楕円テータ関数の数値計算プログラム

2018.8.7　　鈴木　実

1　はじめに

楕円テータ関数を直接計算する機会は珍しいと思われるが，ヤコビのテータ関数やヤコビの楕円関数の計算にはこの楕円テータ関数の計算が必要になる．その理由は，ノーム q による展開式を用いると，多くの場合 q が十分に小さくなるために，収束が速くなるからである．

楕円テータ関数の数値計算は,「電子計算機のための数値計算法 III」[1] に述べられているように，ノーム $q = \mathrm{e}^{i\pi\tau}$ による展開式を用いる．ここに載せた C のプログラムは，同書の ALGOL のプログラムを C に変換したものである。このプログラムによる数値計算は 10 桁の精度をもつ。

2　計算式

2.1　楕円テータ関数 $\vartheta_i(v,q)$

楕円テータ関数の定義には教科書や論文により 2 種類見られ，それぞれの定義で変数は因数にして π だけ異なる．したがって，楕円テータ関数の周期は，変数の定義により，2 と τ，または，2π と $\pi\tau$ の場合がある．そのような違いが一般に存在するので注意する必要がある．前者は寺澤寛一の「数学概論」[2]，岩波の「数学公式 III」[3]，山内二郎他の「電子計算機のための数値計算法 III」[1]，Hancock の “Lectures on the Theory of Elliptic Functions”[4] で使われ，後者の変数は，Whittaker and Watson の “A Course of Modern Analysis”[6] や Onsager の論文 [5] に見られる．

ここでは「電子計算機のための数値計算法 III」[1] のプログラムを利用しており，この本では前者の定義を採用していることから，この文章においても変数の定義は前者を用いる．すなわち，π は定義式に含めて変数には含めず，実数軸の周期は 2 または 1 である．

楕円テータ関数は次のように定義される．なお，ϑ_4 は ϑ_0 と書かれる場合もある．

$$\begin{aligned}\vartheta_1(v,q) &= 2\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n q^{(n+\frac{1}{2})^2}\sin(2n+1)\pi v\\ &= 2q^{1/4}(\sin\pi v - q^2\sin 3\pi v + q^6\sin 5\pi v + \cdots)\end{aligned} \tag{1}$$

$$\begin{aligned}\vartheta_2(v,q) &= 2\sum_{n=0}^{\infty} q^{(n+\frac{1}{2})^2}\cos(2n+1)\pi v\\ &= 2q^{1/4}(\cos\pi v + q^2\cos 3\pi v + q^6\cos 5\pi v + \cdots)\end{aligned} \tag{2}$$

$$\begin{aligned}\vartheta_3(v,q) &= 1 + 2\sum_{n=1}^{\infty} q^{n^2}\cos 2n\pi v\\ &= 1 + 2q\cos 2\pi v + 2q^4\cos 4\pi v + 2q^9\cos 6\pi v + \cdots)\end{aligned} \tag{3}$$

$$\begin{aligned}\vartheta_4(v,q) &= 1 + 2\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n q^{n^2}\cos 2n\pi v\\ &= 1 - 2q\cos 2\pi v + 2q^4\cos 4\pi v - 2q^9\cos 6\pi v + \cdots)\end{aligned} \tag{4}$$

図 1 に，楕円テータ関数 $\vartheta_i(v,q)$ を実軸上 $0 \le v \le 4$ において $q = 0.2, 0.5, 0.8$ の場合にグラフを示しておく．q が小さい時には ϑ_1 は sin 関数，ϑ_2 は cos 関数に近くなるが，振幅は $q^{1/4}$ に比例して小さくなる．q が大きくなると，振幅が大きくなるとともに，振幅の羽根の部分が狭くなる．

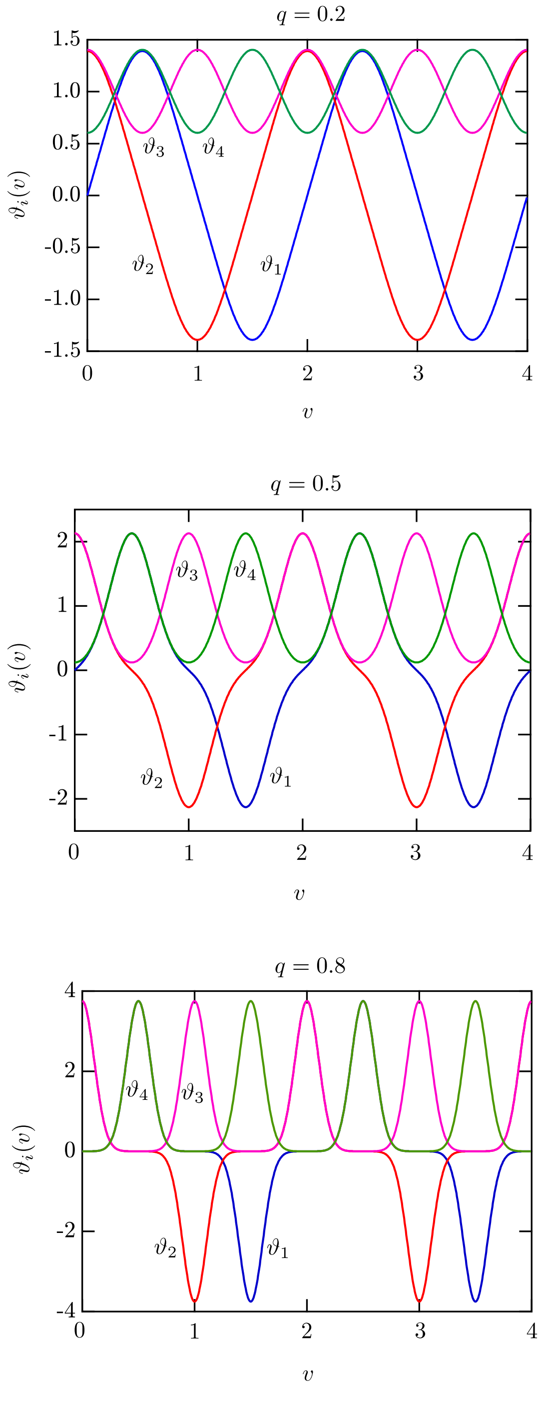

図 1: v が実数のときの楕円テータ関数 $\vartheta_1(v,q)$，$\vartheta_2(v,q)$，$\vartheta_3(v,q)$，$\vartheta_4(v,q)$．$q = 0.2$，0.5，および 0.8 の場合．

変数の範囲は次の周期性から 0 から 1 までで十分である．

$$\vartheta_1(v+1) = -\vartheta_1(v) \tag{5}$$
$$\vartheta_2(v+1) = -\vartheta_2(v) \tag{6}$$
$$\vartheta_3(v+1) = \vartheta_3(v) \tag{7}$$
$$\vartheta_4(v+1) = \vartheta_4(v) \tag{8}$$

また，

$$\vartheta_2(v) = \vartheta_1(v+\frac{1}{2}) \tag{9}$$
$$\vartheta_3(v) = \vartheta_4(v+\frac{1}{2}) \tag{10}$$

であるから，計算は $\vartheta_1(v)$ と $\vartheta_4(v)$ の計算に帰着する．さらに，

$$\vartheta_1(v) = \vartheta_1(1-v) \tag{11}$$
$$\vartheta_4(v) = \vartheta_4(1-v) \tag{12}$$

の関係から $\vartheta_1(v)$ と $\vartheta_4(v)$ は $v = 1/2$ を中心に対称であるから，計算する変数の範囲は $0 \le v \le 1/2$ でよい．

2.2 ノーム q による展開式

q が小さい時は収束が速いが，大きくなると遅くなるので，母数 k から補母数 k' に変えたときの q' を使うのが良い．実際，$k^2 \ge 1/2$ なら，k' に対応する q' のほうが q よりも小さくなる．q' は次のように与えられる．

$$q = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi\tau} \tag{13}$$
$$\tau = \frac{\mathrm{i}K'}{K} \tag{14}$$
$$\tau' = \frac{\mathrm{i}K}{K'} = \frac{-K}{\mathrm{i}K'} = \frac{-1}{\tau} \tag{15}$$
$$q' = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi\tau'} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/\tau} = \mathrm{e}^{\pi^2/\ln q} \tag{16}$$

$k^2 = 1/2$ のときは $k^2 = k'^2$ となり，そのとき $K = K'$ であるから，$\tau = \mathrm{i}K'/K = \mathrm{i}$，したがって，$q = q' = \mathrm{e}^{-\pi} = 0.043214\cdots$ と十分小さくなり，$k^2 = 1/2$ で切り替えれば q または q' はこの値よりも大きくなることはない．したがって，$k^2 \ge 1/2$ のときは，k' に切り替えて，q' で展開した式を計算するほうが収束が速くなる．

しかし，$\vartheta_i(v', q')$ を求めてから $q(v, q)$ に戻るのは K' から K に戻るほど簡単ではない．楕円テータ関数の場合は次に示すヤコビの虚数変換を用いる．

$$\vartheta_1(v,q) = \mathrm{i}\sqrt{\frac{\mathrm{i}}{\tau}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi v^2/\tau}\vartheta_1(\frac{v}{\tau}, q') \tag{17}$$
$$\vartheta_2(v,q) = \sqrt{\frac{\mathrm{i}}{\tau}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi v^2/\tau}\vartheta_4(\frac{v}{\tau}, q') \tag{18}$$
$$\vartheta_3(v,q) = \sqrt{\frac{\mathrm{i}}{\tau}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi v^2/\tau}\vartheta_3(\frac{v}{\tau}, q') \tag{19}$$
$$\vartheta_4(v,q) = \sqrt{\frac{\mathrm{i}}{\tau}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi v^2/\tau}\vartheta_2(\frac{v}{\tau}, q') \tag{20}$$

ここで，$c = K/K'$ とおく．そうすると，

$$c = \frac{K}{K'} = \frac{\mathrm{i}}{\tau} = \frac{-\pi}{\ln q} = \frac{\pi}{\ln(1/q)} \tag{21}$$

である．$v' = vc$ とすると，式 (18) および式 (20) は，

$$\begin{aligned}\vartheta_1(v,q) &= \mathrm{i}c^{1/2}\ \mathrm{e}^{-\pi v^2 c}\ 2q'^{1/4}(\sin[\pi v'/\mathrm{i}] - q'^2\sin[3\pi v'/\mathrm{i}] + q'^6\sin[5\pi v'/\mathrm{i}] - \cdots) \\ &= c^{1/2}\ \mathrm{e}^{-\pi v^2 c}\ 2q'^{1/4}(\sinh\pi v' - q'^2\sinh 3\pi v' + q'^6\sin 5\pi v' - \cdots) \end{aligned} \tag{22}$$

$$\begin{aligned}\vartheta_4(v,q) &= c^{1/2}\ \mathrm{e}^{-\pi v^2 c}\ 2q'^{1/4}(\cos[\pi v'/\mathrm{i}] + q'^2\cos[3\pi v'/\mathrm{i}] + q'^6\cos[5\pi v'/\mathrm{i}] - \cdots) \\ &= c^{1/2}\ \mathrm{e}^{-\pi v^2 c}\ 2q'^{1/4}(\cosh\pi v' + q'^2\cosh 3\pi v' + q'^6\cosh 5\pi v' - \cdots) \end{aligned} \tag{23}$$

となる．

$\mathrm{e}^{-\pi v^2 c} = \mathrm{e}^{(-\mathrm{i}\pi/\tau)v^2} = q'^{v^2}$ であること，および $\mathrm{e}^{\pi v'} = \mathrm{e}^{\pi cv} = q'^{-v}$ であることに注意すると，

$$\begin{aligned}\vartheta_1(v,q) &= \sqrt{\frac{\pi}{\ln(1/q)}}\ q'^{v^2+1/4}\ \{(q'^{-v} - q'^{v}) - q'^2(q'^{-3v} - q'^{3v}) + q'^6(q'^{-5v} - q'^{5v}) - \cdots\} \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{\ln(1/q)}}\ q'^{v^2-5v+1/4}\ \{(q'^{4v} - q'^{6v}) - q'^2(q'^{2v} - q'^{8v}) + q'^6(q'^{0} - q'^{10v}) - \cdots\} \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{\ln(1/q)}}\ q'^{v^2-5v+1/4}\ \{(z^2 - z^3) - q'^2(z - z^4) + q'^6(1 - z^5) - \cdots\} \end{aligned} \tag{24}$$

$$\begin{aligned}\vartheta_4(v,q) &= \sqrt{\frac{\pi}{\ln(1/q)}}\ q'^{v^2+1/4}\ \{(q'^{-v} + q'^{v}) + q'^2(q'^{-3v} + q'^{3v}) + q'^6(q'^{-5v} + q'^{5v}) + \cdots\} \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{\ln(1/q)}}\ q'^{v^2-5v+1/4}\ \{(q'^{4v} + q'^{6v}) + q'^2(q'^{2v} + q'^{8v}) + q'^6(q'^{0} + q'^{10v}) + \cdots\} \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{\ln(1/q)}}\ q'^{v^2-5v+1/4}\ \{(z^2 + z^3) + q'^2(z + z^4) + q'^6(1 + z^5) + \cdots\} \end{aligned} \tag{25}$$

となる．ただし，$z = q'^{2v}$ である．

結局，数値計算する式は $k^2 \leq 1/2$ のときに，式 (1) と (4) を，$k^2 > 1/2$ のときに式 (24) と (25) を用いる．プログラムは q が与えられた場合を考えているが，k が与えられた場合は別途 q を計算する必要がある．k から q への計算は，すでに前のエントリーで述べた [7].

参考文献

[1] 山内二郎，宇野利雄，一松信,「電子計算機のための数値計算法 III」(培風館), 1971 年, p.258.

[2] 「自然科学者のための数学概論［増訂版］」1954 年（岩波書店）.

[3] 森口繁一，宇田川金圭久，一松信,「数学公式 III」(岩波書店), 1960 年.

[4] Harris Hancock "Lectures on the theory of elliptic functions"
ダウンロード URL,
`https://openlibrary.org/works/OL5730167W/Lectures_on_the_theory_of_elliptic_functions`

[5] Lars Onsager, "Crystal Statitics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition", Phys. Rev. **65**, 117-149 (1944).
ダウンロード URL,
`http://www.colorado.edu/physics/phys7230/phys7230_sp08/Onsager1944.pdf`

[6] E. T. Whittaker and G. N. Watson, "A Course of Modern Analysis", 4th Edition Cambridge Mathematical Library, Cambridge University Press, Internet ArchiveOpen Library,
ダウンロード URL,
`https://ia802704.us.archive.org/11/items/courseofmodernan00whit/courseofmodernan00whit.pdf`

[7] 「第 1 種および第 2 種完全楕円積分の数値計算プログラム」(2017/8/3 のエントリー)
http://totoha.web.fc2.com/Complete_Elliptical_Integral.pdf

プログラムソース

以下のプログラムでは，楕円テータ関数の関数サブプログラム THETA(I，v，q) である．計算は，$k^2 = 1/2$ に相当する $q = 0.043$ で計算式を切り替えている．I=1, 2, 3, 4 で $\vartheta_i(v, q)$ $(i = 1, 2, 3, 4)$ が返ってくる．

使い方は，main() のようにすれば良い．計算結果は，周期が 2π または π の場合である．

```
/*  THETA.c  */
// provides values for the four elliptic theta functions
// converted from the ALGOL program in the textbook 電子計算機のための数値計算法 III p.267
// M. Suzuki 2018.6.21

#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <string.h>
#include <math.h>

double THETA(int I, double v, double q)
{
    double w, q2, q3, q6, lnq, qbis, plq;
    double theta;
    double pi=3.14159265359;
    double doub_pi=6.28318530718;
    int S;


    if(I==2) v+=0.5;
    if(I==3) v-=0.5;
    if(I==1 || I==2)
    {
        S=(v>0)-(v<0);
    }
    else
    {
        S=1;
    }
    v=fabs(v);
    while(v>1)
    {
        v-=1.0;
        if(I==1 || I==2) S*=-1;
    }
    if(I==1 || I==2)
    {
        if(q==0 || v==0)
        {
            theta=0;
            return theta;
        }
    }
    else
    {
        if(q==0)
        {
            theta=1;
```

```
            return theta;
        }
    }
    if(q>0.043)  /* IMAG */
    {
        lnq=log(q);
        plq=9.8690440109/lnq;
        qbis=exp(plq);
        q2=qbis*qbis;
        q6=q2*q2*q2;
        if(v>0.5) v=1.0-v;
        if(I==1 || I==2) w=-exp(2.0*v*plq); else w=exp(2.0*v*plq);
        theta=S*(1.7724538509/sqrt(-lnq))*exp((v*v-v+0.25)*plq);
        theta*=(((((q6*w+q2)*w+1.0)*w+1.0)*w+q2)*w+q6)/w/w;
        return theta;
    }
    else
    {
        if(I==1 || I==2)  /* TH1 */
        {
            w=pi*v;
            q2=q*q;
            theta=2*S*sqrt(sqrt(q))*((sin(5.0*w)*q2*q2-sin(3.0*w))*q2+sin(w));
            return theta;
        }
        else  /* TH4 */
        {
            w=doub_pi*v;
            q2=q*q;
            q3=q2*q;
            theta=2.0*((-cos(3.0*w)*q2*q3+cos(2.0*w))*q3-cos(w))*q+1;
            return theta;
        }
    }
}


int main()
{
    FILE *fp;
    double v, dv, q, x, z;
    double pi;
    int i, j, n;
    pi=M_PI;
    n=800;
    q=0.8;
    dv=4.0/n;
    char *filenameout="theta_0.8.txt";
    fp=fopen(filenameout, "w");
    for(i=0;i<n;i++)
    {
        v=dv*i;
        printf("%lf\t%lf\t", v, v*pi);
        fprintf(fp, "%lf\t%lf\t", v, v*pi);
        for(j=1;j<5;j++)
        {
            z=THETA(j, v, q);
            printf("%lf\t", z);
            fprintf(fp, "%lf\t", z);
        }
        printf("\n");
        fprintf(fp, "\n");
```

```
    }
    fclose(fp);
}
```