TIのグラフ電卓による球面調和関数の描画

梅野　善雄*

元 一関工業高等専門学校

1　球面調和関数

フーリエ級数の重要性については改めて述べるまででもない．不連続な点や微分可能ではない点を含む関数まで，無限回微分可能な三角関数で表すことができることは驚くべきことである．根底には，三角関数 $\sin\dfrac{n\pi x}{L}, \cos\dfrac{n\pi x}{L}$ が正規直交性を持つことがある．

一方，通常の数学の教科書では触れられていないが，同じような正規直交性をもつ関数に球面調和関数がある．この関数は，電子の軌道解析を考える中でシュレディンガー方程式の解として得られる関数であるが，三角関数と同じような正規直交性があり，量子力学のみならず，CG での光の反射等のライティングを考えるときに重要な関数である．

具体的には，球座標により次のような式で定義される．

$$Y_l^m(\theta,\phi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{l+\frac{1}{2}}\sqrt{\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\,P_l^m(\cos\theta)\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}$$

ここで，θ は z 軸からの角で $0 \le \theta \le \pi$，ϕ は x 軸からの角で $0 \le \phi \le 2\pi$ である．$P_l^m(x)$ はルジャンドルの培関数と呼ばれる関数で，ルジャンドルの多項式を

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l$$

とするとき，

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}}P_l(x)$$

で定義される．つまり，球面調和関数 Y_l^m は，高次導関数のさらなる高次導関数を含む複素関数である．

通常のグラフ描画ソフトでは関数を定義することすらできないが，数式処理機能があれば，上述の通りに定義することができる．さらに，絶対値や実部・虚部などを取ることで，複素関数を可視化することができる．

結論からいうと，TI-Nspire CX CAS では，この関数を定義して球座標を媒介変数表示することで球面調和関数を可視化することができる．TI-89Titanium では，曲面の媒介変数表示機能はないが，θ か ϕ のいずれかを定数とすることで，要するに断面を極座標モードで描画することができる．

参考 URL

(1) Maxima：　`http://yunavi.la.coocan.jp/maxima2g.html#spherical_harmo`

(2) gnuplot　：　`http://yunavi.la.coocan.jp/gnuplot3.html#spherical`

*[E-mail] umenoy@nifty.com,　　[URL]「数ナビの部屋」http://yunavi.la.coocan.jp/

2　グラフ電卓での定義

フリーの数式処理ソフト Maxima では球面調和関数を前述の通りに定義してグラフ描画することができるが，TI の数式処理機能では，高次導関数で定義される関数のさらなる高次導関数を求めようとする箇所でエラーが生じる．もともとは教育用の電卓であるので，そのエラーはやむを得ないと思われる．そこで，導関数の計算部分をまとめて次のように定義する．

(1) Define $phi(m,x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\cdot\pi}} \cdot e^{i\cdot m\cdot x}$

(2) Define $f(l,m,x) = \dfrac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}}\left((x^2-1)^l\right)$

(3) Define $\theta(l,m,x) = \dfrac{1}{2^l l!} \cdot (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \cdot \sqrt{l+\dfrac{1}{2}} \cdot \sqrt{\dfrac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \cdot (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \cdot f(l,m,x)$

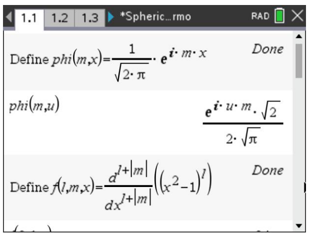
(4) Define $y(l,m,t,u) = \theta(l,m,\cos(t)) \cdot phi(m,u)$

この定義により，具体的な l, m に対して式が表示される．あとは，その絶対値や実部などを取り出すことでグラフを描画することができる．ただし，TI-Nspire では，上記で定義した関数名を 3Dgraph の関数定義の箇所で使用することができない．計算画面に表示される関数の式をメモするかコピーして，具体的な関数を直接入力する必要がある．1 変数関数の場合は，$y(l,m,t,u)$ をそのまま使用できる．

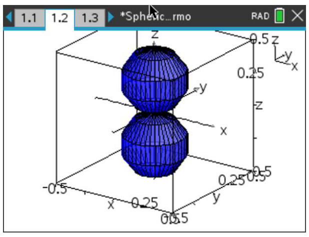
3　SphericalHarmo.tns

以下は，TI-Nspire CX CAS の場合です．

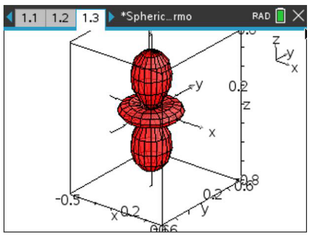
★ 同じ定義式で，TI-89Titanium でも極座標でのグラフが描画されます．



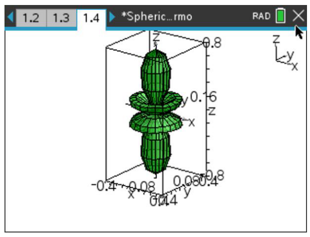
[1.1] 計算画面



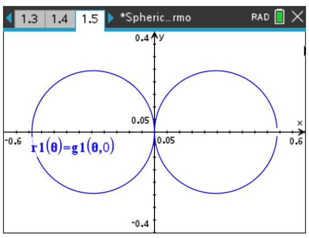
[1.2] $|y(1,0,t,u)|$



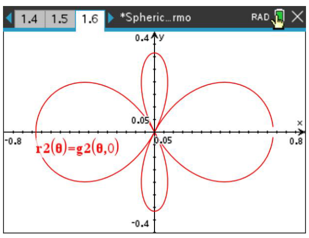
[1.3] $|y(2,0,t,u)|$



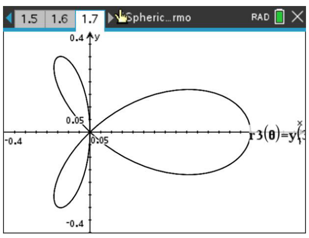
[1.4] $|y(3,0,t,u)|$



[1.5] $|y(1,0,\theta,0)|$



[1.6] $|y(2,0,\theta,0)|$



[1.7] $y(3,0,t,u)$

各ページの内容は下記の通りです.

[1.1] (計算画面) 上記の式の定義と計算例。

$$
\begin{aligned}
y(1,0,t,u) &= \frac{\sqrt{3}\cdot\cos(t)}{2\cdot\sqrt{\pi}} \\
y(2,0,t,u) &= \frac{\sqrt{5}\cdot\bigl(3(\cos(t))^2-1\bigr)}{4\cdot\sqrt{\pi}} \\
y(3,0,t,u) &= \frac{-\sqrt{7}\cdot\bigl((5(\sin(t))^2-2\bigr)\cdot\cos(t)}{4\sqrt{\pi}}
\end{aligned}
$$

[1.2] (グラフ画面) $|y(1,0,t,u)|$ のグラフ

$$
\begin{cases}
xp1(t,u) = \dfrac{\sqrt{3}\cdot|\cos(t)|}{2\cdot\sqrt{\pi}}\cdot\sin(t)\cdot\cos(u) \\
yp1(t,u) = \dfrac{\sqrt{3}\cdot|\cos(t)|}{2\cdot\sqrt{\pi}}\cdot\sin(t)\cdot\sin(u) \\
zp1(t,u) = \dfrac{\sqrt{3}\cdot|\cos(t)|}{2\cdot\sqrt{\pi}}\cdot\cos(t)
\end{cases}
$$

[1.3] (グラフ画面) $|y(2,0,t,u)|$ のグラフ

$$
\begin{cases}
xp2(t,u) = \dfrac{\sqrt{5}\cdot\bigl|3\cdot(\cos(t))^2-1\bigr|}{4\cdot\sqrt{\pi}}\cdot\sin(t)\cdot\cos(u) \\
yp2(t,u) = \dfrac{\sqrt{5}\cdot\bigl|3\cdot(\cos(t))^2-1\bigr|}{4\cdot\sqrt{\pi}}\cdot\sin(t)\cdot\sin(u) \\
zp2(t,u) = \dfrac{\sqrt{5}\cdot\bigl|3\cdot(\cos(t))^2-1\bigr|}{4\cdot\sqrt{\pi}}\cdot\cos(t)
\end{cases}
$$

[1.4] (グラフ画面) $|y(3,0,t,u)|$ のグラフ

$$
\begin{cases}
xp3(t,u) = \dfrac{1}{4}\cdot\sqrt{\dfrac{7}{\pi}}\cdot\Bigl|\bigl(5\cdot(\sin(t))^2-2\bigr)\cdot\cos(t)\Bigr|\cdot\sin(t)\cdot\cos(u) \\
yp3(t,u) = \dfrac{1}{4}\cdot\sqrt{\dfrac{7}{\pi}}\cdot\Bigl|\bigl(5\cdot(\sin(t))^2-2\bigr)\cdot\cos(t)\Bigr|\cdot\sin(t)\cdot\sin(u) \\
zp3(t,u) = \dfrac{1}{4}\cdot\sqrt{\dfrac{7}{\pi}}\cdot\Bigl|\bigl(5\cdot(\sin(t))^2-2\bigr)\cdot\cos(t)\Bigr|\cdot\cos(t)
\end{cases}
$$

[1.5] (グラフ画面) 極座標モードで，$|y(1,0,t,0)|$ のグラフ

$g1(t,u) = |y(1,0,t,u)|$ とするとき，$r1(\theta) = g1(\theta,0)$ $(0\le\theta\le 2\pi)$

[1.6] (グラフ画面) 極座標モードで，$|y(2,0,t,0)|$ のグラフ

$g2(t,u) = |y(2,0,t,u)|$ とするとき，$r2(\theta) = g2(\theta,0)$ $(0\le\theta\le 2\pi)$

[1.7] (グラフ画面) 極座標モードで，$y(3,0,t,0)$ のグラフ (絶対はつかない)

$g3(t,u) = y(3,0,t,u)$ とするとき，$r3(\theta) = g3(\theta,0)$ $(0\le\theta\le 2\pi)$