

動径座標のスペクトル法

竹広 真一

2008 年 7 月 20 日

2 次元極座標, 3 次元円筒座標, および 3 次元球座標での原点で C^∞ 級の微分可能な滑らかな関数をスペクトル法により表現するための動径座標の展開関数について述べる.

1 直交多項式系

円筒座標 (r, ϕ) での C^∞ 級の関数 $f(r, \phi)$ を表現するスペクトル法をさがす. 方位角方向に Fourier 展開して

$$f(r, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} f_m(r) e^{im\phi}. \quad (1)$$

このとき $f_m(r)$ は極での微分可能条件から $r \rightarrow 0$ で $O(r^{|m|+2p})$ と振る舞わなければならないことがわかる¹. ここで p は非負の整数である.

さて, 極での条件を満たしつつ, 展開関数が境界で Gibbs の現象が生じないように定義となる微分方程式が境界で特異であり², かつ重み関数が円筒および球の幾何学的形状に都合のよい $f_m(r)$ の表現を求めたい. また, 3 項間の漸化式を満たし取りあつかいが簡単であるので直交多項式が望ましい.

¹Matsushima and Marcus の参考文献 [6] を参照すべし. 球座標では

$$g(\lambda, \varphi, r) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n g_n^m(r) Y_n^m(\lambda, \varphi)$$

なる関数について $g_n^m(r)$ は $r \rightarrow 0$ で $O(r^{|n|+2p})$ と振る舞わなければならないはず.

²Matsushima and Marcus (1995) の参考文献 11 を参照すべし

この3つの要請を満たす定義となる微分方程式として, $0 \leq r \leq 1$ で定義される特異な Sturm-Liouville 型方程式

$$\frac{(1-r^2)^{1-\alpha}}{r^\beta} \frac{d}{dr} \left((1-r^2)^\alpha r^\beta \frac{dy}{dr} \right) - \frac{|m|(|m|+\beta-1)}{r^2} y + n(n+2\alpha+\beta-1)y = 0, \quad (2)$$

ただし n, m は整数で $0 \leq |m| \leq n$ であり, $0 < \alpha \leq 1$, β は正の整数である.

式(2)は $n+m$ が偶数のとき n 次の多項式の解を持ち $r=0$ に関するフロベニウスの級数を用いて解 $y = Q_n^m(\alpha, \beta; r)$ を閉じた形で書くことができる.

$$Q_n^m(\alpha, \beta; r) = \sum_{p=0}^{(n-|m|)/2} \frac{(-1)^{p+(n-|m|)/2} \Gamma\left(\frac{n+|m|+\gamma-1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2}\right)}{p! \left(\frac{n-|m|}{2} - p\right)! \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\gamma-1}{2}\right)} r^{|m|+2p}, \quad (3)$$

ただし $\gamma \equiv 2\alpha + \beta$ である³. m が偶数であれば $Q_n^m(\alpha, \beta; r)$ は r の偶関数, 奇数であれば奇関数である. $r \rightarrow 0$ で $Q_n^m(\alpha, \beta; r)$ は $O(r^{|m|})$ で振る舞うので極座標 (r, ϕ)

³式(2)の解を r の q 次から始まる級数 $y = \sum_{l=0}^{\infty} a_l r^{q+l}$ の形で求める. これを式(2)に代入すると

$$\frac{(1-r^2)^{1-\alpha}}{r^\beta} \frac{d}{dr} \left((1-r^2)^\alpha r^\beta \frac{d}{dr} \sum_{l=0}^{\infty} a_l r^{q+l} \right) - |m|(|m|+\beta-1) \sum_{l=0}^{\infty} a_l r^{q+l-2} + n(n+2\alpha+\beta-1) \sum_{l=0}^{\infty} a_l r^{q+l} = 0,$$

第1項目を整理すると

$$\begin{aligned} & \frac{(1-r^2)^{1-\alpha}}{r^\beta} \frac{d}{dr} \left((1-r^2)^\alpha r^\beta \frac{d}{dr} \sum_{l=0}^{\infty} a_l r^{q+l} \right) = \frac{(1-r^2)^{1-\alpha}}{r^\beta} \frac{d}{dr} (1-r^2)^\alpha r^\beta \sum_{l=0}^{\infty} (q+l) a_l r^{q+l-1} \\ & = (1-r^2) \sum_{l=0}^{\infty} (q+l) a_l \frac{d}{dr} r^{q+l-1} + \frac{(1-r^2)^{1-\alpha}}{r^\beta} (-2\alpha r) (1-r^2)^{\alpha-1} r^\beta \sum_{l=0}^{\infty} (q+l) a_l r^{q+l-1} \\ & \quad + \frac{(1-r^2)^{1-\alpha}}{r^\beta} (1-r^2)^\alpha \beta r^{\beta-1} \sum_{l=0}^{\infty} (q+l) a_l r^{q+l-1} \\ & = (1-r^2) \sum_{l=0}^{\infty} (q+l)(q+l-1) a_l r^{q+l-2} + (-2\alpha r) \sum_{l=0}^{\infty} (q+l) a_l r^{q+l-1} + \frac{(1-r^2)}{r} \beta \sum_{l=0}^{\infty} (q+l) a_l r^{q+l-1} \\ & = (1-r^2) \sum_{l=0}^{\infty} (q+l)(q+l-1) a_l r^{q+l-2} - \sum_{l=0}^{\infty} 2\alpha(q+l) a_l r^{q+l} + (1-r^2) \sum_{l=0}^{\infty} \beta(q+l) a_l r^{q+l-2} \\ & = (1-r^2) \sum_{l=0}^{\infty} (q+l)(q+l+\beta-1) a_l r^{q+l-2} - \sum_{l=0}^{\infty} 2\alpha(q+l) a_l r^{q+l} \\ & = \sum_{l=0}^{\infty} (q+l)(q+l+\beta-1) a_l r^{q+l-2} - \sum_{l=0}^{\infty} (q+l)(q+l+\beta-1) a_l r^{q+l} - \sum_{l=0}^{\infty} 2\alpha(q+l) a_l r^{q+l} \\ & = \sum_{l=0}^{\infty} (q+l)(q+l+\beta-1) a_l r^{q+l-2} - \sum_{l=0}^{\infty} (q+l)(q+l+2\alpha+\beta-1) a_l r^{q+l} \end{aligned}$$

において $Q_n^m(\alpha, \beta; r)e^{im\phi}$ は極の条件を正確に満たすことになる. $Q_n^m(\alpha, \beta; r)$ は完

これを元の式に代入して整理すると

$$\begin{aligned} & \sum_{l=0}^{\infty} (q+l)(q+l+\beta-1)a_l r^{q+l-2} - \sum_{l=0}^{\infty} (q+l)(q+l+2\alpha+\beta-1)a_l r^{q+l} \\ & - |m|(|m|+\beta-1) \sum_{l=0}^{\infty} a_l r^{q+l-2} + n(n+2\alpha+\beta-1) \sum_{l=0}^{\infty} a_l r^{q+l} = 0, \\ & \sum_{l=0}^{\infty} [(q+l)(q+l+\beta-1) - |m|(|m|+\beta-1)]a_l r^{q+l-2} \\ & + \sum_{l=0}^{\infty} [n(n+2\alpha+\beta-1) - (q+l)(q+l+2\alpha+\beta-1)]a_l r^{q+l} = 0, \\ & \sum_{l=0}^{\infty} (q+l-|m|)(q+l+|m|+\beta-1)a_l r^{q+l-2} + \sum_{l=0}^{\infty} (n-q-l)(q+l+n+2\alpha+\beta-1)a_l r^{q+l} = 0, \end{aligned}$$

最低次の項から次数 q が定まる. 第 1 項目の $l=0$ から

$$(q-|m|)(q+|m|+\beta-1)a_0 = 0, \quad i.e. \quad q = |m|.$$

$l=1$ からは

$$(|m|+1-|m|)(|m|+|m|+\beta-1)a_1 = 0, \quad i.e. \quad a_1 = 0.$$

$q = |m|$ を代入して a_l の漸化式を導こう. 第 1 項目の $l=0, 1$ は 0 となっているので

$$\begin{aligned} & \sum_{l=2}^{\infty} l(l+2|m|+\beta-1)a_l r^{|m|+l-2} + \sum_{l=0}^{\infty} (n-|m|-l)(l+n+|m|+\gamma-1)a_l r^{q+l} = 0, \\ & \sum_{l=0}^{\infty} (l+2)(l+2|m|+\beta+1)a_{l+2} r^{|m|+l} + \sum_{l=0}^{\infty} (n-|m|-l)(l+n+|m|+\gamma-1)a_l r^{|m|+l} = 0, \end{aligned}$$

ただし $\gamma = 2\alpha + \beta$ である. したがって

$$a_{l+2} = -\frac{(n-|m|-l)(l+n+|m|+\gamma-1)}{(l+2)(l+2|m|+\beta+1)}a_l$$

$a_1 = 0$ より l が奇数の項は 0 である. そこで $l = 2p - 2$ と置き換えて

$$a_{2p} = -\frac{(n-|m|-2p+2)(2p+n+|m|+\gamma-3)}{2p(2p+2|m|+\beta-1)}a_{2p-2}$$

これより $n-|m|$ が偶数ならば $p = (n-|m|)/2 + 1$ 番目の項は分子の一つめのカッコの中味が 0 となるので $p = (n-|m|)/2$ までで級数が閉じる. さらに

$$\begin{aligned} a_{2p} &= -\frac{(n-|m|-2p+2)(2p+n+|m|+\gamma-3)}{2p(2p+2|m|+\beta-1)}a_{2p-2} \\ &= -\frac{\left(\frac{n-|m|}{2} - p + 1\right) \left(\frac{n+|m|+\gamma-3}{2} + p\right)}{p \left(\frac{2|m|+\beta-1}{2} + p\right)}a_{2p-2} \end{aligned}$$

全系をなし、重み関数

$$w(\alpha, \beta; r) = \frac{r^\beta}{(1-r^2)^{1-\alpha}} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} &= (-1)^2 \frac{\left(\frac{n-|m|}{2} - p + 1\right) \left(\frac{n-|m|}{2} - p + 2\right) \left(\frac{n+|m|+\gamma-3}{2} + p\right) \left(\frac{n+|m|+\gamma-3}{2} + p - 1\right)}{p(p-1) \left(\frac{2|m|+\beta-1}{2} + p\right) \left(\frac{2|m|+\beta-1}{2} + p - 1\right)} a_{2p-4} \\ &= (-1)^p \frac{\left(\frac{n-|m|}{2} - p + 1\right) \left(\frac{n-|m|}{2} - p + 2\right) \cdots \left(\frac{n-|m|}{2}\right)}{p(p-1) \cdots 1} \\ &\quad \frac{\left(\frac{n+|m|+\gamma-3}{2} + p\right) \left(\frac{n+|m|+\gamma-3}{2} + p - 1\right) \cdots \left(\frac{n+|m|+\gamma-3}{2} + 1\right)}{\left(\frac{2|m|+\beta-1}{2} + p\right) \left(\frac{2|m|+\beta-1}{2} + p - 1\right) \cdots \left(\frac{2|m|+\beta-1}{2} + 1\right)} a_0 \\ &= (-1)^p \frac{\left(\frac{n-|m|}{2}\right)! \Gamma\left(\frac{n+|m|+\gamma-1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2}\right)}{p! \left(\frac{n-|m|}{2} - p\right)! \Gamma\left(\frac{n+|m|+\gamma-1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} + p\right)} a_0 \end{aligned}$$

ここで a_0 として

$$a_0 = \frac{(-1)^{(n-|m|)/2} \Gamma\left(\frac{n+|m|+\gamma-1}{2}\right)}{\left(\frac{n-|m|}{2}\right)! \Gamma\left(\frac{2|m|+\gamma-1}{2}\right)}$$

を選ぶと

$$a_{2p} = (-1)^{p+(n-|m|)/2} \frac{\Gamma\left(\frac{n+|m|+\gamma-1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2}\right)}{p! \left(\frac{n-|m|}{2} - p\right)! \Gamma\left(\frac{2|m|+\gamma-1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} + p\right)}$$

に関して直交している. すなわち⁴

$$\int_0^1 Q_n^m(\alpha, \beta; r) Q_{n'}^m(\alpha, \beta; r) w(\alpha, \beta; r) dr = I_n^m(\alpha, \beta) \delta_{n, n'}, \quad (5)$$

積分定数 $I_n^m(\alpha, \beta)$ の漸化式が後に示される. 与えられた $I_n^m(\alpha, \beta)$ を用いて直交関数系を規格化して

$$\Phi_n^m(\alpha, \beta; r) = (I_n^m(\alpha, \beta))^{-1/2} Q_n^m(\alpha, \beta; r) \quad (6)$$

とする. $\Phi_n^m(\alpha, \beta; r)$ は極座標で与えられる単位円盤 $D \equiv \{(r, \phi) | 0 \leq r \leq 1, 0 \leq \phi \leq 2\pi\}$ 上でのスカラー関数を展開するのに用いることができ

$$f(r, \phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n, m+n \text{ even}}^n f_n^m \Phi_n^m(\alpha, \beta; r) e^{im\phi}, \quad (7)$$

ここで f_n^m は複素展開係数である. $\Phi_n^m(\alpha, \beta; r)$ の極での正しい振舞により $f(r, \phi)$ は円盤 D 上で C^∞ 級であることに注意されたい. 係数 f_n^m は

$$f_n^m = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^1 f(r, \phi) \Phi_n^m(\alpha, \beta; r) e^{-im\phi} w(\alpha, \beta; r) dr d\phi, \quad (8)$$

⁴式 (2) に $Q_{n'}^m(\alpha, \beta; r) w(\alpha, \beta; r)$ をかけて領域積分すると

$$\int_0^1 Q_{n'}^m \frac{d}{dr} \left((1-r^2)^{\alpha} r^{\beta} \frac{dQ_n^m}{dr} \right) dr - \int_0^1 \frac{|m|(|m| + \beta - 1)}{r^2} Q_{n'}^m Q_n^m w dr + n(n+2\alpha + \beta - 1) \int_0^1 Q_{n'}^m Q_n^m w dr = 0,$$

$\alpha > 0$ に注意して第 1 項目を 2 度部分積分して入れ換えると,

$$\begin{aligned} \int_0^1 Q_{n'}^m \frac{d}{dr} \left((1-r^2)^{\alpha} r^{\beta} \frac{dQ_n^m}{dr} \right) dr &= \left[Q_{n'}^m (1-r^2)^{\alpha} r^{\beta} \frac{dQ_n^m}{dr} \right]_0^1 - \int_0^1 (1-r^2)^{\alpha} r^{\beta} \frac{dQ_{n'}^m}{dr} \frac{dQ_n^m}{dr} \\ &= - \left[Q_n^m (1-r^2)^{\alpha} r^{\beta} \frac{dQ_{n'}^m}{dr} \right]_0^1 + \int_0^1 Q_n^m \frac{d}{dr} \left((1-r^2)^{\alpha} r^{\beta} \frac{dQ_{n'}^m}{dr} \right) dr = \int_0^1 Q_n^m \frac{d}{dr} \left((1-r^2)^{\alpha} r^{\beta} \frac{dQ_{n'}^m}{dr} \right) dr \end{aligned}$$

ここで $Q_{n'}^m$ の満たす微分方程式

$$\frac{(1-r^2)^{1-\alpha}}{r^{\beta}} \frac{d}{dr} \left((1-r^2)^{\alpha} r^{\beta} \frac{dQ_{n'}^m}{dr} \right) - \frac{|m|(|m| + \beta - 1)}{r^2} Q_{n'}^m + n'(n' + 2\alpha + \beta - 1) Q_{n'}^m = 0,$$

を用いると,

$$\begin{aligned} \int_0^1 Q_n^m \frac{d}{dr} \left((1-r^2)^{\alpha} r^{\beta} \frac{dQ_{n'}^m}{dr} \right) dr &= \int_0^1 \frac{|m|(|m| + \beta - 1)}{r^2} Q_{n'}^m Q_n^m w dr \\ &\quad - n'(n' + 2\alpha + \beta - 1) \int_0^1 Q_{n'}^m Q_n^m w dr, \end{aligned}$$

これを最初の式に代入して整理すると $|m|$ が係数に含まれる項はキャンセルして

$$[n'(n' + 2\alpha + \beta - 1) - n(n + 2\alpha + \beta - 1)] \int_0^1 Q_{n'}^m Q_n^m w dr = 0.$$

したがって $n \neq n'$ ならば $\int_0^1 Q_{n'}^m Q_n^m w dr = 0$ となる.

により求められる. C^∞ 級に対する展開式 (7) がスペクトル収束 (すなわち代数的収束より速い) することは, 微分方程式 (2) と (8) を用いることで示すことができる. r に対して部分積分をすることにより⁵,

$$f_n^m = \frac{1}{2\pi n(n+2\alpha+\beta-1)} \int_0^{2\pi} \int_0^1 h(r, \phi) \Phi_n^m(\alpha, \beta; r) e^{-im\phi} w(\alpha, \beta; r) dr d\phi, \quad (9)$$

ただし

$$h(r, \phi) = -\frac{(1-r^2)^{1-\alpha}}{r^\beta} \frac{d}{dr} \left((1-r^2)^\alpha r^\beta \frac{df}{dr} \right) + \frac{|m|(|m|+\beta-1)}{r^2} f. \quad (10)$$

f に $r^{|m|} e^{im\phi}$ を代入することにより, $f(r, \phi)$ が極での条件を満たせば $h(r, \phi)$ もまた極での条件を満たすことがわかる⁶. 部分積分を繰り返すことにより式 (7) の $f(r, \phi)$ へのスペクトル収束を示すことができる⁷.

2 数値計算の手順

ここでは実際に $\Phi_n^m(\alpha, \beta; r)$ と式 (7) の f_n^m を数値的に見積もるための手順を議論する. 簡単のため以下では $Q_n^m(\alpha, \beta; r)$, $\Phi(\alpha, \beta; r)$, $I_n^m(\alpha, \beta)$, $w(\alpha, \beta; r)$ の引数 α, β ⁵(2) を用いると

$$\Phi_n^m(\alpha, \beta; r) = \frac{1}{n(n+2\alpha+\beta-1)} \left[-\frac{(1-r^2)^{1-\alpha}}{r^\beta} \frac{d}{dr} \left((1-r^2)^\alpha r^\beta \frac{d\Phi_n^m}{dr} \right) + \frac{|m|(|m|+\beta-1)}{r^2} \Phi_n^m \right]$$

これを (8) に代入して部分積分を 2 度行うと (9) を得る.

⁶実際に $r^{|m|}$ を代入すると

$$\begin{aligned} h(r, \phi) &= -\frac{(1-r^2)^{1-\alpha}}{r^\beta} \frac{d}{dr} \left((1-r^2)^\alpha |m| r^{|m|+\beta-1} \right) + |m|(|m|+\beta-1) r^{|m|-2} \\ &= -(1-r^2) |m|(|m|+\beta-1) r^{|m|-2} - (1-r^2)^{1-\alpha} (1-r^2)^{\alpha-1} (-2\alpha r) |m| r^{|m|-1} \\ &\quad + |m|(|m|+\beta-1) r^{|m|-2} \\ &= |m|(|m|+\beta-1) r^{|m|} + 2\alpha |m| r^{|m|} = |m|(|m|+2\alpha+\beta-1) r^{|m|} \end{aligned}$$

したがって $h(r, \phi)$ も原点で $r^{|m|}$ の振舞をする.

⁷ $\Phi_n^m(\alpha, \beta; r)$ を (2) で変形して部分積分を $2l$ 回繰り返すと, 境界 $r=0, 1$ で $(1-r^2)^\alpha r^\beta = 0$ となるので積分の寄与だけが残る,

$$f_n^m = \frac{1}{2\pi n^l (n+2\alpha+\beta-1)^l} \int_0^{2\pi} \int_0^1 \mathcal{D}_l f(r, \phi) \Phi_n^m(\alpha, \beta; r) e^{-im\phi} w(\alpha, \beta; r) dr d\phi,$$

ただし

$$\mathcal{D}_l = \left[-\frac{(1-r^2)^{1-\alpha} n^l}{r^\beta} \frac{d}{dr} \left((1-r^2)^\alpha r^\beta \frac{d}{dr} \right) + \frac{|m|(|m|+\beta-1)}{r^2} \right]^l$$

である. $f(r, \phi)$ が円盤上で C^∞ 級であり, さらに先の一つ目の式変形から $\mathcal{D}_l f$ は極での条件を満たしている. したがって $\mathcal{D}_l f$ も C^∞ 級であるので n によらず有界な値で積分値が制限される. したがって f_n^m はどのような代数的収束 $1/n^{2l}$ よりも速く収束する.

を省略する. まずいくつかの有用な関係式を導出する. $n > |m|$ に対して Q_n^m は次の関係式を満たす.

$$r \frac{d}{dr} (Q_n^m(r) - Q_{n-2}^m(r)) = nQ_n^m(r) + (n + \gamma - 3)Q_{n-2}^m(r). \quad (11)$$

ここで $Q_{|m|-2}^m(r) \equiv 0$ である. 式 (11) は (3) を代入することで容易に確かめられる⁸. 式 (11) を用いて式 (2) の階数を一つ下げることができて⁹,

$$(1 - r^2)r \frac{d}{dr} Q_n^m(r) = \left(-nr^2 + \frac{|m|(|m| + \beta - 1) + n(n + \gamma - \beta - 2)}{2n + \gamma - 3} \right) Q_n^m(r)$$

8

$$\begin{aligned} & r \frac{d}{dr} (Q_n^m(r) - Q_{n-2}^m(r)) \\ &= \sum_{p=0}^{(n-|m|)/2} \frac{(-1)^{p+(n-|m|)/2} (|m| + 2p) \Gamma\left(\frac{n+|m|+\gamma-1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2}\right)}{p! \left(\frac{n-|m|}{2} - p\right)! \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\gamma-1}{2}\right)} r^{|m|+2p} \\ &\quad - \sum_{p=0}^{(n-|m|)/2-1} \frac{(-1)^{p+(n-|m|)/2-1} (|m| + 2p) \Gamma\left(\frac{n+|m|+\gamma-3}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2}\right)}{p! \left(\frac{n-|m|}{2} - 1 - p\right)! \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\gamma-1}{2}\right)} r^{|m|+2p} \\ &= \sum_{p=0}^{(n-|m|)/2} \frac{(-1)^{p+(n-|m|)/2} [n + (-n + |m| + 2p)] \Gamma\left(\frac{n+|m|+\gamma-1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2}\right)}{p! \left(\frac{n-|m|}{2} - p\right)! \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\gamma-1}{2}\right)} r^{|m|+2p} \\ &\quad - \sum_{p=0}^{(n-|m|)/2-1} \frac{(-1)^{p+(n-|m|)/2-1} (|m| + 2p) \Gamma\left(\frac{n+|m|+\gamma-3}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2}\right)}{p! \left(\frac{n-|m|}{2} - 1 - p\right)! \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\gamma-1}{2}\right)} r^{|m|+2p} \\ &= n \sum_{p=0}^{(n-|m|)/2} \frac{(-1)^{p+(n-|m|)/2} \Gamma\left(\frac{n+|m|+\gamma-1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2}\right)}{p! \left(\frac{n-|m|}{2} - p\right)! \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\gamma-1}{2}\right)} r^{|m|+2p} \\ &\quad - \sum_{p=0}^{(n-|m|)/2} \frac{(-1)^{p+(n-|m|)/2} (n - |m| - 2p) \Gamma\left(\frac{n+|m|+\gamma-1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2}\right)}{p! \left(\frac{n-|m|}{2} - p\right)! \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\gamma-1}{2}\right)} r^{|m|+2p} \\ &\quad - \sum_{p=0}^{(n-|m|)/2-1} \frac{(-1)^{p+(n-|m|)/2-1} (|m| + 2p) \Gamma\left(\frac{n+|m|+\gamma-3}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2}\right)}{p! \left(\frac{n-|m|}{2} - 1 - p\right)! \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\gamma-1}{2}\right)} r^{|m|+2p} \\ &= n Q_n^m \\ &\quad - \sum_{p=0}^{(n-|m|)/2-1} \frac{(-1)^{p+(n-|m|)/2} (n - |m| - 2p) \Gamma\left(\frac{n+|m|+\gamma-1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2}\right)}{p! \left(\frac{n-|m|}{2} - p\right)! \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\gamma-1}{2}\right)} r^{|m|+2p} \\ &\quad - \sum_{p=0}^{(n-|m|)/2-1} \frac{(-1)^{p+(n-|m|)/2-1} (|m| + 2p) \Gamma\left(\frac{n+|m|+\gamma-3}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2}\right)}{p! \left(\frac{n-|m|}{2} - 1 - p\right)! \Gamma\left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m|+\gamma-1}{2}\right)} r^{|m|+2p} \\ &= n Q_n^m \end{aligned}$$

$$+ \frac{(n - |m| + \gamma - \beta - 2)(n + |m| + \gamma - 3)}{2n + \gamma - 3} Q_{n-2}^m. \quad (12)$$

$$\begin{aligned} & - \sum_{p=0}^{(n-|m|)/2-1} \frac{(-1)^{p+(n-|m|)/2} 2 \left(\frac{n+|m|+\gamma-3}{2} + p \right) \Gamma \left(\frac{n+|m|+\gamma-1}{2} + p \right) \Gamma \left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} \right)}{p! \left(\frac{n-|m|}{2} - 1 - p \right)! \Gamma \left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} + p \right) \Gamma \left(\frac{2|m|+\gamma-1}{2} \right)} r^{|m|+2p} \\ & - \sum_{p=0}^{(n-|m|)/2-1} \frac{(-1)^{p+(n-|m|)/2-1} (|m|+2p) \Gamma \left(\frac{n+|m|+\gamma-3}{2} + p \right) \Gamma \left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} \right)}{p! \left(\frac{n-|m|}{2} - 1 - p \right)! \Gamma \left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} + p \right) \Gamma \left(\frac{2|m|+\gamma-1}{2} \right)} r^{|m|+2p} \\ & = nQ_n^m \\ & + \sum_{p=0}^{(n-|m|)/2-1} \frac{(-1)^{p+(n-|m|)/2-1} (n+\gamma-3+|m|+2p) \Gamma \left(\frac{n+|m|+\gamma-1}{2} + p \right) \Gamma \left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} \right)}{p! \left(\frac{n-|m|}{2} - 1 - p \right)! \Gamma \left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} + p \right) \Gamma \left(\frac{2|m|+\gamma-1}{2} \right)} r^{|m|+2p} \\ & - \sum_{p=0}^{(n-|m|)/2-1} \frac{(-1)^{p+(n-|m|)/2-1} (|m|+2p) \Gamma \left(\frac{n+|m|+\gamma-3}{2} + p \right) \Gamma \left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} \right)}{p! \left(\frac{n-|m|}{2} - 1 - p \right)! \Gamma \left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} + p \right) \Gamma \left(\frac{2|m|+\gamma-1}{2} \right)} r^{|m|+2p} \\ & = nQ_n^m + \sum_{p=0}^{(n-|m|)/2-1} \frac{(-1)^{p+(n-|m|)/2-1} (n+\gamma-3) \Gamma \left(\frac{n+|m|+\gamma-1}{2} + p \right) \Gamma \left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} \right)}{p! \left(\frac{n-|m|}{2} - 1 - p \right)! \Gamma \left(\frac{2|m|+\beta+1}{2} + p \right) \Gamma \left(\frac{2|m|+\gamma-1}{2} \right)} r^{|m|+2p} \\ & = nQ_n^m + (n+\gamma-3)Q_{n-2}^m \end{aligned}$$

⁹ Q_n^m, Q_{n-2}^m に対する微分方程式は (2) より

$$\begin{aligned} & \frac{(1-r^2)^{1-\alpha}}{r^\beta} \frac{d}{dr} \left((1-r^2)^\alpha r^\beta \frac{dQ_n^m}{dr} \right) - \frac{|m|(|m|+\beta-1)}{r^2} Q_n^m + n(n+2\alpha+\beta-1)Q_n^m = 0, \\ & \frac{(1-r^2)^{1-\alpha}}{r^\beta} \frac{d}{dr} \left((1-r^2)^\alpha r^\beta \frac{dQ_{n-2}^m}{dr} \right) - \frac{|m|(|m|+\beta-1)}{r^2} Q_{n-2}^m + (n-2)(n+2\alpha+\beta-3)Q_{n-2}^m = 0, \end{aligned}$$

2つの式を引き算すると

$$\begin{aligned} & \frac{(1-r^2)^{1-\alpha}}{r^\beta} \frac{d}{dr} \left[(1-r^2)^\alpha r^\beta \frac{d}{dr} (Q_n^m - Q_{n-2}^m) \right] - \frac{|m|(|m|+\beta-1)}{r^2} (Q_n^m - Q_{n-2}^m) \\ & + n(n+2\alpha+\beta-1)Q_n^m - (n-2)(n+2\alpha+\beta-3)Q_{n-2}^m = 0. \end{aligned}$$

第1項に (11) を適用すると

$$\begin{aligned} & \frac{(1-r^2)^{1-\alpha}}{r^\beta} \frac{d}{dr} \left[(1-r^2)^\alpha r^{\beta-1} (nQ_n^m + (n+\gamma-3)Q_{n-2}^m) \right] - \frac{|m|(|m|+\beta-1)}{r^2} (Q_n^m - Q_{n-2}^m) \\ & + n(n+2\alpha+\beta-1)Q_n^m - (n-2)(n+2\alpha+\beta-3)Q_{n-2}^m = 0, \\ & \frac{(1-r^2)}{r} n \frac{dQ_n^m}{dr} + \frac{(1-r^2)}{r} (n+\gamma-3) \frac{dQ_{n-2}^m}{dr} \\ & + \frac{(1-r^2)^{1-\alpha}}{r^\beta} \left[(1-r^2)^{\alpha-1} (-2\alpha r) r^{\beta-1} + (1-r^2)^\alpha (\beta-1) r^{\beta-2} \right] [nQ_n^m + (n+\gamma-3)Q_{n-2}^m] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{|m|(|m|+\beta-1)}{r^2}(Q_n^m - Q_{n-2}^m) + n(n+2\alpha+\beta-1)Q_n^m - (n-2)(n+2\alpha+\beta-3)Q_{n-2}^m = 0, \\
& \frac{(1-r^2)}{r}n\frac{dQ_n^m}{dr} + \frac{(1-r^2)}{r}(n+\gamma-3)\frac{dQ_{n-2}^m}{dr} \\
& + \left(-2\alpha+(\beta-1)\frac{(1-r^2)}{r^2}\right)[nQ_n^m + (n+\gamma-3)Q_{n-2}^m] \\
& -\frac{|m|(|m|+\beta-1)}{r^2}(Q_n^m - Q_{n-2}^m) + n(n+2\alpha+\beta-1)Q_n^m - (n-2)(n+2\alpha+\beta-3)Q_{n-2}^m = 0,
\end{aligned}$$

(11) を再度用いて $\frac{dQ_{n-2}^m}{dr}$ を消去すると

$$\begin{aligned}
& \frac{(1-r^2)}{r}n\frac{dQ_n^m}{dr} + \frac{(1-r^2)}{r^2}(n+\gamma-3)\left\{r\frac{dQ_n^m}{dr} - [nQ_n^m + (n+\gamma-3)Q_{n-2}^m]\right\} \\
& + \left(-2\alpha+(\beta-1)\frac{(1-r^2)}{r^2}\right)[nQ_n^m + (n+\gamma-3)Q_{n-2}^m] \\
& -\frac{|m|(|m|+\beta-1)}{r^2}(Q_n^m - Q_{n-2}^m) + n(n+2\alpha+\beta-1)Q_n^m - (n-2)(n+2\alpha+\beta-3)Q_{n-2}^m = 0,
\end{aligned}$$

$\frac{dQ_n^m}{dr}$ の項の係数は

$$\frac{(1-r^2)}{r}n + \frac{(1-r^2)}{r^2}(n+\gamma-3)r = \frac{(1-r^2)}{r}(2n+\gamma-3).$$

Q_n^m の項の係数は

$$\begin{aligned}
& -\frac{(1-r^2)}{r^2}(n+\gamma-3)n + \left(-2\alpha+(\beta-1)\frac{(1-r^2)}{r^2}\right)n - \frac{|m|(|m|+\beta-1)}{r^2} + n(n+2\alpha+\beta-1) \\
= & n\left[-\frac{(1-r^2)}{r^2}(n+\gamma-3) + \left(-2\alpha+(\beta-1)\frac{(1-r^2)}{r^2}\right) + (n+2\alpha+\beta-1)\right] - \frac{|m|(|m|+\beta-1)}{r^2} \\
= & n\left[-\frac{(1-r^2)}{r^2}(n+\gamma-\beta-2) + (n+\beta-1)\right] - \frac{|m|(|m|+\beta-1)}{r^2} \\
= & n\left[-\frac{(n+\gamma-\beta-2)}{r^2} + (n+\gamma-\beta-2+n+\beta-1)\right] - \frac{|m|(|m|+\beta-1)}{r^2} \\
= & n\left[-\frac{(n+\gamma-\beta-2)}{r^2} + (2n+\gamma-3)\right] - \frac{|m|(|m|+\beta-1)}{r^2} \\
= & n(2n+\gamma-3) - \frac{|m|(|m|+\beta-1) + n(n+\gamma-\beta-2)}{r^2}.
\end{aligned}$$

Q_{n-2}^m の項の係数は

$$\begin{aligned}
& -\frac{(1-r^2)}{r^2}(n+\gamma-3)(n+\gamma-3)\left(-2\alpha+(\beta-1)\frac{(1-r^2)}{r^2}\right)(n+\gamma-3) \\
& + \frac{|m|(|m|+\beta-1)}{r^2} - (n-2)(n+2\alpha+\beta-3) \\
= & (n+\gamma-3)^2[-2\alpha-(\beta-1)](n+\gamma-3) - (n-2)(n+\gamma-3)
\end{aligned}$$

(11) を再度用いて微分項を消去すると¹⁰,

$$\begin{aligned}
& -(n - |m| + 2)(n + |m| + \beta + 1)(2n + \gamma - 3)Q_{n+2}^m(r) \\
& + (2n + \gamma - 1)\{(2n + \gamma - 3)(2n + \gamma + 1)r^2 - 2n(n + \gamma - 1) \\
& \quad + \frac{-(n + \gamma - 3)^2 + (\beta - 1)(n + \gamma - 3) + |m|(|m| + \beta - 1)}{r^2}\} \\
& = (n + \gamma - 3)[(n + \gamma - 3) - 2\alpha - \beta + 1 - (n - 2)] \\
& \quad + \frac{-(n + \gamma - 3)^2 + (\beta - 1)(n + \gamma - 3) + |m|^2 + |m|(\beta - 1)}{r^2} \\
& = \frac{-(n + \gamma - |m| - 3)(n + \gamma + |m| - 3) + (\beta - 1)(n + \gamma + |m| - 3)}{r^2} \\
& = -\frac{(n + \gamma + |m| - 3)(n + \gamma - |m| - \beta - 2)}{r^2}.
\end{aligned}$$

まとめると

$$\begin{aligned}
& \frac{(1 - r^2)}{r}(2n + \gamma - 3)\frac{dQ_n^m}{dr} + \left[n(2n + \gamma - 3) - \frac{|m|(|m| + \beta - 1) + n(n + \gamma - \beta - 2)}{r^2} \right] Q_n^m \\
& - \frac{(n + \gamma - |m| - 3)(n + \gamma + |m| - \beta - 2)}{r^2} Q_{n-2}^m = 0, \\
& (1 - r^2)r\frac{dQ_n^m}{dr} = \left[-nr^2 + \frac{|m|(|m| + \beta - 1) + n(n + \gamma - \beta - 2)}{2n + \gamma - 3} \right] Q_n^m \\
& + \frac{(n + \gamma + |m| - 3)(n + \gamma - |m| - \beta - 2)}{2n + \gamma - 3} Q_{n-2}^m,
\end{aligned}$$

¹⁰(12) を $n \rightarrow n + 2$ とした式

$$\begin{aligned}
(1 - r^2)r\frac{d}{dr}Q_{n+2}^m(r) & = \left(-(n + 2)r^2 + \frac{|m|(|m| + \beta - 1) + (n + 2)(n + \gamma - \beta)}{2n + \gamma + 1} \right) Q_{n+2}^m \\
& + \frac{(n - |m| + \gamma - \beta)(n + |m| + \gamma - 1)}{2n + \gamma + 1} Q_n^m.
\end{aligned}$$

と (12) を引き算して

$$\begin{aligned}
(1 - r^2)r\frac{d}{dr}(Q_{n+2}^m - Q_n^m) & = \left(-(n + 2)r^2 + \frac{|m|(|m| + \beta - 1) + (n + 2)(n + \gamma - \beta)}{2n + \gamma + 1} \right) Q_{n+2}^m(r) \\
& + \frac{(n - |m| + \gamma - \beta)(n + |m| + \gamma - 1)}{2n + \gamma + 1} Q_n^m \\
& - \left(-nr^2 + \frac{|m|(|m| + \beta - 1) + n(n + \gamma - \beta - 2)}{2n + \gamma - 3} \right) Q_n^m(r) \\
& - \frac{(n - |m| + \gamma - \beta - 2)(n + |m| + \gamma - 3)}{2n + \gamma - 3} Q_{n-2}^m.
\end{aligned}$$

左辺に (11) を適用すると

$$\begin{aligned}
& (1 - r^2)[(n + 2)Q_{n+2}^m + (n + \gamma - 1)Q_n^m] \\
& = \left(-(n + 2)r^2 + \frac{|m|(|m| + \beta - 1) + (n + 2)(n + \gamma - \beta)}{2n + \gamma + 1} \right) Q_{n+2}^m + \frac{(n - |m| + \gamma - \beta)(n + |m| + \gamma - 1)}{2n + \gamma + 1} Q_n^m \\
& - \left(-nr^2 + \frac{|m|(|m| + \beta - 1) + n(n + \gamma - \beta - 2)}{2n + \gamma - 3} \right) Q_n^m - \frac{(n - |m| + \gamma - \beta - 2)(n + |m| + \gamma - 3)}{2n + \gamma - 3} Q_{n-2}^m,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -2|m|(|m| + \beta - 1) - (\gamma - 3)(\beta + 1)\}Q_n^m(r) \\
& -(n - |m| + \gamma - \beta - 2)(n + |m| + \gamma - 3)(2n + \gamma + 1)Q_{n-2}^m(r) = 0 \quad (13)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left(-(1 - r^2)(n + 2) - (n + 2)r^2 + \frac{|m|(|m| + \beta - 1) + (n + 2)(n + \gamma - \beta)}{2n + \gamma + 1} \right) Q_{n+2}^m \\
& + \left[-(n + \gamma - 1)(1 - r^2) + \frac{(n - |m| + \gamma - \beta)(n + |m| + \gamma - 1)}{2n + \gamma + 1} + nr^2 \right. \\
& \left. - \frac{|m|(|m| + \beta - 1) + n(n + \gamma - \beta - 2)}{2n + \gamma - 3} \right] Q_n^m - \frac{(n - |m| + \gamma - \beta - 2)(n + |m| + \gamma - 3)}{2n + \gamma - 3} Q_{n-2}^m.
\end{aligned}$$

Q_{n+2}^m の係数は

$$\begin{aligned}
& -(1 - r^2)(n + 2) - (n + 2)r^2 + \frac{|m|(|m| + \beta - 1) + (n + 2)(n + \gamma - \beta)}{2n + \gamma + 1} \\
= & -(n + 2) + \frac{|m|(|m| + \beta - 1) + (n + 2)(n + \gamma - \beta)}{2n + \gamma + 1} \\
= & \frac{-(n + 2)(2n + \gamma + 1) + |m|(|m| + \beta - 1) + (n + 2)(n + \gamma - \beta)}{2n + \gamma + 1} \\
= & \frac{-(n + 2)(n + \beta + 1) + |m|(|m| + \beta - 1)}{2n + \gamma + 1} = \frac{-(n + 2)^2 - (n + 2)(\beta - 1) + |m|^2 + |m|(\beta - 1)}{2n + \gamma + 1} \\
= & \frac{-(n + |m| + 2)(n - |m| + 2) - (n - |m| + 2)(\beta - 1)}{2n + \gamma + 1} = \frac{-(n + |m| + \beta + 1)(n - |m| + 2)}{2n + \gamma + 1}
\end{aligned}$$

Q_n^m の係数は

$$\begin{aligned}
& -(n + \gamma - 1)(1 - r^2) + \frac{(n - |m| + \gamma - \beta)(n + |m| + \gamma - 1)}{2n + \gamma + 1} + nr^2 - \frac{|m|(|m| + \beta - 1) + n(n + \gamma - \beta - 2)}{2n + \gamma - 3} \\
= & (2n + \gamma - 1)r^2 - (n + \gamma - 1) + \frac{(n - |m| + \gamma - \beta)(n + |m| + \gamma - 1)}{2n + \gamma + 1} - \frac{|m|(|m| + \beta - 1) + n(n + \gamma - \beta - 2)}{2n + \gamma - 3}
\end{aligned}$$

r^2 の項以外の項を通分した分子は

$$\begin{aligned}
& -(n + \gamma - 1)(2n + \gamma + 1)(2n + \gamma - 3) + (n - |m| + \gamma - \beta)(n + |m| + \gamma - 1)(2n + \gamma - 3) \\
& - |m|(|m| + \beta - 1)(2n + \gamma + 1) - n(n + \gamma - \beta - 2)(2n + \gamma + 1) \\
= & -(n + \gamma - 1)(2n + \gamma + 1)(2n + \gamma - 3) + \{(n + \gamma - \beta)(n + \gamma - 1) - (\beta - 1)|m| - |m|^2\}(2n + \gamma - 3) \\
& - |m|(|m| + \beta - 1)(2n + \gamma + 1) - n(n + \gamma - \beta - 2)(2n + \gamma + 1) \\
= & -(n + \gamma - 1)(2n + \gamma + 1)(2n + \gamma - 3) + \{(n + \gamma - \beta)(n + \gamma - 1) - |m|(|m| + \beta - 1)\}(2n + \gamma - 3) \\
& - |m|(|m| + \beta - 1)(2n + \gamma + 1) - n(n + \gamma - \beta - 2)(2n + \gamma + 1) \\
= & -(n + \gamma - 1)(2n + \gamma + 1)(2n + \gamma - 3) + (n + \gamma - \beta)(n + \gamma - 1)(2n + \gamma - 3) \\
& - 2|m|(|m| + \beta - 1)(2n + \gamma - 1) - n(n + \gamma - \beta - 2)(2n + \gamma + 1) \\
= & -(n + \gamma - 1)(2n + \gamma + 1)(2n + \gamma - 3) + (n + \gamma)(n + \gamma - 1)(2n + \gamma - 3) - \beta(n + \gamma - 1)(2n + \gamma - 3) \\
& - 2|m|(|m| + \beta - 1)(2n + \gamma - 1) - n(n + \gamma - 2)(2n + \gamma + 1) + \beta n(2n + \gamma + 1) \\
= & -(n + \gamma - 1)(2n + \gamma + 1)(2n + \gamma - 3) + (n + \gamma)(n + \gamma - 1)(2n + \gamma - 3) \\
& - 2|m|(|m| + \beta - 1)(2n + \gamma - 1) - n(n + \gamma - 2)(2n + \gamma + 1) + \beta[n(2n + \gamma + 1) - (n + \gamma - 1)(2n + \gamma - 3)] \\
= & -(n + \gamma - 1)(2n + \gamma + 1)(2n + \gamma - 3) + (n + \gamma)(n + \gamma - 1)(2n + \gamma - 3) \\
& - 2|m|(|m| + \beta - 1)(2n + \gamma - 1) - n(n + \gamma - 2)(2n + \gamma + 1) - \beta(\gamma - 3)(2n + \gamma - 1) \\
= & -(n + \gamma - 1)(2n + \gamma - 3)(n + 1) - n(n + \gamma - 2)(2n + \gamma + 1)
\end{aligned}$$

式 (3) において $n = |m|, |m| + 2$ と置くと¹¹

$$Q_{|m|}^{|m|} = r^{|m|}, \quad (14)$$

$$Q_{|m|+2}^{|m|} = \frac{2|m| + \gamma - 1}{2} \left(\frac{2|m| + \gamma + 1}{2|m| + \beta + 1} r^2 - 1 \right) r^{|m|} \quad (15)$$

これらの値からスタートして高次の $Q_n^m(r)$ の値を漸化式 (13) によって求めること

$$\begin{aligned} & -2|m|(|m| + \beta - 1)(2n + \gamma - 1) - \beta(\gamma - 3)(2n + \gamma - 1) \\ = & -(2n + 1)\gamma^2 - (6n^2 - 2n - 4)\gamma - (4n^3 - 6n^2 - 4n - 3) \\ & -2|m|(|m| + \beta - 1)(2n + \gamma - 1) - \beta(\gamma - 3)(2n + \gamma - 1) \\ = & -(2n + \gamma - 1)[(2n + 1)\gamma + (2n^3 - 2n - 3)] \\ & -2|m|(|m| + \beta - 1)(2n + \gamma - 1) - \beta(\gamma - 3)(2n + \gamma - 1) \\ = & -(2n + \gamma - 1)[2n(n + \gamma + 1) + (\gamma - 3)] - 2|m|(|m| + \beta - 1)(2n + \gamma - 1) - \beta(\gamma - 3)(2n + \gamma - 1) \\ = & -(2n + \gamma - 1)2n(n + \gamma + 1) - 2|m|(|m| + \beta - 1)(2n + \gamma - 1) - (\beta + 1)(\gamma - 3)(2n + \gamma - 1) \end{aligned}$$

よって、全ての項をまとめると

$$\begin{aligned} & \frac{-(n + |m| + \beta + 1)(n - |m| + 2)}{2n + \gamma + 1} Q_{n+2}^m \\ + & (2n + \gamma - 1) \left[r^2 - \frac{2n(n + \gamma + 1) + 2|m|(|m| + \beta - 1) + (\beta + 1)(\gamma - 3)}{(2n + \gamma + 1)(2n + \gamma - 3)} \right] Q_n^m \\ - & \frac{(n - |m| + \gamma - \beta - 2)(n + |m| + \gamma - 3)}{2n + \gamma - 3} Q_{n-2}^m, \end{aligned}$$

分母をはらって

$$\begin{aligned} & -(n + |m| + \beta + 1)(n - |m| + 2)(2n + \gamma - 3)Q_{n+2}^m \\ + & (2n + \gamma - 1) \left[(2n + \gamma + 1)(2n + \gamma - 3)r^2 - 2n(n + \gamma + 1) - 2|m|(|m| + \beta - 1) - (\beta + 1)(\gamma - 3) \right] Q_n^m \\ - & (n - |m| + \gamma - \beta - 2)(n + |m| + \gamma - 3)(2n + \gamma + 1)Q_{n-2}^m. \end{aligned}$$

11

$$\begin{aligned} Q_{|m|}^{|m|} &= \sum_{p=0}^0 \frac{(-1)^p \Gamma\left(\frac{2|m| + \gamma - 1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m| + \beta + 1}{2}\right)}{p! (-p)! \Gamma\left(\frac{2|m| + \beta + 1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m| + \gamma - 1}{2}\right)} r^{|m|+2p} \\ &= \frac{\Gamma\left(\frac{2|m| + \gamma - 1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{2|m| + \beta + 1}{2}\right)}{0! (0)! \Gamma\left(\frac{2|m| + \beta + 1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{2|m| + \gamma - 1}{2}\right)} r^{|m|} = r^{|m|}, \\ Q_{|m|+2}^{|m|} &= \sum_{p=0}^1 \frac{(-1)^{p+1} \Gamma\left(\frac{2|m| + \gamma + 1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m| + \beta + 1}{2}\right)}{p! (1-p)! \Gamma\left(\frac{2|m| + \beta + 1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m| + \gamma - 1}{2}\right)} r^{|m|+2p} \\ &= \frac{(-1) \Gamma\left(\frac{2|m| + \gamma + 1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{2|m| + \beta + 1}{2}\right)}{0! (1)! \Gamma\left(\frac{2|m| + \beta + 1}{2} + p\right) \Gamma\left(\frac{2|m| + \gamma - 1}{2}\right)} r^{|m|} \end{aligned}$$

ができる. 正規化係数 I_n^m の漸化式は (13) に直交関係 (5) を適用することにより得られる¹².

$$I_n^m = \frac{(2n + \gamma - 5)(n - |m| + \gamma - \beta - 2)(n + |m| + \gamma - 3)}{(n - |m|)(n + |m| + \beta - 1)(2n + \gamma - 1)} I_{n-2}^m, \quad (16)$$

$$\begin{aligned} & + \frac{(-1)^2 \Gamma\left(\frac{2|m| + \gamma + 1}{2} + 1\right) \Gamma\left(\frac{2|m| + \beta + 1}{2}\right)}{1!(0)!\Gamma\left(\frac{2|m| + \beta + 1}{2} + 1\right) \Gamma\left(\frac{2|m| + \gamma - 1}{2}\right)} r^{|m|+2} \\ & = -\frac{2|m| + \gamma - 1}{2} r^{|m|} + \frac{\frac{2|m| + \gamma + 1}{2} \frac{2|m| + \gamma - 1}{2}}{\frac{2|m| + \beta + 1}{2}} r^{|m|+2} \\ & = \frac{2|m| + \gamma - 1}{2} \left(\frac{2|m| + \gamma + 1}{2} r^2 - 1 \right) r^{|m|} \end{aligned}$$

¹²(13) に $Q_{n+2}w(r)$ をかけて積分すると,

$$\begin{aligned} & -(n - |m| + 2)(n + |m| + \beta + 1)(2n + \gamma - 3)I_{n+2} \\ & + (2n + \gamma - 1)(2n + \gamma - 3)(2n + \gamma + 1) \int_0^1 r^2 Q_{n+2}^m Q_n^m w(r) dr = 0, \\ & -(n - |m| + 2)(n + |m| + \beta + 1)I_{n+2} + (2n + \gamma - 1)(2n + \gamma + 1) \int_0^1 r^2 Q_{n+2}^m Q_n^m w(r) dr = 0, \end{aligned}$$

$n \rightarrow n - 2$ と次数を下げると

$$-(n - |m|)(n + |m| + \beta - 1)I_n + (2n + \gamma - 5)(2n + \gamma - 3) \int_0^1 r^2 Q_n^m Q_{n-2}^m w(r) dr$$

再度 (13) に $Q_{n-2}w(r)$ をかけて積分すると,

$$\begin{aligned} & (2n + \gamma - 1)(2n + \gamma - 3)(2n + \gamma + 1) \int_0^1 r^2 Q_n^m Q_{n-2}^m w(r) dr \\ & -(n - |m| + \gamma - \beta - 2)(n + |m| + \gamma - 3)(2n + \gamma + 1)I_{n-2} = 0 \\ & (2n + \gamma - 1)(2n + \gamma - 3) \int_0^1 r^2 Q_n^m Q_{n-2}^m w(r) dr - (n - |m| + \gamma - \beta - 2)(n + |m| + \gamma - 3)I_{n-2} = 0 \end{aligned}$$

先の式とあわせて積分の項を消去できて

$$\begin{aligned} & -(n - |m|)(n + |m| + \beta - 1)(2n + \gamma - 1)I_n + (2n + \gamma - 5)(n - |m| + \gamma - \beta - 2)(n + |m| + \gamma - 3)I_{n-2} = 0, \\ & I_n = \frac{(2n + \gamma - 5)(n - |m| + \gamma - \beta - 2)(n + |m| + \gamma - 3)}{(n - |m|)(n + |m| + \beta - 1)(2n + \gamma - 1)} I_{n-2} \end{aligned}$$

スタートの値 $I_{|m|}^m$ は (14) を (5) に代入して¹³

$$I_{|m|}^m = \frac{\Gamma\left(\frac{\gamma - \beta}{2}\right) \Gamma\left(|m| + \frac{\beta + 1}{2}\right)}{2\Gamma\left(|m| + \frac{\gamma + 1}{2}\right)}. \quad (17)$$

次に (7) でのスペクトル係数 f_n^m を評価する. 偶数 M に対して $f(r, \phi)$ の部分和近似 $f_M(r, \phi)$,

$$f_m(r) = \sum_{n=|m|, n+m \text{ even}}^{\hat{M}} f_n^m \Phi_n^m(r), \quad f_M(r, \phi) = \sum_{m=-M+1}^{M-1} f_m(r) e^{im\phi} \sim f(r, \phi), \quad (18)$$

を考える. ここで \hat{M} は m が奇数のとき $\hat{M} = M - 1$, 偶数のとき $\hat{M} = M - 2$ である. $M = 2^p$ を選べば $f_m(r)$ を求めるのに FFT が使える. (18) の逆変換は

$$f_n^m = \int_0^1 f_m(r) \Phi_n^m(r) w(r) dr. \quad (19)$$

ここでわれわれは f_n^m を効率的に計算するための (19) に対するガウス積分を導出する. まず関数の積 $f_m(r) \Phi_n^m(r)$ がせいぜい $2M - 2$ 次の偶関数であることに注意しよう. (19) のラグランジュ積分公式は (補遺 A 参照),

$$\int_0^1 f_m(r) \Phi_n^m(r) w(r) dr = \sum_{i=1}^{M/2} f_m(r_i) \Phi_n^m(r_i) w_i + E, \quad (20)$$

ここで r_i は積分座標の格子点, E は公式の誤差である. ここでは $0 \leq r_1 < r_2 < \dots < r_{M/2} \leq 1$ を仮定する. 重み w_i は

$$w_i \equiv \frac{1}{\frac{\pi'(r)}{2r} \Big|_{r_i}} \int_0^1 \frac{\pi(r)}{r^2 - r_i^2} w(r) dr, \quad (21)$$

¹³

$$\begin{aligned} I_{|m|}^m &= \int_0^1 r^{2|m|+\beta} (1-r^2)^{\alpha-1} dr = \frac{1}{2} \int_0^1 t^{|m|+(\beta-1)/2} (1-t)^{\alpha-1} dt \\ &= \frac{1}{2} B\left(\alpha, |m| + \frac{\beta+1}{2}\right) = \frac{\Gamma(\alpha) \Gamma\left(|m| + \frac{\beta+1}{2}\right)}{2\Gamma\left(\alpha + |m| + \frac{\beta+1}{2}\right)} = \frac{\Gamma\left(\frac{\gamma-\beta}{2}\right) \Gamma\left(|m| + \frac{\beta+1}{2}\right)}{2\Gamma\left(|m| + \frac{\gamma+1}{2}\right)} \end{aligned}$$

ただしガンマ関数, ベータ関数の公式

$$B(p, q) = \int_0^1 (1-t)^{p-1} t^{q-1} dt, \quad B(p, q) = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)},$$

を用いた

ただし,

$$\pi(r) = \prod_{j=1}^{M/2} (r^2 - r_j^2). \quad (22)$$

公式 (20) は関数の積 $f_m(r)\Phi_n^m(r)$ が $M-2$ 次と同じかそれ以下であるときに正確になる. さて, $f_m(r)\Phi_n^m(r)$ を $\pi(r)$ で割り, $f_m(r)\Phi_n^m(r) = s(r) + \pi(r)q(r)$ と書き直すことができる. ただし $s(r)$ と $q(r)$ はせいぜい $M-2$ 次の偶関数である. これを (20) に代入し, $1 \leq i \leq M/2$ に対して $s(r_i) = f_m(r_i)\Phi_n^m(r_i)$ であることを用いると¹⁴

$$E = \int_0^1 \pi(r)q(r)w(r)dr. \quad (23)$$

したがって, もしわれわれが $\pi(r) = Q_M^0(r)$ と選べば, 直交関係から E は 0 となり¹⁵, $f_M(r, \phi)$ が $f(r, \phi)$ と等しいときには係数 f_n^m を (19) と (20) から正確に計算できる. よってガウス積分の格子点は Q_M^0 の正の零点に対応する. Q_M^0 の零点は数値的に計算しなければならない.

ガウス積分の重み係数 w_i は以下のようにして見積もられる. まず (13) を書き直し

¹⁴実際に代入すると

$$\int_0^1 f_m(r)\Phi_n^m(r)w(r)dr = \int_0^1 s(r)w(r)dr + \int_0^1 \pi(r)q(r)w(r)dr = \sum_{i=1}^{M/2} s(r_i)w_i + E,$$

第 1 項どうしが等しいので E の表式が得られる.

¹⁵ Q_M^0 は M 次の多項式であり M 次より小さい多項式とは直交する. $q(r)$ はせいぜい $M-2$ 次なので誤差の積分は 0 となる.

て¹⁶,

$$\frac{r^2 Q_n^0(r)}{I_n^0} = \frac{C_n}{I_n^0} Q_{n+2}^0(r) + D_n Q_n^0(r) + \frac{C_{n-2}}{I_{n-2}^0} Q_{n-2}^0(r), \quad (24)$$

ただし

$$C_n \equiv \frac{(n+2)(n+\beta+1)}{(2n+\gamma-1)(2n+\gamma+1)}. \quad (25)$$

D_n の詳細は必要ないので定義を述べない. (24) に $Q_n^0(\rho)$ をかけて r と ρ を入れ換えた式を引き算し, $n=0$ から M までの偶数を足しあわせるとクリストッフエ

¹⁶(13) で $m=0$ とした式は

$$\begin{aligned} & -(n+2)(n+\beta+1)(2n+\gamma-3)Q_{n+2}^0(r) \\ & + (2n+\gamma-1)\{(2n+\gamma-3)(2n+\gamma+1)r^2 - 2n(n+\gamma-1) - (\gamma-3)(\beta+1)\}Q_n^m(r) \\ & - (n+\gamma-\beta-2)(n+\gamma-3)(2n+\gamma+1)Q_{n-2}^m(r) = 0, \\ & (2n+\gamma-1)(2n+\gamma-3)(2n+\gamma+1)r^2 Q_n^m(r) = (n+2)(n+\beta+1)(2n+\gamma-3)Q_{n+2}^0(r) \\ & + (2n+\gamma-1)[2n(n+\gamma-1) + (\gamma-3)(\beta+1)]Q_n^m(r) \\ & + (n+\gamma-\beta-2)(n+\gamma-3)(2n+\gamma+1)Q_{n-2}^m(r) = 0, \\ & r^2 Q_n^m(r) = \frac{(n+2)(n+\beta+1)}{(2n+\gamma-1)(2n+\gamma+1)} Q_{n+2}^0(r) \\ & + \frac{2n(n+\gamma-1) + (\gamma-3)(\beta+1)}{(2n+\gamma-3)(2n+\gamma+1)} Q_n^m(r) + \frac{(n+\gamma-\beta-2)(n+\gamma-3)}{(2n+\gamma-1)(2n+\gamma-3)} Q_{n-2}^m(r) = 0, \end{aligned}$$

ここで $C_n \equiv \frac{(n+2)(n+\beta+1)}{(2n+\gamma-1)(2n+\gamma+1)}$ を用いると, $C_{n-2} \equiv \frac{n(n+\beta-1)}{(2n+\gamma-5)(2n+\gamma-3)}$ であるから,

$$\begin{aligned} r^2 Q_n^m(r) &= C_n Q_{n+2}^0(r) \\ &+ \frac{2n(n+\gamma-1) + (\gamma-3)(\beta+1)}{(2n+\gamma-3)(2n+\gamma+1)} Q_n^m(r) + C_{n-2} \frac{(2n+\gamma-5)(n+\gamma-\beta-2)(n+\gamma-3)}{n(n+\beta-1)(2n+\gamma-1)} Q_{n-2}^m(r) = 0, \end{aligned}$$

I_n^0 で割ると

$$\frac{r^2 Q_n^m(r)}{I_n^0} = \frac{C_n}{I_n^0} Q_{n+2}^0(r) + D_n Q_n^m(r) + \frac{C_{n-2}}{I_n^0} \frac{(2n+\gamma-5)(n+\gamma-\beta-2)(n+\gamma-3)}{n(n+\beta-1)(2n+\gamma-1)} Q_{n-2}^m(r) = 0.$$

ただし $D_n = \frac{2n(n+\gamma-1) + (\gamma-3)(\beta+1)}{I_n^0(2n+\gamma-3)(2n+\gamma+1)}$ である. (16) で $m=0$ とした式から

$$I_n^0 = \frac{(2n+\gamma-5)(n+\gamma-\beta-2)(n+\gamma-3)}{n(n+\beta-1)(2n+\gamma-1)} I_{n-2}^0,$$

したがって,

$$\frac{r^2 Q_n^m(r)}{I_n^0} = \frac{C_n}{I_n^0} Q_{n+2}^0(r) + D_n Q_n^m(r) + \frac{C_{n-2}}{I_{n-2}^0} Q_{n-2}^m(r) = 0.$$

ル-ダブル-公式が得られる¹⁷.

$$\sum_{p=0, \text{even}}^M \frac{Q_p^0(r)Q_p^0(\rho)}{I_p^0} = \frac{C_M}{I_M^0} \left(\frac{Q_{M+2}^0(r)Q_M^0(\rho) - Q_{M+2}^0(\rho)Q_M^0(r)}{r^2 - \rho^2} \right). \quad (26)$$

ρ を r_i に置き換えて $Q_M^0(r_i) = 0$ であることを用い, 両辺に $Q_0^0(r)w(r)$ をかけて

¹⁷(24) に $Q_n^0(\rho)$ をかけた式は

$$\frac{r^2 Q_n^0(r)Q_n^0(\rho)}{I_n^0} = \frac{C_n}{I_n^0} Q_{n+2}^0(r)Q_n^0(\rho) + D_n Q_n^0(r)Q_n^0(\rho) + \frac{C_{n-2}}{I_{n-2}^0} Q_{n-2}^0(r)Q_n^0(\rho),$$

r と ρ を入れ換えた式は

$$\frac{\rho^2 Q_n^0(r)Q_n^0(\rho)}{I_n^0} = \frac{C_n}{I_n^0} Q_{n+2}^0(\rho)Q_n^0(r) + D_n Q_n^0(r)Q_n^0(\rho) + \frac{C_{n-2}}{I_{n-2}^0} Q_{n-2}^0(\rho)Q_n^0(r),$$

辺々引き算して

$$\begin{aligned} \frac{(r^2 - \rho^2)Q_n^0(r)Q_n^0(\rho)}{I_n^0} &= \frac{C_n}{I_n^0} [Q_{n+2}^0(r)Q_n^0(\rho)Q_{n+2}^0(\rho)Q_n^0(r)] + \frac{C_{n-2}}{I_{n-2}^0} [Q_{n-2}^0(r)Q_n^0(\rho) - Q_{n-2}^0(\rho)Q_n^0(r)] \\ &= \frac{C_n}{I_n^0} [Q_{n+2}^0(r)Q_n^0(\rho) - Q_{n+2}^0(\rho)Q_n^0(r)] - \frac{C_{n-2}}{I_{n-2}^0} [Q_n^0(r)Q_{n-2}^0(\rho) - Q_n^0(\rho)Q_{n-2}^0(r)] \end{aligned}$$

$n = 0$ から M までの偶数に関して足しあわせると $Q_{-2}^0 = 0$ に注意して

$$(r^2 - \rho^2) \sum_{p=0, \text{even}}^M \frac{Q_p^0(r)Q_p^0(\rho)}{I_p^0} = \frac{C_M}{I_M^0} [Q_{M+2}^0(r)Q_M^0(\rho) - Q_{M+2}^0(\rho)Q_M^0(r)].$$

0 から 1 まで積分し、さらに (24) で $r = r_i$ した式を用いると¹⁸

$$\int_0^1 \frac{Q_M^0}{r^2 - r_i^2} w(r) dr = \frac{I_{M-2}^0}{C_{M-2}^0 Q_{M-2}^0(r_i)}. \quad (27)$$

この式と (21) を $\pi(r) = Q_M^0(r)$ とともに用い、(12) から w_i の式が得られる¹⁹.

$$w_i = \frac{2(2M + \gamma - 3)r_i^2(1 - r_i^2)}{(M + \gamma - \beta - 2)(M + \gamma - 3)C_{M-2}^0[\Phi_M^0(r_i)]^2}. \quad (28)$$

選点法では積分格子点は境界条件を適用するために、境界上に格子点がある方がよい。その場合ガウス-ラダウ (Gauss-Radau) 積分法を用いることができる。 $\pi(r)$ の

¹⁸ ρ を r_i に置き換えて $Q_M^0(r_i) = 0$ であることを用いると

$$\sum_{p=0, \text{even}}^M \frac{Q_p^0(r_i)Q_p^0(r)}{I_p^0} = -\frac{C_M}{I_M^0} \frac{Q_{M+2}^0(r_i)Q_M^0(r)}{r^2 - r_i^2}.$$

$Q_0^0(r)w(r)$ をかけて 0 から 1 まで積分すると、 $Q_p^0Q_0^0$ の積分は直交関係から $p = 0$ の項だけ残る。さらに $Q_0^0(r) = 1$ であるから

$$\frac{Q_0^0(r_i)}{I_0^0} \int_0^1 Q_0^0(r)^2 w(r) dr = -\frac{C_M Q_{M+2}^0(r_i)}{I_M^0}$$

$\int_0^1 Q_0^0(r)^2 w(r) dr = I_0^0$ なので左辺は 1 となる。したがって

$$\int_0^1 \frac{Q_M^0(r)}{r^2 - r_i^2} w(r) dr = -\frac{I_M^0}{C_M Q_{M+2}^0(r_i)}.$$

ここで (24) において $n = M, r = r_i$ を適用すると $Q_M^0(r_i) = 0$ なので

$$0 = \frac{C_M}{I_M^0} Q_{M+2}^0(r_i) + \frac{C_{M-2}}{I_{M-2}^0} Q_{M-2}^0(r_i),$$

となる。したがって

$$\int_0^1 \frac{Q_M^0(r)}{r^2 - r_i^2} w(r) dr = \frac{I_{M-2}^0}{C_{M-2}^0 Q_{M-2}^0(r_i)}.$$

¹⁹(12) において $r = r_i, n = M, m = 0$ とした式は、 $Q_M^0(r_i) = 0$ であるから

$$(1 - r_i^2)r_i \frac{d}{dr} Q_M^0(r_i) = \frac{(M + \gamma - \beta - 2)(M + \gamma - 3)}{2M + \gamma - 3} Q_{M-2}^0.$$

したがって

$$\left. \frac{\pi'(r)}{2r} \right|_{r_i} = \frac{(M + \gamma - \beta - 2)(M + \gamma - 3)}{2(2M + \gamma - 3)r_i^2(1 - r_i^2)} Q_{M-2}^0,$$

これと (27) を (21) に代入すると

$$w_i = \frac{2(2M + \gamma - 3)r_i^2(1 - r_i^2)}{(M + \gamma - \beta - 2)(M + \gamma - 3)Q_{M-2}^0} \frac{I_{M-2}^0}{C_{M-2}^0 Q_{M-2}^0(r_i)} = \frac{2(2M + \gamma - 3)r_i^2(1 - r_i^2)}{(M + \gamma - \beta - 2)(M + \gamma - 3)C_M[\Phi_{M-2}^0]^2}$$

適切な選び方は

$$\pi(r) = Q_M^0(r) - \frac{(M + \gamma - \beta - 2)(M + \gamma - 3)}{M(M + \beta - 1)} Q_{M-2}^0(r). \quad (29)$$

ただし $\pi(r)$ は $\pi(1) = 0$ となるようにとってある²⁰. $1 \leq i \leq M/2 - 1$ の重み係数は次のように与えられる.

$$w_i = \frac{2(2M + \gamma - 5)r_i^2}{(M + \gamma - \beta - 2)(M + \gamma - 3)[\Phi_{M-2}^0(r_i)]^2} \quad (30)$$

²⁰(12) において $n = M, m = 0, r = 1$ と選ぶと

$$\begin{aligned} 0 &= \left(-M + \frac{M(M + \gamma - \beta - 2)}{2M + \gamma - 3}\right) Q_M^m(1) + \frac{(M + \gamma - \beta - 2)(M + \gamma - 3)}{2M + \gamma - 3} Q_{n-2}^m, \\ 0 &= M[-(2M + \gamma - 3) + (M + \gamma - \beta - 2)] Q_M^m(1) + (M + \gamma - \beta - 2)(M + \gamma - 3) Q_{n-2}^m, \\ 0 &= M[-(M + \beta - 1)] Q_M^m(1) + (M + \gamma - \beta - 2)(M + \gamma - 3) Q_{n-2}^m, \\ Q_M^m(1) &= \frac{(M + \gamma - \beta - 2)(M + \gamma - 3)}{M(M + \beta - 1)} Q_{n-2}^m. \end{aligned}$$

よって (29) は $r = 1$ で 0 となる.

(28) を求めたのと同じように (26) と $\pi(r_i) = 0$ を用いて求めることができる²¹

²¹(26) を $M-2$ まで適用して

$$\sum_{p=0, \text{even}}^{M-2} \frac{Q_p^0(r)Q_p^0(\rho)}{I_p^0} = \frac{C_{M-2}}{I_{M-2}^0} \left(\frac{Q_M^0(r)Q_{M-2}^0(\rho) - Q_M^0(\rho)Q_{M-2}^0(r)}{r^2 - \rho^2} \right).$$

$\pi(r) = Q_M^0(r) - E_M Q_{M-2}^0(r)$ と書き表すことにすると $\pi(r_i) = 0$ より $Q_M^0(r_i) = E_M Q_{M-2}^0(r_i)$.
 $\rho = r_i$ ととることにより

$$\begin{aligned} \sum_{p=0, \text{even}}^{M-2} \frac{Q_p^0(r)Q_p^0(r_i)}{I_p^0} &= \frac{C_{M-2}}{I_{M-2}^0} \left(\frac{Q_M^0(r)Q_{M-2}^0(r_i) - Q_M^0(r_i)Q_{M-2}^0(r)}{r^2 - r_i^2} \right) \\ &= \frac{C_{M-2}}{I_{M-2}^0} \left(\frac{Q_M^0(r)Q_{M-2}^0(r_i) - E_M Q_{M-2}^0(r_i)Q_{M-2}^0(r)}{r^2 - r_i^2} \right) \\ &= \frac{C_{M-2}}{I_{M-2}^0} I_M^0 \left(\frac{Q_M^0(r) - E_M Q_{M-2}^0(r)}{r^2 - r_i^2} \right) = \frac{C_{M-2} Q_{M-2}^0(r_i)}{I_{M-2}^0} \frac{\pi(r)}{r^2 - r_i^2}. \end{aligned}$$

$\int_0^1 dr Q_0^0(r)w(r)$ を作用させると (28) を求めたのと同じように左辺が 1 となる。したがって、

$$1 = \frac{C_{M-2} Q_{M-2}^0(r_i)}{I_{M-2}^0} \int_0^1 \frac{\pi(r)}{r^2 - r_i^2} dr, \quad \int_0^1 \frac{\pi(r)}{r^2 - r_i^2} dr = \frac{I_{M-2}^0}{C_{M-2} Q_{M-2}^0(r_i)}.$$

一方 $\left. \frac{\pi'(r)}{2r} \right|_{r_i}$ の方は

$$\pi'(r) = Q_M'(r_i) - E_M Q_{M-2}'(r_i)$$

(11) を用いると $r_i Q_M^0(r_i) - r_i Q_{M-2}^0(r) = M Q_M^0(r_i) + (M + \gamma - 3) Q_{M-2}^0(r_i)$ であるから、

$$\begin{aligned} \pi'(r) &= Q_M^0(r_i) - E_M \left[Q_M^0(r_i) - \frac{M}{r_i} Q_M^0(r_i) - \frac{M + \gamma - 3}{r_i} Q_{M-2}^0(r_i) \right] \\ &= (1 - E_M) Q_M^0(r_i) + \frac{E_M}{r_i} [M E_M - (M + \gamma - 3)] Q_{M-2}^0(r_i) \\ &= (1 - E_M) Q_M^0(r_i) + \frac{E_M}{r_i} \left[\frac{(M + \gamma - \beta - 2)(M + \gamma - 3)}{M + \beta - 1} - (M + \gamma - 3) \right] Q_{M-2}^0(r_i) \\ &= (1 - E_M) Q_M^0(r_i) + \frac{E_M (M + \gamma - 3)}{r_i} \left[\frac{(M + \gamma - \beta - 2)}{M + \beta - 1} - 1 \right] Q_{M-2}^0(r_i) \\ &= (1 - E_M) Q_M^0(r_i) + \frac{E_M (M + \gamma - 3)(2M + \gamma - 3)}{r_i (M + \beta - 1)} Q_{M-2}^0(r_i). \end{aligned}$$

ここで (12) から $r_i \neq 1$ について

$$\begin{aligned} &(1 - r_i^2) r_i Q_M^0(r) \\ &= \left(-M r_i^2 + \frac{M(M + \gamma - \beta - 2)}{2M + \gamma - 3} \right) Q_M^0(r) + \frac{(M + \gamma - \beta - 2)(M + \gamma - 3)}{2M + \gamma - 3} Q_{M-2}^0 \\ &= \left(-M r_i^2 + \frac{M(M + \gamma - \beta - 2)}{2M + \gamma - 3} \right) E_M Q_{M-2}^0(r) + \frac{(M + \gamma - \beta - 2)(M + \gamma - 3)}{2M + \gamma - 3} Q_{M-2}^0 \end{aligned}$$

$r_{M/2} = 1$ に対応する重み係数 $w_{M/2}$ は関係式

$$w_{M/2} = I_0^0 - \sum_{i=1}^{M/2-1} w_i, \quad (31)$$

$$\begin{aligned} &= -r_i^2 M E_M Q_{M-2}^0(r) + \left[\frac{M(M+\gamma-\beta-2)}{2M+\gamma-3} E_M + \frac{(M+\gamma-\beta-2)(M+\gamma-3)}{2M+\gamma-3} \right] Q_{M-2}^0 \\ &= -r_i^2 M E_M Q_{M-2}^0(r) + \frac{M+\gamma-\beta-2}{2M+\gamma-3} [M E_M + M+\gamma-3] Q_{M-2}^0 \\ &= -r_i^2 M E_M Q_{M-2}^0(r) + \frac{M+\gamma-\beta-2}{2M+\gamma-3} \left[M \frac{(M+\gamma-\beta-2)(M+\gamma-3)}{M(M+\beta-1)} + M+\gamma-3 \right] Q_{M-2}^0 \\ &= -r_i^2 M E_M Q_{M-2}^0(r) + \frac{(M+\gamma-\beta-2)(M+\gamma-3)}{2M+\gamma-3} \left[\frac{(M+\gamma-\beta-2)}{M+\beta-1} + 1 \right] Q_{M-2}^0 \\ &= -r_i^2 M E_M Q_{M-2}^0(r) + \frac{(M+\gamma-\beta-2)(M+\gamma-3)(2M+\gamma-3)}{(2M+\gamma-3)(M+\beta-1)} Q_{M-2}^0 \\ &= -r_i^2 M E_M Q_{M-2}^0(r) + \frac{(M+\gamma-\beta-2)(M+\gamma-3)}{M+\beta-1} Q_{M-2}^0 \\ &= -r_i^2 M E_M Q_{M-2}^0(r) + M E_M Q_{M-2}^0 = (1-r_i^2) M E_M Q_{M-2}^0(r), \\ Q_M^0(r) &= \frac{M E_M}{r_i} Q_{M-2}^0(r). \end{aligned}$$

が成り立つので,

$$\begin{aligned} \pi'(r) &= (1-E_M) \frac{M E_M}{r_i} Q_{M-2}^0(r) + \frac{E_M(M+\gamma-3)(2M+\gamma-3)}{r_i(M+\beta-1)} Q_{M-2}^0(r_i) \\ &= \frac{E_M}{r_i} Q_{M-2}^0(r) \left[(1-E_M)M + \frac{(M+\gamma-3)(2M+\gamma-3)}{M+\beta-1} \right] \\ &= \frac{E_M}{r_i} Q_{M-2}^0(r) \left[M - \frac{(M+\gamma-\beta-2)(M+\gamma-3)}{M+\beta-1} + \frac{(M+\gamma-3)(2M+\gamma-3)}{M+\beta-1} \right] \\ &= \frac{E_M}{r_i} Q_{M-2}^0(r) \left[M + \frac{M+\gamma-3}{M+\beta-1} [-(M+\gamma-\beta-2) + (2M+\gamma-3)] \right] \\ &= \frac{E_M}{r_i} Q_{M-2}^0(r) \left[M + \frac{(M+\gamma-3)(M+\beta-1)}{M+\beta-1} \right] \\ &= \frac{E_M(2M+\gamma-3)}{r_i} Q_{M-2}^0(r). \end{aligned}$$

よってガウスの重み係数は (21) より

$$\begin{aligned} w_i &\equiv \frac{1}{\frac{\pi'(r)}{2r} \Big|_{r_i}} \int_0^1 \frac{\pi(r)}{r^2 - r_i^2} w(r) dr = \frac{2r_i^2}{E_M(2M+\gamma-3)Q_{M-2}^0(r)} \frac{I_{M-2}^0}{C_{M-2}Q_{M-2}^0(r_i)} \\ &= \frac{2r_i^2}{E_M C_{M-2}(2M+\gamma-3)} \frac{I_{M-2}^0}{[Q_{M-2}^0(r_i)]^2} \\ &= \frac{2r_i^2}{2M+\gamma-3} \frac{M(M+\beta-1)}{(M+\gamma-\beta-2)(M+\gamma-3)} \frac{(2M+\gamma-5)(2M+\gamma-3)}{M(M+\beta-1)} \frac{1}{[\Phi_{M-2}^0(r_i)]^2} \\ &= \frac{2r_i^2(2M+\gamma-5)}{(M+\gamma-\beta-2)(M+\gamma-3)} \frac{1}{[\Phi_{M-2}^0(r_i)]^2}. \end{aligned}$$

から計算される²².

$f_m(r)\Phi_n^m(r)$ の次数が $\pi(r)q(r)$ と同じであるので (29) の形からガウス–ラダウ積分は $f_m(r)\Phi_n^m(r)$ の次数が $2M - 4$ 以下であるときに正確となる. $2M - 2$ の程度の精度をのぞむためには格子点の数を 1 つ増やせばよい. すると積分の精度は $2M$ となる.

2 つの関数の積はガウス積分の $M/2$ 個の格子点あるいはガウス–ラダウ積分の $M/2 + 1$ 個の格子点を選点に選ぶことで効率的に計算できる. 非エイリアシング化は $3/2$ 則を用いて実現できる.

数値積分を実行するためにはそれぞれの選点における $Q_n^m(r)$ の値を保管しておく必要がある. このことは $O(M^3)$ のメモリーを必要とし典型的な 2 次元計算ではこれが最大の必要メモリーとなる. しかしながら同じ状況が球面調和函数のルジャンドル陪函数を用いるときに生じる. (18), (20) の変換は本質的に行列の演算であり FFT ほど効率的でない. しかしながら, 行列が十分に大きければ我々の基底関数に対して高速変換を適用できる. 擬スペクトル法に関しては複極展開の適用がもう一つの選択肢である.

3 作用素

微分やその他の演算を楽な方法で計算するためには漸化関係式が望ましい. ここでは基本的な演算である r^2 , $r(d/dr)$ とその逆演算の漸化関係式を示す.(そしてヘルムホルツ演算子とその逆演算の手順を示す.) さて

$$g_m(r) = \sum_{n=|m|, n+\text{even}}^{\infty} a_n^m Q_n^m(r), \quad (32)$$

と, ある線形作用素 L があって,

$$Lg_m(r) = \sum_{n=|m|, n+\text{even}}^{\infty} b_n^m Q_n^m(r). \quad (33)$$

ここで後に便利になるように, $n > \hat{M}$ に対して $a_n^m \equiv 0$ を仮定する. ただし \hat{M} は (18) で定義したものと同様である.

²²(20) において, $n = m = 0$, $f_m(r) = Q_0^0(r) = 1$ と選ぶと

$$\int_0^1 Q_0^0 \Phi_0^0(r) w(r) dr = \sum_{i=1}^{M/2} Q_0^0(r_i) \Phi_0^0(r_i) w_i, \quad \sqrt{I_0^0} = \sum_{i=1}^{M/2} \frac{w_i}{\sqrt{I_0^0}}, \quad I_0^0 = \sum_{i=1}^{M/2} w_i.$$

$L = r(d/dr)$ を考える. (32) をに代入し, (11) を繰り返して用いると²³

$$b_n^m = na_n^m + (2n + \gamma - 1) \sum_{p=n+2, p+n=\text{even}}^{\infty} a_p^m. \quad (34)$$

b_{n+2}^m を得るために添え字 n をシフトし, 和の項を取り除くと $L = r(d/dr)$ についての漸化式が得られる²⁴.

$$b_n^m = \frac{2n + \gamma - 1}{2n + \gamma + 3} b_{n+2}^m + \frac{(2n + \gamma - 1)(n + \gamma + 1)}{2n + \gamma + 3} a_{n+2}^m + na_n^m. \quad (35)$$

²³(11) より

$$\begin{aligned} \sum_{n=|m|, n+\text{even}}^{\infty} b_n^m Q_n^m &= r \frac{dg}{dr} = \sum_{n=|m|, n+\text{even}}^{\infty} a_n^m r \frac{dQ_n^m}{dr} \\ &= \sum_{n=|m|, n+\text{even}}^{\infty} a_n^m \left(r \frac{dQ_{n-2}^m}{dr} + nQ_n^m + (n + \gamma - 3)Q_{n-2}^m \right) \\ &= \sum_{n=|m|, n+\text{even}}^{\infty} a_n^m [nQ_n^m + (n + \gamma - 3)Q_{n-2}^m] \\ &+ \sum_{n=|m|, n+\text{even}}^{\infty} a_n^m \left(r \frac{dQ_{n-4}^m}{dr} + (n-2)Q_{n-2}^m + (n + \gamma - 5)Q_{n-4}^m \right) \\ &= \sum_{n=|m|, n+\text{even}}^{\infty} a_n^m [nQ_n^m + (n + \gamma - 3)Q_{n-2}^m] \\ &+ \sum_{n=|m|, n+\text{even}}^{\infty} a_n^m [(n-2)Q_{n-2}^m + (n + \gamma - 5)Q_{n-4}^m] \\ &+ \sum_{n=|m|, n+\text{even}}^{\infty} a_n^m \left(r \frac{dQ_{n-6}^m}{dr} + (n-4)Q_{n-4}^m + (n + \gamma - 7)Q_{n-6}^m \right) \\ &+ \dots \\ &= \sum_{n=|m|, n+\text{even}}^{\infty} a_n^m [nQ_n^m + (2n + \gamma - 5)Q_{n-2}^m + (2n + \gamma - 9)Q_{n-4}^m + (2n + \gamma - 13)Q_{n-6}^m + \dots] \\ &= \sum_{n=|m|, n+\text{even}}^{\infty} a_n^m nQ_n^m + \sum_{n=|m|-2, n+\text{even}}^{\infty} (2n + \gamma - 1)a_{n+2}^m Q_n^m \\ &+ \sum_{n=|m|-4, n+\text{even}}^{\infty} (2n + \gamma - 1)a_{n+4}^m Q_n^m + \sum_{n=|m|-6, n+\text{even}}^{\infty} (2n + \gamma - 1)a_{n+6}^m Q_n^m + \dots \end{aligned}$$

両辺に $Q_n^m w(r)$ をかけて積分することにより

$$b_{n'}^m = na_{n'}^m + (2n' + \gamma - 1) \sum_{p=n'+2, \text{even}}^{\infty} a_p.$$

24

$$b_n^m = na_n^m + (2n + \gamma - 1) \sum_{p=n+2, p+n=\text{even}}^{\infty} a_p^m.$$

$b_{M+2}^m \equiv 0$ を初期値として逆方向に数値的に安定に計算して b_n^m について解くことができる. $r(d/dr)$ の逆演算のための漸化式は, (35) を a_n^m について逆に解くことにより得られる. この漸化式は定めることのできない a_0^0 を除いて, $a_{M+2}^m \equiv 0$ を初期値として安定に計算できる. a_0^0 の項は $r(d/dr)^{-1}$ の積分定数として供される.

もしも $L = r^2$ ならば, (3) とともに (13) と (32) を用いて, $n \geq |m|$ に対して²⁵,

$$b_n^m = \frac{(n - |m|)(n + |m| + \beta - 1)}{(2n + \gamma - 5)(2n + \gamma - 3)} a_{n-2}^m$$

の n を $n + 2$ に置き換えた式は

$$b_{n+2}^m = (n + 2)a_{n+2}^m + (2n + \gamma + 3) \sum_{p=n+4, p+n=\text{even}}^{\infty} a_p^m.$$

上の式に $2n + \gamma + 3$, 下の式に $2n + \gamma - 1$ をかけて引き算すれば

$$\begin{aligned} & (2n + \gamma + 3)b_n^m - (2n + \gamma - 1)b_{n+2}^m \\ &= n(2n + \gamma + 3)a_n^m - (2n + \gamma - 1)(n + 2)a_{n+2}^m + (2n + \gamma - 1)(2n + \gamma + 3)a_{n+2}^m, \\ & (2n + \gamma + 3)b_n^m = (2n + \gamma - 1)b_{n+2}^m + n(2n + \gamma + 3)a_n^m + (2n + \gamma - 1)(n + \gamma + 1)a_{n+2}^m, \\ & b_n^m = \frac{2n + \gamma - 1}{2n + \gamma + 3} b_{n+2}^m + n a_n^m + \frac{(2n + \gamma - 1)(n + \gamma + 1)}{2n + \gamma + 3} a_{n+2}^m. \end{aligned}$$

²⁵ $g_m(r) = \sum_{n=|m|, n+\text{even}}^{\infty} a_n^m Q_n^m(r)$ に対して r^2 を作用させると

$$\begin{aligned} Lg_m(r) &= \sum_{n=|m|, n+\text{even}}^{\infty} b_n^m Q_n^m(r) = \sum_{n=|m|, n+\text{even}}^{\infty} a_n^m r^2 Q_n^m(r) \\ &= \sum_{n=|m|, n+\text{even}}^{\infty} a_n^m \left[\frac{(n - |m| + 2)(n + |m| + \beta + 1)}{(2n + \gamma - 1)(2n + \gamma + 1)} Q_{n+2}^m \right. \\ & \quad \left. + \frac{2n(n + \gamma - 1) + 2|m|(|m| + \beta - 1) + (\gamma - 3)(\beta + 1)}{(2n + \gamma - 3)(2n + \gamma + 1)} Q_n^m + \frac{(n - |m| + \gamma - \beta - 2)(n + |m| + \gamma - 3)}{(2n + \gamma - 1)(2n + \gamma - 3)} Q_{n-2}^m \right] \\ &= \sum_{n=|m|, n+\text{even}}^{\infty} \left[\frac{(n - |m| + 2)(n + |m| + \beta + 1)}{(2n + \gamma - 1)(2n + \gamma + 1)} a_n^m Q_{n+2}^m \right. \\ & \quad \left. + \frac{2n(n + \gamma - 1) + 2|m|(|m| + \beta - 1) + (\gamma - 3)(\beta + 1)}{(2n + \gamma - 3)(2n + \gamma + 1)} a_n^m Q_n^m \right. \\ & \quad \left. + \frac{(n - |m| + \gamma - \beta - 2)(n + |m| + \gamma - 3)}{(2n + \gamma - 1)(2n + \gamma - 3)} a_n^m Q_{n-2}^m \right] \end{aligned}$$

両辺に $Q_n^m w(r)$ をかけて 0 から 1 まで積分すると, 直交関係から

$$\begin{aligned} b_n^m &= \frac{(n - |m|)(n + |m| + \beta - 1)}{(2n + \gamma - 5)(2n + \gamma - 3)} a_{n-2}^m \\ & \quad + \frac{2n(n + \gamma - 1) + 2|m|(|m| + \beta - 1) + (\gamma - 3)(\beta + 1)}{(2n + \gamma - 3)(2n + \gamma + 1)} a_n^m \\ & \quad + \frac{(n - |m| + \gamma - \beta)(n + |m| + \gamma - 1)}{(2n + \gamma + 3)(2n + \gamma + 1)} a_{n+2}^m \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{2n(n + \gamma - 1) + 2|m|(|m| + \beta - 1) + (\gamma - 3)(\beta + 1)}{(2n + \gamma + 1)(2n + \gamma - 3)} a_n^m \\
& + \frac{(n - |m| + \gamma - \beta)(n + |m| + \gamma - 1)}{(2n + \gamma + 3)(2n + \gamma + 1)} a_{n+2}^m, \tag{36}
\end{aligned}$$

ただし $a_{|m|-2}^m \equiv 0$ である. もしも $\gamma = 3$ で $n = m = 0$ ならば, 右辺の第 2 項は $(\beta + 1)/(\gamma + 1)a_n^m$ とする. (36) によって $|m| \leq n \leq \hat{M} + 2$ に対する b_n^m を計算することができる. $1/r^2$ 作用素に対する逆方向の漸化式は (36) を a_{n-2}^m について解くことにより得られる. 初期値は $a_{M+2}^m \equiv 0$, $a_{M+4}^m \equiv 0$ である. しかしながらこの漸化式は数値的に不安定である. a_n^m は (36) をピボットなしの 3 重対角行列の LU 分解して解くことにより安定に, かつ安価に求めることができる. ここで大事なことは b_n^m で表わされる関数が $r \rightarrow 0$ にて $O(r^{|m|+2p+2})$ で振る舞うことである. ここで p は整数である. でなければ結果の $g_m(r)$ が座標の特異点のまわりで不完全な振る舞いをする.

A ラグランジュ補間と積分

区間 $[0,1]$ 中の格子点 $[r_1, \dots, r_n]$ 上での関数 $f(r)$ の値 $f(r_0), f(r_1), \dots, f(r_n)$ が与えられているときに任意の点 r での $f(r)$ の値を r^{2n-2} までの r^2 の多項式で表し, ガウス積分の評価を行う.

まず, Hilderbrand (1974) にしたがって格子点 $[x_0, x_1, \dots, x_n]$ 上での関数 $f(x)$ の値 $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$ が与えられているときに任意の点 x での $f(x)$ の値を x^n までの多項式で補間することを考える (ラグランジュ補間法). すなわち n 次の多項式 $l_k(x)$ があって

$$f(x) = \sum_{k=0}^n l_k(x) f(x_k) \tag{37}$$

多項式 $l_k(x)$ を見出すには, 各格子点での値が正確であることから求められる. すなわち

$$l_k(x_k) = 1, \quad k = 0, \dots, n, \quad l_k(x_l) = 0, \quad l \neq k, k = 0, \dots, n. \tag{38}$$

あるいはクロネッカーのデルタ記号を用いて

$$l_k(x_l) = \delta_{kl}. \tag{39}$$

$l_k(x)$ がせいぜい x の n 次多項式であることと $k \neq l$ の条件から

$$l_k(x) = C_k(x - x_0) \cdots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \cdots (x - x_n) = C_k \frac{\prod_{l=0}^n (x - x_l)}{x - x_k} \tag{40}$$

と書ける. ただし C_k は定数である. C_k を求めるには $l_k(x_k) = 1$ から求められる.

$$l_k(x_k) = C_k(x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n) = 1,$$

$$C_k = \frac{1}{(x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n)}.$$

よって

$$l_k(x) = \frac{(x - x_0) \cdots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n)}. \quad (41)$$

ここで

$$\pi(x) = (x - x_0) \cdots (x - x_k) \cdots (x - x_n) = \prod_{l=0}^n (x - x_l)$$

を用いると

$$\pi'(x) = \sum_{j=0}^n \frac{\pi(x)}{x - x_j}$$

であるから

$$\pi'(x_k) = \left. \frac{\pi(x)}{x - x_k} \right|_{x=x_k} = (x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n).$$

よって

$$C_k = \frac{1}{\pi'(x_k)}, \quad (42)$$

と書くことができ、結局

$$l_k(x) = \frac{\pi(x)}{(x - x_k)\pi'(x_k)}, \quad \pi(x) = \prod_{l=0}^n (x - x_l). \quad (43)$$

$f(r)$ が r^2 の多項式有的时候には, $x \rightarrow r^2$ に置き換えて

$$f(r) = \sum_{k=0}^n l_k(r) f(r_k), \quad (44)$$

$$l_k(r) = \frac{(r^2 - r_0^2) \cdots (r^2 - r_{k-1}^2)(r^2 - r_{k+1}^2) \cdots (r^2 - r_n^2)}{(r_k^2 - r_0^2) \cdots (r_k^2 - r_{k-1}^2)(r_k^2 - r_{k+1}^2) \cdots (r_k^2 - r_n^2)} \quad (45)$$

ここで $\pi(r)$ を

$$\pi(r) = (r^2 - r_0^2) \cdots (r^2 - r_k^2) \cdots (r^2 - r_n^2) = \prod_{k=0}^n (r^2 - r_k^2) \quad (46)$$

と定義すると, この場合微分は

$$\pi'(r) = 2r \sum_{j=0}^n \frac{\pi(r)}{r^2 - r_j^2}$$

であるから

$$\frac{\pi'(r)}{2r} \Big|_{r=r_k} = \frac{\pi(r)}{r^2 - r_k^2} \Big|_{r=r_k} = (r_k^2 - r_0^2) \cdots (r_k^2 - r_{k-1}^2)(r_k^2 - r_{k+1}^2) \cdots (r_k^2 - r_n^2).$$

したがって

$$l_k(r) = \frac{\pi(r)}{(r^2 - r_k^2) \frac{\pi'(r)}{2r} \Big|_{r=r_k}}. \quad (47)$$

文献

- Matsushima, T., Marcus, P. S., 1995: A spectral method for polar coordinates. *J. Comp. Phys.* **120**, 365–374
- Hilderbrand, F. B., 1974: Introduction to numerical analysis. *McGraw-Hill*, 669pp.
- 石岡圭一, 2004: スペクトル法による数値計算入門, 東京大学出版会, 230pp.