

CG のための球面調和関数

mebiusbox software

2019 年 6 月 26 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
5	球面調和関数	10
6	照度環境マップの近似	12
7	付録A：関数の直交性	13
9	付録B：級数展開	15
	参考文献	16

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）、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>

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。

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

次に $0 \leq m \leq n$ から $-n \leq m \leq n$ の領域に拡張します。式 (59) 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、

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

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。

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 $P_{l,m}(\cos\theta)$ 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

$$\sqrt{\frac{2\ell+1}{2} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_{\ell,m} \quad (68)$$

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

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad (69)$$

よって、球面調和関数の正規化定数は

$$K_{\ell,m} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{2} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} \quad (70)$$

そして、球面調和関数 $Y_{\ell,m}$ は

$$Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = K_{\ell,m} e^{im\phi} P_{\ell,m}(\cos\theta) \quad (71)$$

となります。パラメータ ℓ, m は整数であり、 $\ell \geq 0$, $-\ell \leq m \leq \ell$ 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。

ここで、ルジャンドル陪関数 $P_{\ell,m}$ を $0 \leq m \leq \ell$ の範囲の関数

$$P_n^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_\ell(x) \quad (72)$$

とすると

$$P_m^m(x) = (-1)^m (2m-1)!! (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \quad (73)$$

$$P_{m+1}^m(x) = (2m+1)x P_m^m(x) \quad (74)$$

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

が得られます。また、正規化定数も

$$K_{\ell,m} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}} \quad (76)$$

とします。

球面調和関数は項 $e^{im\phi}$ があ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 $Y_{\ell,m}$ と実数球面調和関数 $y_{\ell,m}$ には次のような関係があります。

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

となります。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

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

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

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。

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} とおいて

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

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

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

となります。

7. 付録A：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

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

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

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

となって各係数の 2 乗の総和が得られます。

9. 付録 B：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。

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] 村上雅人, 「なるほど複素関数」
- [4] 村上雅人, 「なるほど微分方程式」
- [5] 村上雅人, 「なるほどフーリエ変換」
- [6] 村上雅人, 「なるほど量子力学 I」
- [7] 都筑卓司, 「なっとくする量子力学」
- [8] 都筑卓司, 「なっとくする物理数学」
- [9] 森弘之, 「2つの粒子で世界がわかる」
- [10] 竹内淳, 「高校数学でわかるシュレディンガー方程式」
- [11] 竹内淳, 「高校数学でわかる複素関数」
- [12] 原岡喜重, 「はじめての解析学」
- [13] 平山令明, 「はじめての量子化学」
- [14] 半場稔雄, 「つかえる特殊関数入門」
- [15] 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/
- [16] EMAN, 「直交関数系」 <https://eman-physics.net/math/fourier04.html>
- [17] EMAN, 「原子の構造」 <https://eman-physics.net/quantum/atom.html>
- [18] 藤田将洋, 「球面調和関数の多項式表現」 <http://lucille.sourceforge.net/blog/images/shpoly.pdf>