

[24_06]九州大学大型計算機センター広報表紙奥付等

<https://hdl.handle.net/2324/1470202>

出版情報：九州大学大型計算機センター広報. 24 (6), 1991-11-25. 九州大学大型計算機センター
バージョン：
権利関係：

お 知 ら せ

Cコンパイラのバージョンアップについて (No. 442-3の追補)

8/5 (月) より, MSPにおけるCコンパイラを従来のバージョン10からバージョン11に上げて運用しています(センターニュースNo. 442-3参照). これにともない, CCコマンドで起動されるCコンパイラのバージョンも11になります. さらにPFD内からCC, FCC, RCC各コマンドで起動されるCコンパイラのバージョンも11になります.

(センターニュースNo. 446, 平成3年8月27日発行)

ケンブリッジ結晶構造データベースの更新と機能追加について

8月2日に標記データベースのデータを8,522件追加し, 総件数が113,922件になりました.

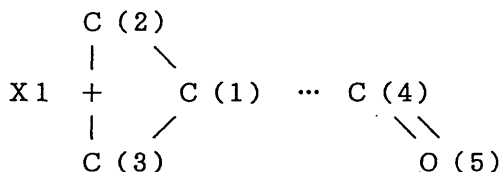
なお, QUEST88の使用法において, 古いデータベースを使用するようになっていたことをお詫びいたします. また, 検索件数の制限が100件になっていたのを, 10000件に変更しましたので, 次のようにコピーして使用してください.

```
COPY 'A70140B.QUEST88.CLIST' QUEST88.CLIST
EX QUEST88
```

GSTAT88が使用できるようになりましたので, 次のようにコピーして使用してください.

```
COPY 'A70140B.GSTAT88.CLIST' GSTAT88.CLIST
EX GSTAT88
```

使用例



1. まず, QUEST88を使用して, 上図の構造の結晶を10件検索(STOP 10)し, GSTAT88用のファイル(FDAT.DATA)を作成(SAVE 3)します.

```
>T1 *CONN
>>AT1 C 3
>>AT2 C 2
```

```

>>AT3 C 2
>>AT4 C 2
>>AT5 O 1
>>BO 1 2
>>BO 2 3
>>BO 1 3
>>BO 1 4
>>BO 4 5
>>END
>QUES T1
>SAVE 3
>STOP 10
>

```

2. 次に、GSTAT88を使用して、条件にあった構造の統計情報を表示させます。

```

>FRAG CYCLOPROPYL-CARBONYLS
>>AT1 C 3
>>AT2 C 2
>>AT3 C 2
>>AT4 C 2
>>AT5 O 1
>>BO 1 2
>>BO 2 3
>>BO 1 3
>>BO 1 4
>>BO 4 5
>>C ENSURE 4 5 IS C=O
>>TEST DIST 4 5 1.15 1.25
>>END
>C GET MID-POINT OF C2-C3 BOND
>SETUP X1 2 3
>C DEFINE FRAGMENT GEOMETRY
>DEF D1 1 2
>DEF D2 1 3
>DEF D3 2 3
>DEF TAU 5 4 1 X1
>C TRANSFORM SOME PARAMETERS
>TRA #INT1 = D1 + D2
>TRA D12M = #INT1 / 2.0
>TRA DIFF = D12M - D3
>TRA PTAU = ABS(TAU)
>SEL D12M 1.45 1.55
>

```

QUEST 88 の使用方法については、文献(1)を参照してください。GSTAT 88 の使用方法については、広報に掲載する予定です。

なお、「結晶構造データベース XDT」の再構築については、10月末までに完成させる予定です。

質問、その他は、メールで、A70140BまたはA70140Cをお願いします。

参考文献

1. 河野重明, ケンブリッジ結晶構造データベース用プログラム QUEST 88 の使用方法, 九州大学大型計算機センター広報, Vol.23, No.3, pp.186-202, 1990年5月.

(データベース室 内線2510)

(センターニュースNo 446, 平成3年8月27日発行)

オペレーティングシステム(OS)のバージョンアップについて

9月24日(火)から、汎用機(M-780)のOSをMSPからMSP/EXにバージョンアップします。これは12月にリプレースを予定している新汎用機のOSですが、繁忙期の導入となりますので移行運用がスムーズに行われるよう、先取りしてバージョンアップするものです。

ソフトウェアやTSSの利用法などは従来と同じです。ただし、SORPのENDサブコマンドでDSFオペランドが指定できなくなりますので、代わりにOUTPUTコマンドを使用してください。

READY

OUTPUT ジョブ名 [(ジョブ番号)] NEW (出力クラス)

注) (ジョブ番号) は同一ジョブ名が複数あるときに指定する

なお、FLIST/MLISTコマンドはOSとのインターフェースを保つのが難しく、将来動作しなくなることも予想されますので、平成4年3月末で正式サポートを停止する予定です。同様な機能を持つPFDEコマンドを利用してください。

(システム管理掛 内線2518)

(センターニュースNo 447, 平成3年9月5日発行)

ロードモジュール名の変更について

9月24日(火)からのOSの変更に伴い、各種PP(Program Products)のロードモジュール名に変更が出ています。ライブラリ名を陽に指定している利用者の方はご注意ください。変更対応表は、"LIB.MSPEX.CHGTBL"で確認して下さい。

(ライブラリ室 内線2508)

(センターニュースNo 448, 平成3年9月19日発行)

MSP/EXにおけるALGOLとBASICの運用停止について

MSPからMSP/EXへのOS移行にともない、ALGOLとBASICの運用を停止します。運用停止によって支障の生じる利用者の方は、ライブラリ室（内線2508）へ御連絡下さい。

（ライブラリ室 内線2508）

（センターニュースNo.448，平成3年9月19日発行）

MSP/EXにおけるLISPの公開について

MSPからMSP/EXへのOS移行にともない、従来のLISP(LISP V01 - LISP 1.5仕様)とCLISP(LISP V10 - Common LISP仕様)に置き換えてLISP(LISP V11 - Common LISP仕様)を運用します。なお、UTILISP(UTILISP)は引き続き運用します。

LISP(LISP V11)は拡張領域上にヒープを取りますので、基本領域のみでは実行できません。TSSで使用する時は以下のようにして下さい。

logon tss a79999a s(9999)(拡張領域使用の宣言)

+ PASSWORD? _____

READY

lisp

(LISPのセッション)

: (quit)

READY

（ライブラリ室 内線2508）

（センターニュースNo.448，平成3年9月19日発行）

ゲータ・ファイルの追加について

従来、ハンブルク版ゲータ全集（全14巻）を「ゲータ・ファイル」として提供してきましたが、ワイマール版ゲータ全集の中の書簡集（全50巻）のうち前半25巻のテキストデータを追加しました。利用法は従来と同様ですが、巻毎のファイルとするとその数が多くなり不便なので、5巻毎にまとめています。使用に際してはDDIRコマンドでファイル名とその内容の対応関係を理解した上で利用して下さい。

```

SIGMA> DDIR S
PASSNUMBER:=
OPTION:= A
FILENAME
ID ALIAS      SIZE      DATE TIME
GA01          4A      0      695152 91:06:03 17:21
  Bd. 1 ( 7-391) Bd. 2 ( 7-125)
GA02          34P      0      806753 91:06:03 17:21
  Bd. 2 (126-270;285-536)
GA03          690      0      705681 91:06:03 17:22
  Bd. 3 ( 9-364;367-420)
GA04         100Y      0      744022 91:06:03 17:22
  Bd. 4 ( 7- 72;176-202;455-462) Bd. 5 ( 7-167;215-308;332-454)
GA05         133M      0      813466 91:06:03 17:22
  Bd. 4 ( 74-175;203-454) Bd. 5 (168-214;309-331)
GB06         169B      0      1206349 91:06:03 17:23
  Bd. 6 ( 7-513)
GB07         2212     0      2595909 91:06:03 17:23
  Bd. 7 ( 9-610) Bd. 8 ( 7-516)
GB09         335S      0      1851319 91:06:03 17:26
  Bd. 9 ( 7-598) Bd.10 ( 7-187)
GB10         416U      0      1679732 91:06:03 17:26
  Bd.10 (188-547)
GB11         490G      0      1266739 91:06:03 17:27
  Bd.11 ( 9-556)
GB12         545W      0      1122320 91:06:03 17:27
  Bd.12 ( 9-364;365-547)
GC13         5941     0      1097175 91:06:03 17:27
  Bd.13 ( 7-523)
GC14         6423     0      586775 91:06:03 17:27
  Bd.14 ( 7-269)
NUM          668U      0          360 91:06:03 17:28
SMALL        668W      0          919 91:06:03 17:28
WBR01        1047I     0      1964693 91:06:07 18:36
  Weimarer Ausgabe , Briefe Bd. 1- 5
WBR02        851C      0      2337330 91:06:03 17:32
  Weimarer Ausgabe , Briefe Bd. 6-10
WBR03        9530     0      2141324 91:06:03 17:33
  Weimarer Ausgabe , Briefe Bd. 11-15
WBR04        668Z      0      2111046 91:06:03 17:29
  Weimarer Ausgabe , Briefe Bd. 16-20
WBR05       11464     0      2828963 91:08:27 15:12
  Weimarer Ausgabe , Briefe Bd. 21-25

```

TOTAL = 20 PREFIX = A70152C

ワイマール版では現在の正書法がまだなかったために、つづり字が何種類も混在していることがあり、また現代の書き方と異なっていることが多いので、キーワードの設定には注意が必要です。

例

```

SIGMA> LIST S.WBR01
#@
#0100100 %1 AN <LUDWIG <YSENBURG VON <BURI .
#0100101 WOHLGEBOHRNER , INSONDERS <HOCHZUEHRENDER <HERR , <EW. <WOHLGEBHRN WE
RDEN <SICH WUNDERN , WENN EIN UNBEKANNTER SICH UNTERSTEHET , BEY <IHNNEN EINE <
BITTE VORZUBRINGEN .
#0100105 DOCH BILLIG FOLTEN <SIE MIT ALLEN <DENJENIGEN , DIE IHRE <VERDIENSTE
KENNEN , NICHT ERSTAUNEN .
#0100107 DA <SIE WOHL WISSEN K=ONNEN , DA# IHRE <EIGENSCHAFFTEN SELBST AUCH NO

```

CH IN FERNERN <L=ANDERN ALS WO ICH WOHNE DIE <GEM=UTHER <IHNNEN EIGEN ZU MACHEN
VERM=OGEND SIND .

#@

#0100110 <SIE SEHEN AUS MEINER <VORREDE , DAß ICH ZUR <ZEIT , UM NICHTS ALS IH
RE <BEKANNTSCHAFFT ANHALTE , BIß <SIE ERFAHREN , OB ICH WERTH BIN , IHR <FREUN
D ZU SEYN , UND IN IHRE <GESELLSCHAFFT EINZUGEHEN .

#@

#0100114 WERDEN <SIE =UBER MEINE <K=UHNHEIT NICHT UNWILLIG , UND VERZEIHEN <SI
E IHR .

#0100115 ICH KANN NICHT ANDERS , DENN WENN ICH AUCH L=ANGER SCHWEIGEN UND IHRE
GROSE <EIGENSCHAFFTEN INSGEHEIM VEREHREN WOLTE , WIE ICH BIßHER GETHAN HABE ,
SO W=URDE MIR DIESES DIE GR=OFTE <BETR=UBN=Uß VON DER <WELT ERWECKEN .

#0100119 KEINER VON MEINEN <FREUNDEN DIE <SIE KENNEN , G=ONNT MIR DIESES UNSCH
=ATZBARE <GL=UCK .

...

(データベース室 内線 2 5 1 0)

(センターニュースNo 448, 平成 3 年 9 月 19 日発行)

データセット名の変更について

前回のニュースでもお知らせしていますが、9月24日(火)からのOSの変更に伴い、
運用中のソフトウェア関連データセット名に一部変更が出ています。ライブラリ名や辞書名
等を直接指定している利用者の方はご注意ください。なお、変更対応表は以下のところにあり
ます。LISTコマンドでご覧下さい。

" LIB. MSPEX. CHGTBL "

(ライブラリ室 内線 2 5 0 8)

(センターニュースNo 449, 平成 3 年 10 月 8 日発行)

FORTRAN新コンパイラの公開について

来る11月11日(月)より、新しい FORTRAN コンパイラ「FORTRAN77 EX」を公開します。新コンパ
イラは、コンパイラ自体の拡張域動作や GO オプションによる大規模プログラムの実行等、新し
い機能が実現されています。今後の FORTRAN コンパイラの運用形態としては、

1991/11/11 ~ 1992/02/29 FORTRAN77 EX を主体に FORTRAN77 と並行運用

1992/03/01 ~ FORTRAN77 EX だけの一本化運用

を予定しています。利用者は、来年2月末日までに、参考文献[6]の非互換項目およびその対処方
法を参考にして、所有プログラムをすべて新コンパイラの下で動作させ実行を確認して下さい。

以下に、FORTRAN77 EX の機能・非互換に関する主な項目及び使用方法を示しますが、詳細に
ついては参考文献[6]をご覧ください。なお、新コンパイラを用いて異常な結果が得られた場合、速
やかにその旨センターまでご連絡下さい。

【1】FORTRAN77 EXの新機能

1. 言語仕様拡張

- ・"! " によって行の後ろにコメントが挿入できる。
- ・英小文字, アンダースコア文字の使用が可能。
- ・英字名の最大長は31文字まで可能。
- ・1文の継続可能行数が19から99へ拡大された。
- ・8 バイト整数型の利用が可能。

2. 日本語機能強化

- ・日本語名標として最大15文字までの利用が可能。
- ・日本語の入出力として母国語編集記述子が使えらる。

3. 大規模プログラムへの対応

- ・アドレス拡張域を利用した翻訳, 実行, 翻訳&実行 (GOオプション) が可能。

【2】FORTRAN77とFORTRAN77 EXとの非互換

FORTRAN77 から FORTRAN77 EX への移行に際して, 目に見えて大きく変化するところは,

- 1) 規格 (JIS FORTRAN) に, より忠実になった結果, 文法チェックが厳密になった。
- 2) エラーメッセージのメッセージID, 内容共に全面的に変更された。
- 3) コンパイラオプションの指定方法およびデフォルト値の変更。

- ・最適化オプションの指定方法が以下のとおり変更になった。
FORTRAN 77 OPT(0), OPT(1), OPT(2), OPT(3)
FORTRAN77 EX OPT(B), OPT(E), OPT(F)

これに伴い, 汎用機のデフォルトが従来の OPT(2) から OPT(B) になった。

なおVPのデフォルトは OPT(E) です。

- ・GO オプションに, AE または NOAE パラメタが追加された。これにより, 大規模プログラム(最大2GB)の処理が GO オプションで実行できるようになった。
 - ・ベクトル化表示付きソースリストの出力オプションは, VSOURCE から SOURCE に変更された。
 - ・ベクトル化指示のデフォルトは, "VP(200)" から "VP(ANY), VPO" に変更された。
- 4) デバッグ体系の変更。
 - ・デバッグの詳細については後日あらためて広報します。

【3】FORTRAN77 EXの使用方法

〈TSS〉

(1) FORT77 EX関連コマンド体系

今回より, PFD や EDIT のエディタの中から FORT, FORT77 及び FORT77EX サブコマンドによるコンパイラの起動が可能となります。入力コマンドおよびサブコマンドに対する起動コンパイラの組み合わせは以下のとおりです。原則として, 11月11日以降 FORTRAN77 EX コンパイラを標準としていますので, 例えばオペランドなしの RUN サブコマンドの場合これまで FORTRAN77 コンパイラが起動されていましたが, 11月11日以降は FORTRAN77 EX が起動されます。

モード	コンパイル起動方法, ライブラリ名	現在の起動コンパイラ	11/11以降の起動コンパイラ
コマンド	FORT dsn(デフォルト名) FORT77 dsn FORT77EX dsn RUN dsn RUN dsn FORT RUN dsn FORT77 RUN dsn FORT77EX	FORTRAN77 FORTRAN77 動作不可 FORTRAN77 FORTRAN77 FORTRAN77 動作不可	FORTRAN77 EX FORTRAN77 FORTRAN77 EX FORTRAN77 EX FORTRAN77 EX FORTRAN77 FORTRAN77 EX
PFD	FORT FORT77 FORT77EX RUN ※ RUN FORT RUN FORT77 RUN FORT77EX	FORTRAN77 FORTRAN77 動作不可 FORTRAN77 FORTRAN77 FORTRAN77 動作不可	FORTRAN77 EX FORTRAN77 FORTRAN77 EX FORTRAN77 EX FORTRAN77 EX FORTRAN77 FORTRAN77 EX
EDIT	FORT FORT77 FORT77EX RUN	動作不可 動作不可 動作不可 FORTRAN77	FORTRAN77 EX FORTRAN77 FORTRAN77 EX FORTRAN77 EX
GEM	FORT FORT77 FORT77EX RUN	FORTRAN77 FORTRAN77 動作不可 FORTRAN77	FORTRAN77 EX FORTRAN77 FORTRAN77 EX モジュールタイプ依存
結合編集 のライブラリ 指定	F77LIB FORTLIB F	指定不可 FORTRAN77 ライブラリ FORTRAN77 ライブラリ	FORTRAN77 ライブラリ FORT77 EX ライブラリ 不定, 再入力要求

※ PFD の中からオペランドなしの RUN サブコマンドを入力した場合、プログラムデータセットの内容識別修飾子が "FORT" であるか "FORT77" であるかにより起動コンパイラが異なります。

内容識別修飾子が "FORT77" FORTRAN77 コンパイラ

内容識別修飾子が "FORT" FORTRAN77 EX コンパイラ

これ以外の場合には、内容識別修飾子に関係なくコマンド名またはオペランドにより起動コンパイラが決定されます。PFD の中から内容識別修飾子によらず FORTRAN77 EX コンパイラを起動するには、"RUN FORT" (または "RUN FORT77EX") としてオペランドを指定して下さい。

使用例

```

READY
FORT77EX TEST.FORT
READY
FORT77EX TEST.FORT OBJ(A.OBJ(ABC))
LINK A.OBJ(ABC) LO(B.LOAD(ABC)) FORTLIB ..... 省略形 "F" は不可
CALL B.LOAD(ABC)
READY
RUN TEST.FORT ..... FORTRAN77 EXコンパイラ起動
RUN TEST.FORT77 ..... FORTRAN77 EXコンパイラ起動
RUN TEST.FORT77 FORT77 ..... FORTRAN77コンパイラ起動
RUN TEST.FORT FORT77 ..... FORTRAN77コンパイラ起動
READY
RUN TEST GO(AE) ..... FORTRAN77 EXコンパイラを起動して、
                           アドレス拡張域を利用した翻訳・実行を行う。
    
```

- (2) GO(AE) を指定して実行したとき, "JQB131I-U" のエラーが出る場合には, GO(AE) 指定を止めてデフォルトの GO(NOAE) で実行して下さい。
- (3) コンパイラオプション AE を指定し, デフォルトの GO(NOAE)で実行したとき "JWE0912I-U" のエラーが出る場合には, ロードのオプション 'AMODE=31,RMODE=24' を指定して下さい。

使用例

```

READY
FORT77EX TEST.FORT 'AMODE=31,RMODE=24' AE
    
```

- (4) 前ページの表の最下段に示したとおり, LINK・LOADGO コマンドのライブラリ指定方法が変わります。従来の FORTLIB 指定は FORTRAN77 EX ライブラリを指すことになり, FORTRAN77 ライブラリを使用する時は F77LIB と指定します。これに伴い, 従来の 1 文字省略形 "F" による指定はできなくなります (不定のため, 再入力を要求される)。必ず, "FORTLIB" とフルスペルで指定して下さい。

```

FORTRAN77 EX ライブラリデータセット ..... 'SYS1.FORTLIB'
FORTRAN77   ライブラリデータセット ..... 'SYS1.F77LIB'
    
```

使用例

```

READY
LINK X1.OBJ(X1) LO(Y1.LOAD(Y1)) FORTLIB ..... FORTRAN77 EX ライブラリを結合
LOADGO X2.OBJ(X2) LO(Y2.LOAD(Y2)) F77LIB ..... FORTRAN77   ライブラリを結合
    
```

《バッチ》

(1) カタログドプロシジャ「FORT」

バッチ処理のためのカタログドプロシジャは, これまで汎用機用(FORT77)とVP用(VPFORT)の2種類を公開していましたが, 11月11日より FORT に1本化します。汎用機とVPの識別は, 以下の例に示すとおり, VP パラメタで指定して下さい。なお, 平成4年2月末日までは従来のカ

タログドプロシジャ (FORT77, VPFORT) も旧コンパイラ用として運用しますが、なるべく新カタログドプロシジャを使用されるようご協力をお願い致します。

カタプロ名	記号パラメタ
F O R T	[, SYSOUT= {O U <u>A</u> K S H}] [, STEP= {C <u>CGO</u> CG CL CLG}] [, OPT= {NO <u>B</u> E F}] [, OPTION='コンパイラ・オプションリスト'] [, PRVLIB='データセット名'] [, VP= {YES <u>NO</u> }] [, VREGION='m, n']

記号パラメタの説明

- SYSOUT : 出力クラスを指定する。省略値はA。
 STEP : 処理過程を選択する。省略値はCGO。
 OPT : 最適化のレベルを指定する。省略値はB。(ただしVP指定時はE)
 OPTION : コンパイラ・オプションのリストを記述する。
 PRVLIB : 組込みたい私用ライブラリのデータセット名を指定する。
 VP : VP側で処理するかどうかを指定する。省略値は、汎用機。
 VREGION : VP実行時のリージョンサイズを指定する。m, nはそれぞれ基本、拡張リージョンサイズ(単位MB)に相当する。省略値は、各ジョブクラスの制限値が割り当てられる。

使用例

```
// EXEC FORT
//FORTCGO.SYSIN DD DSN=A79999A.TEST.FORT, DISP=SHR

// EXEC FORT, STEP=CLG
//FORT.SYSIN DD DSN=A79999A.TEST.FORT, DISP=SHR

// EXEC FORT, STEP=CG, VP=YES, VREGION='5, 35'
//FORT.SYSIN DD DSN=A79999A.TESTVP.FORT, DISP=SHR
//LOADGO.SYSIN DD DSN=A79999A.VP.DATA, DISP=SHR

// EXEC FORT, STEP=CL, OPTION='NOSOURCE'
//FORT.SYSIN DD DSN=A79999A.TEST.FORT, DISP=SHR
//LKED.SYSLIB DD DSN=A79999A.TEST1.LOAD, DISP=SHR
//LKED.SYSLMOD DD DSN=A79999A.TEST2.LOAD(TEST), DISP=(NEW, CATLG),
//          SPACE=(TRK, (2, 2, 2)), UNIT=PUB
```

【4】注意事項

- (1) FORTRAN77 EX は、FORTRAN77 より翻訳時間が多少長くなる場合があります。
- (2) FORTRAN77 EX の実行性能については、FORTRAN77 より向上しています。

- (3) FORTRAN プログラムのデータセット名の内容識別修飾子として、現在 "FORT" と "FORT77" の 2 種類がありますが、近い将来 Fortran 90 への移行のことも考慮しますと、複数の内容識別修飾子の存在はいたずらに混乱を引き起こすことになるかと判断し、今後センターの標準 FORTRAN 内容識別修飾子を "FORT" に統一します。今後新規にデータセットを作成する場合には、プログラムデータセット名の内容識別修飾子としてできるだけ "FORT" を使うように心掛けて下さい。

■参考文献

《FORTRAN 77 EX に関するもの》

- | | |
|---|-------------------------------|
| [1] OSIV/MSP FORTRAN77 EX 使用手引書 V12用 | 富士通 (79SP-5031-1) |
| [2] FUJITSU FORTRAN77 文法書 1991年6月版 | 富士通 (99SP-8032-1) |
| [3] OSIV FORTRAN77 EX メッセージ説明書 V12用 | 富士通 (70SP-5321-1) |
| [4] OSIV/MSP FORTRAN77 EX/VP 使用手引書 V12用 | 富士通 (79SP-5041-1) |
| [5] OSIV デバッガ使用手引書 V10/L20用 | 富士通 (70SP-6430-1) |
| [6] 九州大学大型計算機センター広報, 「新コンパイラ FORTRAN77EX について」, | pp.523-540, Vol.24 No.5, 1991 |

(ライブラリ室 内線 2508)

E-mail:a70040a@kyu-cc.cc.kyushu-u.ac.jp

.or :c70018a@kyu-cc.cc.kyushu-u.ac.jp

(センターニュースNo 449, 平成 3 年 10 月 8 日発行)