球面調和関数の多項式表現

藤田将洋 (syoyo fujita)

July 3, 2004

1 球面調和関数

球面調和関数 (*spherical harmonics*) は球面座標でのラプラス方程式の解として与えられる。物理学においては、球面調和関数はシュレーディンガー方程式の角度成分に対する解としても知られている。球面調和関数はまた、円上での 1 次元フーリエ変換として捉えて考えることもできる。

球面調和関数 $Y_{l,m}(\theta,\phi)$ は θ に関する関数と ϕ に関する関数の積で表現される。θ 方向への関連は**ルジャンドル倍多項式** *(associated Legendre polynomials)* $P_{l,m}(\cos\theta)$ で与えられ、ϕ 方向への関連は項 $e^{im\phi}$ で与えられる。
正規化を考慮すると、球面調和関数は、

$$Y_{l,m}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}e^{im\phi}P_{l,m}(\cos\theta) \tag{1}$$

として定義される。ここで $\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}$ は正規化定数である。パラメータ l,m は整数であり、$l \geq 0, -m \leq l \leq m$ である。つまりある l に対して、$2l+1$ 個の異なった関数が定義される。l は**帯** *(band)* もしくは**次数** *(order)* と呼ばれる。

1.1 実数球面調和関数

球面調和関数は複素数であるが、実際にはコンピュータグラフィックスでは実数のみを扱うので、**実数球面調和関数** (*real spherical harmonics*) を利用する。

球面調和関数 $Y_{l,m}$ と実数球面調和関数 $y_{l,m}$ には以下の関係がある。

$$y_{l,m} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{l,m}+Y_{l,-m}) & m>0 \\ \frac{1}{i\sqrt{2}}(Y_{l,m}-Y_{l,-m}) & m<0 \\ Y_{l,m} & m=0 \end{cases}$$

これをルジャンドル倍多項式 $P_{l,m}$ との関係に書き直すと以下になる。

$$y_{l,m} = \begin{cases} \sqrt{2}K_{l,m}\cos(m\phi)P_{l,m}(\cos\theta) & m>0 \\ \sqrt{2}K_{l,m}\sin(-m\phi)P_{l,-m}(\cos\theta) & m<0 \\ K_{l,m}P_{l,m}(\cos\theta) & m=0 \end{cases}$$

ここで $K_{l,m} = \sqrt{\frac{2l+1}{4}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}$ である。

1.2 デカルト座標系での球面調和関数

球面座標 (r, θ, ϕ) での**体球調和関数** *(solid harmonics)* $r^l Y_{l,m}(\theta, \phi)$ は、以下のようにデカルト座標で記述することができる [1]。

$$\begin{aligned} r^l Y_{l,m}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}(l+m)!(l-m)!} \times \\ &\sum_{p,q,s} \frac{1}{p!q!s!}(-\frac{x+iy}{2})^p(\frac{x-iy}{2})^q z^s \end{aligned}$$

ここで p, q, s は正の整数であり、 $p+q+s=l$, $p-q=m$ である。総和はこれらを満たすすすべての p, q, s の組み合わせについてとる。つまり $r=1$ の単位球上を考えれば、デカルト座標での球面調和関数は次数 l の単純な x, y, z の多項式として表すことができる。表 1 に、 $l=4$ までのデカルト座標での実数球面調和関数を示す。

l=0,1,2	l=3	l=4
$y_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$		$y_{4,-4} = \sqrt{\frac{315}{16\pi}}(x^3y - xy^3)$
$y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}y$	$y_{3,-3} = \sqrt{\frac{35}{32\pi}}(3x^2y - y^3)$	$y_{4,-3} = \sqrt{\frac{315}{32\pi}}z(3x^2y - y^3)$
$y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}z$	$y_{3,-2} = \sqrt{\frac{105}{4\pi}}xyz$	$y_{4,-2} = \sqrt{\frac{45}{16\pi}}xy(7z^2 - 1)$
$y_{1,1} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}x$	$y_{3,-1} = \sqrt{\frac{21}{32\pi}}y(5z^2 - 1)$	$y_{4,-1} = \sqrt{\frac{45}{32\pi}}(7yz^3 - 3yz)$
	$y_{3,0} = \sqrt{\frac{7}{16\pi}}(5z^3 - 3z)$	$y_{4,0} = \sqrt{\frac{9}{256\pi}}(35z^4 - 30z^2 + 3)$
$y_{2,-2} = \sqrt{\frac{15}{4\pi}}xy$	$y_{3,1} = \sqrt{\frac{21}{32\pi}}x(5z^2 - 1)$	$y_{4,1} = \sqrt{\frac{45}{32\pi}}(7xz^3 - 3xz)$
$y_{2,-1} = \sqrt{\frac{15}{4\pi}}yz$	$y_{3,2} = \sqrt{\frac{105}{16\pi}}z(x^2 - y^2)$	$y_{4,2} = \sqrt{\frac{45}{64\pi}}(x^2 - y^2)(7z^2 - 1)$
$y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3z^2 - 1)$	$y_{3,3} = \sqrt{\frac{35}{32\pi}}(x^3 - 3xy^2)$	$y_{4,3} = \sqrt{\frac{315}{32\pi}}z(x^3 - 3xy^2)$
$y_{2,1} = \sqrt{\frac{15}{4\pi}}xz$		$y_{4,4} = \sqrt{\frac{315}{256\pi}}(x^4 - 6x^2y^2 + y^4)$
$y_{2,2} = \sqrt{\frac{15}{16\pi}}x^2 - y^2$		

Table 1: Real spherical harmonics up to $l \leq 4$ with normalized vector (x, y, z) representation in Cartesian coordinates.

References

[1] D. A. Varshalovich and A. N. Moksalev and V. K. Khersonskii, Quantum Theory of Angular Momentum, World Scientific Publishing Co. Singapore, 1988.