q-Bessel 関数の精度保証付き数値計算・零点探索

金泉大介, 丸野健一 (早稲田大学)

@柏木研究室, 早稲田大学数学応用数理専攻

[0] この発表は第 4 回学生研究発表会 (@筑波大学, 2019 年 3 月 3 日) での講演を加筆したものです.

本発表の流れ

1. 研究背景
   - 精度保証付き数値計算
   - q-特殊関数
2. 研究成果 (修論の主結果)
   - q-Bessel 関数の精度保証付き数値計算
   - q-Bessel 関数の零点探索
3. まとめと課題
4. 他に修論等でやったこと
5. 参考文献

研究背景

- 可積分系等で現れる q-特殊関数 (q-gamma, q-Airy, q-Bessel, modified q-Bessel, q-直交多項式 etc) については様々な研究がなされている (Gasper-Rahman, Andrews-Askey-Roy, Ernst, Exton, Ismail, Kac-Cheung, Koornwinder, Koelink, Koekoek-Lesky-Swarttouw, DLMF etc).
- 精度保証付き数値計算による q-特殊関数の研究を目指す.
- 今まで $J_\nu(x)$ 等, 様々な特殊関数の精度保証付き数値計算法が開発されたが (Arb, INTLAB, kv, Yamamoto-Matsuda, Yamanaka-Okayama-Oishi etc), q-特殊関数の精度保証付き数値計算法はまだない [1,2,3].

q-特殊関数 (特殊関数の q-類似)

Weisstein, Eric W. "q-Analog." From MathWorld–A Wolfram Web Resource. http://mathworld.wolfram.com/q-Analog.html

- パラメータ q を加える一般化 (この q は base と呼ばれる)
- $q \to 1$ としたとき元に戻る

[1] Mathematica なら QHypergeometricPFQ, QGamma, QPochhammer を使って近似値計算できる.

[2] 後述するが q-Pochhammer 記号の精度保証付き数値計算に関する先行研究はある.

[3] q-特殊関数は $xy = qyx$(量子群), つまり計算機で表現できない世界で真価を発揮する. よって,「q-特殊関数を計算機で扱うことは無意味だ」という批判も成立しうる.

精度保証付き数値計算で扱う誤差

精度保証付き数値計算

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. 真値を含む区間を結果として出力する.

精度保証付き数値計算では数値計算による誤差を扱う.

数値計算による誤差

大石進一 et al. (2018). 精度保証付き数値計算の基礎, コロナ社.
大石進一 (2000). 精度保証付き数値計算, コロナ社.
Tucker, W. (2011). Validated numerics: a short introduction to rigorous computations. Princeton University Press.

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.

区間演算

精度保証付き数値計算では区間演算により数値計算で生じる誤差を把握している.

Definition (区間演算)

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.
($\bar{x}$ が上限, $\underline{x}$ が下限,$[x] = [\underline{x}, \bar{x}]$ とする)

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

大石進一 et al. (2018). 精度保証付き数値計算の基礎, コロナ社.
大石進一 (2000). 精度保証付き数値計算, コロナ社.
Tucker, W. (2011). Validated numerics: a short introduction to rigorous computations. Princeton University Press.
Mayer, G. (2017). Interval analysis: and automatic result verification (Vol. 65). Walter de Gruyter GmbH & Co KG.
Alefeld, G., & Herzberger, J. (2012). Introduction to interval computation. Academic press.
Moore, R. E., Kearfott, R. B., & Cloud, M. J. (2009). Introduction to interval analysis (Vol. 110). SIAM.

q-類似

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,

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

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 $[n]_q := \frac{1-q^n}{1-q}$ と書く. これを用いて, q-階乗 $[n]_q! := [n]_q\,[n-1]_q \cdots [2]_q\,[1]_q$ や, q-二項係数 $\begin{bmatrix} n \\ k \end{bmatrix}_q := \frac{[n]_q [n-1]_q \cdots [n-k]_q}{[k]_q}$ を定められる. 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, $\begin{bmatrix} N+n \\ n \end{bmatrix}_q = \sum_k c(n,N,k)q^k$ 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 [4]. q 類似は組み合わせ論の分野でも現れるのである.

[4] Andrews, G., Eriksson, K. (2004). Integer Partitions, Cambridge University Press.

q-類似

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, (Euler の) q-指数関数 [5,6]:

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

や (Koekoek-Swarttouw の) q-三角関数 [7]:

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

がある. q-初等関数以外にも, q-特殊関数も考えることができる.

[5] 黒木玄, q-exponential, https://genkuroki.github.io/documents/.

[6] Euler の q-指数関数以外にも様々な q-指数関数が Atakishiyev-Suslov (1992), Nelson-Gartley (1994), Ismail-Zhang (1994), Suslov (2003) 等によって研究されている.

[7] Gosper (2001) では全く異なる q-三角関数が研究されている.

q-特殊関数

q-特殊関数はパラメータ q を加えた特殊関数の拡張版であり, q-微分や q-積分を使う q-解析学と相性がいいように定義される (文字 q を使うだけの関数は除く).

q-微分 (q-差分, Jackson 微分)

$$D_q f(x) := \frac{f(x) - f(qx)}{x(1-q)}$$

q-積分 (Jackson 積分)

$$\int_0^1 f(t) \mathrm{d}_q t := (1-q) \sum_{n=0}^{\infty} f(q^n) q^n$$

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, 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 によって解明された. q-解析学は様々な関数の q 類似の性質を理解する為の道具であるだけでなく, "q の世界" 以外の場所（例えば数理物理）でも頻繁に登場し有益な結果をもたらしてくれるのである.

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.
西澤道知. (2015). q-ガンマ関数 (特集 ガンマ関数とは何か). 数学セミナー, 54(10), 28-33.
上野喜三雄. (1997). q-解析学と量子群 (フォーラム: 現代数学の風景/q-解析学のルネサンス). 数学のたのしみ, (2), 32-46.
S. Ikebe, Graphics Library of Special Functions (特殊関数グラフィックスライブラリ).

研究の意義

- q-特殊関数は q-Painlevé 方程式など様々な方程式の解として現れる [8,9]
- q-特殊関数の性質 (零点, 不動点, 漸近的挙動など) を研究するには, q-特殊関数の精度保証付き数値計算法が重要になりうる.

[8] Kajiwara, K., Masuda, T., Noumi, M., Ohta, Y., Yamada, Y. (2004). Hypergeometric Solutions to the q-Painlevé Equations. International Mathematics Research Notices, 2004(47), 2497-2521.

[9] Kemp, A. (1997). On Modified q-Bessel Functions and Some Statistical Applications. Advances in Combinatorial Methods and Applications to Probability and Statistics, 451-463. Birkh$\ddot{a}$user Boston.

今回は 2 種類の q-Bessel 関数を使って実験する. (ただし $|q| < 1, \nu \in \mathbb{C}$)

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

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

$$(a;q)_n := \prod_{k=0}^{n-1}(1-aq^k),\ (a;q)_\infty := \lim_{n\to\infty}(a;q)_n \quad (q\text{-Pochhammer 記号}^{10,11}),$$

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

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. これらは q-Painlevé III 型方程式の特殊解を記述する (Kajiwara-Ohta-Satsuma (1995), Kajiwara-Masuda-Noumi-Ohta-Yamada (2004)).

[10] 一般に q-特殊関数は $(z;q)_\infty$ と ${}_r\phi_s$ を用いて定義される. Pochhammer 記号と異なり, q-Pochhammer 記号は無限の場合も定義できる. このことが q-特殊関数の世界を豊穣にしている.

[11] $(z;q)_\infty$ に似た関数として Schottky Klein prime function というのがあるそうです.

q-超幾何関数 (ただし, $l = 1 + s - r$.)

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

の打切り誤差を評価した.

誤差評価 ($r \le s$ のとき)

$T(n) := \frac{\prod_{i=1}^{r}(\alpha_i;q)_n \left[(-1)^n q^{\binom{n}{2}}\right]^l z^n}{\prod_{j=1}^{s}(\beta_j;q)_n (q;q)_n}$ とおくと, $0 < q < 1$, $|\beta_j| \le q^{-N}$ のとき,

$$ \left|\sum_{n=N}^{\infty} T(n)\right| \le \sum_{n=N}^{\infty} |T(n)| \le C|T(N)| $$

,

$$ C = \begin{cases} \frac{1}{1-D} & (D < 1) \\ \infty & (D \ge 1) \end{cases}, D = \prod_{i=1}^{r}\left(1 + \frac{|\beta_i - \alpha_i| q^N}{|1 - \beta_i q^N|}\right) \prod_{i=r+1}^{s+1} \frac{|z| q^{Nl}}{|1 - \beta_i q^N|}. $$

ただし, $\beta_{s+1} := q$.

q-超幾何関数 (ただし, $l = 1 + s - r$.)

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

の打切り誤差を評価した.

誤差評価 ($r = s + 1$ のとき)

$0 < q < 1$, $|\beta_j| \le q^{-N}$ のとき,

$$ \left| \sum_{n=N}^{\infty} T(n) \right| \le \sum_{n=N}^{\infty} |T(n)| \le C|T(N)| $$

,

$$ C = \begin{cases} \frac{1}{1-D} & (D < 1) \\ \infty & (D \ge 1) \end{cases}, D = |z| \prod_{i=1}^{s} \left(1 + \frac{|\beta_i - \alpha_i| q^N}{|1 - \beta_i q^N|} \right) E, $$

$$ E = 1 + \frac{q^N |q - \alpha_{s+1}|}{|1 - q^{N+1}|}. $$

証明には次の補題を用いる.

Lemma

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

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

が成り立つ.

$n \geq N, |c| \leq q^{-N}$ に注意する.

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

$$\therefore |q^{-n} - c| \geq |q^{-N} - c|.$$
$$\therefore \tfrac{q^n}{|1-cq^n|} \leq \tfrac{q^N}{|1-cq^N|}.$$

補題が示された. □

誤差評価の証明

$r \leq s$ のとき, $l = 1 + s - r \geq 1$ であることに注意して,

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

(補題は最後の大小比較で用いた)

$\therefore \sum_{n=N}^{\infty} |T(n)| \leq$(初項 $|T(N)|$, 公比 D の等比数列の和)$= \frac{|T(N)|}{1-D}$ ($D < 1$ の時に限る) □

誤差評価の証明

$r = s + 1$ のとき, $l = 1 + s - r = 0$ なので

$$
\begin{aligned}
\left|\frac{T(n+1)}{T(n)}\right| &= \frac{|z|}{1-q^{n+1}} \left|\frac{\prod_{i=1}^{s+1}(\alpha_i;q)_{n+1}}{\prod_{j=1}^{s}(\beta_j;q)_{n+1}}\right| \left|\frac{\prod_{j=1}^{s}(\beta_j;q)_{n}}{\prod_{i=1}^{s+1}(\alpha_i;q)_{n}}\right| \\
&= \frac{|z|}{1-q^{n+1}} \left|\frac{(1-\alpha_1 q^n)\cdots(1-\alpha_{s+1}q^n)}{(1-\beta_1 q^n)\cdots(1-\beta_s q^n)}\right| \\
&= |z| \prod_{i=1}^{s} \left(1 + \frac{|\beta_i - \alpha_i| q^n}{|1-\beta_i q^n|}\right) \left(1 + \frac{|q-\alpha_{s+1}| q^n}{1-q^{n+1}}\right) \\
&\le |z| \prod_{i=1}^{s} \left(1 + \frac{|\beta_i - \alpha_i| q^N}{|1-\beta_i q^N|}\right) \left(1 + \frac{|q-\alpha_{s+1}| q^N}{1-q^{N+1}}\right) \because n \ge N \\
&=: D
\end{aligned}
$$

(補題は最後の大小比較で用いた)

$\therefore \sum_{n=N}^{\infty} |T(n)| \le$(初項 $|T(N)|$, 公比 D の等比数列の和)$= \frac{|T(N)|}{1-D}$ ($D < 1$ の時に限る) □

$(z;q)_\infty$ の精度保証付き数値計算には次の定理を使う [12,13,14].

Theorem

$z \in \mathbb{C}$, $0 < q < 1$ とする. 正の整数 m に対して $0 < \frac{|z|q^m}{1-q} < \frac{1}{2}$ であるとき,

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

が成り立つ.

Zhang, R. (2008). Plancherel-Rotach Asymptotics for Certain Basic Hypergeometric Series, Advances in Mathematics 217, 1588-1613.

ちなみに $(A;q)_\infty$, $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ でも上の定理と類似した主張が成り立つ (詳しくは私の修論を参照).

[12] この方法だと $q \to 1$ または $|z| \to \infty$ の時は計算困難である.

[13] 似たような公式が
Zhang, R. (2008). On asymptotics of q-Gamma functions. Journal of Mathematical Analysis and Applications, 339(2), 1313-1321.
の Lemma 1.1 にある.

[14] $(q;q)_\infty$ に対してはこの発表で紹介する方法の他にも,「Euler の五角数定理」の別表現と交代級数の性質を組み合わせた方法も考えられる. この手法は 2017 年 3 月の日本応用数理学会研究部会連合発表会で報告させていただいた.

次の定理を使えば $q \to 1$ のときも $(z;q)_\infty$ をある程度計算できる.

Theorem (Gabutti-Allasia, $(z;q)_\infty$ の近似)

$z \in \mathbb{C}$, $0 < q < 1$ とし, $N \in \mathbb{N}$ を十分大なる数とすると以下が成り立つ:

$$(z;q)_\infty - T_{m-1,N}(z) = (z;q)_N \sum_{j=0}^{\infty} d_{m+j}(zq^N)^{m+j},$$

$$d_k = \frac{qq^2 \cdots q^{k-1}(1-q)^k}{(1-q)(1-q^2)\cdots(1-q^k)} \le q^{k(k-1)/2},$$

$$T_{m,N}(z) = (z;q)_N \sum_{k=0}^{m} d_k (zq^N)^k.$$

Gabutti, B., Allasia, G. (2008). Evaluation of q-Gamma Function and q-Analogues by Iterative Algorithms. Numerical Algorithms, 49(1), 159-168.

系: この定理で $|zq^N| < 1$ を仮定すれば以下が成り立つ:

$$|(z;q)_\infty - T_{m-1,N}(z)| \le \left| (z;q)_N \frac{|zq^N|^m q^{m(m-1)/2}}{1 - |zq^N|} \right|.$$

x の絶対値が大きい時の対策

q-超幾何関数と q-Pochhammer 記号の精度保証付き数値計算ができたことから，2 つの q-Bessel 関数を精度保証付き数値計算できる．だが，このままだと x の絶対値が大きいときに結果の区間幅が `inf` となりうる．

実験環境

OS: Ubuntu14.04LTS, コンパイラー: gcc version 4.8.4
CPU: Intel Xeon(R) CPU E3-1241 v3 @ 3.50GHz $\times$ 8
メモリ: 15.6GB, kv ライブラリのバージョン: 0.4.41

実験結果 (Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数, Hahn-Exton の q-Bessel 関数)

数値例: $\boldsymbol{q = 0.1}$, $\boldsymbol{x = 40000}$, $\boldsymbol{\nu = 4.5}$
精度保証付き数値計算の結果 (区間): [`-inf`, `inf`]

級数の計算時に x^n の部分が `inf` となるからである．級数に x^n がない別表現を用いる．

Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数の別表現

Theorem (Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数の別表現)

公式:

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

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

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

級数の中身に x^n を持たないような別表現である.

Koelink, H. (1993). Hansen-Lommel Orthogonality Relations for Jackson's q-Bessel Functions. Journal of Mathematical Analysis and Applications, 175, 425-437.

Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数の別表現

例えば $\nu < 0$ のときは前ページの公式を使っても計算がうまくいかないことがある. こういう場合は次を使う [15]:

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

$$f(x,a;q) := (\mathrm{i}ax;\sqrt{q})_\infty \, {}_3\phi_2\left(\begin{matrix} a, & -a, & 0 \\ -\sqrt{q}, & \mathrm{i}ax & \end{matrix}; \sqrt{q}, \sqrt{q}\right).$$

[15] Chen, Y., Ismail, M., Muttalib, K. (1994). Asymptotics of Basic Bessel Functions and q-Laguerre Polynomials, Journal of Computational and Applied Mathematics, 54, 263-272. この論文には q-Laguerre 多項式の別表現も掲載されていて, q-Laguerre 多項式の精度保証付き数値計算に重宝している.

Hahn-Exton の q-Bessel 関数の別表現

Lemma (Koornwinder-Swarttouw)

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

Koornwinder, T., Swarttouw, R. (1992). On q-Analogues of the Fourier and Hankel Transforms. Transactions of the American Mathematical Society, 333, 445-461.

Theorem (Hahn-Exton の q-Bessel 関数の別表現)

補題より, *Hahn-Exton の q-Bessel 関数は次の別表現を持つ:*

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

級数の中身に x^n を持たないような別表現である.

Daalhuis, A. (1994). Asymptotic Expansions for q-Gamma, q-Exponential, and q-Bessel functions. Journal of Mathematical Analysis and Applications, 186, 896-913.

数値実験 (改良前と改良後の比較)

Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数と Hahn-Exton の q-Bessel 関数について数値実験を行い, 改良前と改良後の比較を行った. 実験では kv ライブラリ [16] を使っている.

OS: Ubuntu14.04LTS, コンパイラー: gcc version 4.8.4
CPU: Intel Xeon(R) CPU E3-1241 v3 @ 3.50GHz × 8
メモリ: 15.6GB, kv ライブラリのバージョン: 0.4.41

数値例: $q = 0.1$, $x = 40000$, $\nu = 4.5$
$J_\nu^{(2)}(x;q)$:[3.631036782934 9115,3.631036782935 7793]$\times 10^{23}$
$J_\nu^{(3)}(x;q)$:[-1.138766335782 1531,-1.138766335781 8429]$\times 10^{58}$
発散が防げたことから, 改良が成功していると言える.

以上の準備の下で, q-Bessel 関数の零点存在範囲を数値的に求めていく.

[16] 柏木雅英, kv - C++による精度保証付き数値計算ライブラリ

http://verifiedby.me/kv/index.html

これで $|x| \to \infty$ の時 q-Bessel 関数を計算できるようになっただけで, 他の q-特殊関数や一般の ${}_r\phi_s$ について解決できてない. ただし modified q-Bessel 関数 $I_\nu^{(2)}(x;q)$ については Ismail-Zhang (2018) の定理 2.1, ${}_1\phi_1$ については Guindy-Ismail (2016) の定理 3.1 を使えばよい.

(参考) 数値積分による方法

$J_\nu^{(2)}(x;q)$ は $\Re\nu > 0$ のとき次の積分表示を持つ[17] (他にもある[18]):

$$J_\nu^{(2)}(x;q) = \frac{(q^{2\nu};q)_\infty}{2\pi(q^\nu;q)_\infty}(x/2)^\nu \times \int_0^\pi \frac{\left(e^{2i\theta}, e^{-2i\theta}, -\frac{ixq^{(\nu+1)/2}}{2}e^{i\theta}, -\frac{ixq^{(\nu+1)/2}}{2}e^{-i\theta}; q\right)_\infty}{(e^{2i\theta}q^\nu, e^{-2i\theta}q^\nu; q)_\infty} \mathrm{d}\theta,$$

$$(a_1, a_2, \cdots, a_n; q)_\infty := (a_1;q)_\infty (a_2;q)_\infty \cdots (a_n;q)_\infty.$$

kv ライブラリでは Bessel 関数を数値積分により精度保証付き数値計算してたのと同様に, 数値積分 (Kashiwagi 法, DE 公式) による q-Bessel 関数の精度保証付き数値計算も可能である[19].

[17] Rahman, M. (1987). An integral representation and some transformation properties of q-Bessel functions. Journal of Mathematical Analysis and Applications, 125, 58-71.

[18] Ismail, M. E., & Zhang, R. (2018). Integral and series representations of q-polynomials and functions: Part I. Analysis and Applications, 16(02), 209-281.

[19] 金泉大介, 丸野健一 (2018). Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数の精度保証付き数値計算法, 応用力学研究所研究集会報告 29AO-S7, 1, 49-54.

(参考) 数値積分による方法

"kv ライブラリ"による精度保証付き数値積分の流れ

柏木雅英, ベキ級数演算について, `http://verifiedby.me/kv/psa/psa.pdf`

積分区間を分割する (実験では 10 個に分割)

$\Downarrow$

被積分関数 f に対して剰余項付き Taylor 展開を行う

$\Downarrow$

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)

$\Downarrow$

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

$\Downarrow$

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

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それぞれに対して精度保証付き数値積分を行う.

(参考) DE 公式

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 [20,21,22]. どんな 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

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

なる関数 $F(z)$ の種類に応じて使い分けがされている.

[20] Takahashi, H., Mori, M. (1974). Double Exponential Formulas for Numerical Integration. Publications of the Research Institute for Mathematical Sciences, 9(3), 721-741.
[21] 森正武. (2002). 数値解析 [第 2 版]. 共立出版.
[22] 杉原正顯, & 室田一雄. (1994). 数値計算法の数理. 岩波書店.

零点を求める動機と先行研究

特殊関数の零点には様々な応用がある.

- 直交多項式の零点→Gauss 求積
  (Kreyszig[23], Stoer-Bulirsch, Quarteroni-Sacco-Saleri 等を参照)
- Bessel 関数の零点 → 新しい数値積分公式 (Ogata-Sugihara), 統計での応用 [24]

q-特殊関数の零点探索は q-特殊関数の研究に役立つだけでなく, 新たな積分公式の開発にもつながる可能性がある.

[23] Kreyszig, E. (2011). Advanced Engineering Mathematics, 10-th Edition. John Wiley & Sons.
[24] 松本裕行, 確立解析とその微分作用素の研究への応用, 科学研究費助成事業 研究成果報告書 https://kaken.nii.ac.jp/ja/file/KAKENHI-PROJECT-23540183/23540183seika.pdf

動機と先行研究

- これまで様々な特殊関数の零点探索が行われてきたが (Gil-Segura (2014), Segura (2013), $\cdots$), 可積分系等で現れる q-特殊関数の零点探索はまだない.
- q-Newton 法と精度保証付き数値計算により q-Bessel 関数の零点探索を行うとともに, q-Newton 法の改良を提案する.

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 [25]
- Bessel 関数の比 $\frac{J_\nu(x)}{J_{\nu-1}(x)}$ に対して Newton 法を適用する [26]

Bessel 関数は微分漸化式を持つため, Newton 法の適用は容易である.
だが q-Bessel 関数の導関数を計算する術がないため, Newton 法は適用できない.
そこで今回は Newton 法の代わりに q-Newton 法を使うことを考える.

[25] Garcia, A. (2015). Numerical Methods for Physics, 2nd Edition, Pearson.

[26] Gil, A., Segura, J., Temme, N. (2007). Numerical Methods for Special Functions, Society for Industrial and Applied Mathematics.

q-Newton 法

q-Newton 法は Newton 法の微分を q-微分に置きかえた反復法である [27].

Definition (q-Newton 法)

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

- q-Newton 法では解が得られる前にゼロ除算が起きてしまうことがある.
- q-Newton 法には改良の余地がある.
- ここからは q-Newton 法の改良を考えていくが, その前に Newton 法の改良 (精度保証付き数値計算向け) について見ていく.

[27] Rajković, P., Stanković, M., Marinković D., (2002). Mean Value Theorems in q-Calculus. Matematički Vesnik, 54(3-4), 171-178.

区間 Newton 法

Newton 法の改良として, ”区間 Newton 法”が知られている.

区間 Newton 法

Alefeld, G. (1994). Inclusion Methods for Systems of Nonlinear Equations in: J. Herzberger (Ed.), Topics in Validated Computations, Studies in Computational Mathematics, Elsevier, Amsterdam, 7-26.

大石進一 et al. (2018). 精度保証付き数値計算の基礎, コロナ社.

Newton 法で解が得られている時, 次の反復:

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

によって改良された解が得られることがある.

q-Newton 法で解が得られている時, 次の反復 (q-区間 Newton 法):

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

によって改良された解が得られるかもしれない.

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:
$[-3.2117521818104465, -3.211752181639532]$

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.

q-区間 Newton 法による解の検証定理

Theorem (q-区間 Newton 法による解の検証定理)

f を C^1 級関数, I を与えられた区間とし, $M \in D_q f(I)$ 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:

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

q-微分積分の基本定理

Kac, V., Cheung, P. (2001). Quantum Calculus. Springer.

f を原点で C^1 級関数とすると次が成り立つ:

$$\int_a^b D_q f(x) d_q x = f(b) - f(a).$$

q-区間 Newton 法による解の検証定理

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

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

変形には q-chain rule を用いた.

Lemma (q-chain rule)

$u(x) = \alpha x^\beta$ $(\alpha, \beta \in \mathbb{C})$ とすると次が成り立つ:

$$D_q f(u(x)) = (D_{q^\beta} f)(u(x)) \cdot D_q(u(x)).$$

Kac, V., Cheung, P. (2001). Quantum Calculus. Springer.

ここで関数 $g : I \to \mathbb{R}$ を

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

と定めると, g は連続である ($\because$ $M \neq 0$ in I).

q-区間 Newton 法による解の検証定理

仮定より $\{g(x) | x \in I\} \subset I$ 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．

Theorem (Brouwer の不動点定理)

compact 凸集合 K 内の連続関数は K で少なくとも一つの不動点を持つ．

Deimling, K. (1985). Nonlinear Functional Analysis, Springer-Verlag.

x^* は $f(x^*) = 0$ の一意解である (一意性ないと Rajković-Stanković-Marinković が示した q-Rolle の定理より区間 I 内で $M = 0$ になるがこれは区間 I 内で $M \neq 0$ 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． □

問題点・疑問点

q-Bessel 関数は C^1 級なのか?

- q-区間 Newton 法による解の検証定理を q-Bessel 関数に適用するには, q-Bessel 関数が C^1 級でないといけない. Bessel 関数の微分漸化式より Bessel 関数が C^1 級になるので, q-Bessel 関数も C^1 級になると類推される. 実際, $J_\nu^{(3)}(x;q)$ は微分公式が得られ [a], C^1 級になることが証明されている.
- しかし上のように「q-解析学ではなく (通常の) 微分積分の観点から q-特殊関数を研究する」ことに対する批判も根強い [b].

[a] Koelink, H. T. Swarttouw, R. F. (1994), On the zeros of the Hahn-Exton q-Bessel function and associated q-Lommel polynomials, Journal of Mathematical Analysis and Applications, 186: 690-710.

[b] Rahman, M. (1989), A note on the orthogonality of Jackson's q-Bessel function, Canadian Mathematical Bulletin 32, 369-376.

q-区間 Newton 法の問題点

- q-区間 Newton 法で零点が一意存在する範囲を求められることが分かった.
- しかし区間幅の増大が抑えられていない.
- 区間幅の増大を抑えながら零点を求める方法はないだろうか?

Krawczyk 法

簡易 Newton 法に平均値形式を適用して得られる Krawczyk 法に着目する [28, 29].

簡易 Newton 法 (「大石進一. (1997). 非線形解析入門, コロナ社.」が詳しい)

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_0)$$

平均値形式

大石進一. (2000). 精度保証付き数値計算, コロナ社.

$c := \mathrm{mid}(I)$ とする. $f(I)$ を直接評価する代わりに $f(c) + f'(I)(I - c)$ を計算する.

Krawczyk 法

大石進一 et al. (2018). 精度保証付き数値計算の基礎, コロナ社.

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

[28] Krawczyk, R. (1969). Newton-Algorithmen zur Bestimmung von Nullstellen mit Fehler-schranken, Computing 4, 187-201.

[29] Krawczyk, R. (1969). Fehlerabschätzung reeller Eigenwerte und Eigenvektoren von Matrizen, Computing 4, 281-293.

平均値形式の計算例

$f(x) := x - x$ とする．このとき区間演算では

$$f([a, b]) \subset [a, b] - [a, b] = [a - b, b - a] \quad (a < b)$$

となってしまう．一方で平均値形式では $f'(x) = 0$ なので

$$F([a, b]) = 0 + 0 * [a - c, b - c] = 0$$

となる．区間演算だけ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 $f'([a, b])$ 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．

大石進一 (2000)．精度保証付き数値計算，コロナ社．

Krawczyk 法

Krawczyk 法の特徴

- 初期値を十分近くにとらないと収束しない (簡易 Newton 法が元だから).
- しかし区間幅の増大は抑えられる (平均値形式の効果)

ここでは Krawczyk 法の代わりに次の反復を行う.

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

この反復を q-Krawczyk 法と呼ぶことにする.

q-Krawczyk 法による数値実験

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"を使っている．

初期値 $x = 1, \nu = 1.5, q = 0.8$

反復の結果 (q-Krawczyk 法, 反復 20 回):
$[0.9764014878182568, 0.9764014878292904 9]$
反復で得られた区間の下限による値域:
$[2.869585199568798 3 \times 10^{-12}, 3.184488413395245 8 \times 10^{-11}]$
反復で得られた区間の上限による値域:
$[-3.185242057753685 8 \times 10^{-11}, -2.738033354811183 8 \times 10^{-12}]$

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上に, 区間幅の増大も抑えられている．q-類似しても平均値形式の効果が出ているのだろう．

問題点

- q-区間 Newton 法, q-Krawczyk 法で零点存在範囲を計算可能になった [30].
- しかし反復 1 回につき q-Bessel 関数を 3 回以上計算しないといけないのが弱点である.
- 反復 1 回につき q-Bessel 関数を 2 回計算するだけで済ませられないか?

[30] ちなみに q-Newton Kantorovich の定理は以前からある.
Rajković, P. M., Marinković, S. D., & Stanković, M. S. (2005). On q-Newton-Kantorovich method for solving systems of equations. Applied Mathematics and Computation, 168(2), 1432-1448.

q-Bessel 関数の実根探索

$$x_{n+1} = x_n - \arctan\left(\frac{J_\nu(x_n)}{J_{\nu-1}(x_n)}\right)$$

は初期値を十分近くとると Bessel 関数の零点に収束するということが知られている (Gil-Segura-Temme, 2007). この方法ならば 1 反復で Bessel 関数を 2 回計算するだけで済ませられる.

予想

$$x_{n+1} = x_n - \arctan\left(\frac{J_\nu(x_n;q)}{J_{\nu-1}(x_n;q)}\right)$$

は初期値を十分近くとると q-Bessel 関数の零点に収束するのでは?

実験結果

Hahn-Exton の q-Bessel 関数, 初期値 $x = 6.5, \nu = 4.5, q = 0.8$

反復の結果 (反復 5 回):
$[0.0958100480490693\mathbf{4}, 2.2425868252899446]$
反復で得られた区間の下限による値域:
$[0.0014753173015071661, 0.0014753173015524919]$
反復で得られた区間の上限による値域:
$[-4.580858097945751\mathbf{2}, -4.580858022855625]$

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 つ解がある. 零点存在範囲が得られた.

$$x_{n+1} = x_n - \arctan\left(\frac{J_\nu(x_n;q)}{J_{\nu-1}(x_n;q)}\right)$$

は初期値を十分近くとると q-Bessel 関数の零点に収束するかもしれないという示唆を得た.

$$x_{n+1} = x_n - \arctan\left(\frac{J_\nu(x_n;q)}{J_{\nu-1}(x_n;q)}\right)$$

は初期値を十分近くとると q-Bessel 関数の零点に収束するかもしれないという示唆を得た．もしかしたら，

$$x_{n+1} = x_n - \arctan_q\left(\frac{J_\nu(x_n;q)}{J_{\nu-1}(x_n;q)}\right)$$

も初期値を十分近くとると q-Bessel 関数の零点に収束するのでは?

これまで様々な q-特殊関数 (q-Bessel, q-exp, q-sin,$\cdots$) が研究されてきたが，
q-arctan に関する研究はない．
→q-arctan をどうやって定義する?

q-arctan の定義 (その 1)

Definition (Gauss の超幾何関数 ${}_2F_1$, Pochhammer 記号 $(a)_n$)

$$ {}_2F_1(a,b;c;x) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n (b)_n x^n}{(c)_n n!}, \quad |x|<1, \quad (a)_n := a(a+1)\cdots(a+n-1). $$

原岡喜重. (2002). 超幾何関数. 朝倉書店.

$$ \arctan(x) = x\ {}_2F_1\left(1, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}; -x^2\right), \quad (|x|<1) \quad \text{(Taylor 展開)}, $$

$$ \arctan(x) = \operatorname{sgn}(x)\frac{\pi}{2} - \arctan\left(\frac{1}{x}\right), \quad \arctan(\pm 1) = \pm\frac{\pi}{4} \quad \text{より} $$

$$ \arctan_q(x) := \begin{cases} x\ {}_2\phi_1\left(q, q^{\frac{1}{2}}; q^{\frac{3}{2}}; -x^2\right), & (|x|<1), \\ \pm\frac{\pi_q}{4} & (x=\pm 1), \\ \operatorname{sgn}(x)\frac{\pi_q}{2} - \frac{1}{x}\ {}_2\phi_1\left(q, q^{\frac{1}{2}}; q^{\frac{3}{2}}; -\frac{1}{x^2}\right) \end{cases} $$

と定める ($\pi_q := \left(\Gamma_q\left(\frac{1}{2}\right)\right)^2, \quad \Gamma_q(x) := \frac{(q;q)_\infty}{(q^x;q)_\infty}(1-q)^{1-x}$).
$\Gamma_q(x)$ は (Jackson の) q-gamma 関数である.

q-arctan の定義 (その 2)

Theorem (arctan の別表現)

$$\arctan(x) = \frac{x}{1+x^2}\,{}_2F_1\left(1, 1; \frac{3}{2}; \frac{x^2}{1+x^2}\right), \quad x \in \mathbb{R}.$$

Castellanos, D. (1988), The Ubiquitous Pi. Part I. Math. Mag. 61, 67-98.

上の定理から, q-arctan を

$$\arctan_q(x) := \frac{x}{1+x^2}\,{}_2\phi_1\left(q, q; q^{\frac{3}{2}}; q; \frac{x^2}{1+x^2}\right), \quad x \in \mathbb{R}.$$

と定めることもできる.

q-arctan の定義 (q-積分型)

$$\arctan(x) = \int_0^x \frac{1}{1+t^2}\mathrm{d}t$$

なので,

$$\arctan_q^{int}(x) := \int_0^x \frac{1}{1+t^2}\mathrm{d}_q t = x(1-q)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{q^n}{1+x^2q^{2n}}$$

と定義することも可能である.
$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{q^n}{1+x^2q^{2n}}$ の打切り誤差を評価する. $T(n) := \frac{q^n}{1+x^2q^{2n}}$ とおくと $x \in \mathbb{R}, n \geq N$ のとき,

$$\left|\frac{T(n+1)}{T(n)}\right| = q\left|\frac{1+x^2q^{2n}}{1+x^2q^{2n+2}}\right| \leq q(1+x^2q^{2N}) =: D$$

であり, $D < 1$ のとき,

$$\left|\sum_{n=N}^{\infty} T(n)\right| \leq \frac{T(N)}{1-D}$$

となる.

数値実験

ここまで導入した 3 つの q-arctan について数値実験を行った.

$x = 1.5,\ q = 0.1$

1 番目:$[\mathbf{25.425717946994236}, \mathbf{25.425717946998969}]$
2 番目:$[\mathbf{1.42175327653972}, \mathbf{1.42175327653992}]$
積分型:$[\mathbf{0.5624109153806648 9}, \mathbf{0.5624109153806763 4}]$

3 つの q-arctan は一般には異なる値を取る関数たちであることが分かった.

実験結果

q-arctan（積分型）を使って実験を行った.

Jackson の 2 種 q-Bessel 関数, 初期値 $x = 3.3, \nu = 1.5, q = 0.5$

反復の結果 (反復 11 回):
$[3.3617264194240701, 3.3617270024024 78]$
反復で得られた区間の下限による値域:
$[2.763611807379153 1 \times 10^{-7}, 2.763612405986348 4 \times 10^{-7}]$
反復で得られた区間の上限による値域:
$[-1.150635355242011 6 \times 10^{-6}, -1.150635295431791 4 \times 10^{-6}]$

Hahn-Exton の q-Bessel 関数, 初期値 $x = 6.5, \nu = 4.5, q = 0.8$

反復の結果 (反復 4 回):
$[0.5297388404536764 7, 2.237416768462676 7]$
反復で得られた区間の下限による値域:
$[0.498062970621263 7, 0.498062971077429 14]$
反復で得られた区間の上限による値域:
$[-4.115369978222753 8, -4.115369911073638 1]$

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 つ解がある. 零点存在範囲が得られた.

ここまでのまとめと課題

ここまでのまとめ

q-Bessel 関数とその零点の精度保証法を確立した ($|\nu| \to \infty$ の時を除く).

q-Bessel 関数の零点探索

q-区間 Newton 法で零点が一意存在する範囲を求める.

$\downarrow$

q-Krawczyk 法で零点が存在する範囲を狭める.

今後の課題

- 初期値のとり方を工夫できないか？
- $\mathbb{C}$ 上の零点を見つけたい.
- $x_{n+1} = x_n - \arctan\left(\frac{J_\nu(x_n;q)}{J_{\nu-1}(x_n;q)}\right)$ の収束を示す.

今後も特殊関数, 数値積分の精度保証に関連する研究をしていこうと考えている.
また可積分アルゴリズムの研究にも興味・関心を持っている.

(参考) 他に修論等でやったこと

- q-gamma 関数の数値積分による精度保証付き数値計算
  →2017 年 12 月の学会発表, Ismail (1981) が導出した積分表示を使用した.
- Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数と Hahn-Exton の q-Bessel 関数の無限区間積分表示 (Ismail-Zhang, 2018) に対し DE 変換 $\exp(t-\exp(-t))$[31] を適用した際の計算精度に関する研究 →M1 での中間発表の内容.
- 可積分系で現れる楕円超幾何関数 [32,33] (Gasper-Rahman, Spiridonov を参照) の精度保証付き数値計算
  →2017 年高橋研&丸野研合同ゼミでの発表内容を加筆した.
- 行列 q-特殊関数 [34,35] の精度保証付き数値計算
  →Higham, Functions of Matrices: Theory and Computation に触発された, M2 での研究.

---

[31] Tanaka, K. I., Sugihara, M., Murota, K., & Mori, M. (2009). Function classes for double exponential integration formulas. Numerische Mathematik, 111(4), 631-655.

[32] Frenkel-Turaev (1997) によって初めて導入された.

[33] 楕円特殊関数の例として Ruijsenaars (1997) が導入した楕円 gamma 関数も挙げられる.

[34] Salem, A. (2012). On a q-gamma and a q-beta matrix functions. Linear and Multilinear Algebra, 60(6), 683-696.

[35] Salem, A. (2014). The basic Gauss hypergeometric matrix function and its matrix q-difference equation. Linear and Multilinear Algebra, 62(3), 347-361.

行列 q-特殊関数の精度保証付き数値計算

行列値関数

数値解析 (例えば exponential integrator), 統計学等で応用がある.

q-特殊関数

可積分系等の数理物理で重要視される.

↘ ↙

行列 q-特殊関数は研究されるべき重要な関数かもしれない.

$$(A;q)_n := \prod_{k=0}^{n-1}(I-Aq^k),\ (A;q)_\infty := \lim_{n\to\infty}(A;q)_n \text{ (行列 } q\text{-Pochhammer 記号)}$$

$$\Gamma_q(A) := (q;q)_\infty(q^A;q)_\infty^{-1}(1-q)^{I-A}, \quad |q|<1 \quad \text{(行列 } q\text{-gamma 関数)}$$

↓

行列 q-特殊関数の精度保証付き数値計算が重要になりうる.

- 行列値関数の理論については「行列の関数とジョルダン標準形」 (千葉克裕, 2010) も詳しい.
- exponential integrator は連立 ODE の数値解法である.
- $\exp(A), \log(A)$ の精度保証付き数値計算は Miyajima (2019) によって研究されている.

参考文献

q-特殊関数を含む特殊関数全般に詳しい

- DLMF: Digital Library of Mathematical Functions (米国 NIST が作成)
- Andrews, G. E., Askey, R., & Roy, R. (2000). Special Functions (Encyclopedia of Mathematics and its Applications Vol. 71). Cambridge University Press.

q-特殊関数に詳しい書籍

- Gasper, G. & Rahman, M. (2004). Basic Hypergeometric Series (Encyclopedia of Mathematics and its Applications Vol. 96). Cambridge University Press.→11 章では楕円超幾何関数についても解説されている.
- Andrews, G. E. (1986). q-Series: Their Development and Application in Analysis, Number Theory, Combinatorics, Physics, and Computer Algebra (No. 66). American Mathematical Society.
- Exton, H. (1983). q-Hypergeometric Functions and Applications. Horwood.

q-特殊関数に関する Review 記事

- Koelink, E. (2018). q-Special Functions, Basic Hypergeometric Series and Operators. arXiv preprint arXiv:1808.03441.
- Koornwinder, T. H. (2005). q-Special Functions, an Overview. arXiv preprint math/0511148.

参考文献

q-解析学に詳しい書籍

- Ernst, T. (2012). A Comprehensive Treatment of q-calculus. Springer Science & Business Media.
- Ernst, T. (2000). The History of q-Calculus and a New Method. Department of Mathematics, Uppsala University.
- Kac, V., & Cheung, P. (2001). Quantum Calculus. Springer Science & Business Media.$\rightarrow$ h-解析学についても解説されている.

Hahn-Exton の q-Bessel 関数に詳しい

- Swarttouw, R. F. (1992), The Hahn-Exton q-Bessel Function, PhD Thesis, Delft Technical University.

(q-) 直交多項式に詳しい書籍

- Ismail, M. E. (2006). Classical and Quantum Orthogonal Polynomials in One Variable. (Encyclopedia of Mathematics and its Applications) Cambridge University Press.
- Koekoek, R., Lesky, P. A., & Swarttouw, R. F. (2010). Hypergeometric Orthogonal Polynomials and their q-Analogues. Springer Science & Business Media.

特殊関数を精度保証付き数値計算できるライブラリ

- INTLAB (Interval Laboratory)[36] →gamma 関数と誤差関数が計算できる.
- kv ライブラリ →gamma 関数と Bessel 関数, Airy 関数等が計算できる.
- Arb - a C library for arbitrary-precision ball arithmetic[37]
  →Fredrik Johansson によって開発されたライブラリであり, 様々な特殊関数 (楕円関数, 超幾何関数等) を精度保証付き数値計算できる.

[36] S.M. Rump: INTLAB - INTerval LABoratory. In Tibor Csendes, editor, Developments in Reliable Computing, pages 77-104. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1999.

[37] Johansson, F. (2016). Computing Hypergeometric Functions Rigorously. arXiv preprint arXiv:1606.06977.
Arb の実装はこの論文等に基づいている. この論文は超幾何関数 ${}_p F_q$ の打切り誤差を評価する手法を掲載しており, q-超幾何関数 ${}_r\phi_s$ の打切り誤差を評価する際に参照した.