

九州大学 大型計算機センターニュース

No. 93

1975. 5. 10

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

◇ FEM-MATRIX サブルーチンについて

◇ 試用期間を終えたライブラリプログラムについて

◇ 富士通株式会社福岡営業所所在地の変更について

◇ FORTRAN, ALGOL のメインプログラム名の変更について

◇ ジョブ制御マクロの変更について

◇ 利用者講習会について

◇ FEM-MATRIX サブルーチンについて

広報 Vol. 7 No. 3 に掲載した「FEM-MATRIX サブルーチンを試用して」について、その使用法の説明がありますが、そのなかで4月からのM-VII運用に伴い下記のように変更がありますのでご注意ください。

頁	行	変 更 後	変 更 前
104 (4)	22	FACOM 230-75 システム	FACOM 230-70 システム
107 (7)	11	SYS1. APPLIBのファイルに登録されているが、標準マクロ \$ LIEDRUN では組込むことができない。 \$ PLIBRUN でパラメータ LIBFILE = SYS1. APPLIB の	SYS1. APPLIBのファイルに登録されているが、標準マクロ \$ LIEDRUN では組込むことができない。 \$ PLIBRUN でパラメータ FILENAME = SYS1. APPLIB の
	下9	専用ファイルを使う場合はマクロ \$ PSFILE	専用ファイルを使う場合はマクロ \$ F. DA
	下7	\$ PSFILE Fm, ファイル名, FCBPRM = YES, BLKSIZE = K, RCDSIZE = K② \$ F. WORK Fm, FCBPRM = YES, BLKSIZE = K, RCDSIZE = K [, DISP = PASS]	\$ F. DA UNITO = m, RECORDSIZE = K, FILENAME = ファイル名② \$ F. WORK UNITNO = m, RECORDSIZE = K [, DISP = PASS]
	下2	FACOM MV/VI FORTRAN 文法編	FACOM 230-60 FORTRAN 文法編

頁	行	変 更 後	変 更 前
108(8)	2	2行削除	(その他に、専用ファイル……が必要である)
	8	\$ NO \$ USER \$ QJOB \$ FORTRAND	\$ NO \$ QJOB \$ FORTRAN
	14	FORTRANDソースプログラム	FORTRANソースプログラム
	下13	\$ PLIBRUN LIBFILE=SYS1.APPLIB	\$ PLIBRUN FILENAME=SYS1.APPLIB
	下11	\$F.WORK F01,FCBPRM=YES, BLKSIZE=360,RCDSIZE= 360……④ \$F.WORK F02,FCBPRM=YES, BLKSIZE=180,RCDSIZE= 180……⑤ \$F.WORK F03,FCBPRM=YES, BLKSIZE=270,RCDSIZE= 270……⑥	\$F.WORK UNITNO=01,RECORDSIZE =360 ……④ \$F.WORK UNITNO=02,RECORDSIZE =180……⑤ \$F.WORK UNITNO=03,RECORDSIZE =270 ……⑥
	下2	\$NO \$USER	\$NO
109(9)	1	\$FORTRAND	\$FORTRAN
	7	\$LIEDRUN EBNAME=AA ……①	\$LIEDRUN EBNAME=AA ……①
	9	\$F.WORK F08,FCBPRM=YES,BLKSI ZE=450,RCDSIZE=450, DISP=PASS……② \$FORTRAND STEP=1	\$F.WORK UNITNO=08,RECORDSIZE =450,DISP=PASS……② \$FORTRAN MACROSTEP=1
	20	\$PLIBRUN LIBFILE=SYS1.APPLIB,	\$PLIBRUN FILENAME=SYS1.APPLIB,
	下12	\$F.WORK F08,FCBPRM=YES, BLKSIZE=450,RCDSIZE=450 ……④ \$F.WORK F09,FCBPRM=YES, BLKSIZE=360,RCDSIZE=360	\$F.WORK UNITNO=08,RECORDSIZE =450……④ \$F.WORK UNITNO=09,RECORDSIZE=360 \$F.WORK UNITNO=10,RECORDSIZE=360

頁	行	変 更 後	変 更 前
		\$F.WORK F10,FCBPRM=YES, BLKSIZE=360,RCDSIZE=360	
	下 4	場合、ファイル定義名は同じである方がよい。 異なる場合は、後続のジョブステップで引き継 がれているファイルに対するマクロで、 FILENAME=のパラメータで前ジョブステップ のファイル定義名を指定しなければならない)	場合、UNITNOは同じでなければならない)
110(10)	4	\$NO \$USER \$QJOB \$FORTRAN	\$NO \$QJOB 7001F9999,XYZ,A,PASSWORD=USR3 \$FORTRAN
	12	\$LIEDRUN	\$LIEDRUN
	14	\$PSFILE F01,AAA,FCBPRM=YES, BLKSIZE=180,RCDSIZE=180…①	\$F.DA UNITNO=01,RECORDSIZE=180, FILENAME=AAA ……①
	17	\$NO \$USER \$QJOB \$FORTRAN	\$NO \$USER \$QJOB 7001F99999,XYZ,B,PASSWORD= USR3 \$FORTRAN
	6	\$PLIBRUN LIBFILE=SYS1.APPLIB	\$PLIBRUN FILENAME=SYS1.APPLIB
	4	\$PSFILE F01,AAA,FCBPRM=YES, BLKSIZE=180,RCDSIZE=180…② \$F.WORK F02,FCBPRM=YES, BLKSIZE=360,RCDSIZE=360 \$F.WORK F03,FCBPRM=YES, BLKSIZE=360,RCDSIZE=360	\$F.DA UNITNO=01,RECORDSIZE=180, FILENAME=AAA ……② \$F.WORK UNITNO=02,RECORDSIZE=360 \$F.WORK UNITNO=03,RECORDSIZE=360

◇ 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利用者提供ライブラリのうち、下記の内容は試用期間中のライブラリと
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、5月19日(月)

より通常のライブラリファイルに登録されますのでお知らせいたします。登録後、※印のライブラリはQS. PLIB. TEST のファイルより消去されますのでご注意ください。

登録番号	I D コード	題 目	登録ファイル名
91	Y1/QC/Z/RLC3	格子定数の決定	QS. ALIB. EB(MT)
92	Y1/QC/Z/RWS3	対称中心の判定	"
93	Y1/QC/Z/ROF3	一次元フーリエ合成	"
94	Y1/QC/Z/RDF3	原子位置の作図	"
95	Y1/QC/Z/TRCL	格子の既約化と空間群記号向きかえ	"
96	Y1/QC/Z/AFIU	原子構造因子の作表	"
97	Y1/QC/Z/ROR3	観測可能な反射の作製	"
98	Y1/QC/Z/INCR	等傾法ワイゼンベルグ法の一般的吸収補正	"
99	Y1/QC/Z/DTR3	単結晶強度データ処理	"
100	Y1/QC/Z/OSFD	粉末回折線データ処理	"
101	Y1/QC/Z/SGMA	規格化構造因子の計算と Σ_2 リストの作表	"
102	Y1/QC/Z/SFR5	一般フーリエ合成および構造因子	"
103	Y1/QC/Z/RSSA	結晶構造因子の計算	"
104	Y1/QC/Z/RDLS	対角近似, 等方性最小自乗法	"
105	Y1/QC/Z/FLS4	完全マトリックス構造因子, 最小自乗法	"
106	Y1/QC/Z/ZHFM	モンテ・カルロ/最適移行法	"
107	Y1/QC/Z/RTE2	R 因子図	"
108	Y1/QC/Z/RBP3	分子平面の計算	"
109	Y1/QC/Z/RDA4	原子間距離および角度	"
110	Y1/QC/Z/RMV4	分子の剛体振動	"
111	Y1/QC/Z/ANSF	異常分散の影響をとり除いた電子密度分布の計算	"
112	Y1/QC/Z/HBLS	ブロック近似最小自乗法とフーリエ合成	"
113	I5/QC/Z/PTRJOB	FORTTRANのための紙テープユーティリティ	"
※114	J6/QU/F/QNUMB	数値プロットルーチン	QS. PLIB. RB
115	G2/QC/Z/DRALGT	ロジットモデルによる離散変量の回帰分析	QS. ALIB. EB(MT)
116	Q9/QC/F/FLDUMP	ファイル ダンプ ルーチン	QS. PLIB. RB
117	Q9/QC/F/FLCOPY	ファイル コピー ルーチン	"

登録番号	IDコード	題 目	登録ファイル名
118	Y4/QC/Z/MVINS	基準振動 データ入力	QS.ALIB.RB0
119	Y4/QC/Z/MVBX	B行列の計算	"
120	Y4/QC/Z/MVSYM	分子内対称座標への変換	"
121	Y4/QC/Z/MVRD	行列の入力	"
122	Y4/QC/Z/MVABF	多原子分子の基準振動 GF行列法	"
123	Y4/QC/Z/MVOUT	規準振動 結果の印刷	"
124	Y4/QC/Z/MVFRS	最小二乗法による力の定数の改良	"
※125	C2/QC/F/YONJIS	複素係数4次代数方程式の解 Ferrari法	QS.PLIB.RB
※126	C2/QC/F/YONJID	"	"
※127	G5/QC/F/RUTEST	一様乱数検定 (I)	"
※128	G5/QC/F/RTEST	" (II)	"
※129	G5/QC/F/RTEST2	" (III)	"
※130	G5/QC/F/PTEST	" (IV)	"
※131	G5/QC/F/RWTEST	" (V)	"
※132	G5/QC/F/RUN2	一様乱数発生	"
※133	G5/QC/F/RUD2	" (倍精度)	"
※134	G5/QC/F/RNO2	正規乱数発生	"
135	Y3/QC/Z/SHL1	調和振動子波動関数	QS.ALIB.RB1
136	Y3/QC/Z/SHL2	調和振動子波動関数による二体力行列要素	"
137	Y3/QC/Z/SHL3	j-j結合殻模型における二体力行列要素	"
138	Y3/QC/Z/SHL4	" G-type 行列要素	"
139	Y3/QC/Z/SHL5	" F-type 行列要素	"
140	Y1/QU/Z/ORTEP	結晶構造の立体作図	QS.ALIB.EB(MT)

◇ 富士通株式会社福岡営業所所在地の変更について

昭和50年3月23日より富士通株式会社・福岡営業所の所在地が下記のように変更になりましたので、お知らせします。

記

〒812 福岡市博多区博多駅前1丁目5番1号

朝日生命福岡ビル

TEL (092) 411-6311

センターニュース 追加記事

◇ FORTRAN D, ALGOLのメインプログラム名の変更について

FORTRAN D, ALGOLでメインプログラム名の指定がない場合(即ち, FORTRAN DではELEMENT文, ALGOLでは制御データELEMENT:=による指定がない場合), メインプログラムのエレメント名は現在"PRG. MAIN"となつていますが, 5月19日(月)より"MAIN"に変更します。これでFORTRAN D, FORTRAN H, ALGOLは全て指定がない場合のメインプログラム名はMAINとなります。

なお, この変更に伴ないLIEDのNAME文のENTRYの指定が変わりますので注意してください。

①5月18日以前に作られたメインプログラムのRBを結合する場合

LIED

NAME 実行形式プログラム名, ENTRY=ELM(PRG. MAIN)

CALL

.
. .
. .
. .

②5月19日以後に作られたメインプログラムのRBを結合する場合

LIED

NAME 実行形式プログラム名, ENTRY=ELM(MAIN)

CALL

.
. .
. .
. .

(注) ENTRYの指定が正しくなされていないと LIEDで

LD204Z PROGRAM NO IRIGUTI GA

OKASII のメッセージが出てアボートされます。

(※)

またCPSのFORTRAN D, FORTRAN H, ALGOL サブシステムにも適用されますのでLIEDサブシステムでLIEDの制御文を与える

場合、および各サブシステムのLIEDステップで実行パラメータを与える場合は注意してください。

FASP, PLIサブシステムにおいてもこれに合わせてLIEDステップのNAME文で実行開始エレメント名をMAINと指定していますのでソースプログラムでメインプログラム名の与え方には注意して下さい。

※コマンド名はFORTRAND

◇ ジョブ制御マクロの変更について

下記のジョブ制御マクロの仕様を5月19日(月)より変更します。

¥ LIEDRUND

¥ LIEDRUNH

¥ LIEDRUNA

¥ PLIBRUN

¥ PLIRUN

¥ CBLRUN

変更点

① START=実行開始エレメント名のパラメータを省略した場合PRG.

MAINとなっていたのをMAINに変更

(前述のFORTRAND, ALGOLのメインプログラム名変更による)

対象となるマクロは¥ LIEDRUND, ¥ LIEDRUNA

¥ PLIBRUN, ¥ PLIRUN

② EBNAME=実行形式プログラム名のパラメータを追加

意味: 指定された名前の実行形式プログラム名はEXQTPRGMとなる。

(従来はEBNAME=EXQTPRGMとなっていた)

対象となるマクロは¥ LIEDRUND, ¥ LIEDRUNH, ¥ LI

EDRUNA, ¥ PLIRUN, ¥ CBLRUN

③ RBDISP=PASSのパラメータを追加

意味: RELBINファイルの後続のジョブステップに引継ぐ

省略するとRELBINファイルは後続のジョブステップに引継がれない。

プログラム実行後(即ち、これらのマクロ使用后)RBエレメントをファイルに登録する場合は必ずこのパラメータを指定しなければならない。詳しい使用方法については利用の手引ファイル編暫定版を参照してください。

対象となるマクロは¥LIEDRUND, ¥LIEDRUNH, ¥LIEDRUNA, ¥PLIBRUN, ¥PLIRUN, ¥CBLRUN

◇ 利用者講習会開催について

F O R T R A N 初心者講習会を下記の要領で行ないますので、受講希望者は西利協事務局 (T E L 6 4 1 - 1 1 0 1 内線 2 2 6 4) へ 5 月 2 6 日 (月) までに申し込んでください。

記

- 期 日 5月28日(水), 29日(木), 30日(金)
- 対 象 初心者(センター利用有資格者)
- 参加人員 60名
- 会 場 理学部生物学第一講義室
- テキスト F A C O M 2 3 0 M - V F O R T R A N 解説編(I)
(センター側に在庫がありませんので必ず各自持参の事)
- 時 間 割

9:30

12:00 13:00

16:00

28日	あ い さ つ	基 本 事 項	昼 休 み	代入文, I F 文, G O T O 文 D O 文, 入出力文 F O R M A T 文, 標準関数
-----	------------------	---------	-------------	---

29日		サブ・プログラム	昼 休 み	センター 利用に ついて	演 習	穿孔 依頼 計算
-----	--	----------	-------------	--------------------	-----	----------------

30日	文法 補足追加	穿孔機使用 方法の説明 計算結果の 返却	昼 休 み	エラーの見方	計算依頼
-----	---------	-------------------------------	-------------	--------	------

(50年5月19日) 利用の手引 ジョブ制御マクロ 正誤表

頁	行	正	誤	
11 12 13 13	19 20 18 下4	} MAIN とは、	PRG-MAIN と は、	
11 12 13 13 14	5 5 4 下18 3			(パラメータの追加) [, EBNAME = 実行形式プログラム名] [, RBDISP = PASS]
14	下16			(パラメータの追加) [, RBDISP = PASS]
11 12 13 13 14	下19の後 " 20の後 下19の後 19の後			(パラメータの説明の追加) EBNAME = 指定された名前の実行形式プログラム名は 実行形式プログラムを作成し、実行する。 EXQTPRGM となる
11 12 13 13 15	8の後	(パラメータの説明の追加) RBDISP = 後続のジョブステップに RELBINファイル PASS がないを引継ぐ	RELBINファイルは引継がれない	
37 38 40 41 41	14 下7 5 下13 下16	NAME -----, ENTRY = ELM (MAIN)	NAME ----, ENTRY = ELM (PRG-MAIN)	
44 44 44 45 45	下6 下3 下1 2 4	(パラメータの追加) [, EBNAME = 実行形式プログラム名] [, RBDISP = PASS]		
45	8	(パラメータの追加) [, RBDISP = PASS]		