

CG のための球面調和関数

mebiusbox software

2019 年 7 月 3 日

目次

1	はじめに	2
2	光子（フォトン）	2
3	量子力学の世界	3
4	ヘルムヘルツ方程式・ラプラス方程式の特解	5
4.1	ベッセル微分方程式	7
4.2	ルジャンドルの微分方程式	8
4.3	パリティ	11
5	球面調和関数	12
6	照度環境マップの近似	16
7	付録 1：関数の直交性	19
8	付録 2：級数展開	21
9	付録 3：複素数	21
9.1	虚数	21
9.2	幾何学的な意味	22
9.3	内積・外積	23
9.4	オイラーの公式	24
9.5	複素関数	25
10	付録 4：フーリエ変換	28
10.1	フーリエ級数の積分	28
10.2	フーリエサイン級数, フーリエコサイン級数	29
10.3	複素フーリエ級数展開	30
10.4	フーリエ変換	32
11	付録 5：ルジャンドル多項式, ルジャンドル陪関数, 球面調和関数	34
11.1	ルジャンドル多項式（ロドリゲスの公式）	34
11.2	ルジャンドル陪関数	34
11.3	実数球面調和関数	34
	参考文献	36

1. はじめに

リアルタイムのコンピュータグラフィックスにおいて、大域照明（グローバル・イルミネーション）を実装する方法は様々です。古くは環境光（アンビエント光）として単色を指定する大胆な近似から、半球アンビエント、アンビエントキューブ、そしてテクスチャを使った環境マッピング、または事前にテクスチャに焼き付けたり、スクリーンスペース・アンビエント・オクリューションなどのポストプロセスが使用されています。他にもラジオシティ法を使ったリアルタイムでの大域照明の手法も開発・採用されています。どの方法でも同じですが、より正確な大域照明を行うためには照明対象の周辺から入射してくる輝度情報が必要です。例えばグリッド状に1メートル間隔でキューブマップを作成し、環境マッピングを適用することも可能です。しかし、リアルタイムの制限も多くそう簡単なものでもありません。何より必要なデータ量が膨大になってしまいます。そこで、このデータ量を大幅に縮小する手法が発表・実用化され、現在では一般的に使われています。現在のリアルタイムでの写実的なコンピュータグラフィックスはこの手法による恩恵が大きいと思います。この手法は Ravi Ramamoorthi 氏、Pat Hanrahan 氏の論文「An Efficient Representation for Irradiance Environment Maps」に記述されています。これは**球面調和関数**を使って近似を行う手法です。まず、照度情報を格納した環境マッピング用の**照度マップ**（Irradiance Map）を用意します。これは空間上の任意の位置からあらゆる方向に向いたときの照度を格納します。各方向の半球上から入射する輝度を積分したり、重点サンプリングや、大胆にぼかして近似します。この照度マップは通常キューブマップで作成されます。この手法ではこの照度マップを級数展開することで近似します。そのため、球面におけるフーリエ級数展開みたいなものといえます。ここでは、この近似手法、特に球面調和関数について説明してみたいと思います。

事前知識として、高校数学（特に初等関数、複素数、ベクトル）、複素関数、フーリエ級数展開、微積分（初等関数の微積分、偏微分）が必要です。微分方程式も出てきますが、方程式の中に微分が含まれている程度の認識で十分です。これらの知識がない場合や不安な場合は書籍やインターネットなど参照してください。また、私が書いた記事も参考になるかもしれません。

- CGのための線形代数入門 ベクトル編
- <https://qiita.com/mebiusbox2/items/172131bf95da172d1371>
- CGのためのフーリエ解析入門 フーリエ級数編
- <https://qiita.com/mebiusbox2/items/657df6e458d85303e50d>

また、付録に複素数（複素関数）、フーリエ変換を用意しました。

量子力学に触れていきますが、申し訳ないですけど書いている本人は専門ではありませんし、数学・物理に明るい人ではありませんので、ご了承ください。説明不足なところも多々あると思いますので、随時更新していこうと思います。

※この文書は未完です。

2. 光子（フォトン）

コンピュータグラフィックスで取り扱う光の物理量の最小単位は**光子**です。光は波と粒子の2つの性質を持っていると言われています。少し歴史を辿ってみると光が粒子であると唱えたのはニュートン、光は波であると唱えたのはホイヘンスです。そして、マクスウェルが光は電磁波（電場と磁場で構成される波）の一種であること、アインシュタインが光は粒子であり、光の粒子は光子（光量子）であると唱えました。そして、プランクは光のエネルギー E は振動数 ν の h 倍だと唱えました。

$$E = h\nu$$

ここで ν は光が1秒間に進む間に含まれる波の数です。 h はプランク定数で $6.626 \times 10^{-34} (J \cdot s)$ です。この式によると振動数が大きいほど（つまり波長が短いほど）光のエネルギーが強いことになります。私たちが見ることのできる光は可視光と呼ばれて

いますが、可視光よりも波長が短い紫外線はより強いエネルギーを持っていて、遺伝子に悪影響を及ぼすと言われています。プランクはその後、光のエネルギーはさらに整数倍有していると気づいたそうです。

$$E = nh\nu, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

アインシュタインはこの整数倍は光の粒子の数であるとししました。この粒子が光子と呼ばれているものです。アインシュタインはさらに光子の運動量 p を

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

と導きました。 λ は光の波長です。

3. 量子力学の世界

量子力学は原子や電子、光子など微小なものを取り扱う学問です。原子は原子核と電子からできています。また、原子核は中性子と陽子からできています。陽子の数で原子の種類（元素）が決まり、電子の数は陽子の数と等しいです。電子はそれ以上分割されるとは考えられていないため、素粒子の1つです。中性子や陽子はさらにクォークという素粒子が集まって出来ています。光は波と粒子の性質を持っていることがわかりましたが、ド・ブロイは電子も波の性質を持っていると唱えました。後に電子にも波の性質を持っていることが実験でわかります。つまり、電子も光も波であり、粒子でもあるということです。電子の波の波長は原子核からの距離によって決まり、電子はその軌道上に存在します。電子は原子の中で波として動いて回っていますが、粒子として考えるときにその位置や速度（運動量）は同時に正確に観測できません。これを**不確定性原理**といいます。電子は軌道上のどこかに存在するため、その存在を確率で表すことにし、軌道上での確率分布を関数にします。これを**波動関数**といいます。正確には波動関数は負の値も取れるのでその二乗を確率密度関数とします。よって、波動関数 ψ とすると

$$\int |\psi|^2 dx = 1 \quad (1)$$

の関係を満たします。波動関数は波の関数で振幅の大きいところが電子の存在する確率が高くなります。波動関数は次の波動方程式の解であり、波動はこの方程式を満たします。

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = u^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (2)$$

ここで u は波の速度です。波動方程式の一般の解として複素数を使って次のようになります。

$$\psi(x, t) = A e^{-i(\omega t - kx)} \quad (3)$$

ここで A は振幅、 ω は角速度で $\omega = 2\pi\nu$ 、 k は波数で $k = 2\pi/\lambda$ です。波動方程式 (2) に一般解 (3) を代入して微分すると

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\omega^2 \psi$$

となるので、

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\left(\frac{\omega}{u}\right)^2 \psi = -\left(\frac{2\pi\nu}{u}\right)^2 \psi \quad (4)$$

電子に限らず、ある物体が持っている全エネルギーは一般に運動エネルギーと位置エネルギーの和によって表されます。振動数 ν を持つ電子のエネルギーは

$$E = \frac{p^2}{2m} + 2\pi^2 m \nu^2 x^2 \quad (5)$$

ここで、 p は運動量、 m は質量で $m = 9.109 \times 10^{-31} \text{ (kg)}$ です。右辺の第1項が運動エネルギー、第2項が位置エネルギーです。この位置エネルギー（ポテンシャル・エネルギー）を場所だけの関数として $V(x)$ 、速度 v とすると

$$E = \frac{mv^2}{2} + V, \quad p = mv = \sqrt{2m(E - V)} \quad (6)$$

となります。光には質量がないため、運動量は存在しないはずですが、アインシュタインは光の運動量を次のようにしました。

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (7)$$

よって、光の波長は

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (8)$$

となります。電子も同じ波と考えれば電子の波長は

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m(E - V)}} \quad (9)$$

となります。また、波の速度は

$$u = \frac{E}{p} = \frac{E}{\sqrt{2m(E - V)}} \quad (10)$$

となります。式 (10) の E を $h\nu$ に置き換えて、式 (4) に代入すると

$$\frac{\partial^2 \psi}{dx^2} = -\frac{(2\pi\nu)^2 2m(E - V)}{(h\nu)^2} \psi \quad (11)$$

よって

$$\left\{ -\frac{1}{2m} \left(\frac{h}{2\pi} \right)^2 \frac{d^2}{dx^2} + V \right\} \psi = E\psi \quad (12)$$

となります。これは

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2}{dx^2} + V \right) \psi = E\psi \quad (13)$$

と展開したり、 $\hbar = h/2\pi$ とおいて

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V \right) \psi = E\psi \quad (14)$$

と書くことがあります。式 (14) の左辺の波動関数に掛けている部分を取り出して H とすると

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V \quad (15)$$

この H を**ハミルトニアン**といい、運動量と位置の関数です。これまでは1次元で考えてきましたが、電子の位置は3次元空間、それに時間を追加して4次元となるので

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z, t) \right\} \psi = i \frac{\hbar}{2\pi} \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, z, t) \quad (16)$$

となります。この式を自由度3の**シュレーディンガー方程式**といいます。ここで、もし電子の運動が時間に依存しなければ

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \right\} \psi = E\psi(x, y, z) \quad (17)$$

となります。これを**時間に依存しないシュレーディンガー方程式**といいます。今後、シュレーディンガー方程式といえば、時間に依存しないシュレーディンガー方程式を指すことにします。ここで

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (18)$$

とします。この Δ は**演算子**で、**ラプラシアン**といいます。これを使うとシュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \Delta \psi + V\psi = E\psi \quad (19)$$

また、ラプラシアンと \hbar を使うと、時間に依存するシュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (20)$$

となります。ここで、シュレーディンガー方程式の左辺、第2項に注目します。 V は電子の位置エネルギー（ポテンシャル・エネルギー）のことです。ポテンシャル・エネルギーがなければ $V=0$ 、調和振動子なら $V=2\pi^2 m\nu^2 x^2$ 、水素原子中なら $V=-e^2/r$ となります。ラプラシアンを使って

$$\Delta V = 0 \quad (21)$$

を**ラプラスの方程式**といいます。そして、この方程式を満たす関数を**調和関数**といいます。電子は原子核を中心とする軌道の上に存在するため、3次元座標 (x, y, z) ではなく、極座標 (r, θ, ϕ) で表します。極座標のラプラシアンは

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (22)$$

となって、極座標でのラプラス方程式は

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] V = 0 \quad (23)$$

となります。そして、この方程式を満たす関数を**球面調和関数**といいます。

4. ヘルムホルツ方程式・ラプラス方程式の特解

$\Delta V = 0$ をラプラスの方程式といいました。ここで V はポテンシャル・エネルギーの関数です。極座標のラプラシアンは

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (24)$$

でした。次に空間におけるヘルムホルツ方程式を考えます。ヘルムホルツ方程式は

$$(\Delta + \lambda^2)V = \Delta V + \lambda^2 V = 0 \quad (25)$$

です。 λ は任意の定数です。 $\lambda=0$ のとき、ヘルムホルツ方程式はラプラス方程式となります。ここで

$$V(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) \quad (26)$$

と置いて、ヘルムホルツ方程式を解きます。まず ΔV は

$$\begin{aligned}
\Delta V &= \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} \Theta \Phi + \frac{2}{r} \frac{\partial R}{\partial r} \Theta \Phi + \frac{R}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) \Phi + \frac{R \Theta}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} \\
&= R'' \Theta \Phi + \frac{2}{r} R' \Theta \Phi + \frac{R}{r^2 \sin \theta} (\cos \theta \Theta' + \sin \theta \Theta'') \Phi + \frac{R \Theta}{r^2 \sin^2 \theta} \Phi'' \\
&= R'' \Theta \Phi + \frac{2}{r} R' \Theta \Phi + \frac{\cos \theta}{r^2 \sin \theta} R \Theta' \Phi + \frac{1}{r^2} R \Theta'' \Phi + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} R \Theta \Phi''
\end{aligned}$$

よって、ヘルムホルツ方程式は

$$R'' \Theta \Phi + \frac{2}{r} R' \Theta \Phi + \frac{\cos \theta}{r^2 \sin \theta} R \Theta' \Phi + \frac{1}{r^2} R \Theta'' \Phi + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} R \Theta \Phi'' + \lambda R \Theta \Phi = 0 \quad (27)$$

両辺とも $R \Theta \Phi$ で割ると

$$\frac{R''}{R} + \frac{2}{r} \frac{R'}{R} + \frac{\cos \theta}{r^2 \sin \theta} \frac{\Theta'}{\Theta} + \frac{1}{r^2} \frac{\Theta''}{\Theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\Phi''}{\Phi} + \lambda = 0 \quad (28)$$

両辺に r^2 を掛けて

$$\left(r^2 \frac{R''}{R} + 2r \frac{R'}{R} + \lambda r^2 \right) + \left(\frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\Theta'}{\Theta} + \frac{\Theta''}{\Theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\Phi''}{\Phi} \right) = 0 \quad (29)$$

ここで、左辺の第1項は r だけの関数、第2項は θ, ϕ の関数なので、 μ を定数として

$$r^2 \frac{R''}{R} + 2r \frac{R'}{R} + \lambda r^2 = \mu \quad (30)$$

$$\frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\Theta'}{\Theta} + \frac{\Theta''}{\Theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\Phi''}{\Phi} = -\mu \quad (31)$$

式 (31) の両辺に $\sin^2 \theta$ を掛けると

$$\sin^2 \theta \left(\frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\Theta'}{\Theta} + \frac{\Theta''}{\Theta} + \mu \right) + \frac{\Phi''}{\Phi} = 0 \quad (32)$$

ここでも、左辺の第1項は θ だけの関数、第2項は ϕ の関数と分離できるので、 α を定数として

$$\sin^2 \theta \left(\frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\Theta'}{\Theta} + \frac{\Theta''}{\Theta} + \mu \right) = \alpha \quad (33)$$

$$\frac{\Phi''}{\Phi} = -\alpha \quad (34)$$

となります。 Φ は 2π を周期とする関数なので

$$\alpha = m^2 \quad (m = 0, 1, 2, \dots) \quad (35)$$

となります。ここまですとまとめると次のようになります。

$$R'' + \frac{2}{r} R' + \left(\lambda - \frac{\mu}{r^2} \right) R = 0 \quad (36)$$

$$\sin \theta (\sin \theta \Theta')' + (\mu \sin^2 \theta - m^2) \Theta = 0 \quad (37)$$

$$\Phi'' + m^2 \Phi = 0 \quad (38)$$

式 (38) の解は、

$$\Phi(\phi) = C_1 \cos m\phi + C_2 \sin m\phi \quad (39)$$

4.1 ベッセル微分方程式

式 (36) の形をした微分方程式

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dy}{dx} + \left(1 - \frac{\mu^2}{x^2}\right) y = 0 \quad (40)$$

を**ベッセル微分方程式**といいます。次の微分方程式

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \frac{a}{x} \frac{dy}{dx} + \left(b - \frac{c}{x^2}\right) y = 0 \quad (b \neq 0) \quad (41)$$

がベッセル微分方程式に帰着することを証明します。 $y = x^p u$ と変数変換すると

$$y' = px^{p-1}u + x^p u', \quad y'' = p(p-1)x^{p-2}u + px^{p-1}u' + px^{p-1}u' + x^p u'' \quad (42)$$

これを代入して

$$\begin{aligned} y'' + \frac{a}{x} y' + \left(b - \frac{c}{x^2}\right) y &= \{p(p-1)x^{p-2}u + px^{p-1}u' + px^{p-1}u' + x^p u''\} + \frac{a}{x} (px^{p-1}u + x^p u') + \left(b - \frac{c}{x^2}\right) x^p u \\ &= p(p-1)x^{p-2}u + px^{p-1}u' + px^{p-1}u' + x^p u'' + apx^{p-2}u + ax^{p-1}u' + bx^p u - cx^{p-2}u \\ &= x^p u'' + (2p+a)x^{p-1}u' + [bx^p + \{p(p-1) + ap - c\}x^{p-2}]u \\ &= 0 \end{aligned}$$

よって

$$u'' + \frac{2p+a}{x} u' + \left[b + \frac{p^2 + p(a-1) - c}{x^2}\right] u = 0 \quad (43)$$

ここで、 $2p+a=1$ とすれば、 $p=(1-a)/2$ なので

$$\begin{aligned} p^2 + p(a-1) - c &= \left(\frac{1-a}{2}\right)^2 + \frac{1-a}{2}(a-1) - c \\ &= \frac{(1-a)^2}{4} - \frac{(1-a)^2}{2} - c \\ &= -\left\{\frac{(1-a)^2}{2} + c\right\} \equiv -v^2 \end{aligned}$$

これを代入すると

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{du}{dx} + \left(b - \frac{v^2}{x^2}\right) u = 0 \quad (44)$$

となります。次に $z = \sqrt{b}x$ とおくと

$$b \frac{d^2 u}{dz^2} + \frac{\sqrt{b}}{z} \sqrt{b} \frac{du}{dz} + \left(b - b \frac{v^2}{z^2}\right) u = 0 \quad (45)$$

となって、両辺を b で割ると

$$\frac{d^2 u}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{du}{dz} + \left(1 - \frac{v^2}{z^2}\right) u = 0 \quad (46)$$

となって、ベッセル微分方程式となります。

4.2 ルジャンドルの微分方程式

これまでヘルムホルツ方程式を考えてきましたが、ここでラプラス方程式で考えることにします。ラプラス方程式はヘルムホルツ方程式で $\lambda=0$ としたものなので、式 (30) で μ を移行して R/r^2 を掛けると

$$R'' + \frac{2}{r}R' - \frac{\mu}{r^2}R = 0 \quad (47)$$

となります。 $R = r^p$ とすると

$$p(p-1)r^{p-2} + \frac{2}{r}pr^{p-1} - \frac{\mu}{r^2}r^p = 0$$

$$\{p(p-1) + 2p - \mu\}r^{p-2} = 0$$

$$(p^2 + p - \mu)r^{p-2} = 0$$

よって

$$p^2 + p - \mu = 0 \quad (48)$$

となります。2次方程式なので1つの解を n とすると、解と係数の関係から

$$n + \beta = -\frac{1}{1}, \quad n + \beta = -1, \quad \therefore \beta = -n - 1 = -(n+1) \quad (49)$$

また

$$n(-n-1) = -\frac{\mu}{1}, \quad \therefore \mu = -(-n^2 - n) = n(n+1) \quad (50)$$

よって、式 (47) の一般解は A_1, A_2 を任意定数として

$$R = A_1 r^n + A_2 \frac{1}{r^{n+1}} \quad (51)$$

となります。次に式 (37)

$$\sin\theta (\sin\theta\Theta')' + (\mu\sin^2\theta - m^2)\Theta = 0 \quad (52)$$

を考えます。ここで $\cos\theta = x, \Theta = y$ とおくと

$$\frac{d\Theta}{d\theta} = \frac{d\Theta}{dx} \frac{dx}{d\theta} = \frac{dy}{dx} \frac{d(\cos\theta)}{d\theta} = -\sin\theta \frac{dy}{dx} \quad (53)$$

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} = \frac{d}{d\theta} \left(-\sin\theta \frac{dy}{dx} \right) = -\cos\theta \frac{dy}{dx} - \sin\theta \frac{d}{d\theta} \left(\frac{dy}{dx} \right) = -\cos\theta \frac{dy}{dx} - \sin\theta \frac{d}{dx} \left(\frac{dy}{dx} \right) \frac{dx}{d\theta} = -\cos\theta \frac{dy}{dx} + \sin^2\theta \frac{d^2y}{dx^2} \quad (54)$$

式 (37) を整理して上式を代入すると

$$\begin{aligned}
\sin\theta(\sin\theta\Theta')' + (\mu\sin^2\theta - m^2)\Theta &= \sin\theta(\cos\theta\Theta' + \sin\theta\Theta'') + (\mu\sin^2\theta - m^2)\Theta \\
&= \sin^2\theta\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \sin\theta\cos\theta\frac{d\Theta}{d\theta} + (\mu\sin^2\theta - m^2)\Theta \\
&= \sin^2\theta\left(-\cos\theta\frac{dy}{dx} + \sin^2\theta\frac{d^2y}{dx^2}\right) + \sin\theta\cos\theta\left(-\sin\theta\frac{dy}{dx}\right) + (\mu\sin^2\theta - m^2)y \\
&= \sin^2\theta\left\{\sin^2\theta\frac{d^2y}{dx^2} - 2\cos\theta\frac{dy}{dx} + \left(\mu - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)y\right\} \\
&= 0
\end{aligned}$$

よって

$$(1-x^2)\frac{d^2y}{dx^2} - 2x\frac{dy}{dx} + \left(n(n+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right)y = 0 \quad (55)$$

となります。これを**ルジャンドルの随伴微分方程式**または**ルジャンドルの陪微分方程式**といいます。特に $m=0$ としたとき

$$(1-x^2)\frac{d^2y}{dx^2} - 2x\frac{dy}{dx} + n(n+1)y = 0 \quad (56)$$

となります。これを**ルジャンドルの微分方程式**といいます。このルジャンドルの微分方程式において、 n が正の整数のとき解が n 次多項式になります。この多項式（関数）を**ルジャンドルの多項式**または**ロドリゲス（ロドリグ）の公式**といいます。

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad (57)$$

ルジャンドル多項式は範囲が $-1 \leq x \leq 1$ のとき、次のような性質を持っています。

$$\int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = \begin{cases} 0 & (n \neq m) \\ \frac{2}{2m+1} & (n = m) \end{cases} \quad (58)$$

クロネッカーのデルタを使えば

$$\int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = \frac{2}{2m+1} \delta_{nm}$$

と表すことができます。

また、 n, m が正の整数で、 $0 \leq m \leq n$ のとき、ルジャンドルの随伴微分方程式の解は

$$P_n^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) \quad (59)$$

となります。この関数を**ルジャンドルの陪関数**といいます。 $m=0$ のとき、ルジャンドルの陪関数はルジャンドルの多項式と同じになります。

$$P_n^0(x) = P_n(x) \quad (60)$$

このルジャンドル陪関数も直交関数なので次の性質を満たします。

$$\int_{-1}^1 P_n^m P_{n'}^m dx = \begin{cases} 0 & (n \neq n') \\ \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} & (n = n') \end{cases} = \left\{ \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \right\} \delta_{nn'} \quad (61)$$

次に $0 \leq m \leq n$ から $-n \leq m \leq n$ の領域に拡張します。式 (73) にロドリゲスの公式を適用すると

$$P_n^m(x) = \frac{1}{2^n n!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^n \quad (62)$$

となります。ここで、

$$P_n^m(x) = \frac{1}{2^n n!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^n$$

$$P_n^{-m}(x) = \frac{1}{2^n n!} (1-x^2)^{-\frac{m}{2}} \frac{d^{n-m}}{dx^{n-m}} (x^2-1)^n$$

だから、

$$\frac{1}{2^n n!} (1-x^2)^{-\frac{m}{2}} \frac{d^{n-m}}{dx^{n-m}} (x^2-1)^n = C_n^m \frac{1}{2^n n!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^n \quad (63)$$

が成立する定数 C_n^m を求めます。両辺に $2^n n!$ を掛けて、

$$(1-x^2)^{-\frac{m}{2}} \frac{d^{n-m}}{dx^{n-m}} (x^2-1)^n = C_n^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^n \quad (64)$$

$(1-x^2)^{\frac{m}{2}} = \sqrt{1-x^2}^m$ の部分を整理して

$$\frac{1}{(1-x^2)^m} \frac{d^{n-m}}{dx^{n-m}} (x^2-1)^n = C_n^m \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^n \quad (65)$$

となって、結局

$$C_n^m = (-1)^m \frac{(n-m)!}{(n+m)!} \quad (66)$$

となります。よって、

$$P_n^{-m} = (-1)^m \frac{(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(x) \quad (67)$$

という関係が得られます。以下はいくつかのルジャンドル陪関数をプロットしたものです。

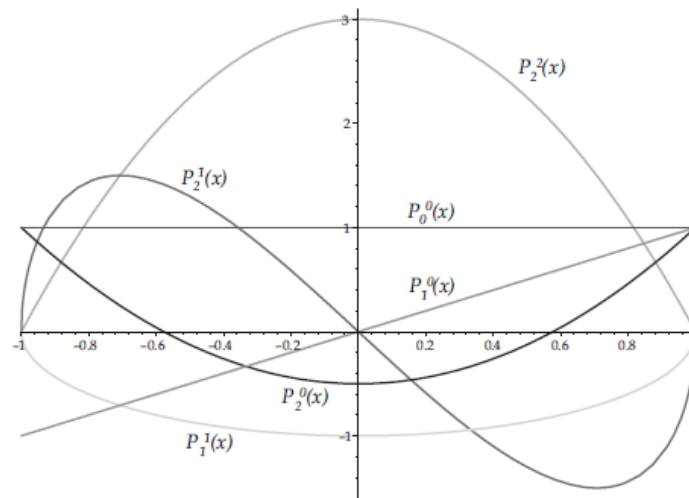


Fig.1: Robin Green, 「Spherical Harmonic Lighting: The Gritty Details」 Sony Computer Entertainment America から引用

また、下図はルジャンドル陪関数を極座標 $r = \text{abs}[P_n^m(\theta)]$ でプロットしたものです。

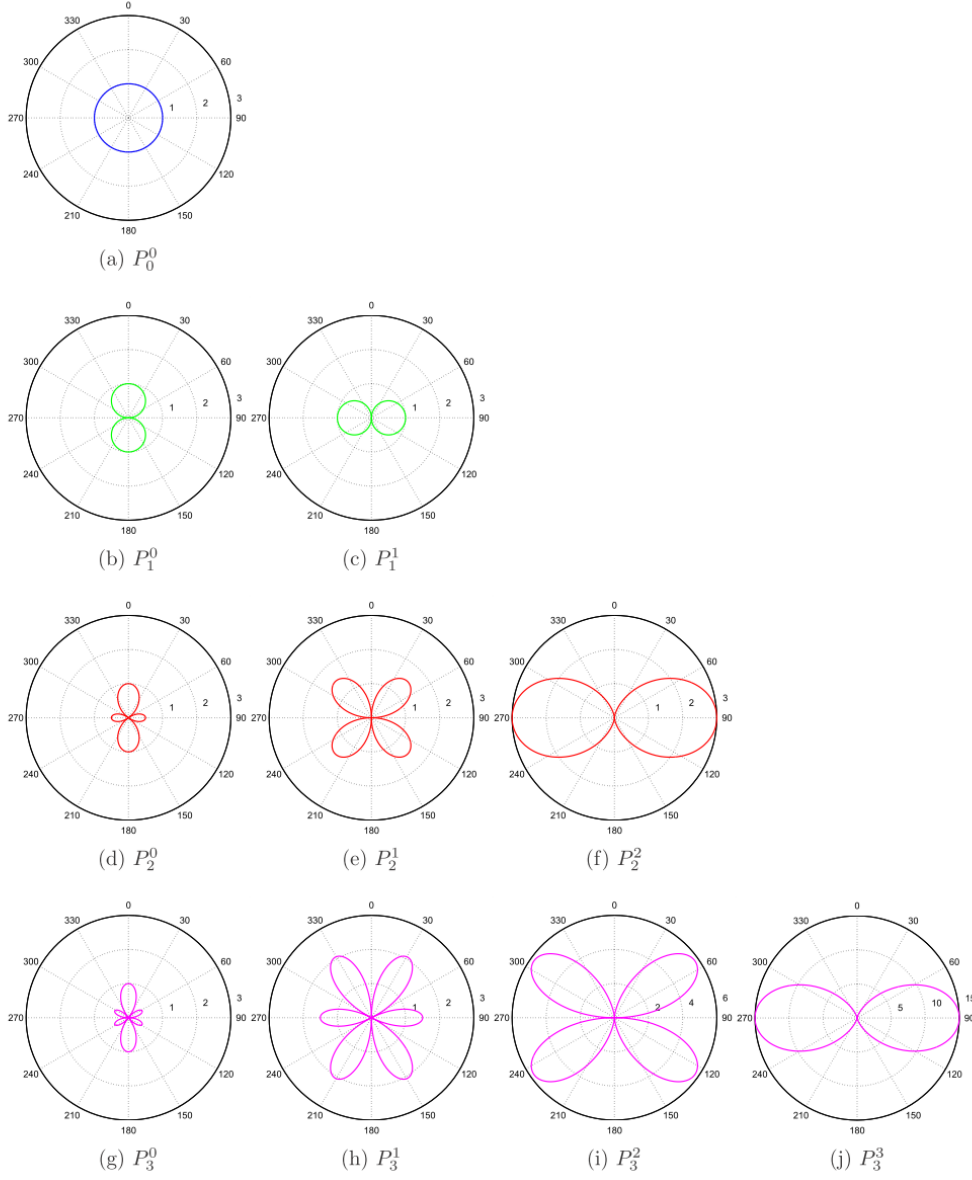


Fig.2: Asaf Pe'er, 「Angular Momentum in Quantum Mecahnics」 から引用

4.3 パリティ

ルジャンドル多項式には以下の性質があります。

$$P_n(-1) = (-1)^n \quad (68)$$

これはルジャンドル多項式の母関数と二項定理により導かれます。ルジャンドル母関数は

$$(1 - 2xt + t^2)^{-\frac{1}{2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n \quad (69)$$

です。これは $x \mapsto -x$, $t \mapsto -t$ と置き換えても値が変化しません。この性質を数式で表現すると

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(-x)(-t)^n \quad (70)$$

という関係になります。この級数における t の各次数の項を等号で結ぶと

$$P_n(-x) = (-1)^n P_n(x) \quad (71)$$

という関係式が得られます。これは偶数次のルジャンドル多項式が偶関数であり、奇数次のルジャンドル多項式が奇関数であることを意味しています。このような偶奇性を**パリティ**といいます。次にルジャンドル陪関数のパリティを考えてみます。まず、ルジャンドル多項式のパリティから

$$P_n^0(-x) = (-1)^n P_n^0(x) \quad (72)$$

という関係がわかります。ルジャンドル陪関数の定義式は

$$P_n^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) \quad (73)$$

でした。偶数階の微分で関数のパリティが変化せず、奇数階の微分でパリティが反転することに注意すると

$$P_n^m(-x) = (-1)^{n+m} P_n^m(x) \quad (74)$$

という関係が得られます。

5. 球面調和関数

球面調和関数 Y_ℓ^m は θ に関する関数と ϕ に関する関数の積で表現されます。 θ 方向への関連はルジャンドル陪関数 $P_{\ell,m}(\cos\theta)$ で与えられ、 ϕ 方向への関連は項 $e^{im\phi}$ (フーリエ級数) で与えられます。それぞれ正規化すると式 (61) から

$$\sqrt{\frac{2\ell+1}{2} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_\ell^m \quad (75)$$

ϕ の範囲 $0 \leq \phi \leq 2\pi$ で $e^{im\phi}$ を積分すると $\int_0^{2\pi} e^{im\phi} d\phi = 2\pi$ なので

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad (76)$$

よって、球面調和関数の正規化定数は

$$K_{\ell,m} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{2} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} \quad (77)$$

そして、球面調和関数 Y_ℓ^m は

$$Y_\ell^m(\theta, \phi) = (-1)^m K_{\ell,m} P_\ell^m(\cos\theta) e^{im\phi} \quad (78)$$

となります。 $(-1)^m$ は波動関数のパリティに関する係数です。パラメータ ℓ, m は整数であり、 $0 \leq m \leq \ell$ です。つまり、 ℓ に対して $2\ell+1$ 個の異なった関数が定義されます。 ℓ は帯 (band) もしくは次数 (order) と呼ばれます。次に範囲を $-\ell \leq m \leq \ell$ ($|m| \leq \ell$) に拡張します。まず、 $-m$ の球面調和関数を考えると、式 (67) から

$$Y_\ell^{-m}(\theta, \phi) = (-1)^m (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}} P_\ell^m(\cos\theta) e^{-im\phi} \quad (79)$$

また、正規化定数を

$$K_\ell^m = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}} \quad (80)$$

と定義すると

$$Y_\ell^m(\theta, \phi) = (-1)^m K_\ell^m P_\ell^m(\cos\theta) e^{im\phi}$$

$$\begin{aligned} Y_\ell^{-m}(\theta, \phi) &= (-1)^m (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}} P_\ell^m(\cos\theta) e^{-im\theta} \\ &= (-1)^m \overline{Y_\ell^m(\theta, \phi)} \end{aligned}$$

の関係になります。これを1つの式にまとめると

$$Y_\ell^m(\theta, \phi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} K_\ell^m P_\ell^{|m|}(\cos\theta) e^{im\phi} \quad (|m| \leq \ell) \quad (81)$$

となります。球面調和関数は $e^{im\phi}$ が含まれているので複素数ですが、コンピュータグラフィックスでは実数のみを扱うので、実数球面調和関数を利用します。球面調和関数 Y_ℓ^m と実数球面調和関数 y_ℓ^m には次のような関係があります。

$$y_\ell^m = \begin{cases} \sqrt{2} \operatorname{Re}[Y_\ell^m] & (m > 0) \\ \sqrt{2} \operatorname{Im}[Y_\ell^{-m}] & (m < 0) \\ Y_\ell^m & (m = 0) \end{cases} = \begin{cases} (-1)^m \sqrt{2} K_\ell^m \cos(m\phi) P_\ell^m(\cos\theta) & (m > 0) \\ (-1)^m \sqrt{2} K_\ell^m \sin(-m\phi) P_\ell^{-m}(\cos\theta) & (m < 0) \\ K_\ell^m P_\ell^m(\cos\theta) & (m = 0) \end{cases}$$

ここで $(-1)^m$ をルジャンドル陪関数の方に含めて

$$P_\ell^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_\ell(x) \quad (82)$$

とすると

$$P_m^m(x) = (-1)^m (2m-1)!! (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \quad (83)$$

$$P_{m+1}^m(x) = (2m+1)x P_m^m(x) \quad (84)$$

$$P_\ell^m(x) = \frac{(2\ell-1)x P_{\ell-1}^m(x) - (\ell+m-1) P_{\ell-2}^m(x)}{\ell-m} \quad (85)$$

が得られます。式 (83) は

$$P_m^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_m(x) \quad (86)$$

と書けます。ここで、 $P_m(x)$ を m 回微分したものは、 x^m の係数に $m!$ を掛けたもの、すなわち

$$\frac{d^m}{dx^m} P_m(x) = \frac{(2m)!}{2^m m!} \quad (87)$$

となります。また、 $n=2k-1, k \geq 1$ なら

$$n!! = \frac{(2k)!}{2^k k!} = \frac{(2k-1)!}{2^{k-1} (k-1)!} \quad (88)$$

の関係から ($n!!$ を **二重階乗** といいます)

$$\frac{d^m}{dx^m} P_m(x) = \frac{(2m)!}{2^m m!} = (2m-1)!! \quad (89)$$

の関係にあります。式 (89) を式 (86) に代入すれば

$$P_m^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_m(x) = (-1)^m (2m-1)!! (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \quad (90)$$

となります。 $(-1)^m$ をルジャンドル関数に含めたので、球面調和関数は

$$y_{\ell}^m = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{\ell}^m + Y_{\ell}^{-m}) & (m > 0) \\ \frac{1}{i\sqrt{2}} (Y_{\ell}^m - Y_{\ell}^{-m}) & (m < 0) \\ Y_{\ell}^m & (m = 0) \end{cases} = \begin{cases} \sqrt{2} K_{\ell}^m \cos(m\phi) P_{\ell}^m(\cos\theta) & (m > 0) \\ \sqrt{2} K_{\ell}^m \sin(-m\phi) P_{\ell}^{-m}(\cos\theta) & (m < 0) \\ K_{\ell}^m P_{\ell}^m(\cos\theta) & (m = 0) \end{cases}$$

に変わります。これらの式からルジャンドル陪関数 P を計算するコードは次のようになります。

```
double P(int l, int m, double x)
{
    // eq.1
    double pmm = 1.0;
    if (m>0) {
        double somx2 = sqrt((1.0-x)*(1.0+x));
        double fact = 1.0;
        for (int i=1; i<=m; i++) {
            pmm *= (-fact) * somx2;
            fact += 2.0;
        }
    }
    if (l==m) return pmm;

    // eq.2
    double pmmp1 = x*(2.0*m+1.0)*pmm;
    if (l == m+1) return pmmp1;

    // eq.3
    double pll = 0.0;
    for (int ll=m+2; ll<=l; ++ll) {
        pll = ((2.0*ll-1.0)*x*pmmp1 - (ll+m-1.0)*pmm) / (ll-m);
        pmm = pmmp1;
        pmmp1 = pll;
    }

    return pll;
}
```

式 (83) は **eq.1** , 式 (84) は **eq.2** , 式 (85) は **eq.3** に対応しています。次に正規化定数 K_{ℓ}^m を計算する関数 **K** は

```
double K(int l, int m)
{
    double lpm = 1.0;
    double lnm = 1.0;
    if (m<0) m=-m;

    for (int i=l-m; 0<i; i--) lnm *= i;
    for (int i=l+m; 0<i; i--) lpm *= i;

    double factor = ((2.0*l+1.0)*lnm)/(1.0/(4.0*PI*lpm));
    return sqrt(factor);
}
```

そして、球面調和関数 **SH** は

```
double SH(int l, int m, double theta, double phi)
{
    const double sqrt2 = sqrt(2.0);
    if (m==0) return K(l,0) * P(l,m,cos(theta));
    else if (m>0) return sqrt2 * K(l,m) * cos(m*phi) * P(l, m,cos(theta));
    else /* m<0 */ return sqrt2 * K(l,m) * sin(-m*phi) * P(l,-m,cos(theta));
}
```

となります。これをプロットしたものが下図になります。

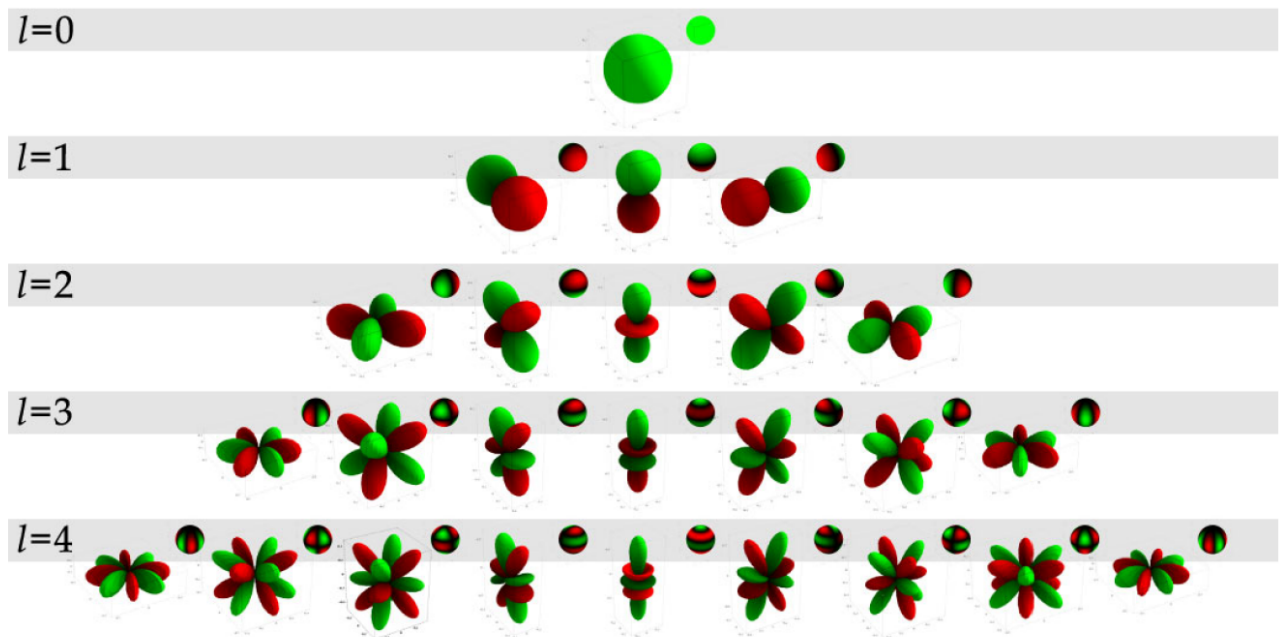


Fig.3: Robin Green, 「Spherical Harmonic Lighting: The Gritty Details」 Sony Computer Entertainment America から引用

緑が正で、赤が負を表しています。 l は帯で、中央の列が $m = 0$ で、球面を帯状に正負が反転しているので**帯球（面）関数**といいます。左側の列は $m < 0$ 、右側の列が $m > 0$ となっていて、これらは球面を縞状および帯状の領域に分かれ、隣同士の符号が反転しているので**縞球（面）関数**といいます。これらの形をした関数ごとに係数を求めて、それらを重ね合わせることで関数を近似します。

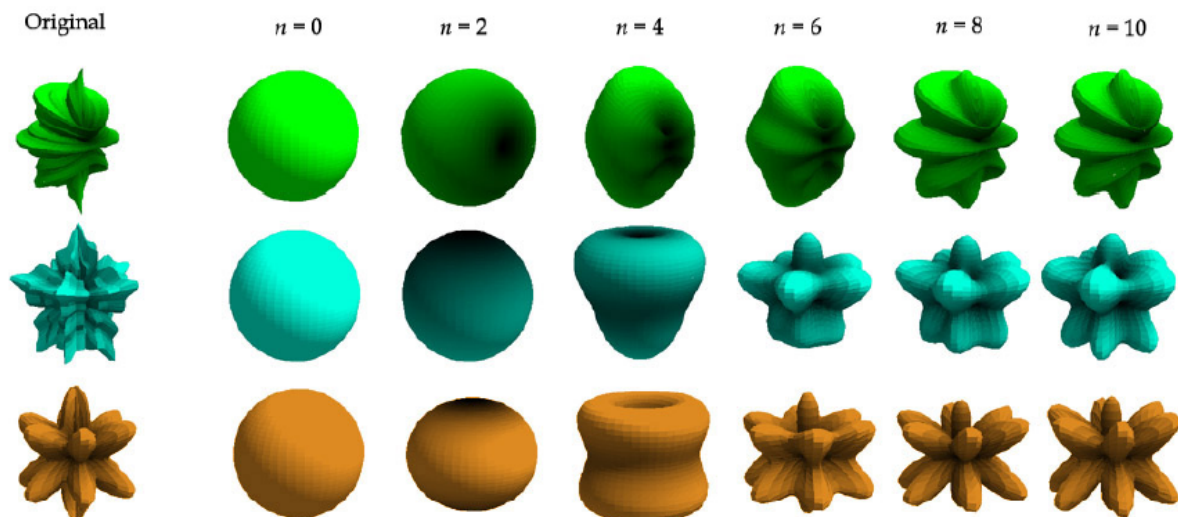


Fig.4: Robin Green, 「Spherical Harmonic Lighting: The Gritty Details」 Sony Computer Entertainment America から引用

ここで、単位球の3次元球面を考えます。球面上の点は

$$(x, y, z) = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$$

となって、 θ, ϕ の2変数で表すことができます。球面調和関数はこの θ, ϕ の関数のフーリエ変換と考えることができます。球面調和関数同士の積分は

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos\theta) Y_{\ell}^m(\theta, \phi) Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \phi) = \int_{-\pi}^{\pi} d\phi \int_{-1}^1 d\theta \sin\theta Y_{\ell}^m(\theta, \phi) Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \phi) = \begin{cases} 1 & (\ell = \ell', m = m') \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

となります。この関係から3次元球面上で定義された関数 $f(\theta, \phi)$ は

$$f(\theta, \phi) = \sum_{\ell=0}^{\phi} \sum_{m=-\ell}^{\ell} c_{\ell}^m Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$$

$$\begin{aligned} c_{\ell}^m &= \int_{-\pi}^{\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos\theta) f(\theta, \phi) Y_{\ell}^m(\theta, \phi) \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} d\phi \int_{-1}^1 d\theta \sin\theta f(\theta, \phi) Y_{\ell}^m(\theta, \phi) \end{aligned}$$

と展開されます。

6. 照度環境マップの近似

ここから球面調和関数をコンピュータグラフィックスで使う方法を見ていきます。Ravi Ramamoorthi 氏と Pat Hanrahan 氏の論文「An Efficient Representation for Irradiance Environment Maps」では、ある表面上の照度（ある点にあらゆる方向から入射した輝度）を球面調和関数で展開しました。この方法では通常6方向のテクスチャ（キューブマップ）が必要なものに対して、球面調和関数の係数から展開することができるので必要なデータ量が大幅に少なくなりました。計算コストも高くなく、補間も可能なため、現在では球面調和関数によるデータ近似は一般的に使われるようになっています。

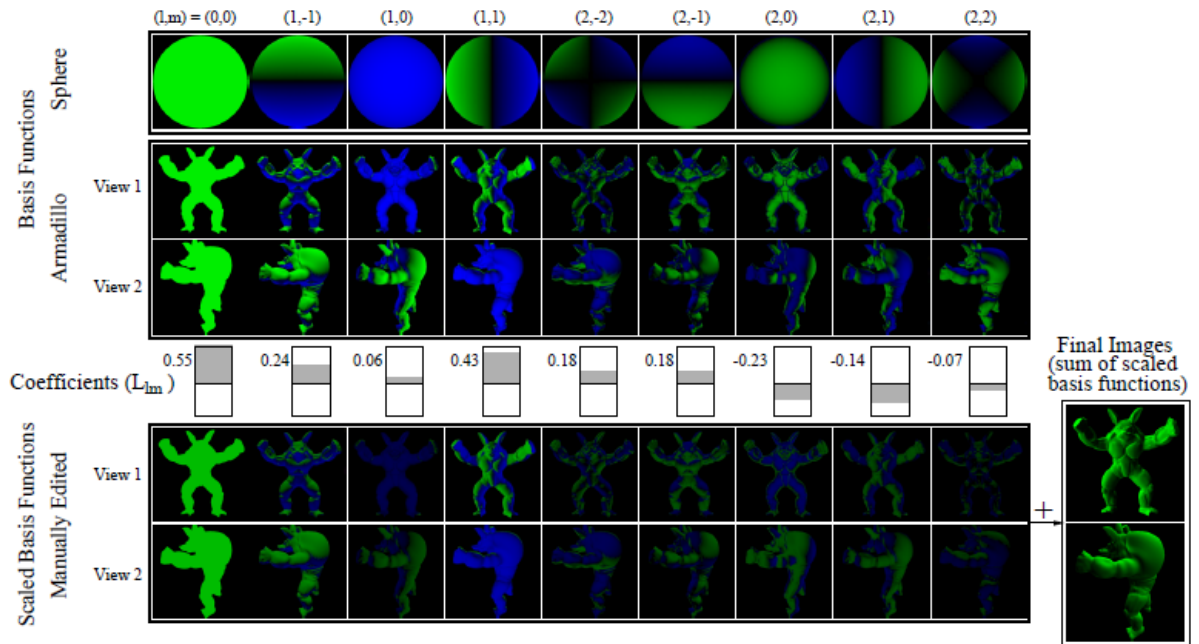


Fig.5: Ravi Ramamoorthi, Pat Hanrahan, 「An Efficient Representation for Irradiance Environment Maps」から引用

まず、ある表面上の点における法線が n の照度 $E(n)$ は

$$E(n) = \int_{\Omega(n)} L(\omega)(n \cdot \omega) d\omega$$

です。ここで、 L は輝度、 n と ω は単位ベクトルで、 E と L は単位球上の θ, ϕ によってパラメータ化されます。照度 E はある点 p における表面のアルベド（リフレクタンス）と乗算することでラジオシティ B が得られます。

$$B(p, n) = \rho(p)E(n)$$

論文ではこの E を近似しています．ここで $L_{\theta, \phi}, E_{\theta, \phi}$ は球面調和展開 $E_{\ell, m}, L_{\ell, m}$ を係数として

$$L(\theta, \phi) = \sum_{\ell, m} L_{\ell, m} Y_{\ell, m}(\theta, \phi)$$

$$E(\theta, \phi) = \sum_{\ell, m} E_{\ell, m} Y_{\ell, m}(\theta, \phi)$$

と定義します．また， $A = (n \cdot \omega)$ を係数 A_ℓ において

$$A(\theta) = \max[\cos \theta, 0] = \sum_{\ell} A_{\ell} Y_{\ell 0}(\theta)$$

とすると

$$E_{\ell m} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} A_{\ell} L_{\ell m}$$

また

$$\hat{A}_{\ell} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} A_{\ell}$$

と定義します．レンダリング時に照度 E を球面調和展開するには

$$E(\theta, \phi) = \sum_{\ell, m} \hat{A}_{\ell} L_{\ell m} Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

となります． A_{ℓ} は解析的に解くことができるため， \hat{A}_{ℓ} は

$$\begin{cases} \hat{A}_1 = \frac{2\pi}{3} & \ell = 1 \\ \hat{A}_{\ell} = 0 & \ell > 1, \text{ odd} \\ \hat{A}_{\ell} = 2\pi \frac{(-1)^{\frac{\ell}{2}-1}}{(\ell+2)(\ell-1)} \left[\frac{\ell!}{2^{\ell} (\frac{\ell}{2}!)^2} \right] & \ell \text{ even} \end{cases}$$

となります．例えば次のようになります．

$$\begin{aligned} \hat{A}_0 &= 3.141593 & \hat{A}_1 &= 2.094395 & \hat{A}_2 &= 0.785398 \\ \hat{A}_3 &= 0 & \hat{A}_4 &= -0.130900 & \hat{A}_5 &= 0 & \hat{A}_6 &= 0.049087 \end{aligned}$$

レンダリングするときは

$$E(\theta, \phi) = \sum_{\ell, m} \hat{A}_{\ell} L_{\ell m} Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

を使います．ここで $\ell \leq 2$ の時を考えます．係数は最大9個となって， $n^t = (x \ y \ z \ 1)$ とおくと

$$E(n) = n^t M n$$

として行列とベクトルの計算になります．行列 M は

$$M = \begin{pmatrix} c_1 L_{22} & c_1 L_{2-2} & c_1 L_{21} & c_2 L_{11} \\ c_1 L_{2-2} & -c_1 L_{22} & c_1 L_{2-1} & c_2 L_{1-1} \\ c_1 L_{21} & c_1 L_{2-1} & c_3 L_{20} & c_2 L_{10} \\ c_2 L_{11} & c_2 L_{1-1} & c_2 L_{10} & c_4 L_{00} - c_5 L_{20} \end{pmatrix}$$

$$c_1 = 0.429043 \quad c_2 = 0.511664$$

$$c_3 = 0.743125 \quad c_4 = 0.886227 \quad c_5 = 0.247708$$

となります。この式を展開して整理すると

$$\begin{aligned} E(n) = & c_1 L_{22} (x^2 - y^2) + c_3 L_{20} z^2 + c_4 L_{00} - c_5 L_{20} \\ & + 2c_1 (L_{2-2} xy + L_{21} xz + L_{2-1} yz) \\ & + 2c_2 (L_{11} x + L_{1-1} y + L_{10} z) \end{aligned}$$

となります。

以下は $l \leq 2$ の球面調和関数による係数から照度を求めるコードです。通常は光源からの光の色を表す RGB3 つそれぞれに係数が必要です。例えば $l \leq 2$ で係数が 9 個の場合、RGB を近似するために 27 個の係数が必要です。

```
uniform vec3 irradcoeff[9];
vec3 SphericalHarmonics(const in vec3 N) {
    float x2;
    float y2;
    float z2;
    float xy;
    float yz;
    float xz;
    float x;
    float y;
    float z;
    vec3 col;

    // 0: Y{0, 0} = 0.282095
    // 1: Y{1,-1} = -0.488603(y)
    // 2: Y{1, 0} = 0.488603(z)
    // 3: Y{1, 1} = -0.488603(x)
    // 4: Y{2,-2} = 1.092548(xy)
    // 5: Y{2,-1} = -1.092548(yz)
    // 6: Y{2, 0} = 0.315392(3z^2-1)
    // 7: Y{2, 1} = -1.092548(xz)
    // 8: Y{2, 2} = 0.546274(x^2-y^2)

    // A0 = PI = 3.141593
    // A1 = 2PI / 3 = 2.094395
    // A2 = PI / 4 = 0.785398

    const float c1 = 0.429043; // 0.546274 * PI / 4
    const float c2 = 0.511664; // 0.488603 * 2PI / 3 * 0.5
    const float c2c2 = 1.023328; // 0.488603 * 2PI / 3
    const float c3 = 0.743125; // c5 * 3.0
    const float c4 = 0.886227; // 0.282095 * PI
    const float c5 = 0.247708; // 0.315392 * PI / 4

    x = N.x;
    y = N.y;
    z = N.z;

    x2 = x*x; y2 = y*y; z2 = z*z;
```

```

xy = x*y; yz = y*z; xz = x*z;

// L0
col = c4*irradcoeff[0];

// L1
col += 2.0 * c2 * irradcoeff[3]*x;
col += 2.0 * c2 * irradcoeff[1]*y;
col += 2.0 * c2 * irradcoeff[2]*z;
//col += c2c2 * irradcoeff[3]*x;
//col += c2c2 * irradcoeff[1]*y;
//col += c2c2 * irradcoeff[2]*z;

// L2
col += 2.0*c1*irradcoeff[4]*xy;
col += 2.0*c1*irradcoeff[5]*yz;
col += c3*irradcoeff[6]*z2 - c5*irradcoeff[6];
col += 2.0*c1*irradcoeff[7]*xz;
col += c1*irradcoeff[8]*(x2-y2);

return col;
}

```

7. 付録1：関数の直交性

例えば、ベクトル \vec{v} は正規直交基底を使って

$$\vec{v} = a_x \vec{e}_x + a_y \vec{e}_y + a_z \vec{e}_z = a_x \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + a_y \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + a_z \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

と表すことができます。正規直交基底は

$$\vec{e}_x \cdot \vec{e}_y = \vec{e}_y \cdot \vec{e}_z = \vec{e}_x \cdot \vec{e}_z = 0$$

の関係になっています。ここでベクトル \vec{v} と正規直交ベクトルとの内積を求めると

$$\vec{v} \cdot \vec{e}_x = a_x \vec{e}_x \cdot \vec{e}_x + a_y \vec{e}_y \cdot \vec{e}_x + a_z \vec{e}_z \cdot \vec{e}_x = a_x$$

各成分が取り出せます。これは関数でも同じことが言えます。区間 $a \leq x \leq b$ で定義された関数 $f_1(x), f_2(x), f_3(x)$ が互いに直交関係のとき

$$\int_a^b f_1(x) \cdot f_2(x) dx = 0, \quad \int_a^b f_2(x) \cdot f_3(x) dx = 0, \quad \int_a^b f_1(x) \cdot f_3(x) dx = 0$$

の関係にあります。このような関数の集まりを直交関数系といいます。ここで次のような任意の関数 $F(x)$ を定義します。

$$F(x) = a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x) + a_3 f_3(x)$$

$F(x)$ と $f_1(x)$ の内積を積分すると

$$\begin{aligned}
\int_a^b F(x) \cdot f_1(x) dx &= a_1 \int_a^b f_1(x) \cdot f_1(x) dx + a_2 \int_a^b f_2(x) \cdot f_1(x) dx + a_3 \int_a^b f_3(x) \cdot f_1(x) dx \\
&= a_1 \int_a^b f_1^2(x) dx \\
&= a_1 \int_a^b f_1^2(x) dx
\end{aligned}$$

となります。また、

$$\int_a^b f_1(x) \cdot f_1(x) dx = \int_a^b f_1^2(x) dx = 1$$

と正規化されていれば、ただちに係数 a_1 が求められます。

$$\int_a^b F(x) \cdot e_1(x) dx = a_1, \quad \int_a^b F(x) \cdot e_2(x) dx = a_2,$$

\vdots ,

$$\int_a^b F(x) \cdot e_n(x) dx = a_n$$

もし正規化されていなければ関数のノルム

$$|f(x)| = \sqrt{(f, f)}$$

あるいは

$$|f(x)| = \left(\int_a^b f(x) \cdot f(x) dx \right)^{\frac{1}{2}}$$

を使って

$$\frac{1}{|f_1(x)|} = \frac{1}{\sqrt{(f_1, f_1)}} = \frac{1}{\sqrt{\int_a^b f_1^2(x) dx}}$$

とおくと

$$\begin{aligned}
\int_a^b e_1(x) \cdot e_1(x) dx &= \int_a^b \frac{f_1(x)}{\sqrt{\int_a^b f_1^2(x) dx}} \frac{f_1(x)}{\sqrt{\int_a^b f_1^2(x) dx}} dx \\
&= \frac{1}{\int_a^b f_1^2(x) dx} \cdot \int_a^b f_1^2(x) dx = 1
\end{aligned}$$

となります。ここで正規直交関数系

$$e_1(x), e_2(x), e_3(x), \dots, e_n(x), \dots$$

において、次のような関数 $G(x)$ を定義し

$$G(x) = a_1 e_1(x) + a_2 e_2(x) + a_3 e_3(x)$$

この関数 $G(x)$ の内積を計算すると

$$\begin{aligned}
(G, G) &= \int_a^b G(x) \cdot G(x) dx \\
&= \int_a^b (a_1 e_1(x) + a_2 e_2(x) + a_3 e_3(x))^2 dx \\
&= \int_a^b (a_1 e_1(x))^2 dx + \int_a^b (a_2 e_2(x))^2 dx + \int_a^b (a_3 e_3(x))^2 dx \\
&\quad + 2 \int_a^b a_1 e_1(x) \cdot a_2 e_2(x) dx + 2 \int_a^b a_2 e_2(x) \cdot a_3 e_3(x) dx + 2 \int_a^b a_3 e_3(x) \cdot a_1 e_1(x) dx \\
&= a_1^2 \int_a^b e_1(x) dx + a_2^2 \int_a^b e_2(x) dx + a_3^2 \int_a^b e_3(x) dx \\
&\quad + 2a_1 a_2 \int_a^b e_1(x) \cdot e_2(x) dx + 2a_2 a_3 \int_a^b e_2(x) \cdot e_3(x) dx + 2a_3 a_1 \int_a^b e_3(x) \cdot e_1(x) dx \\
&= a_1^2 + a_2^2 + a_3^2
\end{aligned}$$

となって各係数の 2 乗の総和が得られます。

8. 付録 2：級数展開

直交関数系の級数 $F(x)$ から次のような関数 $f(x)$ に展開することを考えます。

$$f(x) = \sum_n c_n F_n(x)$$

関数の直交性からこの級数 $F_n(x)$ は

$$\int_a^b F_n(x) F_m(x) dx = \begin{cases} 0 & (n \neq m) \\ c & (n = m) \end{cases}$$

という性質を満たします。すると展開係数を

$$c_n = \frac{1}{c} \int_a^b f(x) F_n(x) dx$$

という形で計算できます。この形に当てはまるものとしてフーリエ級数があります。また、その他の関数系としてルジャンドル多項式があります。

9. 付録 3：複素数

9.1 虚数

例えば方程式 $x^2 + 1 = 0$ を考えます。これは $x = \sqrt{-1}$ となりますが、 $+1$ を 2 回かけても $+1$ であり、 -1 を 2 回かけても $+1$ となって、実数の世界では解がありません。そこで同じ数を 2 回かけると -1 になる数、**虚数**を導入し

$$i^2 = -1, \quad i = \sqrt{-1} \tag{91}$$

となる i を定義します。この i を**虚数単位**といいます。虚数を使えば $x^2 + 1 = 0$ の解は $x = i$ となります。ここで、次の 2 次方程式を考えます。

$$ax^2 + bx + c = 0$$

この根は

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

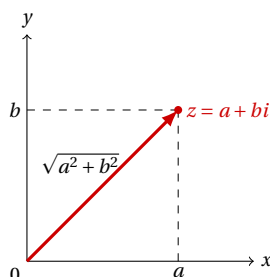
で与えられます。この時、 $b^2 - 4ac$ を**判別式**といい、これが0または正であると実数解が得られ、負の値だと実数では解がありません。ところが、虚数を導入すると

$$x = \frac{-b}{2a} \pm \frac{\sqrt{-(b^2 - 4ac)}}{2a} i$$

となって、解が求められます。これは実数と虚数の和で表されます。このような数を**複素数**といいます。複素数が実数 a, b を用いて $a + bi$ と表されるとき、 a を実部といい、 b を虚部といいます。

9.2 幾何学的な意味

複素数は実部と虚部からなる2次元のベクトルと考えることができます。複素数 $z = a + bi$ を平面上に描いてみると次の図のようになります。



ここで x 軸は実軸、 y 軸は虚軸となっています。このような xy 平面を**複素平面**または**ガウス平面**といいます。次に、上の図で示しているように原点から z までの距離は

$$|z| = \sqrt{a^2 + b^2}$$

となります。これを複素数の**絶対値**といいます。例えば、 $4 + 2i$ の絶対値は $|4 + 2i| = \sqrt{4^2 + 2^2} = \sqrt{20}$ となります。実際に複素数の絶対値を求める場合、 $a^2 + b^2$ を得るためには $a + bi$ に虚部の符号が反転した $a - bi$ をかけます。これら複素数を互いに**共役**であるといいます。 $a + bi$ の共役な複素数は $a - bi$ であり、 $a - bi$ の共役な複素数は $a + bi$ です。共役な複素数は \bar{z} または z^* で表します。複素数 $z = a + bi$ 、その共役な複素数 $\bar{z} = a - bi$ を使うと

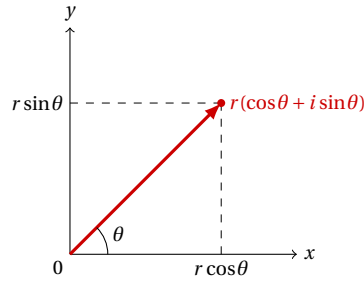
$$|z| = \sqrt{z\bar{z}} = \sqrt{(a + bi)(a - bi)} = \sqrt{a^2 - b^2 i^2} = \sqrt{a^2 + b^2}$$

となります。複素数 z の実部を $\text{Re}(z)$ 、虚部を $\text{Im}(z)$ とすると

$$\text{Re}(z) = a = \frac{z + \bar{z}}{2} \quad (92)$$

$$\text{Im}(z) = b = \frac{z - \bar{z}}{2i} \quad (93)$$

となります。さらに、複素平面で原点から z までの距離 r と、 x 軸の正の方向となす角 θ を使って複素数を表示することができます。



このような表現方法を**極形式**といいます。原点からの距離 r は絶対値なので

$$r = |z| = \sqrt{x^2 + y^2}$$

となります。そして、 x 軸、 y 軸、複素数 z は次の関係にあります。

$$x = r \cos \theta$$

$$y = r \sin \theta$$

$$z = r \cos \theta + i r \sin \theta = r(\cos \theta + i \sin \theta) \quad (94)$$

また、 x 軸とのなす角 θ を**偏角**といい、 $\arg(z)$ と書きます。

9.3 内積・外積

複素数を複素平面で表せば2次元のベクトルと考えることができます。ベクトルならば内積が定義できます。例えば

$$z_1 = x_1 + y_1 i \quad z_2 = x_2 + y_2 i$$

とすると、内積は

$$z_1 \cdot z_2 = |z_1| |z_2| \cos \theta \quad (95)$$

となります。成分表示の場合は次のようになります。

$$z_1 \cdot z_2 = x_1 x_2 + y_1 y_2 \quad (96)$$

これは複素数 z_1 と z_2 が実軸の正方向となす角を α, β とすると、三角関数の加法定理を使って

$$z_1 \cdot z_2 = |z_1| |z_2| \cos \theta = |z_1| |z_2| \cos \theta (\alpha - \beta) = |z_1| |z_2| (\cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta) \quad (97)$$

で与えられます。ここで

$$\cos \alpha = \frac{x_1}{|z_1|}, \quad \cos \beta = \frac{x_2}{|z_2|}, \quad \sin \alpha = \frac{y_1}{|z_1|}, \quad \sin \beta = \frac{y_2}{|z_2|} \quad (98)$$

の関係から、これを式 (97) に代入すると

$$\begin{aligned} z_1 \cdot z_2 &= |z_1| |z_2| (\cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta) \\ &= |z_1| |z_2| \left(\frac{x_1 x_2}{|z_1| |z_2|} + \frac{y_1 y_2}{|z_1| |z_2|} \right) \\ &= x_1 x_2 + y_1 y_2 \end{aligned}$$

となって、内積の成分表示式 (96) と等しいことがわかります。同じ複素数の内積は

$$z_1 \cdot z_1 = |z_1||z_1|\cos(0) = |z_1|^2 = z_1 \overline{z_1} = \overline{z_1} z_1 = (x_1 - y_1 i)(x_1 + y_1 i) = x_1^2 + y_1^2$$

という関係です。次に複素数 z_1 と z_2 のなす角を θ として

$$z_1 \times z_2 = |z_1||z_2|\sin\theta \quad (99)$$

と定義します。これはベクトルの外積と同じような性質になりますが、スカラー値となり、 z_1 と z_2 がつくる平行四辺形の面積となります。ここで次の複素数の掛け算

$$\overline{z_1} z_2 = (x_1 - y_1 i)(x_2 + y_2 i) = (x_1 x_2 + y_1 y_2) + (x_1 y_2 - x_2 y_1) i \quad (100)$$

から

$$z_1 \cdot z_2 = \operatorname{Re}(\overline{z_1} z_2) \quad z_1 \times z_2 = \operatorname{Im}(\overline{z_1} z_2) \quad (101)$$

となることがわかります。また、掛ける順番を変えると符号が反転する外積の性質も確認できます。

$$z_1 \times z_2 = \operatorname{Im}(\overline{z_1} z_2) = (x_1 y_2 - x_2 y_1) i$$

$$z_2 \times z_1 = \operatorname{Im}(\overline{z_2} z_1) = (x_2 y_1 - x_1 y_2) i$$

$$\therefore z_1 \times z_2 = -(z_2 \times z_1)$$

9.4 オイラーの公式

次の式を **オイラーの公式** といいます。

$$e^{ix} = \cos x + i \sin x \quad (102)$$

ここで、オイラーの公式に $x = \pi$ を代入すると

$$e^{i\pi} = \cos \pi + i \sin \pi = -1 + i \cdot 0 = -1$$

となって、値が求まります。このように円周率、虚数、指数関数、三角関数の関係を単純な式で関係づけることができます。オイラーの公式から次の関係も成り立ちます。

$$e^{-ix} = \cos x - i \sin x$$

ここで、この和と差をとると

$$e^{ix} + e^{-ix} = 2 \cos x$$

$$e^{ix} - e^{-ix} = 2i \sin x$$

となって、 $\sin x$ と $\cos x$ それぞれについて整理すると

$$\cos x = \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2}$$

$$\sin x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}$$

が得られます.

9.5 複素関数

複素数を変数とする関数を複素関数といいます. まず, オイラーの公式から式 (94) は指数関数を使って

$$z = r e^{i\theta} \quad (103)$$

と書けます. ここで, $r = 1$, $\theta = 2\pi$ を代入すると

$$z = e^{i2\pi} = 1 \quad (104)$$

となって, 複素平面上の単位円を一周した場合の値となります. 2π の整数倍では何度回転しても同じなので, n を整数とすると

$$z = e^{in2\pi} = 1 \quad (105)$$

が成立します.

ここで複素数

$$z_1 = x_1 + y_1 i \quad z_2 = x_2 + y_2 i$$

を指数関数の指数にすると

$$e^{z_1} = e^{x_1 + y_1 i} = e^{x_1} (\cos y_1 + i \sin y_1) \quad e^{z_2} = e^{x_2 + y_2 i} = e^{x_2} (\cos y_2 + i \sin y_2)$$

の掛け算を計算すると

$$\begin{aligned} e^{z_1} e^{z_2} &= e^{x_1} (\cos y_1 + i \sin y_1) e^{x_2} (\cos y_2 + i \sin y_2) \\ &= e^{x_1 + x_2} (\cos y_1 + i \sin y_1) (\cos y_2 + i \sin y_2) \end{aligned}$$

三角関数の加法定理を使って

$$\begin{aligned} (\cos y_1 + i \sin y_1) (\cos y_2 + i \sin y_2) &= \cos y_1 \cos y_2 - \sin y_1 \sin y_2 + (\sin y_1 \cos y_2 + \cos y_1 \sin y_2) i \\ &= \cos(y_1 + y_2) + i \sin(y_1 + y_2) \\ &= e^{i(y_1 + y_2)} \end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}
e^{z_1} e^{z_2} &= e^{x_1+x_2} (\cos y_1 + i \sin y_1) (\cos y_2 + i \sin y_2) \\
&= e^{x_1+x_2} e^{i(y_1+y_2)} \\
&= e^{x_1} e^{x_2} e^{iy_1} e^{iy_2} \\
&= e^{x_1+iy_1+x_2+iy_2} \\
&= e^{z_1+z_2}
\end{aligned}$$

と実数と同じように計算することができます。この関係とオイラーの公式を使えば

$$\begin{aligned}
(\cos \theta + i \sin \theta)^n &= (e^{i\theta})^n = e^{in\theta} = e^{i(n\theta)} = \cos n\theta + i \sin n\theta \\
\therefore (\cos \theta + i \sin \theta)^n &= \cos n\theta + i \sin n\theta
\end{aligned} \tag{106}$$

が成立します。これを**ド・モアブルの定理**といいます。また、

$$z_1 = r_1 e^{i\theta_1} \quad z_2 = r_2 e^{i\theta_2}$$

として掛け算を計算すると

$$z_1 z_2 = r_1 e^{i\theta_1} r_2 e^{i\theta_2} = r_1 r_2 e^{i(\theta_1+\theta_2)}$$

から

$$\arg(z_1 z_2) = \theta_1 + \theta_2 = \arg(z_1) + \arg(z_2) \tag{107}$$

という関係になります。次に三角関数ですが、次のように**双曲線関数**を使って

$$\sin(x + yi) = \sin x \cosh y - i \cos x \sinh y \tag{108}$$

$$\cos(x + yi) = \cos x \cosh y - i \sin x \sinh y \tag{109}$$

となります。

次に複素関数の微分を考えます。複素数 $z = x + iy$ は複素平面上の1点です。この点での微分は

$$\frac{df(z)}{dz} = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{f(z + \Delta z) - f(z)}{\Delta z}$$

となります。ここで z が 0 に近づくことを考えると複素数は複素平面上で拡がっているため、近づく方向が無数にあります。どの方向から近づいても同じ値にならなければなりません。ここで、複素関数 $f(z)$ が

$$f(z) = u(x, y) + i v(x, y)$$

と2つの実数関数 $u(x, y)$ および $v(x, y)$ の関数で与えられているとすると、微分可能であれば、 x 方向、 y 方向から近づいても同じ値になるはずです。まず、 x 軸で微分すると

$$\begin{aligned}
f'(z) &= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x, y) - f(x, y)}{\Delta x} \\
&= \frac{\{u(x + \Delta x, y) + i v(x + \Delta x, y)\} - \{u(x, y) + i v(x, y)\}}{\Delta x} \\
&= \frac{\{u(x + \Delta x, y) - u(x, y)\} + i \{v(x + \Delta x, y) - v(x, y)\}}{\Delta x} \\
&= \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} + i \frac{\partial v(x, y)}{\partial x}
\end{aligned} \tag{110}$$

同様に

$$\begin{aligned}
f'(z) &= \lim_{i\Delta y \rightarrow 0} \frac{f(x, y + \Delta y) - f(x, y)}{\Delta y} \\
&= \frac{\partial v(x, y)}{\partial y} + i \frac{\partial u(x, y)}{\partial y}
\end{aligned} \tag{111}$$

となります。2つの $f'(z)$ が等しくなければならぬので、実部と虚部が等しいとおくと

$$\frac{u(x, y)}{\partial x} - \frac{v(x, y)}{\partial y} = 0 \quad \frac{u(x, y)}{\partial y} + \frac{v(x, y)}{\partial x} = 0 \tag{112}$$

または

$$\frac{u(x, y)}{\partial x} = \frac{v(x, y)}{\partial y} \quad \frac{u(x, y)}{\partial y} = -\frac{v(x, y)}{\partial x} \tag{113}$$

となります。これを**コーシー・リーマンの関係式**といいます。微分可能な関数を**正則関数**または**解析関数**といい、コーシー・リーマンの関係式は正則関数の必要条件となっています。ここで

$$f(z) = \frac{1}{z}$$

の微分を考えると $z=0$ で無限大になるので、この複素関数は正則ではありません。このように無限大になる点を**特異点**といいます。複素関数は正則であれば、実数関数で成立する関係がそのまま複素関数でも成立するという性質があります。また、特異点があったとしても、特異点を含まない領域ならばこの性質を持ちます。複素数 z を極形式 $z = re^{i\theta}$ とすると

$$dz = e^{i\theta} dr + r i e^{i\theta} d\theta \tag{114}$$

の関係があります。そして、

$$z^n = r^n e^{in\theta}$$

として、この微分を計算すると

$$\begin{aligned}
d(z^n) &= n r^{n-1} e^{in\theta} dr + r^n i n e^{in\theta} d\theta \\
&= n r^{n-1} e^{i(n-1)\theta} e^{i\theta} dr + n r^{n-1} e^{i(n-1)\theta} r i e^{i\theta} d\theta \\
&= n r^{n-1} e^{i(n-1)\theta} \left(e^{i\theta} dr + r i e^{i\theta} d\theta \right)
\end{aligned}$$

式 (114) を使って整理すると

$$d(z^n) = n z^{n-1} dz \tag{115}$$

となって、一般式が成立します。

次に積分ですが、式 (115) が成立しているので

$$\int z^n dz = \frac{1}{n+1} z^{n+1} + C$$

も成立します。ただし、複素数は2変数（実部、虚部）で複素平面上に拡がっているため、範囲を指定しても経路は無数にあります。そのため、**積分経路** C を指定する必要があります。よって

$$\int_C f(z) dz \quad (116)$$

と表記し、これを**線積分**といいます。

最後に式 (113) の左側の式の両辺を x で微分、右側の式の両辺を y で微分すると

$$\frac{u^2(x, y)}{\partial x^2} = \frac{v^2(x, y)}{\partial x \partial y} \quad \frac{u^2(x, y)}{\partial y^2} = -\frac{v^2(x, y)}{\partial x \partial y} \quad (117)$$

これらの左辺と右辺同士を足し合わせると

$$\frac{u^2(x, y)}{\partial x^2} + \frac{u^2(x, y)}{\partial y^2} = \frac{v^2(x, y)}{\partial x \partial y} - \frac{v^2(x, y)}{\partial x \partial y} \quad (118)$$

よって

$$\frac{u^2(x, y)}{\partial x^2} + \frac{u^2(x, y)}{\partial y^2} = 0 \quad (119)$$

また、同様に式 (113) の左側の式の両辺を y で微分、右側の式の両辺を x で微分して足し合わせると

$$\frac{v^2(x, y)}{\partial x^2} + \frac{v^2(x, y)}{\partial y^2} = 0 \quad (120)$$

が得られます。これは2次元の**ラプラス方程式**です。

10. 付録4：フーリエ変換

これは「[CGのためのフーリエ解析入門 フーリエ級数編](#)」のつづきです。

10.1 フーリエ級数の積分

基本周期 2π のフーリエ級数展開は

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + a_1 \cos x + b_1 \sin x + a_2 \cos x + b_2 \sin x + \dots + a_n \cos x + b_n \sin x + \dots$$

です。一般式は

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \sin nx)$$

で、フーリエ係数は

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \cos nx dx \quad b_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \sin nx dx$$

です。ここで、基本周期内にある任意の点を x と考え、0 から x までの範囲の積分を考えます。フーリエ級数を個別に積分して

$$\int_0^x f(x)dx = \int_0^x \frac{a_0}{2} dx + a_1 \int_0^x \cos x dx + b_1 \int_0^x \sin x dx + a_2 \int_0^x \cos 2x dx + b_2 \int_0^x \sin 2x dx + \dots +$$

$$a_n \int_0^x \cos nx dx + b_n \int_0^x \sin nx dx + \dots$$

となります。 $\cos nx$ と $\sin nx$ の項を計算すると

$$\int_0^x \cos nx = \left[\frac{\sin nx}{n} \right]_0^x = \frac{\sin nx}{n} - \frac{\sin 0}{n} = \frac{\sin nx}{n} \quad (121)$$

$$\int_0^x \sin nx = \left[-\frac{\cos nx}{n} \right]_0^x = -\frac{\cos nx}{n} + \frac{\cos 0}{n} = \frac{-\cos nx + 1}{n} \quad (122)$$

となって、まとめると

$$\int_0^x f(x)dx = \frac{a_0}{2}x + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{a_n}{n} \sin nx - \frac{b_n}{n} (\cos nx - 1) \right) \quad (123)$$

10.2 フーリエサイン級数, フーリエコサイン級数

周期 $2L$ のフーリエ級数展開は

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi x}{L} + b_n \sin \frac{n\pi x}{L} \right)$$

$$a_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \cos \frac{n\pi x}{L} dx \quad (124)$$

$$b_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \sin \frac{n\pi x}{L} dx \quad (125)$$

となります。例えば範囲 $-L < x < L$ において

$$f(-x) = -f(x)$$

となる関数を**奇関数**といいます。また,

$$f(-x) = f(x)$$

となる関数を**偶関数**といいます。 \cos は奇関数, \sin は偶関数なので, 式 (124) は奇関数であり, 範囲 $-L < x < L$ で積分すると

$$a_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \cos \frac{n\pi x}{L} dx = 0$$

となるので, a_n 項が消えて, フーリエ級数展開は

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (126)$$

となります。これを**フーリエサイン級数**といいます。フーリエサイン級数のフーリエ係数は

$$b_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \sin \frac{n\pi x}{L} dx \quad (127)$$

になります。同様に式 (125) は偶関数で, 範囲 $-L < x < L$ で積分すると

$$b_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \sin \frac{n\pi x}{L} dx = 0$$

となって、 b_n 項が消えて、フーリエ級数展開は

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos \frac{n\pi x}{L} \quad (128)$$

となります。これを**フーリエコサイン級数**といいます。フーリエコサイン級数のフーリエ係数は

$$a_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \cos \frac{n\pi x}{L} dx \quad (129)$$

となります。

10.3 複素フーリエ級数展開

周期が 2π のフーリエ級数展開の一般式は

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \sin nx)$$

でした。ここでオイラーの公式から

$$\cos nx = \frac{e^{inx} + e^{-inx}}{2} \quad \sin nx = \frac{e^{inx} - e^{-inx}}{2i}$$

を一般式に代入すると

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \sin nx) \\ &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \frac{e^{inx} + e^{-inx}}{2} + b_n \frac{e^{inx} - e^{-inx}}{2i} \right) \\ &= \frac{a_0}{2} + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \left(a_n + \frac{b_n}{i} \right) e^{inx} + \left(a_n - \frac{b_n}{i} \right) e^{-inx} \right\} \\ &= \frac{a_0}{2} + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ (a_n - b_n i) e^{inx} + (a_n + b_n i) e^{-inx} \right\} \end{aligned}$$

ここで、フーリエ係数を

$$c_0 = \frac{a_0}{2} \quad c_n = \frac{1}{2} (a_n - b_n i) \quad c_{-n} = \frac{1}{2} (a_n + b_n i)$$

とおくと、

$$f(x) = c_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (c_n e^{inx} + c_{-n} e^{-inx})$$

さらに、 c_0 もまとめて

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{inx} \quad (130)$$

とすることができます。 c_{-n} は

$$c_{-n} = \overline{c_n}$$

と複素共役の関係です。 e^{inx} は複素平面において、半径 1 の単位円に対応し、実軸は $\cos nx$ 、虚軸は $\sin nx$ に対応しています。

このフーリエ級数展開は関数 $f(x)$ を

$$\{1, e^{ix}, e^{-ix}, e^{i2x}, e^{-i2x}, \dots, e^{inx}, e^{-inx}, \dots\}$$

という基本周波数の整数倍の波の重ね合わせであり、三角関数と同様に直交関係にあります。直交関係になるかどうかは内積が 0 になるかどうかでわかります。複素数の内積は

$$z \cdot z = z \bar{z} = \bar{z} z = (x + yi)(x - yi) = x^2 + y^2 \quad (131)$$

です。複素関数 $f(x), g(x)$ の内積も同様に、

$$(f, g) = \int_a^b \overline{f(x)} g(x) dx$$

となります。 e^{imx} と e^{inx} の内積は

$$\int_0^{2\pi} \overline{e^{imx}} e^{inx} dx = \int_0^{2\pi} e^{-imx} e^{inx} dx = \int_0^{2\pi} e^{i(n-m)x} dx$$

となります。ここで $m \neq n$ のとき

$$\int_0^{2\pi} e^{i(n-m)x} dx = \left[\frac{1}{i(n-m)} e^{i(n-m)x} \right]_0^{2\pi} = \frac{1}{i(n-m)} (1 - 1) = 0$$

となって、この積分は 0 となり、直交関係であることがわかります。一方、 $m = n$ のとき

$$\int_0^{2\pi} e^{i(n-m)x} dx = \int_0^{2\pi} e^0 dx = \int_0^{2\pi} 1 dx = [x]_0^{2\pi} = 2\pi$$

となります。よって、これらの関数のノルムはすべて $\sqrt{2\pi}$ となります。次に複素数のフーリエ係数を求めます。式 (130) を展開すると

$$f(x) = \dots + c_{-n} e^{-inx} + \dots + c_{-2} e^{-i2x} + c_{-1} e^{-ix} + c_0 + c_1 e^{ix} + c_2 e^{i2x} + \dots + c_n e^{inx} + \dots$$

となります。 e^{inx} の項のみを取り出すには $f(x)$ に e^{-inx} をかけて積分します。

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} f(x) e^{-inx} dx &= \\ &\dots + c_{-n} \int_0^{2\pi} e^{-i2nx} dx + \dots \\ &+ c_{-1} \int_0^{2\pi} e^{-i(n+1)x} dx + c_0 \int_0^{2\pi} e^{-inx} dx + c_1 \int_0^{2\pi} e^{-i(n-1)x} dx + \dots + c_n \int_0^{2\pi} 1 dx + \dots \end{aligned}$$

となって、 $e^{inx} \cdot e^{-inx} = 1$ から、残る項は $c_n e^{inx}$ となります。よって

$$c_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(x) e^{-inx} dx \quad (132)$$

となります。まとめると

$$f(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} c_n e^{inx} \quad c_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(x) e^{-inx} dx$$

となります。これが複素フーリエ級数展開の式です。また、周期が $2L$ の場合は、フーリエ級数展開のように

$$f(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} c_n e^{i \frac{n\pi x}{L}} \quad c_n = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(x) e^{-i \frac{n\pi x}{L}} dx$$

となります。

10.4 フーリエ変換

これまでのフーリエ級数展開，複素フーリエ級数展開は周期のある関数で展開するものです．これを周期のない関数でも対応できるようにします．まず，複素フーリエ級数展開

$$f(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} c_n e^{inx} \quad c_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(x) e^{-inx} dx$$

の係数を k の関数として $a(k)$ と表記すると

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} a(k) e^{ikx} \quad a(k) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(x) e^{-ikx} dx$$

となります． k は c_n の n に相当すると考えると，整数 ($k = \dots, -1, 0, 1, \dots$) の値なので，積分の区分求積法の区間の幅が 1 で，その高さが $a(k)$ ，面積は $a(k) \cdot 1$ に相当します．よって

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} a(k) e^{ikx} \cdot 1$$

と見なせます．ここで範囲 $0 \leq k \leq 1$ の区間を考えると，区間を n 等分すれば

$$f(x) = \left\{ a(0) \exp(0) + a\left(\frac{1}{n}\right) \exp\left(i\frac{1}{n}x\right) + a\left(\frac{2}{n}\right) \exp\left(i\frac{2}{n}x\right) + \dots + a(1) \exp(ix) \right\} \frac{1}{n}$$

さらに分割数を $n \rightarrow \infty$ の極限にすると，この和は積分となって

$$\begin{aligned} f(x) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ a(0) \exp(0) + a\left(\frac{1}{n}\right) \exp\left(i\frac{1}{n}x\right) + a\left(\frac{2}{n}\right) \exp\left(i\frac{2}{n}x\right) + \dots + a(1) \exp(ix) \right\} \frac{1}{n} \\ &= \int_0^1 a(k) e^{ikx} dk \end{aligned}$$

となります．これを一般区間 ($k \leq k_n \leq k+1$) で表すと

$$\begin{aligned} f(x) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left[a(0) \exp(0) + a\left(k + \frac{1}{n}\right) \exp\left\{i\left(k + \frac{1}{n}\right)x\right\} + a\left(k + \frac{2}{n}\right) \exp\left\{i\left(k + \frac{2}{n}\right)x\right\} + \dots + a(k+1) \exp\{i(k+1)x\} \right] \frac{1}{n} \\ &= \int_k^{k+1} a(k) e^{ikx} dk \end{aligned}$$

となって， $f(x)$ は k に関する関数 $a(k) e^{ikx}$ の積分となります．これを全区間にわたって足したものが $f(x)$ なので

$$\begin{aligned} f(x) &= \dots + \int_{-n}^{-n+1} a(k) e^{ikx} dx + \dots + \int_{-1}^0 a(k) e^{ikx} dx \\ &\quad + \dots + \int_n^{n+1} a(k) e^{ikx} dx + \dots \end{aligned}$$

よって

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} a(k) e^{ikx} dk \quad (133)$$

これを**フーリエ積分**といいます．フーリエ積分はフーリエ級数展開で k の値が離散だったものを，その間隔を無限小にして連続にしたものと考えることができます．この k は**波数**と呼ばれるもので区間 2π の波の数です． $k=1$ ならば周期 2π の波， $k=1/2$ なら周期 4π の波， $k=1/4$ なら周期 8π の波の成分が級数展開に加えられることになります．よって， k の間隔を小さくして，連続的なものに変えることで，関数 $f(x)$ の周期を無限大，つまり $-\infty < x < \infty$ に広げたと考えることができます．

次にフーリエ積分するための係数 $a(k)$ を求める必要があります． k を 0 以外の整数とすれば

$$\int_{-\pi}^{\pi} e^{ikx} dx = 0$$

となって、この性質から $a(k)$ の係数のみを選択的に取り出すことができました。ここで k の間隔を n 分割した場合は積分範囲を n 倍する必要があります。

$$\int_{-n\pi}^{n\pi} e^{i\frac{k}{n}x} dx = 0$$

さらに、分割数が無限大の場合は

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-n\pi}^{n\pi} dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\Delta k x} dx = 0$$

とすればよいことになります。よって、任意の k に対して、 $k \neq 0$ ならば

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\Delta k x} dx = 0 \quad (134)$$

よって $a(k)$ を取り出すには

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (135)$$

を計算することになります。例えば、区間の幅が $1/n$ の $f(x)$ を考えます。

$$f(x) = \left\{ a(0) \exp(0) + a\left(\frac{1}{n}\right) \exp\left(i\frac{1}{n}x\right) + a\left(\frac{2}{n}\right) \exp\left(i\frac{2}{n}x\right) + \cdots + a(1) \exp(ix) \right\} \frac{1}{n}$$

に、 $e^{-ikx/n}$ を掛けて、 $-n\pi$ から $n\pi$ までの積分を計算すると

$$\begin{aligned} \int_{-n\pi}^{n\pi} f(x) \exp\left(-i\frac{k}{n}x\right) dx &= \int_{-n\pi}^{n\pi} a\left(\frac{k}{n}\right) \exp\left(i\frac{k}{n}x\right) \exp\left(-i\frac{k}{n}x\right) \frac{1}{n} dx \\ &= \int_{-n\pi}^{n\pi} a\left(\frac{k}{n}\right) \frac{1}{n} dx \\ &= a\left(\frac{k}{n}\right) \frac{1}{n} [x]_{-n\pi}^{n\pi} \\ &= a\left(\frac{k}{n}\right) \frac{2n\pi}{n} \\ &= 2\pi a\left(\frac{k}{n}\right) \end{aligned}$$

ここで $n \rightarrow \infty$ の極限をとれば

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx = 2\pi a(k) \quad (136)$$

となって、結局

$$a(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (137)$$

となります。フーリエ積分と、その係数は

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} a(k) e^{ikx} dk \quad (138)$$

$$a(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (139)$$

となります。式 (138) を **フーリエ逆変換 (逆フーリエ変換)**，式 (139) を **フーリエ変換** といいます。これらの式は，係数 $1/2\pi$ を逆にしたもの

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} a(k) e^{ikx} dk$$

$$a(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx$$

もしくは両方に $1/\sqrt{2\pi}$ を掛けた

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} a(k) e^{ikx} dk$$

$$a(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx$$

と表すことも出来ます。

11. 付録5：ルジャンドル多項式，ルジャンドル陪関数，球面調和関数

11.1 ルジャンドル多項式 (ロドリゲスの公式)

$$P_0(x) = 1; \quad P_1(x) = \frac{1}{2} \frac{d}{dx} (x^2 - 1) = x; \quad p_2(x) = \frac{1}{2} (3x^2 - 1);$$

$$p_3(x) = \frac{1}{2} (5x^3 - 3x); \quad p_4(x) = \frac{1}{8} (35x^4 - 30x^2 + 3); \quad p_5(x) = \frac{1}{8} (63x^5 - 70x^3 + 15x);$$

11.2 ルジャンドル陪関数

次の式において $x = \cos(\theta)$ とします。

$$P_0^0(x) = 1;$$

$$P_1^0(x) = \cos \theta; \quad P_1^1(x) = \sin \theta;$$

$$P_2^0(x) = \frac{1}{2} (3 \cos 2\theta - 1); \quad P_2^1(x) = 3 \sin \theta \cos \theta; \quad P_2^2(x) = 3 \sin^2 \theta;$$

11.3 実数球面調和関数

$$y_0^0 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}};$$

$$y_1^{-1} = -\frac{\sqrt{3}y}{2\sqrt{\pi}}; \quad y_1^0 = \frac{\sqrt{3}z}{2\sqrt{\pi}}; \quad y_1^1 = -\frac{\sqrt{3}x}{2\sqrt{\pi}};$$

$$y_2^{-2} = \frac{\sqrt{15}yx}{2\sqrt{\pi}}; \quad y_2^{-1} = -\frac{\sqrt{15}yz}{2\sqrt{\pi}}; \quad y_2^0 = \frac{\sqrt{5}(3z^2 - 1)}{4\sqrt{\pi}}; \quad y_2^1 = -\frac{\sqrt{15}xz}{2\sqrt{\pi}}; \quad y_2^2 = \frac{\sqrt{15}(x^2 - y^2)}{4\sqrt{\pi}}$$

11.3.1 計算済み版

$$c_0 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} = 0.282095, \quad c_1 = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} = 0.488603, \quad c_2 = \frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}} = 1.092548, \quad c_3 = \frac{\sqrt{5}}{4\sqrt{\pi}} = 0.315392, \quad c_4 = \frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}} = 0.546274,$$

$$y_0^0 = c_0;$$

$$y_1^{-1} = -c_1 y;$$

$$y_1^0 = c_1 z;$$

$$y_1^1 = -c_1 x;$$

$$y_2^{-2} = c_2 y x;$$

$$y_2^{-1} = -c_2 y z;$$

$$y_2^0 = c_3 (3z^2 - 1);$$

$$y_2^1 = -c_2 x z;$$

$$y_2^2 = c_4 (x^2 - y^2)$$

参考文献

- [1] Ravi Ramamoorthi, Pat Hanrahan, 「An Efficient Representation for Irradiance Environment Maps」
<https://cseweb.ucsd.edu/~ravir/papers/envmap/envmap.pdf>
- [2] Peter-Pike Sloan, 「Stupid Spherical Harmonics (SH) Tricks」
<http://www.ppsloan.org/publications/StupidSH36.pdf>
- [3] Robin Green, 「Spherical Harmonic Lighting: The Gritty Details」
<http://silviojemma.com/public/papers/lighting/spherical-harmonic-lighting.pdf>
- [4] Asaf Pe'er, 「Angular Momentum in Quantum Mechanics」
http://www.physics.ucc.ie/~apeer/PY3102/Angular_momentum.pdf
- [5] 村上雅人, 「なるほど複素関数」
- [6] 村上雅人, 「なるほど微分方程式」
- [7] 村上雅人, 「なるほどフーリエ変換」
- [8] 村上雅人, 「なるほど量子力学 I」
- [9] 都筑卓司, 「なっとくする量子力学」
- [10] 都筑卓司, 「なっとくする物理数学」
- [11] 森弘之, 「2つの粒子で世界がわかる」
- [12] 竹内淳, 「高校数学でわかるシュレディンガー方程式」
- [13] 竹内淳, 「高校数学でわかる複素関数」
- [14] 竹内淳, 「高校数学でわかるフーリエ変換」
- [15] 原岡喜重, 「はじめての解析学」
- [16] 平山令明, 「はじめての量子化学」
- [17] 半場稔雄, 「つかえる特殊関数入門」
- [18] 今給黎 隆, 「テイラー、フーリエ、球面調和関数」 https://t-pot.com/program/88_SH/
- [19] EMAN, 「直交関数系」 <https://eman-physics.net/math/fourier04.html>
- [20] EMAN, 「原子の構造」 <https://eman-physics.net/quantum/atom.html>
- [21] 藤田将洋, 「球面調和関数の多項式表現」 <http://lucille.sourceforge.net/blog/images/shpoly.pdf>