3次元無限区間に対する積分に関する一考察

3次元無限区間に対する積分に関する一考察

On the Integration for the Three-dimensional Infinite Intervals

石田俊正

Toshimasa ISHIDA

Four quadrature, the Gauss-Hermite, the good latice points, and two types of double exponential formulas, for the three-dimensional infinite intervals are compared with each other in respect of integrations of three different Gaussian-type functions. The double exponential formula utilizing the polar coordinate representation is superior to the other quadratures. It is noted, however, the center of the integration must match with that of the function evaluated when it is δ-function-like. The Gauss-Hermite quadrature reveals its poor performance when integrands is not similar to the product of polynomials and exp $(-r^2)$. The good latice points method is relatively satisfactory although the number of the latice points proposed is insufficient for high accuracy calculations. The direct product double exponential quadrature is suited to the case in which we desire high accuracy integral values at the cost of the number of evaluations of functions.

1．序

物理や化学において、3次元無限区間に関する積分

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,dx \tag{1.1}$$

がしばしば現れる。しかし、汎用の公式はないように思われる。ここでは、分子軌道計算において広範に使われているガウス型関数［1］

$$(x-x_0)^l(y-y_0)^m(z-z_0)^n\exp\left[-\alpha\left((x-x_0)^2+(y-y_0)+(z-z_0)^2\right)\right] \tag{1.2}$$

について、4つの方法の比較を試みた。ガウス型関数は積分の値が解析的に表されているので、厳密に正しい積分値との比較が容易である。次に、用いた4つの方法について簡単に言及する。

2．公　　式

1） 3次元直積ガウス－エルミート積分公式

3次元に関する公式について述べる前に、1次元のガウス－エルミート公式［2］について述べる。

区間 $(-\infty,\infty)$ における積分

$$I=\sum_{-\infty}^{\infty} f(x)\,w(x)\,dx \tag{2.1.1}$$

を考える。ここで、$w(x)$はあらかじめ定めた重み関数である。この積分に対する積分公式を

$$I_n=\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \qquad (x_0<x_1<\cdots<x_n) \tag{2.1.1}$$

とする。ここで、x_iを分点という。

分点数 n を決めたとき、$f(x)$が$(2n-1)$以下の任意の多項式に対して I と I_nが厳密に一致するように分点をエルミート多項式 $H_n(x)$の零点にとり、重み関数 $w(x)$として、$\exp(-x^2)$を用いるのが、(一次元) ガウスーエルミート公式である。

3次元の公式では、この式を3次元座標 x, y, z にそれぞれ適用し、

$$I_n=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} A_iA_jA_k f(x_i)f(y_j)f(z_k) \tag{2.1.3}$$

とする。

2) 優良格子点法 [2]

s次元単位超立方体上の積分

$$I=\int_{[0,\ 1]} f(x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_s)\,dx_1dx_2\cdots dx_s \tag{2.2.1}$$

に対する数値積分公式として、次のような形の公式を考える:

$$I_n=\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1} f\left(\left\{\frac{i}{n}g_1(n)\right\},\left\{\frac{i}{n}g_2(n)\right\},\ \cdots,\ \left\{\frac{i}{n}g_s(n)\right\}\right) \tag{2.2.2}$$

ここで、$g_i(n)\ (i=1,\ 2,\ \cdots,\ s)$は分点の数 n に対応して決まる整数値関数で、$\{x\}$は、x の小数部分を表す。この公式を、被積分関数$f(x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_s)$が条件

(1) $f(x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_s)$は次のような s 次元フーリエ級数に展開可能である。:

$$f(x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_s)=\sum_{h1=-\infty}^{\infty}\cdots\sum_{hs=-\infty}^{n-1} c_{h_1h_2\cdots h_s}\exp\left[2\pi i(h_1x_1+h_2x_2+\cdots h_sx_s)\right] \tag{2.2.3}$$

(2) $f(x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_s)$のフーリエ係数 $c_{h_1h_2\cdots h_s}$は次の不等式を満たす:

$$|c_{h_1h_2\cdots h_s}|\le C\left(\prod_{i=1}^{s} Max(1,|h_i|)\right)^{-\lambda}(\lambda>1,\ C>0) \tag{2.2.4}$$

を満たすときに用いると、n を決めたときに適当な $g_i(n)\ (i=1,\ 2,\ \cdots s)$ を選んで、

$$|I-I_n|\le c(s,\ \lambda)\frac{(\log n)^s}{n} \tag{2.2.5}$$

が成り立たせるようにできる。ここで、$c(s,\ \lambda)$は s と λ のみに依存する正の数である。この式による誤差評価が成立するように選んだ$g_1(n)$, $g_2(n)$, $\cdots$, $g_s(n)$を優良格子点といい、式(2.2.3)の公式による積分法を優良格子点法という。3次元の場合、$g_1(n)$, $g_2(n)$, $g_3(n)$がしらみつぶし法で調べられ、与えられている。

しかし、このままでは、条件を満たす被積分関数は少ないので、次のような変数変換

$$x_i=\phi_p(y_i)=\frac{(2p+1)!}{p!p!}\int_0^{y_i} u^p(1-u)^p du \tag{2.2.6}$$

を用いて、

$$I=\int_{[0,\ 1]^s} f(\phi_p(y_1),\ \phi_p(y_2),\ \cdots,\ \phi_p(y_s))\,\phi_p'(y_1)\phi_p'(y_2)\cdots\phi_p'(y_s)\,dy_1dy_2\cdots dy_s \tag{2.2.7}$$

と変形する。この方法を使うと、被積分関数$f(x_1,x_2,\cdots,x_s)$に関して単位超立方体 $[0,\ 1]^s$上で

$$\frac{\partial^{j_1}}{\partial x_1^{j_1}}\frac{\partial^{j_2}}{\partial x_2^{j_2}}\cdots\frac{\partial^{j_s}}{\partial x_s^{j_s}}f(x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_s) \qquad (0\le j_1,\ j_2,\ \cdots,\ j_s\le p) \tag{2.2.8}$$

が存在して連続ならば、変換後の関数

$$f(\phi_p(y_1),\ \phi_p y(_2),\ \cdots,\ \phi_p(y_s))\phi_p'(y_1)\phi_p'(y_2)\cdots\phi_p'(y_s) \tag{2.2.9}$$

を $\lambda=p$ として先ほどの条件を満たすようにできる。

以上の方法を3次元の場合に適用し、さらに、

$$X=\tan(\pi(x-\frac{1}{2})),\ \ Y=\tan(\pi(y-\frac{1}{2})),\ \ Z=\tan(\pi(z-\frac{1}{2})) \tag{2.2.10}$$

なる変換を行い、積分区間を $(-\infty,\infty)$ に変更している。

(3)　3次元直積二重指数関数公式［3］

これについてもまず、1次元の場合について述べる。

この公式は、全無限区間 $(-\infty,\infty)$ のに対して台形公式がきわめて精度の高い積分値を与えることに基づいている。積分

$$I=\int_a^b f(x)\,dx \tag{2.3.1}$$

を求めるのに、$\phi(u)$ を $a=\phi(-\infty)$, $b=\phi(\infty)$ を満たす単調増大する解析関数として、この積分に変数変換

$$x=\phi(u) \tag{2.3.2}$$

をほどこし、刻み副 h の台形公式を適用すれば、公式

$$I_h=h\sum_{i=-\infty}^{\infty} f(\phi(nh))\phi'(nh) \tag{2.3.3}$$

が得られる。$|f(\phi(u)\phi'(u)|$ は $|u|$ の増大とともに減少するので、実際の計算では有限の上下限で打ち切る：

$$I_h^{(n)}=h\sum_{i=n_-}^{n_+} f(\phi(ih))\phi'(ih)),\qquad n=n_-+n_++1 \tag{2.3.4}$$

ここで、積分を無限和で近似したための誤差と、無限和を有限和で近似したための誤差が生じる。この両誤差を等しくするという条件のもとで、誤差を分点数の関数として最も急激に減少するのは被積分関数が

$$|f(\phi(u))\phi'(u)|\approx \exp\ [-a\exp(b|u|)],\ \ |u|\to\infty \tag{2.3.5}$$

の形で減衰するように $\phi(u)$ を選ぶときであること［3］から、無限区間にもこれを適用し、

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,dx \approx \frac{\pi}{2}\sum_{i=n_-}^{n_+} f(\sinh(\frac{\pi}{2}\sinh ih))\cosh(ih))\cosh(\frac{\pi}{2}\sinh(ih)) \tag{2.3.6}$$

$$x=\sinh(\frac{\pi}{2}\sinh(u)) \tag{2.3.7}$$

この1次元無限区間の公式を3次元にそのまま拡張するのである。

(4)　極座標表示による二重指数公式＋ガウスールジャンドル公式＋台形公式の併用

まず、求める3次元積分

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} f(x,\ y,\ z)\,dxdydz \tag{2.4.1}$$

を極座標を使って

$$I=\int_0^{\infty} r^2dr\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi} d\phi g(r,\ \theta,\ \phi) \tag{2.4.2}$$

と変形し、ϕ については周期関数なので、台形公式を、θ についてはガウスールジャンド公式［2］を、r については半無限区間に関する二重指数関数公式［2］をそれぞれ適用する。θ についてはガウスールジャンドル公式よりも有限区間に関する二重指数関数公式を用いたほうが精度がよいと考

えられるが、ガウスールジャンドル公式の簡便さと関数に特異性がないことを考慮し、ガウスールジャンドル公式を用いた。１次元有限区間に関する積分

$$I=\int_{-1}^{1} g(x)\,dx \tag{2.4.3}$$

における台形公式は、

$$I_n=\frac{2}{n}\sum_{i=1}^{n} g(-1+2\frac{i}{n}) \tag{2.4.4}$$

となり、ガウスールジャンドル公式は、

$$I_n=\sum_{i=1}^{n} A_i g(x_i) \tag{2.4.5}$$

となる。ここで、分点 x_iはルジャンドル多項式 $P_m(x)$の零点で与えられる。また、１次元半無限区間に関する積分

$$I=\int_{0}^{\infty} g(x)\,dx \tag{2.4.6}$$

に対して変数 x に

$$x=\phi(u)=\exp(2\sinh(u)) \tag{2.4.7}$$

という変換を行い、台形公式を適用して、

$$I_n=2h\sum_{i=n-}^{n+} g(\exp\,[2\sinh(ih)])\exp\,[2\sinh(ih)]\,\cosh(ih) \tag{2.4.8}$$

という二重指数関数公式が得られる。ただし、被積分関数が $x\rightarrow\infty$のとき $f(x)\sim f_1(x)\exp(-x)$ ($f_1(x)$は代数関数) のように減衰するときには、

$$x=\exp(u-\exp(-u)) \tag{2.4.9}$$

なる変換を行い、$x\rightarrow\infty$のとき $f(x)\sim f_1(x)\exp(-x^2)$のように減衰するときには、

$$x=\exp(\frac{1}{2}u-\exp(-u)) \quad 2.4.10)$$

なる変換を行って、二重指数関数公式を導く。

3．計　　算

以上の４つの公式を用いて1s ガウス型関数

$$\exp\,[-\alpha(x^2+y^2+z^2)] \tag{3.1}$$

デカルト型6h ガウス型関数の一つ

$$x^2y^2z^2\exp\,[-\alpha(x^2+x^2+z^2)] \tag{3.2}$$

および中心を10ずらした1s ガウス型関数

$$\exp\,[-\alpha((x-10)^2+y^2+z^2)] \tag{3.3}$$

について積分値を計算した。α は定数である。α を1000, 100, 10, 1, 0.1, 0.01, 0.001として積分値を求めた。実際には、それぞれを規格化した

$$(\frac{\alpha}{\pi})^{\frac{3}{2}}\exp\,[-\alpha(x^2+y^2+z^2)] \quad (3.1)'$$

$$\frac{8\alpha^{\frac{9}{2}}}{\pi^{\frac{3}{2}}}x^2y^2z^2\exp\left[-\alpha(x^2+y^2+z^2)\right] \qquad (3.2)'$$

$$\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}}\exp\left[-\alpha((x-10)^2+y^2+z^2)\right] \qquad (3.3)'$$

について求めた。

極座標DE公式による方法では、θ方向、π方向の分点数をそれぞれ16、20とした。

ガウスーエルミート法以外では、プログラムが収束かどうか判断している精度の値が得られたところで計算を打ち切るようになっている。この方法は、関数が局所的なところでのみ値をもつような、δ関数に近い場合や関数がひじょうに広がっていて収束が遅くなるようなときには必ずしも適していないが、普通に積分のプログラムを使うときにはこの点を修正することはまずないと思われるので、そのままにした。収束の判断のしきい値を1×10^{-15}まで10分の1刻みで変えて用いた。

計算は筆者の研究室のワークステーションNWS—1860(ソニー製)と静岡大学情報処理センターのワークステーションHP—9000／720（ヒューレットパッカード製）を用いた。

プログラムは(4)については参考文献［2］のプログラムをほぼそのまま用いた。(1)については、［2］のプログラムに、17次から72次の分点と重みをデータ文で加え、1次元で72次まで計算できるように直した。(4)については積分が実行できるように［2］の二重指数関数公式とガウスルジャンドル公式を組み合わせ、台形公式を加え、極座標表示による積分ができるようにした。(3)については参考文献［3］に基づき自作した。

4．結果と考察

表1、表2、表3に、式(3.1)'、(3.2)'、(3.3)'の数値積分に要した計算回数を示した。公式の(1)、(2)、(3)、(4)を以後ガウスーエルミート法、優良格子点法、直積DE法、極座標DE法とよぶこととする。表中でもこの名称で記している。各表の(a)、(b)、(c)は相対誤差がそれぞれ1×10^{-2}、1×10^{-5}、1×10^{-10}になるまでの計算回数を表している。NCは各方法の最大回数でも誤差内の値が求まらなかったことを示し、*はプログラムが収束していると誤って判断して途中で計算を打ち切った場合を示す。また、表2で直積DE法の計算回数が(　)でくくられているのは、中心をx、y、z方向に1.0ずらして計算した場合を示している。式(3.2)の関数はx、y、z軸上で0であるため、そのままであると、プログラムが収束していると誤って判断して途中で計算を打ち切ってしまう（*の場合）からである。最大計算回数は、ガウスーエルミート法では$72^3=373248$回、優良格子点法では21467回、直積DE法では、$1217^3=18024853$回、極座標DE法では$1281\times16\times20=4099220$回である。この制限は、ガウスーエルミート法では分点と重みを生成するプログラム［4］が正常に動作したのが72次までであったことによるものであり、優良格子点法ではしらみつぶしで得られている分点数がこの数までであることによるものであり、DE法では主に分点の浮動小数点表示が可能な範囲によるものである。

表1、表2ともに、系の対称性を考慮している極座標DE法が少ない計算回数で精度のよい答を出していることがわかる。1s関数、6h関数の積分いずれの場合にも、$\alpha=1000$から$\alpha=0.001$という10^6の範囲にわたって数千から数万の計算回数で1×10^{-10}の精度で積分値が得られていることがわかる。ここにあげたαのうち特定な値についてはこの方法より優れている方法もあるが、表1の半数以上、表2、表3の大部分の場合最も少ない回数で誤差内の計算値が得られていることからも全般的に優れているといえよう。中心のずれた関数の積分(表3)では、αの小さい、すなわち、広がった関数についてのみにしか結果が得られないが、結果が得られたものについては計算回数が数千か

表1 式(3.1)'の積分を求めるのに要する計算回数

(a) 1×10^{-2}の誤差内で計算値を求めるのに要した計算回数

α	ガウスーエルミート法	優良格子点法	直積DE法	極座標DE法
1000	NC	*	4930	6080
100	NC	NC	1817	2880
10	32768	NC	485	3520
1	8	4756	543	4160
0.1	17576	6713	93419	7360
0.01	NC	866	174235	9920
0.001	NC	NC	2029781	32960

(b) 1×10^{-5}の誤差内で計算値を求めるのに要した計算回数

α	ガウスーエルミート法	優良格子点法	直積DE法	極座標DE法
1000	NC	*	4930	13760
100	NC	NC	2791	7360
10	287496	NC	886	4160
1	8	NC	5614	6080
0.1	195112	NC	105891	8000
0.01	NC	NC	174235	9920
0.001	NC	NC	2029781	32960

(c) 1×10^{-10}の誤差内で計算値を求めるのに要した計算回数

α	ガウスーエルミート法	優良格子点法	直積DE法	極座標DE法
1000	NC	*	9843	16320
100	NC	NC	35926	16320
10	NC	NC	11013	9920
1	8	NC	51759	8000
0.1	NC	NC	919491	16960
0.01	NC	NC	158541	18240
0.001	NC	NC	17161578	43200

注）NCは各方法の最大回数でも誤差内の値が求まらなかったことを示し、＊はプログラムが収束していると誤って判断して途中で計算を打ち切った場合を示す。

表2　式(3.2)'の積分を求めるのに要する計算回数

(a) 1×10^{-2}の誤差内で計算値を求めるのに要した計算回数

α	ガウス—エルミート法	優良格子点法	直積DE法	極座標DE法
1000	NC	*	*	11200
100	NC	*	*	4800
10	97336	NC	(592111)	2880
1	8	9152	(33894)	5440
0.1	54872	NC	(111270)	13120
0.01	NC	866	(12661814)	29760
0.001	NC	NC	*	58560

(b) 1×10^{-5}の誤差内で計算値を求めるのに要した計算回数

α	ガウス—エルミート法	優良格子点法	直積DE法	極座標DE法
1000	NC	NC	*	11200
100	NC	NC	*	4800
10	NC	NC	(592111)	6080
1	8	NC	(43725)	5440
0.1	NC	NC	(111270)	13120
0.01	NC	NC	(12661814)	29760
0.001	NC	NC	*	58560

(c) 1×10^{-10}の誤差内で計算値を求めるのに要した計算回数

α	ガウス—エルミート法	優良格子点法	直積DE法	極座標DE法
1000	NC	*	*	26560
100	NC	*	*	11200
10	NC	NC	(592111)	8640
1	8	NC	(479289)	6080
0.1	NC	NC	(1003939)	13120
0.01	NC	NC	(12995421)	29760
0.001	NC	NC	*	58560

注) NCは各方法の最大回数でも誤差内の値が求まらなかったことを示し、*はプログラムが収束していると誤って判断して途中で計算を打ち切った場合を示す。直積DE法の計算回数が(　)でくくられているのは、中心をx、y、z方向に1.0ずらして計算した場合を示している。

表3　式(3.3)'の積分を求めるのに要する計算回数

(a)　1×10^{-2}の誤差内で計算値を求めるのに要した計算回数

α	ガウスーエルミート法	優良格子点法	直積 DE 法	極座標 DE 法
1000	NC	*	*	*
100	NC	*	*	*
10	262144	NC	*	*
1	373248	NC	*	*
0.1	NC	12388	6773327	24640
0.01	NC	21467	171016	9920
0.001	NC	NC	2043470	32960

(b)　1×10^{-5}の誤差内で計算値を求めるのに要した計算回数

α	ガウスーエルミート法	優良格子点法	直積 DE 法	極座標 DE 法
1000	NC	*	*	*
100	NC	*	*	*
10	NC	NC	*	*
1	NC	NC	*	*
0.1	NC	NC	6773327	*
0.01	NC	NC	171016	9920
0.001	NC	NC	2043470	32960

(c)　1×10^{-10}の誤差内で計算値を求めるのに要した計算回数

α	ガウスーエルミート法	優良格子点法	直積 DE 法	極座標 DE 法
1000	NC	*	*	*
100	NC	*	*	*
10	NC	NC	*	*
1	NC	NC	*	*
0.1	NC	NC	6773327	*
0.01	NC	NC	1497980	*
0.001	NC	NC	17094888	43200

注) NC は各方法の最大回数でも誤差内の値が求まらなかったことを示し、＊はプログラムが収束していると誤って判断して途中で計算を打ち切った場合を示す。

ら数万にとどまっている。α が大きい場合、すなわち、関数が δ 関数に近い場合には、関数の値が大きくなるところが分点に考慮されにくくなるため、プログラムが計算を途中で打ち切ってしまっているので、結果が得られないのである。このことから、関数の中心がどこにあるかがわかっている場合には積分の中心と関数の中心を一致させることが重要であると考えられる。

極座標DE法で注意してほしいのは、積分の中心と関数の中心とが一致している球対称関数の場合である。関数が球対称の場合（表1）に、この方法が最も優れているはずなのに、優良格子点法や直積DE法より計算回数が多くなっている場合がかなりある。この計算では、θ 方向、ϕ 方向の分点がそれぞれ16、20となっているが、当然ながら、各方向の分点をともに1としても同じ精度の解が得られるので、表の16×20＝320分の1の計算回数でよい。このことを考慮すると式(3.1)'の場合、特殊な $\alpha=1$ のときを除き、最も効率的な積分法となる。

ガウスーエルミート法は、式(3.1)'、(3.2)'の $\alpha=1$ の場合を除き、収束する解が得られない場合が多く、指定誤差内で解が求められた場合にも計算回数が他の方法より多い。このような意味で、ガウスーエルミート法はよい積分とはいい難い。なお、表1、表2で、ガウスーエルミート法が $\alpha=1$ で8回で正解が求まっているのは、この場合には、式(2.1.1)で $f(x)=1$ ととったのと等価で $I=I_n$ が厳密に成立するためである。他の α の値ではこの関係が成立しないためよい結果を与えていない。また、中心のずれている場合（表3）に計算回数がひじょうに大きくなってしまっていることからもわかる。関数が（多項式）$\times\exp(-r^2)$ の形でかけるような場合以外には有効でないであろうと結論される。このことは参考文献［3］においても指摘されている。

優良格子法はどの積分でも 1×10^{-2} の誤差内で求められた場合には計算回数がこの4つの方法の中で最も少ない場合（表1（a）$\alpha=0.1$、0.01、表2（a）$\alpha=0.01$、表3（a）$\alpha=0.1$）があるが、得られている格子点数の絶対数が少ないので、有効な方法となり得ていない。さらに精度を要求される場合には、しらみつぶしによる優良格子点の探索が必要である。

面積DE法は、式(3.1)'、(3.2)'の積分で極座標DE法に劣るのは当然としても多くの場合に 1×10^{-10} の精度が求められていることから、計算回数が多くてもよいから積分を精度よく求めたい場合に適していることがわかる。ただし、極座標DE法が特に有利とはいえない式(3.3)'の積分結果を見ても計算回数は極座標DE法より多いので、計算回数的には極座標DE法に劣る傾向があると考えられる。また、x、y、z 軸上で0であるような関数（式3.2'）の積分は要注意である。さきほど指摘したように、x、y、z 軸上で0であると、プログラムが収束していると誤って判断して途中で計算を打ち切ってしまう（＊の場合）からである。そのようなときには積分の中必と関数の中心をずらさないと意味のある結果が得られない。

結論的には、極座標DE法が最も優れていると思われるが、関数が δ 関数的な場合には、大きな値をとる点付近に積分の中心をとることが必要であることがわかる。

謝　　辞

静岡大学情報センターのHP9000／720を使わせていただいたことに感謝する。また、教養部の松山先生には、ガウス積分法の分点と重みを計算するプログラム（参考文献［4］）をいただいたことに感謝する。

参 考 文 献

［1］たとえば、藤永茂「分子軌道法］1980年、岩波書店
［2］渡部力、名取亮、小国力「Fortran 77による数値計算ソフトウェア」1989年、丸善
［3］P. J. Davis/P. Rabinowitz著、森正武訳「計算機による数値積分法」訳者補遺1981年、日本

コンピュータ協会
[4] T. S. Cheon, 1982