球面調和関数展開の説明

堀田英之 (千葉大学)

1　球面調和関数展開の基本公式

球面調和関数展開の定義を示す。球面調和関数を $Y_\ell^m(\theta,\phi)$ とすると

$$\int d\Omega Y_\ell^m Y_{\ell'}^{m'} = \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_\ell^m Y_{\ell'}^{m'} = 4\pi\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'} \tag{1}$$

となるような定義が好ましい。numpy の fftn は以下のような計算を実行している。我々が利用するような状況では norm='forward' として, フーリエ順変換に $1/n$ してもらった方が良いと思われる。(デフォルトでは norm='backward' で逆変換に $1/n$ がつく)

$$\tilde{Q}_m = \frac{1}{n}\sum_{j=0}^{n-1} Q_j \exp\left(-2\pi i\frac{jm}{n}\right) \tag{2}$$

$$Q_j = \sum_{m=0}^{n-1} \tilde{Q}_m \exp\left(2\pi i\frac{jm}{n}\right) \tag{3}$$

$\exp(im\phi)$ の直交性から

$$\int_0^{2\pi} \exp\left[i(m-m')\phi\right] d\phi = 2\pi\delta_{mm'} \tag{4}$$

これを離散化すると $2\pi = n\Delta\phi$, $\phi = j\Delta\phi$ となるので, $\phi = 2\pi j/n$ となる。

$$\int_0^{2\pi} \exp\left[i(m-m')\phi\right] d\phi \sim \sum_{j=0}^{n-1} \exp\left[2\pi i\frac{m-m'}{n}j\right]\Delta\phi \sim n\Delta\phi\delta_{kk'} \tag{5}$$

少し整理すると

$$\frac{1}{n}\sum_{m=0}^{n-1} \exp\left[2\pi i\frac{m-m'}{n}j\right] \sim \delta_{kk'} \tag{6}$$

これを用いるとフーリエ変換, 逆変換で元に戻ることがわかる。つまり

$$\sum_{m=0}^{n-1}\tilde{Q}_m \exp\left(2\pi i\frac{jm}{n}\right) = \frac{1}{n}\sum_{m=0}^{n-1}\sum_{j'=0}^{n-1} Q_{j'}\exp\left[2\pi i\frac{(j-j')m}{n}\right] \tag{7}$$

$$= \sum_{j'=0}^{n-1} Q_{j'}\delta_{jj'} = Q_j \tag{8}$$

フーリエ変換の離散化から連続化への変換は $1/n = \Delta\phi/(2\pi)$ なので

$$\frac{1}{n}\sum_{j=0}^{n-1} Q_j \exp\left(-2\pi i\frac{jm}{n}\right) = \frac{1}{2\pi}\sum_{j=0}^{n-1} Q_j \exp\left(-im\phi\right)\Delta\phi \tag{9}$$

$$\sim \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} Q(\phi)\exp(-im\phi)d\phi \tag{10}$$

となっているし, フーリエ逆変換は, $dm = 1$ であることを考慮すると

$$\sum_{m=0}^{n-1}\tilde{Q}_m \exp\left(2\pi i\frac{jm}{n}\right) \sim \int_0^m \tilde{Q}(m)\exp\left(im\phi\right)dm \tag{11}$$

と書いても良いかもしれない。

一方, ルジャンドル陪関数は以下のような漸化式を用いて計算する。

$$P_m^m(\cos\theta) = -\sqrt{\frac{2m+1}{2m}}\sin\theta P_{m-1}^{m-1}(\cos\theta) \tag{12}$$

$$P_\ell^m(\cos\theta) = \sqrt{\frac{(2\ell+1)(2\ell-1)}{(\ell-m)(\ell+m)}}\cos\theta P_{\ell-1}^m - \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{(2\ell-3)}\frac{(\ell+m-1)(\ell-m-1)}{(\ell+m)(\ell-m)}}P_{\ell-2}^m \tag{13}$$

という関係式を用いて,

$$P_0^0(\cos\theta) = \sqrt{2} \tag{14}$$

$$P_m^{m-1}(\cos\theta) = 0 \tag{15}$$

と定義すると

$$\int_0^\pi P_\ell^m(\cos\theta)P_{\ell'}^m(\cos\theta)\sin\theta d\theta = 2\delta_{\ell\ell'} \tag{16}$$

となる。このように定義されたルジャンドル陪関数と exp を用いて球面調和関数

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = P_\ell^m(\cos\theta)\exp(im\phi) \tag{17}$$

と定義して直交性を確認すると

$$\begin{aligned}\int d\Omega (Y_\ell^m)^* Y_{\ell'}^{m'} &= \int_0^\pi P_\ell^m(\cos\theta)P_{\ell'}^{m'}(\cos\theta)\sin\theta d\theta \int_0^{2\pi}\exp\left[i(m'-m)\phi\right]d\phi \\ &= 2\pi\int_0^\pi P_\ell^m(\cos\theta)P_{\ell'}^m(\cos\theta)\sin\theta d\theta\delta_{mm'} \\ &= 4\pi\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}\end{aligned} \tag{18}$$

となる。球面調和関数の完全性は

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^{m*}(\theta,\phi)Y_\ell^m(\theta',\phi') = \frac{4\pi\delta(\theta-\theta')\delta(\phi-\phi')}{\sin\theta} \tag{19}$$

と表されるので, 球面調和関数の正変換, 逆変換は以下のように表される。

$$\begin{aligned}\widehat{Q}_\ell^m &= \frac{1}{4\pi}\int d\Omega Q(\theta,\phi)Y_\ell^m(\theta,\phi) \\ Q(\theta,\phi) &= \sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell}\widehat{Q}_\ell^m Y_\ell^{m*}(\theta,\phi)\end{aligned} \tag{20}$$

離散フーリエ変換を連続フーリエ変換に直すときに, 自動的に $1/(2\pi)$ のファクターは入るが, ルジャンドル関数の積分の時にどこかで $1/2$ を追加する必要がある。

元に戻ることを確かめる

$$
\begin{aligned}
\sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell}\widehat{Q}_\ell^m Y_\ell^{m*}(\theta,\phi) =& \frac{1}{4\pi}\sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell}\int d\Omega' Q(\theta',\phi')Y_\ell^m(\theta',\phi')Y_\ell^{m*}(\theta,\phi) \\
=& \frac{1}{4\pi}\int d\Omega' Q(\theta',\phi')\sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^{m*}(\theta,\phi)Y_\ell^m(\theta',\phi') \\
=& \int d\Omega' Q(\theta',\phi')\frac{\delta(\theta-\theta')\delta(\phi-\phi')}{\sin\theta'} \\
=& \int_0^\pi d\theta' \int_0^{2\pi} d\phi' Q(\theta',\phi')\delta(\theta-\theta')\delta(\phi-\phi') \\
=& Q(\theta,\phi)
\end{aligned} \tag{21}
$$

となるので, 元に戻る。一方

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{4\pi}\int d\Omega Q(\theta,\phi)Y_\ell^m(\theta,\phi) &= \frac{1}{4\pi}\int d\Omega \sum_{\ell'=0}^{\infty}\sum_{m'=-\ell'}^{\ell'}\widehat{Q}_{\ell'}^{m'} Y_{\ell'}^{m'*}(\theta,\phi)Y_\ell^m \\
&= \frac{1}{4\pi}\sum_{\ell'=0}^{\infty}\sum_{m'=-\ell'}^{\ell'}\widehat{Q}_{\ell'}^{m'}\int d\Omega Y_{\ell'}^{m'*}(\theta,\phi)Y_\ell^m(\theta,\phi) \\
&= \sum_{\ell'=0}^{\infty}\sum_{m'=-\ell'}^{\ell'}\widehat{Q}_{\ell'}^{m'}\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'} = Q
\end{aligned} \tag{22}
$$

パワースペクトルと実空間の速度の関係を調べる。

$$
\begin{aligned}
\sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell}\widehat{Q}_\ell^{m*}\widehat{Q}_\ell^m &= \frac{1}{(4\pi)^2}\sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell}\int d\Omega Q(\theta,\phi)Y_\ell^{m*}(\theta,\phi)\int d\Omega' Q(\theta',\phi')Y_\ell^m(\theta',\phi') \\
&= \frac{1}{(4\pi)^2}\int d\Omega\int d\Omega' Q(\theta,\phi)Q(\theta',\phi')\sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^{m*}(\theta,\phi)Y_\ell^m(\theta',\phi') \\
&= \frac{1}{4\pi}\int d\Omega Q^2(\theta,\phi)
\end{aligned} \tag{23}
$$

物理でよく使う定義では, パワースペクトル P_m^ℓ は

$$
\sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell}\frac{P_\ell^m}{R} = \frac{1}{4\pi}\int d\Omega Q^2(\theta,\phi) \tag{24}
$$

となるので、

$$
P_\ell^m = R\widehat{Q}_\ell^{m*}\widehat{Q}_\ell^m \tag{25}
$$

とするのが良いと思われる。

2　領域を制限した場合の球面調和関数展開

データが, $\theta_{\min} < \theta < \theta_{\max}$, $\phi_{\min} < \phi < \phi_{\max}$ の範囲でしか定義されていない時の展開方向。θ 方向は, 領域に制限はないが, $\phi_{\max} - \phi_{\min} = 2\pi/N$ (N は自然数) である必要がある。するとフーリエ変換で得られる $\tilde{m}$ と球面調和関数の m の間には, $\tilde{m} = Nm$ の関係がある。データとして存在する m のみを計算していくという手法が良いであろう。

exp の直交性のみ確認しておく。$\Phi = N\phi$ として

$$\begin{aligned}\int_0^{2\pi/N} \exp[i(\tilde{m}-\tilde{m}')\phi]d\phi &= \int_0^{2\pi/N} \exp[i(m-m')N\phi]d\phi \\ &= \frac{1}{N}\int_0^{2\pi} \exp[i(m-m')\Phi]\Phi = 2\pi\delta_{mm'}\end{aligned} \tag{26}$$

離散フーリエ変換と連続フーリエ変換の関係は $1/n = N\Delta\phi/2\pi$ なので

$$\begin{aligned}\frac{1}{n}\sum_{j=0}^{n-1} Q_j \exp\left(-2\pi i\frac{jm}{n}\right) &= \frac{N}{2\pi}\sum_{j=0}^{n-1} Q_j \exp\left(-iNm\phi\right)\Delta\phi \\ &\sim \int_0^{2\pi/N} Q(\phi)\exp(-im'\phi)d\phi\end{aligned} \tag{27}$$

3　実数の球面調和関数展開と計算量削減

まず以下の関係を確認する。

$$\begin{aligned}\tilde{Q}_{n-m} &= \frac{1}{n}\sum_{j=0}^{n-1} Q_j \exp\left[-2\pi i\frac{j(n-m)}{n}\right] \\ &= \frac{1}{n}\sum_{j=0}^{n-1} Q_j \exp\left(-2\pi ij\right)\exp\left[-2\pi i\frac{j(-m)}{n}\right] \\ &= \frac{1}{n}\sum_{j=0}^{n-1} Q_j \exp\left[-2\pi i\frac{j(-m)}{n}\right] \\ &= \tilde{Q}_{-m}\end{aligned} \tag{28}$$

一方, 実数のフーリエ変換は, 実数部は偶関数, 虚数部は奇関数になることは定義からすぐわかる。このことを利用すると $m = 0$ から $m = n/2$ までを計算すれば良いことがわかる。

A　デルタ関数

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\exp\left(ikx\right) = 2\pi\delta(x) \tag{29}$$

なので, $X = 2\pi x$ として $dx = X/2\pi$ なので

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\exp\left(2\pi ikx\right) = \delta(x) \tag{30}$$

がわかる。よってフーリエ変換

$$\tilde{Q}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx Q(x) \exp\left(-2\pi i x k\right) \tag{31}$$

と定義すれば, フーリエ逆変換は

$$Q(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{Q}(k) \exp\left(2\pi i x k\right) \tag{32}$$

とすればよい。なぜならば

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{Q}(k) \exp\left[2\pi i x k\right] = \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} dx' Q(x') \exp[2\pi i (x - x')k] \tag{33}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx' Q(x') \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp[2\pi i (x - x')k] \tag{34}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx' Q(x') \delta(x - x') = Q(x') \tag{35}$$

となり、元に戻る。