

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

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

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)

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

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

$\exp(im\phi)$ の直交性から

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

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。

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

少し整理すると

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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。

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

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

という関係式を用いて、

$$P_0^0(\cos\theta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (14)$$

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

と定義すると

$$\int_0^\pi P_\ell^m(\cos\theta) P_{\ell'}^m(\cos\theta) \sin\theta d\theta = \frac{1}{2\pi} \quad (16)$$

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

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

と定義して直交性を確認すると

$$\int d\Omega (Y_\ell^m)^* Y_{\ell'}^{m'} = \int_0^\pi P_\ell^m(\cos\theta) P_{\ell'}^{m'}(\cos\theta) \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} \exp[i(m'-m)\phi] d\phi \quad (18)$$

$$= 2\pi \int_0^\pi P_\ell^m(\cos\theta) P_{\ell'}^{m'}(\cos\theta) \sin\theta d\theta \delta_{mm'} \quad (19)$$

$$= \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \quad (20)$$

となる。球面調和関数の完全性は

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_\ell^{m*}(\theta, \phi) Y_\ell^m(\theta', \phi') = \frac{\delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi')}{\sin\theta} \quad (21)$$

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。

$$\hat{Q}_\ell^m = \int d\Omega Q(\theta, \phi) Y_\ell^m(\theta, \phi) \quad (22)$$

$$Q(\theta, \phi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \hat{Q}_\ell^m Y_\ell^{m*}(\theta, \phi) \quad (23)$$

元に戻ることを確かめる

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \hat{Q}_{\ell}^m Y_{\ell}^{m*}(\theta, \phi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \int d\Omega' Q(\theta', \phi') Y_{\ell}^m(\theta', \phi') Y_{\ell}^{m*}(\theta, \phi) \quad (24)$$

$$= \int d\Omega' Q(\theta', \phi') \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell}^{m*}(\theta, \phi) Y_{\ell}^m(\theta', \phi') \quad (25)$$

$$= \int d\Omega' Q(\theta', \phi') \frac{\delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi')}{\sin \theta'} \quad (26)$$

$$= \int_0^{\pi} d\theta' \int_0^{2\pi} d\phi' Q(\theta', \phi') \delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi') \quad (27)$$

$$= Q(\theta, \phi) \quad (28)$$

となるので, 元に戻る。

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

$$\int_0^{2\pi/N} \exp[i(\tilde{m} - \tilde{m}')\phi] d\phi = \int_0^{2\pi/N} \exp[i(m - m')N\phi] d\phi \quad (29)$$

$$= \frac{1}{N} \int_0^{2\pi} \exp[i(m - m')\Phi] d\Phi = 2\pi \delta_{mm'} \quad (30)$$

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

$$\frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} Q_j \exp\left(-2\pi i \frac{jm}{n}\right) = \frac{N}{2\pi} \sum_{j=0}^{n-1} Q_j \exp(-iNm\phi) \Delta\phi \quad (31)$$

$$\sim \int_0^{2\pi/N} Q(\phi) \exp(-im'\phi) d\phi \quad (32)$$

A デルタ関数

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(ikx) = 2\pi \delta(x) \quad (33)$$

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(2\pi i kx) = \delta(x) \quad (34)$$

がわかる。よってフーリエ変換

$$\tilde{Q}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx Q(x) \exp(-2\pi i x k) \quad (35)$$

と定義すれば, フーリエ逆変換は

$$Q(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{Q}(k) \exp(2\pi i x k) \quad (36)$$

とすればよい。なぜならば

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{Q}(k) \exp[2\pi i x k] = \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} dx' Q(x') \exp[2\pi i(x - x')k] \quad (37)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx' Q(x') \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp[2\pi i(x - x')k] \quad (38)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx' Q(x') \delta(x - x') = Q(x) \quad (39)$$

となり、元に戻る。