

Title	プロ相だより 大阪大学大型計算機センターニュース 第84号 (Vol.21 No.4)
Author(s)	
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1992, 84, p. 67-77
Version Type	VoR
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/65958">https://hdl.handle.net/11094/65958</a>
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

# プロ相だより

梅本 勝 弥 (大阪大学工学部)

火曜日 13時～15時

私、昨年5月より相談を担当している梅本でございます。

とはいうものの、この文章がセンターニュースに掲載される頃にはプログラム相談員の担当を終了しているのではないかと恐れている次第です。それまでやっておられた先輩の修了にともない、我々の研究室から長年引き継いでいたプログラム相談員の火を消すなということで浅学ながら、私がピンチヒッターとして引き継いだわけではありますが、その私も今年4月で無事、卒業？ とあいなるからです。そんなわけで、8か月間、プログラム相談員をさせて頂いた感想でも述べたいと思います。

相談員となって最も感動したことは、相談員室の快適さです。冷暖房完備はもちろんのと、大型計算機用の端末、パソコン、EWSと一応のものはそろっています。机は広く、ソファまであり、計算機に関する書籍もたくさんあるといった具合です。また、相談員室にいつも熱いお湯と一緒に準備されてあるお茶がおいしい。相談のない時など小説を片手に何杯も飲んでしまうというありさまで。いつも、きちんと用意して下さる方、この場をお借りしてお礼を申し上げます。かんじんの相談のこととなりますと、7勝8敗で負け越しといったところ。少し守備範囲からはずれたこととなりますと（ピンチヒッターが守備につくと、当然、守備範囲は狭い；TSS, FORTRAN）すぐにセンターの方へ電話交換手になり恥ずかしい限りですが、質問には八方手を尽くしてできるだけ誠意をもってお答えしようと思っております。

我々の研究室は、計算力学を専門とし、長年、計算機センターの大口ユーザーであったのですが、ここ数年で、ほとんどの計算を自前のワークステーションでこなすようになりました。そんなわけで、とうとう今年は、我々の研究室から相談員を出せないのではと心配しております。あの快適な相談員室がいつまでも快適であり続けることをお祈りして、このへんで筆を置きたいと思います。

金曜日 10時~12時

研究分野は、物性物理学の中で結晶固体の電子状態の研究を行っていますが、スーパーコンピュータの尻をたたいて走らせるのが日常の研究ということになります。われわれのプログラムの開発には、かなり高速化の手法を取り入れてあると思います。プログラムを速くしたいというご相談には少しはお役にたつかも知れません。

フォートランでプログラムを作りだしてから25年ほどになります。この間通常の数値計算の他に、フォートランで数式処理を行ったり、多倍長の整数計算と整数の素因数分解を使って桁落ちフリーで計算を行う等の、少しこみいったアルゴリズムを駆使するプログラムも作りました。そのほか3次元図形の透視図の作図プログラムセット、空間群(結晶固体の研究に応用される数字でいう群の一種)関連のプログラムセットはかなりの数の関係する研究者に提供して御好評? をえていますと思っています。なにかこみいった問題を計算機で処理したい方は一度ご相談においで下さい。

最近はACOS・SXの両システム共安定した動作をしているためか、一時期あったシステムに対する苦情のような相談はなくなりました。大変結構なことだと思っています。ほとんどの利用者が各研究室からTSSで計算機にアクセスされるためか、以前のように相談室に待行列ができるような盛況はなくなっています。長時間相談室に座り込まれてのご相談にも十分お相手できると思います。

私の経験から勝手に考えているのですが、現在の計算機はその能力の平均して1/10かもっと低い機能しかはたしていないようです。利用者が使用できる予算と時間の範囲で処理できれば満足して、それ以上の改善の努力を怠っているのが現状のようです。われわれのプログラムで、当初とにかく目的にあった結果を出すプログラムの段階から、100倍を越す処理速度の改善がなされたようです。単にベクトル化率だけではなく、演算数そのものを減少させることで達成されたのです。昔にくらべれば計算機の処理能力の改善はめざましいものがありますが、まだまだ足りないというのが計算機利用者の実感だと思います。初心者の方の相談の結果、現在の10倍もうまくいけば100倍もの計算を同じ予算でこなすことに、もし役立つことができればと少しは本気で考えています。

浦 畑 育 生 (大手前女子短期大学)

土曜日 10時～12時

私と大阪大学大型計算機センターとのつき合いは早いもので13年になります。在学中は非定常管内流の研究をしていましたが、利用形態としては、数値解析、LA処理、図形処理がおもなもので、言語はFORTRANを使用していました。当時は実験室での徹夜の実験と計算機センターでのデータ処理に明け暮れる毎日でした。夏でもスキーウェアを着込んで、LA処理ルームで冷房の寒さと戦い、並行してデータ処理とMTへのデータのセーブを行い(同時に5台くらいの端末を使いひんしゅくをかっていました)、LA処理のサービス終了とともに研究室にもどり、TSSでその日のうちにデータの処理を済ませ、不要ファイルを削除するという生活パターンでした。不要ファイル削除は必須の作業であり、その日の内にやらないとファイル使用料が一日で5千円つきました。データ量は膨大でした(あまり利口な利用方法ではないのですが)。このような姑息な手法は経験から編み出されたもので、そのほかにXYプロッターの一回のランで何枚も作図する方法とか……。理論計算にしる、データ処理にしる、かなりの時間と金額をかけたほうです。

その後、パーソナル・コンピュータや、AD変換ボードなどの周辺機器の性能向上に伴い、データ処理は文字どおりラボラトリー・オートメーション化し、オンラインでリアルタイムに研究室で行えるようになりました。計算機センターの利用はもっぱら理論計算になりました。このころSXが設置されましたが、カード読みとり機でジョブを流す時代から計算機センターとかかわり合ってきた者としては、コンピュータの急速な進歩とネットワーク化、パーソナル化の流れを身を持って感じる次第です。

現在、私は女子短期大学に身をおき、以前のような大規模計算からは縁遠くなっています。現在のおもな研究分野である色彩学、染色学に関しては、たいがいの計算はパーソナル・コンピュータで事足ります。言語もFORTRANよりも、PASCALやC言語を用いることが多くなりました。SXに関しては、最近まったく使ったことがありません。3年前、頼まれるままにSPSSXのプログラミングを請け負ったことから、今ではSPSSXの使用頻度が最も高く、自分でも想像もしなかった形でコンピュータの啓蒙家? になってしまいました。科学技術計算一筋にやってきた者としては複雑な心境ですが、なんでもACOSのバッチジョブのかなりの部分はSPSSXであるそうです。計算機センターでも夏休みなどには女子大学の先生方や学生さんがお見えになり、SPSSXに関する質問も増えます。殺伐とした計算機センターも華やぎ、私もSPSSXから足抜けできそうにありません。

白 井 正 文 (大阪大学基礎工学部)

(豊中地区) 月曜日10時~12時

本年度から月曜日の午前中に豊中地区でプログラム相談員を担当しています。私は基礎工学部物性物理工学科で助手をしています。専攻は物性理論ということになっていまして、物質（主に固体）の電子状態の計算ならびにその電子状態に基づく諸物性（磁性・構造相転移・超伝導等々）の評価を生業としている者です。この件に関してさらに詳細について知りたい方は、下記の参考文献を御覧下さい<sup>1)</sup>。

ところで、現在、我々の研究室からは、私以外に3人の博士課程の学生が、プログラム相談員を担当しています。我々がプログラム相談員になろうと考えた最大の理由は、理学部の某研究室が、大勢でプログラム相談員を担当していることに触発されたためです。しかし、それだけでなく、少しでも計算機センターとの接触の機会を増やすことができると考えたのも事実です。

どうも我々ユーザにとって計算機センターというのは縁遠い存在に感じられてなりません。勿論、毎日の時間の大半を、大型計算機と接続した端末の前で過ごしているわけですから、ちっとも縁遠くなんかないじゃないかと云われれば、そのとおりなのですが。我々ユーザ側から、センターの運営その他に関する情報を得る手段としては、センター速報とこのセンターニュースぐらいなものです。けれども、その内容は決して我々ユーザの希望どおりのものとは云いかねます。

さて、それではどうすれば、計算機センター側とユーザ側の意思の疏通が図れるのでしょうか。我々プログラム相談員は、センターとユーザの仲介役として何か役に立てるのでしょうか。例えば、私が多くのユーザの声を代弁して、次のような質問を投げかけた場合、センターはどのような回答を示してくれるでしょうか。

- (1) 計算機使用料の料金体系は、現行どおりで妥当なのでしょうか。
- (2) 毎年、1月・2月はジョブの処理時間が極度に長くなるのですが、それはユーザ側の責任なのでしょうか。
- (3) ある日突然、既存のTSSのコマンドが消失してしまうのは、どうしたのでしょうか。
- (4) 午後5時30分以後に、専用回線が不通となった場合、どうすればいいのでしょうか。等々、自己紹介を書くように頼まれたはずなのに、話題が大幅に脱線してしまいました。申し分けありません。最後になりましたが、ユーザの皆様、せいぜいプログラム相談員を活用しましょう。

#### 参考文献

- 1) 望月和子：大阪大学大型計算機センターニュース 第81号 (1991) p.73-77

今 田 真 (大阪大学基礎工学部)

(豊中地区) 火曜日10時~12時

豊中データステーションでプログラム相談員をしている今田です。基礎工学部は物性物理工学科で高エネルギー分光をやっています。

私の場合、計算機は主にスペクトルの理論計算に使っています。使用言語はFORTRANで、デバッグや小さい計算にはACOSをおおきなマトリクスの対角化を含むときはSXの基本形を使っています。基本形を使うのは、使えば計算結果をグラフ化するための加工をするプログラムを、1つのJOBで何度も走らせるなど、融通の利く使い方ができるからです。また、同じような計算を系(例えば元素)をいろいろ変えて行う都合上、一部だけが違うプログラムを作ることが多く、そのためにCRUNをよく使います。

上で書いた計算機利用は、どれもたいてい研究室の人にやり方を聞いたり、サンプルファイルを貰ったりしてやり始めたことばかりです。ですから、近くに聞ける人がいなかったり、いても聞きにくい(?)という方は、プログラム相談員に気軽に、文字通り「利用」してみられてはいかがでしょうか。特に朝の早い(!)時間帯は、プログラム相談室はととてもすいていて、待ち時間は0であること請け合いです。

高 橋 学 (大阪大学理学部 城グループ)

(豊中地区) 火曜日 13時~15時

豊中地区で火曜日の午後1時から3時までを担当している高橋学です。現在、大阪大学理学部城グループ(旧金森研)のD2の学生です。大型計算機を使い始めてまだ二年強で、経験もそんなにあるわけではありませんがプログラム相談員をやらせていただいています。研究分野はSolid State Physicsの中の磁性、電子状態に関する事で、主に電子相関の強い遷移金属化合物(NiO、CuO等々)の電子状態の研究をしています。研究で使用するのは主にSXで、電子状態の計算をするのに大規模疎行列(40万×40万程度)を対角化するために使っています。もちろん全部の固有値、固有ベクターをもとめるわけではなくて、基底状態とその近くの状態をもとめるだけです。ACOSではテスト計算やデータの加工に使っています。

私の大型計算機の利用環境は、端末としてパソコンPC-98RAを主に使っていてVZエディターをメモリーに常駐させ、さらにKtermを立ち上げてDOSに抜けてVZでプログラムを修正して、KtermにもどってACOSにアップロードして走らせるといったややこしいことをしています。ACOSのエディターのほうがやり易いことはACOSで処理しますが大抵のことはVZでやっています。データを料理して絵にしたりプログラムをTeXファイルにしてプリンターに打ちだしたりといったこともVZを常駐させたままで行っています。ときどき、常駐解除の順番をまちがえて端末を暴走させてしまうこともあります……。

私が相談にお答えできる分野は、今のところFORTRANのプログラミングとTSS、ACOS、SXの極基本的な使いかたに関する程度です。その他VZエディターや松などパソコンソフトに関することや壊れたMS-DOSフォーマットのフロッピーディスク(機械的に壊れたものは除く)の修復なども受け付けることができます。あまりレベルの高いことはお答え出来ないこともあります。また使用している端末ソフトはKtermでAsterやETGなどは使ったことがありませんので、データを端末に落としてくるとか、ACOSに上げるような端末ソフトに依存するような操作に関してはKtermでないと答えられないかもしれません。(もちろん努力はしますが……)

豊中地区は相談者が少ないようで、私がプログラム相談員を始めて2年目になりますが相談を受けた回数は全部で両の手で数えられる程度です。そのうち私の実力を遙かに越えた相談を持ちかけられたのは2回ありました。その時は、センターのバックアップの方の内線を教えて逃げの一手を打ちました。一年目のときに、一度だけ宗教関係の方が来られたことがありました。この時はちょっとあせりまちあが、「プログラム相談票に相談内容を書いてください。」とお願ひしたところ、すごすごとひきあげて下さいました(合掌)。このような変な相談もありましたが、やはり豊中地区はかなり暇のおかげで自分の仕事に精を出しているといった状況です。豊中地区で暇な思いをしているプログラム相談員は私だけではないと思いますのでどんどん相談をもってこられることをお願ひします。

小田川 直 人 (大阪大学理学部)

(豊中地区) 水曜日 13時～15時

今年でプログラム相談員2年目になります小田川です。現在は豊中データステーションで相談員を担当していますが、去年は吹田の計算機センターでもやっていました。この文章を読まれている方で、昨年、僕にお会いになられた方もおられると思いますが、質問に来られて、おろおろしていた相談員がなにを隠そうこの私です。

現在は、理学部の大学院に在籍しており専攻は原子核理論です。毎日、机に向かって紙と鉛筆のお世話になり、PC98のキーボードを友として計算に明け暮れています。その関係で計算機とのお付き合いは数値計算やその周辺ユーティリティーを使ったりするのが主なもので、センターの利用法も専用回線でASTERを使って、ACOS上でFORTRANを動かすだけでした。その他のアプリケーションはLATEX、CなどをPC98上で半分趣味で扱ったことがあります。質問に答えられるというものでは……。という訳ですので、吹田で相談員をしていたときは、FORTRANやTSS関係について聞きに来られた方にはある程度はお力になれたのですが、SPSSや図形処理の相談にこられた方から先生と呼ばれようものなら、穴があったら入りたい気持ちになったり、中にはACOSのハードウェアについて聞きに来られて、手も足も出ないというような恥ずかしい思いをしたことが多々ありました。

このACOSしか使えなかった相談員も、ごく最近では、計算機センターのCCSUNでUNIXのことも勉強し始めています。阪大の原子核関係の施設でUNIX環境が急速に整備され始めるに伴い、必要に迫られて始めたものですが、最近ではのめり込みだして漢字がどうの、メールがどうのとCCSUNの中をうろうろしています。しばらくしたら、UNIXやワークステーション関係のことも聞きに来ていただけたと思います(多分)。それでは次回はデータステーションの相談室でお会いしましょう。

田 川 幸 雄 (大阪大学基礎工学部)

(豊中地区) 水曜日 15時～17時

今年度から豊中地区のプログラム相談員をやっている田川です。担当は毎週水曜日の午後3時から5時までです。現在、基礎工物性物理工学科の学生(D2)で、従って専門分野は物性物理です。

主に、一次元性物質の電子状態やその物性につちえの理論計算を行っており、毎日ACCOSやSX上でFORTRANのプログラムを動かしています。相談分野はTSS、FORTRANで、図形処理、SX簡易形、基本形についても初歩的な質問であれば答えられるのではないかと思います。ただし、プログラム相談というものをやるのは初めてなので、質問に来られた方の要望に即座に答えることが出来ず一緒になって考え込む事のほうが多いのが現状です。従って、質問にすぐ答えられた時には、『今日は、役に立った。』という充実感もあり結構嬉しく思っているものですから、初心者の方も気軽にプログラム相談室を覗いて見て下さい。

西 尾 好 正 (大阪大学基礎工学部)

(豊中地区) 金曜日10時~12時

豊中D. Sで金曜午前の担当をしている西尾です。

自己紹介を…とのこと。私の本業は物性物理で、超伝導転移温度や、電気伝導度、熱伝導度等の見積りを行って（及び行う予定）おります。ある Program の debug が「1年間」にもわたる長期になって、ウチノメサレていますが、最近終了（強制終了 or Run Time Exhausted）して、ホッとしているところです。

豊中は Program の相談員のなり手がいないそうなのでムリをして(?) なっていますが、実は初心者と変わりません。ACOS上で、Fortran の program を動かして計算したり、絵を描いたり、SXの簡易型&基本型の原始的利用といった範囲でしょうか。最近は便利な Command もでき、「簡易型」は知らなくても良くなりそうな雰囲気ですので、私は数少ない「相談分野」も1つ減少したような気がします……。

マニュアルの意味不明単語にウチノメサレていたり、オニガワラのような顔をした先輩には怖くて尋ねられないとお悩みの「初心者の方」は一度お越し下さい。

高 根 慎 也 (大阪大学基礎工学部)  
(豊中地区) 金曜日 13時～15時  
x60614@ ccews08.center.osaka-u.ac.jp

皆さん、はじめまして。基礎工学部の高根と申します。一昨年の後期から、豊中でプログラム相談員をやっています。現在は金曜日の午後1時から3時の担当です。

それでは、簡単に自己紹介をいたします。年齢は26才(二月で27才になります。)の独身です。趣味は、まず、音楽。学部時代はバンドでベースを弾いてましたが、最近は演奏の方はまったくやっていません。ジャンルは、ヨーロッパのロック、特にプログレやジャズロックが好きです。それから、へたですがスキーをちょっとやります。まだ、通算5回程しか行ったことがありませんが、結構やみつきになってしまいました。最後、去年の2月に購入したMacで遊ぶこと。機種はSE/30でメモリー5MB、ハードディスク100MBの構成です。去年一年で、かなりの額をこいつに投資してしまい、現在はいわゆる“Mac貧乏”です。

次に、研究分野について書きます。非経験的分子軌道法を用いて、気相分子種の反応機構や反応速度の予測を行っています。現在は硫黄原子を含むラジカル種の反応を調べています。大規模な計算は主に分子研の大型計算機のお世話になっていますが、当計算機センターのACOSでもHONDOとうプログラムを移植して使っています。なお、プログラムに興味のある方は私の方にご連絡ください。

相談分野ですが、実はそれほどここの計算機にはくわしくありません。また一応かじった言語はFORTRAN77とCですが、トリッキーなプログラミングについての知識はほとんどありません。UNIXも少し使っていますが、TeXはまったく知りません。しかし、IBM上で開発されたプログラムをさんざん苦労してACOSに移植したことや、HITAC、FACOM、IBMそしてCRAYをいじった経験はほんの少しですがありますので、IBMやHITAC、FACOMなどのプログラムの移植については多少なりとも力になれるかも知れません。あとはMacの話なら大歓迎。何時間でもおつき合いいたします。

以上ならだらと書いてしまいましたが、これにて終わらせていただきます。

---

センターニュースの第83号及び本号に21名のプログラム相談員の自己紹介記事を掲載いたしました。この他に次の3名も、プログラム相談員(豊中地区)として活躍中です。

本センターの運営に協力いただいたプログラム相談員の皆様に厚くお礼申し上げます。

所 属	氏 名	研究分野
大阪大学基礎工学部	加藤 竜次	固体物理
〃	手嶋 達也	物性物理
〃	濱名 寛幸	流体の数値解析