

Laguerre-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***

さきに「Gauss の数値積分公式の分点と重率の決定」を本誌 5 巻 4 号に掲載した。その続篇として、ここでは Gauss 型の積分公式 $\int_a^b w(x)f(x)dx \doteq \sum_{k=1}^n W_k f(x_k)$ において、 $a=0, b=\infty, w(x)=e^{-x}$ とおいたものを扱う。これは Laguerre の多項式に関係があるので、Laguerre-Gauss の積分公式という。この公式

$$\int_0^{\infty} e^{-x} f(x) dx = \sum_{k=1}^n W_k f(x_k) + E$$

の分点 x_k は n 次の Laguerre 多項式 $L_n(x)$ の 0 点であり、重率 W_k 、誤差 E は、

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

$$E = \frac{(n!)^2 f^{(2n)}(\xi)}{\{(2n)!\}^2}, \quad \text{ここに } 0 < \xi < \infty$$

である。

この公式の作成の主な仕事は、Laguerre 多項式、 $L_n(x)$ の 0 点の計算である。

計算は Newton 法で行なう。このときの初期値は次のようにしてきめる。まず、 n の大きいときの漸近式、

$$L_n(x) \cong \frac{e^{x/2}}{\sqrt{\pi} \sqrt{nx}} \left\{ \cos \left(2\sqrt{nx} - \frac{\pi}{4} \right) \right\}$$

から、だいたい

$$x_k \cong \frac{\pi^2 (k-0.25)^2}{4n}, \quad k=1, 2, \dots, n$$

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、この式によって求め、 $k \geq 4$ の場合には、

$$x_k = 3x_{k-1} - 3x_{k-2} + x_{k-3} \\ k=4, 5, \dots, n$$

を用いる。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 補間式になっている。 k の増すにつれて得られる新しい x_k の値をくりこんで、補間の点数を増せば、さらにより値が得

られそうであるが、 x_k は、ほぼ k の 2 次式になっているので、この場合には、3 点補間式が最も能率的である。

関数値の計算には、漸化式

$$L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = 1 - x$$

$$L_{l+1}(x) = (2l+1-x)L_l(x) - l^2 L_{l-1}(x)$$

を用いる。 $L_n'(x)$ の値は、

$$xL_n'(x) = (x-n-1)L_n(x) + L_{n+1}(x)$$

から計算すればよい。

```
begin comment reallength := 45,
integerlength := 5;
integer n, c, k, i;
real x, dx, f0, f1, t, W, N;
Boolean B;
Readinteger (n); c:=0; N:=1.0;
for k:=n-1 step -1 until 2 do N:=N*k;
for n:=n step 1 until 100 do
begin array XX, WW[1:n]; N:=N*n;
Printstring ('i N='); PPrint (n, 2); Space (7);
Printstring ('Abscissas (Xi)'); Space (32);
Printstring ('Weights (Wi)'); crlf; crlf;
for K:=1 step 1 until n do
begin if K<4 then x:=2.4674011*
(k-0.25)↑2/n
else x:=3.0*(XX[k-1]-XX[k-2])
+XX[k-3]; B:=true;
L:
f0:=1.0; W:=f1:=1.0-x;
for i:=1 step 1 until n do
begin t:=(i+i+W)*f1-i*i*f0;
f0:=f1; f1:=t;
end;
dx:=x*f0/((x-n-1)*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;
PPrint (k, 2); Space (2); PPrint (x, 6); Space (2);
f1:=f1/N; XX[k]:=x; WW[k]:=W
:=x/(f1*f1);
PPrint (W, 6); crlf;
```

* Computation of the Abscissas and Weight Coefficients for the Laguerre-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 *** 武蔵工大

```

end k;
crlf; crlf; crlf;
if c+n>50 then begin c:=0; LFEED; LFEED
end;
end n;
end of program;
Data n=2;
    
```

この計算は、FACOM-231で行なった。別掲のプログラムはその要点をあげたものである。プログラムのうち crlf, PPrintx (I, J), PPrint(X, K) は、それぞれ改行して行数 c を数える操作、整数 I を J 桁印

Calculated and Printed Results by FACOM-231

N	M	Abcissas (xi)	Weights (wi)
1	2	5.85786 4.3762 6.9049 5.1198 3.1127 5.7903 (-1)	8.23553 39057 32737 62200 42218 10524 (-1)
2	3	3.41421 3.5623 7.3095 0.8860 1.6887 2.4209 (0)	1.46844 60940 67262 37799 51761 89475 (-1)
1	3	4.15774 5.5678 3.4790 8.3311 5.3387 3.1282 (-1)	7.11093 00992 91730 15449 59019 11425 (-1)
2	2	2.29428 0.5602 7.9041 7.1982 2.0503 6.1359 (0)	2.78517 73356 28408 48861 44488 84567 (-1)
3	6	6.28994 5.0889 3.7479 1.9686 6.4157 6.5512 (0)	1.03892 96501 58613 57489 64920 40067 (-2)
1	4	3.22547 6.8961 9.3923 1.1800 3.6145 9.1043 (-1)	6.03154 10434 16336 01675 96602 38180 (-1)
2	1	1.41240 3.0591 0.6516 0.8123 3.0462 8.8167 (0)	3.87418 69243 77996 85641 42021 74280 (-1)
3	4	4.53662 0.8969 2.1127 3.6327 6.8951 (0)	1.50429 40489 70752 51876 13331 40534 (-2)
4	7	7.38781 0.7108 5.8117 5.6526 2.1243 8.1108 (0)	1.61175 86799 22048 45446 12675 73038 (-2)
5	1	1.26408 0.0844 2.7578 2.6594 1.3219 3.0656 (1)	2.33599 72365 77622 76911 43084 55158 (-3)
1	5	2.63560 3.1771 9.2409 1.0203 0.6174 3.3608 (-1)	5.21722 61058 20286 29472 86092 87024 (-1)
2	1	1.41240 3.0591 0.6516 0.8123 3.0462 8.8167 (0)	1.50429 40489 70752 51876 13331 40534 (-2)
3	4	4.53662 0.8969 2.1127 3.6327 6.8951 (0)	1.50429 40489 70752 51876 13331 40534 (-2)
4	7	7.38781 0.7108 5.8117 5.6526 2.1243 8.1108 (0)	1.61175 86799 22048 45446 12675 73038 (-2)
5	1	1.26408 0.0844 2.7578 2.6594 1.3219 3.0656 (1)	2.33599 72365 77622 76911 43084 55158 (-3)
1	5	2.63560 3.1771 9.2409 1.0203 0.6174 3.3608 (-1)	5.21722 61058 20286 29472 86092 87024 (-1)
2	1	1.41240 3.0591 0.6516 0.8123 3.0462 8.8167 (0)	1.50429 40489 70752 51876 13331 40534 (-2)
3	4	4.53662 0.8969 2.1127 3.6327 6.8951 (0)	1.50429 40489 70752 51876 13331 40534 (-2)
4	7	7.38781 0.7108 5.8117 5.6526 2.1243 8.1108 (0)	1.61175 86799 22048 45446 12675 73038 (-2)
5	1	1.26408 0.0844 2.7578 2.6594 1.3219 3.0656 (1)	2.33599 72365 77622 76911 43084 55158 (-3)
1	5	2.63560 3.1771 9.2409 1.0203 0.6174 3.3608 (-1)	5.21722 61058 20286 29472 86092 87024 (-1)
2	1	1.41240 3.0591 0.6516 0.8123 3.0462 8.8167 (0)	1.50429 40489 70752 51876 13331 40534 (-2)
3	4	4.53662 0.8969 2.1127 3.6327 6.8951 (0)	1.50429 40489 70752 51876 13331 40534 (-2)
4	7	7.38781 0.7108 5.8117 5.6526 2.1243 8.1108 (0)	1.61175 86799 22048 45446 12675 73038 (-2)
5	1	1.26408 0.0844 2.7578 2.6594 1.3219 3.0656 (1)	2.33599 72365 77622 76911 43084 55158 (-3)
1	7	1.93013 6.7656 0.3624 1.3838 2.4788 5.0038 (-1)	4.09318 35170 12737 02190 42088 00177 (-1)
2	3	3.02668 4.8973 2.9121 2.9034 5.1924 2.2174 (0)	4.11621 47496 71752 73264 37418 46345 (-1)
3	4	4.90056 3.6628 2.6418 5.6670 1.7143 2.8102 (0)	2.06335 14468 71603 96677 07614 96420 (-2)
4	8	1.04590 1.0459 6.2960 7.9108 1.8275 5.1233 (0)	1.07401 01432 89745 52213 13596 28430 (-3)
5	1	1.27341 8.0291 7.9781 3.7580 1.2542 1.5819 (1)	1.58654 64348 56420 12627 35622 32340 (-3)
6	1	1.93957 2.7862 2.6654 0.3117 1.2492 0.5763 (1)	3.17031 54789 95580 56227 13221 53653 (-5)
1	8	1.70279 6.3230 5.1009 9.9788 8.6185 6.6026 (-1)	3.62188 58324 16375 22920 52683 93757 (-1)
2	3	2.25108 6.6298 3.3799 1.2186 2.0202 3.5550 (0)	4.18786 78061 43459 56076 97858 13333 (-1)
3	4	4.26670 0.1702 0.7658 7.9360 7.1181 6.6968 (0)	1.75794 98603 71718 05699 65996 67767 (-1)
4	7	7.04590 5.4023 3.4465 6.9127 9.3524 2.6119 (0)	3.33434 82261 21565 15221 32534 93440 (-2)
5	1	1.57383 7.6010 1.6995 2.5740 5.8926 7.8003 (1)	2.79453 62382 24672 52493 89241 47928 (-3)
6	1	1.97183 7.6010 1.6995 2.5740 5.8926 7.8003 (1)	3.04650 67733 28213 58468 80181 08327 (-3)
7	0	2.26631 3.1738 4.8923 4.1057 6.0534 2.9791 (1)	1.08600 11798 71510 38161 50889 35915 (-9)

刷、実数 X の小数部を 5 K 桁印刷の procedure である。この procedure の本体はかなり長いので省略した。

計算結果のチェックとしては、 W_k については、 $\sum_{k=1}^n W_k \equiv 1$ の関係を確認、またサンプリング調査として、 x_k の末尾を変化させて、 $L_n(x)$ の符号の変化を調べた。いずれも良好な結果を得た。

結果の表の () の中は 10 の指数を表わす。たとえば、 $N=3, i=3$ の $W_i=1.038 \dots 067 (-2)$ は $W_i=1.038 \dots 067 \times 10^{-2}$ の意味である。

Table with 3 columns: N, Abscissas (Xi), Weights (Wi). Rows are numbered 1 to 23.

Table with 3 columns: N, Abscissas (Xi), Weights (Wi). Rows are numbered 1 to 21.

Table with 3 columns: N, Abscissas (Xi), Weights (Wi). Rows are numbered 1 to 22.

Table with 3 columns: N, Abscissas (Xi), Weights (Wi). Rows are numbered 1 to 17.

Table with 3 columns: N, Abscissas (Xi), Weights (Wi). Rows are numbered 1 to 18.

Table with 3 columns: N, Abscissas (Xi), Weights (Wi). Rows are numbered 1 to 19.

Table with 3 columns: N, Abscissas (Xi), Weights (Wi). Rows are numbered 1 to 17.

Table with 3 columns: N, Abscissas (Xi), Weights (Wi). Rows are numbered 1 to 18.

Table with 3 columns: N, Abscissas (Xi), Weights (Wi). Rows are numbered 1 to 19.

N = 25	Weights (Wt.)	Weights (Wt.)	Abscissas (Xi)	Abscissas (Xi)
1	5.67047	74.54	70.947	68.082
2	2.99010	88.58	68.851	50.785
3	7.35978	35.943	70.211	81.767
4	1.86215	180.36	24.364	119.10
5	4.17181	611.89	93.333	98.829
6	1.53052	388.86	39.543	33.713
7	8.12641	83.58	68.73	91.74
8	1.58261	103.58	68.73	91.74
9	2.00655	01.97	12.945	68.73
10	1.63465	20.222	91.11	68.56
11	9.76601	20.81	84.877	33.60
12	1.35460	0.9633	84.877	33.60
13	3.13682	27.925	39.925	36.732
14	4.80261	4.8226	04.204	97.851
15	2.81520	53.98	87.236	56.81
16	8.74284	13.79	31.06	81.54
17	1.18136	0.0034	97.292	75.372
18	8.27365	19.40	99.207	15.703
19	1.16888	17.115	42.765	06.599
20	1.31583	1.5000	59.125	50.014
21				
22				
23				
24				
25				

N = 25	Abscissas (Xi)	Abscissas (Xi)	Weights (Wt.)	Weights (Wt.)
1	5.67047	74.54	70.947	68.082
2	2.99010	88.58	68.851	50.785
3	7.35978	35.943	70.211	81.767
4	1.86215	180.36	24.364	119.10
5	4.17181	611.89	93.333	98.829
6	1.53052	388.86	39.543	33.713
7	8.12641	83.58	68.73	91.74
8	1.58261	103.58	68.73	91.74
9	2.00655	01.97	12.945	68.73
10	1.63465	20.222	91.11	68.56
11	9.76601	20.81	84.877	33.60
12	1.35460	0.9633	84.877	33.60
13	3.13682	27.925	39.925	36.732
14	4.80261	4.8226	04.204	97.851
15	2.81520	53.98	87.236	56.81
16	8.74284	13.79	31.06	81.54
17	1.18136	0.0034	97.292	75.372
18	8.27365	19.40	99.207	15.703
19	1.16888	17.115	42.765	06.599
20	1.31583	1.5000	59.125	50.014
21				
22				
23				
24				
25				

N = 26	Weights (Wt.)	Weights (Wt.)	Abscissas (Xi)	Abscissas (Xi)
1	1.38616	884.14	76.019	80.805
2	2.18867	3680.	62.984	353.57
3	2.68382	62.212	17.258	17.258
4	1.07912	34.164	25.680	78.817
5	4.86565	6.9448	92.179	71.794
6	1.74821	37.978	48.942	76.392
7	5.08498	30.368	31.312	59.193
8	1.15266	1.9897	89.609	77.429
9	3.07295	26.281	71.513	18.960
10	3.14195	63.253	59.245	89.265
11	2.15845	65.114	03.710	42.008
12	1.38047	24.176	36.678	7.084
13	2.13268	61.568	3.7205	24.798
14	3.20521	85.598	31.626	43.331
15	2.76249	41.506	07.936	81.662
16	3.20521	85.598	31.626	43.331
17	2.13268	61.568	3.7205	24.798
18	1.38047	24.176	36.678	7.084
19	2.15845	65.114	03.710	42.008
20	3.14195	63.253	59.245	89.265
21	3.07295	26.281	71.513	18.960
22	1.15266	1.9897	89.609	77.429
23	5.08498	30.368	31.312	59.193
24	1.74821	37.978	48.942	76.392
25	4.86565	6.9448	92.179	71.794
26	1.07912	34.164	25.680	78.817
27	2.68382	62.212	17.258	17.258
28	2.18867	3680.	62.984	353.57
29	1.38616	884.14	76.019	80.805
30				
31				
32				
33				
34				
35				
36				

N = 24	Abscissas (Xi)	Abscissas (Xi)	Weights (Wt.)	Weights (Wt.)
1	5.91396	59.181	59.797	62.857
2	1.45736	10.514	20.437	90.613
3	7.46036	9.054	59.366	1.6231
4	1.42559	20.586	32.130	29.915
5	2.30777	46.642	9.997	71.619
6	4.16623	37.034	67.176	34.378
7	9.92733	29.711	17.938	10.161
8	9.91209	60.150	77.076	18.882
9	1.21461	08.711	75.976	55.500
10	1.46487	32.289	59.667	13.222
11	1.74179	56.946	29.687	87.822
12	2.38873	29.948	16.972	31.752
13	2.37659	37.174	33.772	38.883
14	3.63584	08.601	65.162	16.531
15	4.74327	22.448	1.832	40.417
16	5.16385	74.944	69.906	9.0237
17	6.10585	10.035	10.503	04.311
18	6.98662	30.035	10.503	04.311
19	8.14982	79.233	94.888	53.786
20				
21				
22				
23				
24				