

1. Legendre 函数の積の積分表

桂 重 俊 (東北大学工学部)

井 上 雄 次 (東北大学電気通信研究所)

§1 Legendre の陪函数を $P_l^m(x)$ とするとき, その 3 個及び 4 個の積の積分の値は量子力学における角運動量の合成, 統計力学におけるビリアル係数の計算等に必要である.

Legendre 陪函数の 3 個の積の積分表の場合は, $l \leq 3$ なるものは Condon 及び Shortley⁽¹⁾ の著書に掲載されており, $l \leq 4$ なる場合は Shortley⁽²⁾ が計算している. $l \leq 5$ の場合は雨宮⁽³⁾ が計算した. $l \leq 8$ の場合は Rotenberg⁽⁴⁾ 等の $3j$ 記号の表より求めることが出来るが, $3j$ 記号から積分値に変換を要するので使い易い積分表を作成することは極めて意義がある. また 4 個の積の積分表の場合は見当らない. 筆者は小数表示の $l \leq 8$ までの 3 個の積を作成し, 及び $l \leq 4$ までの 4 個の積の積分表を作成中であるので, これを報告する.

Legendre 函数の 3 つの積の積分値は Gaunt の公式があるが, これを直接用いることはあまり計算機に適した方法ではない.

数値積分の方法としては Simpson 法, Gauss の方法⁽⁵⁾ が通常用いられている方法であるが, ここでは積分値の平方を正確な有理分数表示でも出せるように多項式の不定積分を基礎とする方法⁽⁶⁾⁽⁷⁾ を用いた. この方法は多項式の係数を Memory に入れておいて, この係数から多項式の加, 減, 乗, 微分, 積分の結果が得られる多項式の係数を Sub-routine で求めるものである. この方法で得られた多項式の各項に上限及び下限の値を入れて和を作れば定積分の値が得られる. このとき係数を分子, 分母の 2 つの既約整数であらわし, 加, 減, 乗を有理数の加法, 減法, 乗法の interpretive Subroutine を用いると答を正確な有理表示⁽⁶⁾ で得ることが出来る. この方法による Legendre 函数の積の積分表の一部は 1961 年の情報処理学会⁽⁶⁾ で報告したが, 当時記憶容量の不足の為中断していたものである.

§2 3 つの spherical harmonics の積の積分を

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l_1 m_1} Y_{l_2 m_2} Y_{l_3 m_3} \sin \theta d\varphi = \delta_K(m_1 + m_2 + m_3) (2\pi)^{-\frac{1}{2}} \\ \times I(l_1, l_2, l_3; m_1, m_2, m_3) \quad (1)$$

$$\begin{aligned}
 I(\ell_1, \ell_2, \ell_3; m_1, m_2, m_3) &= \int_0^\pi \theta_{\ell_1}^{m_1}(\cos \theta) \theta_{\ell_2}^{m_2}(\cos \theta) \theta_{\ell_3}^{m_3}(\cos \theta) \sin \theta \, d\theta \\
 &= \int_{-1}^1 \theta_{\ell_1}^{m_1}(x) \theta_{\ell_2}^{m_2}(x) \theta_{\ell_3}^{m_3}(x) \, dx
 \end{aligned}$$

とすると、ここに

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \theta_{\ell}^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

$$\theta_{\ell}^m(\cos \theta) = (-1)^m \left[\frac{(2\ell+1)}{2} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_{\ell}^m(\cos \theta) \quad (m > 0)$$

$$\theta_{\ell}^{-m}(\cos \theta) = (-1)^m \theta_{\ell}^m(\cos \theta)$$

$$P_{\ell}^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} P_{\ell}^{(m)}(x), \quad P_{\ell}^{(m)}(x) = \frac{d^m P_{\ell}(x)}{dx^m}$$

$$P_{\ell}^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_{\ell}^m(x)$$

である。(1)により必要な場合は $m_1+m_2+m_3=0$ の場合に限ることが出来、又、 ℓ_1, ℓ_2, ℓ_3 が偶三角形の3辺を形成する場合に限り I は消えないので、この場合についての I の値を

$$\begin{aligned}
 &I(\ell_1, \ell_2, \ell_3; m_1, m_2, m_3 = -m_1 - m_2) \\
 &= (-1)^{(|m_1|+|m_2|+|m_3|)/2} \\
 &\quad \left[\frac{(2\ell_1+1)}{2} \cdot \frac{(2\ell_2+1)}{2} \cdot \frac{(2\ell_3+1)}{2} \cdot \frac{(\ell_1-|m_1|)!}{(\ell_1+|m_1|)!} \cdot \frac{(\ell_2-|m_2|)!}{(\ell_2+|m_2|)!} \cdot \frac{(\ell_3-|m_3|)!}{(\ell_3+|m_3|)!} \right]^{\frac{1}{2}} \\
 &\quad \times \int (1-x^2)^{(|m_1|+|m_2|+|m_3|)/2} P_{\ell_1}^{(|m_1|)}(x) P_{\ell_2}^{(|m_2|)}(x) P_{\ell_3}^{(|m_3|)}(x) \, dx
 \end{aligned}$$

但し

$$0 \leq \ell_1 \leq 8, \quad 0 \leq \ell_2 \leq \ell_1, \quad 0 \leq \ell_3 \leq \ell_2$$

$$0 \leq m_1 \leq \ell_1, \quad \ell_2 \leq m_2 \leq \ell_2, \quad -\ell_3 \leq m_3 \leq \ell_3, \quad m_3 = -m_1 - m_2$$

により計算した。これは ℓ_i, m_i について対称で、また

$$\begin{aligned}
 &I(\ell_1, \ell_2, \ell_3; -m_1, -m_2, -m_3 = m_1 + m_2) \\
 &= I(\ell_1, \ell_2, \ell_3; m_1, m_2, m_3)
 \end{aligned}$$

である。

Wigner の 3 添字記号との関係は

$$\begin{aligned}
 &I(\ell_1, \ell_2, \ell_3; m_1, m_2, m_3 = -m_1 - m_2) \\
 &= 2 \left[\frac{(2\ell_1+1)}{2} \cdot \frac{(2\ell_2+1)}{2} \cdot \frac{(2\ell_3+1)}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \ell_1, \ell_2, \ell_3 \\ m_1, m_2, m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_1, \ell_2, \ell_3 \\ 0, 0, 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

である。また spherical harmonics の matrix element は

$$\begin{aligned}
 & (\ell' m' | Y_{LM} | \ell m) \\
 &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta Y_{\ell' m'} Y_{LM} Y_{\ell m} \\
 &= (-)^{m'} \delta_K(-m' + M + m) (2\pi)^{-\frac{3}{2}} I(\ell', L, \ell; -m', M, m)
 \end{aligned}$$

となる。

Condon & Shortley の係数との関係は

$$\begin{aligned}
 c^K(\ell m, \ell' m') &= (-)^m \sqrt{\frac{2}{2K+1}} I(k, \ell, \ell'; m-m', -m, m') \\
 &= (-)^{m-m'} c^K(\ell' m', \ell m)
 \end{aligned}$$

である。

正規化しない Legendre 函数の積については

$$\begin{aligned}
 & \Delta(\ell_1, \ell_2, \ell_3; m_1, m_2, m_3 = -m_1 - m_2) \\
 &= \int_{-1}^1 P_{\ell_1}^{m_1}(x) P_{\ell_2}^{m_2}(x) P_{\ell_3}^{m_3}(x) dx \\
 &= \left[\frac{2}{(2\ell_1+1)} \cdot \frac{2}{(2\ell_2+1)} \cdot \frac{2}{(2\ell_3+1)} \cdot \frac{(\ell_1+|m_1|)! (\ell_2+|m_2|)! (\ell_3+|m_3|)!}{(\ell_1-|m_1|)! (\ell_2-|m_2|)! (\ell_3-|m_3|)!} \right]^{\frac{1}{2}} \\
 &\quad \times I(\ell_1, \ell_2, \ell_3; m_1, m_2, m_3 = -m_1 - m_2)
 \end{aligned}$$

である。従つて

$$\begin{aligned}
 & \Delta(\ell_1, \ell_2, \ell_3; -m_1, -m_2, -m_3 = m_1 + m_2) \\
 &= \frac{(\ell_1-|m_1|)! (\ell_2-|m_2|)! (\ell_3-|m_3|)!}{(\ell_1+|m_1|)! (\ell_2+|m_2|)! (\ell_3+|m_3|)!} \Delta(\ell_1, \ell_2, \ell_3; m_1, m_2, m_3 = -m_1 - m_2)
 \end{aligned}$$

また

$$\begin{aligned}
 & \Delta(\ell_1, \ell_2, \ell_3; m_1, m_2, m'_3 = -m_3 = m_1 + m_2) \\
 &= (-)^{m_3} \left[\frac{2}{(2\ell_1+1)} \cdot \frac{2}{(2\ell_2+1)} \cdot \frac{2}{(2\ell_3+1)} \cdot \frac{(\ell_1+|m_1|)! (\ell_2+|m_2|)! (\ell_3-|m_3|)!}{(\ell_1-|m_1|)! (\ell_2-|m_2|)! (\ell_3+|m_3|)!} \right]^{\frac{1}{2}} \\
 &\quad \times I(\ell_1, \ell_2, \ell_3; m_1, m_2, m_3 = -m_1 - m_2)
 \end{aligned}$$

となる。

計算方式は Fig. 1 の Flow Chart に示す如く、先ず Legendre 函数の多項式 $P_n(x)$ の x^n の係数を漸化式

$$(n+1) P_{n+1}(x) - (2n+1)x P_n(x) + n P_{n-1}(x) = 0$$

を用いて生成し、次にこの多項式を微分 Subroutine で微分することにより、 $P_\ell^{(m)}(x)$

の x^l の係数を生成し, $l_1, l_2, l_3; m_1, m_2, m_3$ を選定することによつて, $\frac{d^{|m_1|}}{dx^{|m_1|}} P_{l_1}(x)$, $\frac{d^{|m_2|}}{dx^{|m_2|}} P_{l_2}(x)$, $\frac{d^{|m_3|}}{dx^{|m_3|}} P_{l_3}(x)$ が決まり, これより 3 個の多項式が生成される.

次に積を作る Subroutine で前述の 3 個の多項式の積を計算し, 更に

$(1-x^2)^{(|m_1|+|m_2|+|m_3|)/2}$ をかけ, 次に多項式を積分する Subroutine で不定積分の係数を求め, 上, 下限の値より定積分の値を出した.

その検算には n の小さい所について Condon & Shortley の計算値と比較した.

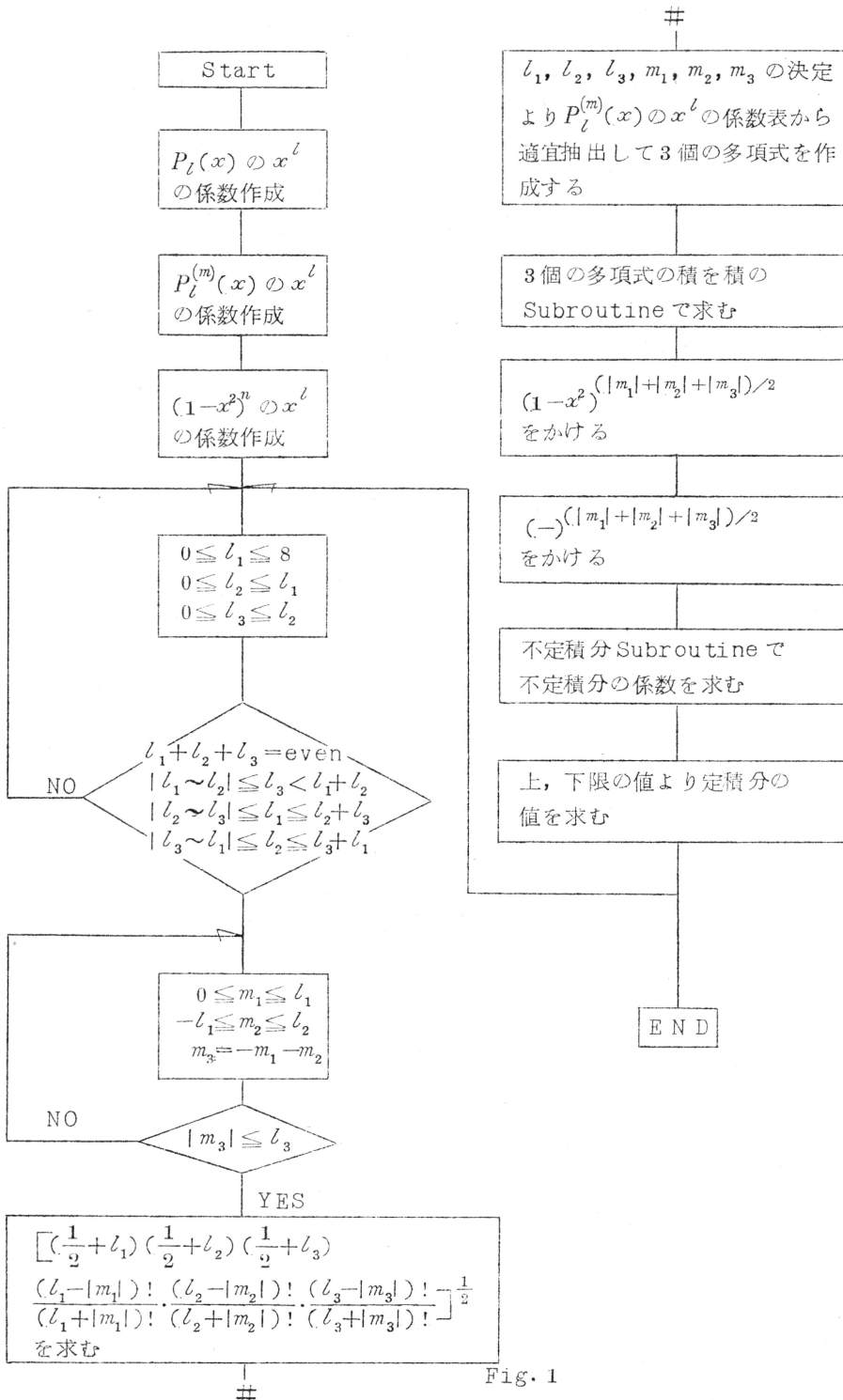
4 個の場合も同様である. Table 1, Table 2 は 3 個の, 及び 4 個の場合の計算結果の一部を掲載しておきます.

§ 3 おわりに

数値計算には UNICON を通じて IBM 7090 のお世話になつた. ここに学振 UNICON 担当の方々及び日本 IBM の方々の御便宜に厚く感謝します.

REFERENCES

1. E.U. Condon and G.H. Shortley, Theory of Atomic Spectra p. 174-180, (1959)
2. G.H. Shortley and F. Fried, Phys. Rev. 54, 739 (1938)
3. A. Amemiya, 日本数学物理学会誌 18, 77 (1943)
4. M. Rotenberg, R. Bivins, N. Metropolis, J.K. Wooten, The $3j$ and $6-j$ symbols, MIT (1959)
5. E.L. Albasiny, R.J. Bell and J.R.A. Cooper, Proc. Phys. Soc. 84 336 (1964)
6. 遠藤, 高橋, 桂, 情報処理学会講演予稿 1961, 10
7. J. Miller, Math. Comp. 17 84 (1963)



L1	L2	L3	M1	M2	M3	Integral
4	2	2	0	1	-1	0.40406120E-00
4	2	2	0	2	-2	0.10101521E-00
4	2	2	1	-2	1	-0.22587693E-00
4	2	2	1	-1	-0	-0.55328310E 00
4	2	2	1	0	-1	-0.55328310E 00
4	2	2	1	1	-2	-0.22587693E-00
4	2	2	2	-2	-0	0.39123029E-00
4	2	2	2	-1	-1	0.63887650E 00
4	2	2	2	0	-2	0.39123029E-00
4	2	2	3	-2	-1	-0.59761433E 00
4	2	2	3	-1	-2	-0.59761433E 00
4	2	2	4	-2	-2	0.84515417E 00
4	3	1	-4	3	1	0.81649653E 00
4	3	1	-3	2	1	-0.70710668E 00
4	3	1	-3	3	0	-0.40824826E-00
4	3	1	-2	1	1	0.59761417E 00
4	3	1	-2	2	0	0.53452253E 00
4	3	1	-2	3	-1	0.15430333E-00
4	3	1	-1	0	1	-0.48795038E-00
4	3	1	-1	1	0	-0.59761441E 00

Table 1 3 個の場合の計算結果

L1	L2	L3	L4	M1	M2	M3	M4	Integral
2	2	1	1	1	-2	0	1	0.30304577E-00
2	2	1	1	1	-2	1	0	0.30304577E-00
2	2	1	1	1	-1	-1	1	0.42857146E-00
2	2	1	1	1	-1	0	-0	-0.64285712E 00
2	2	1	1	1	-1	1	-1	0.42857146E-00
2	2	1	1	1	0	-1	-0	-0.12371789E-00
2	2	1	1	1	0	0	-1	-0.12371789E-00
2	2	1	1	1	1	-1	-1	0.42857146E-00
2	2	1	1	2	-2	-1	1	-0.64285713E 00
2	2	1	1	2	-2	0	-0	0.21428572E-00
2	2	1	1	2	-2	1	-1	-0.64285713E 00
2	2	1	1	2	-1	-1	-0	0.30304577E-00
2	2	1	1	2	-1	0	-1	0.30304577E-00
2	2	1	1	2	0	-1	-1	-0.34992708E-00
2	2	2	0	-2	0	2	0	-0.31943826E-00
2	2	2	0	-2	1	1	0	0.39123040E-00
2	2	2	0	-2	2	0	0	-0.31943826E-00
2	2	2	0	-1	-1	2	0	0.39123040E-00
2	2	2	0	-1	0	1	0	-0.15971914E-00
2	2	2	0	-1	1	0	0	-0.15971914E-00

Table 2 4個の場合の計算結果

本 PDF ファイルは 1965 年発行の「第 6 回プログラミング・シンポジウム報告集」をスキャンし、項目ごとに整理して、情報処理学会電子図書館「情報学広場」に掲載するものです。

この出版物は情報処理学会への著作権譲渡がなされていませんが、情報処理学会公式 Web サイトの https://www.ipsj.or.jp/topics/Past_reports.html に下記「過去のプログラミング・シンポジウム報告集の利用許諾について」を掲載して、権利者の検索をおこないました。そのうえで同意をいただいたもの、お申し出のなかったものを掲載しています。

過去のプログラミング・シンポジウム報告集の利用許諾について

情報処理学会発行の出版物著作権は平成 12 年から情報処理学会著作権規程に従い、学会に帰属することになっています。

プログラミング・シンポジウムの報告集は、情報処理学会と設立の事情が異なるため、この改訂がシンポジウム内部で徹底しておらず、情報処理学会の他の出版物が情報学広場(=情報処理学会電子図書館)で公開されているにも拘らず、古い報告集には公開されていないものが少なからずありました。

プログラミング・シンポジウムは昭和 59 年に情報処理学会の一部門になりましたが、それ以前の報告集も含め、この度学会の他の出版物と同様の扱いにしたいと考えます。過去のすべての報告集の論文について、著作権者(論文を執筆された故人の相続人)を探し出して利用許諾に関する同意を頂くことは困難ですので、一定期間の権利者搜索の努力をしたうえで、著作権者が見つからない場合も論文を情報学広場に掲載させていただきたいと思います。その後、著作権者が発見され、情報学広場への掲載の継続に同意が得られなかった場合には、当該論文については、掲載を停止致します。

この措置にご意見のある方は、プログラミング・シンポジウムの辻尚史運営委員長(tsuji@math.s.chiba-u.ac.jp)までお申し出ください。

加えて、著作権者について情報をお持ちの方は事務局まで情報をお寄せくださいますようお願い申し上げます。

期間：2020 年 12 月 18 日～2021 年 3 月 19 日

掲載日：2020 年 12 月 18 日

プログラミング・シンポジウム委員会

情報処理学会著作権規程

<https://www.ipsj.or.jp/copyright/ronbun/copyright.html>