

1971. 6. 1

九州大学 大型計算機センターニュース

No. 16

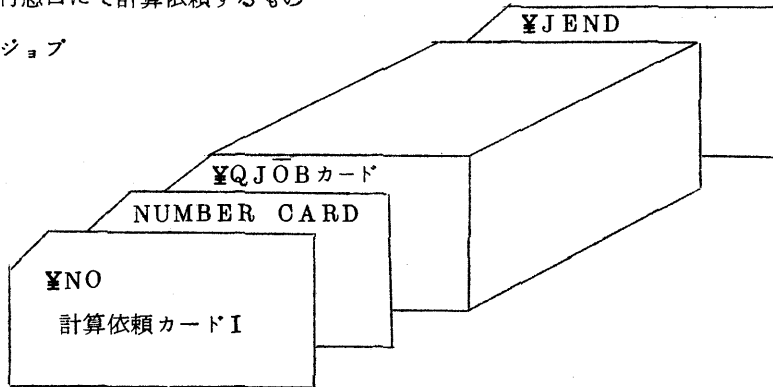
福岡市大字箱崎
九州大学大型計算機センター
共同利用掛 (TEL 092-64-1101)
内線 5337

◇計算依頼カード様式変更のお知らせ

1. カード構成 (6月1日より)

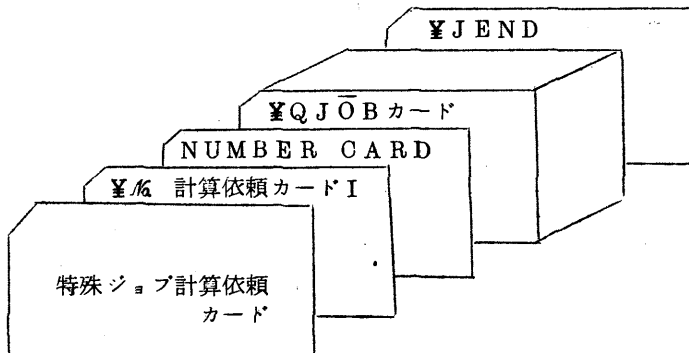
(1) 直接受付窓口にて計算依頼するもの

(i) 標準ジョブ

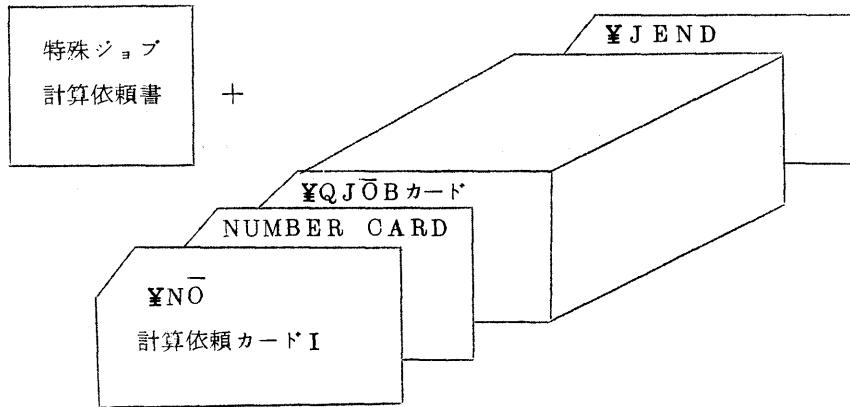


(ii) 特殊ジョブ

a) 標準的なもの (紙テープ、専用ボリューム、X-Yプロッタ長時間等)

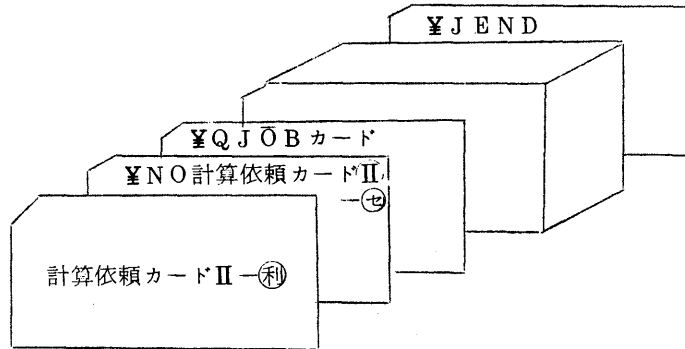


b) a以外のもの(今までに例がない計算機の使い方をするもの他)



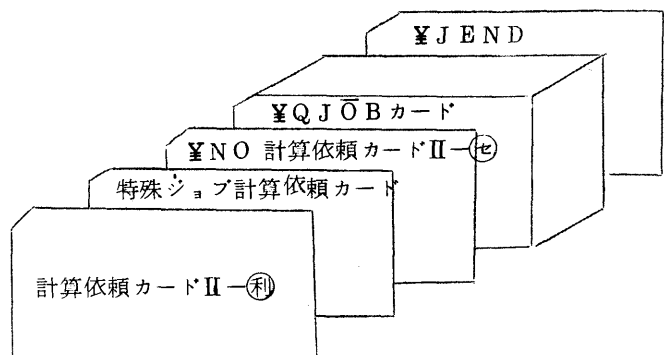
(2) 郵送にて計算依頼するもの

(i) 標準ジョブ



(ii) 特殊ジョブ

a) 標準的なもの(紙テープ、専用ボリューム、X-Yブロック、長時間等)



特殊ジョブ計算依頼カード

九

(注1)

受付番号							
------	--	--	--	--	--	--	--

特殊ジョブにする理由	
------------	--

ボリューム名	取付機番	ボリューム通番	書き込み有無	持ち込み有無
磁気テープ			有無	
			有無	
			有無	

受付	(*)
返却	(*)

記事

(注1) 専用ボリューム使用の場合に記入して下さい。 ※(*)はセンター記入欄です。

九州大学大型計算機センター

3. 記入上の注意

(1) 計算依頼カードI、計算依頼カードII-㉔

(i) 利用区分

該当する欄に[レ]印をつけて下さい。

(ii) システム使用量(C、Dジョブの場合に記入し、処理の時期を決めるときの参考にします)

a) USE時間(分)

入力されてから出力までの予想時間を分単位で記入して下さい。ファイルのアクセスタイムが含まれマルチジョブでの処理では他のジョブの影響も受け固定的なものではないが前回処理したときの時間と見合せて予想をたてて下さい。

b) CPU時間(分)

実際の演算時間を記入して下さい。

(2) 特殊ジョブ計算依頼カード

(i) 磁気テープ取付機番

E.010、E.011、E.012、E.013の4台が使用できます。すべて

READ/WRITE可能です。

(ii) 特殊ジョブにする理由

X-Yプロッタ使用、紙テープ使用というぐあいに簡単明瞭に記入して下さい。

4. その他

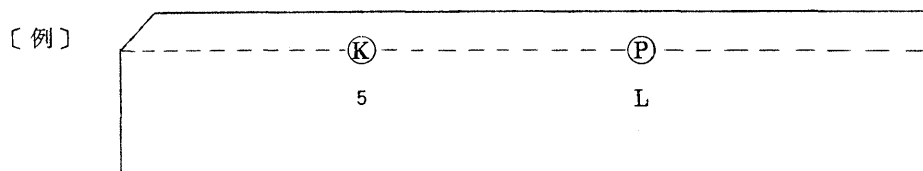
- (1) 専用ボリュームを使用するジョブは特殊ジョブとなります。紙テープ、X-Yプロッタ使用のジョブも従来どおり特殊ジョブです。

◇修正穿孔を依頼する際の諸注意

1. 修正を要するカードはすべて裏返しにして、カードデッキの中に入れて下さい。
2. 修正内容は次の要領で明示して下さい。

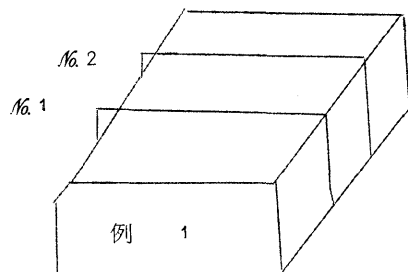
① 修正内容が簡単な場合

直接そのカードに赤字で修正個所を明示し、修正する文字をその下か又は斜め下に記入して下さい。

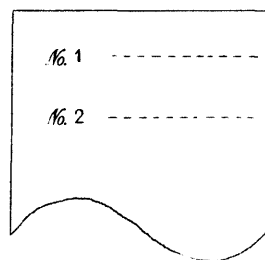


② 修正内容が複雑な場合及び追加の場合

[例1]の様にカードデッキの中に $\#$ をうった別紙(カードが望ましい)をはさむ事によってその該当個所を示し、もう一つのコーディングシートにカードデッキの中の別紙に記入した $\#$ の順に詳しく修正事項を記入して下さい。



[例2]



3. 修正後計算の場合、修正個所の明示方法は前記の通りですが、カード修正後計算にまわされるるので、計算依頼カード、コントロールカードを必ずカードデッキに添付して下さい。尚、これは学外者とセンター滞在者を対象としております。
4. その他

新規穿孔依頼をする場合には必ずコーディングシートに記入して下さい。

◇端局利用についてのお願い

端局利用の際の消耗品については、各端局で準備してください。

- 〔例〕
1. ロール紙
 2. リボン
 3. 紙テープ

購入先 日本通信紙株式会社福岡営業所 電話(41)6222

現在は実験段階ですから各端局ともなるべく早い時期(1週間毎)に利用報告書を提出してください。これは端局を利用された方が利用時の状態、センターへの要望、その他気づかれた事などを気楽に記入していただくもので、用紙はセンターから送付いたします。(センター2階第1受付に常備)。

なお、利用上問題が生じたり、不明な点がありましたら下記宛ご連絡ください。

研究開発(井上) 電話(64)1101 内線6634
業務掛 内線5334

◇カードデッキ保管の使用期間変更について

センターニュース№12でお知らせしましたカードデッキ保管棚の使用については、使用期間を毎月1日～15日または16日～30日(31日)とし、その最終日を整理日として運用して来ましたが、整理日に更新手続をされる方が非常に多いので6月1日より使用期間を月単位とし、その最終日を整理日としましたのでどうぞご利用ください。

なお、現在保管棚を利用中の方で6月1日以降継続してご利用の方は改めて申し込まれるようお願いいたします。

◇試用期間を終えたライブラリプログラムについて

現在登録されているライブラリプログラムの内、以下のものは試用期間としてテスト用ファイルに登録されていましたが、6ヶ月の試用期間を終えたため、通常のライブラリ用ファイルに再登録されましたので、お知らせいたします。

これに従い、標準のコントロールカードを使用して、SSLと同様に呼び出せるようになりました。

№251	F2/QU/F/HER4	№257	C3/QU/F/SANJI
№252	J0/QU/F/INLIST	№258	C3/QU/F/ONDS
№253	F4/QU/F/SWPML	№259	F4/QU/F/GSRENS
№254	C2/QU/F/SANJI	№260	F4/QU/F/GSREND

◇試用期間中のライブラリプログラムの使用方法について（変更）

ジョブ制御マクロの変更に伴ない、試用期間中のライブラリプログラムの使用方法を暫定的に次のように変更いたします。

(イ) RBで登録されているプログラム

富士通提供のSSLと同様、次のようなコントロールカードを用いてください。

¥NO

¥QJOB

¥FORTRAN

FORTRAN ソースプログラム

¥LIEDRUN

デ ー タ

¥JEND

なお、これに該当するプログラムは、現在、次の4つのプログラムです。

№261 F2/QU/F/SQRS

№262 F2/QU/F/SQRD

№263 J0/QU/F/MPTCS

№264 J0/QU/F/MXPTS

(ロ) EBで登録されているプログラム

¥RUNのマクロを用い、パラメータで、ファイル名QU.EB.P.LIB.TESTと実行形式プログラム名を指定してください。

¥NO

¥QJOB

¥RUN FLNAME=QU.EB.P.LIB.TEST,
 EBNAME=実行形式プログラム名

デ ー タ

¥JEND

これに該当するプログラムは、現在、以下のプログラムがあります。

№256 H3/QU/Z/SUCPM (実行形式プログラム名はSUCPM)

№247 Y3/QC/Z/AA01 (実行形式プログラム名はELASTC)

№248 Y3/QC/Z/AA02 (実行形式プログラム名はDWBA1)

(ハ) RBで登録されている応用プログラムライブラリ

¥LIED、¥DAFILEのマクロを用い、自分でLIEDの制御文を書いてください。

行の使用方法説明書を参照されたい。(＊)

なお、九大センター登録のプログラムを使う際のコントロールカードのつけ方は、以下の通りである。

≡QJOB

≡RUN FLNAME=QU.EB.P.LIB.TEST,EBNAME=ELASTC

データ

≡JEND

§ 3. その他

(＊)連絡先

東京都北多摩郡田無町2970

東京大学原子核研究所理論部内 核研理論プログラム管理機関

久保謙一 (TEL, 0424-61-4131 内225)

№248 Y3/QC/Z/AA02

DWBA ANALYSIS OF DIRECT NUCLEAR REACTION 1

(DWBA1)

DWBAによる直接反応の解析(DWBA1)

作成	<u>作成者</u> 宇田川猛、吉田弘 久保謙一、山浦元	<u>作成年月日</u> 昭和40年6月
改訂	<u>改訂者</u> 上村正康	<u>改訂年月日</u> 昭和46年1月
形式	①. コンプリートプログラム b. サブルーチン c. 関数 d. 手続き e. 関数手続き	
使用言語	①. FORTRAN b. ALGOL c. FASP d. PL/I e. その他()	
使用機種	FACOM230-60	

使用メモリ数	(a) コア(29)K語 b ディスクバック()K語 c その他()
使用機器構成	(a) カードリーダー (b) ラインプリンタ c. カードパンチ d. 紙テープリーダー e 紙テープパンチ f. 磁気テープ()ユニット g. ディスクバック i. その他()
利用者の義務	(a). プログラム名と作成者名・改訂者名を明記する b. 明記する必要はない
公 表	(a). ソースプログラムを公表する b. ソースプログラムの公表は一定期間保留する(年 月 日まで)

§ 1. 概 要

原子核による粒子の非弾性散乱と、一粒子の Stripping および Pick - up 反応を Zero - range 歪曲波 Born 近似 (DWBA) で数値解析するプログラムである。

入射粒子および放出粒子の散乱を記述する光学 Potential には、Spin - Orbit は含まれないと近似する。

§ 2. 使用方法

このプログラムの使用法等については、当分の間、東京大学原子核研究所理論プログラム管理機関発行の使用説明書を参照されたい。(*)

なお、九大センター登録のプログラムを使い際のコントロールカードのつけ方は、以下の通りである。

※ Q J O B

※ R U N F L N A M E = Q U . E B . P . L I B . T E S T , E B N A M E = D W B A 1

デ ー タ

※ J E N D

§ 3. その他

(*) 連絡先 東京都北多摩郡田無町 2 9 7 0

東京大学原子核研究所理論部内 核研理論プログラム管理機関

久 保 謙 一 (T E L 0 4 2 4 - 6 1 - 4 1 3 1 (内) 2 2 5)

$$I = \int_a^b f(X) dx$$

を求めろ。

1.2 計算方法

台形公式を用いたROMBERGの方法による。

[参考文献]

Herbert S. Wilf, *Advances in Numerical Quadrature, in 'Mathematical for Digital Computers', 1960, pp. 133-140, Interscience.*

§ 2. 使用法

2.1 呼び出し方法

ROMBER(FUNC, A, B, ERR) (関数サブプログラムである)

2.2 パラメータ

FUNC 実数型関数名。被積分関数 $f(X)$ を関数サブプログラムまたは文関数で与える。(*)

A 実数型変数名または実定数。積分区間の下限を与える。

B 実数型変数名または実定数。積分区間の上限を与える。

ERR 実数型変数名または実定数。誤差判定用のパラメータである。

(1) ERR > 0 のとき相対誤差で

(2) ERR < 0 のとき絶対誤差で

(3) ERR = 0 のときERR = 10^{-7} とみなして絶対誤差で

収斂が以下のように判定される。

今、 W_i を i 段階における積分近似とすれば、相対誤差制御では、 $|W_i - W_{i-1}| \leq \text{ERR}$ 、絶対誤差制御では、 $|W_i - W_{i-1}| \leq |\text{ERR}|$ になったとき W_i を積分値とする。

ただし、 $|W_i| \leq 10^{-38}$ のときはERRの符号にかかわらず絶対誤差で収斂が判定される。

(*) 被積分関数は、FUNC(X)の形で与える。(ここでFUNCは関数サブプログラム名または文関数名。Xは独立変数で実数型)

関数サブプログラムで与えた場合、パラメータFUNCは呼び出しプログラムの中でEXTERNAL宣言をしなければならないが、文関数で与えた場合は、EXTERNAL宣言をしてはならない。

§ 3. エラー処理

逐次近似値を9回求めた後、依然として上記収斂条件が満たされないときは、第9近似値を

もつて積分値とし、エラーメッセージを

***ROMBER(A, B, ERR) = W9 - W8 ERROR = T ***
と印刷する。ここにA, B, ERRは実引数として与えられた値を、W9は第9近似値を、TはW9を第8近似値とすれば

$$\text{ERR} > 0 \text{ のとき } T = |W_9 - W_8| / W_9$$

$$\text{ERR} \leq 0 \text{ のとき、および } |W_9| \leq 10^{-38} \text{ のときは } T = |W_9 - W_8|$$

を表わす。

§ 4. 使用ルーチン

このプログラムでは、ABS、FLOATを使用している。

§ 5. 備考

GauB求積法との比較

概括的にいえばRomberg法は、有限区間において、多項式に依って近似されるような関数の積分に適している。したがって、Romberg法はNewton - Cotes法あるいはGauB求積法と対比すべきであろう。しかしながら、Newton - Cotesの公式は精度・安定・洗練度の諸点に関し、Romberg法には遙かに及ばない。以下はRomberg法とGauB法の比較である。

1) 精度・・・GauB法が優れている。

a) 区間(-1, 1)を65点に細分し、Romberg法で 10^{-8} 、同じ区間を64点に分割し、GauB法で 10^{-48}

b) GauB10点法がRomberg65点法と同じ程度の誤差を与える、という例が知られている。

2) 安定・・・ややRomberg法に分がある。

a) Romberg法では、格子点における被積分関数の値に乗すべき係数(重み)は正であって、且つお互いに同じ程度の大きさである。大きくなっても他の3倍を越えることはない。

b) GauB法においても、重みの値は正である。しかしながら、格子点は区間の端末に集中し、分割点が24を越すと大きな重みが小さなその10倍、あるいはそれ以上になる。

3) 洗練度・・・Romberg法の存在理由はここにある。

a) 計算法においてすでに述べたように、Rombergの計算手順は洗練されたものである。

b) GauB法では、周知のように積分区間を不等の、しかも細分区間の長さの比が無理数になるように分割する。

4) 誤差評価

- a) Romberg法では、積分の近似値を逐次求めるのであるから、誤差の大きさを把握することは比較的容易である。
- b) GauB法においては、異なる分点法を続けて採用しないと誤差の評価ができない。
- c) しかしながら、1)項に述べたように、GauB法はRomberg法に遙かに勝る精度を有するので、たとえ異なる分点法を連続して用いたとしても、同じ程度の誤差を得るにRomberg法より少ない仕事量で済むことが多い。

5) 結論

- a) 積分区間を等分割して積分を計算するにはRomberg法が最上であろう。
- b) 座標が無理数であるような格子点における、被積分関数の値が利用できるときは、GauB法を採用すべきである。

正 誤 表

センターニュース №.16に以下のような訂正がありましたので、お詫びいたしますと共にお知らせいたします。

頁	行	正	誤
9	下 4	ライブラリプログラムの紹介(表題を入れてください)	
10	下 8	プログラム名と作成者を明記する	プログラム名と作成者名・改訂者名を明記する
12	上 8	"	"
14	上 7	'Mathematical Method for Digital Computer', 1960	'Mathematical for Digital Computers',
	下12	Wi を i 段階における積分近似値とすれば, 相対誤差制御では, $ (Wi - Wi - 1) / Wi $	Wi を i 段階における積分近似とすれば, 相対誤差制御では, $ Wi - Wi - 1 $
15	上 2	W 9 □ □ …… □ ERROR = T □ ***	W 9 □ □ …… □ ERROR = T □ * * * *
15頁以下		Gauss	GauB