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

2019 年 3 月 3 日, 第 4 回学生研究発表会@筑波大学

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
   - 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

研究背景

- 可積分系などで現れる q-特殊関数 (特殊関数の q 類似) については様々な理論的研究がなされている (Gasper-Rahman, Andrews-Askey-Roy).
- 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.

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.

q 類似

- パラメータ q を加える一般化
- $q \to 1$ としたとき元に戻る

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

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: $[x]\times[y]=[\min(\underline{x}\underline{y},\underline{x}\bar{y},\underline{y}\bar{x},\bar{x}\bar{y}),\max(\underline{x}\underline{y},\underline{x}\bar{y},\underline{y}\bar{x},\bar{x}\bar{y})]$
- 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

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-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 [1]. q 類似は組み合わせ論の分野でも現れるのである.

[1]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, q-指数関数

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

や q-三角関数

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

がある. 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.

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 (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（例えば数理物理）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.

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.
Souichiro Ikebe, Graphics Library of Special Functions.

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

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 [2,3]
- 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.

[2] 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.

[3] 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 $|q| < 1, \nu \in \mathbb{C}$)

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

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

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

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

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)).

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 ($r \leq s$ 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, $0 < q < 1$, $|\beta_j| \leq q^{-N}$ 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, $\beta_{s+1} := q$.

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.

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

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

補題が示された. □

誤差評価の証明

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

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

(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) □

誤差評価の証明

$r = s+1$ のとき, $l = 1+s-r = 0$ なので

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

(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) □

$(z;q)_\infty$ の精度保証付き数値計算には次を使う．

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.

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 × 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

Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数の別表現

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

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.

Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数の別表現

前ページの公式を使っても計算がうまくいかないときは次を使う [4]:

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

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

[4] 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.

Hahn-Exton の q-Bessel 関数の別表現

公式

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

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

Hahn-Exton の q-Bessel 関数の別表現

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

定理より, 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.

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 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"[5] を使用している.

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: $\boldsymbol{q = 0.1}$, $\boldsymbol{x = 40000}$, $\boldsymbol{\nu = 4.5}$
$\boldsymbol{J_\nu^{(2)}(x;q)}$:[3.631036782934 9115,3.631036782935 7793]$\times\boldsymbol{10^{23}}$
$\boldsymbol{J_\nu^{(3)}(x;q)}$:[-1.138766335782 1531,-1.138766335781 8429]$\times\boldsymbol{10^{58}}$
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.

[5] 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

(参考) 数値積分による方法

Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数は次の積分表示を持つ [6]:

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

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

数値積分による精度保証付き数値計算も可能である [7].

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

[7] 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.

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 $\longrightarrow$Gauss 型積分公式
- Bessel 関数の零点 $\longrightarrow$ 新しい数値積分公式 (Ogata-Sugihara)

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.

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 [8]
- Bessel 関数の比 $\frac{J_\nu(x)}{J_{\nu-1}(x)}$ に対して Newton 法を適用する [9]

q-Bessel 関数の導関数を計算するのは困難なため, 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.

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

[9] 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[10].

q-Newton 法

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

- 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 (既存手法) について見ていく.

[10] 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.

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.

予想 (q-区間 Newton 法)

q-Newton 法で解が得られている時, 次の反復:

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

によって改良された解が得られることがある.

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

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.

q-chain rule

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

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

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

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.

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．

Brouwer の不動点定理

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

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．

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． □

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 [11, 12].

簡易 Newton 法

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

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次を計算する:

$$f(c) + f'(I)(I - c).$$

Krawczyk 法

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

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

[12] 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．

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.
- 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):
$[\mathbf{0.9764014878}\mathbf{1825686}, \mathbf{0.9764014878}\mathbf{2929049}]$
反復で得られた区間の下限による値域:
$[\mathbf{2.869585199568798 3} \times \mathbf{10^{-12}}, \mathbf{3.1844884133952458} \times \mathbf{10^{-11}}]$
反復で得られた区間の上限による値域:
$[\mathbf{-3.1852420577536858} \times \mathbf{10^{-11}}, \mathbf{-2.7380333548111838} \times \mathbf{10^{-12}}]$

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.

問題点

- q-区間 Newton 法, q-Krawczyk 法で零点存在範囲を計算できるようになった.
- 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?

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). この方法なら 1 反復につき q-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):
$[\mathbf{0.09581004804906934, 2.2425868252899446}]$
反復で得られた区間の下限による値域:
$[\mathbf{0.0014753173015071661, 0.0014753173015524919}]$
反復で得られた区間の上限による値域:
$[\mathbf{-4.5808580979457512, -4.580858022855625}]$

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.

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付き数値計算法を確立した.

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.