

学外からの研究用システムの利用 : 量子化学計算

広川, 昭二
九州芸術工科大学芸術工学部

今坂, 智子
九州芸術工科大学芸術工学部

<https://doi.org/10.15017/1470462>

出版情報 : 九州大学情報基盤センター広報 : 全国共同利用版. 2 (3), pp.171-172, 2002-11. 九州大学
情報基盤センター
バージョン :
権利関係 :

学外からの研究用システムの利用：量子化学計算

広川昭二*

今坂智子*

我々の研究室の研究テーマの一つは有機包接結晶の統計力学的研究である。これはクラシックなスタイルの研究で、FORTRAN プログラムの作成が主である。80年代にはPC98 をキャラクター端末として九大センターで計算を行っていた。90年代に入ってから、この研究は九芸工大情報処理センターで FORTRAN と Mathematica を利用して行なっている。九大センターから九芸工大センターへ利用を切り替えたのは、計算機使用料の負担軽減が第一の目的であったが、学内 LAN の整備と Unix OS の導入で使い易くなったことも動機になっている。従って、90年代の大型計算機センターの利用はデータベースのみであり、九大センターの INSPEC と東大センターの Chemical Abstracts を利用した。データベースとしては現在、九大センターの INSPEC と九芸工大図書館が契約している Jois を利用している。

もう一つの研究テーマは最近開始した電子スペクトルの量子化学的研究で、これは時流に合わせたスタイルの研究である。この研究では Power Mac と Windows WS NT/2000 上で種々の計算化学ソフトを使って予備計算を行い、九大センターの FUJITSU VPP5000/64 あるいは東大センターの HITACHI SR8000/MPP に転送して MOPAC2000 や Gaussian98 により本格的計算を行なう。両センターの OS はいずれも Unix のため利用上の困難はない (SR8000/MPP のエディターは vi であるが、我々も vi を主に使っている)。計算結果は再び Mac や Windows WS に取り込んで解析する。大型計算機の利用が中心のためと貧乏所帯のため、研究室が所有する計算機資源は乏しい。昨年度までは Unix WS として九芸工大センターの貸し出し WS (Sun 4/5) があったが、貸し出し制度は今年度から廃止になり、研究室所有の計算機は上記の機種のみである。

我々のように大型計算機の利用を主な研究手段としている研究室にとって、最大の関心事は計算機使用料であり、昨年度は九大センターと東大センターの定額利用料金制度を利用した。両センターにはそれぞれ特徴があり、計算の種類によって両センターを使い分けた。東大センターのセンター・ニュースには各センターの特徴比較の一覧表が掲載されたりすることからも分かるように、ユーザーが安い利用料金や必要なライブラリーを所蔵するセンターを探すなどは普通のことになっている。定額利用料金制度の一層の充実はユーザーとセンターの両方にとって望ましいことと思われる。

* 九州芸術工科大学芸術工学部 E-mail: {hirokawa,imasaka}@kyushu-id.ac.jp

センターが混み過ぎてはユーザーが困るが、例えば、年間定額 50 万円、100 万円コースの増設や、あるいは定額利用 10 万円の利用期間は現在、4 月から 10 月までであるが、3 月から 10 月までとして、次年度に継続利用ができるようにするなどにはできないものだろうか。

センター利用に関する主な情報源はセンターの広報とホームページである。80 年代に PC98 を端末として九大センターを利用していた頃から、センター広報の記事は重宝してきた。80 年代には広報に記載された PC98 用の端末エミュレーションソフトをセンターからダウンロードし、また、90 年代に入ってから Mathematica の利用は尾崎敬二氏の解説（九州大学大型計算機センター広報 Vol. 24, p. 501, 1991）に教えられて始めたものである。Mathematica は現在、九芸工大センターの Unix 版と研究室の Windows 版を研究・教育に利用している。パソコンから研究用システムを利用するユーザーもいるはずであり、例えば、Mathematica などを X 端末エミュレーションソフトから利用する方法の解説が広報などに掲載されると有益かもしれない。研究用システムのユーザー拡大という観点からも、商業雑誌には掲載されないパソコンから研究用システムを利用する方法の解説記事が広報にもう少しあってもよいと思われる。

講習会は福岡近辺のユーザーにとっては大変有用であるが、全国共同利用施設としてのユーザー教育はセンター広報やホームページの方が重要かもしれない。九芸工大のセンター利用に際しては、大学が小規模なこともあって、センターの技官の方が直接研究室に来てシステム更新時などのトラブルの解決をしてくれている。全国利用のセンターの場合にはそれは望むべくもないが、電子メールによる相談に加えて、よく質問される事柄についてのホームページの FAQ コーナーの開設や広報の関連記事のより一層の充実を図っていただければ幸いである。研究用システムの九芸工大からの利用者は多くないこともあって、研究用システム利用に関する耳学問の機会は少ない。上手に研究用システムを利用している事例の簡単な紹介などを広報に掲載していただくと学外ユーザーには有益と思われる。

古いタイプのユーザーである我々はシステムやアプリケーションなどには疎い方であり、また、研究テーマが物理と化学の両分野に関係するため、計算機科学の勉強に費やす時間はあまりない。九大センターの研究用システムを日頃利用させて頂いており、その経験から幾つかの要望を記させていただいたが、もし我々の無知・不勉強による見当違いの意見の場合にはご寛容のほどをお願いしたい。