

I 部

目 次

寄 語	広島大理教授 今 村 詮	1
1. 分子研電子計算機センターの経緯—そのまとめ—		
	分子研電子計算機センター 柏 木 浩	2
2. スーパーコンピュータ・ワークショップの活動		10
3. 計算機システムの運用と使い方		12
3. 1 システムの特徴		12
3. 2 ジョブクラスの構成		13
3. 3 利用点数		13
3. 4 通信・ネットワークの構成		14
3. 5 FORTRAN (バージョン22-00)のセンター標準化		17
3. 6 HAP FORTRAN77のオンラインマニュアル		19
3. 7 S-820 でのTSSサービス		20
3. 8 ASPEN E2 (02-00)のバージョンアップ		20
3. 9 MSGHELPの操作性改善		21
3. 10 FORTRANメッセージのMSGHELPサポート		21
3. 11 光ディスクの利用法		21
3. 12 ODM (光ディスクマネジャ)の機能アップ		22
3. 13 LISTCFコマンドの公開		22
3. 14 LISTDTコマンドの公開		22
3. 15 S-820 で実行するジョブの基本リージョンの指定法		23
3. 16 VAXで作成した磁気テープの読み込み方法		23
3. 17 パラレルI/Oジョブの指定		23
3. 18 TSSのTIME0500ログオンプロシジャの廃止		24
3. 19 センター1, 2階の閉館時刻		24
4. 研究開発レポート		25
4. 1 分子軌道計算結果の動的modelingシステムKORIN/IRIS		
	分子研電子計算機センター 伊 奈 諭, 柏 木 浩	25

5. 一般報告	29
5. 1 分子研ライブラリプログラムの収集と開発	29
5. 2 データベース開発状況	39
5. 3 プログラム相談	39
5. 4 研究会, 学会報告	40
5. 5 電子計算機センター運営委員会	42
5. 6 大型計算成果発表会	47
6. 昭和63年度稼動状況および利用者数	49
6. 1 利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数	49
6. 2 システム稼動状況	49
6. 3 CPU時間	50
6. 4 ジョブ処理件数	50
7. 資料	52
7. 1 センター関連組織	52
7. 2 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則	53
7. 3 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター運営委員会規則	54
7. 4 電子計算機運営委員会委員	55
7. 5 電子計算機センター職員(平成元年7月現在)	56
7. 6 建物図	56
7. 7 応用プログラム相談員一覧	57
7. 8 端末設置状況(平成元年7月現在)	57
7. 9 マニュアルの紹介と購入方法	58

寄 語

Science とTechnologyの接点

広島大理教授 今 村 詮

手動計算機の時代から、スーパーコンピュータの時代まで、量子化学の分野に首をつっこんでいた者にとっては、この変革の時代についていくための意識の改革が迫られることは、なかなかきびしいものである。特に、近年新しい計算方法を提出する場合、その方法の優劣が、以前の方法と計算時間で比較されることが一般的になってきて、方法の価値判断の基準を変えざるを得なくなっている。私には、この現象が、ScienceとTechnologyの競合のように思える。すなわち、既存の方法が発表されてからの時間の長さに対応して、その方法のプログラムの技術が蓄積された、いわばソフトウェア工学の技術の粋を集めたプログラムパッケージに対抗して、新しい方法による未成熟なプログラムを用いて、計算時間で競争しなければならないからである。すなわち、OriginalityがTechniqueと競合していることになる。しかも、近年のスーパーコンピュータの進歩は、このソフトウェアのTechniqueのWeightをより大きくしている。

ところで、本来はScienceとTechnologyは競合的關係にあるのではなくて、むしろ相補的に働くべきものである。ソフトウェアに関していえば、なにか新しい方法を考えたときに、その方法にもとづくもっとも効率のよいプログラムが容易に作成できるようなシステムをつくるには、Technologyの寄与は不可欠である。このような観点にたてば、コンピュータに多くを依存する研究分野においても、ScienceとTechnologyの接点がみえてくるのではなからうか。今日の量子化学の分野におけるいわゆるGaussian86とかPSIのような巨大なプログラムパッケージは、多くの人達の長い間の血と汗と涙の結晶ではあるが、それを横目にみながら、もう少し容易に、このような巨大なパッケージに対抗できるプログラムが作成できるシステムの出現を待ち望んでいる。それは、また量子化学者をScienceへ回帰させることになると信じてもいる。そのような接点を探し出す場としても、この分子研の電子計算機センターが、大きな役割を果たしてくれそうだという期待をもって。

1. 分子研電子計算機センターの経緯 — そのまとめ —

分子研電子計算機センター 柏木 浩

(現職：九工大情報工学部)

私は平成元年4月1日付で新設の九工大情報工学部生物化学システム工学教室へ移籍しました。センターレポートNo.1からこのNo.10まで「センターの経緯」を書き続けてきましたが、この欄の執筆はこれが最後になります。No.9に記載したことも含め総まとめをしたいと思います。

1.1 量子化学文献データベースからの統計

量子化学文献データベース(QCLDB)は御存知のようにab initio M0法関連の文献情報を集めたデータベースである。センターのはたした役割の一面を調べるために、西本、山本技官の協力で作成したグラフが図1.1である。一度でも分子研センターのユーザとして登録されたことのある人の英語名リストを作り、その名前を含む論文の数を数え上げたものである。したがって、当センターのユーザでない時の論文も、他所の計算機を使った論文も全て数え上げられている。

QCLDBには分子研センターがオープンする2年前の1977年から採録が行われている。このため当センター発足の効果を数量的に見ることができる。1977年の分子研ユーザ(もちろんこの時にはまだユーザになっていない)の論文数はわずか8報である。しかもこの大部分は海外における研究の報告である。この時期の国内のab initio M0計算は曙の時代で、北大、電通大、九大などの少数の研究者が手を付けているのみであった。国産のab initio M0プログラムの第一号は九大を退官された竹田宏先生のプログラム、第二号が私達が北大で作ったJAMOLである。国内で使えるプログラムはC I計算のCOMICALを含め3本だけであった。計算機環境は極めて不十分で、例えば、北大大型センターのFACOM230-75のユーザ用主記憶は80KWしかなかった。ユーザ用磁気ディスクはわずかしかなく、外部メモリの主力は磁気テープであった。ジョブのCPU時間上限は、1MFLOPSもない計算機でわずか10分であった。図1.2に示すように現在13分の計算に2年かかるという状況であった。土方克法先生の書かれた分子研センター設立要望書には分子軌道研究者の海外流出リストが記載されている。

1979年1月に当センターがオープンすると3月末にはユーザ数は150名を越えた。1981年には分子研ユーザのab initio M0関連の論文は100報に達した。その後も上昇傾向にあるが、全世界の論文数との割合をみると6~7%のところまで平衡状態にある。一つのセンターの貢献としては大変大きなものと考えてよいだろう。スーパーコンピュータ導入の効果が論文数の上でどの位出てくるか2~3年先が楽しみである。

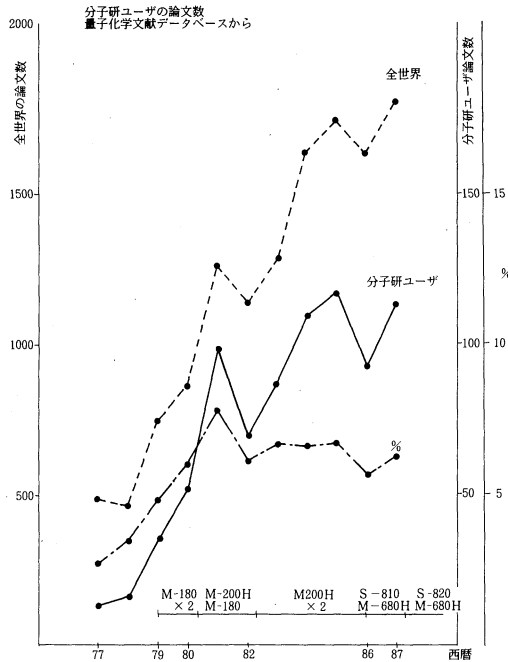


図1. 1 ab initio MO法についての論文数の増加。実線は分子研ユーザとして登録されたことのある人の論文数。破線は全世界の論文数。一点鎖線は分子研ユーザの論文数の全世界の論文数に占める割合。量子化学文献データベース (QCLDB) から抽出したデータなのでab initio MO関連に限られる。

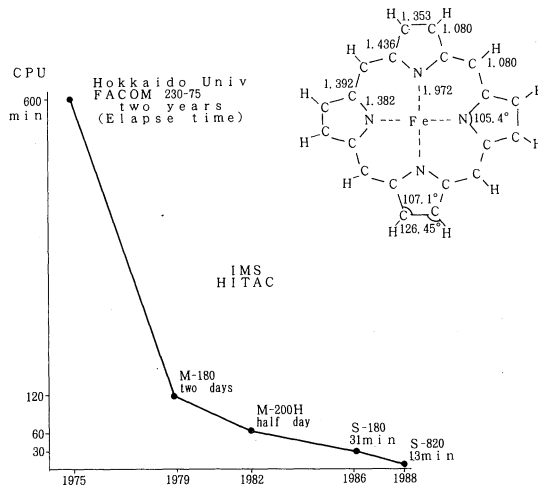


図1. 2 CPU時間と実行時間 (Elapse time) の短縮

基底関数 (CGTO) 184個の鉄ポルフィンのab initio SCF MO計算。但し、1975年の計算はコバルトポルフィン。プログラムは1975年: JAMOL 2, 1979年~1986年: JAMOL 3, 1988年 JAMOL 4 (SCF繰返し計算のみベクトル化)。1986年と1988年の場合は単一ジョブのテスト結果。

1.2 その他の数量的データ

図1.3にはCPU能力の増加, 図1.4にはメモリの増加, 最後の表1.4には利用状況がまとめられている。図1.4には平成元年6月の磁気ディスクの増設も記入されている。図1.3も図1.4も縦軸は対数であることを強調したい。当センターの能力増大は日本の計算機産業の急成長にささえられている。二つの図に見られるようにたえず能力の増強を計ってきた。今後は日米間の政治・経済問題のからみで種々の困難が発生してくるかもしれない。

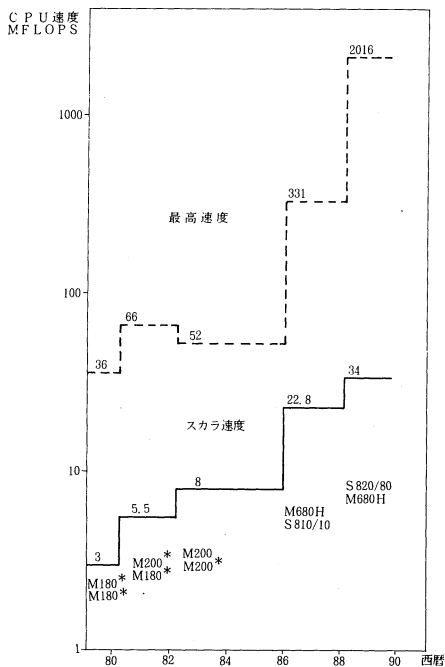


図1.3 分子研電子計算機センターにおけるCPU能力の拡張

実線はスカラ速度合計, 破線は最高速度合計。
*印はIAPつき。IAPの最高速度はスカラ速度の12倍とした。各計算機のスカラ速度はMFLOPS単位で, M180=1.5, M200=4, S810/10=6.8, M680H=16, S820/80=18とした。

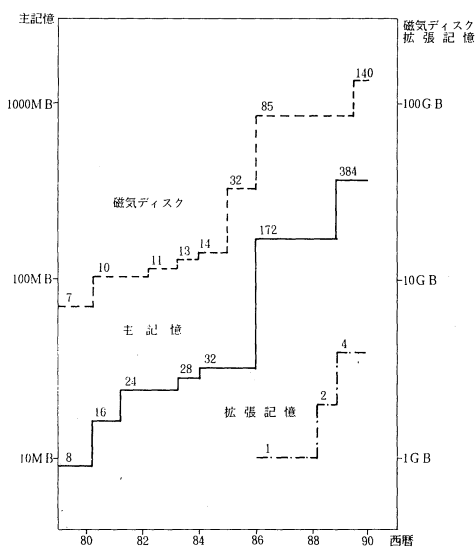


図1.4 分子研電子計算機センターにおける記憶容量の増加

1.3 センター職員と協力者

当センターは公務員の定員削減時代に設置されたため、当初よりスタッフの不足が深刻であった。図1.5に職員の存在期間のグラフをかかげたがセンターオープンの1979年1月までの職員数はわずか4名であった。これだけの人数で当時国内最大の学術センターをオープンしなければならなかった。当然4人だけでできるような事業ではなく、管理局職員、日立系会社の社員、各種業者の協力があって初めて実現した快挙であった。西本技官、牧野（現：長畑）秘書の献身的努力は賞賛に値する。牧野さんはパートタイムなので時間外勤務は御法度である。しかし私達の過労働状態をみかねてボランティア勤務をしてくれる。当時の赤松所長が電算センターはけしからんと言ってこまめに見回りに来る。所長相手に牧野さんの隠れぼが始まる。このような逸話はたくさんある。ここでは実名を挙げるのは避けるが、管理局の職員や日立系の社員の中にも通常の職分を越えて献身的に仕事をしてくださった方が何人もおられる。これらの人達の日曜出勤や夜間労働も頻繁であった。関東と岡崎の間を週に何回も往復する。このような努力でセンターはきれいにオープンした。

センター職員はじめ、協力者達の努力はその後もずっと継続してきた。図1.3と図1.4に見られるシステムのレベルアップの一回毎に似たような努力が払われている。センター創設当初の勢いで密度の高い労働状態を強いられたきらいがある。それにもかかわらず計算化学の充実のためにしなければならないことが手つかずのままたくさん残っている。井口先生が新所長になられた時にセンター職員の数倍増計画案を作成し、所内で提案した。このような計画案の実現のためにはユーザの強力な支援が必要であろう。

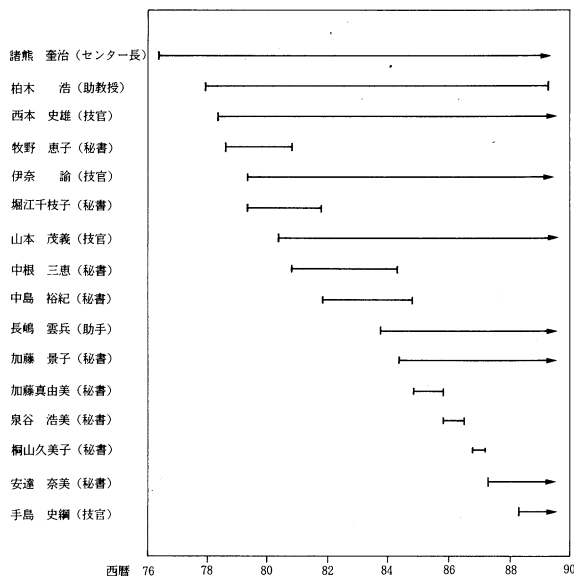


図1.5 センター職員の存在期間

現定員；センター長 1名
 助 教 授 1名
 技 官 4名
 秘書 (パートタイム) 2名

1.4 機種選定委員

機種選定はセンターシステムの能力を決定してしまう大変重要な手続きであり、選定に当たる委員会とセンター職員が行う。センター発足の際の選定は計算機委員会によって行われた。そのメンバーは表1.1の通りである。ベンチマークテストジョブの作成に当たった分子研理論系のスタッフやその結果の分析を行ってくれた電通大情報処理センター齊藤丹郎さんの好意も忘れてはなるまい。スーパーコンピュータの選定はセンター運営委員会のメンバーから選ばれた次期システム検討委員会で行われた。メンバーは表1.2に示す通りである。

機種選定というのは身も細るような大変重度の高い作業で、これに参加してくださった先生方にはほんとうにお礼を申し上げなければならない。例えば、スーパーコンピュータシステム選定の際の委員会のスケジュールは表1.3のようなもので、出席するだけでもかなりの労力である。委員会と委員会との期間がまた大変で、毎日のように押し寄せてくる各社からの攻勢に対応しなければならない。受け手はたかだか2～3名、寄せ手は20～30名のことがある。それが3ヶ月も続いたのである。身も細るといというのは単なる比喩ではない。

とにかく、機種選定は一回目も二回目も好結果に終わった。選定に当たった先生方、裏方のセンターの職員、それに自分の身体に感謝の意を表したい。

1.5 終りに

終りに電通大を退官された土方先生と諸熊センター長について。分子研の当初の計画では、計算機システムは所内向けで中型規模という構想であったと聞く。これを、日本全体の計算化学・計算物理のために大型システムに格上げした立役者が両先生である。分子研の計算機を使っている方はこの御二人に足を向けて寝るようなことがあってはならない。土方先生は眼底出血という病状の中で数年にわたり岡崎に足を運ばれ、現在のセンターの基礎を築かれた。諸熊先生は自らのポジションをかけてセンターの大規模化をはかった。(どんな内容かは本人に聞いてください。)いずれも日本の将来を考えられてのことである。その後も運営委員として、あるいはセンター長としての活動は皆さんの御存知の通りである。この方々の下での期間はおよそ楽というにはほど遠いものであったが、私のこれまでの人生の中でも最も充実した時期の一つである。

表 1. 1 センター発足時に機種選定を行った計算機委員会（昭和51年12月～53年3月）のメンバー。役職は当時のもの。

○土 方 克 法	電通大教授, 分子研客員教授
長 倉 三 郎	東大物性研教授
鈴 木 功	東京大学教授
石 田 晴 久	東大大型計算機センター助教授
津 田 健 三	名大プラズマ研計算機センター助手
諸 熊 奎 治	分子研教授, センター長
広 田 栄 治	分子研教授
塚 田 捷	分子研助教授
柏 木 浩	分子研電子計算機センター助教授
亘 弘	生理研教授

表 1. 2 スーパーコンピュータの機種選定を行った次期システム検討委員会（昭和58年8月～昭和62年7月）のメンバー。役職は当時のもの。

諸 熊 奎 治	分子研理論第一部門教授, センター長
柏 木 浩	分子研電子計算機センター助教授
大 野 公 男	北大理教授, 分子研客員教授
正 畠 宏 祐	分子研基礎光化学部門助教授
岩 田 末 広	慶大理工助教授

表 1. 3 電子計算機センター運営委員会とその小委員会である次期システム検討委員会における機種選定の経過は次のようだった。

昭和58年8月17日	第5回電子計算機センター運営委員会にて, 次期システム検討委員会を作ることを提案
9月16日	第77回教授会議にて, 電子計算機センター運営委員会の下に次期システム検討委員会を作ることを承認。委員5名を指定
10月8日	検討委 諸熊委員を委員長に選ぶ。提案作成要領検討。
11月19日	検討委 提案作成要領案検討
12月17日	検討委 同上
昭和60年1月11日	検討委 提案作成要領決定
1月17日	提案作成要領をメーカー5社（日本クレイ, 日本C D C, 富士通, 日立, 日電）に提示

- 2月8日 提案締切。3社（富士通、日立、日電）より提案
- 2月16日 検討委 各社による提案説明
センターより各社へ質問事項
- 2月25日 検討委 提案検討
- 2月26日 検討委 同上
- 3月4日 検討委 同上
- 3月11日 検討委 同上
- 3月18日 第8回電子計算機センター運営委員会にて中間報告
- 3月22日 検討委 提案検討
- 3月29日 検討委 同上
- 4月9日 検討委 同上
- 4月24日 （午前）検討委 答申決定
（午後）第9回電子計算機センター運営委員会にて機種決定

表 1. 4 利用者数とCPU時間の推移

		53 年度	54 年度	55 年度	56 年度	57 年度	58 年度
計 算 機 シ ス テ ム 式		M-180 2 台 3 ヶ月 有 人	M-180 2 台 9 月から無人	M-200 H M-180 200 H 無 人 180 有 人	M-200 H M-180 疎 結 合 人 無	M-200 H 2 台 疎 結 合 人 無	同 57 年度
プ ロ ジ ェ ク ト 数 機 構 内 外 a 機 合 計		63	176	192	183	198	199
		48	70	69	91	94	102
		107	254	325	330	375	426
		155	334	394	421	469	528
稼 動 時 間		1.087	6.071	6.553	6.721	6.305	6.170
利 用 P 申 請 時 間	申 請	(200 H 基準)					
	許 可	929	4,666	11,033	10,230	11,938	13,053
		816	3,171	7,427	8,306	10,141	10,091
総 使 用 C P U 時 間 c		509	2,405	5,405	6,320	8,205	8,489
ジ ョ ブ 処 理 件 数 c		41,521	155,980	183,840	214,847	239,771	236,519
ライブラリプログラム新規登録数		0	20	43	20	699	10
データベース新規登録数		0	2	0	0	3	3
センタ-使用論文数 d		0	24	93	118	190	185

		59 年度	60 年度	61 年度	62 年度	63 年度
計 算 機 シ ス テ ム 式		同 57 年度	(~11 月) 同 57 年度 (1 月 ~) M-680H S-810/10	M-680 H S-810/10 疎 結 合 人 無	M-680 H (~1 月) S-810/10 (2 月 ~) S-820/80 疎 結 合	M-680 H S-820/80 疎 結 合
プ ロ ジ ェ ク ト 数 機 構 内 外 a 機 合 計		207	226	234	213	231
		110	130	141	143	137
		446	464	496	520	515
		556	594	637	663	652
稼 動 時 間		6,316	6,016	6,368	6,444	6,091
利 用 P 申 請 時 間	申 請	(200 H 基準)			(M-680H 基準) b	
	許 可	14,799	15,536	33,832/8,458 *	9,880	12,439
		10,768	12,080	28,184/7,046 *	7,978	10,418
総 使 用 C P U 時 間 c		8,508	12,770	20,092/5,023 ^e *	6,624 ^e	7,872
ジ ョ ブ 処 理 件 数 c		226,727	274,431	289,915	278,956	278,104
ライブラリプログラム新規登録数		118	160	39	4	7
データベース新規登録数		0	1	0	1	0
センタ-使用論文数 d		202	206	237	223	211

a : 機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含まない。
b : 申請および使用の詳細については 6.1 項を参照。
c : ここの値は CPU 時間、件数ともにライブラリ開発、センタ-業務使用分などのすべてを含む。
d : センタ-を使用した計算に基づく論文としてセンタ-に提出されたもの。
e : S-810, S-820 については SPU と VPU の CPU 時間の単純な和である。
* : 下段は M-680 H 基準

2. スーパーコンピュータ・ワークショップの活動

柏 木 浩

昭和57年2月の分子研研究会「スーパーコンピュータとその分子科学への応用」及び昭和58年1月の第1回ワークショップ公開講演会以来8年にわたり活動を続けてきました。ワークショップレポートのNo.1に「スーパーコンピュータ・ワークショップは鳳雛の塾」という小文を載せましたが、はたして鳳雛の塾になりましたかどうか。

私が分子研センターを去る時に、たまたま、このセンターの創設の立役者であった土方先生も電通大を退官されることになったので、特別に記念講演をお願いしました。また近未来のスーパーコンピュータを開発中の後藤英一先生にも、新しいコンピュータの作動原理について話していただきました。

二日目の午後には、今話題のニューラルネットワークについて、最先端の研究開発を行っている企業の方々に講演をしていただきました。異なるタイプのコンピュータの世界をかいま見た思いがします。

第9回講演会も盛会の中に終わりました。この会の講演の内容はレポートNo.7にまとめて、このセンターレポートと前後して発刊する予定です。ワークショップに対する長期間の御支援、どうもありがとうございました。

第9回公開講演会

(平成元年2月23日午後)

☆ はじめに

分子研センター 諸熊 奎治

☆ 我国のスーパーコンピュータ誕生の経緯

電通大 土方 克法

☆ ジョセフソン・スーパーコンピュータ

東大大型計算機センター 後藤 英一

☆ 液体の分子動力学プログラムのベクトル化

京大理 片岡 洋右

☆ 理論計算プログラムKOTOと直接アクセス型入力データ

京大理 小原 繁

☆ これまでとこれから —— 計算化学と分子研センターの10年 ——

分子研センター 柏木 浩

(平成元年2月24日午前)

- ☆ 三菱化成における分子設計の実際
三菱化成総研 中村振一郎
- ☆ 酸化物の電子状態計算
東大物性研 朴 琦宅
- ☆ スーパーコンピュータに適した固有値ルーチン
愛知技術短大 別府 良孝

(平成元年2月24日午後)

- ☆ 並列ニューラルネットワーク・シミュレータ
日本電気C&Cシステム研究所 梶原 信樹
- ☆ ニューロコンピュータの原理とロボット制御への応用
富士通研究所 木本 隆
- ☆ ニューロ処理記述言語
日立コンピュータ・エンジニアリング 青山智夫, 近藤直紘,
阿南洋一郎, 水上真澄, 羽淵信幸
- ☆ ニューロコンピュータの組み合わせ最適化問題への応用
日立システム開発研究所 松葉 育雄
- ☆ 終わりに

3. 計算機システムの運用と使い方

3.1 システムの特徴

当センターのシステムは図3.1.1に示すように汎用計算機M-680HとスーパーコンピュータS-820/80との疎結合マルチプロセサ（LCMP）構成となっている。

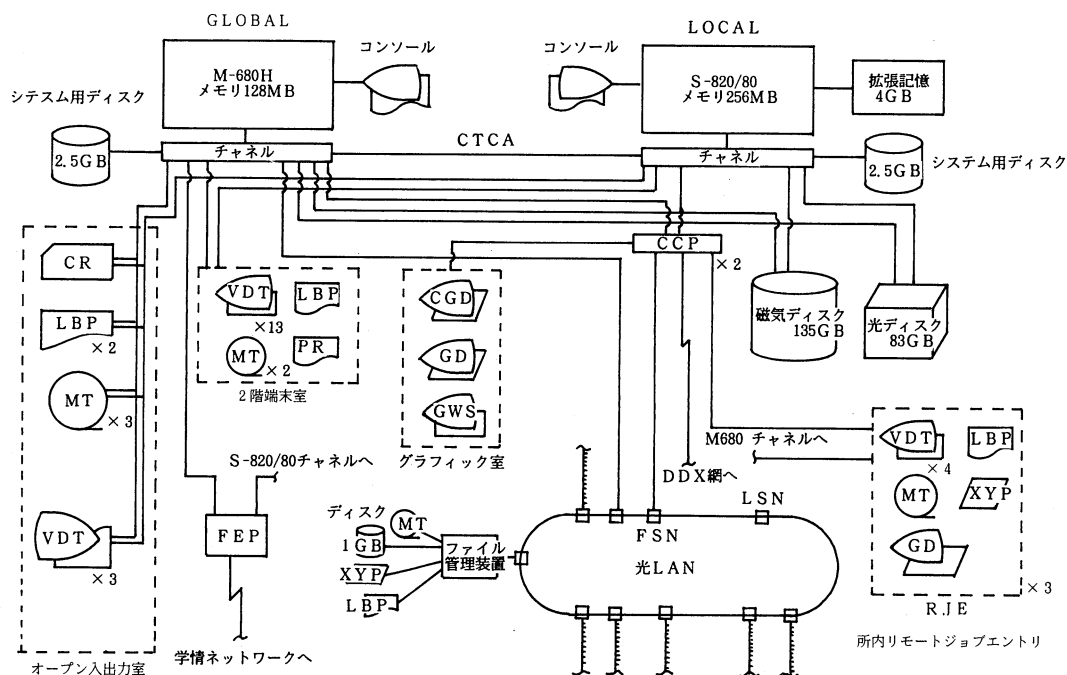


図3.1.1 システム構成概念図

- M-680Hでは主にT S S処理, ジョブ管理, バッチ処理を行い, S-820/80ではベクトル演算向きのバッチ処理を行う。しかしS-820/80でもT S S処理のサービスは行っている。
- 自動ジョブスケジュール機能（日立製作所と共同開発）により各種資源の柔軟かつ最適な割当が行える。また各種資源を最大限に必要とする大規模ジョブも他のジョブと混在させてシステム全体を有効に使うことができる。
- S-820/80では拡張記憶4GBを有し, 通常の磁気ディスクと同様な使い方で2GB/秒の高速入出力を行うことができる。
- 総計140GBの磁気ディスク容量を擁し, CPUの高速化とあわせて大規模科学計算を可能としている。その内容は以下の通りである。

一般ディスク			パラレルI/Oディスク		システムディスク
長期ファイル	短期ファイル	ワークファイル	短期ファイル	ワーク/短期共用	22GB
11GB	28GB	19GB	30GB	30GB	

- ・大容量の光ディスク装置を遠隔磁気テープ倉庫の代替機能として利用でき、所外の遠隔地ユーザの便に供している。

3.2 ジョブクラスの構成

〈S-820/80〉

クラス	CPUタイム(分)		基本リージョン(MB)		拡張リージョン(MB)		ES(拡張記憶)(MB)	
	MAX	STD	MAX	STD	MAX	STD	MAX	STD
A	1	1	4	0.5	128	4	1920	0
B	5	5	4	0.5	128	4	1920	0
C	30	30	4	0.5	128	4	1920	0
D	120	30	4	0.5	128	4	1920	0
G	30	30	4	2.0	128	4	1920	0
S	600	30	7	0.5	224	4	3328	0
TSS	3	3	4	4	8	8	192	0

〈M-680H〉

クラス	CPUタイム(分)		基本リージョン(MB)		拡張リージョン(MB)		ES(拡張記憶)(MB)	
	MAX	STD	MAX	STD	MAX	STD	MAX	STD
A	1	1	7	2	32	4	-	-
B	5	5	7	2	32	4	-	-
C	30	30	7	2	32	4	-	-
D	120	30	7	2	32	4	-	-
S	600	30	7	0.5	96	4	-	-
TSS	3	3	4	4	4	4	-	-

3.3 利用点数

63年度6月よりS-820/80の利用課金点数を変更した。

これは63年度4月に設定を行ったS-820の利用点数の係数0.20をその後のM-680H、S-820両システムの利用バランスの調査に基づいて訂正を行ったものである。この結果S-820の利用点数は0.175となり従来より割安となった。利用点数の算出式と新しい係数は以下の通り。

$$P = CPU_m * a + (CPU_s - VPU_s) * b + VPU_s * c + LP * d + DISK * e$$

CPUM : 全CPU時間 (M-680H)

CPUs : 全CPU時間 (S-820)

VPU_s : ベクルト演算器の全CPU時間 (S-820)

L P : プリンタ用紙出力枚数

D I S K : D I S K使用総数 (MB * h o u r)

係数の値は以下の通り。

a : 0.10 /sec

b : 0.175/sec (改訂前: 0.20)

c : 0.175/sec (改訂前: 0.20)

d : 0.045/ページ (1ページがM-680Hの0.45秒分)

e : 0.00067/MB * h o u r

3.4 通信・ネットワークの構成

当センターの関連するネットワークの構成概念図を図3.4.1に示す。

3.4.1 所外通信回線・ネットワークサービス

(1) 学術情報網経由大学間ネットワーク

名古屋大学に設置の学術情報網ノードに9600BPS専用回線で接続して、大学間ネットワークに加入している。現在のサービス形態は次の通りである。

T S S サーバ 論理10多重

T S S ユーザ 論理10多重

ホスト名称 I M S

(2) 電話回線, D D Xパケット網回線

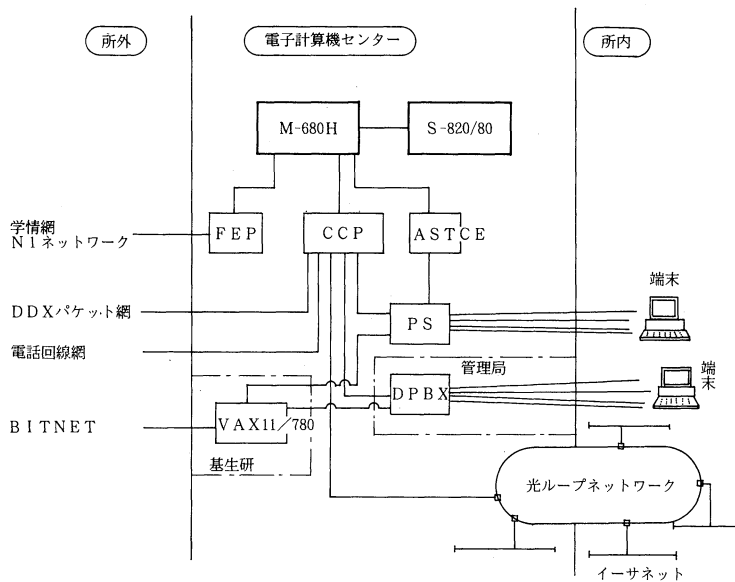
	通 信 速 度	回 線 数	手 順	局 線 番 号
電 話 回 線	1200BPS (V. 22)	2 回線	TTY	0564-53-6114(代) 0564-53-6117
	1200BPS (V A D I C)	3 回線	TTY	0564-53-6113(代) 0564-53-6114 0564-53-6115
	300BPS (V. 21)	2 回線	TTY	0564-53-6111(代) 0564-53-6112
D D X 回 線	9600BPS	1 回線* (論理15多重)	TTY	163-060-5722107

*物理的には1回線しかないがメッセージをパケットに分解して多重に伝送できるため、論理的に多重化できる。現在は15端末まで同時に接続可能としている。

(3) B I T N E T通信サービス

海外ネットワークB I T N E Tに加入し、電子メールサービスを行っている。

ノード計算機としては基生研所有のV A X11/780を使用し、名古屋商科大学との間を9600BPSの専用回線で接続している。利用対象者は機構内の教官、職員に限定している。



CCP : 通信制御装置
 ASTCE : アスキーターミナルコントローラ
 FEP : フロントエンドプロセッサ
 PS : ポートセレクタ
 DPBX : デジタル交換機

図3.4.1 ネットワーク構成概念図

3.4.2 構内通信回線, ローカルエリアネットワーク

(1) DPBX (デジタル私設交換機) による構内ネットワーク

DPBXによるデジタル通信網が現在90ライン分, 機構内に割当設置されている。その内訳は次の通りである。

分子研	70
基生研	5
生理研	5
予備	10

これらの回線によって利用できるホスト計算機と通信速度は現在以下の通りである。

	通信速度	ポート数	手 順	内線番号 (代)
M-680H S-820/80	9600BPS	4ポート	TTY	6210
	1200BPS	3ポート	TTY	6200
基生研 VAX11/780	9600BPS	2ポート	TTY	6220

今後は(2)項のポートセレクタに替って, この形態の接続が主流となると予測される。

(2) ポートセクタによる通信

ポートセクタ経由で接続できる計算機と通信速度は以下の通りである。

	通信速度	画面モード	ポート数	ポートセクタクラス
M-680H S-820/80	9600BPS	ラインモード (CCP)	8ポート	20
		スクリーンモード (ASTCE)	7ポート	30
	1200BPS	ラインモード (CCP)	8ポート	10, 15
基生研 VAX11/780	1200BPS	ラインモード	2ポート	50

この形態で使用されている端末は現在まだ約70端末ある。

(3) ローカルエリアネットワーク (LAN)

LANは現在二系統ある。一つはX.25のプロトコルに基いて構築された光ループネットワークとCSMA/CD方式でLLCプロトコルに準拠したイーサネットをゲートウェイ (GW) で接続した形の中央 (M-680H) 集中形のもので、TSS端末機能、ファイル転進 (FIT)、フルスクリーンエディタ (ASPEN) などが使用できる。但し接続できる端末はNEC PC9801シリーズに限られている。またこの形態では24時間稼働のファイル管理装置 (M-220H) の利用も可能である。

もう一つはKNET/K200を介してホスト計算機 (M-680H) と接続されたイーサネットで、この上ではTCP/IPのプロトコルに則って通信が可能である。ホスト計算機、あるいはワークステーション (WS) 間で、端末機能 (telnet)、ファイル転送 (ftp) が使用できる。ただし、今のところ電算センター構内のイーサネットケーブルに接続された機器間に限定される。将来、光ループネットワークのノード (FSN) がFDDI対応のものに置き替わると、分子研全棟のイーサネットケーブル下の計算機、WS同志がTCP/IPプロトコルで通信できるようになる見通しである。

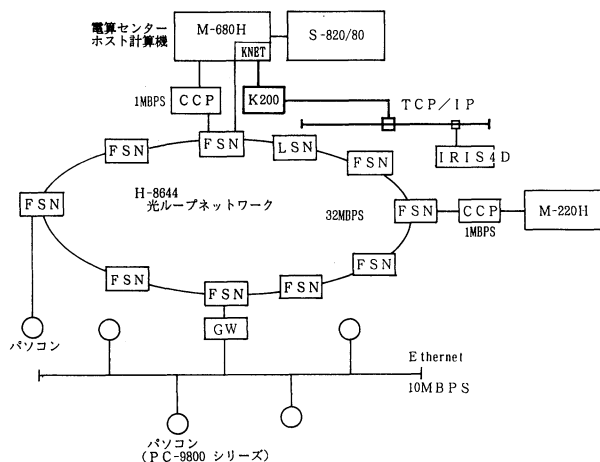


図3.4.2 LANの構成

3.5 FORTRAN (バージョン22-00) のセンター標準化

分子研電子計算機センターの標準コンパイラを1989年4月3日にバージョン02-04からバージョン22-00に切り換えた。22-00は、分子研計算機センターでは既に1988年10月よりサブコンパイラとして公開している。信頼性は1988年10月時点におけるものよりかなり高くなっている。

以下に22-00の特徴及び使用法について説明する。

1) 22-00の特徴

22-00の主な特徴はFORTRAN開発支援プログラムFORT/ASSISTとの密な連携及びS-820の新しいハードの機能を意識したオブジェクトの出力を可能にした点にある。従来より指摘されていたコンパイル速度、コンパイル時に必要なメモリサイズに関しても以前の02-04とほぼ同等の性能を持っている。

特にオブジェクトの最適化機能(ベクトル化機能も含む)及びステートメント数等の量的制限の撤廃、ワーク領域の制限(特にベクトル化時)の撤廃等に関しては、02-04に比べ格段の差があり、S-820上で走らされることを意図したプログラムのコイパイルに特に向いている。

当センターに登録されているライブラリのうち、使用頻度の高い約20本のプログラム(約150jobs)を用いた調査の結果を簡単にまとめると以下の通り。

コンパイルCPU時間比(22-00/02-04)

	スカラ	HAP
OPT(3)	1.80~2.51倍	2.21~4.15倍
SOPT	2.26~4.61倍	2.39~4.34倍

実行CPU時間比(22-00/02-04)

	スカラ	HAP
OPT(3)	0.49~0.97倍	0.37~0.96倍
SOPT	0.40~0.93倍	0.37~0.95倍

コイパイル作業領域

(1サブルーチンの行数あたり)

NOHAP属性の時

ソース行数	400	1000	3000	5000
作業領域	0.4 MB	0.9 MB	1.3 MB	1.5 MB

HAP属性の時

ソース行数	400	1000	3000	5000
作業領域	0.5MB	1.9 MB	3.2 MB	4.8 MB

この調査によればプログラムの実行速度は、02-04でコンパイルしたものに比べ1.0から2.5倍ほど速くなっている。

02-04に比べ、ベクトル化の範囲と性能が向上したので、S-820/80を使用するプログラムは性能の上がる可能性が高くなっている。ただし、この傾向はプログラムやデータによって変化し、極端にベクトル長が短いと遅くなることもあるので、02-04に比べて*V OPTION文によるきめ細かなベクトル化の指示がより有効になる場合が多くある。

2) 使用法

使用方法(カタプロ名称)は以前の標準FORTRAN(02-04)と同じである。標準化以前より22-00を使用していたユーザは、バッチジョブの場合、FORT7CLG、FORT7CL、FORT7CGのようにFORTの後に7のつくカタプロを使うようにJCLを変更する必要がある。カタプロは'SYS1. IMS. PROCLIB'に入っている。また展開形を使用している場合は、'SYS1. FORTELIB'を定義しているJOB LIBやSTEPLIBを削除し、リンケージのSYS LIB等で指定している場合は、'SYS1. FORT7LIB'に修正しなければならない。

TSSコマンドではLIBコマンドやリンケージのLIBオペランドで'SYS1. FORTELIB'を指定していた文を指定しないように修正することが必要である。

関連ライブラリ名称は以下のようにになっている。GPSL、BGSPを除いては、すべて以前の標準FORTRAN(02-04)の時と同じ名称である。

```
SYS1. MATRIX. HAP
SYS1. MATRIX. NOHAP
SYS1. MSL2. NOHAP
SYS1. MSL2. HAP
SYS1. GPSL
SYS1. BGSP
```

3) 注意事項

02-04は廃棄されるので新たなオブジェクトの作成や実行はできない。また02-04で作成したオブジェクトモジュールとの混在はできないので、02-04から移行する際に全てのプログラムを再コンパイルする必要がある。21-00で作成したオブジェクトモジュールとの混在は可能である。22-00コンパイラの詳細については、オンラインマニュアル(OMM1コマンド又はASPENのTUTORコマンド)や利用の手引に示し、ユーザが比較的簡単に知ることができるようになっている。

コンパイルオプションは特に従来の22-00からの変更はない。DCOMでDCOM(±:...)という指定方法が日立発行のマニュアルでは明示的に示されていないため、

あたかも許されていないかのように誤解されるが、この指定は許される。さらにMAX, NOMAXのオペランドが追加されている。COMMON領域をJOBの実行中に確保する際、そのCOMMON領域の最大を確保するかそうでないかを指示するオペランドであり、従来は最初にCOMMON領域が定義される場所にその最大長を定義しておかなければ、実行途中でERRORでJOBが止まっていたが、22-00ではDCOM (MAX) を指定していれば、それは起こらない。

DCOMを指定した時は、必ずリンケージエディタのパラメータ'LD=ANY, EX=EA' を指定しなければならない。

コンパイルオプションにSOPTの指定をするとNODCOMのようなオプションが仮定されることがあり、他に指定したオプションが無視されることがあるので、オプションの並びの一番最初に指定するようにする。(オプションは、後に指定されものが優先される。)さらにOPLISTを指定してオプションが意図したように指定されているか確認するようになる。

4) ベクタイザ

22-00コンパイラの公開にともない、ベクタイザ22-00のベクタイザも1988年10月より公開している。従来より分子研センターで開発していたVREPOは、1989年4月3日以降使用できなくなっている。

使用法は以下のカタプロを使用するか、ASPENのFORT/ASSISTを使う。

VELOOP 以前のVECDOSOに対応している。

VECMODU 以前のVECTMAPに対応している。

5) FORT/ASSIST (FORTRAN開発支援プログラム)

ASPENからFORTRAN開発支援プログラムFORT/ASSISTが利用できる。会話的に作業を進めることができるようにASPENから起動できるのが特徴である。無手順端末でも同じ様に番号入力ができる。以前と比較してHELP機能が充実しているが、センターの運用上TSS空間を大きくできないため、GAUSSIAN82のような大きなプログラムをTSSだけでは取り扱うことはできない。バッチジョブとの併用が必要である。

ASPENでは@ASPEN画面で10番(拡張機能ASPEN2)を選択すれば、ASSISTにはいることができる。

3.6 HAP FORTRAN77のオンラインマニュアル

HAP FORTRAN77の言語および使用の手引のマニュアルがTSS端末(日本語表示可能なもの)から参照できる。参照方法は2通りあり、日立製品版(ASPENエディタ中で使用し、端末は所内設置の2020端末に限定される)と分子研センター版(無手順端末からでも参照可能)の

どちらでもマニュアルテキストは同一である。

(日立製品版の使用方法)

ASPENエディタでTUTORコマンドを入力する。

TUTOR FLANG 言語マニュアルを参照する。

TUTOR FGUIDE 使用の手引マニュアルを参照する。

TUTOR END マニュアル参照モードから抜ける。

(分子研センター版の使用方法)

READY状態でOMM1コマンドを入力する。

マニュアル選択メニューで言語か使用の手引かを選択する。

3.7 S-820 でのTSSサービス

S-820 に直接ログオンができるようになった。

次のようにログオン入力する。

```
LOGON S820 AB1CD2
```

2020端末の場合、ENTER LOGONが表示されている状態のときのみS-820 にLOGONできる。ログオンしたのちM-680HかS-820のどちらにログオンしているか分からなくなったらSYSTEMコマンドを入力すると答えてくれる。

ESはセッションあたり192MBまで使用できる。ただし、TSS全体では384MBであるので他のTSSユーザが使用している場合には192MBすべてを使用できないこともある。

ESのアロケートは次のようにALLOCコマンドを入力する。

```
ALLOC DD (FT02F001) TEMP (ESFILE) +  
UNIT (ES) SPACE (10) MB
```

又、プログラムの実行が終了した時点で速やかにFREEすること。

```
FREE DD (FT02F001)
```

なお、一時的な制限事項としてESについては増分指定をするとABENDすることがあるので、当面初期値で必要量を確保するようにすること。

HAP (拡張) リージョンはセッションあたり8MBまで使用できる。

3.8 ASPEN E2 (02-00) のバージョンアップ

ASPENがバージョンアップした。主な機能拡張について次に説明する。

- (1) 範囲行アドレスを指定する場合、開始および終了を省略できる。
- (2) =コマンドにより前に投入したコマンドを再表示して使用できる。
- (3) MEMOコマンドであらかじめ記憶させてある情報を表示できる。

記憶させる情報はコマンド記号の¥ASPENMEMEMOLIN1と¥ASPENMEMEMOLIN2にSETCSコマンドを用いて設定する。

```
SETCS ¥ASPENMEMEMOLIN1 VAL (メモ1)
```

```
SETCS ¥ASPENMEMEMOLIN2 VAL (メモ2)
```

ASPENを使用する場合、次のことに注意のこと。

ASPENのTSSコマンドの実行機能でコマンドプロシジャを実行する場合ATTN文を使用することができない。またTMP4の機能の一部制約を受ける(Xコマンドおよびオペランドの記憶機能が使用できない)。

ASPENのバージョンアップに伴いTSDUT関係のコマンドの仕様が一部変更になった。

TSDUTはCOPY, LIST, COMPARE, LISTSP, LISTPDS, DLNコマンドの総称である。

LISTコマンドでの行範囲の指定の区切りが「,」から「:」に変更された。

```
例 LIST dsn 1, 5 従来
     LIST dsn 1:5 今回変更
```

LISTSP, LISTPDSの表示(出力)形式も少し変更されている。これらのコマンドの出力をユーザのプログラムで使っている場合は注意する必要がある。

3.9 MSGHELPの操作性改善

MSGHELPでメッセージIDにワイルドカード(総称名)が指定できるようになった。

```
例1 MH JBB04% (JBB0411などを参照する)
```

```
例2 MH ABNDS0C% (0C1などを参照する)
```

あるメッセージIDを参照した後引き続いて別のメッセージIDが参照できる。SCROLL値を指定するところに「・」(ピリオド)とメッセージIDを入力することによってできる。

```
例 SCROLL:. JNL241I (ラインモード端末)
    SCROLL[. JNL241I] (フルスクリーン端末)
```

3.10 FORTRANメッセージのMSGHELPサポート

FORTRAN77(21-00)のエラーメッセージの情報についてMSGHELPでサポートされた。日本語版のみのサポートである。日本語が仕様できる端末で使用のこと。

```
例 MH JNL240I J
```

3.11 光ディスクの利用法

ユーザは共用光ディスクあるいは専用光ディスクのどちらか一方を使用できるようになってい

る。光ディスクは書き換えができないけれども、間違っただけで消去してしまうことはない。磁気ディスクのSAVEデータセットのなかで重要なもの、たまに必要になるものなどは光ディスクに格納しておくことで事故の影響を回避したりSAVEのスペースをもっと有効に使うことができる。

光ディスクを使用するためにODMが用意されている。今回、ODMを無手順の端末からでも使いやすくするため、機能の選択をするメニュー画面を省略できるように変更した。ODMコマンドのオペランドに機能番号を指定するとメニュー画面省略モードになる。機能番号を指定した場合はほかのパラメータも一緒に指定できる。

使用例1 (DISK TO OD)

ODM 1

使用例2 (OD TO DISK)

ODM 2

メニュー画面省略で指定できる機能番号は現在、1と2のみである。

機能番号に続いてパラメータを指定できるが、指定しない場合は順に問合せてくる。標準値でよいパラメータの問合せには送信キーのみで構わない。

ODMの処理の対象とするデータセット群の指定は、あらかじめ名前のリストをデータセットに作成しておいて、それを指定する方が便利である。指定はALLやSAVEのかわりに*@LISTとし@LISTのデータセット中には次のような完全データセット名を書く（1カラム目はスペースにすること）。

AB1CD2. @A. FORT

AB1CD2. B. DATA

3.12 ODM (光ディスクマネージャ) の機能アップ

ラインモード端末での操作性を改善した。パラメータを指定するのにデフォルト値のままでもよい場合でも全部パラメータを入力しなけりばならなかったのを送信(リターン)キーだけでもよいようにしたり、パソコンのターミナルモードを使用している場合にカーソルを操作してパラメータの一部を変更して送信することができるようになっている。

3.13 LISTCFコマンドの公開

データセット名の一覧を端末に表示させるLISTC1コマンドの高速版としてLISTCFを公開した。

3.14 LISTDTコマンドの公開

データセット名の一覧を木構造で表示するLISTDTコマンドを公開した。データセット名に

ワイルドカード（総名称）が指定できる。第2パラメータにLISTを指定すると一覧表をカット紙型レーザプリンタに出力できる。

例 LISTDT %, LIST

表示例

```
__ AB1CD2 __A__ FORT __
      |      |      |__ BACKUP
      |      |__ DATA
      |      |__ CNTL
      |__J__ OUTLIST
```

3.15 S-820 で実行するジョブの基本リージョンの指定方法

S-820でジョブを実行させる場合に、//*MAIN文で指定する基本リージョンは、実際に使用するものと同じくらいの大きさを指定するようにすること。必要以上に指定すると、同時に実行できるジョブの数が少なくなり、全体の処理効率が落ちたり、Aジョブの処理が待たされてしまうことが多くなる。実際に使用したリージョンの大きさは、シスアウトのシステムメッセージかJOBLTコマンドで知ることができる。

指定例 //*MAIN SYSTEM=S820
//*MAIN REGION=(, , 600 K, 4 M)

3.16 VAXで作成した磁気テープの読み込み方法

VAXのCOPY形式の磁気テープ（ASCII形式）はOPENMTのメニューのLABEL欄でJLと指定することにより読み込みが可能となっている。

3.17 パラレルI/Oジョブの指定

JCLの//*MAIN文でPRL=YESを指定するとパラレルI/Oを使用するジョブとして実行するが、高速なI/O速度を確保するために、同時に実行できるジョブ数はプロセッサあたり5程度に押さえている。最近、パラレルI/Oを使用しないのにPRL=YESの指定をしているジョブが見受けられ、パラレルI/Oを本当に使用するジョブがそのため実行待ちになってしまうことがある。

パラレルI/Oを使用する場合にのみ

//*MAIN PRL=YES

を指定すること。

3.18 TSSのTIME0500ログオンプロシジャの廃止

TSSセッションのCPU時間上限を1分から3分に変更したのに伴い、いままで3分までの使用を許可されたプロジェクトに限り指定できたTIME0500ログオンプロシジャ名は指定しても無効あるいはエラーになる。PROCパラメータは指定しないでログオンすること。

3.19 センター1，2階の閉館時刻

センター1，2階の閉館時刻は次の通りである。

	1階	2階
平日	17:00	22:00
土曜日	12:00	17:00

4. 研究開発レポート

4.1 分子軌道計算結果の動的modelingシステムKORIN/IRIS

分子科学研究所電子計算機センター 伊奈 諭, 柏木 浩

4.1.1 はじめに

分子の構造, 化学反応を純理論的に電子の振舞いとしてシミュレートする非経験的分子軌道法は分子解析の強力なツールであるが膨大なコンピュータ資源を必要とするため現状ではまだ超大型の計算機を必要とする。またこの計算によって得られる分子軌道や電子分布をより迅速に解析, 理解するためには, 結果を図形, 画像の形で得, 動的にさまざまな角度から観察したり, 切断したり, 合成比較などが自在にできることが有効である。ここでは超大型計算機の強力な計算能力と高性能なグラフィックワークステーション (GWS) の動的画像作成機能を結合した分子軌道計算のためのグラフィックシステムKORIN/IRISについて報告する。

前号 (No.9) では同じく分子軌道計算結果のmodelingシステムKORINについて報告したが, そのときはモデリングの計算をすべて大型計算機側で行ない, できあがった最終の画像データをグラフィックディスプレイ上に静止画像として表示するものであった (このシステムを改めてKORIN/Sと呼ぶ)。

今回作成報告するものでは分子軌道計算と電子密度などの格子点上の値の計算は大型計算機上で行うが, モデリング処理, 画像生成をすべてグラフィックワークステーション (GWS) 側で行うような分散処理システムを採用した。これにより分子軌道計算結果が3次元の動画像として観察ができると同時に, 操作性が飛躍的に向上し, 画像生成のターンアラウンドタイムが大幅に向上した。また分散処理の特徴により大型の計算機の稼働状況にほとんど拘束されずに作業ができるようになった。このGWS上のモデリングシステムをKORIN/IRISと呼ぶことにする。KORIN/SとKORIN/IRISは独立に使用できるシステムであるが, 無関係ではなく, それぞれのシステムで作成された奥行き付きピクセル画像データはどちらのシステムにもっていても組合せ, 合成ができるように考慮されている。

4.1.2 システム構成

システム構成は図4.1.1に示すようになっていいる。IRIS4D/70GTはGWSであり, RISCアーキテクチャに基づくUNIXマシンである。主記憶量16MB, 磁気ディスク量380MBを有し, 約10MIPSの計算速度をもっている。そのほかには強力なグラフィックエンジンをもってお

り、移動回転・拡大縮小・隠面消去・ライティング・スムージングなどの機能がある。1280×1024の分解能で1677万色同時表示フレームバッファ、Zバッファを各2面もつ。大型計算機との間はイーサネット（TCP/IP）で接続されており、お互いにtelnet, ftp が使える。大型計算機側はVOS 3下でKNET/K200 システムを使ってTCP/IPプロトコルを実現している。KNET/K200 を使った実効転送速度は大型計算機の負荷によりゆらぎが大きい、大体60～120KB/秒くらいであった。

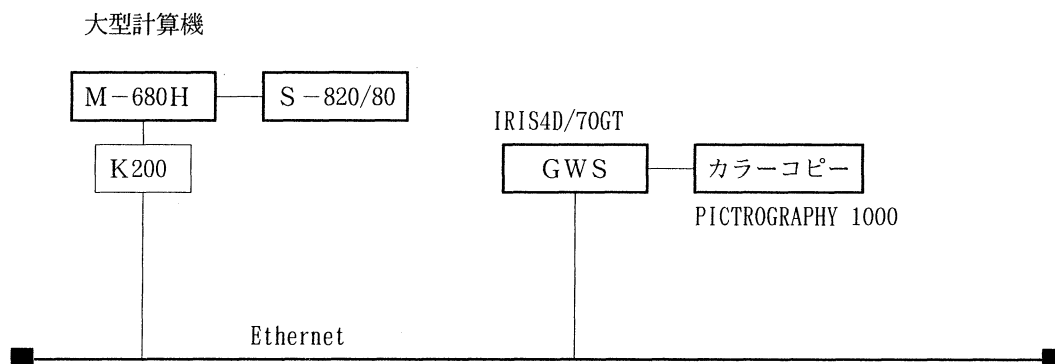
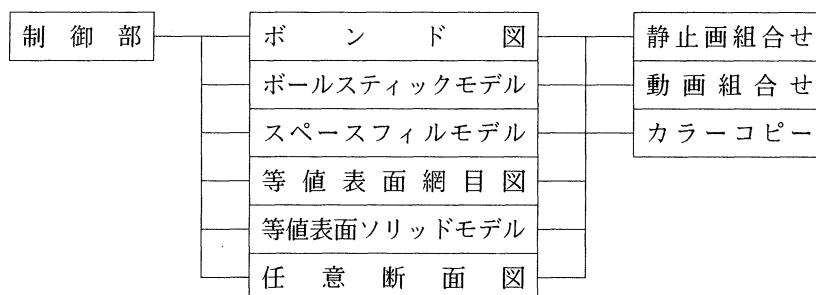


図 4. 1. 1 システム構成図

4. 1. 3 プログラム概要と機能

分子軌道計算はJAMOL, JASONなどを使って大型計算機側で行なう。得られた分子軌道関数(MO)からKORIN/Sの入力計算部を使用してMOまたは電子密度の3次元格子状データを求める。この後イーサネット経由で、この3次元格子や原子座標データをKORIN/IRIS側のファイルに転送する。ここから後のmodeling, 表示, 操作はすべてKORIN/IRIS側で行うことができる。現バージョンで使用できる機能を表4.1.1に示す。

表 4. 1. 1 機能一覧



これらのモデルは各々の中でまたはお互いを任意に組み合わせて、合成表示, 半透明表示, 動画表示ができる。使用した言語はFORTRAN, Cである。

4.1.4 手法のポイント

KORIN/Sではグラフィックディスプレイのピクセルに対応する画像情報を光線追跡法で求めたのに対し、KORIN/IRISではGWSのもつハードウェア/ソフトウェア機能を最大限に生かすためにすべての図形要素をポリゴン（多角形）の形で表現した。この種のGWSでは対象とするモデルがポリゴンの集合として与えられていれば、あとは移動回転・拡大縮小・スムージング・半透明処理などが自在にできるインテリジェンシーをもっているからである。したがってボンド図や網目図を除いてはそのモデルの構成要素（球や棒など）をいかにポリゴンの集合に展開できるかにかかっている。球や棒は簡単にポリゴンの集合である多面体に分解できることは容易に想像できる。少々やっかいなのは等値表面ソリッドモデルと任意断面図をいかに多面体として再構築するかである。このために3次元格子の各セル（直方体）を5個の4面体に分割して、各4面体から等値面および断面の構成ポリゴンを切り出すことにした。

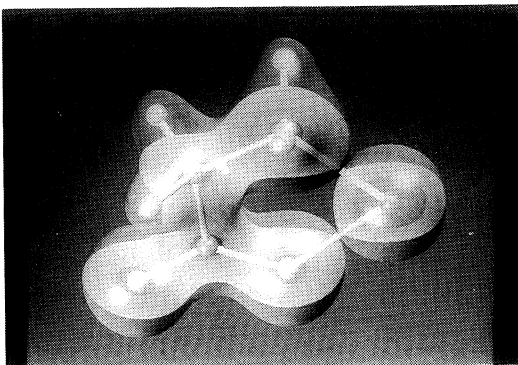
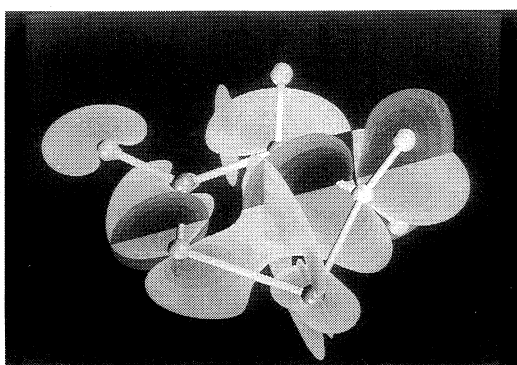
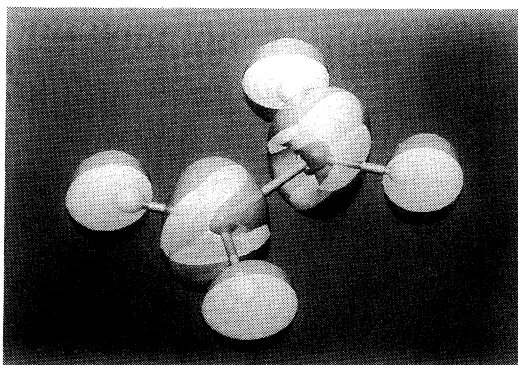
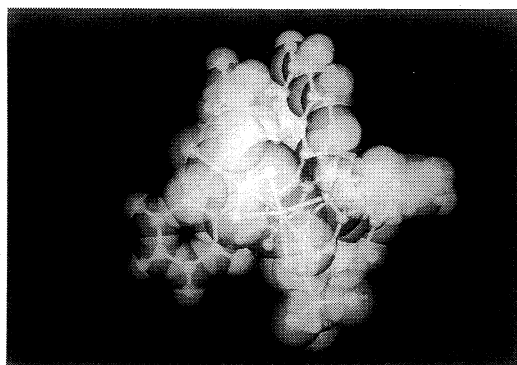
4.1.5 おわりに

KORIN/IRISはKORIN/Sに比べて格段に使いやすくなっている。多くの任意断面や等値面が数分以内で計算でき、回転・拡大縮小をリアルタイムに行えることにより単位時間に得られる情報量が多くなった。おわりにあたってまだ残されている課題をいくつか述べてみたい。エチレンのように小さな分子の場合には各モデルとも実にスムーズな動きを実現できるが、数十原子を含むような大きな分子となってくると必要とするポリゴン数が増大するので回転などの動きがリアルタイムに追従できず運動性が悪くなる。また小さな分子であっても各種モデルを組み合わせると同時に表示するポリゴン数が多くなると同じ現象が起こる。3次元格子を細かくし数を多くしていくと等値面、断面の計算にもかなりの時間を要するようになる。こうしたことから操作性が向上したとはいえまだまだ計算能力、グラフィック能力が不足している。このような場合にもなめらかで一定の速度の動きを作るためにはやはりビデオ装置などへのコマ撮りが必要になる。

次に機能面ではKORIN/Sには存在した断面による等値表面ソリッドモデルや網目図のカッティング機能をつけ加えなければならない。

断面の表裏の問題も重要である。現在は一つのポリゴンに表裏の二方向に法線を定義できないため、裏表の輝度の差が顕著に現われすぎる。表裏に2枚のポリゴンを背中合わせに張りつけると演算時間が増えるしポリゴン数が倍増して運動性が悪くなるので考えものである。カラーハードコピーは銀塩写真方式のものであり高画質ではあるが画面をダイレクトにコピーする形ではなくファイル化されたピクセルイメージを転送し直すため、転送と、現像に併せて4、5分/枚の時間がかかる。

4.1.6 表示動画像例



5. 一 般 報 告

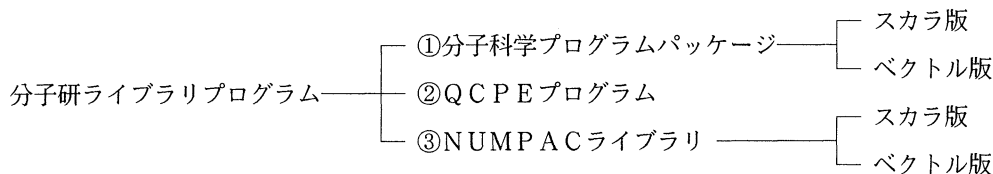
5.1 分子研ライブラリプログラムの収集と開発

昭和63年度のライブラリ開発計画を表5.1.1に示す。開発されたライブラリは新規プログラムの登録あるいは既存プログラムの改良・発展というかたちでライブラリ管理システムを介してユーザに公開されている。

表5.1.1 昭和63年度 分子研ライブラリプログラム開発作業一覧

1	荒川透 田中 英次 大田 芳 久	阪市大 研究生 研究生 大学院生	CI計算プログラムGSDTCIの開発
2	藪下聡 古賀 伸 諸 熊 奎 明 治	分子研 技官 助手 教授	分子軌道計算プログラムGAUS86の開発整備
3	寺倉清 柳瀬 之 石 田 章 浩	東大 助 大阪府大 教 東大 授 助 手	固体バンド計算のプログラムFLAPWの開発
4	酒井嘉子 三好 永 富 樫 雅 文	九大 助 福岡大 教 北大 授 助 手 研 究 生	モデルポテンシャル関数データの整備
5	長村吉洋	慶応大 助手	MCSCF計算プログラムGAMESSのレベルアップ
6	別府良孝 上 田 誠	愛知技術短大 講師 東海産業短大 講師	高性能固有値ルーティンANGELの開発
7	富樫雅文 J.M. Rudzinski	北大 研究生 大学院生	半経験的分子軌道計算プログラムMOPACの開発整備
8	小杉信博	東大 助手	分子軌道計算プログラムGSCF3のレベルアップ
9	岩田末広 小南 関 橋 部 伸 本 健 朗	慶応大 教授 大学院生 大学院生 大学院生	分子軌道計算のプログラム群MOLYXの開発・整備
10	小原繁 本多 卓 中野 晴 高坂 野 文 野 文 二 洋	京大 助手 大学院生 大学院生 大学院生 大学院生	分子積分パッケージ及び分子構造最適化プログラムKOTOの導入・整備
11	富樫雅文 J.M. Rudzinski	北大 研究生 大学院生	汎用分子力場計算プログラムBIGSTRN-3の移植
12	Y. Yamaguchi C. Janssen	PSITECH Inc.	分子軌道プログラムPSIのインプリメント

分子研ライブラリプログラムの構成は以下の様に3部構成になっている。



①の分子科学プログラムパッケージには、国内および国外の研究者から提供されたプログラム、②のQCPEプログラムを現行システムにコンバートしたものなど143件が収まっている。①のソースプログラムはデータセットとして磁気ディスク上にカタログされている。汎用機(M-680H)で実行させるためのスカラ版とスーパーコンピュータ(S-820)で実行させるためのベクトル版の2種を用意している。ライブラリプログラムの大部分については実行可能ロードモジュールも登録されているので、ユーザは即座にプログラムを実行することができる。

昭和63年度に新規登録した分子科学プログラムパッケージは以下の5本である。

```

FEMSE2  FINITE ELEMENT METHOD FOR 2-DIMENSIONAL SCHRODINGER EQ.
GHFID   GENERAL HARTREE-FOCK CALCULATION
BAND1   EXTENDED HUCKEL CALCULATIONS OF ONE-DIMENSIONAL POLIMERS
JAMOL4  AB INITIO LCAO MO SCF CALCULATION
HONDO7  HONDO VERSION 7.0: AB INITIO MO CALCULATION
  
```

②のQCPEプログラムは米国インディアナ大学に登録されているQCPE(Quantum Chemistry Program Exchange)プログラムを購入しているものであり、現在総件数505本である。量子化学の分野でよく使われる有名なプログラムのみならず、数学・物理化学一般のプログラムも含まれており、非常に有益なものである。ほとんどはFORTRANで書かれたプログラムで、ユーザには磁気テープによるソースプログラムの貸出サービスを行っている。

昭和63年度に新規登録したQCPEプログラムは以下の24件である。

```

QC0527  AMPAC: AUSTIN METHOD 1 PACKAGE (IBM 3090 VERSION)
QC0530  FALLOFF-CURVES FOR UNIMOLECULAR AND TERMOLECULAR REAC. (IBM)
QC0531  PERPCI: PREPARE PCILO INPUT CARDS
QC0532  NEWMAN: GRAPHICAL NEWMAN PROJECTIONS
QC0533  CDRAFT: CHEMICAL DRAFTSMAN
QC0534  QCFF-PI:FORCE FIELD EVAL. OF EQUIL. GEOM. & VIB. FREQ. (VAX)
QC0535  VIB: NORMAL MODES OF VIBRATION (VAX)
QC0536  JOBO/HAMA: AROMATIC RING CURRENT EFFECTS
QC0537  KMG: KANT MOLECULAR GRAPHICS PROGRAM V 2.05
QC0538  KGMOL: QUANTUM CHEMICAL PROGRAM PSCKAGE
QC0539  AMPAC: IBM 3090 VECTORIZED VERSION (WITH ESSL)
QC0540  DENSITY: DENSITY PLOTTING ROUTINE FOR AMPAC USE
QC0541  DRAW: STRUCTURE INPUT AND MANIPULATION ROUTINE FOR AMPAC
QC0542  QCFF-PI:FORCE FIELD EVAL. OF EQUIL. GEOM. & VIB. FREQ. (IBM)
QC0543  MINP: MM2 INPUT ASSIST PROGRAM (VAX VERSION)
QC0544  HONDO VERSION 7.0 (1987)
QC0545  FORTICON8: EXTENDED HUCKEL CALC. (IBM 3090 VERSION)
QC0546  PCILO3:PERTURBATIVE CONFIGURATION INTERACTION V 3 (IBM 3090)
QC0547  MM2: MOLECULAR MECHANICS II (IBM 3090 VERSION)
QC0548  PCK83: A CRYSTAL MOLECULAR PACKING ANALYSIS PGM (IBM 3090)
QC0549  MOPAC: A GENERAL MOLECULAR ORBITAL PACKAGE V 4.00 (IBM)
QC0550  PDM87: LEAST-SQUARES NET ATOMIC CHARGES OF SITE MULTIPOLES
QC0551  PRODIS: LOW-ENERGY CONFORMATION OF FLEXIBLE MOLECULES (VAX)
QC0552  STICK: 2-D GRAPHICS SYSTEM
  
```


③のNUMPACプログラムは二宮市三教授（中部大）、秦野甯世助教授（中京大）らにより製作された名古屋大学大型計算機センターの数値計算ライブラリプログラムを移植したものである。総件数は826本である。

以下、表5.1.2に現在登録されている分子科学プログラムパッケージの一覧を掲げる。

表5.1.2 分子科学プログラムパッケージ一覧

```

===== IMS PROGRAM LIBRARY =====

***** LIST OF PROGRAMS IN THE GIVEN FIELD *****
FIELD CODE : AS10
FIELD TITLE : SOLID STATE AND SURFACE.

NO. PROGRAM ID          PROGRAM TITLE
001 MDANO3 MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE
002 DVSCAT NUMERICAL-BASIS-SCC-DV-XALPHA MO AND CLUSTER CALCULATION
003 EHTB EXTENDED HUCKEL METHOD FOR TWO DIMENSIONAL PERIODIC SYSTEMS

FIELD CODE : AS20
FIELD TITLE : POLYMER AND LIQUID CRISTAL.

NO. PROGRAM ID          PROGRAM TITLE
001 BAND1 EXTENDED HUCKEL CALCULATIONS OF ONE-DIMENSIONAL POLYMERS

FIELD CODE : AS30
FIELD TITLE : LIQUID AND SOLUTION.

NO. PROGRAM ID          PROGRAM TITLE
001 MDANO3 MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE
002 MDSALT MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION FOR MOLTEN SALT
003 CLAMPS CLASSICAL MANY PARTICLE SIMULATOR
004 NLPLSQ LEAST-SQUARES PROGRAM FOR REFINING LIQUID STRUCTURE MODELS
005 KURVLR PROGRAM FOR ANALYSING X-RAY DIFFRACTION DATA OF LIQUID
006 CCP5 CCP5 SIMULATION PROGRAMS

FIELD CODE : BI10
FIELD TITLE : BIOMOLECULES.

NO. PROGRAM ID          PROGRAM TITLE
001 NASH SEARCH FOR NEAR ATOMS IN A PROTEIN
002 STEREO STEREO DRAWING OF SKELETAL MODEL OF PROTEINS.
003 CONVRT CONVERSION OF BNL DATA FORMATS TO PSCPS FORMAT
004 DISMAP TRIANGULAR DISTANCE MAP OF A PROTEIN
005 ASA ACCESSIBLE SURFACE AREA OF A PROTEIN
006 BENDER PARAMETER CALCULATION FOR BYRON'S BENDER MODEL
007 SUPPOS SUPERPOSITION OF TWO SIMILAR CONFORMATION OF PROTEIN(S)
008 BSIP BASIC STRUCTURAL INFORMATION ON PROTEIN FROM PDB DATA
009 TASP ANALYSIS OF PRIMARY AND SECONDARY STRUCTURES OF PROTEIN
010 PDB THE PROTEIN DATA BANK
011 PRXYZ XYZ COORDINATES OF MODEL STRUCTURE OF PROTEIN
012 GPQDD GRAPHIC PROGRAM FOR QUANTITATIVE DRUG DESIGN

FIELD CODE : CR20
FIELD TITLE : CARTESIAN COODINATES OF ATOMS IN MOLECULES.

NO. PROGRAM ID          PROGRAM TITLE
001 ORTEP ORTEP DRAWING OF MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURE
002 BSIP BASIC STRUCTURAL INFORMATION ON PROTEIN FROM PDB DATA
003 TASP ANALYSIS OF PRIMARY AND SECONDARY STRUCTURES OF PROTEIN
004 PDB THE PROTEIN DATA BANK
005 PRXYZ XYZ COORDINATES OF MODEL STRUCTURE OF PROTEIN
006 GPQDD GRAPHIC PROGRAM FOR QUANTITATIVE DRUG DESIGN
007 MDP MOLECULAR DISPLAY PROGRAM
008 STERIC STEREOCHEMISTRY BY INPUT OF CHEMO

```

FIELD CODE : CR30
FIELD TITLE : MOLECULAR MECHANICS AND FORCE FIELD CALCULATIONS.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MM2	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION BY MM2 FORCE FIELD MODEL
002	MMIPI1	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 100-ATOM MOLECULES
003	MMIPI3	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 300-ATOM MOLECULES
004	MMIY3	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION FOR 6-COORDINATED COMPOUNDS
005	MDANO3	MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE
006	CLAMPS	CLAMPS: CLASSICAL MANY PARTICLE SIMULATOR
007	BGSTR3	BIGSTRN3: A GENERAL PURPOSE EMPIRICAL FORCE FIELD PROGRAM
008	CCP5	CCP5 SIMULATION PROGRAMS

FIELD CODE : DB10
FIELD TITLE : DATA BASES.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	QCLDB	QUANTUM CHEMISTRY LITERATURE DATA BASE SYSTEM
002	QCHECK	CHECK ROUTINE OF QUANTUM CHEMISTRY LITERATURE DATA BASE
003	ISLINE	ATOMIC AND MOLECULAR SPECTRAL LINE DATA RETRIEVAL SYSTEM
004	CHEMIC	CHEMICS :AUTOMATED ORGANIC CHEMICAL STRUCTURE ELUCIDATION
005	IR2	INFRARED SPECTRAL RETRIEVAL SYSTEM
006	CMQCA	CARNEGIE-MELLON QUANTUM CHEMISTRY ARCHIVE
007	STERIC	STEREOCHEMISTRY BY INPUT OF CHEMO
008	QCBDB	QUANTUM CHEMISTRY BASIS SET DATA BASE
009	MPBDB	MODEL POTENTIAL BASIS SET DATA BASE

FIELD CODE : EG10
FIELD TITLE : EDUCATIONAL TOOLS.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	OTHELLO	*** OTHELLO GAME FOR TSS EDUCATION ***

FIELD CODE : EG20
FIELD TITLE : GENERAL UTILITIES.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	LIBE	SOURCE PROGRAM MAINTENANCE UTILITY
002	FCBSD	FILE ACCESS ROUTINES WHICH CAN BE USED IN FORTRAN PROGRAM
003	PSTOPO	CONVERT FORTRAN SOURCE DATA FROM PS-DSN. TO PO-DSN(MEM).
004	POTOPS	CONVERT FORTRAN SOURCE DATA FROM PO-DSN(MEM). TO PO-DSN.
005	REPORT	DISPLAY MODULE-REFERENCE RELATION IN TABLES AND CHARTS.
006	PFORTV	PFORT VERIFIER:CHECK OF FORTRAN PROGRAM FOR PORTABILITY
007	FCMP	FILE COMPARE
008	FLOW	FORTFLOW
009	FORDAP	FORDAP (FORTRAN PROGRAM DYNAMIC ANALYSIS PACKAGE)
010	STINGY	STINGY PRINTER
011	PROFIL	PROFILE
012	SFORT	FORMAT TRANSFORMER FOR FORTRAN COMPILE LIST
013	PSPART	EXTRACT SPECIFIED ROUTINES FROM A FORTRAN PROGRAM PACKAGE
014	DRAWDG	DIAGRAM:GENERATION OF GOLDSTONE AND BLOCH-BRANDOW DIAGRAMS
015	OUTFIT	UTILITY PROGRAM PACKAGE WRITTEN IN PL/I TO HANDLE DATASET
016	PKIT	PROGRAMMER'S KIT : TSS COMMAND PROCEDURES FOR CODING AID
017	COUNTF	FORMAT TRANSFORMER FOR FORTRAN77 EXECUTION MAP
018	TSS517	PROGRAM FOR TELECOMMUNICATION BY NEC PC-8801 COMPUTER
019	VREPRT	FORTAN PROGRAM ANALYZER FOR A VECTOR PROCESSOR.

FIELD CODE : GP10
FIELD TITLE : GRAPHIC PROCESSING.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	JAPIC1	PLOTTER WRITING OF MO AND DENSITY BY AB INITIO METHODS

002 JAPIC2 PLOTTER AND GRAPHIC DISPLAY WRITING OF MO AND DENSITY
 003 ORTEP ORTEP DRAWING OF MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURE
 004 GPQDD GRAPHIC PROGRAM FOR QUANTITATIVE DRUG DESIGN
 005 MDP MOLECULAR DISPLAY PROGRAM
 006 CRYSTA PROGRAM SYSTEM FOR CRYSTAL STRUCTURE ANALYSIS
 007 EXAFS GRAPHIC PROGRAM SYSTEM FOR EXAFS ANALYSIS

FIELD CODE : MI10
 FIELD TITLE : MOLECULAR INTEGRALS.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	CGTORL	MOLECULAR INTEGRALS FOR THE RELATIVISTIC INTERACTIONS
002	CGTOFD	FIELD AND FIELD GRADIENT INTEGRALS OF CGTO
003	PA300	EVALUATE ONE- AND TWO-ELECTRON INTEGRALS
004	PA600	ONE-ELECTRON PROPERTIES PACKAGE

FIELD CODE : NM10
 FIELD TITLE : MATRIX,ALGEBRAIC AND ARITHMETIC UTILITY.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	SALS	STATISTICAL ANALYSIS WITH LEAST SQUARES FITTING
002	REDUCE	REDUCE-2 SYMBOLIC AND ALGEBRAIC PROGRAMMING SYSTEM
003	NICER	NAGOYA ITERATIVE COMPUTATION EIGEN ROUTINES
004	NLPLSQ	LEAST-SQUARES PROGRAM FOR REFINING LIQUID STRUCTURE MODELS
005	KURVLR	PROGRAM FOR ANALYSING X-RAY DIFFRACTION DATA OF LIQUID
006	EMOR1	EXTENDED METHOD OF OPTIMAL RELAXATION FOR EIGENPROBLEMS

FIELD CODE : NM40
 FIELD TITLE : SYMMETRY ANALYSIS.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	WIGNER	MAGNITUDES OF 3-J AND 6-J SYMBOLS

FIELD CODE : SC10
 FIELD TITLE : SCATTERING AND TRAJECTORY.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MOLSCAT	MOLSCAT: MOLECULAR SCATTERING PROGRAM
002	CSACST	CROSS SECTIONS OF ATOMIC COLLISIONS BY SEMICLASSICAL THEORY
003	GORDON	COUPLED CHANNEL SCATTERING MATRICES

FIELD CODE : SC20
 FIELD TITLE : CRYSTALLOGRAPHY.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	NASH	SEARCH FOR NEAR ATOMS IN A PROTEIN
002	STEREO	STEREO DRAWING OF SKELETAL MODEL OF PROTEINS.
003	CONVRT	CONVERSION OF BNL DATA FORMATS TO PSCPS FORMAT
004	DISMAP	TRIANGULAR DISTANCE MAP OF A PROTEIN
005	ASA	ACCESSIBLE SURFACE AREA OF A PROTEIN
006	BENDER	PARAMETER CALCULATION FOR BYRON'S BENDER MODEL
007	SUPPOS	SUPERPOSITION OF TWO SIMILAR CONFORMATION OF PROTEIN(S)
008	PGCCMB	CONFORMATIONAL ANALYSIS BY BOYD'S METHOD.
009	UNICS3	UNIVERSAL CRYSTALLOGRAPHIC COMPUTATION PROGRAM SYSTEM
010	ORTEP	ORTEP DRAWING OF MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURE
011	BSIP	BASIC STRUCTURAL INFORMATION ON PROTEIN FROM PDB DATA
012	TASP	ANALYSIS OF PRIMARY AND SECONDARY STRUCTURES OF PROTEIN
013	MULTAN	AUTOMATIC SOLUTION OF CRYSTAL STRUCTURES BY DIRECT METHOD
014	PDB	THE PROTEIN DATA BANK
015	PRTXYZ	XYZ COORDINATES OF MODEL STRUCTURE OF PROTEIN
016	NLPLSQ	LEAST-SQUARES PROGRAM FOR REFINING LIQUID STRUCTURE MODELS

017 KURVLR PROGRAM FOR ANALYSING X-RAY DIFFRACTION DATA OF LIQUID
018 CRYSTA PROGRAM SYSTEM FOR CRYSTAL STRUCTURE ANALYSIS
019 EXAFS GRAPHIC PROGRAM SYSTEM FOR EXAFS ANALYSIS

FIELD CODE : SL10
FIELD TITLE : SPECIAL LANGUAGES.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	HLISP	HLISP PROGRAMMING SYSTEM
002	REDUCE	REDUCE-2 SYMBOLIC AND ALGEBRAIC PROGRAMMING SYSTEM

FIELD CODE : SS10
FIELD TITLE : SPECTROSCOPY AND INSTRUMENTAL ANALYSIS.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	DIAVIB	CALC. OF NUMERICAL VIBRATIONAL WAVEFUNCTION FOR DIATOMICS
002	DIAMT	CALC. OF FCF AND ELECTRONIC SPECTRA OF DIATOMIC MOLECULES
003	MMIPI1	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 100-ATOM MOLECULES
004	MMIPI3	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 300-ATOM MOLECULES

FIELD CODE : SS30
FIELD TITLE : NMR SPECTROSCOPY.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	DNMR3	SIMULATION OF EXCHANGE BROADENED NMR SPECTRA
002	LAOCN3	ANALYSIS OF HIGH RESOLUTION NMR SPECTRA
003	CHEMIC	CHEMICS :AUTOMATED ORGANIC CHEMICAL STRUCTURE ELUCIDATION
004	JHH	3JHH: NMR VICINAL COUPLING CONSTANTS
005	FPTSPN	NMR SPIN-SPIN COUPLIN CONSTANT CALCULATION BY FPT INDO
006	FPTNMR	CALCULATION OF NMR CHEMICAL SHIFT BY FPT-INDO/CNDO

FIELD CODE : SS50
FIELD TITLE : VIBRATIONAL AND ROTATIONAL SPECTROSCOPY.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	NCTB	NORMAL COORDINATE TREATMENT OF MOLECULAR VIBRATIONS
002	CVOA	NORMAL COORDINATE TREATMENT OF CRYSTAL VIBRATIONS
003	LSVR3	LEAST-SQUARES ANALYSIS OF VIB-ROT SPECTRA OF AN ASYM. TOP
004	LSRES3	L.S. ANALYSIS OF VIB-ROT SPECTRA OF ASYM. TOP IN RESONANCE
005	BC3	CALCULATION OF VIB-ROT SPECTRA OF ASYMMETRIC TOP
006	BCRES3	CALC. OF VIB-ROT SPECTRA IN RESONANCE FOR AN ASYMM. TOP
007	ENVLOP	CALCULATION OF BAND ENVELOPES OF VIB-ROT SPECTRA
008	DISPL3	DISPLAY OF THEORETICAL VIB-ROT SPECTRA
009	ASSIGN	ASSIGN DIAGRAM FOR THE ASSIGNMENT OF VIB-ROT SPECTRA
010	ISLINE	ATOMIC AND MOLECULAR SPECTRAL LINE DATA RETRIEVAL SYSTEM
011	CHEMIC	CHEMICS :AUTOMATED ORGANIC CHEMICAL STRUCTURE ELUCIDATION
012	IR2	INFRARED SPECTRAL RETRIEVAL SYSTEM
013	SERIES	LOOMIS-WOOD DIAGRAM FOR FINDING LINE SERIES
014	DIAVIB	CALC. OF NUMERICAL VIBRATIONAL WAVEFUNCTION FOR DIATOMICS
015	DIAMT	CALC. OF FCF AND ELECTRONIC SPECTRA OF DIATOMIC MOLECULES
016	FEMSE2	FINITE ELEMENT METHOD FOR 2-DIMENSIONAL SCHRODINGER EQ.

FIELD CODE : WF10
FIELD TITLE : WAVEFUNCTIONS BY AB INITIO METHODS.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	QCLDB	QUANTUM CHEMISTRY LITERATURE DATA BASE SYSTEM
002	JAMOL3	AB INITIO LCAO MO SCF CALCULATION
003	ATOMHF	AB INITIO LCAO SCF OF ATOMS. GAUSSIAN ORBITALS ARE USED.
004	HONDOG	AB INITIO LCAO-SCF-MO METHOD AND GRADIENT METHOD
005	SCEP	SELF-CONSISTENT ELECTRON PAIRS METHOD

006	IMSPAC	AB INITIO SCF MO CALCULATIONS
007	IMSPAK	GEOMETRY OPTIMIZATION BY AB INITIO SCF-MO CALCULATIONS
008	PA200	LIST OF ONE- AND TWO-ELECTRON INTEGRAL LABELLS
009	PA300	EVALUATE ONE- AND TWO-ELECTRON INTEGRALS
010	PA409	CLOSED-SHELL SCF AND POPULATION ANALYSIS PACKAGE
011	PA600	ONE-ELECTRON PROPERTIES PACKAGE
012	INTCPY	INTEGRAL COPY ROUTINE OF POLYATOM SYSTEM
013	GAUS76	AB INITIO MO CALCULATION. GAUSSIAN 76 M-VERSION.
014	ALIS	AB INITIO MCSCF PROGRAM FOR ATOMS AND MOLECULES
015	JAPIC1	PLOTTER WRITING OF MO AND DENSITY BY AB INITIO METHODS
016	JAPIC2	PLOTTER AND GRAPHIC DISPLAY WRITING OF MO AND DENSITY
017	GUGACI	GRAPHICAL UNITARY GROUP APPROACH CI BY ISAIAH SHAVITT
018	DRAWDG	DIAGRAM:GENERATION OF GOLDSTONE AND BLOCH-BRANDOW DIAGRAMS
019	GSCF2	PROGRAM GSCF2 WITH ONE-HAMILTONIAN AND PARTIAL SCF METHOD
020	GAMESS	GENERAL ATOMIC AND MOLECULAR ELECTRONIC STRUCTURE SYSTEM
021	GAUS80	GAUSSIAN 80 : AB INITIO MO CALCULATION (HITAC VERSION)
022	ALCHEM	ALCHEMY:AB INITIO ELECTRONIC STRUCTURE CALCULATION PACKAGE
023	CMQCA	CARNEGIE-MELLON QUANTUM CHEMISTRY ARCHIVE
024	ATOMCI	CONFIGURATION INTERACTION PROGRAM FOR ATOMS
025	CASSCF	A PROGRAM FOR COMPLETE ACTIVE SPACE SCF CALCULATIONS
026	PSHOND	PSEUDOPOTENTIAL VERSION OF MO PROGRAM HONDO
027	MELD	PROGRAM FOR MANY ELECTRON DESCRIPTION
028	JANIE1	NUMERICAL INTEGRATION OF ELECTRON DENSITY
029	GRAMOL	GRADIENT METHOD PROGRAM
030	COLMBS	COLUMBUS: A PROGRAM SYSTEM FOR SCF,MCSCF AND MR-SDCI CALC.
031	ATOMST	SCF PROGRAM FOR ATOMIC CONTRACTED STO CALCULATIONS
032	GAUS82	GAUSSIAN 82:AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS
033	MICA3	A PROGRAM SYSTEM FOR CONFIGURATION MIXING CALCULATION(CI)
034	SAC85	SAC/SACCI PROGRAM FOR GROUND,EXCITED,IONIZED AND ANION STATE
035	GSCF3	PROGRAM GSCF3 FOR SCF AND CI CALCULATION
036	QCBDB	QUANTUM CHEMISTRY BASIS SET DATA BASE
037	JASON2	CASSCF CALCULATION WITH LARGE BASIS SET
038	SCMOLX	MOLYX-SCF
039	CIMOLX	MOLYX-CI
040	KAMUY	KAMUY:AB INITIO CI CALCULATION OF ELECTRONIC STRUCTURE
041	FINSE2	FINITE ELEMENT METHOD FOR 2-DIMENSIONAL SCHRODINGER EQ.
042	MPBDB	MODEL POTENTIAL BASIS SET DATA BASE
043	JAMOL4	AB INITIO LCAO MO SCF CALCULATION
044	HONDO7	HONDO VERSION 7.0: AB INITIO MO CALCULATION
045	PSI	A SUITE OF AB INITIO QUANTUM MECHANICAL PROGRAMS
046	KOTO	KOTO: AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS
047	MNDOC	CORRELATED SEMIEMPIRICAL CALCULATIONS WITH GEOM.OPT.

FIELD CODE : WF20
FIELD TITLE : WAVEFUNCTIONS BY CNDO,INDO,AND MINDO METHOD.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MINDO3	MO CALCULATIONS BY MINDO/3 METHOD
002	CNINDO	MO CALCULATION BY CNDO AND INDO METHODS
003	MNDOM	MNDIFIED VERSION OF MNDO SCF MO CALCULATION PROGRAM
004	FPTNMR	CALCULATION OF NMR CHEMICAL SHIFT BY FPT-INDO/CNDO
005	CNDOS	CNDO/S-CI: MODIFIED CNDO AND CI METHOD
006	MNDOC	CORRELATED SEMIEMPIRICAL CALCULATIONS WITH GEOM.OPT.
007	FPTSPN	NMR SPIN-SPIN COUPLIN CONSTANT CALCULATION BY FPT INDO
008	GHFID	GENERAL HARTREE-FOCK CALCULATION
009	BAND1	EXTENDED HUCKEL CALCULATIONS OF ONE-DIMENSIONAL POLYMERS
010	MOPAC	A GENERAL MOLECULAR ORBITAL PACKAGE

FIELD CODE : WF30
FIELD TITLE : WAVEFUNCTIONS BY HUECKEL,EXTENDED HUECKEL,PPP METHOD.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	HMO	HUECKEL MOLECULAR ORBITAL CALCULATION
002	DVSCAT	NUMERICAL-BASIS-SCC-DV-XALPHA MO AND CLUSTER CALCULATION

```

003  GPQDD  GRAPHIC PROGRAM FOR QUANTITATIVE DRUG DESIGN
004  PPP    SCF-CI-PI-MO PROGRAM WITH PPP APPROXIMATION
005  EHTB  EXTENDED HUCKEL METHOD FOR TWO DIMENSIONAL PERIODIC SYSTEMS
006  ICON  EXTENDED HUCKEL CALCULATIONS FOR MOLECULES
007  HUCKEL HUCKEL CALCULATIONS FOR MOLECULES
008  MPXALP MODEL POTENTIAL X-ALPHA METHOD

```

```

**** TOTAL NUMBER OF UNIQUE PROGRAMS ****
      143

```

```

**** SORTED UNIQUE PROGRAMS ****

```

ALCHEM	ALIS	ASA	ASSIGN	ATOMCI	ATOMHF	ATOMST
BAND1	BCRES3	BC3	BENDER	BGSTR3	BSIP	CASSCF
CCP5	CGTOFD	CGTORL	CHEMIC	CIMOLX	CLAMPS	CMQCA
CNDOS	CNINDO	COLMBS	CONVRT	COUNTF	CRYSTA	CSACST
CVOA	DIAINT	DIIVIB	DISMAP	DISPL3	DNMR3	DRAWDG
DVSCAT	EHTB	EMOR1	ENVLOP	EXAFS	FCBSD	FCMP
FEMSE2	FLOW	FORDAP	FPTNMR	FPTSPN	GAMES	GAUS76
GAUS80	GAUS82	GHFID	GORDON	GPQDD	GRAMOL	GSCF2
GSCF3	GUGACI	HLISP	HMO	HONDOG	HONDO7	HUCKEL
ICON	IMSPAC	IMSPAK	INTCPY	IR2	ISLINE	JAMOL3
JAMOL4	JANIE1	JAPIC1	JAPIC2	JASON2	JHH	KAMUY
KOTO	KURVLR	LAOCN3	LIBE	LSRES3	LSVR3	MDAN03
MDP	MDSALT	MELD	MICA3	MINDO3	MMIPI1	MMIPI3
MMIY3	MM2	MNDOC	MNDOM	MOLSCT	MOPAC	MPBDB
MPXALP	MULTAN	NASH	NCTB	NICER	NLPLSQ	ORTEP
OTHELO	OUTFIT	PA200	PA300	PA409	PA600	PDB
PFORTV	PGCCMB	PKIT	POTOPS	PPP	PROFIL	PRTXYZ
PSHOND	PSI	PSPART	PSTOPO	QCBDB	QCHECK	QCldb
REDUCE	REPORT	SAC85	SALS	SCEP	SCMLX	SERIES
SFORT	STEREO	STERIC	STINGY	SUPPOS	TASP	TSS517
UNICS3	VREPRT	WIGNER				

IMS COMPUTER CENTER: LAST UPDATE = 89-06-01

5.1.1 分子研ライブラリ・プログラムの紹介

(1) MOPAC

- ・分野コード : WF20, WF2V
- ・タイトル : A GENERAL MOLECULAR ORBITAL PACKAGE
- ・作成者 : James J. P. Stewart (TEXAS大)
- ・登録者 : 大沢映二
- ・使用目的 : 半経験的MO法による化学反応研究のためのプログラムパッケージ
半経験的分子軌道法計算用のプログラムパッケージである。

三種類の計算方法MNDO/3およびAM1が含まれていて、分子軌道法計算に基づいて得られる化学的情報(振動解析, 熱力学的諸関数, 二中心エネルギー, 局在化軌道, 反応の経路追跡など)を得るための小プログラム群が付随している。最も汎用的でかつ使用頻度の高い分子計算プログラムであろう。

本プログラムに関しては最近内田氏による紹介が行われた⁽¹⁾, MNDOについては成書があるので、⁽²⁾ここでは重複を避けて分子研のプログラムライブラリに入れてあるバージョンの変更点について述べる。

ライブラリに入っているMOPACの下地はQCPE455のMOPACバージョン3.00である。⁽³⁾約半年かけてバグを可能な限り除去し、さらに分子研計算センターの特徴を生かせるように計算可能な規模を100原子分子以上に拡張した。デバッグの詳細については別の場所にまとめて報告した。⁽⁴⁾結果は新しいバージョン4.0⁽³⁾に取り入れている。

拡張版のテストはC₆₀H₆₀について、MNDOとAM1による最適化を行ってある。この場合原子軌道の総数は300である。ただしMINDO/3に関してはテストしていない。またC以外の重原子に関してもテストしていない。拡張の結果ロードモジュールは10MB以上の領域を必要とし、縮小は甚だ困難であるので、小分子を計算する目的で他のコンピュータに移植するのは止めておく方がよい。

マニュアルに関しては日本語版が近く販売される見込みである。

- ① 内田 希, CICSJ Bulletin (日本化学会情報化学部会会報) 1988, 6, [1], 10
- ② T. クラーク (大沢ほか訳)「計算化学ガイドブック」, 丸善, 昭和63年
- ③ 現在既にバージョン4.0がQCPEから入手可能である。
- ④ M. Togashi, J. M. Rudzinski, Z. Slanina, E. Osawa and T. Hirano, QCPE Bull. 1987, 7, 8

(2) P S I

P S Iは米国Georgia大学のH. F. Schaefer IIIグループにより開発されているプログラムの集合で、分子の構造、分光的性質、物性、化学反応性に関する非経験的量子力学計算を行う。分子研電子計算機センターではこのプログラムをP S I T E C H Inc. より購入し、プログラムライブラリとして登録、公開した。プログラムは、Curtis JanssenとDr. Yukio Yamaguchiにより移植された。

RHF, T C S C F (2配置S C F), 対励起型M C S C F (G V B相当), C I, C C S D (coupled-cluster single and double), C C S D T-1 (C C S Dにさらに3電子クラスターオペレータの効果を線形化して加えたもの)によるエネルギー計算に加えて、核座標に関する微分(derivative)を解析的にRHF, 対励起型M C S C Fでは3次まで, C I, C C S Dでは1次まで行うことができる。これらの微分を利用して、分子構造最適化, 分子振動解析, 非調和項, infrared強度などを計算することもできる。C IはC I S D部分はshape driven graphical unitary group approach (G U G A), 多電子励起についてはloop driven G U G Aによる高速なものである。

P S Iは積分, RHF, C Iなどの各計算ステップに対応したプログラム約100本から成り立っており、全体では25万行に達する。各プログラムは共通の入力データをアクセスし、コマンドプロシジャによってコントロールされる。個々のプログラムを個別に呼び出すこともできるし、いくつかのプログラムを組み合わせることで構造最適化などの一連の計算を実行させること

もできる。

現在のプログラムには以下のような制限事項がある。

原子数上限 : 50

シェル数上限 : 120

primitive GTO数上限 : 256

GTO : d軌道(6成分)まで

対称軌道を用い、D_{2h}対称まで扱うことができる。

使用法はFLIBコマンドで検索できるが、特に注意すべき点を簡単に記しておく。

詳細なマニュアルが'SYS2.#GUID(PSI00)'に格納されている。また、'SYS2.#GUID(PSI01)'には分子研センター固有の補足事項が載っている。入力データの例は、'SYS2.#DATA.PSI'に多数収められている。

ユーザはまず、自分のSAVEファイルに(分子名).INPUTという名称で順編成で入力データを作成する。分子名は例えばH₂CO分子のdouble-zeta を使ったのCI計算ならばH₂CODZCIとでもする。通常ファイル名の規則に従って命名する。

実行に際しては常にINPUTというプログラムを初めに一度コールして、FILE30と呼ぶファイルを作って分子の座標、基底関数の情報を格納する必要がある。分子軌道等もこのファイルに格納され後続ステップで参照されるので、このFILE30は非常に重要である。

INPUTプログラムは小さいプログラムなのでTSS下でも実行できる。実行はすべてコマンドプロシジャによって行うが、そのためのコマンドPSIがシステムに登録されている。

READYモードで

```
PSI INPUT H2CODZCI
```

と入力する。この後、自分の望みのプログラムをコールする。

```
PSI (プログラム名), (分子名), ………
```

分子名のあとに必要なならば他のパラメータを書く。プログラムに必要なデータセットの割当はコマンドプロシジャが行う。データセットのサイズは標準はSMALLになっているが、パラメータ指定によりサイズを変更できる。コマンドの中身を知りたい方、あるいはコマンドを自分なりに変更したい方は'SYS2.#SUPL.PSI.CLIST'を参照のこと。

INPUT以外のプログラムは通常、メモリー、CPU時間が多く必要になるのでバッチで実行する必要があるが、それにはカタログプロシジャTSSCOMNDを用いてTSSバッチを走らせる。JCLの例を以下に示す。

```
//AB1CD2XX JOB PASSWORD, CLASS=A
//*MAIN SYSTEM=M680, REGION=(2000K, 20M)
//PSI EXEC TSSCOMND
```



```
//SYSIN DD *  
PSI CI1ST H2CODZCI .....  
//
```

オブジェクトモジュール、ロードモジュールはNOHAPオプションで作ってあるので、S-820でも、MAIN文で、SYSTEM=S820を指定するだけでそのまま動く。ただし、ベクトル化されていないので課金はM-680Hに比べ割高になる。パラメータ指定でESを割り当てることもできるようになっている。

実行結果は、@. (分子名).OUTPUTというデータセットに蓄積される。ジョブが異常終了した場合には、@. (分子名).FILE6というファイルにエラーが生じたプログラムの実行結果が残っている場合があるので、それを見てエラーの原因を調べられる。

分子研センターとPSITECH Inc.との契約により、ソースプログラムの複写は禁止されている。また、オブジェクトモジュール、ロードモジュールを複写して分子研センター以外の計算機で使用することも禁止されている。このプログラムを用いて得られた結果についてPSITECH Inc., 分子研センターはいっさい責任を持たない。PSIを使用して得られた結果を発表する場合は、次の引用を必ず含めること。

PSI 1.0, 1989, PSITECH Inc., Watkinsville, Georgia, USA

5.2 データベース開発状況

分子研データベースとして以下の7件が登録されており、ユーザに公開している。

- (1) QCLDB (量子化学文献データベース)
- (2) CMQCA (Carnegie-Mellon量子化学アーカイブ)
- (3) CHEMICS (有機化合物自動構造解析システム)
- (4) IR2 (赤外線スペクトルデータベース)
- (5) STERIC (立体化学計算プログラム基礎団データベース)
- (6) QCBDB (量子化学基底関数データベース)
- (7) MPBDB (モデルポテンシャル関数データ)

5.3 プログラム相談

プログラム相談は、一般プログラム相談と応用プログラム相談の二本立てで行っている。

(1) 一般プログラム相談

時間帯は昼休みを除いた計算機オープンサービス時間内にプログラム相談コーナーで行っている。相談内容はFORTRAN言語 (コンパイラ), オープンバッチの利用方法, データセット, TSSコマンドおよび操作, ASPENなどのエディタ, MTM, シスアウト編集, カタ

ログドプロシジャ，運用についての問い合わせなどである。

一般利用を行う上での相談を受けている。

(2) 応用プログラム相談

相談員は所内外の研究者（主に理論系および電算機センターの受託大学院学生）に委嘱している。相談内容は、ライブラリ・プログラム，その中でも特にGAUSSIAN82, JAMOL4といった大型ab initio 計算プログラムの使い方等である。所外から共同研究者・施設利用者が多く利用している。一般プログラム相談に比べ，個々のプログラムの内容にまで立ち入った，より高度な問題を扱うことを主眼としており，研究者の便宜に供している。この意味で，応用プログラム相談員は所外からの共同利用者と施設利用者にとって，貴重な人的資源であるということができ，またセンターの円滑的・効率的運営においても欠くことのできない存在である。

5.4 研究会・学会報告

5.4.1 NTT電気通信技術委員会画像部会

昭和63年4月20日 分子研

○ 分子科学研究所における画像応用

○ 発表者 柏木 浩

(内容) 分子グラフィックスのプログラムKORINの開発とその応用

5.4.2 企業研究会「計算物理・計算化学基礎講座」

昭和63年9月21日 弘済会館（東京）

○ 分子軌道法の実際

○ 発表者 柏木 浩

(内容) 非経験的分子軌道計算について，現在の世界の水準を実例を挙げて紹介した。

5.4.3 情報化学討論会

昭和63年12月5～7日 京大薬学部

○ スーパーコンピュータによる分子グラフィックス

○ 発表者 伊奈 諭，長嶋 雲兵，柏木 浩（分子研）

玉谷 祐，岡本 政久（中部システムズ）

(内容) KORINのスーパーコンピュータ向けアルゴリズムと性能及び画像を紹介した。

5.4.4 東海地区高校化学教育セミナー

昭和63年12月10日 愛知県スポーツ会館

- 分子の世界をコンピュータで見れば
- 発表者 柏木 浩

(内容) コンピュータグラフィックスの画像を用いて最近の分子の研究を紹介した。

5.4.5 第9回スーパーコンピュータ・ワークショップ公開講演会

平成元年2月23～24日 分子研

- これまでとこれから — 計算化学と分子研センターの10年 —
- 発表者 柏木 浩

(内容) 分子研センターの創設以来の10年をふりかえってみた。

5.4.6 NICOGRAPH '88

昭和63年11月11日(金) 池袋サンシャインシティ文化会館

- 分子軌道計算結果のmodelingシステムKORIN
- 発表者 伊奈 諭, 柏木 浩, 長嶋 雲兵(分子研)
玉谷 祐, 岡本 政久(中部システムズ)

(内容) 最新のスーパーコンピュータ, 高分解能なグラフィックシステム, 最新の光線追跡アルゴリズムなどを用いて構築した分子グラフィックシステムKORINの説明とその製作画像の紹介を行った。

5.4.7 情報処理学会

平成元年3月16日(木) 中央大学(東京)

- 分子グラフィックスへのスーパーコンピュータの適用
- 発表者 伊奈 諭, 柏木 浩, 長嶋 雲兵(分子研)
玉谷 祐, 岡本 政久(中部システムズ)

(内容) 分子軌道計算によって得られる分子軌道関数, 電子密度分布などを解析把握するための3次元カラーグラフィックシステムKORINの説明と, そこで使われている画像生成のためのアルゴリズム, スーパーコンピュータの有効性などを話した。

5.4.8 分子研コロキウム

平成元年3月1日 分子研

- ポルフィリンとコンピュータの10年
- 発表者 柏木 浩
- (内容) 分子研における10年間の研究の概略をまとめた。

5.5 電子計算機センター運営委員会

(1) 第16回電子計算機センター運営委員会議事報告

第16回電子計算機センター運営委員会が昭和63年9月9日(金)に開催された。以下にその要約を掲載する。

1 所長挨拶

センターからの報告、議事に先立って井口所長より挨拶があり次のことについて説明、報告がなされた。

- (1) 大学院大学の設置予定に関して状況が説明された。七つの共同利用機関が参加して10月1日より開校、64年4月から博士課程後期の大学院学生を受け入れる。分子科学研究所は高エネルギー研、統数研とともに数物研究科に属し機能分子科学と構造分子科学の二専攻で、定員はそれぞれ各6名である。

入学試験は、2月に行われる。また従来からの受託大学院生の制度も継続する。

- (2) 教官、技官の人事交流の状況が報告された。人事交流はたいへん活発であり流動部門を含めて75名の転出が行われた。
- (3) 実験新棟の完成予定が述べられた。64年2月中に完成し4月1日より使用可能となる予定である。ここにはまず錯体部門が移動する。この新棟により客員部門のためのスペースにかなり余裕ができる。
- (4) 極低温センターでかなり大きな改修を行った。

2 センターからの報告

- (1) 63年度計算機稼動および利用状況、電力使用状況
- (2) 63年度予算の使途
- (3) 63年度前期計算機時間配当状況、追加状況

CPU時間の月別、利用区分別割り当て状況が一覧表によって示された。9月1日現在で197プロジェクト、590名、申請時間総数計9,444時間に対して許可7,868時間となっている。

続いて前回(15回)委員会で計算機の使い方がはっきり申請書に書いてないプロジェクトがいくつかあるとして問題となった件については申請書の記入要領上に注意として明記した旨の説明があった。また書信を発することになっていた四プロジェクトに対して送付された手紙の文面が資料として示され説明された。

次に追加申請状況が表として示された。9月1日現在で12件のプロジェクトが追加申請を行っており、追加申請時間合計は252時間で内196時間が許可された。

この中で、前回委員会後郵便審査を行った追加申請7件に対して評価の見直しを行った結果評点通りで承認された。

(4) 63年度前期施設利用旅費割り当て状況

施設利用旅費前期の割当一覧が示された。前期は17プロジェクトから旅費希望が出され7プロジェクトを採択し、1プロジェクトが辞退したことが報告された。割当額は194,050円であった。

(5) ライブラリプログラム開発状況

分子科学プログラムパッケージ、QCPEプログラム、NUMPACライブラリの登録、サービス状況が報告された。

(6) データベース開発・サービス状況

7件のデータベース(QCLDB, CMQCA, CHEMICS, IR2, STERIC, QCBDB, MPBDB)について現状の報告があった。特にMPBDBは今回新規に加わったものである。また、今年度開発計画についてはQCLDB, FCDBの2件に絞って開発を援助しているとの報告があった。

これに続いてQCLDBの著作権法での扱われ方に関してその経過、及び結果がセンター長から説明があった。

(7) 63年度ライブラリープログラム開発計画およびセンター業務補佐謝金割り当て状況

分子研ライブラリープログラム開発計画(計11件)と個々の旅費、謝金の割り当て状況が資料に基づいて報告された。

次に、応用プログラム相談員およびセンター業務補佐に対する謝金の支払い状況が資料に基づいて示された。応用プログラム相談員としては今回受託大学院生を確保できた。

3 63年度後期および64年度計算機運用方針案

(1) 利用点数の改訂

S-820/80の4, 5月の利用率がM-680Hに比べてかなり悪かったため利用課金点数のS-820/80の係数 b, c を再度変更した旨の報告があった。その結果6月からは $b = c = 0.175$ (改定前 $b = c = 0.20$)となり従来より割安となった。 $b = c = 0.20$ でS-820/80の利用率が低くなった理由の一つはGAUSSプログラムの積分とgradientのベクトル化ができていないためであると考えられる。これを回避する一策はプログラムKOTOの組み込みであるが日立FORTRANがこれをコンパイルできないなどの障害があったため立ち後れていたものである。しかし10月からサブで公開する22-00バージョンのFORTRANでは実行可能となるのでS-820/80利用が今後は増大する方向へ行くだろうとの

見通しが述べられた。そのため点数はこのままで据え置くことで了承された。

(2) C V C F電源の入れ替え

前回議事の方針に従ってC V C F電源の置き換え対策が示された。この案では瞬断に強いC P U系は商用電源から直接供給し、それに弱い磁気ディスク系、通信系のみ瞬低対策装置経由で供給する形になった。この形態で発生する可能性のある障害の種類、頻度の見通しが説明された。

(3) 新F O R T R A N (22-00) の公開

バージョン22-00の新F O R T R A Nに関して公開までの経緯、性能、テスト結果、使用方法などについて説明があった。分子研センターではバージョン21-00に替わり10月1日からサブコンパイラとして公開する予定であることが示された。

4 63年度後期計算機時間配分案

63年度後期C P U時間配分案が資料に基づいて説明された。許可目標時間は合計1,106時間(所外729時間, 所内377時間)であった。

5 63年度後期利用申請審査

各委員によってあらかじめ評価、採点された施設利用(B)後期1件、協力研究後期14件の審査が資料に基づいて行われた。審査は主に重複申請の可能性のあるもの、各委員間の評点の巾の大きなもの、評価の低いものに重点をおいて議論された。この結果二プロジェクトには以下の処置を行うことになった。

(協力研究後期)

A C氏のプロジェクトと重複しており1/4くらいの重複度があるとみなされる。従って8時間の点数減を行い18時間の許可とすることを手紙で通知することになった。

但し本来はC氏のプロジェクトから点数を引くべきであるが、すでに使用を始めているため今回の処置とした。

B 申請書の書き方が悪いので注意を手紙で通知することとなった。

但し点数は審査通りで許可することになった。

討論の結果、そのほかの各課題は採点通りの許可が認められた。

(2) 第17回電子計算機センター運営委員会議事報告

第17回電子計算機センター運営委員会が平成元年3月10日(金)に開催された。以下にその要約を掲載する。

1 所長挨拶

2 前回議事録朗読

3 センターからの報告

(1) センターの柏木助教授が九州工業大学情報工学部生物化学システム工学科へ4月1日付

けで栄転される旨が報告された。センター長から柏木助教授に11年間にわたるセンターへの貢献にたいして感謝の意を述べられた。

(2) 63年度計算機稼働および利用状況、電力使用状況

M-680H, S-820/80システムの電力使用状況、稼働状況、ジョブ件数、CPU時間が資料に基づいて報告された。平均稼働時間は昨年より数%少ない目であるが、これはCPU時間の配当を絞り気味に行ってきたためであるとの説明があった。電力使用量は約430KW/Hである。従来と比べ幾分増えているのはメモリや拡張記憶の増設により若干の電力上昇分があるためと考えられるとの報告があった。

またCPU時間の比較からM-680HとS-820との負荷バランスについて、昨年利用点数改訂後まだS-820の利用率が低めであり、あらたな点数調整を検討しなければならないかもしれないとの報告があった。ただし平成元年2月度にS-820の利用率がM-680Hを上回るといった初めての現象がでてきているためこれが一時的なものかももう少し時間をかけて調べたいとの報告があった。

次に、分野区別のCPU使用状況、電話回線によるTSSの利用状況が示された。

(3) 63年度予算と用途

(4) 63年度計算機時間配当状況、追加状況

CPU時間の月別、利用区分別割り当て状況が一覧表によって示された。また10月以降の各プロジェクトの申請と許可状況が一覧表で示された。

続いて前回(第16回)委員会で警告書を発することになっていた二プロジェクトに対して送付された手紙の文面が資料として示され、説明があった。また前回委員会後の申請で研究分野が分子科学かどうかの問題がありセンター単独の判断で警告の手紙を送付したプロジェクトに対する文面が示され説明があり、この処置が了承された。

次にプロジェクト別の追加申請の状況が表として示された。この中で、前回委員会後の追加申請にたいする郵便審査の結果16件に対して評価の見直しを行った結果、評点通りで承認された。このなかの一プロジェクトに対しては、評点が非常に低かったので委員のコメントを記した手紙を送付した旨が説明され、了承された。

(5) 63年度施設利用旅費割り当て状況

前期と後期の割当一覧が示され説明があった。前期は6プロジェクトに対して194,250円が割り当てられた。後期は15プロジェクトから旅費希望が出され6プロジェクトを採択し割当額は194,690円であった。旅費の割当方針は従来通りで遠方、小規模な研究室、最近割当をもらっていない研究室を中心に行うことが再確認された。

(6) ライブラリプログラム開発状況

分子科学プログラムパッケージ、QCPEプログラム、NUMPACライブラリの登録、

サービス状況が資料によって報告された。

(7) データベース開発・サービス状況

登録、サービスを行っている7件のデータベース（QCLDB, CMQCA, CHEMICS, IR2, STERIC, QCBDB, MPBDB）について現状の報告があった。また、今年度開発計画についてはQCLDB, FCDBの2件に開発を援助しているとの報告があった。

これに続いてQCLDBの民間、海外への頒布の方法について前回委員会後の経過がセンター長から説明があった。

(8) 63年度ライブラリプログラム開発計画およびセンター業務補佐謝金割り当て状況

分子研ライブラリプログラム開発計画（計14件）と個々の旅費、謝金の割り当て状況が資料に基づいて報告された。

次に、応用プログラム相談員およびセンター業務補佐に対する謝金の支払い状況が資料に基づいて示された。

4 平成元年度計算機運用方針案

稼働状況のところでふれられたM-680HとS-820との負荷バランスに基づく課金点数の再調整についてはセンターに一任することとし、次回に報告をうけることとなった。

(1) 次期システムについての検討・準備を開始することが了承され、次回委員会で具体的方針をきめるまでの間、センターが適当な処置をとることとなった。

(2) 年度末から平成元年度にかけてのシステム変更作業予定とそのためのシステム停止予定が説明され了承された。

(3) 実験研究棟の完成にともないUVSOR棟のRJEステーションを実験研究棟に移設する件が了承された。

(4) CVC F電源の入れ替え

前回議事の方針に従ってCVC F電源の置き換え対策が示された。この方法は瞬断に強いCPU系は商用電源から直接供給し、それに弱い磁気ディスク系のみ瞬低対策装置経由で供給する形になる。この形態で発生する可能性のある障害の種類、頻度の見通しが説明され、入れ替えが了承された。

(5) 磁気ディスクを6月に新型に置き換えることによりディスクの総容量は現在の85GBから140GBに増強される。この方針が了承された。

(6) 学術情報ネットワークの加入予定

学術情報ネットワークの加入が遅れているため、その理由の説明があった。それによると接続テストは5月頃、サービスの開始は6月頃になる予定である。

(7) 今年度新たにライブラリとして購入し登録準備中の非経験的分子軌道計算プログラムP

SIの概要が説明された。

(8) FORTRAN (22-00) のセンター標準化

4月より従来のセンター標準のFORTRAN (02-04)にかわりバージョン22-00の新FORTRANをセンター標準にする。このことに関して新FORTRANの性能やテスト結果、使用方法などについて説明があり了承された。

5 平成元年度計算機時間配分案

平成元年度のCPU時間配分案が資料に基づいて説明・検討された。その結果所外平均許可率は80%とすることとした。通年許可目標時間は合計12,514時間(所外 4,382時間, 所内 8,132時間)であった。許可所内外比は35:65となる。

6 平成元年度利用申請審査

各委員によってあらかじめ評価、採点された協力研究前期11件、施設利用(B)85件の審査が資料に基づいて行われた。審査は主に重複申請の可能性のあるもの、各委員間の評点の中の大きなもの、評価の低いものに重点を置いて議論された。この結果次のプロジェクトには以下の処置を行うことになった。

(協力研究後期)

- A 評価点数が非常に低かったため委員からのコメントを手紙で通知することとした。但し点数は審査通りで許可することとした。

(施設利用B)

- B P氏のプロジェクトと重複が認められるので評価点数から3分の1を減らすことになった。但しP氏のプロジェクトはそのままとする。
- C 評価点数が非常に低く最低点であった。このため委員のコメントとともに最低点であったことを手紙で通知することになった。
- D 実績のない初の申請であるのに申請時間が大きい上に、その根拠、方法の具体性等の記述に欠けるため許可は保留とし、申請を再提出させてから再評価を行うこととした。
- E D氏と同じ状況にあるため、同じ処置をとることとした。
- F 研究分野が分子科学かどうか問題があるため、次回申請からは参考文献とともに分子科学との関連の説明を添付するように要請する手紙を書くこととした。

討論の結果、そのほかの各課題は採点通りの許可を認めることとした。

5.6 大型計算成果発表会

当センターでは大学計算センターでは実行できないような分子科学の大型計算を一つの特徴としている。大型計算課題の研究成果を公表し、今後のプログラム開発、センター運営、利用申請審査の参考とするため、下記のように「分子研電子計算機センター大型計算成果発表会」を開催した。

電子計算機センター第8回大型計算成果発表会

「使用プログラムの特徴と研究成果の報告」

日 時 : 昭和63年9月9日(金) 9:30~12:35

場 所 : 分子研 研究棟 101号室

- 9:30 挨拶 センター長
- 9:35 郷 信広, 入佐正幸, 伊倉貞吉, 麻野英三, 高橋勝利(京大 理)
蛋白質立体構造の変化と運動
—NMRとDISTANCE GEOMETRYによる蛋白質の溶液構造の決定—
- 10:05 西本吉助, 北浦和夫, 甲斐栄子, 田中英次, 荒川 透, 桜井克典, 銭 福椿,
本多一彦, 大田芳久, 福富信也, 村形哲伸(阪市大 理)
分子の電子状態に関する理論的研究
- 10:35 永瀬 茂, 工藤貴子, 鞍掛稔也, 郭 福林, 中野真理(横国大 教育)
新規な興味ある分子及び反応系設計の理論的研究
- 11:05 阿知波一雄, 寺尾良保, 青野雅博, 常盤広明, 今井信行, 高橋 寿(静県大 薬)
有機合成反応の分子軌道論的研究
- 11:35 柳瀬 章, 宮原俊治(阪府大 総合科学)
固体及び固体表面の電子状態
- 12:05 加藤重樹(東大 教養), 天辰禎晃, 黒田 啓(東大 理)
気相および液相における化学反応の理論的研究

6. 昭和63年度稼働状況および利用者数

6.1 利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数

利用分野	利用区分	プロジェクト数	ユーザー数	時間			点数	
				申請	許可	実績	許可	実績
分子科学	施設利用	150	471	6,425	5,196	4,566	2,078,400	1,643,803
	協力研究	33	33	1,438	1,115	1,017	446,000	366,035
	所 内	43	136	4,500	4,058	4,095	1,623,200	1,474,117
生理学	施設利用	2	4	12	11	8	4,400	2,761
基礎生物学	施設利用	2	7	54	29	31	11,600	11,193
	所 内	1	1	10	9	0	3,600	13
合 計		231	652	12,439	10,418	9,717	4,167,200	3,497,922

(注) ここでのCPU時間実績は点数管理の方から(点数/360)を行って逆算したものであるため、LP用紙使用量、ディスク使用量等の要素による点数も反映されている。したがって純粋のCPU使用時間となっていないことに注意。

6.2 システム稼働状況

年 月	稼 働 時 間		保 守 時 間
	グ ロー バ ル	ロ ー カ ル	
昭和63/ 4	533 : 00	532 : 00	7 : 00
5	480 : 00	470 : 00	9 : 00
6	542 : 30	528 : 30	11 : 30
7	560 : 00	559 : 00	8 : 00
8	560 : 30	559 : 30	10 : 30
9	507 : 00	504 : 00	16 : 00
10	396 : 00	396 : 00	17 : 00
11	437 : 00	434 : 00	11 : 00
12	438 : 00	427 : 00	22 : 00
平成元/ 1	457 : 00	454 : 00	10 : 00
2	502 : 00	499 : 00	21 : 00
3	524 : 00	523 : 00	11 : 00
計	5937 : 00	5886 : 00	154 : 00

6.3 CPU時間

(M-680H CPU時間)

(#)	(A)	(B)	(C)	(D)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(TOTAL)
04	8:11:17	26:33:09	95:55:51	158:44:13	0:00:00	3:22:50	12:00:30	2:36:32	3:11:43	1:14:40	311:50:45
05	7:00:19	29:10:27	95:53:33	159:44:14	0:00:00	0:00:00	13:51:55	5:11:15	4:09:21	8:15:18	323:16:22
06	7:43:38	35:26:38	138:36:30	165:39:05	0:00:00	0:00:00	11:15:49	0:05:51	1:42:13	2:49:46	363:19:30
07	8:53:55	45:25:16	134:47:55	200:31:17	0:00:00	0:00:00	17:16:44	1:35:09	7:03:45	5:44:09	421:18:10
08	10:53:52	42:13:41	153:07:39	153:14:15	0:00:17	0:00:00	17:38:52	0:22:17	6:19:16	3:09:39	386:59:48
09	9:21:50	41:30:23	180:24:24	161:57:12	0:00:00	0:00:00	18:05:44	1:14:42	6:04:25	2:39:25	421:18:05
10	5:09:13	20:48:44	82:04:37	96:45:35	0:00:00	0:00:00	12:43:02	2:52:21	2:54:20	6:31:45	229:49:37
11	12:35:03	30:50:55	97:32:42	116:15:58	0:00:00	0:00:00	16:17:10	1:43:46	3:20:52	4:04:39	282:41:05
12	8:10:45	37:06:19	133:04:28	124:14:18	0:15:46	0:00:10	13:42:13	0:49:39	1:55:10	2:57:43	322:16:31
01	7:55:43	43:48:41	121:47:52	176:16:51	0:00:00	0:00:00	15:07:04	0:21:19	0:26:33	2:06:35	365:50:38
02	10:56:56	44:18:23	136:58:07	159:53:21	0:00:00	0:00:00	20:15:21	0:50:58	2:39:28	2:40:48	380:33:22
03	9:39:22	46:52:47	149:13:41	186:52:10	0:00:00	0:00:06	16:08:37	8:29:39	2:41:31	4:19:35	426:17:28
(TOTAL)					0:16:03	3:23:06	184:23:01	26:13:28	42:28:37	46:34:02	4233:31:21

(S-820/80 CPU時間)

(#)	(A)	(B)	(C)	(D)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(TOTAL)
04	1:24:28	11:27:41	60:26:42	161:55:56	0:00:39	0:00:00	0:00:01	0:00:00	27:47:49	0:00:00	263:03:16
05	2:11:10	13:59:28	69:53:06	81:53:05	0:06:33	0:00:00	0:00:00	0:00:00	15:43:32	0:00:01	183:46:55
06	2:11:05	14:38:37	42:57:43	81:03:43	1:07:32	3:48:51	0:00:27	0:00:06	6:38:26	0:00:16	152:26:46
07	1:31:44	38:17:38	47:52:03	170:50:50	2:11:25	0:00:00	0:00:00	0:00:00	38:33:11	0:00:00	299:16:51
08	5:03:13	27:12:43	95:15:18	162:58:19	1:43:04	0:08:06	0:27:15	0:00:47	8:50:56	0:00:11	301:59:52
09	4:11:21	19:05:45	75:52:13	109:30:20	0:02:26	0:00:00	1:38:45	0:00:00	12:18:28	0:00:00	222:39:18
10	2:05:26	18:13:10	69:19:44	78:31:55	0:05:50	0:00:00	0:37:07	0:28:48	10:26:24	0:14:23	180:00:44
11	3:37:04	41:03:16	98:55:37	112:53:42	1:35:44	0:00:00	0:46:31	0:51:50	10:34:03	0:16:10	270:34:17
12	4:13:21	29:27:17	84:27:18	118:10:18	1:03:02	0:00:23	0:09:27	0:14:14	14:02:30	0:42:15	252:30:05
01	3:57:46	23:59:47	91:37:45	210:15:20	0:00:18	0:00:00	1:14:29	0:00:00	10:13:22	0:00:00	341:18:47
02	4:13:50	33:32:31	149:43:28	225:14:19	0:00:33	2:47:47	1:23:33	0:07:56	12:50:52	0:00:00	429:54:49
03	3:44:11	31:40:42	127:46:20	214:47:50	0:02:08	0:00:04	1:17:16	0:00:01	31:21:04	0:00:00	410:39:36
(TOTAL)					7:59:14	6:45:11	7:34:51	1:43:42	199:20:37	1:13:16	3307:51:16

(S-820/80 VPU時間)

(#)	(A)	(B)	(C)	(D)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(TOTAL)				
04	0:14:03	1:25:36	15:47:45	43:39:03	0:00:01	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1:59:40	0:00:00	63:06:08				
05	0:11:19	3:27:08	22:44:34	28:38:54	0:00:03	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1:59:40	0:00:00	57:01:38				
06	0:16:33	2:30:07	8:25:50	19:59:05	0:14:05	1:15:51	0:00:00	0:00:00	0:07:53	0:00:00	32:51:24				
07	0:11:41	10:10:55	10:52:03	36:57:52	0:14:11	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:56:52	0:00:00	59:23:34				
08	0:34:44	6:55:58	27:27:05	45:42:43	0:20:22	0:00:01	0:02:30	0:00:00	0:41:33	0:00:00	81:44:56				
09	0:37:33	5:59:02	19:56:23	43:28:51	0:00:18	0:00:00	0:04:43	0:00:00	0:32:03	0:00:00	70:38:53				
10	0:12:39	3:42:00	25:06:25	30:49:07	0:00:24	0:00:00	0:09:41	0:28:44	1:03:12	0:12:52	61:45:04				
11	0:35:40	8:42:50	18:50:27	46:32:36	0:10:32	0:00:00	0:05:00	0:11:27	0:34:02	0:00:55	75:43:29				
12	0:49:19	7:30:44	24:31:43	49:29:14	0:15:34	0:00:00	0:02:26	0:09:24	1:31:13	0:06:27	84:26:04				
01	0:41:43	5:16:55	39:19:46	130:14:20	0:00:00	0:00:00	0:00:11	0:00:00	1:53:27	0:00:00	177:26:22				
02	0:45:03	12:35:12	65:57:26	137:26:47	0:00:03	0:00:11	0:33:29	0:06:56	0:08:30	0:00:00	217:33:35				
03	0:39:55	8:36:13	47:43:26	112:57:35	0:00:09	0:00:00	0:23:17	0:00:00	0:02:44	0:00:00	170:23:19				
(TOTAL)					5:50:12	76:52:40	326:42:51	725:56:07	1:17:42	1:16:03	1:21:17	0:56:31	11:30:49	0:20:14	1152:04:26

6.4 ジョブ処理件数

(M-680H ジョブ件数)

(#)	(A)	(B)	(C)	(D)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(TOTAL)				
04	3,210	1,236	679	346	1	0	8,555	338	402	461	15,229				
05	3,972	1,554	1,165	576	4	0	9,633	631	414	436	18,385				
06	3,960	1,344	1,193	298	3	0	9,063	566	316	163	16,926				
07	3,806	1,880	1,087	381	0	0	11,428	803	637	425	20,447				
08	4,485	1,982	1,225	410	3	1	12,149	435	847	410	21,947				
09	4,644	1,966	1,280	512	0	0	12,030	467	620	314	21,833				
10	2,463	1,226	866	266	0	0	8,091	420	572	577	14,481				
11	4,264	1,641	956	324	0	0	10,308	435	593	295	18,816				
12	3,777	1,805	1,221	356	6	1	9,961	182	431	230	17,950				
01	4,077	1,919	1,237	359	0	0	10,074	191	211	185	18,253				
02	5,646	2,052	1,111	329	0	1	11,669	281	487	250	21,826				
03	4,016	1,787	955	365	0	3	11,588	366	468	332	19,880				
(TOTAL)					48,340	20,392	12,975	4,502	17	7	124,549	5,115	5,998	4,078	225,973

(S-820/80 ジョブ件数)

(年)	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(TOTAL)
04	551	861	549	272	3	0	5	0	780	1	3,022
05	381	705	855	385	13	0	0	1	685	2	3,527
06	615	725	551	177	97	1	42	9	620	10	2,847
07	614	1,405	578	326	68	0	0	0	1,362	0	4,353
08	1,692	1,249	859	473	56	4	39	13	870	9	5,284
09	1,482	1,133	812	325	5	0	115	0	1,285	0	5,157
10	1,223	1,050	789	245	14	0	68	3	1,018	16	4,426
11	1,288	1,848	1,010	430	60	0	121	3	473	2	5,235
12	1,562	1,334	738	423	78	2	84	36	479	25	4,761
01	1,322	1,356	671	363	4	0	169	0	237	0	4,122
02	1,423	1,340	1,019	434	1	4	132	3	189	0	4,545
03	1,417	1,670	863	372	5	3	162	1	358	1	4,852
(TOTAL)	14,070	14,696	9,294	4,225	404	14	937	69	8,356	66	52,131

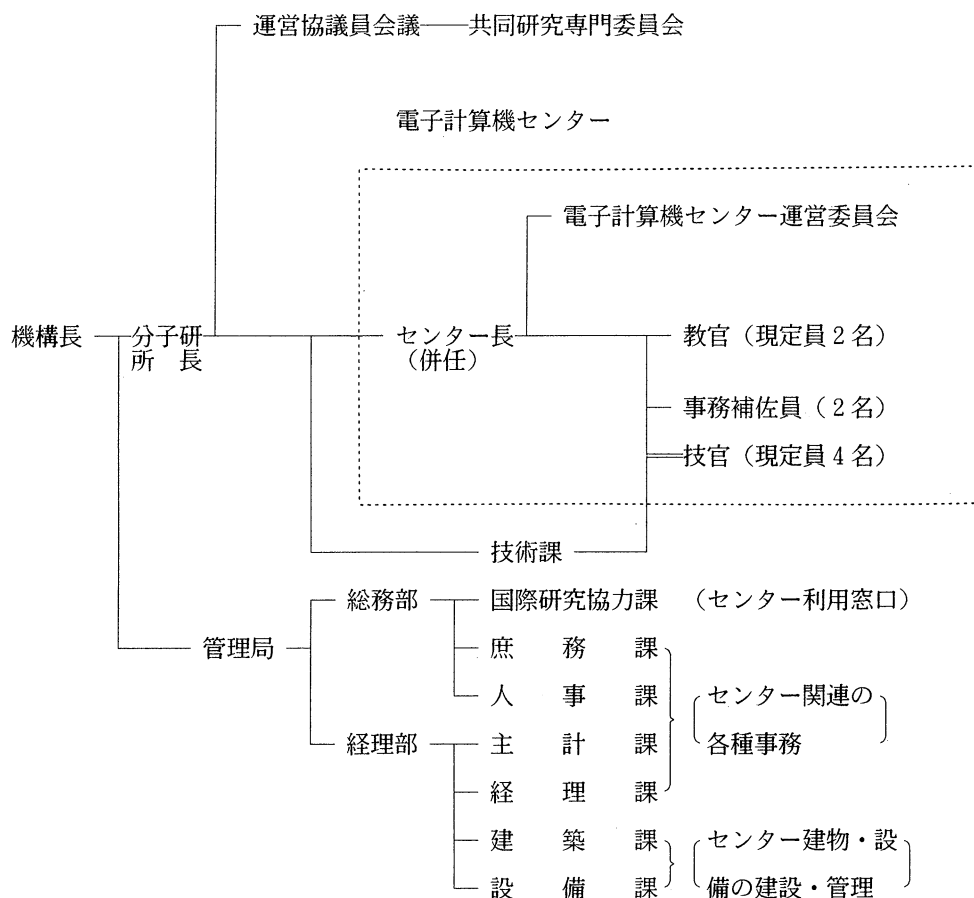
7. 資 料

7.1 センター関連組織

センター関連組織は下図に示す通りである。

課題・協力研究の運営は運営協議員会議及びその共同研究専門委員会で行われている。

電子計算機センター運営委員会の規則と委員については資料7.2, 7.3, 7.4を参照されたい。



7.2 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則

〔昭和56年4月14日〕
分子研規則第4号

最終改正 昭和62年3月30日

岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則

(目 的)

第1条 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター（以下「センター」という）は、センターの大型電子計算機システムを分子科学の大型計算等のために分子科学研究所内外の研究者の利用に供するとともに、これに必要な研究開発を行い、かつ、岡崎国立共同研究機構に置かれる研究所の研究に関する計算を処理することを目的とする。

(職 員)

第2条 センターに、次の職員を置く。

- 一 センター長
- 二 助教授
- 三 助 手
- 四 その他必要な職員

(センター長)

第3条 センター長は、分子科学研究所の教授又は助教授をもって充てる。

2 センター長は、センターの業務を掌理する。

(運営委員会)

第4条 分子科学研究所に、センターの管理運営に関する重要事項を審議し、分子科学研究所長の諮問に応じるため、分子科学研究所電子計算機センター運営委員会（以下「運営委員会」という）を置く。

2 運営委員会の組織及び運営に関し必要な事項は、分子科学研究所長が定める。

この規則は、昭和56年4月14日から施行する。

(昭和62年分子研規則第1号)

この規則は、昭和62年4月1日から施行する。

7.3 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター運営委員会規則

〔昭和56年4月14日〕
分子研規則第9号

最終改正 昭和62年3月30日

岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター運営委員会規則

(目 的)

第1条 この規則は、岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則（昭和56年分子研規則第4号）第4条第2項の規定に基づき、分子科学研究所電子計算機センター（以下「センター」という）の運営委員会の組織及び運営に関し必要な事項を定めることを目的とする。

(組 織)

第2条 運営委員会は、次の各号に掲げる委員をもって組織する。

- 一 センター長
- 二 センターの助教授
- 三 分子科学研究所の教授又は助教授2名
- 四 基礎生物学研究所及び生理学研究所の教授又は助教授各1名
- 五 岡崎国立共同研究機構の職員以外の分子科学に関する学識経験者4名

2 前項第3号から第5号に掲げる委員は、分子科学研究所長が委嘱する。

(任 期)

第3条 前項第3号から第5号に掲げる委員の任期は、2年とし、再任を妨げない。

ただし、補欠の委員の任期は、前任者の残任期間とする。

(委 員 長)

第4条 運営委員会に委員長を置き、センター長をもって充てる。

2 委員長は、運営委員会を招集し、その議長となる。

3 委員長に事故あるときは、あらかじめ委員長が指名する委員がその職務を代行する。

(議 事)

第5条 運営委員会は、委員の3分の2以上の出席がなければ、議事を開き、議決することができない。

(委員以外の者の出席)

第6条 運営委員会は、必要に応じて委員以外の者に出席を求め、意見を聴取することができる。

(庶 務)

第7条 運営委員会の庶務は、総務部国際研究協力課において処理する。

附則

- 1 この規則は、昭和56年4月14日から施行する。
- 2 昭和60年6月1日任命に係る委員の任期は、第3条の規定にかかわらず、昭和62年3月31日までとする。

附則 (昭和60年分子研規則第3号)

この規則は、昭和60年4月1日から施行する。

附則 (昭和62年分子研規則第2号)

この規則は、昭和62年4月1日から施行する。

7.4 電子計算機センター運営委員会委員

(昭和62～63年度)

諸熊奎治	分子研理論第一部門教授, センター長	センター委員
柏木浩	分子研電子計算機センター助教授	〃
中村宏樹	分子研理論第二部門教授	分子研所内委員
西信之	分子研電子状態動力学部門助教授	〃
今村詮	広大理教授	分子研所外委員
中西浩一郎	京大工教授	〃
岩田末廣	慶大理工教授	〃
塚田捷	東大理助教授	〃
亘弘	生理研教授	生理研委員
中研一	基生研教授	基生研委員

(平成元年度～2年度)

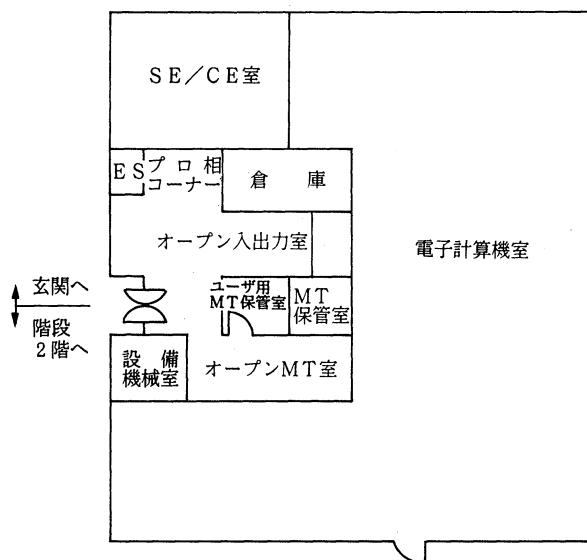
諸熊奎治	分子研理論第一部門教授, センター長	センター委員
北浦和夫	分子研電子計算機センター助教授	〃
中村宏樹	分子研理論第二部門教授	分子研所内委員
宇田川康夫	分子研分子動力学部門助教授	〃
今村詮	広大理教授	分子研所外委員
中西浩一郎	京大工教授	〃
足立裕彦	兵庫教育大教授	〃
加藤重樹	東大教養助教授	〃
大森治紀	生理研教授	生理研委員
村田紀夫	基生研教授	基生研委員

7.5 電子計算機センター職員（平成元年7月現在）

諸熊 奎治	センター長（併任）
柏木 浩	助教授（平成元年4月九州工大教授に転出）
北浦 和夫	“（平成元年7月大阪市大理助手より着任）
長嶋 雲兵	助手
伊奈 諭	技官（係長）
西本 史雄	技官
山本 茂義	技官
手島 史綱	技官
加藤 景子	事務補佐員
安達 奈美	事務補佐員

7.6 建物図

1階

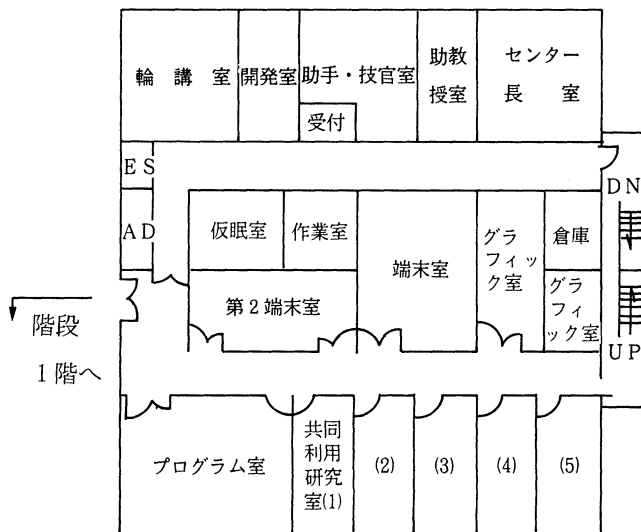


- (1) プログラム相談コーナー
プログラムとシステムに関する相談指導を行う。
- (2) オープン入出力室
カードの入出力，レーザプリンタ出力，XYプロッタ出力，ジョブ状態表示のためのオープン利用室。
- (3) オープンMT室
オープンMTシステムの利用を行う。

(4) ユーザ用MT保管室

ユーザ用MTを置くが、センターは保管の責任を負わない。

2階



(1) プログラム室

ユーザの卓上作業のための室、ジョブ状態表示ディスプレイ、ロッカーなどが置かれる。

(2) 共同利用研究室

遠隔地ユーザの居室。センターの許可を受けて利用する。

(3) 端末室、第2 端末室

ディスプレイ型の各種T S S端末が置かれ、自由に利用できる。

(4) グラフィック室

カラーグラフィックディスプレイやモノクロの蓄積型グラフィックディスプレイが置かれ、自由に利用できる。

7.7 応用プログラム相談員

鮫島 圭一郎	分子研受託大学院生	昭和63年5月－平成元年3月
望月 祐志	〃	昭和63年10月－平成元年3月
沢辺 恭一	〃	昭和63年12月－平成元年3月

7.8 端末設置状況（平成元年7月現在）

(1) リモートステーション

(分子研) 所内 実験棟 MT 1台, LBP 1台, TSS端末5台, XYプリンタ2台
グラフィック端末2台, ファイル管理装置1台

研究棟 MT 1 台, LBP 1 台, TSS 端末 4 台
南実験棟 MT 1 台, LBP 1 台, TSS 端末 4 台
UVSOR TSS 端末 1 台, グラフィック端末 1 台, XYプロッタ 1 台

(2) 構内回線 (HITAC M-680H 接続分)

a. ポートセクタ経由

1200 B P S 8 ポート
9600 B P S 15 ポート
接続端末数 約 70 端末

b. DPBX (デジタル私設交換機) 経由

1200 B P S 3 ポート
9600 B P S 4 ポート
接続可能端末数 90 端末

(3) 電話回線

300 B P S 2 回線
1200 B P S (V22) 2 回線
1200 B P S (VADIC) 3 回線
設置端局数 116

(4) DDX パケット網

9600 B P S 1 回線 (論理多重度 15 回線)
設置端局数 78

(5) 学術情報網 大学間ネットワーク (N1) TSS サーバ/ユーザ

9600 B P S 1 回線 (論理多重度 10 回線)
ホスト名称 IMS
経由ノード 名古屋

7.9 マニュアルの紹介と購入方法

よく利用されているマニュアルには以下のようなものがある。

センターでは端末室などに置いてあるが、個人で購入を希望する時の申し込み先は次の通り。

〒113 東京都文京区本郷 7-3-1

東大構内財団法人好仁会内

アカデミービジネスサービス(株)

電話 03-811-7786

FORTRAN77関係 (HAPを含む)

最適化FORTRAN77言語	8090	- 3 -	761
最適化FORTRAN77使用の手引	8090	- 3 -	765
FORTRAN開発支援システム	8090	- 3 -	230

TSS

TSS入門 (ASPEN編)	8090	- 3 -	015
TSSコマンド	8091	- 3 -	037
TSS操作	8091	- 3 -	034
TSSメッセージ	8091	- 3 -	035
TSS解説	8091	- 3 -	032
TMP4 E2	8091	- 3 -	074
TSDUT E2	8091	- 3 -	069
TSLOG	8090	- 3 -	135
ファイル伝送プログラムIFIT-TSS	8090	- 3 -	323

ASPEN, MODE

ASPEN E2使用の手引	8090	- 3 -	370
KGRAF E2解説	8090	- 3 -	369
BGRAF解説	8090	- 3 -	360

データベース

ORION利用の手引	8090	- 6 -	502
------------------	------	-------	-----

メッセージ

システムメッセージ/コード	8091	- 9 -	010
サービスプログラムメッセージ	8091	- 9 -	063

MSL2, MATRIX/HAP

MSL2機能編第1分冊	8080	- 7 -	120
MSL2機能編第2分冊	8080	- 7 -	121
MSL2機能編第3分冊	8080	- 7 -	141
MSL2操作編	8080	- 7 -	122

MATRIX/HAP	8090 - 7 - 035
ジョブ管理	
ジョブ制御文 使用の手引	8091 - 3 - 101
ジョブ制御言語	8091 - 3 - 017
ジョブ管理解説	8091 - 3 - 016
リンケージエディタ/ローダLNK/LD2	8090 - 3 - 317
データ管理	
データ管理解説	8091 - 3 - 042
ユーティリティ	
データセットユーティリティ	8091 - 3 - 303
数学関係	
数学関数	8080 - 3 - 218
TRUST	
TRUST利用者エンドユーザー向け使用の手引	8090 - 3 - 352
GPSL, PREVIEW	
GPSL機能編第1分冊基本・機能ルーチン	8080 - 7 - 096
プレビュープログラムPREVIEW	8080 - 7 - 130
文書処理	
日本語文書エディタDEDIT	8090 - 7 - 020
日本語清書プログラム	8090 - 7 - 027
RUNOFF	8090 - 3 - 312