

## [06\_05]九州大学大型計算機センター広報 : 6(5)

<https://doi.org/10.15017/1468029>

---

出版情報 : 九州大学大型計算機センター広報. 6 (5), pp.1-33, 1973-10-22. 九州大学大型計算機センター  
バージョン :  
権利関係 :

## 随 想

九州大学教養部 上 田 幾 彦

広報に何か書くようにとのセンターからの依頼に筆をとったものの、果して利用者の皆様に何か参考になるようなことが書けるか？と危惧しながら、昭和46年夏から1年8ヶ月スイスのベルン大学の結晶学教室での有機結晶 ([2n] Metacyclophane) の構造解析のプロジェクトに参加したことについての随想を書く次第です。

昭和43年6月の米軍機墜落事件以来一連の学園紛争による、研究の空白、心理的肉体的な底にたまった疲労からの回復のために海外留学を計画した。幸い九大の OKITAC-5090H 稼動以来、計数施設、大型機センターの皆様の御協力で、幾度も中断しながら続けていた、Prof. Karrer, Prof. Nowacki との共同研究の Capsanthin ( $C_{54}H_{62}O_5Br_2$ ) の構造解析の計算が終ったので、この論文を仕上げる目的もあった。

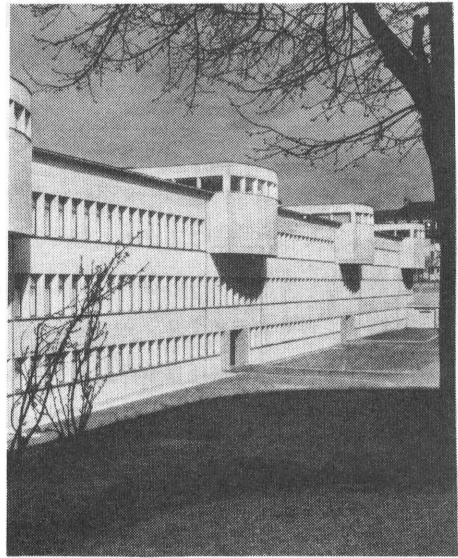
8月15日羽田を出発して、ロンドンでサレー大学の知人をたづねたのち、19日にベルンに到着した。10年ぶりに見るベルンの町はほとんど変わっておらず、豊かなアレー河に落付いた街々のたたずまいを映していた。教室も若い人たちの顔ぶれは変わっていたが、古いメンバーは皆な健在で、時の流れが日本よりはるかにゆっくりしているように感じられた。

はじめの6ヶ月は単結晶の作成、測定の前準備、実験で過ぎた。X線自動回折計をドライブする紙テープは IBM 1620 で作り、測定の結果も同機で処理をして回折強度データを得るようになっていた。ここまでは旧式な回折計のトラブルに悩まされながらも、大体順調に仕事が進んだけれど、さて解析の計算とすると、OKITAC と同程度の Bull  $\Gamma$  30 という MT 6 台のついた計算機で我々の研究室は一週5~10時間程度の割当しかなく、47年の秋の学会にむけての前準備ははかどらず、同僚とばやきながら、ぼつぼつ計算を進めて行った。計算から次の計算まで一週間あるので、少い計算時間を有効に使うために、得た結果をよくチェックし、また次の計算の入力データも入念に調べて、ミスによる無駄は省けたようである。近頃のように計算機のスピードもあがり、手軽に計算機が使えるようになると、あまり考えもしないで計算機にかけてしまい、少量の有効な結果と無駄な Line Printer から出た紙の山という、所謂“消費は美德”、?という状況だけは避けられたようである。

昭和47年の夏に IBM 370 が導入され、ベルン大学、ベルン市の官庁、ベルン市の会社が共同利用する形態で稼動をはじめた。研究室で使用した結晶構造解析用のプログラムは助手の Dr. Engel が従来 Bull  $\Gamma$  用に作成した Fortran と Assembler 言語で書かれたプログラム群を、PL/1 で大巾な改良を加えて書き直した。書換をはじめたのが47年4月頃からで、そのテストは9月から開始され、半年後には殆んど実用上さしつかえない状態になった。この間そのプログラムを使って計算をしている連中にとっては、構造解析の仕事をしているのか、プログラムのテストをやっているのかわからない状況であったが、とにかくつまづきながらも仕事はすすめられた。このプログラムシステムはプログラムリストだけでも135頁もある膨大なもので、僅か一年で一人の力で完成したことは Dr. Engel の

有能さを物語るに充分であろう。

結晶構造解析用のプログラムシステムは、すべての晶系、空間群に属する結晶の計算を処理できるよう作らねばならず、計算の内容も三次元の Fourier 級数、最少に乘法、各種の統計計算を含む複雑なものである。又これらの個々の計算に必要なデータがその計算の間で有機的に結合していることが必要で、かつ計算すべきデータが大量であるところから、計算時間も短くなるように設計しなければならない。このような要求のために、プログラムの設計、組立には、結晶構造解析に対する豊富な経験と計算機及びその言語に対する深い理解を必要とする。しかもプログラムが膨大であるためミスも出来るだけ少くなければ短い期間で完成させることは不可能である。



ベルン大学

有能な Dr. Engel のおかげで、日本にいたときのプログラミングの苦勞から解放されて、いわゆる“あげ膳すえ膳、で解析に専念すればよいという結構な身分で計算をすすめることができた。ただ、計算のときに何度もトラブルにあい、それが自分のミスなのかプログラムのミスなのかかわからず、(自分で作ったプログラムの場合には何んとなく両者の区別はわかるものだが。)よく彼とも口論をやった。ともあれ48年の2月頃からこのプログラムシステムも実用上殆んどトラブルもない状態になり、計算機の方も利用者が少いせいか九大の計算機の C-Job 程度ならば1日3回位はまわせるようになって仕事の方は順調に進む筈であるのだけれど、計算と計算の間の結果チェックと次の計算の計画が粗雑になり、無駄な計算も多くなってしまった。何かしら人間の思考のスピードと計算機のスピードには釣り合いがないといろいろ無駄が出るのではないかというまことに贅沢な感想も出てきた次第である。幸い計算機の使用料は1時間2000Fr (1Fr 約80円) で非常に高いようだけれど、これは本格的な稼働の料金をきめる統計資料をうるための見掛上のもので思う存分計算機を使うことができた。

ただ入出力の費用は有料であったが、この点についても Dr. Engel のプログラムは非常によく出来ていて、はじめに基礎になる数千個のデータ(面反射強度など)を入れておけば、あとはファイルに計算の間の必要なデータが保持され、1つのプログラムの計算ごとに必要な入力、1枚のプログラムを呼出すカードと1~2枚のデータカードですむようになっていた。又ラインプリンターに出すべき出力は3段階にわけて必要結果を出すようにし、出力の節約をはかっていた。紙の大量消費が公害につながることを考えると、これはよいアイデアである。また入力データに対するチェックを可成嚴重にやってミス計算をやらないようになっていた。無駄な金は1文も使わないというスイス人気質のよく出たプログラムだと感心した。計算機のスピードは直接比較できないけれど、同じ計算を FACOM 230-60 の FORTRAN のプログラムで計算したものと、IBM 370 の PL/1 で書かれたプログラムでの計算を比較してみると、後者が半分の時間ですんだ。

帰国直前にイタリアのパビア大学に同じ分野の研究をしている友人を訪問したが、ここでは大きな計算はミラノ大学に依頼し、小さな計算はパビアの大学の小型機を使っていた。又ミラノ大学との連絡は郵便と TSS によっていた。スペインのバルセロナ大学でも大きな計算はフランスに頼んでいた。将来 TSS が本格的になればこのような不便は軽減されるであろうが、通信量の増大と端末機の性能向上には費用の問題がからんで、理想的な状態になるのは程遠いことであろうと思った。

一切の雑用からはなれて、研究に専念し、週末にはスキーをたのしみ（計算センターが土、日休みになるのでは?）、あっという間に留学期間も過ぎてしまいました。お蔭で研究の目的も殆んど達成でき、体の方も元気になって帰国することができました。これまで色々お世話になった九大のセンターの方、留守で御迷惑をかけた教養部の方々に感謝とお詫びの言葉をのべて筆をおきます。