

Hermite-Gauss の数値積分公式の分点と重率の決定*

山 下 真 一 郎** 佐 竹 誠 也***

Gauss 型の積分公式 $\int_a^b w(x)f(x)dx \approx \sum_{k=1}^n w_k f(x_k)$ において、 $a=-\infty$, $b=\infty$, $w(x)=e^{-x^2}$ としたものは、Hermite-Gauss の積分公式とよばれる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx = \sum_{k=1}^n w_k f(x_k) + E$$

の分点 x_k は、 n 次の Hermite 多項式 $H_n(x)$ の 0 点であり、重率 W_k 、誤差 E は、それぞれ、

$$W_k = \frac{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}}{(H_{n+1}(x_k))^2}$$

$$E = \frac{n! \sqrt{\pi} f^{(2n)}(\xi)}{2 n (2n)!}, \quad |\xi| < \infty$$

である。

Hermite 多項式 $H_n(x)$ の 0 点の計算は Newton 法によって行なう。このときの初期値のとり方は、次のようにする。まず、 n の大きいときの漸近式、

$$H_{2n}(x) \approx (-1)^n (2n-1)!! e^{x^2/2}$$

$$\times \left[\cos(\sqrt{4n+1} \cdot x) + O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right) \right]$$

$$H_{2n+1}(x) \approx (-1)^n 2^{n+\frac{1}{2}} (2n-1)!! \sqrt{2n+1} e^{x^2/2}$$

$$\times \left[\sin(\sqrt{4n+3} \cdot x) + O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right) \right]$$

ここで、 $(2n-1)!! = (2n-1)(2n-3)\cdots 5 \cdot 3 \cdot 1$ から、おのれの、

$$x_k = \frac{1}{\sqrt{4n+1}} \cdot \frac{2k-1}{2} \cdot \pi \quad k=1, 2, \dots$$

$$x_k = \frac{1}{\sqrt{4n+3}} \cdot \pi \cdot k \quad k=1, 2, \dots$$

である。これは k が大きくなるとよくないので、 $k=1, 2, 3$ についてのみ用いて、 $k \geq 4$ のときは

$$x_k = 3x_{k-1} - 3x_{k-2} + x_{k-3}$$

$$k=4, 5, \dots, n$$

を使う。この式は、 x を k の関数とみなしたときの等間隔分点に対する 3 点の Lagrange 補間から導びいたものである。 k を増すにつれて新しく得られる x_k

をつぎつぎに利用して、補間の点数をふやせば、さらによい値が得られそうであるが、 x_k は、ほぼ k の一次式になっているので、この場合には、むしろ 2 点の補間でもよく、むやみに点数を増すことは得策でない。

関数値の計算には、漸化式

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x$$

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$$

を用いる。また、 $H'_n(x)$ の値は、

$$H'_n(x) = 2xH_n(x) - H_{n+1}(x)$$

から求めればよい。

この計算は、FACOM-231 によって行なった。プログラムの大部分は印刷用のルーチンである。

計算結果のチェックには、 $\sum_{k=1}^n W_k = \sqrt{\pi}$ の関係を用い、また、サンプリング調査として、 x_k の末尾を変化させたときの $H_n(x)$ の符号変化を調べた。いずれも結果は満足すべきものである。結果の表の中で () の中は 10 の指数を表わす。たとえば、 $N=3, i=3$ のときの $W_i = 2.954 \dots 38901 (-1)$ は $W_i = 2.954 \dots 38901 \times 10^{-1}$ の意味である。

```
begin comment reallength := 45, integerlength:
      := 5;
integer n, c, k, i, K;
real x, dx, fo, fl, t, W, N, SQPI;
Boolean B, Q;

procedure crlf;
begin CRLF; c := c+1; end;

procedure PRIntx (I, J);
value I, J; integer I, J;
begin integer i, j;
i := 10↑J; j := I := I - (I div i) * i;
for i := 0, i+1 while j ≠ 0 do j := j div 10;
if I > 0 then Space (J-i+1)
else begin Space (J-i); Printstring
(' - ') end;
Printx (I, i);
end of PRIntx;
```

* Computation of the Abscissas and Weight Coefficients for the Hermite-Gaussian Quadrature Formulae by Shin-ichiro Yamashita (FACOM Computing and Data Processing Center), and Seiya Satake (Musashi Institute for Technology)

** ファコム株式会社

*** 武藏工業大学

```

procedure PRint (x, K);
  value x,K; real x; integer K;
begin
procedure PRint (A) Integralpart: (U) Decimal-
  part:(K);
value A,U,K; real A; integer U,K;
begin integer I, J, N; U:=U+1;
J:=N:=if A>=0.0 then entier (A) else
  entier(A)+1;
  for I:=0, I+1 while J<0 do J:=J div 10;
if I<U then
  begin if A>=0.0 then Space (U-I) else
    begin Space (U-I-1); Printstring ('-')
      end; Printx(N,I) end else Printx(N,U);
    Printstring ('.');
for J:=1 step 1 until K do
  begin A:=(A-N) *1000000.0; N:=entier(A):
    Printx(N, 5); Space(1) end
end of Print;

real a; integer i;
a:=abs(x); i:=0;
LL: if a=0.0 then i:=-51 else
  if a>10.0 then begin i:=i+1; a:=0.1*a; go
    to LL end
  else MM: if a<1.0 then begin i:=i-1; a:=
    10.0*a; go to MM end;
if x<0.0 then a:=-a;
  PRint(a, 1, K); Printstring ('('); Printx(i,2);
  Printstring(')');
end of PRint;

SQPI:=sqrt (3.1415926535897932384626433832795
  028841971693993751);
Readinteger(n); c:=0; N:=4.0;
for k:=n-1 step -1 until 2 do N:=N*k*2.0;
for n:=n step 1 until 100 do
begin K:=(n+1) div 2; Q:=K*2-n; N:=N
  *n*2.0;
begin array XX, WW [1:K];
Printstring('    i    N='); Printx(n, 2);
  Space(7);
Printstring('Abscissas (Xi)'); Space (31);
Printstring('Weights (Wi)'); crlf; crlf;
  for k:=1 step 1 until k do
begin if k<4 then
  begin if Q then x:=3.14159 * (k-1)/sqrt(n+n
    +1.0)
    else x:=3.14159 * (k-0.5)/sqrt(n+n
    +1.0)
  end
  else x:=3.0 * (XX[k-1]+XX[k
    -2])+XX[k-3];
B:=true;
L: f0:=1.0; f1:=x+x;
  for i:=1 step 1 until n do
begin t:=2.0 * (x*f1-i*f0);
  f0:=f1; f1:=t;
end;
dx:=f0/(2.0*x*f0-f1); x:=x-dx;
if abs(dx)>10^-30 then go to L else
  if B then begin B:=false; go to L end;

if Q then
  begin if K=1 then Space(3) else
    Printx (K+1-k, 2); Printx(K-1+k, 2)
    end
  else begin Printx(K+1-k, 2);
    Printx(K+k, 2) end;

Space(1); PRint(x, 6); Space(1);
XX[k]:=x; WW[k]:=W :=N * SQPI/f1/f1;
PRint(W, 6); crlf;
  end k;
end;
crlf; crlf; crlf;
if c+n>50 then begin c:=0; LFEED; LFEED
  end;
end n;
  end of program;

Data n=2;

```

Calculated and Printed Results by FACOM-231

1 N = 28		Abscissae (x1)		Weights (w1)	
14	15	2.08667	30269	0.73268	69114
13	16	6.28285	52777	51289	72314
12	17	1.04333	31253	31253	43923
11	18	1.16533	76234	57619	61054
10	19	1.89236	0.98426	18450	4785
9	20	2.38579	98426	37615	12175
8	21	2.76779	53256	13593	12061
7	22	3.22111	20765	51760	24735
6	23	1.68913	42634	61679	18123
5	24	5.827	52939	35939	74643
4	25	2.35761	54243	68263	61949
3	26	6.59160	54243	67772	54013
2	27	1.28	6.72669	21286	68264
1	28	1.29	6.72669	21286	68264
1 N = 29		Abscissae (x1)		Weights (w1)	
14	15	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
13	16	0.47904	53639	49287	30190
12	17	1.23221	0.915	73248	30117
11	18	1.64662	50136	92132	82946
10	19	2.07018	10176	74061	0.92176
9	20	2.49858	56014	19450	24265
8	21	2.93588	55012	90126	44265
7	22	3.23164	0.911	92214	0.77574
6	23	7.24	3.84947	7922	13620
5	24	4.23247	62356	19126	35219
4	25	5.38667	55171	56351	98751
3	26	3.26	5.38667	55171	56351
2	27	5.99497	26946	63281	70376
1	28	6.72669	21286	68264	68264
1 N = 30		Abscissae (x1)		Weights (w1)	
15	16	2.01126	51654	88714	83515
14	17	6.93921	52523	0.77798	1.5567
13	18	1.41554	50136	92132	83946
12	19	1.82674	50136	92132	83946
11	20	2.24339	11316	61549	0.92176
10	21	2.66713	21245	13617	1.17064
9	22	3.09997	87313	78858	22374
8	23	3.50444	38731	53319	88632
7	24	4.18095	61283	81522	50169
6	25	5.26	4.18095	61283	81522
5	26	7.25	3.70074	31340	81126
4	27	5.26	5.26	70376	19709
3	28	5.26	5.26	64971	0.933
2	29	5.26	5.26	75511	83335
1	30	6.86354	52935	49287	30190
1 N = 31		Abscissae (x1)		Weights (w1)	
15	16	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
14	17	3.92547	73617	14231	10366
13	18	1.59195	52523	0.77798	1.5567
12	19	2.41231	70754	61549	0.92176
11	20	2.81168	0.911	92132	10557
10	21	3.26032	0.732	31340	13617
9	22	7.25	3.70074	31340	81126
8	23	5.26	5.26	70376	19709
7	24	5.26	5.26	64971	0.933
6	25	5.26	5.26	75511	83335
5	26	4.15687	17259	49287	30190
4	27	5.26	5.26	75511	83335
3	28	5.26	5.26	75511	83335
2	29	5.26	5.26	75511	83335
1	30	6.29249	67045	62660	21245
1 N = 32		Abscissae (x1)		Weights (w1)	
15	16	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
14	17	7.26	5.26	75511	83335
13	18	1.59195	52523	0.77798	1.5567
12	19	2.41231	70754	61549	0.92176
11	20	2.81168	0.911	92132	10557
10	21	3.26032	0.732	31340	13617
9	22	7.25	3.70074	31340	81126
8	23	5.26	5.26	70376	19709
7	24	5.26	5.26	64971	0.933
6	25	5.26	5.26	75511	83335
5	26	4.15687	17259	49287	30190
4	27	5.26	5.26	75511	83335
3	28	5.26	5.26	75511	83335
2	29	5.26	5.26	75511	83335
1	30	6.29249	67045	62660	21245
1 N = 33		Abscissae (x1)		Weights (w1)	
15	16	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
14	17	3.92547	73617	14231	10366
13	18	1.59195	52523	0.77798	1.5567
12	19	2.41231	70754	61549	0.92176
11	20	2.81168	0.911	92132	10557
10	21	3.26032	0.732	31340	13617
9	22	7.25	3.70074	31340	81126
8	23	5.26	5.26	70376	19709
7	24	5.26	5.26	64971	0.933
6	25	5.26	5.26	75511	83335
5	26	4.15687	17259	49287	30190
4	27	5.26	5.26	75511	83335
3	28	5.26	5.26	75511	83335
2	29	5.26	5.26	75511	83335
1	30	6.29249	67045	62660	21245
1 N = 34		Abscissae (x1)		Weights (w1)	
15	16	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
14	17	3.92547	73617	14231	10366
13	18	1.59195	52523	0.77798	1.5567
12	19	2.41231	70754	61549	0.92176
11	20	2.81168	0.911	92132	10557
10	21	3.26032	0.732	31340	13617
9	22	7.25	3.70074	31340	81126
8	23	5.26	5.26	70376	19709
7	24	5.26	5.26	64971	0.933
6	25	5.26	5.26	75511	83335
5	26	4.15687	17259	49287	30190
4	27	5.26	5.26	75511	83335
3	28	5.26	5.26	75511	83335
2	29	5.26	5.26	75511	83335
1	30	6.29249	67045	62660	21245
1 N = 35		Abscissae (x1)		Weights (w1)	
15	16	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
14	17	3.92547	73617	14231	10366
13	18	1.59195	52523	0.77798	1.5567
12	19	2.41231	70754	61549	0.92176
11	20	2.81168	0.911	92132	10557
10	21	3.26032	0.732	31340	13617
9	22	7.25	3.70074	31340	81126
8	23	5.26	5.26	70376	19709
7	24	5.26	5.26	64971	0.933
6	25	5.26	5.26	75511	83335
5	26	4.15687	17259	49287	30190
4	27	5.26	5.26	75511	83335
3	28	5.26	5.26	75511	83335
2	29	5.26	5.26	75511	83335
1	30	6.29249	67045	62660	21245