q; q)_n (1 - zq^n)}. \quad (2.3)$$

$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n q^{n(n+1)/2}}{(q; q)_n (1 - zq^n)}$ については系 2 を適用できる. $z = q^{\nu+1}$ とすれば Jackson の第 2 種 q -Bessel 関数で現れた $\frac{(q^{\nu+1}; q)_\infty}{(q; q)_\infty}$ の打ち切り誤差を評価できる.

こうして 交代級数の性質と q -指数関数の変換公式により Jackson の第 2 種 q -Bessel 関数を精度保証付き数値計算できた. しかしこの手法は制限 (2.1) がないと適用できない. 以下では x, ν に関する制限を緩めて精度保証付き数値計算する手法を考えていく.

2.2 積分を用いる方法

Jackson の第 2 種 q -Bessel 関数は $\Re \nu > 0$ のとき以下の積分表示を持つ [28]:

$$J_\nu^{(2)}(x; q) = \frac{(q^{2\nu}; q)_\infty}{2\pi(q^\nu; q)_\infty} \left(\frac{x}{2}\right)^\nu \int_0^\pi \frac{(e^{2i\theta}, e^{-2i\theta}, f_+, f_-; q)_\infty}{(e^{2i\theta} q^\nu, e^{-2i\theta} q^\nu; q)_\infty} d\theta, \quad (2.4)$$

$$(a_1, \dots, a_n; q)_\infty := (a_1; q)_\infty \cdots (a_n; q)_\infty, \quad f_\pm := -\frac{ixq^{(\nu+1)/2}}{2} e^{\pm i\theta}.$$

積分表示 (2.4) に現れる $(z; q)_\infty$ の精度保証付き数値計算には次の定理を使う.

定理 4. [31]

$z \in \mathbb{C}$, $0 < q < 1$ とする. ある $n \in \mathbb{N}$ に対して $0 < \frac{|z|q^n}{1-q} < \frac{1}{2}$ であるとき, 以下が成り立つ:

$$\frac{(z; q)_\infty}{(z; q)_n} = 1 + r(z; n), \quad |r(z; n)| \leq \frac{2|z|q^n}{1-q}. \quad (2.5)$$

さらに, 被積分関数を数値積分しやすい形に変えることを考える. 変形には定理 4 に加えて次を使う.

定理 5. [31] 定理 4 と同じ仮定で以下が成り立つ:

$$\frac{(z; q)_n}{(z; q)_\infty} = 1 + r(z; n), \quad |r(z; n)| \leq \frac{2|z|q^n}{1-q}. \quad (2.6)$$

定理 4, 5 より,

$$\begin{aligned} & \int_0^\pi \frac{\left(e^{2i\theta}, e^{-2i\theta}, -\frac{ixq^{(\nu+1)/2}}{2}e^{i\theta}, -\frac{ixq^{(\nu+1)/2}}{2}e^{-i\theta}; q \right)_\infty}{(e^{2i\theta}q^\nu, e^{-2i\theta}q^\nu; q)_\infty} d\theta \\ & \in \left[1 \pm \frac{2|q^{\nu+n}|}{1-q} \right]^2 \left[1 \pm \frac{2q^n}{1-q} \right]^2 \left[1 \pm \frac{|xq^{(\nu+1)/2}|q^n}{1-q} \right]^2 \\ & \times \int_0^\pi \frac{\left(e^{2i\theta}, e^{-2i\theta}, -\frac{ixq^{(\nu+1)/2}}{2}e^{i\theta}, -\frac{ixq^{(\nu+1)/2}}{2}e^{-i\theta}; q \right)_n}{(e^{2i\theta}q^\nu, e^{-2i\theta}q^\nu; q)_n} d\theta \end{aligned} \quad (2.7)$$

と変形できる. ただし $n \in \mathbb{N}$ は

$$\frac{|q^{\nu+n}|}{1-q} < \frac{1}{2}, \quad \frac{q^n}{1-q} < \frac{1}{2}, \quad \frac{|xq^{(\nu+1)/2}|q^n}{2(1-q)} < \frac{1}{2} \quad (\text{定理 4, 5 の仮定}) \quad (2.8)$$

を満たすものであり, 記号 $[1 \pm |b|]$ を

$$\begin{cases} [1-b, 1+b] \ (b \in \mathbb{R}) \\ \text{中心 } 1, \text{ 半径 } |b| \text{ なる } \mathbb{C} \text{ 上の近傍 } (b \in \mathbb{C} - \mathbb{R}) \end{cases} \quad (2.9)$$

と定める. 変形後の積分には [13] に組み込まれている精度保証付き数値積分パッケージを使う. その仕組みは以下のようになっている [32]:

1. 積分区間を分割する (実験では 10 個に分割).
2. 被積分関数 f に対して剰余項付き Taylor 展開を行う.
3. 各区分で f の像を係数が区間である多項式として得る (実験では 10 次に指定).
4. 各区分で得られた多項式を不定積分して原始関数を得る.
5. 各区分で区間端の値を代入して定積分の値を区間として得る.

上記のアルゴリズムと (2.7) による被積分関数の包含により, 得られた区間に真値が存在することが保証される. 今回扱う積分は被積分関数が複素関数なので, 被積分関数を実部と虚部に分けて精度保証付き数値積分を行う.

2.3 二重指数関数型積分公式 (DE 公式) を用いる方法

二重指数関数型積分公式 (DE 公式) とは, 二重指数関数型の変数変換 (DE 変換) と台形公式を組み合わせた数値積分法である [27]. どのような DE 変換を施すかは積分区間と被積分関数 f の持つ優関数, つまり

$$|f(z)| \leq |F(z)| \quad (\forall z \in \mathcal{D}_d := \{z \in \mathbb{C} : |\Im z| < d < \pi/2\}) \quad (2.10)$$

なる関数 $F(z)$ の種類に応じて使い分けがされている. DE 公式を (2.4) に適用することを考える. 具体的には (2.4) で θ を下記の $\psi_{DE}(t)$ に変換する. ここでは

$$\psi_{DE}(t) := \frac{b-a}{2} \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh(t)\right) + \frac{a+b}{2}, \quad a < b \quad (2.11)$$

という変換を扱う. この変換について次の定理が知られている.

定理 6. [33]

$$\mathcal{D}_{DE}(d) := \{z = \psi_{DE}(w) : w \in \mathcal{D}_d\}, \quad h := \frac{\log(4dN)}{N}, \quad N \geq e/(4d) \quad (2.12)$$

とする. f が $\mathcal{D}_{DE}(d)$ ($d \in (0, \frac{\pi}{2})$) で正則で, 定数 K に対して

$$|f(z)| \leq K \quad (\forall z \in \mathcal{D}_{DE}(d)) \quad (2.13)$$

が成り立つなら, 次が成り立つ (ただし $C = \frac{1}{\cos^2(\frac{\pi}{2} \sin d) \cos d}$):

$$\left| \int_a^b f(x) dx - h \sum_{k=-N}^N f(\psi_{DE}(kh)) \psi'_{DE}(kh) \right| \leq K(b-a) \left(e^{\pi/2} + \frac{2C}{1-e^{-\pi/2}} \right) \exp(-2\pi d/h). \quad (2.14)$$

上の不等式は台形公式の打ち切り誤差を評価するものである. いま, 被積分関数はすべて収束する無限積なので有界であり, (2.13) を満たす. 定数 K は定理 4, 5 を使えば決定できるので DE 公式により精度保証付き数値計算できる.

2.4 漸近展開による方法

ここでは Jackson の第 2 種 q -Bessel 関数の持つ次の漸近展開を用いる [34]:

$$J_\nu^{(2)}(x; q) = \frac{(x/2)^\nu (\sqrt{q}; q)_\infty}{2(q; q)_\infty} [f(x/2, q^{(\nu+1/2)/2}; q) + f(-x/2, q^{(\nu+1/2)/2}; q)], \quad (2.15)$$

$$f(x, a; q) := (iax; \sqrt{q})_\infty {}_3\phi_2(a, -a, 0; -\sqrt{q}, iax; \sqrt{q}, \sqrt{q}).$$

$(z; q)_\infty$ と q -超幾何関数を精度保証付き数値計算すれば漸近展開により精度保証付き数値計算できる. $(z; q)_\infty$ の精度保証付き数値計算には定理 4 を使う. q -超幾何関数の精度保証付き数値計算には以下の定理を用いる. この定理は q -超幾何関数の打ち切り誤差を評価するものである.

定理 7.

$$T(n) := \frac{\prod_{i=1}^r (\alpha_i; q)_n \left[(-1)^n q^{\frac{n(n-1)}{2}} \right]^l z^n}{\prod_{j=1}^s (\beta_j; q)_n (q; q)_n} \quad (2.16)$$

とおくと, $r \leq s+1$, $|\beta_j| \leq q^{-N}$ のとき以下が成り立つ:

$$\begin{aligned} \left| \sum_{n=N}^{\infty} T(n) \right| &\leq \sum_{n=N}^{\infty} |T(n)| \leq C|T(N)|, \\ C &= \begin{cases} \frac{1}{1-D} & (D < 1) \\ \infty & (D \geq 1) \end{cases}, D = \prod_{i=1}^r \left(1 + \frac{|\beta_i - \alpha_i| q^N}{|1 - \beta_i q^N|} \right) E, \\ E &= \begin{cases} \prod_{i=r+1}^{s+1} \frac{|z| q^{Nl}}{|1 - \beta_i q^N|} & (\text{if } r \leq s) \\ 1 + \frac{q^N |q - \alpha_{s+1}|}{|1 - q^{N+1}|} & (\text{if } r = s+1) \end{cases}, \quad \beta_{s+1} := q. \end{aligned} \quad (2.17)$$

証明には次の補題を用いる.

補題 8. $n, N \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$, $n \geq N$, $0 < q < 1$, $c \in \mathbb{C}$ とする. $|c| \leq q^{-N}$ のとき次が成り立つ:

$$\frac{q^n}{|1 - cq^n|} \leq \frac{q^N}{|1 - cq^N|}. \quad (2.18)$$

$n \geq N$, $|c| \leq q^{-N}$ に注意すると,

$$\begin{aligned} |q^{-n} - c|^2 - |q^{-N} - c|^2 &= q^{-2n} - q^{-2N} - 2|c|q^{-n} + 2|c|q^{-N} \\ &= (q^{-n} - q^{-N})(q^{-n} + q^{-N} - 2|c|) \\ &\geq 2(q^{-n} - q^{-N})(q^{-N} - |c|) \quad (\because n \geq N) \\ &\geq 0 \quad (\because n \geq N, |c| \leq q^{-N}). \end{aligned} \quad (2.19)$$

$$\therefore |q^{-n} - c| \geq |q^{-N} - c|.$$

$$\therefore \frac{1}{|q^{-n} - c|} \leq \frac{1}{|q^{-N} - c|}.$$

$$\therefore \frac{q^n}{|1 - cq^n|} \leq \frac{q^N}{|1 - cq^N|}.$$

補題が示された. □

$r \leq s$ のとき

$$\begin{aligned} \left| \frac{T(n+1)}{T(n)} \right| &= \frac{|z| q^{nl}}{1 - q^{n+1}} \left| \frac{\prod_{i=1}^r (\alpha_i; q)_{n+1}}{\prod_{j=1}^s (\beta_j; q)_{n+1}} \right| \left| \frac{\prod_{j=1}^s (\beta_j; q)_n}{\prod_{i=1}^r (\alpha_i; q)_n} \right| \\ &= \frac{|z| q^{nl}}{1 - q^{n+1}} \left| \frac{(1 - \alpha_1 q^n) \cdots (1 - \alpha_r q^n)}{(1 - \beta_1 q^n) \cdots (1 - \beta_s q^n)} \right| \\ &= \prod_{i=1}^r \left(1 + \frac{|\beta_i - \alpha_i| q^n}{|1 - \beta_i q^n|} \right) \prod_{i=r+1}^{s+1} \frac{|z| q^{nl}}{|1 - \beta_i q^n|} \quad (\because \beta_{s+1} := q) \\ &\leq \prod_{i=1}^r \left(1 + \frac{|\beta_i - \alpha_i| q^N}{|1 - \beta_i q^N|} \right) \prod_{i=r+1}^{s+1} \frac{|z| q^{Nl}}{|1 - \beta_i q^N|} \quad (\because n \geq N) \\ &=: D. \end{aligned} \quad (2.20)$$

補題は最後の大小比較で用いた. $D < 1$ のとき,

$$\sum_{n=N}^{\infty} |T(n)| \leq (\text{初項 } |T(N)|, \text{ 公比 } D \text{ の等比数列の和}) = \frac{|T(N)|}{1 - D}$$

よって示された ($r = s + 1$ の時も同様). □

漸近展開 (2.15) を用いなくとも定理 4,7,9 を使うことで Jackson の第 2 種 q -Bessel 関数を精度保証付き数値計算することもできる.

定理 9. [35]

$$(w; q)_\infty {}_0\phi_1(-; w; q, wz) = {}_1\phi_1(z; 0; q, w) \quad (2.21)$$

より, Jackson の第 2 種 q -Bessel 関数は次の別表現を持つ:

$$J_\nu^{(2)}(x; q) = \frac{(x/2)^\nu}{(q; q)_\infty} {}_1\phi_1(-x^2/4; 0; q, q^{\nu+1}). \quad (2.22)$$

級数の中身に x^n を持たないような別表現である.

定理 9 を用いる方法と漸近展開 (2.15) を用いる方法はどちらも $(z; q)_\infty$ と q -超幾何関数を精度保証付き数値計算する点は同じである. これらの違いは $\nu < 0$ としたときの挙動にある. 定理 9 を用いる方法では $\nu < 0$ としたとき級数の中身にある $(q^\nu)^n$ が影響してゼロ除算が発生してしまう. 漸近展開を用いる方法ではゼロ除算をある程度防げるが, $\nu \rightarrow -\infty$ としたとき, 得られる結果の区間幅が **inf** (ゼロ除算やオーバーフローなど, 通常の浮動小数点数値として表すには大きすぎる値 [11]) になってしまう. これは q -超幾何関数内の q -Pochhammer 記号にある q^ν が影響している.

2.5 数値実験

Jackson の第 2 種 q -Bessel 関数を DE 公式と漸近展開によって精度保証付き数値計算し, Mathematica 11 を使って計算する方法と比較した. 実装には kv ライブラリ [13] (バージョン 0.4.43) を使用した. 計算環境は Ubuntu14.04LTS, CPU: Intel Xeon(R) CPU E3-1241 v3 @ 3.50GHz \times 8, メモリ: 15.6GB, gcc 4.8.4 コンパイラを使用している. Mathematica 11 では関数 QHypergeometricPFQ を使用した.

数値例: $q = 0.1, \nu = 1.4, x = 6000 + 1000i$ (この数値例では交代級数による方法は適用できない)

精度保証付き数値計算の結果 (積分 [13]): $[-811903614675.55958, -811903606004.70812] + i[-3282263160705.7828, -3282263152005.5209]$.

精度保証付き数値計算の結果 (DE 公式): $[-811903610341.59888, -811903610338.72387] + i[-3282263156357.3467, -3282263156354.1054]$.

精度保証付き数値計算の結果 (漸近展開): $[-811903610340.45716, -811903610339.47705] + i[-3282263156356.6651, -3282263156355.2021]$.

Mathematica の結果 (近似): $-8.119036103401538 \times 10^{11} - 3.2822631563556987 \times 10^{12}i$.

数値例: $q = 2^{-53}, x = 2^{-53}, \nu = 2$

精度保証付き数値計算の結果 (交代級数): $[3.081487911018969 \times 10^{-33}, 3.0814879110201631 \times 10^{-33}]$.

精度保証付き数値計算の結果 (積分 [13]): $[3.0814879110044665 \times 10^{-33}, 3.0814879110346906 \times 10^{-33}] +$

$i[-1.469128504022636 \times 10^{-44}, 1.4691284493772653 \times 10^{-44}]$.

精度保証付き数値計算の結果 (DE 公式): $[3.0814879110186132 \times 10^{-33}, 3.0814879110204197 \times 10^{-33}] +$

$i[-9.2380320625533862 \times 10^{-47}, 9.2444715835654248 \times 10^{-47}]$.

精度保証付き数値計算の結果 (漸近展開): $[3.081487911019242 \times 10^{-33}, 3.0814879110204197 \times 10^{-33}] +$

$i[-2.6664348032491181 \times 10^{-82}, 2.6664348032491181 \times 10^{-82}]$.

Mathematica の結果 (近似): $3.081487911019578 \times 10^{-33}$.

DE 公式と漸近展開による結果は Mathematica による計算結果を包含している. Mathematica11 を使って Jackson の第 2 種 q -Bessel 関数を計算する際は QHypergeometricPFQ の代わりに Sum を使うこともできる. この場合, $q = 2^{-53}$, $x = 2^{-53}$, $\nu = 2$ としたときの計算結果は次のようになる:

Mathematica の結果 (近似, Sum を使用): $3.081487911019578 \times 10^{-33} - 1.67385337691597 \times 10^{-56}i$.

Mathematica による計算結果では虚部方向のずれが生じているが, そのずれも精度保証付き数値計算の結果に包含されている.

2.6 本研究のまとめと今後の課題

本研究では Jackson の第 2 種 q -Bessel 関数を 4 通りの方法 (交代級数による方法, 漸近展開 (2.15) による方法, kv ライブラリ [13] の数値積分パッケージを使う方法と DE 公式を使う方法) によって精度保証付き数値計算した. 各手法の性能を表にまとめると以下のとおりである. なお本稿の実験環境において計算時間はどの手法を用いても数秒以内で終わる.

状況	交代級数	漸近展開	積分 (kv & DE)
$ x \rightarrow \infty$	制限 (2.1) より不可	x^ν が \inf にならない限り有効	x^ν が \inf にならない限り有効
$\nu \rightarrow \infty$	x^ν が \inf にならない限り有効	x^ν が \inf にならない限り有効	x^ν が \inf にならない限り有効
$\nu \rightarrow -\infty$	制限 (2.1) より不可	q^ν でゼロ除算が発生しない限り有効	積分表示が成立しないので不可

漸近展開 (2.15) を用いても $\nu \rightarrow \pm\infty$ のときはうまくいかない時がある. この点を克服できるかは今後の課題となる.

3 Hahn-Exton の q -Bessel 関数の精度保証付き数値計算法

本節では交代級数の性質を用いる方法 [15] と q -超幾何関数を用いる手法を提案し, その有効範囲を議論する.

3.1 交代級数を用いる方法

Hahn-Exton の q -Bessel 関数

$$J_\nu^{(3)}(x; q) = \frac{(q^{\nu+1}; q)_\infty}{(q; q)_\infty} x^\nu \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n q^{n(n+1)/2} x^{2n}}{(q^{\nu+1}; q)_n (q; q)_n}$$

に現れる $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n q^{n(n+1)/2} x^{2n}}{(q^{\nu+1}; q)_n (q; q)_n}$ に対しては

$$\begin{cases} 0 < q < 1 \\ x, \nu \in \mathbb{R} \\ |q^\nu| < 1 \end{cases} \quad (3.1)$$

に制限すれば系 2 が適用できる. 実際,

$$d_n := \frac{(-1)^n q^{n(n+1)/2} x^{2n}}{(q^{\nu+1}; q)_n (q; q)_n}$$

とおくと,

$$|c_n| := \left| \frac{d_n}{d_{n-1}} \right| = \frac{q^n x^2}{(1 - q^n)(1 - q^{\nu+n})}$$

なので,

$$\begin{aligned} |c_n| \leq 1 &\iff \frac{q^n x^2}{(1 - q^n)(1 - q^{\nu+n})} \leq 1 \\ &\iff q^\nu Q^2 - (q^\nu + x^2 + 1)Q + 1 \geq 0 \quad (Q := q^n). \\ \therefore Q &\leq \frac{q^\nu + x^2 + 1 - \sqrt{(q^\nu + x^2 + 1)^2 - 4q^\nu}}{2q^\nu} =: A. \\ \therefore n &\geq \frac{\log A}{\log q}. \end{aligned}$$

つまり $\frac{\log A}{\log q}$ 以上の n では $|c_n| = \left| \frac{d_n}{d_{n-1}} \right| \leq 1$ となる. よって $\{d_n\}$ はその絶対値が単調減少する交代数列となる. このことから前述した交代級数の定理が適用できる.

3.2 q -超幾何関数を用いる方法

q -Pochhammer 記号と q -超幾何関数を精度保証付き数値計算できることから, Hahn-Exton の q -Bessel 関数を精度保証付き数値計算できる. しかし $|x|$ の絶対値が大きいときには計算がうまくいかない場合がある. これは級数の中身にある x^n が `inf` になるためである. 実際, $q = 0.1$, $x = 40000$, $\nu = 4.5$ で数値実験してみると

精度保証付き数値計算の結果 (区間): `[-inf, inf]`

となってしまう. 交代級数の性質を用いる方法でも同様である. なお, 実験環境は OS: Ubuntu14.04LTS, コンパイラ: gcc version 4.8.4, CPU: Intel Xeon(R) CPU E3-1241 v3 @ 3.50GHz \times 8, メモリ: 15.6GB, kv ライブラリ [13] のバージョン: 0.4.43 である.

そこで, 級数の中身に x^n を持たないような別表現を用いる.

定理 10. [36]

$$(w; q)_\infty {}_1\phi_1(0; w; q, z) = (z; q)_\infty {}_1\phi_1(0; z; q, w). \quad (3.2)$$

定理 10 より次が成り立つ.

定理 11. [37]

$$J_{\nu}^{(3)}(x; q) = x^{\nu} \frac{(x^2 q; q)_{\infty}}{(q; q)_{\infty}} {}_1\phi_1(0; x^2 q; q, q^{\nu+1}). \quad (3.3)$$

級数の中身に x^n を持たないような別表現である.

3.3 数値実験

(3.3) を用いて $q = 0.1$, $x = 40000$, $\nu = 4.5$ で数値実験してみると

精度保証付き数値計算の結果 (区間): $[-1.1387663357821749 \times 10^{58},$
 $-1.1387663357818205 \times 10^{58}]$

となる. 交代級数を用いる場合, 定義通り計算した場合は計算がうまく行かなかったが (3.3) によって計算が改善されたと言える. ちなみに, Mathematica に組み込まれている関数 QHypergeometricPFQ と QPochhammer で Hahn-Exton の q -Bessel 関数の近似値を求めることもできる. 上の数値例における Mathematica での結果は $-1.1387663357819748 \times 10^{58}$ であり, 精度保証付き数値計算の結果に含まれていると言える.

今度は x の絶対値がとても小さい場合について見てみよう. $q = 0.1$, $x = 2^{-53}$, $\nu = 3.5$ で数値実験してみると

精度保証付き数値計算の結果 (交代級数): $[-1.6200395214118995 \times 10^{-56},$
 $-1.6200395214121531 \times 10^{-56}]$

精度保証付き数値計算の結果 ((3.3) を使用): $[-1.6200395214117612 \times 10^{-56},$
 $-1.6200395214122652 \times 10^{-56}]$

Mathematica の結果 (近似): $1.620039521412011 \times 10^{-56}$

となる. この場合は交代級数を用いる場合が少しだけ区間幅が小さくなる.

Mathematica を使って Hahn-Exton の q -Bessel 関数を計算する際は QHypergeometricPFQ の代わりに Sum を使うこともできる.

Mathematica の結果 (近似, Sum を使用):

$1.620039521412011 \times 10^{-56} - 1.804518679293575 \times 10^{-445}i$

Sum を使用した計算結果では虚部方向のずれが生じている.

3.4 まとめと今後の課題

本研究では Hahn-Exton の q -Bessel 関数を 2 通りの方法 (交代級数による方法, q -超幾何関数表示 (3.3) による方法) によって精度保証付き数値計算した. 各手法の性能を表にまとめると以下のとおりである.

状況	交代級数	(3.3) による方法
$ x \rightarrow \infty$	制限 (3.1) より不可	x^ν が \inf にならない限り有効
$\nu \rightarrow \infty$	x^ν が \inf にならない限り有効	x^ν が \inf にならない限り有効
$\nu < 0$	制限 (3.1) より不可	q^ν でゼロ除算が発生しない限り有効

q -超幾何関数表示 (3.3) を用いても $\nu \rightarrow \infty$, $\nu < 0$ のときはうまくいかない場合がある. この点を克服できるかは今後の課題となる.

4 いくつかの q -特殊関数に対して有効な DE 変換について

Jackson の第 2 種 q -Bessel 関数, Hahn-Exton の q -Bessel 関数はそれぞれ以下のような無限区間積分表示を持つ [39]:

$$J_\nu^{(2)}(z; q) = \frac{(z/2)^\nu}{\sqrt{2\pi \log q^{-1}}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\left(\frac{q^{\nu+1/2} z^2 e^{ix}}{4}; q\right)_\infty \exp\left(\frac{x^2}{\log q^2}\right)}{(q, -q^{\nu+1/2} e^{ix}; q)_\infty} dx, \quad (4.1)$$

$$J_\nu^{(3)}(z; q) = \frac{z^\nu}{\sqrt{\pi \log q^{-2}}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left(\frac{x^2}{\log q^2}\right)}{(q, -q^{\nu+1/2} e^{ix}, -q^{1/2} z^2 e^{ix}; q)_\infty} dx. \quad (4.2)$$

この 2 つの関数はどれも被積分関数 f は $|f(z)| \leq C_1 \exp(-\beta z^2)$ ($\beta = -\frac{1}{2 \log q}$) を満たすという共通点がある. 本節ではこれらの積分表示に対して,

$$\psi_{DE}(t) := \exp(t - \exp(-t))$$

が有効であることを示す. この変換については次の定理が知られている.

定理 12. [40]

$$\mathcal{D}_{DE}(d) := \{z = \psi_{DE}(w) : w \in \mathcal{D}_d\}, \quad h := \frac{\log(2\pi d N / \beta)}{N}$$

とする. f が $\mathcal{D}_{DE}(d)$ ($d \in (0, \frac{\pi}{2})$) で正則で, 定数 $\beta \in (0, 1], C_1$ に対して

$$|f(z)| \leq C_1 \left| \left(\frac{z}{1+z} \right)^{\beta-1} \exp(-\beta z) \right| \quad (\forall z \in \mathcal{D}_{DE}(d))$$

が成り立つなら, 次を満たす定数 C が存在する:

$$\left| \int_0^\infty f(x) dx - h \sum_{k=-N}^N f(\psi_{DE}(kh)) \psi'_{DE}(kh) \right| \leq C \exp(-2\pi d/h).$$

ここからは次を示す. ($\mathcal{D}_{DE}(d), h$ は定理 12 と同じ).

定理 13. f が $\mathcal{D}_{DE}(d)$ ($d \in (0, \frac{\pi}{2})$) で正則で, 定数 $\tilde{\beta}, \beta \in (0, 1], C_1$ に対して

$$|f(z)| \leq C_1 \left| \left(\frac{z}{1+z} \right)^{\tilde{\beta}-1} \exp(-\beta z^2) \right| \quad (\forall z \in \mathcal{D}_{DE}(d))$$

が成り立つなら、次を満たす定数 C が存在する:

$$\left| \int_0^\infty f(x)dx - h \sum_{k=-N}^N f(\psi_{DE}(kh))\psi'_{DE}(kh) \right| \leq C \exp(-2\pi d/h).$$

定理 12 の証明を手本に定理 13 を示す. 証明には定理 14, 15 を用いる (ただし $h := \frac{\log(2\pi d\gamma N/\beta)}{\gamma N}$).

定理 14. $[40]$ f を \mathcal{D}_d ($d > 0$) で正則な関数とし, 正定数 A, B, γ に対して,

$$\mathcal{N}(f, d) := \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \int_{-\infty}^\infty (|f(x + i(d - \epsilon))| + |f(x - i(d - \epsilon))|)dx < \infty, \quad (4.3)$$

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \int_{-(d-\epsilon)}^{d-\epsilon} |f(x + iy)|dy = 0 \quad (4.4)$$

$$|f(x)| \leq A \exp(\gamma|x|) \exp(-B \exp(\gamma|x|)) \quad (\forall x \in \mathbb{R}) \quad (4.5)$$

が成り立つとき, 次を満たす定数 C が存在する.

$$\left| \int_{-\infty}^\infty f(x)dx - h \sum_{k=-N}^N f(kh) \right| \leq C \exp(-2\pi d/h).$$

定理 15. $[40]$ 正定数 A', B', γ' に対して,

$$|f(z)| \leq |g(z)| \quad (\forall z \in \mathcal{D}_d), \quad (4.6)$$

$$|g(x + iy)| \leq A' \exp(\gamma'|x|) \exp(-B' \exp(\gamma'|x|)) \quad (\forall x \in \mathbb{R}, \forall y \in [-d, d]), \quad (4.7)$$

$$|g(x)| \leq A \exp(\gamma|x|) \exp(-B \exp(\gamma|x|)) \quad (\forall x \in \mathbb{R}) \quad (4.8)$$

なる関数 $g \in \text{Cl}(\mathcal{D}_d)$ が存在するとき, \mathcal{D}_d ($d > 0$) で正則な関数 f と, 正定数 A, B, γ に対して, (4.3), (4.4), (4.5) が成り立つ.

4.1 主定理の証明

$f(\psi_{DE}(z))\psi'_{DE}(z)$ は \mathcal{D}_d で正則なので定理 13 の仮定より次が成り立つ:

$$\begin{aligned} |f(\psi_{DE}(z))\psi'_{DE}(z)| &\leq C_1 \left| \left\{ \frac{\exp z}{\exp z + \exp(\exp(-z))} \right\}^{\tilde{\beta}} \right| \\ &\quad \times |\exp(-\beta \exp(2z) \exp(-2 \exp(-z)))| \\ &\quad \times |(\exp(-\exp(-z)) + \exp(-z))(1 + \exp z)| =: g(z). \end{aligned}$$

補題 16. $d \in (0, \pi/2)$, $B > 0$ に対し, $g(z)$ は $B = \beta, \gamma = 1$ で定理 15 を満たす.

補題より, $f(\psi_{DE}(z))\psi'_{DE}(z)$ は $B = \beta, \gamma = 1$ のとき定理 14 の仮定を満たすので定理 13 が示される.

4.2 補題の証明 (概略)

$z = x + iy$ ($x \in \mathbb{R}, y \in [-d, d]$) として,

$$\begin{aligned} g_1(z) &:= \frac{\exp z}{\exp z + \exp(\exp(-z))} \\ g_2(z) &:= \exp(-\beta \exp(2z) \exp(-2 \exp(-z))) \\ g_3(z) &:= (\exp(-\exp(-z)) + \exp(-z))(1 + \exp z) \end{aligned}$$

とおく ($g = g_1^{\tilde{\beta}} g_2 g_3$ が成り立つ). 正定数 \hat{x} が

$$\alpha := \hat{x} - e^{-\hat{x}} > 0, \quad \delta := \pi/2 - d - 2e^{-\hat{x}} \sin d > 0$$

を満たすとして, (i) $x < 0$ の場合, (ii) $0 \leq x \leq \hat{x}$ の場合, (iii) $x > \hat{x}$ の場合に分けて示す. また, 以下が成立することも注意する:

$$\begin{aligned} |g_1(x + iy)| &= \left| \frac{1}{1 + \exp(\exp(-x - iy) - x - iy)} \right| \\ &\leq \left| \frac{1}{1 - |\exp(\exp(-x - iy) - x - iy)|} \right| \\ &= \frac{1}{|1 - \exp(e^{-x} \cos y - x)|}, \\ |g_2(x + iy)| &= |\exp(-\beta \exp(2(x + iy))) \cdot \exp(-2 \exp(-x - iy))| \\ &= |\exp(-\beta \Re(\exp(2(x + iy)))) \cdot \exp(-2 \exp(-x - iy))| \\ &= \exp(-\beta \exp(2x - 2e^{-x} \cos y) \cos(y + 2e^{-x} \sin y)), \\ |g_3(x + iy)| &= |(\exp(-\exp(-x - iy)) + \exp(-x - iy)) \cdot (1 + \exp(x + iy))| \\ &\leq (|\exp(-\exp(-x - iy))| + |\exp(-x - iy)|) \cdot (1 + |\exp(x + iy)|) \\ &= (\exp(-e^{-x} \cos y) + e^{-x})(1 + \exp x). \end{aligned}$$

(i) の場合 ($x < 0$): いま,

$$\begin{aligned} |g_1| &= \frac{1}{\exp(e^{-x} \cos y - x) - 1} \leq \frac{1}{\exp(e^{-x} \cos d) - 1}, \\ |g_3| &\leq 4e^{-x} \end{aligned}$$

が成立する. また,

$$\exp(2x - 2e^{-x} \cos y) \cos(y + 2e^{-x} \sin y) \geq -1$$

より, $|g_2| \leq \exp \beta$ となる. また, $x < 0$ のとき,

$$1 - \exp(-e^{-x} \cos d) \geq 1/e$$

が成り立つので,

$$|g| = |g_1|^{\tilde{\beta}} |g_2| |g_3| \leq 4 \exp(\beta + \tilde{\beta} - x - \cos d e^{-x})$$

となり, (4.7) が示される. $y = 0$ とすれば,

$$|g| \leq 4 \exp(\beta + \tilde{\beta} - x - e^{-x}) \leq 4 \exp(\beta + \tilde{\beta} - x - \beta e^{-x}) \quad (\because \beta \leq 1)$$

となり, (4.8) も示される.

(ii) の場合 ($0 \leq x \leq \hat{x}$): このときは最大値最小値の定理より,

$$|g_2| \leq C_2 (= A \exp(\hat{x}) \exp(-\beta))$$

なる定数 C_2 が存在する. C_2 を決定する. いま, g_1, g_3 は

$$\begin{aligned} |g_1(x+iy)| &= \frac{1}{1 - \exp(e^{-x} \cos y - x)} \\ &\leq \frac{1}{1 - \exp(e^{-x} - x)} \quad (\because \cos y \leq 1) \\ &\leq \frac{1}{1 - \exp(e^{-\hat{x}} - \hat{x})} \quad (\because x \leq \hat{x}) \\ &= \frac{\exp \hat{x}}{\exp \hat{x} - \exp(e^{-\hat{x}})}, \\ |g_3(x+iy)| &= (\exp(-e^{-x} \cos y) + e^{-x})(1 + \exp x) \\ &\leq (\exp(-e^{-\hat{x}}) + 1)(1 + \exp \hat{x}) \quad (\because x \in [0, \hat{x}], \cos y \leq 1) \end{aligned}$$

と評価される. g_2 については,

$$\beta \exp(x - e^{-x} \cos y) \cos(y + 2e^{-x} \sin y) \leq -\beta \exp(x - e^{-x} \cos y) \leq -\beta/e \quad (\because x \geq 0, \cos y \leq 1)$$

となることから, $|g_2(x+iy)| \leq \exp(-\beta/e)$ となる.

$$\therefore C_2 = \frac{(\exp(-e^{-\hat{x}}) + 1)(1 + e^{\hat{x}}) \exp(-\beta/e) e^{\hat{x}}}{e^{\hat{x}} - \exp(e^{-\hat{x}})}.$$

(iii) の場合 ($x > \hat{x}$): いま,

$$\begin{aligned} |g_1| &\leq \frac{1}{1 - \exp(e^{-x} - x)} \leq \frac{1}{1 - \exp(e^{-\hat{x}} - \hat{x})} = \frac{1}{1 - \exp(-\alpha)}, \\ |g_3| &\leq 4e^x \end{aligned}$$

が成立する. また,

$$\exp(2x - 2e^{-x} \cos y) \geq \exp(x - 1), \quad \cos(y + 2e^{-x} \sin y) \geq \cos(\pi/2 - \delta)$$

より, $|g_2| \leq \exp\left(-\frac{\beta \cos(\pi/2 - \delta)}{e} \exp x\right)$ となり, (4.7) が示される. $y = 0$ として $x \rightarrow \infty$ としたときの漸近的な挙動を考えれば (4.8) も示される ($\because g_2 \sim \exp(-\beta \exp x)$).

補題が示されたので定理 13 が示された. 次に, 定理 13, 14 における定数 C , 定理 13 における定数 C_1 の評価を行う. 定数 C を評価するには定理 14 の証明過程をたどれば良い.

4.3 定数 C の評価と今後の課題

ここで,

$$\begin{aligned} (\text{定理 14 の左辺}) &= \left| \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx - h \sum_{k=-N}^N f(kh) \right| \\ &\leq \left| \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx - h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh) \right| + h \left| \sum_{|k| \geq N} f(kh) \right| \end{aligned} \tag{4.9}$$

となるので, (4.9) の第 1 項と (4.9) の第 2 項をそれぞれ評価する. 定理 14 の導出には定理 17 が使われた.

定理 17. [41] \mathcal{D}_d で正則な関数 f が

$$\mathcal{N}(f, d) := \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{\infty} (|f(x + i(d - \epsilon))| + |f(x - i(d - \epsilon))|) dx < \infty \quad (4.10)$$

を満たすなら, 以下が成り立つ:

$$\left| \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx - h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh) \right| \leq \frac{\exp(-2\pi d/h)}{1 - \exp(-2\pi d/h)} \mathcal{N}(f, d). \quad (4.11)$$

(4.11) の右辺を評価するのには補題 18 を用いる.

補題 18. [42] 関数 $\exp(x/\log x)$ が $x = e$ で最小値を持つということを利用すれば,

$$\frac{\exp(-2\pi d/h)}{1 - \exp(-2\pi d/h)} \leq C_3 \exp(-2\pi d/h)$$

なる定数 C_3 を決められる.

$$\frac{\exp(-2\pi d/h)}{1 - \exp(-2\pi d/h)} = \frac{\exp(-2\pi d/h)}{1 - \exp(-\beta(2\pi d\gamma N/\beta)/\log(2\pi d\gamma N/\beta))} \leq \frac{\exp(-2\pi d/h)}{1 - \exp(-\beta e)}$$

となることから, $C_3 = \frac{1}{1 - \exp(-\beta e)}$ である.

$\mathcal{N}(f, d)$ の評価には補題 19 を使う.

補題 19. [42] \mathcal{D}_d で正則な関数 f が

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \int_{-(d-\epsilon)}^{d-\epsilon} |f(x + iy)| dy = 0 \quad (4.12)$$

を満たすならば, 以下が成り立つ:

$$\mathcal{N}(f, d) = \lim_{y \rightarrow d} \int_{-\infty}^{\infty} |f(x + iy)| dx + \lim_{y \rightarrow -d} \int_{-\infty}^{\infty} |f(x + iy)| dx.$$

補題 19 と (4.5) より,

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(f, d) &= \lim_{y \rightarrow d} \int_{-\infty}^{\infty} |f(x + iy)| dx + \lim_{y \rightarrow -d} \int_{-\infty}^{\infty} |f(x + iy)| dx \\ &\leq 2A \int_{-\infty}^{\infty} \exp(|x|) \exp(-\beta \exp(|x|)) dx \\ &= 2A \left\{ \int_{-\infty}^0 \exp(-x) \exp(-\beta \exp(-x)) dx + \int_0^{\infty} \exp x \exp(-\beta \exp x) dx \right\} \\ &= 2A \{ [\exp(-\beta \exp(-x))]_{-\infty}^0 - [\exp(-\beta \exp x)]_0^{\infty} \} / \beta = \frac{4A}{\beta} \exp(-\beta) \end{aligned}$$

となる. (4.9) の第 1 項が評価された. 次に (4.9) の第 2 項を評価する.

補題 20. [40] 定理 14 の仮定のもとで, 以下が成り立つ:

$$h \left| \sum_{|k| \leq N} f(kh) \right| \leq \frac{2A}{\beta\gamma} \exp(-\beta \exp(\gamma Nh)).$$

(4.9) と定理 17, 補題 18, 19, 20 より, N が $2\pi d\gamma N/\beta > e$ を満たすとすれば,

$$C = \frac{2A}{\beta\gamma} (1 + 2 \exp(-\beta)/(1 - \exp(-\beta e)))$$

である. A については補題 16 での議論をたどることで次のように評価できる:

$$A \leq \max \left(\frac{C_2 \exp \beta}{\exp \hat{x}}, 4 \exp(\beta + \tilde{\beta}), \frac{4}{1 - \exp(-\alpha)} \right) \times C_1.$$

あとは定数 C_1 さえ評価できれば定数 C が評価できて各 q -特殊関数を精度保証付き数値計算できる. しかし現状では定数 C_1 を評価する術がないためここまでの限界である.

5 楕円超幾何関数の精度保証付き数値計算とその課題

楕円超幾何関数は Date-Jimbo-Kuniba-Miwa-Okado, Frenkel-Turaev による Yang-Baxter 方程式の研究で導入された関数で, 次のように定義される ($0 < p < 1, 0 < q < 1$ を仮定する) [17]:

$${}_rE_{r-1}(a_1, \dots, a_r; b_1, \dots, b_{r-1}; p, q; z) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\prod_{i=1}^r (a_i; p, q)_n z^n}{\prod_{j=1}^{r-1} (b_j; p, q)_n (q; p, q)_n}.$$

q -超幾何関数にパラメータ p を加えた拡張ともいえる. $(z; p, q)_n$ は有限の楕円 Pochhammer 記号で以下のように定義される.

$$(z; p, q)_n := \begin{cases} \prod_{k=0}^{n-1} \theta(zq^k; p) & (n = 1, 2, \dots) \\ 1 / \prod_{k=0}^{-n-1} \theta(zq^{n+k}; p) & (n = -1, -2, \dots) \\ 1 & (n = 0) \end{cases}.$$

$$\text{ただし, } \theta(z; q) := (z; q)_{\infty} (qz^{-1}; q)_{\infty}.$$

$(z; p, q)_n$ は $p \rightarrow 0$ のとき $(z; q)_n$ に戻るのて, $p \rightarrow 0$ としたとき, ${}_rE_{r-1} \rightarrow {}_r\phi_{r-1}$ となる. また, 楕円超幾何関数は公比が有理型二重周期関数になることも知られている. これが楕円と名につく由来である.

本研究では公比を使って剰余項を評価する方法を楕円超幾何関数 ${}_2E_1$ に応用し, 楕円超幾何関数 ${}_2E_1$ を足掛かりに, 楕円特殊関数の精度保証付き数値計算法を確立することを目指した.

5.1 誤差評価手法

$$T(n) := \frac{(a_1; p, q)_n (a_2; p, q)_n z^n}{(b_1; p, q)_n (q; p, q)_n}$$

とにおいて, $n \geq N$ のときの $\left| \frac{T(n+1)}{T(n)} \right|$ の評価を考える.

$$\begin{aligned} \left| \frac{T(n+1)}{T(n)} \right| &= |z| \left| \frac{(b_1; p, q)_{n+1}(q; p, q)_{n+1}}{(b_1; p, q)_n(q; p, q)_n} \right| \left| \frac{(a_1; p, q)_n(a_2; p, q)_n}{(a_1; p, q)_{n+1}(a_2; p, q)_{n+1}} \right| \\ &= |z| \left| \frac{\theta(b_1 q^n; p) \theta(q^{n+1}; p)}{\theta(a_1 q^n; p) \theta(a_2 q^n; p)} \right| \\ &= |z| \left| \frac{(b_1 q^n; p)_\infty (q^{n+1}; p)_\infty}{\left(\frac{p}{a_1 q^n}; p \right)_\infty \left(\frac{p}{a_2 q^n}; p \right)_\infty} \right| \left| \frac{\left(\frac{p}{b_1 q^n}; p \right)_\infty \left(\frac{p}{q^{n+1}}; p \right)_\infty}{(a_1 q^n; p)_\infty (a_2 q^n; p)_\infty} \right| \end{aligned}$$

$\left| \frac{(b_1 q^n; p)_\infty (q^{n+1}; p)_\infty}{(a_1 q^n; p)_\infty (a_2 q^n; p)_\infty} \right|$ の評価から考えよう. $n \geq N$ であるときの $|(b_1 q^n; p)_\infty (q^{n+1}; p)_\infty|$ の評価には定理 4 を使う. 定理 4 と $n \geq N$ より,

$$|(b_1 q^n; p)_\infty (q^{n+1}; p)_\infty| \leq \left(1 + \frac{2|b_1|q^N p^m}{1-p} \right) \left(1 + \frac{2q^{N+1} p^m}{1-p} \right) |(b_1 q^n; p)_m (q^{n+1}; p)_m|$$

となる. $n \geq N$ のとき $\frac{1}{|(a_1 q^n; p)_\infty (a_2 q^n; p)_\infty|}$ の評価には定理 5 を使う. 定理 5 と $n \geq N$ より,

$$\left| \frac{1}{(a_1 q^n; p)_\infty (a_2 q^n; p)_\infty} \right| \leq \frac{\left(1 + \frac{2|a_1|q^N p^m}{1-p} \right) \left(1 + \frac{2|a_2|q^N p^m}{1-p} \right)}{|(a_1 q^n; p)_m (a_2 q^n; p)_m|}$$

となる. ここまで,

$$|(b_1 q^n; p)_\infty (q^{n+1}; p)_\infty| \leq \left(1 + \frac{2|b_1|q^N p^m}{1-p} \right) \left(1 + \frac{2q^{N+1} p^m}{1-p} \right) |(b_1 q^n; p)_m (q^{n+1}; p)_m|,$$

$$\left| \frac{1}{(a_1 q^n; p)_\infty (a_2 q^n; p)_\infty} \right| \leq \frac{\left(1 + \frac{2|a_1|q^N p^m}{1-p} \right) \left(1 + \frac{2|a_2|q^N p^m}{1-p} \right)}{|(a_1 q^n; p)_m (a_2 q^n; p)_m|}$$

であることが分かった.

$|(b_1 q^n; p)_m (q^{n+1}; p)_m|$, $\frac{1}{|(a_1 q^n; p)_m (a_2 q^n; p)_m|}$ の評価について考える. まず,

$$\begin{aligned} |(b_1 q^n; p)_m| &= |(1 - b_1 q^n) \cdots (1 - b_1 q^n p^{m-1})| \\ &= |(b_1 q^n - 1) \cdots (b_1 q^n p^{m-1} - 1)| \\ &\leq |(b_1 q^N - 1) \cdots (b_1 q^N p^{m-1} - 1)| \quad (\because q^n \leq q^N) \\ &= |(1 - b_1 q^N) \cdots (1 - b_1 q^N p^{m-1})| \\ &= |(b_1 q^N; p)_m| \end{aligned}$$

となることから $|(b_1 q^n; p)_m|$ が評価できる (同様に $|(q^{n+1}; p)_m| \leq |(q^{N+1}; p)_m|$).

$\frac{1}{|(a_1 q^n; p)_m (a_2 q^n; p)_m|}$ の評価には以下の補題を用いる.

補題 21. $n, N \in \mathbb{N}, n \geq N, 0 < q < 1, c \in \mathbb{C}$ とする. $q^N \leq |c|$ のとき,

$$\frac{1}{|c - q^n|} \leq \frac{1}{|c - q^N|}$$

が成り立つ.

(証明)

$$\begin{aligned}
|c - q^n|^2 - |c - q^N|^2 &= q^{2n} - q^{2N} - 2|c|q^n + 2|c|q^N \\
&= (q^n - q^N)(q^n + q^N) - 2|c|(q^n - q^N) \\
&= (q^n - q^N)(q^n + q^N - 2|c|) \\
&\geq 0 \quad (\because n \geq N, q^N \leq |c|) \\
\therefore |c - q^n| &\geq |c - q^N| \\
\therefore \frac{1}{|c - q^n|} &\leq \frac{1}{|c - q^N|}
\end{aligned}$$

補題が示された. □

$q^N \leq \left| \frac{1}{a_1} \right|$ のとき

$$\begin{aligned}
\frac{1}{|(a_1 q^n; p)_m|} &= \frac{1}{|(1 - a_1 q^n) \cdots (1 - a_1 q^n p^{m-1})|} \\
&= \frac{|a_1^{-m}| p^{-m(m-1)/2}}{\left| \left(\frac{1}{a_1} - q^n \right) \cdots \left(\frac{p^{1-m}}{a_1} - q^n \right) \right|} \\
&\leq \frac{|a_1^{-m}| p^{-m(m-1)/2}}{\left| \left(\frac{1}{a_1} - q^N \right) \cdots \left(\frac{p^{1-m}}{a_1} - q^N \right) \right|}
\end{aligned}$$

(補題は最後の大小比較のところで用いた)

同様に, $q^N \leq \left| \frac{1}{a_2} \right|$ のとき

$$\frac{1}{|(a_2 q^n; p)_m|} \leq \frac{|a_2^{-m}| p^{-m(m-1)/2}}{\left| \left(\frac{1}{a_2} - q^N \right) \cdots \left(\frac{p^{1-m}}{a_2} - q^N \right) \right|}$$

が成り立つ.

ここまで, 楕円超幾何関数 ${}_2E_1$ の公比の絶対値,

$$\left| \frac{T(n+1)}{T(n)} \right| = |z| \left| \frac{(b_1 q^n; p)_\infty (q^{n+1}; p)_\infty}{\left(\frac{p}{a_1 q^n}; p \right)_\infty \left(\frac{p}{a_2 q^n}; p \right)_\infty} \right| \left| \frac{\left(\frac{p}{b_1 q^n}; p \right)_\infty \left(\frac{p}{q^{n+1}}; p \right)_\infty}{(a_1 q^n; p)_\infty (a_2 q^n; p)_\infty} \right|$$

のうち, $\left| \frac{(b_1 q^n; p)_\infty (q^{n+1}; p)_\infty}{(a_1 q^n; p)_\infty (a_2 q^n; p)_\infty} \right|$ の評価ができた.

ここからは $\left| \frac{\left(\frac{p}{b_1 q^n}; p \right)_\infty \left(\frac{p}{q^{n+1}}; p \right)_\infty}{\left(\frac{p}{a_1 q^n}; p \right)_\infty \left(\frac{p}{a_2 q^n}; p \right)_\infty} \right|$ の評価を考える. いま, n は $n \geq N$ なる任意の自然数なので, $0 < \frac{|p|q^{-n-1}p^m}{1-p} < \frac{1}{2}$, $0 < \frac{|p/b_1|q^{-n}p^m}{1-p} < \frac{1}{2}$, $0 < \frac{|p/a_2|q^{-n}p^m}{1-p} < \frac{1}{2}$, $0 < \frac{|p/a_1|q^{-n}p^m}{1-p} < \frac{1}{2}$ なる

正の整数 m をとることはできない. そのため,

$$\left| \frac{\left(\frac{p}{b_1 q^n}; p \right)_\infty \left(\frac{p}{q^{n+1}}; p \right)_\infty}{\left(\frac{p}{a_1 q^n}; p \right)_\infty \left(\frac{p}{a_2 q^n}; p \right)_\infty} \right|$$

の評価に定理 4, 5 を適用できない. 定理 4, 5 を適用できるように変形しよう. 変形には定理 22, 23 を使う.

定理 22. [43]

$${}_1\phi_1(q^a; 0; q, xq) = x^{-a} {}_1\phi_1(q^a; 0; q, q/x),$$

$$x \rightarrow \infty, \quad \Re(a) > 0, \quad x \in \mathbb{R}, \quad |q| < 1.$$

定理 23. [1, 17]

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{q^{n(n-1)/2} (-x)^n}{(q; q)_n} = (x; q)_{\infty}, \quad |q| < 1.$$

分子にある q -Pochhammer 記号の評価をする. まず, 定理 23 より,

$$\begin{aligned} \left| \left(\frac{p}{b_1 q^n} \right)_{\infty} \right| &= \left| \sum_{k=0}^{\infty} \frac{p^{k(k-1)/2}}{(p; p)_k} \left(-\frac{p}{b_1 q^n} \right)^k \right| \\ &= \left| \sum_{k=0}^{\infty} \frac{p^{k(k-1)/2} (1-p)^k}{(p; p)_k} \left(-\frac{p}{(1-p)b_1 q^n} \right)^k \right|. \end{aligned}$$

補題 24. [44]

$$(1-q)^k \leq (q; q)_k \leq 1/(q; q)_{\infty}, \quad 0 < q < 1, \quad k \in \mathbb{N}_{\geq 0}.$$

補題と定理 22 より ($B := \frac{p}{(1-p)b_1 q^n}$, $C := p(1-p)b_1 q^n$),

$$\begin{aligned} \left| \sum_{k=0}^{\infty} \frac{p^{k(k-1)/2} (1-p)^k}{(p; p)_k} (-B)^k \right| &\leq \left| \sum_{k=0}^{\infty} \frac{p^{k(k-1)/2} (p; p)_k}{(p; p)_k} (-B)^k \right| \\ &= \left| {}_1\phi_1 \left(p; 0; p, \frac{p}{(1-p)b_1 q^n} \right) \right| \\ &\leq \frac{C}{p} |{}_1\phi_1(p; 0; p, C)| \quad (\because \text{定理 22}) \\ &= \frac{C}{p} \left| \sum_{k=0}^{\infty} \frac{p^{k(k-1)/2} (p; p)_k}{(p; p)_k} (-C)^k \right| \\ &\leq \frac{C}{p(p; p)_{\infty}} |(C; p)_{\infty}| \quad (\because \text{定理 23}). \end{aligned}$$

同様に,

$$\left| \left(\frac{p}{q^{n+1}} \right)_{\infty} \right| \leq \frac{(1-p)q^{n+1}}{(p; p)_{\infty}} (p(1-p)q^{n+1}; p)_{\infty}.$$

定理 4 の仮定を満たすように $l \in \mathbb{N}$ をとると,

$$\begin{aligned} |(p(1-p)b_1 q^n; p)_{\infty}| &\leq (1 + 2|b_1|q^N p^{l+1}) |(p(1-p)b_1 q^n; p)_l| \\ |(p(1-p)b_1 q^n; p)_l| &\leq |(p(1-p)b_1 q^N; p)_l| \quad (\because n \geq N). \end{aligned}$$

同様に,

$$|(p(1-p)q^{n+1}; p)_{\infty}| \leq (1 + 2q^{N+1} p^{l+1}) |(p(1-p)q^{N+1}; p)_l| \quad (\because n \geq N).$$

次に $1/\left(\frac{p}{a_1 q^n}; p\right)_\infty, 1/\left(\frac{p}{a_2 q^n}; p\right)_\infty$ を評価する. 定理 22, 23 と先の補題から,

$$\begin{aligned}
\left|1/\left(\frac{p}{a_1 q^n}; p\right)_\infty\right| &= 1/\left|\sum_{k=0}^{\infty} \frac{p^{k(k-1)/2}}{(p; p)_k} \left(-\frac{p}{a_1 q^n}\right)^k\right| \quad (\because \text{定理 23}) \\
&= \frac{(p; p)_\infty}{(p; p)_\infty \left|\sum_{k=0}^{\infty} \frac{p^{k(k-1)/2}}{(p; p)_k} \left(-\frac{p}{a_1 q^n}\right)^k\right|} \\
&\leq \frac{1}{(p; p)_\infty \left|\sum_{k=0}^{\infty} \frac{p^{k(k-1)/2} (p; p)_k}{(p; p)_k} \left(-\frac{p}{a_1 q^n}\right)^k\right|} \\
&= \frac{1}{(p; p)_\infty \left|{}_1\phi_1\left(p; 0; p, \frac{p}{a_1 q^n}\right)\right|} \\
&= \frac{1}{(p; p)_\infty |a_1| q^n |{}_1\phi_1(p; 0; p, p a_1 q^n)|} \quad (\because \text{定理 22}).
\end{aligned}$$

${}_1\phi_1$ を評価して,

$$\begin{aligned}
\frac{1}{|{}_1\phi_1(p; 0; p, p a_1 q^n)|} &= \frac{1}{\left|\sum_{k=0}^{\infty} \frac{p^{k(k-1)/2} (p; p)_k}{(p; p)_k} (-p a_1 q^n)^k\right|} \\
&\leq \frac{1}{\left|\sum_{k=0}^{\infty} \frac{p^{k(k-1)/2}}{(p; p)_k} (-p(1-p) a_1 q^n)^k\right|} \quad (\because \text{補題 24}) \\
&= \frac{1}{|(p(1-p) a_1 q^n; p)_\infty|} \quad (\because \text{定理 23})
\end{aligned}$$

定理 5 の仮定を満たすように $l \in \mathbb{N}$ をとると,

$$\frac{1}{|(p(1-p) a_1 q^n; p)_\infty|} \leq (1 + 2|a_1| p^{l+1} q^N) / |(p(1-p) a_1 q^n; p)_l|.$$

あとは $1/|(p(1-p) a_1 q^n; p)_l|$ を評価するだけである. $q^N \leq \frac{1}{|a_1| p(1-p)}$ と補題 21 より,

$$\begin{aligned}
1/|(p(1-p) a_1 q^n; p)_l| &= \frac{|a_1(1-p)|^{-l} p^{-l(l+1)/2}}{\left|\left(\frac{1}{p(1-p)a_1} - q^n\right) \cdots \left(\frac{1}{p^l(1-p)a_1} - q^n\right)\right|} \\
&\leq \frac{|a_1(1-p)|^{-l} p^{-l(l+1)/2}}{\left|\left(\frac{1}{p(1-p)a_1} - q^N\right) \cdots \left(\frac{1}{p^l(1-p)a_1} - q^N\right)\right|} \\
&= 1/|(p(1-p) a_1 q^N; p)_l|.
\end{aligned}$$

$1/\left(\frac{p}{a_2 q^n}; p\right)_\infty$ の評価も同様である.

5.2 今後の課題

q -超幾何関数と同様に級数展開に基づいて楕円超幾何関数の精度保証付き数値計算を行うという試みは中心を精度良く計算できないがためにことごとく失敗した. 超幾何関数では連分数を使った計算法も知られているので楕円超幾何関数を連分数によって計算するというのはいくつかの手かもしれない.

6 q -特殊関数の零点探索

特殊関数の零点には様々な応用がある．例えば直交多項式の零点を分点とする数値積分公式の一群は Gauss 型積分公式と総称される． $\phi_n(x)$ を x^n の係数が 1 の n 次直交多項式とすると，このような $\phi_n(x)$ は重み関数 $w(x) > 0$ を与えれば一意に定まる．さらに， $\phi_n(x) = 0$ は開区間 (a, b) 内に n 個の実単根を持つ．それを $a < x_1 < \dots < x_n < b$ として，これらに関する被積分関数 $f(x)$ の $n-1$ 次補間多項式を $p_{n-1}(x)$ とする．このとき，

$$I_n(f) = \int_a^b p_{n-1}(x)w(x)dx$$

として積分計算を行う公式を Gauss 型積分公式という [10]．他にも，Ogata-Sugihara 等によって Bessel 関数の零点を分点とする数値積分法も研究されている． q -Bessel 関数の零点探索は新たな数値積分公式の開発につながる可能性がある．これまで様々な特殊関数の零点探索が行われてきたが [10, 45–47]，可積分系等で現れる q -特殊関数の零点探索はまだない．Bessel 関数の零点探索については，以下の方法が知られている．

- Bessel 関数に対して Newton 法を適用する [47]
- Bessel 関数の比 $\frac{J_\nu(x)}{J_{\nu-1}(x)} = \frac{1}{\frac{2\nu}{x} - \frac{1}{\frac{2(\nu+1)}{x} - \frac{1}{\frac{2(\nu+2)}{x} - \dots}}}$ に対して Newton 法を適用する [10]

Newton 法を使うには扱う関数の導関数が必要になる．Bessel 関数の微分は

$$2 \frac{d}{dz} J_\nu(z) = J_{\nu-1}(z) - J_{\nu+1}(z)$$

と求まるので [2]Bessel 関数の計算をするだけで良い．しかし残念ながら現時点で q -Bessel 関数の導関数を精度保証付き数値計算する技術はない．そこで微分を使う Newton 法の代わりに q -微分を使う q -Newton 法 [48]:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{D_q f(x_n)}, \quad D_q f(x) := \frac{f(x) - f(qx)}{x(1-q)} \quad (6.1)$$

を使うことを考える． q -Newton 法では零点が得られる前にゼロ除算が発生することがあるので， q -Newton 法の改良を考えていく．その前に Newton 法の改良 (既存手法) について見ていく．

6.1 q -Krawczyk 法

Newton 法の改良として，Krawczyk 法 [11, 12]:

$$x_{n+1} = \text{mid}(x_n) - \frac{f(\text{mid}(x_n))}{f'(x_0)} + \left(1 - \frac{f'(x_n)}{f'(x_0)}\right)(x_n - \text{mid}(x_n)) \quad (6.2)$$

が知られている．これは簡易 Newton 法:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_0)} \quad (6.3)$$

に平均値形式:

$$F(I) = f(\text{mid}I) + f'(I)(I - \text{mid}I) \quad (6.4)$$

を適用して得られる反復法である。簡易 Newton 法は Newton 法と違って収束速度は劣るが半局所収束定理が成り立つことが知られている。Newton 法は解の存在を仮定して反復の収束を示す局所収束定理が成り立つ。一方で簡易 Newton 法では初期値に条件を課すだけで解の一意性を示す半局所収束定理 (Urabe の定理) が成り立つ。平均値形式は区間演算の欠点である区間幅の増大を抑えるために使われる技法である。つまり, Krawczyk 法は区間幅の増大を抑えた簡易 Newton 法と言える。

平均値形式で本当に区間幅の増大を抑えられることなどあるのだろうか。例えば $f(x) = x - x$ としよう。明らかに $f = 0$ なので $f([a, b]) = 0$ である。しかし, 区間演算では $f([a, b]) \subset [a - b, b - a]$ と過大評価してしまう。一方で平均値形式を用いると $f'(x) = 0$ より $F[a, b] = 0$ となる。区間演算では決して縮小することのなかった区間幅がこの場合には平均値形式を用いることで縮小することが分かった。一般に $f'([a, b])$ の値が小さく $[a, b]$ が小さな幅のとき平均値形式はよい幅を与える [11]。

Krawczyk 法については次が成り立つ。

定理 25. [12] f を連続関数, I を与えられた区間として,

$$K(I) := \text{mid}(I) - \frac{f(\text{mid}(I))}{Df(x_0)} + \left(1 - \frac{f(I)}{Df(x_0)}\right) (I - \text{mid}(I))$$

と定める。 $K(I) \subset \text{int}I$ ならば, $f(x) = 0$ の解 x^* は I 内に一意存在する。

さて, ここでは q -Krawczyk 法:

$$x_{n+1} = \text{mid}(x_n) - \frac{f(\text{mid}(x_n))}{D_q f(x_0)} + \left(1 - \frac{D_q f(x_n)}{D_q f(x_0)}\right) (x_n - \text{mid}(x_n)) \quad (6.5)$$

を使う。 q -Krawczyk 法により Jackson の第 2 種 q -Bessel 関数の零点探索を行った。C++ による精度保証付き数値計算ライブラリである "kv ライブラリ" を使用した。初期値 $x = 1, \nu = 1.5, q = 0.8$ として実験を行った。

反復の結果 (q -Krawczyk 法, 反復 20 回):

[0.97640148781825686, 0.97640148782929049]

反復で得られた区間の下限による値域:

[2.8695851995687983 $\times 10^{-12}$, 3.1844884133952458 $\times 10^{-11}$]

反復で得られた区間の上限による値域:

[-3.1852420577536858 $\times 10^{-11}$, -2.7380333548111838 $\times 10^{-12}$]

反復で得られた区間の下限の値域, 上限の値域は正負が異なるため中間値の定理より反復で得られた区間内に少なくとも 1 つの解がある。 q -Krawczyk 法で零点存在範囲が得られた。

q -Krawczyk 法については次が成り立つ。

定理 26. f を連続関数, I を与えられた区間として,

$$K_q(I) := \text{mid}(I) - \frac{f(\text{mid}(I))}{D_q f(x_0)} + \left(1 - \frac{f(I)}{D_q f(x_0)}\right) (I - \text{mid}(I))$$

と定める。 $K_q(I) \subset \text{int}I$ ならば, $f(x) = 0$ の解 x^* は I 内に一意存在する。

まず, 簡易 q -Newton 写像 s が縮小写像となることを示す. q -Lagrange の平均値定理より $\tilde{q} \in (0, 1)$ が存在し, $x, y \in I, q \in (\tilde{q}, 1)$ に対して $\xi \in I$ が存在して,

$$s(x) - s(y) = (1 - RD_q f(\xi))(x - y) \in (1 - RD_q f(I))(x - y),$$

$$R := \frac{1}{D_q f(x_0)}$$

となる. $y = \text{mid}(I)$ とおくと, q -平均値形式より,

$$s(x) \in \text{mid}(I) - Rf(\text{mid}(I)) + (1 - RD_q f(I))(I - \text{mid}(I)).$$

$$\therefore s(I) \subset K(I) \subset \text{int} I.$$

$K_q(I) \subset \text{int} I$ より, $|K_q(I) - \text{mid}(I)| < \text{rad}(I)$ なので

$$\text{rad}(I) > |K_q(I) - \text{mid}(I)| \geq |1 - RD_q f(I)| |I - \text{mid}(I)| = |1 - RD_q f(I)| \text{rad}(I)$$

となるので,

$$|1 - RD_q f(I)| < 1$$

となり, 簡易 q -Newton 写像 s の縮小性が示される. よって縮小写像原理より,

$$\exists! x \in I \quad \text{s.t.} \quad x = s(x),$$

$$\therefore \exists! x \in I \quad \text{s.t.} \quad f(x) = 0$$

□

6.2 q -区間 Newton 法

Newton 法の改良として, 区間 Newton 法 [49]:

$$x_{n+1} = \text{mid}(x_n) - \frac{f(\text{mid}(x_n))}{f'(x_n)} \quad (6.6)$$

も知られている. 先ほど紹介した Krawczyk 法と並んでよくつかわれる. 一つだけ難点があるとすれば, 多次元化したときに区間連立一次方程式を解く必要がある点である. 多次元化した Krawczyk 法では近似解における Jacobi 行列の近似逆行列だけを利用するのに対して, 区間 Newton 法では区間連立一次方程式の解を精度保証付き数値計算する必要がある. 区間連立一次方程式の解は要素数が大きくなると計算速度が遅くなり, さらに精度が悪くなるという問題がある [12]. 一方で, 次の性質を持つ.

定理 27. [12] f を C^1 級関数, I を与えられた区間として, $M \in Df(I)$ なる M がゼロでないとする. また, $\exists x_0 \in I$ に対して,

$$N(x_0, I) := \{x_0 - f(x_0)/M \mid M \in Df(I)\}$$

と定める. $N(x_0, I) \subset I$ ならば $f(x) = 0$ の解 x^* が一意存在する. さらに $x^* \in N(x_0, I)$ である.

さて, ここでは q -区間 Newton 法:

$$x_{n+1} = \text{mid}(x_n) - \frac{f(\text{mid}(x_n))}{D_q f(x_n)}, \quad D_q f(x) := \frac{f(x) - f(qx)}{x(1-q)} \quad (6.7)$$

を使う. q -区間 Newton 法により Jackson の第 2 種 q -Bessel 関数の零点探索を行った. C++ による精度保証付き数値計算ライブラリである”kv ライブラリ”を使用した. 初期値 $x = 20, \nu = 1.5, q = 0.7$ として実験を行った.

反復の結果 (q -Newton 法):

[4.0077479819329377, 5.674456744153634]

反復で得られた区間の下限による値域:

[11.797254862637029, 11.797254862676434]

反復で得られた区間の上限による値域:

[-53.690211419197688, -53.690211418819508]

反復の結果 (q -区間 Newton 法):

[4.8965494653086354, 5.1008419887877184]

反復で得られた区間の下限による値域:

[6.1224708721105507, 6.1224708722403465]

反復で得られた区間の上限による値域:

[-3.2117521818104465, -3.211752181639532]

q -区間 Newton 法は q -Krawczyk 法と違い, 初期値が零点から多少離れていても収束する (q -Krawczyk 法では十分近くにとる必要がある). 反復で得られた区間の下限の値域, 上限の値域は正負が異なるため, 中間値の定理より反復で得られた区間内に少なくとも 1 つの解がある. q -区間 Newton 法で改良された解を得ることができた. 次に q -区間 Newton 法で得られた解が一意性を持つための条件を見ていく.

定理 28. f を C^1 級関数, I を与えられた区間として, $M \in D_q f(I)$ なる M がゼロでないとする. また, $\exists x_0 \in I$ に対して,

$$N_q(x_0, I) := \{x_0 - f(x_0)/M \mid M \in D_q f(I)\}$$

と定める. $N_q(x_0, I) \subset I$ ならば $f(x) = 0$ の解 x^* が一意存在する. さらに $x^* \in N_q(x_0, I)$ である.

まず q -微分積分の基本定理 [18] より次の等式が成り立つ:

$$f(x) - f(x_0) = \int_0^1 D_q f(x_0 + t(x - x_0)) d_q t.$$

よって,

$$f(x) - f(x_0) = M(x)(x - x_0) \quad (\forall x \in I),$$

$$M(x) := \int_0^1 D_q f(x_0 + t(x - x_0)) d_q t \in \int_0^1 D_q f(I) d_q t = D_q f(I).$$

となる. 変形には q -chain rule [18] を用いた. ここで関数 $g : I \rightarrow \mathbb{R}$ を

$$g(x) := x_0 - \frac{f(x_0)}{M(x)}$$

と定めると, g は連続である. 仮定より $\{g(x)|x \in I\} \in I$ が成り立つ. よって Brouwer の不動点定理より,

$$g(x^*) = x^* = x_0 - \frac{f(x_0)}{M(x^*)}$$

を満たす不動点 $x^* \in I$ が存在する. x^* は $f(x^*) = 0$ を満たす. また x^* は一意である (一意性がないと $M \neq 0$ という仮定に反する). さらに $f(x^*) = 0$ より,

$$x^* = x_0 - \frac{f(x_0)}{M(x^*)} \in N_q(x_0, I)$$

も示される. □

6.3 まとめと今後の課題

この研究では q -Krawczyk 法と q -区間 Newton 法で q -Newton 法により得られた解 (零点存在範囲) を改良できた. 今後の課題, 未解決の疑問としては

- 初期値のとり方を工夫できないか?
- q -Newton 法の収束を加速できないか & 他の手法との比較
- 与えられた領域内での零点をすべて探せるようにしたい.
- \mathbb{C} 上の零点を見つけたい.
- Jackson 微分以外の q -微分を使うとどうなる?
- q -区間 Newton 法の収束はどれぐらい早いのか?
- ゼロ除算を回避できないか?

が挙げられる.

7 行列 q -特殊関数の精度保証付き数値計算

任意の n 次行列 A と複素関数 f が与えられたとしよう. このとき, $f(z)$ がどのような関数であれば $f(A)$ に行列としての意味を持たせられるだろうか? 誰でもすぐに思いつくのは関数 f が z の多項式, つまり

$$f(z) = c_0 + c_1 z + \cdots + c_m z^m$$

の場合はもちろん

$$f(A) = c_0 I + c_1 A + \cdots + c_m A^m$$

と定義するのが自然である. この考えをもう一歩進めて, $f(z) := \sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k$ と定義されているとき, $f(A) := \sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k$ と定義できないだろうか? 行列 A のべき級数の場合には, 収束してくれるかが問題になるだろう. これからまず初めに一般に行列の無限列 $(A_k)_{k=1}^{\infty}$ が収束するとはどういうことであるか定義する. $(A_k)_{k=1}^{\infty}$ が収束するというのは, 行列 A_k の (i, j) 成分を $a_{ij}^{(k)}$ とするとき, 全ての i, j に対して $\lim_{k \rightarrow \infty} a_{ij}^{(k)}$ が存在することである. 次に $\sum_{k=0}^{\infty} A^k$ が収束するというのはこの級数の m 項までの部分 $S_m = \sum_{k=1}^m A_k$ から作られる行列の無限列 $(S_m)_{m=1}^{\infty}$ が収束するということである. 次に簡単な定理を一つ紹介しておこう.

定理 29. [50] ベキ級数 $\sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k$ の収束半径が無限大ならば, 任意の行列 A に対して $\sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k$ は収束する.

この定理により収束半径が無限大のベキ級数によって定められる関数 $f(z) := \sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k$ に対して $f(A) := \sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k$ と定める. 例えば初等関数は次のように定められる:

$$\exp A := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k, \quad (7.1)$$

$$\sin A := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} A^{2k+1}, \quad \cos A := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} A^{2k}. \quad (7.2)$$

収束半径が有限のベキ級数の場合にはどうだろうか? 実は次の定理が成り立つ.

定理 30. [50] 行列 A の全固有値がベキ級数 $\sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k$ の収束円内にあればベキ級数 $\sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k$ は収束する.

よってこの場合にも関数 $f(z) := \sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k$ に対して $f(A) := \sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k$ と定めることができる. それでは, ベキ級数では定義されない一般の関数 $f(z)$ の場合はどうだろうか? $f(z)$ が行列 A の全固有値を含む領域で定義された正則関数であれば $f(z)$ に対して適切な多項式 (Lagrange-Sylvester 多項式という) $L_f(z)$ を作ることで $f(A) = L_f(A)$ が定められる [50].

行列値の関数は統計学などの分野で応用されている [50, 51]. 一方で, q -特殊関数は可積分系などの数理物理で重要視されている. これらのことから, 行列 q -特殊関数は研究されるべき重要な関数ではないかと類推されている [52, 53]. よって, 行列 q -特殊関数の精度保証付き数値計算は重要になりうるかもしれない.

7.1 $(A; q)_{\infty}$ の精度保証付き数値計算

$(A; q)_{\infty}$ の精度保証付き数値計算には次を使う.

定理 31. $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $0 < q < 1$ とする. $m \in \mathbb{N}$ に対して $\frac{\|A\|q^m}{1-q} < \frac{1}{2}$ かつ $(A; q)_m$ が正則であるとき,

$$(A; q)_{\infty} = (A; q)_m (1 + r(A; m)), \quad \|r(A; m)\| \leq \frac{2\|A\|q^m}{1-q}.$$

証明には次の補題を用いる.

補題 32. [52]

$$(A; q)_{\infty} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{q^{n(n-1)/2}}{(q; q)_n} (-A)^n.$$

まず, $(A; q)_m$ が正則なので $(A; q)_{\infty} = (A; q)_m (Aq^m; q)_{\infty}$ である. 補題より,

$$(Aq^m; q)_{\infty} = 1 + r(A; m), \quad r(A; m) := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{q^{n(n-1)/2}}{(q; q)_n} (-Aq^m)^n.$$

そして $\frac{\|A\|q^m}{1-q} < \frac{1}{2}$ より

$$\begin{aligned} \|r(A; m)\| &\leq \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\|A\|q^m}{1-q} \right)^{n+1} \frac{1}{(n+1)!} \left(\because \frac{(q; q)_n}{(1-q)^n} \geq n!q^{n(n-1)/2} \right) \\ &< \frac{\|A\|q^m}{1-q} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2} \right)^n \frac{1}{n!} = \frac{\|A\|q^m \sqrt{e}}{1-q} < \frac{2\|A\|q^m}{1-q}. \end{aligned}$$

□

$(A; q)_{\infty}^{-1}$ の精度保証付き数値計算には次を使う ($A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $0 < q < 1$).

定理 33. $m \in \mathbb{N}$ に対して $\frac{\|A\|q^m}{1-q} < \frac{1}{2}$ かつ $(A; q)_m$ が正則であるとき,

$$(A; q)_{\infty}^{-1} = (A; q)_m^{-1}(1 + r(A; m)), \quad \|r(A; m)\| \leq \frac{2\|A\|q^m}{1-q}.$$

証明には次の補題を使う.

補題 34. [52]

$$(A; q)_{\infty}^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(q; q)_n} A^n, \quad \|A\| < 1.$$

まず, $(A; q)_m$ が正則なので $(A; q)_{\infty}^{-1} = (A; q)_m^{-1}(Aq^m; q)_{\infty}^{-1}$ である. 補題より,

$$(Aq^m; q)_{\infty}^{-1} = 1 + r(A; m), \quad r(A; m) := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(q; q)_n} (Aq^m)^n.$$

そして $\frac{\|A\|q^m}{1-q} < \frac{1}{2}$ より

$$\begin{aligned} \|r(A; m)\| &\leq \frac{\|A\|q^m}{1-q} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\|A\|q^m}{1-q} \right)^n (\because (q; q)_n \geq (1-q)^n) \\ &< \frac{\|A\|q^m}{1-q} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2} \right)^n = \frac{2\|A\|q^m}{1-q}. \end{aligned}$$

□

これらの定理を使うには, $(A; q)_m$ が正則であることを確かめなければならない. その判定法として次の 2 つがある.

定理 35. $A, I - A$ が正定値行列ならば $(A; q)_m$ は正則である.

実際,

$$x^t(I - Aq^k)x > x^t(I - A)x > 0 \quad (k = 0, 1, \dots, m-1)$$

となることから $I - Aq^k$ は正定値行列であり, ゆえに正則である. 各因子が正則であることからその積である $(A; q)_m$ は正則である. □

定理 36. $I - A$ が狭義優対角行列で A の対角成分の絶対値が $\frac{1-q^2}{2q(1+2q)}$ 未満ならば $(A; q)_m$ は正則である.

$A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $A = (a_{ij})$ とする. このとき,

$$I - A = \begin{pmatrix} 1 - a_{11} & -a_{12} & \cdots & -a_{1j} \\ -a_{21} & 1 - a_{22} & \cdots & -a_{2j} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -a_{i1} & -a_{i2} & \cdots & 1 - a_{ij} \end{pmatrix},$$

$$I - Aq^k = \begin{pmatrix} 1 - q^k a_{11} & -q^k a_{12} & \cdots & -q^k a_{1j} \\ -q^k a_{21} & 1 - q^k a_{22} & \cdots & -q^k a_{2j} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -q^k a_{i1} & -q^k a_{i2} & \cdots & 1 - q^k a_{ij} \end{pmatrix}$$

である. 仮定より,

$$|1 - a_{ii}| > \sum_{i \neq j} |a_{ij}|, \quad i = 0, 1, \dots, n$$

である. よって,

$$q^k \sum_{i \neq j} |a_{ij}| < q^k |1 - a_{ii}| < |1 - q^k a_{ii}|$$

である. 実際

$$|1 - q^k a_{ii}|^2 - (q^k |1 - a_{ii}|)^2 = 1 - q^{2k} - 2|a_{ii}|q^k(1 + q^k) > 0$$

である. 以上より, $I - Aq^k$ は狭義優対角行列であり, ゆえに正則である. 各因子が正則であることからその積である $(A; q)_m$ は正則である. \square

$(A; q)_m$ に正則性がない場合,

$$(A; q)_\infty = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{q^{n(n-1)/2}}{(q; q)_n} (-A)^n$$

より, $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{q^{n(n-1)/2}}{(q; q)_n} (-A)^n$ の打ち切り誤差を求めることで精度保証付き数値計算できる.

$$\left\| \sum_{k=m+1}^{\infty} \frac{q^{k(k-1)/2}}{(q; q)_k} A^k \right\| = \frac{q^{m(m+1)/2}}{(q; q)_{m+1}} \|A\|^{m+1} \sum_{k=m+1}^{\infty} \frac{(q; q)_{m+1}}{(q; q)_k} q^{k(k-1)/2 - m(m+1)/2} \|A\|^{k-m-1}$$

$$\leq \frac{q^{m(m+1)/2}}{(q; q)_{m+1}} \|A\|^{m+1} (-\|A\|; q)_\infty$$

となることから打ち切り誤差を評価できる.

7.2 今後の課題

この研究では行列 q -Pochhammer 記号 $(A; q)_\infty$ の精度保証付き数値計算を行ったが, 入力した行列のノルム, 次数が大きい場合についての対策は行っていないのでこれが今後の課題となる.

8 謝辞

本論文に関して初歩的なところから、研究の要所に至るまでさまざまな対話を通して何度も繰り返しご指導・ご助言を賜り、文献・計算機環境を用意するなど研究の環境を整えてくださった本学の丸野健一教授、柏木雅英教授に誠に有難く感謝致します。そしてこの論文の作成中に常に励まし応援して完成を心待ちにしてくださった家族、研究室・サークルの皆さん、知人や他研究室・他大学の先輩方と先生方など全ての方々に心より感謝の意を表します。

参考文献

- [1] G. Andrews, A. Askey and R. Roy (1999): Special Functions, Cambridge University Press.
- [2] 時弘哲治 (2006): 工学における特殊関数, 共立出版.
- [3] N. Vilenkin and A. Klimyk (1991): Representation of Lie groups and special functions: Volume 1: Simplest Lie Groups, Special Functions and Integral Transforms. Springer Science & Business Media.
- [4] N. Vilenkin and A. Klimyk (1993): Representation of Lie groups and special functions: Volume 2: Class/Representations, Special Functions and Integral Transforms. Springer Science & Business Media.
- [5] N. Vilenkin and A. Klimyk (1992): Representation of Lie groups and special functions: Volume 3: Classical and quantum groups and special functions. Springer Science & Business Media.
- [6] M. Kita and K. Aomoto (2011): Theory of hypergeometric functions. Springer-Verlag.
- [7] T. Koornwinder (2007): The hierarchy of hypergeometric functions and related algebras, International Conference on Number Theory, Theoretical Physics and Special Functions.
- [8] 原岡喜重 (2002): 超幾何関数, 朝倉書店.
- [9] 木村弘信 (2007): 超幾何関数入門, サイエンス社.
- [10] A. Gil, J. Segura and M. Temme (2007): Numerical Methods for Special Functions, Society for Industrial and Applied Mathematics.
- [11] 大石進一 (2000): 精度保証付き数値計算, コロナ社.
- [12] 大石進一 et al. (2018): 精度保証付き数値計算の基礎, コロナ社.
- [13] M. Kashiwagi: kv - a C++ Library for Verified Numerical Computation, <http://verifiedby.me/kv/index-e.html>
- [14] 大石進一 (2008): 電子情報通信学会技術研究報告. NLP, 非線形問題, 108, 55-57.
- [15] N. Yamamoto and N. Matsuda (2005): Trans. Jap. Soc. Indust. Appl. Math., 15, 347-359.
- [16] F. Johansson (2016): arXiv:1606.06977.
- [17] G. Gasper and M. Rahman (2004): Basic Hypergeometric Series, Cambridge Univer-

sity Press.

- [18] V. Kac and P. Cheung (2001): Quantum Calculus, Springer Science & Business Media.
- [19] 広田良吾 (1998): 差分学入門, 培風館.
- [20] 堀田良之, 渡辺敬一, 庄司俊明, 三町勝久 (2004): 群論の進化, 代数学百科 I, 朝倉書店.
- [21] G. Andrews and K. Eriksson (2004): Integer Partitions, Cambridge University Press.
- [22] V. Drinfeld (1986): Proc. Intern. Congr. Math., 798-820.
- [23] M. Jimbo (1985): Lett. Math. Phys., 10, 63-69.
- [24] M. Jimbo (1986): Lett. Math. Phys., 11, 247-252.
- [25] R. Koekoek and R. Swarttouw (1996): arXiv preprint math/9602214.
- [26] R. Koekoek, P. Lesky and R. Swarttouw (2010): Hypergeometric orthogonal polynomials and their q -analogues. Springer Science & Business Media.
- [27] H. Takahashi and M. Mori (1974): Publ. Res. I. Math. Sci., 9, 721-741.
- [28] M. Rahman (1987): J. Math. Anal. Appl., 125, 58-71.
- [29] 杉浦光夫 (1980): 解析入門 I, 東京大学出版会.
- [30] M. Olshanetsky and V. Rogov (1995): arXiv preprint q-alg/9509013.
- [31] R. Zhang (2008): Adv. Math., 217, 1588-1613.
- [32] 柏木雅英, ベキ級数演算について, <http://verifiedby.me/kv/psa/psa.pdf>.
- [33] T. Okayama, T. Matsuo and M. Sugihara (2009): METR, 2009-01.
- [34] Y. Chen, M. Ismail and K. Muttalib (1994): J. Comput. Appl. Math., **54**, 263-272.
- [35] H. Koelink (1993): J. Math. Anal. Appl., **175**, 425-437.
- [36] T. Koornwinder and R. Swarttouw (1992): Trans. Am. Math. Soc., 333, 445-461.
- [37] A. Daalhuis (1994): J. Math. Anal. Appl., 186, 896-913.
- [38] M. Ismail and R. Zhang (2017): Proc. Am. Math. Soc., 145, 3717-3733.
- [39] M. E. Ismail and R. Zhang (2016): arXiv:1604.08441.
- [40] K. Tanaka, M. Sugihara, K. Murota and M. Mori (2007): Math. Eng. Tech. Rep., METR2007-07.
- [41] F. Stenger (1993): Numerical Methods Based on Sinc and Analytic Functions, Springer.
- [42] T. Okayama, T. Matsuo and M. Sugihara (2013): Numer. Math. 124, 361-394.
- [43] A. Salem (2014): Georgian Math. J., 21, 233-241.
- [44] R. Zhang (2006): arXiv:math/0612216.
- [45] A. Gil and J. Segura (2014): Anal. Appl., 12, 537-561.
- [46] J. Segura (2013): Numer. Math, 124, 723-752.
- [47] A. Garcia (2015): Numerical Methods for Physics, Pearson.
- [48] P. Rajković, M. Stanković and S. Marinković (2002): Mat. Vesnik, 54, 171-178.
- [49] G. Alefeld (1994): Inclusion Methods for Systems of Nonlinear Equations in: J. Herzberger (Ed.), Topics in Validated Computations, Studies in Computational Mathematics, Elsevier, Amsterdam, 7-26.
- [50] 千葉克裕 (2010): 行列の関数とジョルダン標準形, サイエンス社.
- [51] N. Higham (2008): Functions of Matrices: Theory and Computation. Society for

Industrial and Applied Mathematics.

- [52] A. Salem (2012): Linear and Multilinear Algebra, 60, 683-696.
- [53] A. Salem (2014): Linear and Multilinear Algebra, 62, 347-361.