q-Bessel 関数の精度保証付き数値計算法

金泉大介 (早稲田大学 B4), 丸野健一

日本応用数理学会研究部会連合発表会, 電気通信大学

2017 年 3 月 6-7 日

研究背景

- これまで様々な特殊関数の精度保証付き数値計算が研究されてきているが (Yamamoto (2005), Oishi (2008), Kashiwagi (2013), $\cdots$), 可積分系をはじめとする数理物理で現れる q-特殊関数の精度保証付き数値計算に関する研究は我々の知る限りまだない.
- q-特殊関数の精度保証付き数値計算法を確立するため, 可積分系でよく現れる q-Bessel 関数の精度保証付き数値計算を行なった.

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法のこと. 真値を含む区間を結果として出力する.

Jackson の q-Bessel 関数, Hahn-Exton の q-Bessel 関数

Bessel 関数 ($J_\nu(x) := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\Gamma(\nu+k+1)k!}\left(\frac{x}{2}\right)^{2k+\nu}$) の q 類似としては以下の 3 種類が知られている. (ただし $|q| < 1, \nu \in \mathbb{C}$)

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

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

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

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

上から順に Jackson の第 1 種, 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)).

研究の意義

- いろいろな特殊関数を解に持つ Painlevé 方程式では計算機によって極の位置を把握する研究がなされている (Novokshenov (2009), $\cdots$).
- q-Painlevé 方程式の性質を解明するには, 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.
- q-特殊関数の精度保証付き数値計算法の確立を目指して q-Bessel 関数の精度保証付き数値計算を行ったが, その前に Bessel 関数の精度保証付き数値計算法について見ていく.

Bessel 関数の精度保証付き数値計算法

Bessel 関数の精度保証付き数値計算法に関する研究としては以下が知られている.

- 数値積分を用いる方法 (Kashiwagi, 2013)

$$J_\nu(x) = \frac{(x/2)^\nu}{\sqrt{\pi}\Gamma(\nu+1/2)} \int_0^\pi \cos(x\cos t)\sin^{2\nu} t dt$$

- 漸近展開を用いる方法 (Oishi, 2008)
- 交代級数の性質を用いて打切り誤差を評価する方法 (Yamamoto, 2005)

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

本研究では交代級数の性質を用いる方法を q-Bessel 関数に応用し, q-Bessel 関数を足掛かりに, q-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.

Bessel 関数の精度保証付き数値計算法

Bessel 関数の精度保証付き数値計算 (Yamamoto, 2005) では以下のような交代級数の性質が使われた.

定理 (Leibniz)

数列 $\{p_n\}_{n=0}^{\infty}$ が $\lim_{n\to\infty} p_n = 0$ を満たす単調減少な正数列ならば, 交代級数 $\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n p_n$ は収束する.

系 (交代級数の打切り誤差)

$s := \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n p_n$, $s_N := \sum_{n=0}^{N}(-1)^n p_n$ とおくと,

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

が成り立つ.

まずは, これらの性質を Hahn-Exton の q-Bessel 関数

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

に適用できるかを考える.

Hahn-Exton の q-Bessel 関数の精度保証付き数値計算法

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

に制限して, 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 $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n q^{n(n+1)/2} x^{2n}}{(q^{\nu+1};q)_n (q;q)_n}$ に対して前述の交代級数の性質が適用できることを示す. そのために, 級数の中身を d_n とおいたときに d_n の絶対値が単調減少するための条件を求める. つまり,

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

が成り立つための n に関する条件を求める.

$$
\begin{aligned}
|c_n| \le 1 \quad &\Longleftrightarrow \quad \frac{q^n x^2}{(1-q^n)(1-q^{\nu+n})} \le 1 \\
&\Longleftrightarrow \quad q^\nu Q^2 - (q^\nu + x^2 + 1)Q + 1 \ge 0 \ (Q := q^n)
\end{aligned}
$$

$$
\therefore Q \le \tfrac{q^\nu + x^2 + 1 - \sqrt{(q^\nu + x^2 + 1)^2 - 4q^\nu}}{2q^\nu} =: A.
$$

$$
\therefore n \ge \tfrac{\log A}{\log q}.
$$

つまり $\frac{\log A}{\log q}$ 以上の n では $|c_n| = |\frac{d_n}{d_{n-1}}| \le 1$ 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．

- $\sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n q^{n(n+1)/2} x^{2n}}{(q^{\nu+1};q)_n (q;q)_n}$ の打切り誤差が評価できた．
- 無限積 $\frac{(q^{\nu+1};q)_\infty}{(q;q)_\infty}$ の打切り誤差も評価すれば Hahn-Exton の q-Bessel 関数
$$J_\nu^{(3)}(x;q) = \tfrac{(q^{\nu+1};q)_\infty}{(q;q)_\infty} x^\nu \textstyle\sum_{n=0}^\infty \tfrac{(-1)^n q^{n(n+1)/2} x^{2n}}{(q^{\nu+1};q)_n (q;q)_n}$$
を精度保証付き数値計算できる．
- 前述した交代級数の定理が適用できるように $\frac{(q^{\nu+1};q)_\infty}{(q;q)_\infty}$ を変形できないだろうか?

Hahn-Exton の q-Bessel 関数の精度保証付き数値計算法

ここで, 補助的に以下の関数を用いる.

定義 (q-exponential 関数)

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

この関数は以下のような性質を持つことが知られている.

定理 (Euler)

$$e_q(z) = \frac{1}{(z;q)_\infty} \tag{4}$$

定理 (Karpelvich)

$$e_q(z) = \frac{1}{(q;q)_\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n q^{n(n+1)/2}}{(q;q)_n (1 - zq^n)} \tag{5}$$

(4), (5) より, $|z| < 1$ のとき, 次の等式が成り立つ.

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

Hahn-Exton の q-Bessel 関数の精度保証付き数値計算法

- $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n q^{n(n+1)/2}}{(q;q)_n(1-zq^n)}$ に対して前述の交代級数の定理を適用できる. (証明は先ほど扱った $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n q^{n(n+1)/2} x^{2n}}{(q^{\nu+1};q)_n (q;q)_n}$ と同様である.)
- $\frac{(z;q)_\infty}{(q;q)_\infty} = 1/\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n q^{n(n+1)/2}}{(q;q)_n(1-zq^n)}$ の打切り誤差を評価できる.
- $z = q^{\nu+1}$ とすれば 3 つの q-Bessel 関数で現れた $\frac{(q^{\nu+1};q)_\infty}{(q;q)_\infty}$ の打切り誤差を評価できる.

$\frac{(q^{\nu+1};q)_\infty}{(q;q)_\infty}$ と $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n q^{n(n+1)/2} x^{2n}}{(q^{\nu+1};q)_n (q;q)_n}$ の打切り誤差を評価できるので, Hahn-Exton の q-Bessel 関数

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

を精度保証付き数値計算できる.
(他の 2 つの q-Bessel 関数についても同じ手順で出来る.)

数値実験 (Mathematica と提案手法の比較)

Hahn-Exton の q-Bessel 関数の値を精度保証付き数値計算するプログラムを C++ で自作し, Mathematica11 を使って数値計算した結果と比較した. 自作したプログラムでは 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"[1] を使用している.
Mathematica に組み込まれている関数 `QPochhammer` を使うことで Hahn-Exton の q-Bessel 関数の近似値を計算することができる.

```
nu = 3.5;
q = 0.1;
x = 1.4;
N[(x^nu)*QPochhammer[q^(nu+1),q,Infinity]Sum[((-1)^
k)*(q^(k*(k + 1)/2))*(x^(2*k))/(QPochhammer[q, q, k]*
QPochhammer[q^(nu + 1), q, k]), {k, 0, Infinity}]/
QPochhammer[q, q, Infinity]]
```

[1] 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

数値実験 (Mathematica と提案手法の比較)

実験環境

OS: Ubuntu14.04LTS
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: 0.4.40
コンパイラー: gcc version 4.8.4

実験結果

数値例: $\boldsymbol{q = 0.1}$, $\boldsymbol{x = 1.4}$, $\boldsymbol{\nu = 3.5}$
Mathematica の計算結果 (近似): 2.869108159692556
精度保証付き数値計算の結果 (区間, [下限, 上限]):
[2.8691081596921672,2.8691081596929449]

精度保証付き数値計算した結果が Mathematica による数値計算結果を包含していることがわかる.

数値実験 (Mathematica と提案手法の比較)

x の絶対値がとても小さい場合について見てみよう.

実験結果

数値例: $q = 0.1$, $x = 2^{-53}$, $\nu = 3.5$
Mathematica の計算結果 (近似):
1.62003952141 20114 $\times 10^{-56}$-1.804518679293576 $\times 10^{-445}\sqrt{-1}$
精度保証付き数値計算の結果 (区間):
[1.62003952141 17279 $\times 10^{-56}$,1.62003952141 24056 $\times 10^{-56}$]

実数値の計算なので虚部は 0 のはずだが Mathematica による計算だと虚部が 0 でないことになる.

数値実験 (Mathematica と提案手法の比較)

x の絶対値が大きい場合は提案手法がうまくいかない場合もある.

実験結果

数値例: $q = 0.1$, $x = 1.5$, $\nu = 3.5$
精度保証付き数値計算の結果 (区間): [nan, inf]

得られた区間が発散してしまっているのが分かる. このようになってしまうのは,

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

の打切り誤差が `inf` となるからである.

$(z;q)_\infty$ の精度保証付き数値計算法

本研究の目標

q-Bessel 関数を足掛かりに, q-特殊関数の精度保証付き数値計算法を確立する.

- q-特殊関数は q-Pochhammer 記号 $(z;q)_\infty$ によって表わされることがある.
  - $e_q(z) = \frac{1}{(z;q)_\infty}$ (q-exponential 関数)
  - $\mathrm{Li}_2(z;q) := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n(1-q^n)} = -\log(z;q)_\infty$ (quantum dilogarithm, Kirillov (1994))
- (5) (Karpelevich の定理) を用いて $(z;q)_\infty = (q;q)_\infty / \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n q^{n(n+1)/2}}{(q;q)_n(1-zq^n)}$ と変形した際に現れた $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n q^{n(n+1)/2}}{(q;q)_n(1-zq^n)}$ は交代級数の性質を用いて打切り誤差を評価できることが分かった.
- $(q;q)_\infty$ の打切り誤差を評価できれば $(z;q)_\infty$ の打切り誤差を評価することが可能になり, 様々な q-特殊関数を精度保証付き数値計算できるようになる. $\to$ $(q;q)_\infty$ の打切り誤差を評価する方法を考える.

$(q;q)_\infty$ の精度保証付き数値計算法

$(q;q)_\infty$ は Euler 関数とよばれることもあり, Euler などによって数論の分野で研究されている関数である. Euler によって以下のような変形公式が導かれている.

Euler の五角数定理

$|q| < 1$ のとき,

$$(q;q)_\infty = \prod_{n=1}^{\infty}(1-q^n) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n(1+q^n)q^{n(3n-1)/2}$$

が成り立つ.

この公式を使って精度保証付き数値計算を行うことを試みたが, $\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n(1+q^n)q^{n(3n-1)/2}$ については前述の交代級数の性質を適用できない, つまり, 級数の中身を d_n とおいたときに d_n の絶対値が単調減少しないということが分かった. そこで Euler の五角数定理の別表現を用いることにした.

$(q;q)_\infty$ の精度保証付き数値計算法

Euler の五角数定理には

$$1+\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n(1+q^n)q^{n(3n-1)/2}=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n(1-q^{2n+1})q^{n(3n+1)/2} \quad (6)$$

という別表現があり, (7) と (8) を用いて導出できる.

Shanks の公式

$$1+\sum_{n=1}^{N}(-1)^n(1+q^n)q^{n(3n-1)/2}=(q;q)_N\sum_{n=0}^{N}\frac{(-1)^n q^{Nn+n(n+1)/2}}{(q;q)_n} \quad (7)$$

定理 (Andrews, Merca)

$$\sum_{n=0}^{N-1}(-1)^n(1-q^{2n+1})q^{n(3n+1)/2}=(q;q)_N\sum_{n=0}^{N-1}\frac{(-1)^n q^{Nn+n(n+1)/2}}{(q;q)_n} \quad (8)$$

$(q;q)_\infty$ の精度保証付き数値計算法

実際, ((7) の右辺)

$$= (q;q)_N \left(1 - \frac{q^{N+1}}{(q;q)_1} + \cdots + \frac{(-1)^N q^{N^2+N(N+1)/2}}{(q;q)_N}\right) \to (q;q)_\infty \ (N \to \infty)$$

((8) の右辺)

$$= (q;q)_N \left(1 - \frac{q^{N+1}}{(q;q)_1} + \cdots + \frac{(-1)^{N-1} q^{N(N-1)+N(N-1)/2}}{(q;q)_{N-1}}\right) \\ \to (q;q)_\infty \ (N \to \infty)$$

となることから,
$\lim_{N\to\infty}$((7) の左辺)$= \lim_{N\to\infty}$((7) の右辺)
$= \lim_{N\to\infty}$((8) の右辺)$= \lim_{N\to\infty}$((8) の左辺)
つまり,

$$1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n (1+q^n) q^{n(3n-1)/2} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (1-q^{2n+1}) q^{n(3n+1)/2}$$

が成り立つ.

- Euler の五角数定理の別表現で現れた
$$\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n(1-q^{2n+1})q^{n(3n+1)/2}$$
に対しても, 前述の交代級数の性質を適用できる. (証明は先ほど扱った $\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n q^{n(n+1)/2}x^{2n}}{(q^{\nu+1};q)_n(q;q)_n}$ と同様である.)
- $(q;q)_\infty$ の打切り誤差を評価できる.
- $(q;q)_\infty$ と $\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n q^{n(n+1)/2}}{(q;q)_n(1-zq^n)}$ の打切り誤差を評価できたことから,
$$(z;q)_\infty = (q;q)_\infty / \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n q^{n(n+1)/2}}{(q;q)_n(1-zq^n)},\ (|z|<1)$$
を精度保証付き数値計算できる.

数値実験 (Mathematica と提案手法の比較)

$(z;q)_\infty$ を精度保証付き数値計算するプログラムを C++で自作し, Mathematica に組み込まれている `QPochhammer` と比較した. 自作したプログラムでは 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"を使用している.

実験環境

OS: Ubuntu14.04LTS
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: 0.4.40
コンパイラー: gcc version 4.8.4

実験結果

数値例: $\boldsymbol{z = 0.1}$, $\boldsymbol{q = 0.4}$
Mathematica の計算結果 (近似): 0.8411350632442746
精度保証付き数値計算の結果: [0.841135063244220428,0.841135063244434462]

精度保証付き数値計算した結果が Mathematica による数値計算結果を包含していることがわかる.

数値実験 (Mathematica と提案手法の比較)

$e_q(z)$, $\mathbf{Li_2}(z;q)$ についても数値実験を行った ($z = 0.1$, $q = 0.4$).

q-exponential 関数 ($e_q(z) = \frac{1}{(z;q)_\infty}$) の実験結果

Mathematica の計算結果 (近似): 1.188869711533580
精度保証付き数値計算の結果: [1.1888697115334805,1.1888697115336791]

quantum dilogarithm ($\mathbf{Li_2}(z;q) = -\log(z;q)_\infty$) の実験結果

Mathematica の計算結果 (近似): 0.173003033515769
精度保証付き数値計算の結果: [0.17300303335168571,0.17300303335185325]

精度保証付き数値計算した結果が Mathematica による数値計算結果を包含していることがわかる.

本研究のまとめ

- 交代級数の定理 (Leibniz) と q-exponential 関数の変換公式 (Euler, Karpelevich) を用いて 3 種類の q-Bessel 関数を (x の絶対値が小さい限り) 精度保証付き数値計算できた.
- q-特殊関数を記述するのに用いられる q-Pochhammer 記号 $(z;q)_\infty$ を ($-1 < z < 1,\ 0 < q < 1$ である限り) 精度保証付き数値計算できた.

今後の課題

- 交代級数の性質を用いて q-Bessel 関数の精度保証付き数値計算をしたが, x の絶対値が大きくなると区間が発散してしまう. 同じことは交代級数の性質を用いた Bessel 関数の精度保証付き数値計算 (Yamamoto, 2005) でも起きる.
- 一方で, 数値積分を用いた方法 (Kashiwagi, 2013) では x の絶対値が大きくても区間が発散するのを抑えられる.
- 数値積分を用いて q-Bessel 関数を精度保証付き数値計算できないか？

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

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

(Rahman, 1987)