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

Daisuke Kanaizumi (金泉大介, 早稲田大学 M1)[1,2]

平成 29 年度九大応力研共同利用研究集会　非線形波動研究の新潮流-理論とその応用-

2017 年 11 月 9-11 日

[1] https://github.com/Daisuke-Kanaizumi/q-special-functions

[2] This is a joint work with Kenichi Maruno and Masahide Kashiwagi (developer of kv library)

本発表の流れ

1. 研究背景
2. Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数
3. 研究成果
   - 交代級数の性質を用いる方法
   - 積分を用いる方法
   - 二重指数関数型積分公式 (DE 公式) による方法
   - 漸近展開による方法
4. 数値実験 (提案手法と Mathematica との比較)
5. 本研究のまとめと今後の課題

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開発されてきたが (Yamamoto-Matsuda (2005), Oishi (2008), Kashiwagi (kv ライブラリ), Yamanaka-Okayama-Oishi (2017), $\cdots$), 可積分系等で現れる 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, Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数を精度保証付き数値計算した.

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のこと. 真値を含む区間を結果として出力する.

区間演算

精度保証付き数値計算では" 区間演算" という技術により数値計算の際に生じる誤差を把握している.

区間演算 [a]

[a]大石進一. (2000). 精度保証付き数値計算, コロナ社.

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)

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

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では数値計算による誤差を扱う.

数値計算による誤差 [a]

[a] 大石進一. (2000). 精度保証付き数値計算, コロナ社.

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.

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-解析学に適合するように定義される (文字 q を使うだけの関数は除く).

q-微分

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

q-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 によって量子群の理論が導入され, q-特殊関数と q-解析学の本質が解明された [3] [4].

[3]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.
[4]Souichiro Ikebe, Graphics Library of Special Functions.

http://math-functions-1.watson.jp/index.html

Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数

次の関数を Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数という:

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

${}_r\phi_s$ は次のように定義される q-超幾何関数である $(r,s\in\mathbb{Z}_{\geq 0}, l=1+s-r)$:

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

以下の乗積で定義される記号を q-Pochhammer 記号という $(a\in\mathbb{C}, |q|<1)$:

$$(a;q)_n := \prod_{k=0}^{n-1}(1-aq^k),\quad (a;q)_0 := 1,\ (a;q)_\infty := \lim_{n\to\infty}(a;q)_n.$$

q-Painlevé III 型方程式の特殊解を記述する (Kajiwara-Ohta-Satsuma (1995)).

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.
- q-特殊関数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.
- 本研究では 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 Jackson の第 2 種 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としては以下が知られている.

- 数値積分を用いる方法 (Kashiwagi, kv ライブラリ)

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

- 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-Matsuda, 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

今回は Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数に対して, 交代級数の性質を用いる方法, 積分を用いる方法, 漸近展開を使う方法と二重指数関数型積分公式 (DE 公式) を用いる方法を提案する.

交代級数の性質を用いる方法

本手法では交代級数に関する以下の定理を用いる.

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)

$s := \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n p_n,\ s_N := \sum_{n=0}^{N}(-1)^n p_n$ とおくと次が成り立つ:

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

交代級数の性質を Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数に適用できるか考える.

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

交代級数の性質を用いる方法

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

に制限して, 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,

$$|c_n| = \left| \frac{d_n}{d_{n-1}} \right| \leq 1$$

が成り立つための n に関する条件を求める.

$$|c_n| \le 1 \iff x^2 q^{2n+\nu-1}/4 \le (1-q^n)(1-q^{\nu+n})$$
$$\iff Q^2 q^\nu \left(1 - \frac{x^2}{4q}\right) - Q(1+q^\nu) + 1 \ge 0 \ (Q := q^n).$$

$$\therefore Q \le \frac{1+q^\nu - \sqrt{(1+q^\nu)^2 - q^\nu\left(4 - \frac{x^2}{q}\right)}}{q^\nu\left(1 - \frac{x^2}{4q}\right)} =: A.$$
$$\therefore n \ge \frac{\log A}{\log q}.$$

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．従って交代級数の性質が適用できる．

- $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n q^{n(n-1)} \left(\frac{x^2 q^{\nu+1}}{4}\right)^n}{(q^{\nu+1};q)_n (q;q)_n}$ の打切り誤差が評価できた．
- 後は $\frac{(q^{\nu+1};q)_\infty}{(q;q)_\infty}$ の打切り誤差を評価できれば Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数

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

  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 $\frac{(q^{\nu+1};q)_\infty}{(q;q)_\infty}$ を変形できないだろうか?

交代級数の性質を用いる方法

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[5].

定理 (Euler)

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

定理 (Karpelvich)

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

上の 2 式より, $|z| < 1$ のとき, 次の等式が成り立つ.

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

[5] Olshanetsky, M. A., Rogov, V. B. (1995). The Modified q-Bessel Functions and the q-Bessel-Macdonald Functions. arXiv preprint q-alg/9509013.

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

- $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n q^{n(n+1)/2}}{(q;q)_n (1-zq^n)}$ 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.)
- $\frac{(z;q)_\infty}{(q;q)_\infty} = 1 \Big/ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n q^{n(n+1)/2}}{(q;q)_n (1-zq^n)}$ の打切り誤差を評価できる.
- $z = q^{\nu+1}$ とすれば Jackson の第 2 種 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 $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n q^{n(n-1)} \left(\frac{x^2 q^{\nu+1}}{4}\right)^n}{(q^{\nu+1};q)_n (q;q)_n}$ の打切り誤差を評価できるので, Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数

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

を精度保証付き数値計算できる.

数値実験 (Mathematica との比較)

Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数を精度保証付き数値計算するプログラムを C++ で作り, Mathematica の計算結果と比較した. 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"[6] 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: 0.4.41, gcc version 4.8.4

実験結果 ($q = 0.1$, $x = 0.6$, $\nu = 2$)

Mathematica の計算結果 (近似): 0.1009999898980716
精度保証の結果 (区間): [0.10099998989807004, 0.10099998989807313]

精度保証付き数値計算による結果が Mathematica の計算結果を包含している.

[6]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

交代級数の性質を用いる方法

- 交代級数の性質と q-exponential 関数の変換公式を用いて 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

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

に制限しないと適用できない.

- x, ν に関する制限なしに精度保証付き数値計算できないだろうか?

積分を用いる方法

x に関する制限なく Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数を精度保証付き数値計算するために積分を用いる方法を開発した．ここでは Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数の持つ次の積分表示を使う[7]:

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

$$(a_1, a_2, \cdots, a_n; q)_\infty := (a_1;q)_\infty(a_2;q)_\infty\cdots(a_n;q)_\infty, \ \mathrm{Re}\,\nu > 0.$$

[7] Rahman, M. (1987). An Integral Representation and Some Transformation Properties of q-Bessel Functions. Journal of Mathematical Analysis and Applications, 125(1), 58-71.

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

$$(a_1, a_2, \cdots, a_n; q)_\infty := (a_1;q)_\infty(a_2;q)_\infty \cdots (a_n;q)_\infty, \ \mathrm{Re}\,\nu > 0.$$

q-Pochhammer 記号 $(z;q)_\infty$ については次の定理 1 を使えば精度保証付き数値計算できるので, あとは無限積の積分をどうするかが問題になる. 被積分関数を積分しやすい形に変形していくことを考える.

定理 1 [a]

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

$z \in \mathbb{C}$, $0 < q < 1$ とする. 正の整数 n に対して

$$0 < \frac{|z|q^n}{1-q} < \frac{1}{2}$$

であるとき, 次が成り立つ:

$$(z;q)_\infty/(z;q)_n = (zq^n;q)_\infty = 1 + r(z;n), |r(z;n)| \le 2|z|q^n/(1-q).$$

被積分関数の変形には以下を用いる.

定理 1 (再掲)[a]

[a]Zhang, R. (2008). Plancherel-Rotach Asymptotics for Certain Basic Hypergeometric Series. Advances in Mathematics, 217(4), 1588-1613.

$z \in \mathbb{C}$, $0 < q < 1$ 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:

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

定理 2[a]

[a]Zhang, R. (2008). Plancherel-Rotach Asymptotics for Certain Basic Hypergeometric Series. Advances in Mathematics, 217(4), 1588-1613.

定理 1 と同じ仮定で以下が成り立つ:

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

定理 1, 2 より,

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

$$= \left[1 \pm \frac{2|q^{\nu+n}|}{1-q}\right]^2 \left[1 \pm \frac{2q^n}{1-q}\right]^2 \left[1 \pm \frac{|xq^{(\nu+1)/2}|q^n}{1-q}\right]^2$$

$$\times \int_0^\pi \frac{\left(e^{2i\theta}, e^{-2i\theta}, -\frac{ixq^{(\nu+1)/2}}{2}e^{i\theta}, -\frac{ixq^{(\nu+1)/2}}{2}e^{-i\theta}; q\right)_n}{(e^{2i\theta}q^\nu, e^{-2i\theta}q^\nu; q)_n} d\theta$$

と変形できる. ただし $n \in \mathbb{N}$ は

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

を満たすものであり,

$$[a \pm b] := [a - b, a + b]$$

とする.

積分を用いる方法

変形後の積分には 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"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.

"kv ライブラリ"による精度保証付き数値積分の流れ [a]

[a] 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. (ここまでが積分による方法)
$\rightarrow$(後程) 二重指数関数型積分公式 (DE 公式) を用いる場合と比較する.

二重指数関数型積分公式 (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 [8]. 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

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

なる関数 $F(z)$ の種類に応じて使い分けがされている.
DE 公式を Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数の積分表示に適用することを考える:

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

$$(a_1, a_2, \cdots, a_n; q)_\infty := (a_1;q)_\infty (a_2;q)_\infty \cdots (a_n;q)_\infty, \ \operatorname{Re}\nu > 0.$$

[8] Takahashi, H., Mori, M. (1974). Double Exponential Formulas for Numerical Integration. Publications of the Research Institute for Mathematical Sciences, 9(3), 721-741.

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

という DE 変換に着目する．この変換については次の定理が知られている．

定理 [a]

[a] Okayama, T., Matsuo, T., Sugihara, M. (2009). Error Estimates with Explicit Constants for Sinc Approximation, Sinc Quadrature and Sinc Indefinete Integration. Mathematical Engineering Technical Reports, METR2009-01, University of Tokyo.

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

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

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

が成り立つなら，次が成り立つ (ただし $C_3 = \frac{1}{\cos^2\left(\frac{\pi}{2}\sin d\right)\cos d}$):

$$\left|\int_a^b f(x)\mathrm{d}x - h\sum_{k=-N}^{N} f(\psi_{DE}(kh))\psi'_{DE}(kh)\right| \leq K(b-a)\left(e^{\pi/2} + \frac{2C_3}{1-e^{-\pi e/2}}\right)\exp(-2\pi d/h).$$

二重指数関数型積分公式 (DE 公式) による方法

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

$$(a_1, a_2, \cdots, a_n; q)_\infty := (a_1;q)_\infty (a_2;q)_\infty \cdots (a_n;q)_\infty, \ \mathrm{Re}\,\nu > 0.$$

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,

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

を満たす. 定数 K を決定できれば DE 公式による精度保証付き数値計算が可能になる.

定数 K の評価

定数 K の評価には以下を用いる.

定理 1 (再掲)[a]

[a] Zhang, R. (2008). Plancherel-Rotach Asymptotics for Certain Basic Hypergeometric Series. Advances in Mathematics, 217(4), 1588-1613.

$z \in \mathbb{C}$, $0 < q < 1$ 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:

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

定理 2 (再掲) [a]

[a] Zhang, R. (2008). Plancherel-Rotach Asymptotics for Certain Basic Hypergeometric Series. Advances in Mathematics, 217(4), 1588-1613.

定理 1 と同じ仮定で以下が成り立つ:

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

定理 1, 2 より ($\zeta = x + \mathrm{i}y$, $n \in \mathbb{N}$ は定理 1,2 の仮定を満たすとする),

$$\left|\left(e^{\pm 2\mathrm{i}\zeta}; q\right)_\infty\right| \leq \left(1 + \frac{2q^n e^{\mp 2y}}{1-q}\right) \left|\left(e^{\pm 2\mathrm{i}\zeta}; q\right)_n\right|$$

$$\leq \left(1 + \frac{2q^n \exp\left(\frac{2\sin(\pi\sin(d))}{\cos(\pi\sin(d))+1}\right)}{1-q}\right) \left(-\exp\left(\frac{2\sin(\pi\sin(d))}{\cos(\pi\sin(d))+1}\right); q\right)_n,$$

$$\left|1/\left(e^{\pm 2\mathrm{i}\theta} q^\nu; q\right)_\infty\right| \leq \left(1 + \frac{|q^{\nu+n}| \exp\left(\frac{2\sin(\pi\sin(d))}{\cos(\pi\sin(d))+1}\right)}{1-q}\right)$$

$$/\left(q^\nu \exp\left(-\frac{2\sin(\pi\sin(d))}{\cos(\pi\sin(d))+1}\right)\right)_n$$

と評価できる ($\left(-\frac{\mathrm{i}xq^{(\nu+1)/2}}{2} e^{\pm \mathrm{i}\theta}; q\right)_\infty$ も同様, $\zeta \in \mathcal{D}_{DE}(d)$ より $|\operatorname{Im}\zeta| \leq \frac{\sin(\pi\sin(d))}{\cos(\pi\sin(d))+1}$ が成り立っていることに注意する).

定数 K の評価ができた.

数値実験

Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数を DE 公式によって精度保証付き数値計算するプログラムを C++で自作し，積分を用いる方法と比較した．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: 0.4.42 コンパイラー: gcc 4.8.4

実験結果 ($q = 0.1, \nu = 4.5, x = 60 + 100i$)

精度保証の結果 (DE 公式):([-8584953.5198317655,-8584953.5198080316])+([-99374452.859596462,-99374452.859525665])i
精度保証の結果 (積分):([-8584953.5213287343,-8584953.5183109082])+([-99374452.86108996,-99374452.858030959])i

DE 公式を使って計算をした方が区間幅が小さくなっている．

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 [9]:

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

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

q-Pochhammer 記号と 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って精度保証付き数値計算出来るということが分かる.

[9] Chen, Y., Ismail, M. E. H.; Muttalib, K.A. (1994). Asymptotics of Basic Bessel Functions and q-Laguerre Polynomials, Journal of Computational and Applied Mathematics, 54: 263-272.

漸近展開による方法

q-Pochhammer 記号の精度保証付き数値計算には定理 1 を使う.

定理 1 (再掲)[a]

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

$z \in \mathbb{C}$, $0 < q < 1$ とする. 正の整数 n に対して

$$0 < \frac{|z|q^n}{1-q} < \frac{1}{2}$$

であるとき, 次が成り立つ:

$$(z;q)_\infty/(z;q)_n = (zq^n;q)_\infty = 1 + r(z;n), |r(z;n)| \leq 2|z|q^n/(1-q).$$

q-超幾何関数 (ただし, $l = 1 + s - r$.)

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

の精度保証付き数値計算 (打切り誤差の評価) には定理 3, 4 を使用する.

定理 3 ($r \leq s$ のとき)

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

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

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

ただし, $\beta_{s+1} := q$.

定理 4 ($r = s + 1$ のとき)

$T(n)$ は定理 3 と同じで, $r = s + 1$, $|\beta_j| \leq q^{-N}$ のとき,

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

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

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

定理 3, 4 の証明には次の補題を用いる.

補題

$n, N \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$, $n \geq N$, $0 < q < 1$, $c \in \mathbb{C}$ 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.

補題の証明

$n \geq N, |c| \leq q^{-N}$ に注意する.

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

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

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

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

補題が示された. □

定理 3, 4 の証明

$r \leq s$ のとき (定理 3), $l = 1 + s - r \geq 1$ 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) $\square$

定理 3, 4 の証明

$r = s+1$ のとき (定理 4), $l = 1+s-r = 0$ なので

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

(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) $\square$

漸近展開を用いなくとも定理 1, 3, 5 を組み合わせて 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 5 (Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数の別表現)[a]

[a]Koelink, H. T. (1993). Hansen-Lommel Orthogonality Relations for Jackson's q-Bessel Functions. Journal of Mathematical Analysis and Applications, 175(2), 425-437.

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

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.

定理 5 を用いる方法と漸近展開を用いる方法はどちらも q-Pochhammer 記号と 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. これらの違いを数値実験を通してみていく.

数値実験 (漸近展開と定理 5 との比較)

Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数を漸近展開によって精度保証付き数値計算するプログラムを C++で自作し，定理 5 を使って計算する方法と比較した．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: 0.4.42 コンパイラー: gcc 4.8.4

実験結果 ($q = 0.1, \nu = 1.5, x = 80000 + 90000\mathrm{i}$)

漸近展開の結果:([-4.56445403584959e+22,-4.56445403583238e+22])+([3.26544888256245e+23,3.26544888256455e+23])i
精度保証の結果 (定理 5):([-4.56445403584284e+22,-4.56445403583836e+22])+([3.26544888256273e+23,3.26544888256352e+23])i

$|x| \to \infty$ としただけではあまり違いが無いようだ．

数値実験 (漸近展開と定理 5 との比較)

今度は $\nu < 0$ としてみる.

実験結果 ($q = 0.1, \nu = -1.5, x = 80000 + 90000i$)

漸近展開の結果:([-2.68357252450128e+23,-2.68357252449777e+23])+([-2.75213451400802e+22,-2.75213451397966e+22])i
精度保証の結果 (定理 5):ゼロ除算発生

定理 5 を使った時にはゼロ除算が発生してしまった. これは級数の中身にある $(q^\nu)^n$ が影響している.

定理 5 (再掲, Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数の別表現)[a]

[a]Koelink, H. T. (1993). Hansen-Lommel Orthogonality Relations for Jackson's q-Bessel Functions. Journal of Mathematical Analysis and Applications, 175(2), 425-437.

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

数値実験 (漸近展開)

$\nu \to -\infty$ のとき, 漸近展開を用いる方法でも計算がうまく行かないことがある.

実験結果 ($q = 0.1, \nu = -20.5, x = 80000 + 90000\mathrm{i}$)

漸近展開の結果:([-inf,inf])+([-inf,inf])i

得た結果の区間幅が無限大になってしまった.

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

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

q-超幾何関数内の q-Pochhammer 記号にある q^ν が影響している.

数値実験 (提案手法と Mathematica との比較)

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するプログラムを C++で自作し, Mathematica 11 を使って計算する方法と比較した. 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"を使用している. Mathematica11 では関数 `QHypergeometricPFQ` を使用した.

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: 0.4.42 コンパイラー: gcc 4.8.4

実験結果 ($q = 0.1, \nu = 1.4, x = 6000 + 1000i$)

精度保証の結果 (DE 公式):([-811903610341.59888,-811903610338.72387])+([-3282263156357.3467,-3282263156354.1054])i
精度保証の結果 (漸近展開):([-811903610340.45716,-811903610339.47705])+([-3282263156356.6651,-3282263156355.2021])i
Mathematica の結果 (近似): -8.119036103401538$\times 10^{11}$+ -3.28226315635 6987$\times 10^{12}$

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.

数値実験 (提案手法と Mathematica の比較)

x の絶対値が小さい場合でも実験を行った.

実験結果 ($q = 2^{-53}$, $x = 2^{-53}$, $\nu = 2$)

精度保証付き数値計算の結果 (漸近展開):
[3.081487911019242$\times 10^{-33}$,3.081487911020419 7$\times 10^{-33}$]+
$\mathrm{i}[-2.666434803249118 1 \times 10^{-82}, 2.666434803249118 1 \times 10^{-82}]$
精度保証付き数値計算の結果 (DE):[3.0814879110186132$\times 10^{-33}$,
3.0814879110204197$\times 10^{-33}$]+i[-9.2380320625533862e$\times 10^{-47}$,
,9.2444715835654248$\times 10^{-47}$]
Mathematica の結果 (近似):3.081487911019578$\times 10^{-33}$

この時も精度保証付き数値計算の結果が Mathematica の結果を包含している.

数値実験 (提案手法と Mathematica の比較)

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.

```
q = 2^(-53); nu = 2 ; x = 2^(-53);
N[Sum[(- x*x*q^(nu+1)/4)^n*q^(n*(n-1))/(QPochhammer[q^(nu+1),q,n]
*QPochhammer[q,q,n]),{n,0,Infinity}]*(x/2)^nu*
QPochhammer[q^(nu+1),q,Infinity]/QPochhammer[q,q,Infinity]]
```

実験結果 ($q = 2^{-53}$, $x = 2^{-53}$, $\nu = 2$)

精度保証付き数値計算の結果 (漸近展開):
[$3.081487911019242 \times 10^{-33}$,$3.081487910204197 \times 10^{-33}$]+ $\mathbf{i}$[$-2.666434803249118 1 \times 10^{-82}$, $2.666434803249118 1 \times 10^{-82}$]
精度保証付き数値計算の結果 (DE):[$3.081487910186132 \times 10^{-33}$, $3.081487910204197 \times 10^{-33}$]+$\mathbf{i}$[-9.2380320625533862e$\times 10^{-47}$, ,$9.244715835654248 \times 10^{-47}$]
Mathematica の結果 (近似, `Sum` を使用):
$3.08148791101957 8 \times 10^{-33} - 1.67385337691597 \times 10^{-561}\mathbf{i}$

実数値計算なので虚部は 0 のはずだが Mathematica だと虚部 $\neq \mathbf{0}$ になる.

本研究のまとめと今後の課題

本研究のまとめ

Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数を

- 交代級数を用いる方法
- 積分を用いる方法
- DE 公式を用いる方法
- 漸近展開を用いる方法

により精度保証付き数値計算できた.

今後の課題

- 漸近展開を用いても $\nu \to -\infty$ のときはうまくいかなかった
  $\to$ 改良できるか?