

1977・10・25

# 九州大学 大型計算機センターニュース

No. 149

福岡市東区箱崎6丁目10番1号  
九州大学大型計算機センター  
共同利用掛(TEL092-641-1101)  
内線 2256

## 目 次

◇ プログラムライブラリについて・・・・・・・・・・ 1

### ◇ プログラムライブラリについて

新システムでのプログラムライブラリの利用について、以下に、1) 九大ライブラリ、2) 富士通提供のSSL, SSL II, およびアプリケーションプログラム、3) SPSS, 4) 名大SSL, に分けてお知らせします。

#### 1) 九大ライブラリ

九大ライブラリのなかで、11月1日より使えるものを表1に示します。この表にのっていない九大ライブラリについては、現在、書き替え作業中ですので、終わりしだいセンターニュースでお知らせします。

なお、九大ライブラリを利用する際には、つぎの点に、ご注意ください。

- i) FACOM 230-75 (以下、F-75と略称) と FACOM M-190 とのハードウェアの違いにより、F-75の計算結果よりも、精度が、単精度の場合、約1~2桁、倍精度の場合、約2~3桁悪くなります。そのため、利用者が引数として、収束判定値を与えるときなどは十分注意してください。
- ii) 実引数として、文関数名や組み込み関数名を書いてはいけない。これについては、広報 Vol. 10, No. 3, 別冊 新システム特別号のFORTRANを参照してください。

九大ライブラリの詳細な利用法は、利用の手引「ライブラリ編」を参照してください。

2) 富士通提供のSSL, SSLII, およびアプリケーションプログラム

F-75で使用できたものは、新システムにおいてもほとんど同じように使えます。使用できるプログラムは、広報, Vol. 10, No. 3, 別冊 新システム特別号に付表としてのせていますので、それをご覧ください。

3) SPSS

SPSSは、従来京大センターより譲渡してもらったのを九大ライブラリとして登録していたものですが、SPSSの管理がChicago大学からSPSS Inc. という企業体に移つたのに伴つて、ライセンス契約の問題が起こり、そのまま従来のやり方で使用するわけにはいなくなりました。そのために、しばらくは現在F-75が稼動している名大もしくは北大センターを利用していただくようお願いいたします。あしからずご了承ください。

4) 名大SSL

名大SSLについては、アセンブリ言語についての互換性がないため、新システムでは使用できません。この中の優秀なプログラムについては、いずれ使用できるようにとその措置を考慮中です。

表1. 九大ライブラリ

| 登録番号 | IDコード     | 内 容                     |
|------|-----------|-------------------------|
| 4    | C2/SANJI  | 複素係数3次代数方程式             |
| 57   | C2/GRAEFS | 高次代数方程式 Graeffe Modify法 |
| 58   | C2/GRAEFD | 高次代数方程式 Graeffe Modify法 |
| 7    | C3/CNDS   | 累積正規分布関数                |
| 59   | C3/DERF   | 誤差関数, 余誤差関数             |
| 65   | C3/BETA   | ベータ関数                   |
| 66   | C3/FBET   | 不完全ベータ関数                |
| 34   | C7/POWELL | 関数の極小値                  |
| 18   | D1/CGJQ   | Gauss-Jacobi積分公式の係数     |
| 20   | D1/ROMBGS | 数値積分 Romberg法           |
| 21   | D1/ROMBGD | 数値積分 Romberg法           |
| 161  | D1/DBLEXP | 二重指数関数型数値積分公式           |

| 登録番号 | IDコード     | 内 容                           |
|------|-----------|-------------------------------|
| 1    | F2/HER4   | 複素共役行列の固有値および固有ベクトル           |
| 80   | F2/SHQS   | 実対称行列の固有値・固有ベクトル QR法          |
| 81   | F2/SHQD   | 実対称行列の固有値・固有ベクトル QR法          |
| 82   | F2/HHQOS  | 複素共役行列の固有値 QR法                |
| 83   | F2/HHQOD  | 複素共役行列の固有値 QR法                |
| 9    | F4/GSRENS | 連立一次方程式 Gauss-Seidel法         |
| 10   | F4/GSREND | 連立一次方程式 Gauss-Seidel法         |
| 141  | F4/LUDECS | 連立一次方程式 LU分解法(反復改良)           |
| 142  | F4/LUDECD | 連立一次方程式 LU分解法(反復改良)           |
| 46   | G1/CNTGTB | 2×2の表の解析                      |
| 129  | G5/RTEST2 | 一様乱数検定(Ⅲ)                     |
| 132  | G5/RUN2   | 一様乱数発生                        |
| 133  | G5/RUD2   | 一様乱数発生(倍精度)                   |
| 134  | G5/RNO2   | 正規乱数発生                        |
| 87   | G6/PCAJCB | 主成分分析 Jacobi法                 |
| 45   | G9/EIYOO  | 栄養調査統計および解析                   |
| 13   | JQ/MPTCS  | 行列の印刷(複素数)                    |
| 14   | JQ/MXPTS  | 行列の印刷(実数)                     |
| 47   | JQ/GRAPH  | グラフの印刷                        |
| 52   | JQ/LETTER | 花文字の印刷                        |
| 91   | Y1/RLC3   | 格子定数の決定                       |
| 99   | Y1/DTR3   | 単結晶強度データ処理                    |
| 101  | Y1/SCMA   | 規格化構造因子の計算と $\Sigma_2$ リストの作表 |
| 102  | Y1/SFR5   | 一般フーリエ合成および構造因子               |
| 103  | Y1/RSSA   | 結晶構造因子の計算                     |
| 104  | Y1/RDLS   | 対角近似, 等方性最小自乗法                |

| 登録<br>番号 | I Dコード    | 内<br>容                           |
|----------|-----------|----------------------------------|
| 105      | Y1/FLS4   | 完全マトリックス構造因子, 最小自乗法              |
| 108      | Y1/RBP3   | 分子平面の計算                          |
| 109      | Y1/RDA4   | 原子間距離および角度                       |
| 110      | Y1/RMV4   | 分子の剛体振動                          |
| 112      | Y1/HBLS   | ブロック近似最小自乗法とフーリエ合成               |
| 146      | Y1/APLM   | 格子定数の精密化および反射の理論的再生              |
| 148      | Y1/XEMAPX | 規格化構造因子 ( E ) によるフーリエ合成          |
| 150      | Y1/DAPH   | 原子間距離, 原子価格, 平面方程式等              |
| 27       | Y3/DB01   | クレブシュ・ゴールドン係数                    |
| 28       | Y3/DB02   | ラッカー係数                           |
| 29       | Y3/DB03   | 9-J 係数                           |
| 36       | Y3/AA03   | D W B A による直接反応の解析 ( D W B A 2 ) |
| 41       | Y3/DB05   | 調和振動子波動関数によるテンソル力の二体行列要素         |
| 135      | Y3/SHL1   | 調和振動子波動関数                        |
| 136      | Y3/SHL2   | 調和振動子波動関数による二体行列要素               |
| 137      | Y3/SHL3   | j-j 結合殻模型における二体行列要素              |
| 139      | Y3/SHL5   | j-j 結合殻模型における F-type 行列要素        |
| 118      | Y4/MVINS  | 規準振動 データ入力                       |
| 120      | Y4/MVSYM  | 分子内対称座標への変換                      |
| 121      | Y4/MVRD   | 行列の入力                            |
| 122      | Y4/MVABF  | 多原子分子の規準振動 結果の印刷                 |
| 154      | Y4/MVOUTP | 基準振動 P E D の印刷                   |