

いとあきらめて、私はN A R Cを忘れることにした。テープをくずかごに入れるのは何となくはばかられて、私は自分で焼却することにした。テープに無数にあけられた穴は、そこに何もないからこそそれが穴であるのに、燃えて煙になった。

— I / O チャネル

計算機使用雑感

薬学部・大学院生 小川 謙

4年生の夏にFORTRANの講習会を受け、コンピューターを使いはじめて2年以上たってしまった。研究の目的は生体内にある化合物（ステロイドホルモン）の電子状態を計算しそれらのもつ生物活性との相関を解明しようと言うものであり、どうしてもコンピューターの利用が不可欠であった。講習会を受け理学部の青野教授の所へ相談しに行き、プログラムについて、また研究の方向などについて、ていねいに教えてもらい、どうやらいくどとなくERRORを出しながらも粗い近似理論に従ったプログラムを作る事ができた。だがいざステロイドを計算し始めると金沢のFACOM 230-35では演算速度もおそらくメモリーも不足し全然使えない、このことは前から予想していたのですが以後230-35を予備計算に使う事にし京都大学のFACOM 230-60を使う事にした。これでどうやら時間制限である20分以内で計算することができ安心したのですが、計算がこんでいる時など計算依頼から結果返却まで20日間近くかかる事もあり、長く待ちのぞんだ結果がERRORだったりすると本当にガッカリしてしまいます。何どとなくそんな事があったのですがこの時思った事はまず第一にすでにでき上がっている理論で計算、適応しようという時はプログラムライブラリー等を調べそれを利用するのが良いのではないかという事。自分がFORTRAN入門編、解説編を見ながら作ったプログラムは不能率きわまりなく、今見るといやになる。現在ではライブラリープログラム、その他をすこしmodifyしたり付け加えたりして計算しています。第二に京大なみの性能をもつコンピューターが金沢にあったらと言う事。ないのでしかたがないのですがせめて計算依頼から結果返却が1週間ぐらいであってほしい。第三に計算機のある工学部と薬学部の往来が時として苦痛に感じ薬学にもせめてカードパンチ機なりとあってほしいという事。願わくばこちらで計算できるようにする事を望みます。

大学院に入って、もっと近似の進んだ方法で計算するようになると京大のFACOM 230-60でもまにあわなくなった。比較的小さいステロイドでも60分以上計算にかかり大きなのになるとメモリーが不足しどうしようかと思っていたところに東大の HITAC 8800/8700システムができ、9月からは京大でもFACOM 230-75が運転し始めた。まだかなり時間的制約（東大は5分まででこの点10分ぐらいにすることを検討中のこと、京大は15分まで）があるが今まで特殊ジョブ扱いだった計算がかなり普通に行なう事ができるようになり8800/8700システムでは大きなステロイドでも十分で計算してくれる。現在私がしている計算の限りにおいて近ごろになってようやくコンピューターの性能からくる制約が取りのぞかれたようだ。コンピューターの性能が向上し次々と新しい科学の分野を開いていくのを見ると、学術文化都市金沢にも時代の先端を行くコンピューターシステムが早く導入される事をのぞみます。緑の多い美しい城のある金沢で超大型コンピューターの打だす数字の山を胸をわくわくさせながらのぞきこんでいるすがたを想像すると楽しい。