超球面調和関数(hyperspherical harmonics functions)

極座標における計量テンソル

Definition 0.1 (極座標変換): $\forall d \in \mathbb{N}, \mathbb{R}^d$における以下のような極座標$(r, \theta_1, ..., \theta_{d-1})$から直交座標$(x_1, ..., x_d)$への変換を定める。

$$\begin{cases} 0 < r \\ 0 \le \theta_1 < 2\pi \\ 0 \le \theta_i < \pi \ \text{ for } 2 \le i \le d-1 \end{cases}$$

$$x_i = \begin{cases} r \cos\varphi & \text{if } i = 1 \\ r \prod_{j=d-i}^{d-1} \sin(\theta_j) \cos\varphi & \text{if } 2 \le i \le d-1 \\ r \prod_{j=1}^{d-1} \sin(\theta_j) & \text{if } i = d \end{cases}$$

参考文献と異なり、θ_iをこのような順番で取らないと、球面調和関数の計算で添字をずらすことなり、混乱する。x_iの順序はどうでも良い。

Lemma 0.1:

$$g_{ij} = \operatorname{diag}\left(1, r^2 \prod_{j=2}^{d-1} \sin^2(\theta_j), ..., r^2\right)_{ij}$$

Proof:

$$(ds)^2 = (dr)^2 + r^2 \sum_{i=1}^{d-1} \left(\left(\prod_{j=i+1}^{d-1} \sin^2(\theta_j) \right) (d\theta_i)^2 \right)$$

■

[1]

Corollary 0.1:

$$g^{ij} = \operatorname{diag}\left(1, \frac{1}{r^2 \prod_{j=2}^{d-1} \sin^2(\theta_j)}, ..., \frac{1}{r^2}\right)_{ij}$$

Corollary 0.2:

$$\sqrt{|g|} = r^{d-1} \prod_{i=2}^{d-1} \sin^{i-1}(\theta_i)$$

極座標ラプラシアン

Theorem 0.1 (Voss-Weyl の定理 [2]):

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{\sqrt{|g|}} \partial_i \left(\sqrt{|g|} g^{ij} \partial_j \psi \right)$$

Theorem 0.2 (∇^2の極座標表示):

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r^{d-1}}\partial_r\left(r^{d-1}\partial_r f\right) + \sum_{i=1}^{d-1}\frac{1}{\left(r^2\prod_{j=i+1}^{d-1}\sin^2\left(\theta_j\right)\right)\sin^{i-1}(\theta_i)}\partial_{\theta_i}\left(\sin^{i-1}(\theta_i)\partial_{\theta_i} f\right)$$

Proof:

各i'ごとに分割する。

$$\nabla^2 f = \left(\nabla^2\right)_r f + \sum_{i=1}^{d-1}\left(\nabla^2\right)_{\theta_i} f$$

まず、$g^{i'j}$は$\partial_{i'}$と可換である。 i'がrに対応するとき、$|g|$のrに依存する部分以外は$\partial_{i'}$と可換であるため、約分して、

$$\left(\nabla^2\right)_r f = \frac{1}{r^{d-1}}\partial_r\left(r^{d-1}\partial_r f\right) = \partial_r^2 f + \frac{d-1}{r}\partial_r f$$

i'がθ_iに対応するとき、$|g|$のθ_iに依存する部分以外は$\partial_{i'}$と可換であるため、約分して、

$$\left(\nabla^2\right)_{\theta_i} f = \frac{1}{\left(r^2\prod_{j=i+1}^{d-1}\sin^2\left(\theta_j\right)\right)\sin^{i-1}(\theta_i)}\partial_{\theta_i}\left(\sin^{i-1}(\theta_i)\partial_{\theta_i} f\right) = \frac{1}{r^2\prod_{j=i+1}^{d-1}\sin^2\left(\theta_j\right)}\left(\partial_{\theta_i}^2 f + (i-1)\cot(\theta_i)\partial_{\theta_i} f\right)$$

■

[3]

Lemma 0.2:

$$\forall i \in \{1, ..., d-2\}, \left(\sin^2(\theta_{d-1})\right)\left({\nabla^2}_d\right)_{\theta_i} f = \left({\nabla^2}_{d-1}\right)_{\theta_i} f$$

ラプラス方程式

d次元ラプラス方程式$\nabla^2 f = 0$の変数分離可能な解$f(r, \theta_1, ..., \theta_{d-1}) = R_d(r)Z_d(\theta_1, ..., \theta_{d-1})$を考える。 代入して

$$Z_d(\theta_1, ..., \theta_{d-1})\left(\nabla^2\right)_r R_d(r) + R_d(r)\sum_{i=1}^{d-1}\left({\nabla^2}_d\right)_{\theta_i} Z_d(\theta_1, ..., \theta_{d-1}) = 0$$

$$-\frac{\left(\nabla^2\right)_r R_d(r)}{R_d(r)} = \frac{\sum_{i=1}^{d-1}\left({\nabla^2}_d\right)_{\theta_i} Z_d(\theta_1, ..., \theta_{d-1})}{Z_d(\theta_1, ..., \theta_{d-1})} =: k^2 = \text{const.}$$

$$\begin{cases}\frac{\left(\nabla^2\right)_r R_d(r)}{R_d(r)} + k^2 = 0 \\ \frac{\sum_{i=1}^{d-1}\left({\nabla^2}_d\right)_{\theta_i} Z_d(\theta_1, ..., \theta_{d-1})}{Z_d(\theta_1, ..., \theta_{d-1})} - k^2 = 0\end{cases}$$

$$\begin{cases}\partial_r^2 R_d(r) + \frac{d-1}{r}\partial_r R_d(r) + k(k+d-2)R_d(r) = 0 & \text{(ベッセルの微分方程式)} \\ \sum_{i=1}^{d-1}\left({\nabla^2}_d\right)_{\theta_i} Z_d(\theta_1, ..., \theta_{d-1}) - k(k+d-2)Z_d(\theta_1, ..., \theta_{d-1}) = 0\end{cases}$$

$d = 2$のとき、

$$\partial_{\theta_1}^2 Z(\theta_1) - k^2 Z(\theta_1) = 0$$

$$Z(\theta_1) = A\cos(k\theta_1) + B\sin(k\theta_1)$$

[4]

$d = d$のとき、$Z_d(\theta_1, ..., \theta_{d-1}) = W_d(\theta_{d-1})Z_{d-1}(\theta_1, ..., \theta_{d-2})$と変数分離可能な解を考える。

$$\sum_{i=1}^{d-2}\left({\nabla^2}_d\right)_{\theta_i} Z_d + \left({\nabla^2}_d\right)_{\theta_{d-1}} Z_d(\theta_1, ..., \theta_{d-1}) - k(k+d-2)Z_d(\theta_1, ..., \theta_{d-1}) = 0$$

$$\frac{1}{\sin^2(\theta_{d-1})}\sum_{i=1}^{d-2}\left(\nabla^2{}_{d-1}\right)_{\theta_i} Z_{d-1}(\theta_1,...,\theta_{d-2})W_d(\theta_{d-1}) + \left(\nabla^2{}_d\right)_{\theta_{d-1}} Z_d(\theta_1,...,\theta_{d-1}) - k(k+d-2)Z_d(\theta_1,...,\theta_{d-1}) = 0$$

$d = d-1$のときの式を代入して、

$$\frac{l(l+d-1)Z_{d-1}(\theta_1,...,\theta_{d-2})W_d(\theta_{d-1})}{\sin^2(\theta_{d-1})} + \left(\nabla^2{}_d\right)_{\theta_{d-1}} Z_d(\theta_1,...,\theta_{d-1}) - k(k+d-2)Z_d(\theta_1,...,\theta_{d-1}) = 0$$

$$\frac{l(l+d-1)}{\sin^2(\theta_{d-1})} + \left(\nabla^2{}_d\right)_{\theta_{d-1}} - k(k+d-2))W = 0$$

$$\left(\partial^2_{\theta_{d-1}} + (d-2)\cot(\theta_{d-1})\partial_{\theta_{d-1}} - \frac{l(l+d-1)}{\sin^2(\theta_{d-1})} + k(k+d-2)\right)W = 0$$

$t \coloneqq \cos(\theta_{d-1})$とおけば、$\partial_{\theta_{d-1}} = -\sin(\theta_{d-1})\partial_t, \partial^2_{\theta_{d-1}} = (1-t^2)\partial^2_t - t\partial_t$。

$$\left((1-t^2)\partial^2_t - (d-1)t\partial_t - \frac{l(l+d-1)}{1-t^2} + k(k+d-2)\right)W = 0$$

Definition 0.2 (Gegenbauer 陪多項式):

$$C^{\lambda,k}_h(t) \coloneqq (1-t^2)^{\frac{k}{2}}\frac{\mathrm{d}^k C^\lambda_h(t)}{\mathrm{d}t^k}$$

正規化

対称性による計算量の削減

参考文献

[1] 「(3+1+1)極座標系の超球面調和関数」. [Online]. 入手先: http://kuiperbelt.la.coocan.jp/sf/egan/Diaspora/atomic-orbital/laplacian/5D-1.html

[2] 「The Voss-Weyl formula」. [Online]. 入手先: https://www.general-relativity.net/2021/01/the-voss-weyl-formula.html

[3] 「ラプラシアンの極座標表示～計量テンソル編～ ： n 次元」. [Online]. 入手先: https://wasan.hatenablog.com/entry/20110608/1307529023

[4] 「ラプラス方程式の一般解」. [Online]. 入手先: https://ieyasu03.web.fc2.com/PhysicsMath/43-Laplace_Eq.html