資　料

プログラム・ライブラリィの追加登録

名古屋大学より譲渡された以下のプログラムが当センターのライブラリィとして3月1日より使用可能となります。

D1	AQNN5S, AQNN5D AQNN7S, AQNN7D AQNN9S, AQNN9D	ニュートン・コーツ5(7, 9)点則に基づく適応型自動数値積分
D1	QDAPBS, QDAPBD	等差数列的に標本点を増す補間型積分法
D1	DEFINS, DEFIND IMTDES, IMTDED	二重指数関数型公式による有限区間積分
D1	HINFAS, HINFAD HINFES, HINFED	二重指数関数型公式による半無限区間積分
D1	INFINS, INFIND	二重指数関数型公式による無限区間積分
D1	TRAPZS, TRAPZD	台形則による無限区間積分

次に使用方法について説明します。引数の説明の中で実数型(倍精度実数型)とあるのは、倍精度のライブラリィを使用するときには、その英字名を倍精度実数型のデータとして宣言しなければならないことを意味します。

なお、これらのランクはすべて2です。

分 類 コード	ニュートン・コーツ５（７，９）点則に基づく適応型自動数値積分
D1	単精度 CALL AQNN5S(A, B, FUNC, S, EPS, LF, NF, ILL) 単精度 CALL AQNN7S(A, B, FUNC, S, EPS, LF, NF, ILL) 単精度 CALL AQNN9S(A, B, FUNC, S, EPS, LF, NF, ILL) 倍精度 CALL AQNN5D(A, B, FUNC, S, EPS, LF, NF, ILL) 倍精度 CALL AQNN7D(A, B, FUNC, S, EPS, LF, NF, ILL) 倍精度 CALL AQNN9D(A, B, FUNC, S, EPS, LF, NF, ILL)

ADAPTIVE QUADRATURE BASED ON NEWTON—COTES 5(7, 9) POINT RULE

1. 目　　的

被積分関数 $f(x)$ 、下限 a、上限 b、要求精度 ε が与えられたとき、適応型自動積分法を用いて、定積分 $\int_a^b f(x)\,dx$ を絶対誤差 ε 以内の精度で計算する。適応型自動積分法というのは、被積分関数の変化の緩急に順応して、サンプル値を取る密度を調節し、合理的に計算を進める方法である。本ルーチンは、ニュートン・コーツ５（７，９）点則に基づくものであるが、従来からの同様なものに比べ、誤差の推定法、誤差の各小部分区間への配分、不連続点、代数的特異点の検出など、多くの新しい工夫が加えられているので、信頼性が高く、サンプル数も少ない。

2. 使 用 法

A……………入力。実数型（倍精度実数型）変数名。定積分の下限。保存される。

B……………入力。実数型（倍精度実数型）変数名。

　　定積分の上限。保存される。A＜Bでなければならない。

FUNC……入力。実数型（倍精度実数型）関数副プログラム。

　　被積分関数の名前。これに対する実引数としての関数は、使用者が積分変数だけの１変数の関数副プログラムとして用意しなければならない。AQNN5S／D, AQNN7S／D, AQNN9S／Dを引用するプログラムの中で

　　EXTERNAL FUNC と宣言しなければならない。

S……………出力。実数型（倍精度実数型）変数名。定積分の値が出力される。

EPS………入力。実数型（倍精度実数型）変数名。要求精度を表す正数。

　　単精度の場合 $10^{-3}\sim10^{-6}$, 倍精度の場合 $10^{-5}\sim10^{-15}$

　　の程度が標準である。保存される。

ＬＦ…………入力。整数型変数名。

関数のサンプル回数の上限。ＬＦ＞１２。数千程度が適当。保存される。

ＮＦ…………出力。整数型変数名。関数のサンプル回数。ＮＦ＞ＬＦとなったとき、計算を中断してルーチンより脱出する。

ＩＬＬ………出力。整数型変数名。

ルーチン内での計算の状況を示す。ルーチン内で０にセットされ、次の各状態が発生する度にそれぞれに応じて一定の数が加えられる。

(1) 小部分区間の長さが極度に小さくなったとき、１

(2) 不連続点を検出したとき、１０

(3) 対数特異点を検出したとき、１００

(4) 代数特異点を検出したとき、１０００

(5) ＮＦ＞ＬＦとなったとき、１００００

(6) 代数特異点の次数が－１以下であるとき、２００００

(7) 入力に関する制限が破られたとき、３００００

以上のうち、(5), (6), (7)が発生すると、計算は中断される。

３. 備　　考

① 本ルーチンの場合に限らないが、定積分を計算するには、必要があれば適当な変数変換により、積分区間の長さと積分値の絶対値をともに１の程度の数にすることが望ましい。

② 特異点などはできる限り積分区間の端にくるように、しかも、なるべくこれを原点にとることが精度を高める上で望ましい。なお特異点などがあってその点での関数値が∞になる場合は、その特異成分を０とすることが本ルーチンを利用する場合には必要である。

③ 使用法のＩＬＬの項にあるように、本ルーチンでのＩＬＬの値は、ＩＬＬ≧１００００の場合以外はＩＬＬ≒０でも必ずしも得られた積分値が無効ということはない。例えば、代数特異点を検出して、これに応ずる処置が取られた場合にはＩＬＬ＝１０００　となるが、積分値は正しいことが多い。このような場合、得られた積分値に自信が持てないときには、２種類のルーチンを用いて、それぞれの計算値を比較するのも一法であろう。

参考文献

二宮市三：“ 適応型自動積分法の改良 ”、情報処理学会第１８回大会講演予稿集（ １９７７ ）

作成者　名古屋大学工学部　　二宮市三。

分類コード	等差数列的に標本点を増す補間型積分法
D1	単精度　CALL　QDAPBS(A, B, F, S, EPS, N, ILL) 倍精度　CALL　QDAPBD(A, B, F, S, EPS, N, ILL)

A QUADRATURE OF INTERPOLATORY TYPE INCREASING THE SAMPLE POINTS WITH ARITHMETIC PROGRESSION

1. 目　　的

被積分関数 $f(x)$、積分区間の下限 a、上限 b が与えられたとき、定積分 $\int_a^b f(x)\,dx$ をセンターの計算機で得られる限度の精度で計算する自動積分ルーチンである。本ルーチンは、標本点を等差数列的（8点ずつ）に増すので、標本を無駄にする可能性が少なく効率が良い。滑らかな被積分関数に対して精度の良い方法である。

2. 使 用 法

A……………入力。実数型（倍精度実数型）変数名。定積分の下限。保存される。

B……………入力。実数型（倍精度実数型）変数名。定積分の上限。保存される。B>A。

F……………入力。実数型（倍精度実数型）関数副プログラム名。被積分関数。これに対する実引数としての関数は使用者が積分変数だけの1変数の関数副プログラムとして用意しなければならない。QDAPBS／Dを引用するプログラムで EXTERNAL　F　と宣言しなければならない。

S……………出力。実数型（倍精度実数型）変数名。定積分の値が出力される。
ILL＝10000のときは、最後に得られた近似値が出力されている。

EPS………出力。実数型（倍精度実数型）変数名。積分値Sの誤差の推定値。

N……………入出力。整数型変数名。
入力としては標本数の下限。出力としては実際に使用した標本数。入力として、N＝16（QDAPBS）又はN＝32（QDAPBD）とするのが良い。

ILL………出力。整数型変数名。ルーチン内での計算の状況を示す。正常に計算が行われたときILL＝0，B≦AのときILL＝30000、標本点を200点（QDAPBS）又は512点（QDAPBD）使用しても収束しないときILL＝10000。

3. 備　　考

積分区間〔Ａ，Ｂ〕を〔－１，１〕に変換し、この区間内にチェビシェフ分布するよう標本点を等差数列的に追加しながら補間式の列をつくり、これを積分する。

参考文献

鳥居達生、長谷川武光、二宮市三；“等差数列的に標本数を増す補間的自動積分法”、情報処理、Ｖｏｌ，１９，№３．ｐｐ．２４８－２５５（１９７８）

作成者　名古屋大学工学部　長谷川武光、鳥居達生、二宮市三。

分類コード	二重指数関数型公式による有限区間積分
D1	単精度 CALL DEFINS(A, B, F, S, EPS, N, ILL) 倍精度 CALL DEFIND(A, B, F, S, EPS, N, ILL) 単精度 CALL IMTDES(A, B, F, S, EPS, N, ILL) 倍精度 CALL IMTDED(A, B, F, S, EPS, N, ILL)

NUMERICAL QUADRATURE BY DOUBLE EXPONENTIAL FORMULAS —FINITE INTERVAL—

1. 目　　的

被積分関数 $f(x)$、下限 a、上限 b、要求精度 ε が与えられたとき、高橋・森の二重指数関数型積分公式を用いて、定積分 $\int_a^b f(x)\,dx$ を絶対誤差 ε 以内の精度で計算する自動積分ルーチンである。特に、積分区間の端点で $x^{-\alpha}$ $(0<\alpha<1)$ 型の特異点があってもわずかな計算量で高精度の結果が得られる。ただし、$f(x)$ は端点を除いて解析的であることを前提としている。

2. 使 用 法

A……………入力。実数型（倍精度実数型）変数名。定積分の下限。

B……………入力。実数型（倍精度実数型）変数名。定積分の上限。A≠B。

F……………入力。実数型（倍精度実数型）関数副プログラム。被積分関数の名前。これに対する関数副プログラムは積分変数一つだけを引数に持つものを利用者が用意しなければならない。DEFINS／D, IMTDES／Dを引用するプログラムで EXTERNAL　F と宣言しなければならない。

S……………出力。実数型（倍精度実数型）変数名。定積分の値が出力される。ILL＝0 又は30000以外のときは最後に得られた近似値が出力されている。

EPS………入力。実数型（倍精度実数型）変数名。要求精度を表す正数（ε）。単精度では 10^{-5}、倍精度では 10^{-10} 程度が標準である。保存される。

N……………出力。整数型変数名。関数の実際の評価回数。

DEFINSの場合	N≦432
DEFINDの場合	N≦608
IMTDESの場合	N≦282
IMTDEDの場合	N≦326

ＩＬＬ………出力。整数型変数名。ルーチン内での計算の状況を示す。

ＤＥＦＩＮＳ／Ｄの場合： ルーチン内で最初０にセットされ、次の各状態が発生する度にそれぞれに応じて一定の値が加えられる。

(1) 区間の下限の方で、関数値が急激に増大しているため要求精度が自動的に引下げられたとき、１

(2) 区間の上限の方で、(1)の事象が発生したとき、２

(3) ルーチンの許容標本点数の最大を用いても収束しないとき、１００００

(4) 入力引数に対する制限が破られたとき、３００００

ＩＭＴＤＥＳ／Ｄの場合： ＩＬＬ＝０のとき正常終了、ＩＬＬ＝１００００のときルーチンの許容標本点数の最大を用いても収束しない、ＩＬＬ＝３００００のとき入力引数に対する制限が破られたため計算を全く行わない。

３．備　　考

定積分 $I=\int_{-1}^{1} f(x)\,dx$ において、x に変換　$x=\phi(t)$ を行うと定積分 I は

$$I=\int_{t_0}^{t_n} f(\phi(t))\,\phi'(t)\,dt$$

と書ける。これに台形則を用いて I を求める。変換式は、ＤＥＦＩＮＳ（Ｄ）の場合は

$$x=\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right),\ -1\leqq x\leqq 1,\ -\infty\leqq t\leqq\infty$$

を、ＩＭＴＤＥＳ（Ｄ）の場合は

$$x=\tanh\left\{\frac{\pi}{2}\sinh\frac{\pi}{2}\left(\frac{1}{1-t}-\frac{1}{1+t}\right)\right\},\ -1\leqq x,\ t\leqq 1$$

を用いる。

関数の評価回数が少ないのが特長である。被積分関数の変化の仕方が滑らかでおだやかなものや比較的ゆるやかな振動をするものについては効率が良い。特に端点で x^{-a}（ $0<a<1$ ）の特異性をもっているものに対しては、他のルーチンにみられない高効率を示す。ただし、この場合、１０桁以上の精度を得ることが難しいこともある。区間の中央部に高いピークを持つもの、不連続点を持つものに対しては不得意である。

参考文献

森　正武；“ 曲線と曲面 ”、２４頁、教育出版社（ １９７４ ）

作成者　名古屋大学大型計算機センター　　秦野寯世

分類コード	二重指数関数型公式による半無限区間積分
D1	単精度　CALL　HINFAS(F, S, EPS, N, ILL) 倍精度　CALL　HINFAD(F, S, EPS, N, ILL) 単精度　CALL　HINFES(F, S, EPS, N, ILL) 倍精度　CALL　HINFED(F, S, EPS, N, ILL)

NUMERICAL QUADRATURE BY DOUBLE EXPONENTIAL FORMULAS ——SEMI INFINITE INTERVAL——

1. 目　的

被積分関数$f(x)$と要求精度εが与えられたとき、高橋・森の二重指数関数型積分公式を用いて半無限区間定積分$\int_0^\infty f(x)dx$を絶対誤差ε以内の精度で計算する自動積分ルーチンである。特にHINFES／Dは、おとなしい関数$g(x)$を用いて$f(x)=g(x)e^{-x}$の形で表される場合に適した公式を用いている。$f(x)$が$x\to\infty$での0への収束が遅い場合$x=0$で$x^{-\alpha}$（$0<\alpha<1$）程度の特異性を持つ場合でも高精度の解が得られる。

2. 使 用 法

F……………入力。実数型（倍精度実数型）関数副プログラム。被積分関数の名前。これに対する副プログラムは、積分変数一つだけを引数に持つものを利用者が用意しなければならない。HINFAS／D, HINFES／Dを引用するプログラムでEXTERNAL　F　と宣言しなければならない。

S……………出力。実数型（倍精度実数型）変数名。
定積分の値が出力される。ILL＝0又は30000以外のときは、最後に得られた近似値が出力されている。

EPS………入力。実数型（倍精度実数型）変数名。
要求精度を表す正数（ε）。単精度では10^{-5}、倍精度では10^{-8}程度が適当である。保存される。

N……………出力。整数型変数名。
関数の実際の評価回数。
HINFAS／Dの場合　　N≦320
HINFES／Dの場合　　N≦395

ILL………出力。整数型変数名。

ルーチン内の計算の状況を示す。ルーチン内で最初０にセットされ、次の各状態が発生する度にそれぞれに応じて一定の値が加えられる。

(1) $x \to 0$ の付近で、関数値が急激に増大しているため要求精度が自動的に引き下げられたとき、１

(2) $x \to \infty$の方で、関数値の０への収束が遅いため要求精度が自動的に引き下げられたとき、２

(3) ルーチンの許容標本点数の最大を用いても収束しないとき、１００００

(4) ＥＰＳ＜０を指定したとき、３００００

３. 備　考

定積分 $\int_0^\infty f(x)\,dx$ において積分変数xを次のように変換したものに、台形則を用いる。ＨＩＮＦＡＳ／Ｄの場合は、

$$x = \exp\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right),\quad -\infty \leqq t \leqq \infty$$

を、ＨＩＮＦＥＳ（Ｄ）の場合は、

$$x = \exp\left\{\frac{\pi}{2}\left(t - \exp(-t)\right)\right\},\quad -\infty \leqq t \leqq \infty$$

を用いる。

$x \to \infty$での関数値の０への収束が遅いものやＧａｕｓｓ－Ｌａｇｕｅｒｒｅ の公式でうまく求まらないようなものに対しても、かなり良い結果が得られる。ただし、そのようなものに対して１０桁以上の精度を得ることは難しい。

参考文献

森　正武；“曲線と曲面”、２４頁、教育出版社（１９７４）

作成者　名古屋大学大型計算機センター　　秦野寧世

分類コード	二重指数関数型公式による無限区間積分
D1	単精度　CALL　INFINS(F, S, EPS, N, ILL) 倍精度　CALL　INFIND(F, S, EPS, N, ILL)

NUMERICAL QUADRATURE BY DOUBLE EXPONENTIAL FORMULAS ── INFINITE INTERVAL ──

1. 目　的

被積分関数 $f(x)$ と要求精度 ε が与えられたとき、高橋・森の二重指数関数型積分公式を用いて無限区間定積分 $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx$ を絶対誤差 ε 以内の精度で計算する自動積分ルーチンである。 $f(x)$ が $x \to \pm\infty$ で0への収束が遅い場合でも高精度の解が得られる。

2. 使 用 法

F……………入力。実数型（倍精度実数型）関数副プログラム。

被積分関数の名前。これに対する関数副プログラムは、積分変数一つだけを引数に持つものを利用者が用意しなければならない。INFINS／Dを引用するプログラムでEXTERNAL　F　と宣言しなければならない。

S……………出力。実数型（倍精度実数型）変数名。

定積分の値が出力される。ILL＝0又は30000以外のときは、最後に得られた近似値が出力されている。

EPS………入力。実数型（倍精度実数型）変数名。要求精度を表す正数（ε）。

単精度では 10^{-5}、倍精度では 10^{-8} 程度が適当である。保存される。

N……………出力。整数型変数名。関数の実際の評価回数。N≦321

ILL………出力。整数型変数名。

ルーチン内の計算の状況を示す。ルーチン内で最初0にセットされ、次の各状態が発生する度にそれぞれに応じて一定の値が加えられる。

(1)　$x \to -\infty$ の方で、関数値の0への収束が遅いため要求精度が自動的に引き下げられたとき、1

(2)　$x \to +\infty$ の方で、(1)の状態が発生したとき、2

(3)　ルーチンの許容標本点数の最大を用いても収束しないとき、10000

(4)　EPS＜0を指定したとき、30000

3. 備　　考

定積分 $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,dx$ において、積分変数xを次のように変換したものに台形則を用いる。

$$x=\sinh\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right),\quad -\infty\leqq x,\ t\leqq\infty$$

$x\to\pm\infty$での関数値0への収束が遅いものやGauss－Hermiteの公式でうまく求まらないようなものに対しても、かなり良い結果が得られる。ただし、原点付近で高いピークを持つもの、激しく振動するものに対しては不得意である。

参考文献

森　正武；"曲線と曲面"、24頁、教育出版社（1974）

作成者　名古屋大学大型計算機センター　　秦野甯世

分類コード	台形則による無限区間積分
D1	単精度　CALL　TRAPZS(F, S, H, EPS, N, MAXF, ILL) 倍精度　CALL　TRAPZD(F, S, H, EPS, N, MAXF, ILL)

NUMERICAL QUADRATURE BY TRAPEZOIDAL RULE
——INFINITE INTERVAL——

1. 目　　的

被積分関数 $f(x)$ と要求精度 ε が与えられたとき、台形則により定積分 $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,dx$ を絶対誤差 ε 以内の精度で計算する自動積分ルーチンである。$f(x)$ が $x \to \pm\infty$ で０への収束が速い場合に有効である。

2. 使用法

F……………入力。実数型（倍精度実数型）関数副プログラム。

被積分関数の名前。これに対する関数副プログラムは、積分変数一つだけを引数に持つものを、利用者が用意しなければならない。TRAPZS／Dを引用するプログラムで　EXTERNAL　F　と宣言しなければならない。

S……………出力。実数型（倍精度実数型）変数名。

定積分値が出力される。ILL＝0又は30000以外のときは、最後に得られた近似値が出力されている。

H……………入出力。実数型（倍精度実数型）変数名。

入力としてはきざみ幅の初期値。計算の途中では半分ずつに減少させて行き、最終段階でのきざみ幅が出力される。H＞0。

EPS………入力。実数型（倍精度実数型）変数名。

要求精度を表す正数（ε）。単精度では 10^{-5}、倍精度では 10^{-15} 程度が最小限である。保存される。

N……………出力。整数型変数名。

関数の実際の評価回数。

MAXF……入力。整数型変数名。

関数の評価回数の上限。保存される。5≦MAXF。

ILL………出力。整数型変数名。

ルーチン内の計算の状況を示す。ルーチン内で0にセットされ、次の各状態が発生する度にそれぞれに応じて一定の値が加えられる。

(1) $x \to -\infty$の方で、関数値の0への収束が遅くてＭＡＸＦ以内で要求精度が得られないため、要求精度を自動的に大きくしたとき、1

(2) $x \to +\infty$の方で、(1)の状態が発生したとき、2

(3) Ｎ＞ＭＡＸＦになっても収束しないとき、10000

(4) 入力引数に対する制限が破られているとき、30000

3. 備　　考

$f(x)$が$x \to \pm\infty$での0への収束が速い場合には、Gauss−Hermite の公式や二重指数関数型公式でうまく解が求まらない場合でも、有効である。

ＩＬＬ＝1又は2で終了したときには、きざみ幅の初期値Ｈを大きくするとよい。

作成者　名古屋大学大型計算機センター　　秦野甯世