The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	大阪大学大型計算機センターのソフトウェアについて
Author(s)	システム管理掛
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1996, 100, p. 10-29
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/66149
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

大阪大学大型計算機センターのソフトウェア

システム管理掛

1　まえがき

大阪大学大型計算機センターのスーパーコンピュータ SX-3/14R(以下、SX-3R といいます)、汎用機 ACOS-3900/10(以下、ACOS)、UNIX サブシステム Onyx 及びワークステーション (以下、WS) で使用できるソフトウェアを紹介します。詳細は掲載してある説明書並びに各手引をご覧ください。なお、センターが発行している手引の一覧は、本センターニュースの「センター刊行物一覧」をご覧ください。

2　計算機のオペレーティングシステム

計算機を運用管理しているオペレーティングシステム (以下、OS といいます) には、それぞれ次表のような OS が採用されています。

表 2.1: 計算機とオペレーティングシステム

計　算　機	オペレーティングシステム名
SX-3R	SUPER-UX R4.1(UNIX Sysytem V)
IRIS Onyx	IRIX Release5.3
SPARCstation2	SunOs4.1.1(UNIX 4.2BSD)
IRIS 4D/310VGX	IRIX Release5.2(UNIX System V)
EWS4800	UNIX System V
ACOS3900/10	ACOS-6 NVX R2.1

SX-3R と Onyx、WS は同じ系統の OS ですので使い方はほぼ同じですが、ACOS は日本電気独自の OS であり利用法は全く異なります。

3　計算機の利用形態

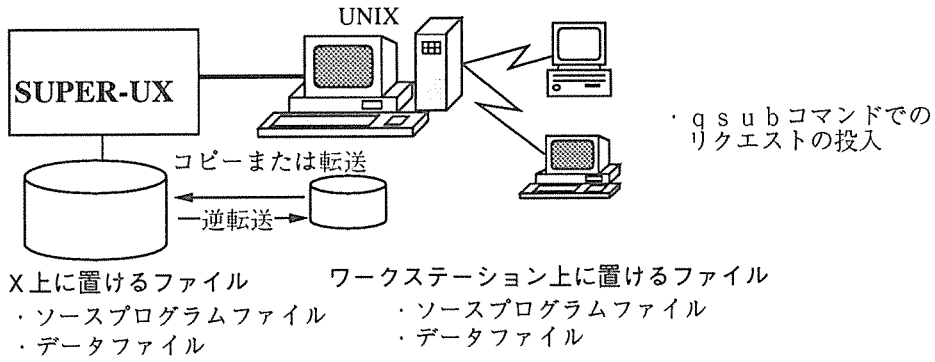


図 3.1: NQS 形

SX-3R を使用する利用形態として、Onyx、WS あるいは ACOS から SX-3R へ直接接続して会話型で利用する会話型直接利用形、センターの WS から SX-3R へバッチジョブを投入する NQS 形[1]の 2 つがあります。

ACOS では広範な端末利用者に対し、対話型で利用できる TSS[2]、ジョブの作成、投入、実行結果の検索が端末からできる会話型リモートバッチ処理、遠隔地から一括して大量のジョブの投入・受け取りができるリモートバッチ処理があります。

WS は会話型での利用方法だけです。

それぞれの計算機には磁気ディスク装置が接続されており、ディスクに保存されているデータは SX-3R、Onyx、WS、ACOS の間で自由に転送できます。

◆ 青井、中島「スーパーコンピュータ SX-3R 利用法」、センターニュース,vol.22,No.4,pp.1-35,1993.2

● 「スーパーコンピュータ利用の手引 (NQS 形編)」、大阪大学大型計算機センター利用の手引,1993.

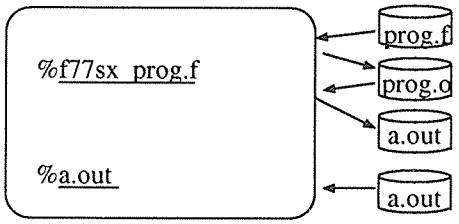
4 スーパーコンピュータ用言語/支援プログラム

4.1 FORTRAN77/SX

科学技術計算用として利用されている高水準プログラミング言語、JIS 規格上位水準に準拠。

コマンド形式

```
/usr/bin/f77sx ソースプログラムファイル名
```



NQS 及び会話型の形態で利用可能。コマンド名は'f77sx'、翻訳するプログラムの格納されているソースプログラムファイルを指定します。Fortran ソースプログラムファイルは必ず最後 2 文字が'.f'で終わること。致命的エラーがなければ標準では a.out ファイルが作成されます。

会話型翻訳処理例

```
%/usr/bin/f77sx /usr1/w60000a/prog.f
```

この例では登録番号 w60000a の下のファイル prog.f を翻訳。SX の利用者のホームディレクトリ[3]は /home/ccsx3/user1 から/home/ccsx3/user3 のいずれかに作成されていますが、すべて'/usr1'で割り当てることができます。

自由形式 2 で記述されているプログラムの翻訳

```
%/usr/bin/f77sx -f2 /usr1/w60000a/prog.f
```

o オプションの使用

```
%/usr/bin/f77sx -f2 -o /usr1/w60000a/obj /usr1/w60000a/prog.f
```

実行形式ファイルを指定したファイル名で作成するために、o オプションを使用しファイル obj に実行形式プログラムを登録しています。オプションの指定順序は任意です。

[1] Network Queuing System:ネットワークで結ばれた UNIX システム間でバッチ処理を行います。
[2] Time Shearing System:時分割処理システム
[3] 登録番号が割り当てられています。

◆ 広瀬、その他「第一原理分子動力学シミュレーションコードのチューニング」, センターニュース,vol.23,no.4,pp.37-46,1994-2.

◆ 片山、他「SX-3R のバージョンアップによる機能強化」, センターニュース,vol.23,No.2,No.3 合併号 pp.20-34,1993.11

◆ 青井、中島「スーパーコンピュータ SX-3R 利用法」, センターニュース,vol.22,No.4,pp.1-35,1993.2

● 「スーパーコンピュータ利用の手引 (NQS 形編)」, 大阪大学大型計算機センター手引,1993.

◆ 片山、他「SX-3R シリーズの言語プロセッサと開発支援ツール」, センターニュース,vol.22,No.3,pp.44-52,1992.11

● 後藤「スーパーコンピュータ利用の手引 (FORTRAN77 編)」, 大阪大学大型計算機センター手引,1992.

▲ GUF13「FORTRAN77/SX 言語説明書」, 日本電気,1992.

▲ GUF14「FORTRAN77/SX プログラミングの手引」, 日本電気,1992.

4.2 C

B.W.Kernighan と D.M.Ritchie の共著による "The C PROGRAMING LANGUAGE" に準拠した SUPER-UX K&R C コンパイラと、ANSI の規格に準拠した SUPER-UX ANSI C コンパイラの 2 種類があります。各々について機能が少し拡張されています。

▲ GUF12「C プログラミングの手引」、日本電気,1992.

4.3 C++

C プログラミング言語を基にした汎用プログラミング言語。

▲ GUF20「C++言語説明書」, 日本電気,1992.

▲ GUF21「C++ライブラリ利用の手引」, 日本電気,1992.

4.4 ANALYZER/SX

FORTRAN77 言語で記述されたソースプログラムを入力し、プログラムの構造とプログラムの実行に関する種々の解析情報を出力し、SX-3R の能力を最大限に引き出すための性能向上支援ツール。

Analyzer の使用

```
%/usr/bin/fan [オプションの並び] ファイル名の並び
```

▲ GUF15「ANALYZER/SX 利用の手引」, 日本電気,1992.

4.5 ANALYZER-P/SX

FORTRAN77 言語で記述されたソースプログラムを入力し、プログラムの構造とプログラムの実行に関する種々の解析情報を出力し、SX-3R の能力を最大限に引き出すための性能向上支援ツール。マルチプロセッサ用で ANALYZER/SX より詳細な情報が出力されます。

Analyzer/P の使用

```
%/usr/bin/fanp [オプションの並び] ファイル名の並び
```

▲ GUF16「ANALYZER-P/SX 利用の手引」, 日本電気,1992.

4.6 C-ANALYZER/SX

C 言語で記述されたソースプログラムを入力し、プログラムの構造とプログラムの実行に関する種々の解析情報を出力し、SX-3R の能力を引き出すための性能向上支援ツール。

C-ANALYZER/SX の使用

```
%/usr/bin/ca [オプションの並び] ファイル名の並び
```

▲ GUF29「C-ANALYZER/SX 利用の手引」, 日本電気,1995.

5 スーパーコンピュータ用ライブラリ

5.1 IMSL（数値・統計問題解析用ライブラリ）

IMSL 社が開発した工学、科学、物理学、応用数学、その他の技術分野で使用されます 900 以上の FORTRAN 用サブルーチンライブラリ。

（数学アプリケーション）

線形システム、固有値システム解析、補間と近似、微分と積分、微分方程式、変換、非線形方程式、最適化、基本行列／ベクトル演算、ユーティリティ

▲ MATH/LIBRARY,USER'S MANUAL,IMSL.

（統計アプリケーション）

回帰分析、相関、分散分析、カテゴリと離散データ解析、ノンパラメトリック統計、適合度とランダム度検定、時系列分析と予測、共分散構造と因子分析、判別分析、クラスター分析、生存性分析、生命検定、信頼性、多次元尺度構成、密度と危険度推定、ライン・プリンタ・グラフィック機能、確率分布関数とその逆関数、乱数生成、数学補助機能

▲ STAT/LIBRARY,USER'S MANUAL,IMSL.

（関数アプリケーション）

基本関数、三角関数と双曲線関数、積分指定関数及びその関連関数、ガンマ関数及びその関連関数、誤差関数及びその関連関数、ベッセル関数、有理ベッセル関数、ケルビン関数、楕円積分、ワイエルストラス楕円関数、確率分布関数とその逆関数、その他の関数

▲ SFUN/LIBRARY,USER'S MANUAL,IMSL.

IMSL ライブラリの割り当て

```
%/usr/bin/f77sx /usr1/w60000a/prog.f /usr/lib/imsl
```

ライブラリは格納されているファイルを指定するだけでよく、ファイル名は‘/usr/lib/imsl’です。

◇「SX-3R のライブラリ利用法について」, 速報,no.216,1993.3

5.2 ASL/SX（科学技術計算ライブラリ）

基本行列演算、連立一次方程式（直接法、反復法）、対称連立一次方程式、非対称連立一次方程式、常微分方程式、固有値・固有ベクトル、最小二乗法、高速フーリエ変換、スプライン関数、数値積分、特殊関数、乱数などの FORTRAN 用サブルーチンライブラリ。

ASL ライブラリの割り当て

```
%/usr/bin/f77sx /usr1/w60000a/prog.f /usr/lib/asl
```

ライブラリファイル名は ' /usr/lib/asl ' です。

▲ GUY21「科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引〈基本機能編第 1 分冊〉」, 日本電気,1992.

▲ GUY22「科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引〈基本機能編第 2 分冊〉」, 日本電気,1992.

▲ GUY23「科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引〈基本機能編第 3 分冊〉」, 日本電気,1992.

▲ GUY24「科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引〈基本機能編第 4 分冊〉」, 日本電気,1992.

▲ GUY28「科学技術計算ライブラリ ASL/SX V2 利用の手引〈高速機能編〉」, 日本電気,1992.

◇「SX-3R のライブラリ利用法について」, 速報,no.216,1993.3

5.3 MATHLIB/SX（数値計算、統計計算ライブラリ）

行列計算、連立一次方程式、固有値・固有ベクトル、代数方程式、非線形方程式、多項式、補間、関数近似、数値積分、数値微分、常微分方程式、積分方程式、特殊関数、データ操作、基礎統計量、確率分布、回帰分析、多変量解析、時系列分析、検定及び推定、分散分析、乱数などのサブルーチンライブラリ。全ての形態で利用可能です。

MATHLIB ライブラリの割り当て

```
%/usr/bin/f77sx /usr1/w60000a/prog.f /usr/lib/math
```

ライブラリファイル名は ' /usr/lib/math ' です。

▲ GUY11「数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2 利用の手引〈概念／機能編〉」, 日本電気,1991.

▲ GUY12「数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2 利用の手引〈アルゴリズム編〉」, 日本電気,1991.

▲ GUY13「数値計算ライブラリ MATHLIB/SX V2 利用の手引〈例題編〉」, 日本電気,1991.

◇「SX-3R のライブラリ利用法について」, 速報,no.216,1993.3

【注意事項】ASL と MATHLIB に同じ機能のサブルーチンがある場合、ASL の方が新しく、最新の手法が取り入れられています。ASL の方をご利用ください。

6　スーパーコンピュータ用アプリケーション

6.1　SXview

SX 上で実行される計算結果のビジュアルシミュレーションシステム。

◆ 中島「SXview/GWS 入門」, センターニュース,vol.24,No.4,1995-2,pp26-41

▲ GUY31「ビジュアルシミュレーション SXview/GWS・IMG 利用の手引〈対話処理編〉」, 日本電気,1992.

▲ GUY32「ビジュアルシミュレーション SXview/GWS・IMG 利用の手引〈ライブラリ編〉」, 日本電気,1992.

◆ 藤川「SXview の概要」, センターニュース,vol.23,no.2,pp.15-19,1993-11

6.2　分子・材料設計支援システム AMOSS

物質の物理的・化学的性質を非経験的分子軌道計算により解析・予測するシステム。非経験的分子軌道法は、分子中の電子の運動方程式を実験値等の経験的パラメータを用いずに解析的に記述する手法であり、分子設計やドラッグデザインを行うための解析的エンジンの一つとして威力を発揮します。

▲ GUY42「分子・材料設計支援システム AMOSS 利用の手引<分子軌道計算編>」, 日本電気,1995.

▲ GUY43「分子軌道計算システム AMOSS 利用の手引<ポストプロセッサ編>」, 日本電気,1994.

▲ GUY44「分子・材料設計支援システム AMOSS 利用の手引<プリポスト編>」, 日本電気,1995.

6.3　MOPAC（半経験的分子軌道法プログラム）

MOPAC は非常に多くの機能を有しています。すべてを説明できませんので、後述の参考書を参照してください。SX-3R 及び ACOS から利用できます。

計算可能な分子軌道法として、MINDO/3 法、MNDO 法、AM1 法、MNDO/PM3 法があります。プログラムはスーパーコンピュータ SX-3R で実行されるため、2 つのコマンド MOP1、MOPO が ACOS 上に用意されています。ジョブを実行する場合は、MOP1、結果を取り出すために MOPO を使用します。

【利用法】MOPAC の利用

ACOS からバッチジョブを起動します。MOP1 コマンドを入力します。データファイルの問い合わせがありますので、実行するデータが登録されているファイルの名前を入力します。必要な JCL が自動的に作成され、SX-3R にジョブが投入されます。発生したジョブ番号が後で必要になりますので記録しておいてください。ジョブの実行が終了すれば、このコマンドも自動的に終了しますので MOPO コマンドで結果を取り出します。

MOPAC の実行

```
*MOP1
    :
CRJE600 I normal termination
*MOPO
Enter job number-nnnnT ···· MOP1 で発生したジョブ番号を指定します。
```

◆ 高木, その他,「半経験的分子軌道法プログラム MOPAC の移植と、関連プログラムの開発」, センターニュース,vol.22,no.2,pp.1-25,1992.
この資料は SX-2N 用として書かれていますが、SX-3R に再移植されています。

7 汎用コンピュータ用言語/支援プログラム

7.1 FORTRAN77

科学技術計算用として利用されている高水準プログラミング言語、JIS 規格上位水準 (C6201-1982) に準拠。

【利用法 1】TSS での利用

```
SYSTEM ? FRT77   N  ..................................................(a)
* RUN   ファイル名 [ : F=ファイル名、アクセスタイプ (論理機番)] ..........(b)
```

(a) FORTRAN77 サブシステムを呼び出します。

(b) RUN コマンドでソースプログラムが入っているファイルを指定します。データをファイルから入力する場合は F オプションを使用し、プログラム中の論理機番とデータファイルを対応づけます。アクセスタイプは読み込みなら ‘R’、書き込みなら ‘W’ を指定します。

【利用法 2】バッチジョブでの利用

```
カラム  1      8       16
        $      JOB     ; 支払いコード, ジョブクラス,,,,JPA4 ..............(a)
        $      FRT77   LSTIN ..................................(b)
        |                  プログラム                                |
        $      GO      ..................................................(c)
    [   $      PRMFL   論理機番, タイプ, モード, 利用者番号/ファイル名] (d)
        |                  データ                                    |
        $      ENDJOB
```

(a) ジョブクラスには ACOS 用の E、A、B、C、M のいずれかを指定します。

(b) FORTRAN77 でコンパイルするための制御文。必要に応じて 16 カラムからオプションを指定します。この例の LSTIN オプションはソースリストを出力します。

(c) 利用者プログラムを実行します。

(d) データをファイルから入力あるいは出力する場合、$PRMFL 文で割り当てます。タイプには読み込み専用のときは R、書き込み時は W。モードは順アクセス入出力の時は S、直接アクセスの時は R を指定します。

▲ AGB01「FORTRAN77 言語説明書」, 日本電気,1992.

▲ FMC71「FORTRAN77(V) プログラミングの手引」, 日本電気,1992.

▲ FMC72「FORTRAN 支援ツール利用の手引」, 日本電気,1992

7.2 FANALYZE

FORTRAN77 言語で記述されたソースプログラムを入力し、プログラムの構造とプログラムの実行に関する種々の解析情報（構造に関する情報、英字名の相互参照、文番号相互参照プログラム全体の呼び出し関係、プログラム単位の呼び出し関係、共通ブロック相互参照、引き数対応、プログラムの実行に関する情報、ＣＰＵ時間、実行文の総実行回数、ベクトル化率、ベクトル化対象ＤＯループのベクトル化情報各文の実行回数とその比率、分岐先の選択回数とその比率など）を出力する解析ツール。

▲ FMC72「FORTRAN 支援ツール利用の手引」, 日本電気,1992

7.3 FOPTIMIZER

FORTRAN77 言語で記述されたプログラムを解析し、性能向上のための最適化（外部手続きのインライン展開、ＤＯループ入れ替え、ＤＯループ展開、演算評価順序の変更）を図り、新たな原始プログラムを作成する性能向上支援ツール。

▲ FMC72「FORTRAN 支援ツール利用の手引」, 日本電気,1992

7.4 BEAUTIFIER

FORTRAN77 言語で記述された原始プログラムに直接清書処理をほどこし、字下げ等によりプログラム構造を見やすくする清書ツール。

▲ FMC72「FORTRAN 支援ツール利用の手引」, 日本電気,1992

7.5 C

ベル研究所で開発された汎用プログラミング言語、UNIX のシステム記述言語として有名。当初のシステムプログラミングから数値解析、テキスト処理、事務上のデータ処理にまで使われます。「The C PROGRAMING LANGUAGE」準拠と ANSI 規格準拠の 2 種類があります。

△ B.W. カーニハン,「プログラミング言語 C」, 共立出版,1981

▲ FMK71「C 言語及びプログラミングの手引」, 日本電気,1992

▲ FMK72「C(V) 言語及びプログラミングの手引」, 日本電気,1992

▲ FMK73「C(VX) プログラミングの手引」, 日本電気,1992

8 汎用コンピュータ用サブプログラム　ライブラリ

8.1 ASL（科学技術計算ライブラリ）

基本行列演算、連立一時方程式（直接法、反復法）、固有値・固有ベクトル、最小二乗法、高速フーリエ変換、スプライン関数、数値積分、特殊関数、乱数などの FORTRAN 用サブルーチンライブラリ。

【利用法 1】TSS での利用

```
SYSTEM ? FRT77   N   ..................................................(a)
* RUN   ファイル名:L=LIB/ASL7 ..................................................(b)
```

(a) FORTRAN77 サブシステムを呼び出します。

(b) RUN コマンドでソースプログラムが入っているファイルを指定します。ライブラリを割り当てるため L オプションで ASL ライブラリファイルを割り当てます。

【利用法 2】バッチジョブでの利用

カラム	1	8	16
	$	JOB	；支払いコード，ジョブクラス,,,,JPA4
	$	FRT77	LSTIN .....(a)
	プログラム		
	$	GO	ASL .....(b)
	データ		
	$	ENDJOB	

(a) 必要であれば 16 カラム以降にオプションを指定します。この LSTIN オプションはソースリストを出力します。

(b) $GO 文に ASL オプションを指定します。

▲ FXF11「科学技術計算ライブラリ ASL 利用の手引〈第 1 分冊〉」，日本電気,1992

▲ FXF12「科学技術計算ライブラリ ASL 利用の手引〈第 2 分冊〉」，日本電気,1992

▲ FXF13「科学技術計算ライブラリ ASL 利用の手引〈第 3 分冊〉」，日本電気,1992

▲ FXF14「科学技術計算ライブラリ ASL 利用の手引〈第 4 分冊〉」，日本電気,1992

8.2 MATHLIB（数値計算、統計計算ライブラリ）

行列計算、連立一次方程式、固有値・固有ベクトル、代数方程式、非線形方程式、多項式、補間、関数近似、数値積分、数値微分、常微分方程式、積分方程式、特殊関数、データの操作、基礎統計量、確率分布、回帰分析、多変量解析、時系列分析、検定及び推定、分散分析、乱数などの FORTRAN 用サブルーチンライブラリ。ASL と同じサブルーティンがある場合は ASL のライブラリをお使いください。

【利用法 1】TSS での利用

```
SYSTEM ? FRT77   N   ..................................................(a)
* RUN   ファイル名:L=LIB/MLIB7 ..................................(b)
```

(a) FORTRAN77 サブシステムを呼び出します。

(b) RUN コマンドでソースプログラムが入っているファイルを指定します。ライブラリを割り当てるため L オプションで MATHLIB ライブラリファイルを割り当てます。

【利用法 2】バッチジョブでの利用

カラム	1	8	16
	$	JOB	；支払いコード，ジョブクラス,,,,JPA4
	$	FRT77	LSTIN .....(a)
	プログラム		
	$	GO	MLIB .....(b)
	データ		
	$	ENDJOB	

(a) 必要であれば 16 カラム以降にオプションを指定します。この LSTIN オプションはソースリストを出力します。

(b) $GO 文に MLIB オプションを指定します。

▲ FXF01「数値計算ライブラリ説明書〈MATHLIB 概念／機能編〉」, 日本電気,1992

▲ FXF02「数値計算ライブラリ説明書〈MATHLIB アルゴリズム編〉」, 日本電気,1992

▲ FXF03「数値計算ライブラリ説明書〈MATHLIB-6 例題編〉」, 日本電気,1992

8.3 図形処理ライブラリ

- GKS ライブラリ
  ISO7942 に準拠したグラフィックサブルーティンライブラリ。
  ▲ AHA31「GKS プログラミングの手引」, 日本電気,1992
  ◇「GKS のサービス開始について」, 速報,no.196,1991.

- 図形処理用 FORTRAN77 サブルーチンライブラリ
  ●「図形処理の手引」第二版, 大阪大学大型計算機センター,1984

9 汎用コンピュータ用アプリケーション プログラム

9.1 SPSS（第 4 版）

集合データファイルの記述統計、分散・共分散分析、ボックス・ジェンキンス法、サブグループの記述統計、数量データの記述統計、クロス集計、判別分析、因子分析、変数分布とヒストグラムの作成、多変量分散分析、重複反応を持つ変数の作表、スピアマン及びケンドールの順位相関係数、ノンパラメトリック分析、一元配置分散分析、偏相関係数、ピアソンの相関係数、重回帰分析、信頼性係数、レポートジェネレータ、相関グラフの作成、生存表分析、2 つの平均の差の検定、その他、社会科学における統計パッケージ。

【利用法 1】基本的なジョブ構成

```
カラム  1        8        16
        $        JOB      ; 支払いコード, ジョブクラス,,,,JPA4
        $        CPROC    SPSS ..........................(a)
        |                 SPSS プログラム                 |
        $        ENDJOB
```

(a) SPSS の呼びだし

【利用法 2】データのファイルからの入力とシステムファイルの作成

```
カラム  1        8        16
        $        JOB      ; 支払いコード, ジョブクラス,,,,JPA4
        $        CPROC    SPSS
        $        PRMFL    11,R,S, 利用者番号/ファイル名 1 ........(a)
        $        PRMFL    12,W,S, 利用者番号/ファイル名 2........(b)
        FILE HANDLE  din/DEVICE=11/RECFORM=F/LRECL=80 .....(c)
        FILE HANDLE  dout/DEVICE=12/RECFORM=SYS/LRECL=512 (d)
        DATA    LIST    FILE= din /A1    1-5
                A2    6-10
        SAVE    OUTFILE= dout
           ⋮
        $        ENDJOB
```

(a) ケースデータが入っているファイルを割り当てます。

(b) システムファイルとして保存するファイルを割り当てます。あらかじめファイルは作成しておく必要があります。

(c) ケースデータファイルの定義。1レコードの長さが80文字、装置番号を11と定義し、(a)と対応づけます。

(d) 保存するシステムファイルの定義。装置番号12と定義し、(b)と対応づけます。

△ SPSS Inc.,「SPSS-X　User's Guide」,McGraw-Hill

△ 三宅一郎, 他,「新版 SPSS-X　I 基礎編」, 東洋経済新報社

△ 垂水共之, 他,「新版 SPSS-X　II 解析編 1」, 東洋経済新報社

△ 三宅一郎, 他,「新版 SPSS-X　III 解析編 2」, 東洋経済新報社

◆岩井,「SPSS R4.0 の概要」, センターニュース,vol.22,no.4,pp57-85,1992

◆岩井,「SPSS による正準相関分析の実行について」, センターニュース,vol.22,no.4,pp39-56,1992.

◆家本　修,「SPSSX の数量化サブプログラムについて」, センターニュース,vol.21,no.4,pp.29-44,1992.

◆中島,「統計パッケージ SPSS から SPSS-X への移行について」, センターニュース,vol.20,no.3,pp.61-68,1990.

◆小野寺義孝, 他,「汎用統計パッケージ SPSS-X のサブプログラム」, センターニュース,vol.18,no.2,pp.71-159,1988.

9.2　SALS（最小二乗法標準プログラム）

自然科学における実験データの解析のための、汎用性のある最小二乗法プログラム。

【利用法 1】単精度版バッチジョブ

カラム	1	8	16
	$	JOB	; 支払いコード, ジョブクラス,,,,JPA4
	$	FRT77	LSTIN
	プログラム		
	$	GO	SLIB ..... (a)
	データ		
	$	ENDJOB	

(a) $GO 文に SLIB オプションを指定します。倍精度版の場合は SLIBD。

【利用法 2】TSS での利用

SYSTEM ? FRT77　N ..... (a)

＊ RUN　ファイル名:L=LIB/SLIB7 ..... (b)

(a) FORTRAN77 サブシステムを呼び出します。

(b) RUN コマンドでソースプログラムが入っているファイルを指定します。ライブラリを割り当てるため L オプションで SALS ライブラリファイルを割り当てます。

● 小柳義夫, 他,「最小二乗法ＳＡＬＳ利用の手引」, 東京大学大型計算機センター

9.3 DAISY（データ解析システム）

データの概観、クリーニングから統計や計量経済分析などの解析（多変量解析・数量化、検定・分散分析、クロス集計・クロス統計、時系列分析、計量経済分析）が画面型端末を使用して会話的に利用できるデータ解析システム。

▲ DXT11「データ解析システム DAISY 概説書」, 日本電気,1992

▲ DXT15「データ解析システム DAISY 利用の手引〈共通編〉」, 日本電気,1992

▲ DXT21「データ解析システム DAISY 利用の手引〈統計解析システム編〉」, 日本電気,1992

▲ DXT41「データ解析システム DAISY 利用の手引〈時系列・計量経済分析システム編〉」, 日本電気,1992

▲ DXT51「データ解析システム DAISY 利用の手引〈解析データ操作システム編〉」, 日本電気,1992

▲ DXT61「データ解析システム DAISY 事例集」, 日本電気,1992

9.4 FEMLAB（有限要素法解析システム）

構造解析、熱伝導解析、最適設計などの解析を有限要素法を用いて処理する解析パッケージ。

【利用法 1】TSS での利用

```
SYSTEM ? ACCE    AF,FEMLAB/MSG,FILE"09",R ..........................(a)
SYSTEM ? CARD NEW
* FEMLAB/FEMLAB ....................................................(b)
LOAD filename .....................................................(c)
RUN
      実行
BYE
SYSTEM ?
```

(a) メッセージファイルを割り当てる。

(b) FEMLAB を呼び出す。

(c) filename で利用者が作成した FEMLAB 用プログラムを指定する。

【利用法 2】バッチジョブ

カラム	1	8	16
	$	JOB	;支払いコード, ジョブクラス,,,,JPA4
	$	CPROC	FEMLA
	FEMLAB プログラム		
	$	ENDJOB	

▲ DXT「有限要素法解析システム FEMLAB 操作の手引き」, 日本電気,1995

▲ DXT「有限要素法解析システム利用の手引き＜機能編＞」, 日本電気,1995

▲ DXT「有限要素法解析システム利用の手引き＜例題編＞」, 日本電気,1995

9.5 STATPAC-6（統計解析システム）

基礎統計量、検定、分散分析、相関・回帰分析、多変量解析、数量化理論、ノンパラメトリック分析などの統計解析パッケージ。

【利用法】バッチジョブでの利用のみ

```
カラム  1        8        16
        $        JOB      ;支払いコード,ジョブクラス,,,,JPA4
        $        CPROC    STPC6
        [        STATPAC6プログラム        ]
        $        ENDJOB
```

▲ DXB02「統計解析システム説明書〈STATPAC-2/4/6〉」, 日本電気,1989

9.6 ISAP-6（複合構造解析システム）

静的解析、振動解析、時刻歴応答解析、最大応答解析、周波数応答解析の解析ができる、有限要素法を用いた汎用構造解析プログラムパッケージ。グラフィックディスプレイに図形表示も可。

【利用法１】TSS での利用

```
SYSTEM ? SAPV ..................................(a)
INPUT TERMINAL TYPE
N6921=1   N6922=2   N6960=6
  TERMINAL   TYPE ?
=6 .............................................(b)
  ⋮
? S ............................................(c)
```

(a) ISAP-6/GRAPHIC サブシステムを呼び出します。

(b) 使用する装置の番号を入力します。

(c) ISAP-6/GRAPHIC サブシステムを終了させます。

【利用法２】バッチジョブ

```
カラム  1        8        16
        $        JOB      ;支払いコード,ジョブクラス,,,,JPA4
        $        CPROC    DISAP
        [        ISAP6プログラム           ]
        $        ENDJOB
```

▲ FXI52「複合構造解析システム説明書〈ISAP〉」, 日本電気,1991.

▲ FXI53「複合構造解析システム説明書〈ISAP 操作編〉」, 日本電気,1988.

▲ FXI54「複合構造解析システム説明書〈ISAP 例題編〉」, 日本電気,1991.

▲ FXI56「ISAP ディジタルプロッタサブシステム説明書〈ISAP/XYP〉」, 日本電気,1991.

▲ FXI57「ISAP 図形処理サブシステム説明書〈ISAP/GRAPHIC V2〉」, 日本電気,1991.

▲ FXI59「複合構造解析システム説明書〈ISAP エラーメッセージ編〉」, 日本電気,1988.

9.7 EPLAN（二次元及び軸対称弾塑性大ひずみ問題解析有限要素法プログラム）

大ひずみを伴う弾塑性問題解析のための有限要素法に基づいて作成されたパッケージ。

【利用法】バッチジョブでの利用のみ

```
カラム  1        8        16
        $        JOB      ;支払いコード,ジョブクラス,,,,JPA4
        $        CPROC    EPLAN
        [                データ                ]
        $        ENDJOB
```

◆ 富田,「2次元及び軸対称弾塑性大ひずみ問題解析有限要素法プログラムの利用について」,センターニュース,vol.14,no.1,pp.59-70,1984.

9.8 RPLAN（二次元及び軸対称剛塑性問題解析有限要素法）

剛塑性問題解析のための有限要素法に基づいて作成されたプログラム。

【利用法】バッチジョブでの利用のみ

```
カラム  1        8        16
        $        JOB      ;支払いコード,ジョブクラス,,,,JPA4
        $        CPROC    RPLAN
        [                データ                ]
        $        ENDJOB
```

◆ 富田,「二次元及び軸対称剛塑性問題解析有限要素法プログラムの利用について」,センターニュース,vol.16,no.4,p.69-81,1987.

9.9 MNDOA、MNDOC（半経験的分子軌道法プログラム）

分子軌道法、半経験的分子軌道法による分子計算プログラムパッケージ。

【利用法1】MANDOA のバッチジョブでの利用

```
カラム  1        8        16
        $        JOB      ;支払いコード,ジョブクラス,,,,JPA4
        $        CPROC    MNDOA
        [                データ                ]
        $        ENDJOB
```

【利用法2】MANDOA の TSS での利用

SYSTEM ? *FRT77 N*
* *MNDA*
DATA FILE ? ファイル名 ……(a)

(a) 入力データの入っているファイル名を指定します。このファイルはクイックアクセスファイルか、そうでなければ MNDA コマンド入力前に GET コマンドで AFT に登録しておく必要があります。出力結果をファイルに保存する場合は CREATE コマンドで '06' というファイルを作っておく必要があります。

【利用法３】MNDOC のバッチジョブでの利用

カラム	1	8	16
	$	JOB	；支払いコード，ジョブクラス,,,,JPA4
	$	CPROC	MNDOC
	データ		
	$	ENDJOB	

【利用法４】MNDOC の TSS での利用

SYSTEM？ *FRT77　N*
＊ *MNDC*
DATA　FILE？ ファイル名

◆ 佐々木，他「半経験的分子軌道法プログラムＭＮＤＯの改良と整備」，センターニュース，vol.14,no.4,pp.103-115,1985.

◆ 高木，他「半経験的分子軌道法ＭＮＤＯＣの改良と整備」，センターニュース，vol.16,no.4,pp.83-99,1987.

9.10　LAOCN5、PIC(ＮＭＲスペクトル解析プログラム)

このプログラムは LAOCOON3 及び LAOCOON4A を、Bari 大学の L.Cassidei と O.Sciacovelli が改良したものです。また移植者によりグラフィックディスプレイに表示するルーチンが付け加えられています。

【利用法１】LAOCN5 のバッチジョブでの利用

カラム	1	8	16
	$	JOB	；支払いコード，ジョブクラス,,,,JPA4
	$	CPROC	LAO5
	データ		
	$	ENDJOB	

【利用法２】LAOCN5 の TSS での利用

SYSTEM？ *FRT77　N*
＊ *LAO5* ……(a)
DATA　FILE？ ファイル名 ……(b)

(a) LAO5 を起動します。

(b) 入力データの入っているファイル名を指定します。出力結果をファイルに保存する場合は、LAO5 コマンド入力前に CREATE コマンドで‘06’というファイルを作成しておく必要があります。

【利用法３】PIC の利用

SYSTEM？ *FRT77　N*
＊ *PIC* ……(a)
ENTER　TERMINAL　TYPE ……(b)
DATA　FILE？ ファイル名 ……(c)

(a) PIC を起動します。

(b) 使用している端末の形式を指定します。

(c) 入力データの入っているファイル名を指定します。

◆ 高木, 他,「NMR スペクトル解析プログラム、LAOCN5 の移植と関連プログラムの開発」, センターニュース,vol.18,no.2,pp.161-173,1988.

9.11 PROPATH（熱物性値プログラム）

流体の熱物性値が関数型で与えられるプログラム。

【利用法 1 】バッチジョブでの利用のみ

カラム	1	8	16
	$	JOB	;支払いコード, ジョブクラス,,,,JPA4
	$	FRT77	
		プログラム	
	$	EXEC	PROPATH
	$	PRMFL	02,W,S, 利用者番号/ファイル名 .(a)
	$	ENDJOB	

(a) ファイルコード 02 に結果が出力されます。

【利用法 2 】TSS での利用

SYSTEM ? *FRT77 N*

* *RUN ファイル名:L=LIB/PROPATH;* .....(a)

MORE ? *F=出力ファイル名 (02)* .....(b)

(a) メインプログラムが登録されているファイルを指定し、L オプションで Propath ライブラリを指定します。

(b) 出力結果が 02 のファイルコードに出力されるので出力結果用ファイルを割り当てます。

◆ 山本,「流体の熱物性値を関数で与える熱物性値プログラムパッケージ " PROPATH " 活用法」, センターニュース,vol.16,no.3,pp.143-167,1986.

9.12 POISN（直接解法による 3 次元ポアソン方程式プログラム）

幾つかの境界条件を持つ 3 次元ポアソン方程式を直接解法で解くプログラム。

【利用法】バッチジョブでの利用のみ

カラム	1	8	16
	$	JOB	;支払いコード, ジョブクラス,,,,JPA4
	$	EXEC	{ *DPOIS* / *SPOIS* } .....(a)
		データ	
	$	ENDJOB	

(a) 倍精度版のときは DPOIS、単精度版のときは SPOIS を指定します。

◆ 酒井,「直接解法による 3 次元ポアソン方程式計算プログラム利用の手引」, センターニュース,vol.18, no.1,pp.71-85,1988.

9.13 HBLS-V（X線結晶解析のための最小二乗法プログラム）

結晶構造の精密化を行うプログラム。

【利用法】バッチジョブでの利用のみ

```
カラム 1        8        16
       $        JOB      ;支払いコード,ジョブクラス,,,,JPA4
       $        CPROC    UNICS/HBLS
       $        PRMFL    05,R,S,LIBSOURCE/UNICS/HBLS/HBLSDATA (a)
       $        PRMFL    11,R,S,LIBSOURCE/UNICS/HBLS/FDATA ....(b)
       $        PRMFL    12,R,S,LIBSOURCE/UNICS/HBLS/APINPUT .(c)
       $        PRMFL    07,W,S,利用者番号/APOUTPUT .............(d)
       $        PRMFL    13,W,S,利用者番号/RWP ....................(e)
       $        PRMFL    14,W,S,利用者番号/ESD ....................(f)
       $        PRMFL    15,W,S,利用者番号/DELTA ..................(g)
       $        ENDJOB
```

(a)(b)(c) 参考用の入力テストデータ

(d)(e)(f)(g) テスト結果が出力されるファイル。あらかじめ作成しておく必要があります。ファイル名は任意でよい。

◆ 三木,「x線結晶解析のための最小二乗法プログラムＨＢＬＳ－νの改訂について」, センターニュース,vol.17,no.2,pp.101-112,1987.

なお、これらのアプリケーションの簡単な説明とジョブ制御言語の組み方が「プログラム・ライブラリの概要と使用法」の手引（ファイル化）に説明されています。

10 データベース

データベースはすべて汎用機上に構築されています。

データベース名	内　容	件数
PROTEIN-DB	蛋白質の結晶構造データの検索と図形表示	2,441 件
NQR	核四極スペクトルに関する書誌的情報と数値データ	10,820 件
JSR	学術研究・教育のための科学映画の二次情報	11,100 件
SPEECH-DB	音声認識の研究のための音声データ	46MB
BIOSIS	生物学・生物医学分野の学術文献情報	651 万件
CHEM-J	日本国内の化学文献・論文のデータ	202,000 件
ECD	電解質溶液の物性データ	1,300 件
KIGYO	上場企業 1700 社の有価証券報告書	16,000 件
TAXA	種子植物分類学の 1980 年以前の文献データ	16,000 件

● 「オンラインデータベース利用ガイド (第 15 版)」, 全国共同利用大型計算機センターデータベース連絡会, 平成 7 年 11 月

◆ 「蛋白質データベースを IRIS-4D で可視化する方法」, センターニュース,vol.22,no.4,pp.87-93,1993.2

◆ 「タンパク質立体構造データベースの新しいコマンドについて」, センターニュース,vol.15,no.4,pp.137-184,1986.

◆「SPEECH-DB 利用説明書」, センターニュース,vol.15,no.2,pp.77-105,1985.

◆ 千原「データベースＮＱＲ検索の手引」, センターニュース,vol.19,no.1,pp.71-83,1989.

◆ 「BIOSIS データベース（第２版)」, 大阪大学大型計算機センター利用の手引,1991.12

◆ 千原「日本の化学文献データベースの検索法」, センターニュース,vol.19,no.3,pp.51-65,1989.

◆ 石田「電気化学データベース利用の手引」, センターニュース,vol.18,no.2,pp.19-37,1988.

◆ 岡田「種子植物分類学文献データベースの検索法」, センターニュース,vol.22,no.3,pp.53-61,1992.11

11 Onyx のソフトウェア

11.1 ウィンドウシステム

X11/R4,IRIX/Motif,Display PostScript

11.2 言語

Fortran77,c

11.3 最適化ツール

マルチプロセッサ上でプログラムを効果的に実行できる最適化プリプロセッサ。
IRIS Power C Analyzer,IRIS Power Fortran Accelertor

11.4 IRIS Showcase

マルチメディアプレゼンテーションツール

11.5 IRIS Inventor

3D グラフィックスプログラミングのためのオブジェクト指向ソフトウェアライブラリ。

11.6 ライブラリ

IMSL ライブラリが利用可能です。

- MATH/LIBRARY 広範な数学能力と共に、工学、科学、その他の数学計算を必要とする分野のアプリケーションサブルーチン。
- STAT/LIBRARY 科学/ビジネス用アプリケーションのデータ解析/表現のためのサブルーチン。

◇「Onyx の IMSL ライブラリの利用方法について」, 速報 No.240,1995.4.20

11.7 数式処理システム mathematica

数式処理、数値計算、グラフ処理をあわせた統合型ソフトウェア。

◇「Onyx 上での数式処理システム mathematica のサービス開始について」, 速報 No.240,1995.4.20

◆出口, 富田「Onyx によるアニメーションの作成方法について」, センターニュース,vol.24,No.4,pp.4-11,1995-2

◆出口, 富田「船体動揺による槽内の流体挙動と内壁に働く変動荷重の可視可」, センターニュース,vol.24, No.4,pp.12-19,1995-2

◆ 東田「PVM と PCA による Onyx 上の並列処理システムの構築」, センターニュース,vol.23,no.4, pp.61-88,1994-2.

12 ワークステーションのソフトウェア

12.1 SPARCstation のソフトウェア

①ウィンドウシステム： x window system（R11.4)、OpenWindows、Sun View
②言語： C
③図形処理： Sun Pixrect、Sun CGI、Sun Core
④文書処理： TeX、jlatex、kdraw、tgif
⑤数式処理： Mathematica
数式処理だけでなく、任意精度の数値計算やグラフ処理が行える統合型ともいえるソフトウェア。

◆ 魚井,「大阪大学大型計算機センターにおける数式処理ソフトウェア Mathematica の使い方」, センターニュース,vol.20,no.2,pp.25-33,1990.

⑥ファイル転送： KERMIT,FTP

◆ 中島「ファイル転送のまとめ」, センターニュース,vol21,No.1,1991

⑦POP メール,NNTP ニュースサービス
お手持ちのパソコンでインターネット[4]上でのメールのやりとり、及びニュースの購読が簡単にできます。

◇「インターネットサービスの開始について」, 速報,no.251,1996.3.21

◇「POP メールサービス」, 速報 No.237,1995.1.25

◇「NNTP ニュースサービス」, 速報 No.237,1995.1.25

12.2 IRIS のソフトウェア

①言語： FORTRAN-77,C
②画像処理： EXPLORER,AVS
可視化機能と分析機能が提供されているアプリケーション作成システム。利用者は、に附属する各種モジュールを接続するだけで、専門的なプログラミング知識がなくても可視化を短時間で行うことができます。

[4] 大阪大学大型計算機センターの運用についての「ネットワークからの利用」をご覧ください。

▲ IRIS Explorer Module Writer's Guide,SGI

▲ IRIS Explorer User's Guide,SGI

▲ IRIS Explorer Reference Page,SGI

▲ AVS Module referencs、AVS User's Guide、AVS Tutorial Guide

◆ 出口,その他「IRIS-4Dで2次元情報を3次元空間へ展開する方法」,センターニュース,vol.23,no.4,pp.27-36,1994-2.

◆ 広瀬,その他「第一原理分子動力学シミュレーションデータの可視化」,センターニュース,vol.23,no.4,pp.47-59,1994-2.

◆「IRIS-4Dの静止画出力装置について」,センターニュース,vol.22,no.4,pp.95-97,1993.2

◆小林「グラフィックワークステーションIRIS-4Dの概要と利用法」,センターニュース,vol.22,no.2,pp.59-65,1992.8

◆出口「汎用可視化ツールExplorerの使い方」,センターニュース,vol.22,no.2,pp.66-92,1992.8

◆小林「IRIS-4Dのビデオシステムについて」,センターニュース,vol.22,no.2,pp.93-98,1992.8

◆箱嶋　俊雄,「三次元カラーグラフィックワークステーションIRIS-4D」,センターニュース,vol.21,no.3,pp.21-33,1991.

12.3　EWSのソフトウェア

①ウィンドウシステム：　x window system（R11.4）
②言語：　FORTRAN-77(f77)、C、Common Lisp、UTILISP、FAnalyzer、pascal、
　Allegro Common Lisp、PROLOG2、C++
③図形処理：　GKS、XGKS
④翻訳処理：　PIVOT　日英及び英日翻訳支援ソフトウェア。

◆中島「翻訳ワークベンチPIVOT入門」、センターニュース,vol.22,no.2,pp.99-113,1992.8

⑤文書処理：　DWB、JWB
⑥イメージ支援処理：　Image-Driver、Image View
⑦AI：　EXBASE、EXTOOL、EXWORK
⑧統計解析：　micro Researcher II、SII
⑨ファイル転送：　KERMIT,FTP
⑩FAXサービス：　ワークステーションからのFAXへの送出

◇「FAXサービスの利用について」,速報 No.237,1995.1.25

◆中島,「初めてワークステーションを使われる方へ」,センターニュース,vol.22,no.1, pp.58-66,1992.5

◆中島,「端末ソフト"HTERM"によるワークステーションの利用」,センターニュース,vol.22, no.1,pp.67-86,1992.5

◇「ターミナル・サーバ（Annex II）の利用について」,速報,no.192,1991.

◇「newsサービスの開始について」,速報,no.186,p.5-8,1990.