

I 部

目 次

寄 語	京大工教授 中 西 浩一郎	1
1. 分子研計算機センターでのこの一年		
	分子研電子計算機センター 北 浦 和 夫	3
2. 計算機システムの運用および使い方		5
2. 1 システムの構成と特徴		5
2. 2 ジョブクラスの構成		6
2. 3 利用課金点数		6
2. 4 通信・ネットワーク		7
2. 5 ワークステーションの導入設置		18
2. 6 Fortranのバージョンアップ		19
2. 7 オンラインマニュアルおよび手引き		19
2. 8 COPYコマンドの機能強化		21
2. 9 HSGHELPのメッセージ内容の充実		21
2. 10 データセット検索システムFFF		21
2. 11 グラフィックワークステーション (IRIS4D) 用 分子グラフィックスソフトウェアの公開		22
2. 12 データセットの内容を圧縮してスペース効率, データ転送効率を上げるコマンド		23
2. 13 平成2年度利用申請審査結果		24
2. 14 保存データセットの申請について		25
2. 15 SE/CE室, プロ相コーナーの移転とプログラム室の廃止		26
2. 16 センター 1階の閉鎖及び磁気テープ倉庫の廃止		26
3. 一 般 報 告		27
3. 1 分子研ライブラリプログラムの収集と開発		27
3. 2 データベース開発状況		35
3. 3 電子計算機センター運営委員会		35
3. 4 大型計算成果発表会		41

4. 平成元年度稼働状況および利用者数	42
4. 1 利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数	42
4. 2 システム稼働状況	42
4. 3 CPU時間	43
4. 4 ジョブ処理件数	44
4. 5 所外ネットワーク・通信回線の利用状況（セッション数）	44
4. 6 所内ネットワーク・通信回線の利用状況（セッション数）	46
5. 資 料	47
5. 1 センター関連組織	47
5. 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	48
5. 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	49
5. 4 電子計算機センター運営委員会委員	50
5. 5 電子計算機センター職員（平成2年7月現在）	50
5. 6 建物図	51
5. 7 応用プログラム相談員一覧	51
5. 8 利用者数とCPU時間の推移	52

寄 語

マクロ ⇄ ミクロの可逆過程とマルチM計画

京大工教授 中西 浩一郎

分子研の電子計算機センターが動き出してから十有余年が経過しました。元来、溶液の化学熱力学の、主に実験的な研究を細々と続けていた筆者のグループでも、若い人達の強い希望を受け入れて、ささやかな利用申請を出したのは1979年が最初でした。それから十年あまり、昨今では全国でも指折りのワーストユーザー(CPU時間を沢山使っているという意味です。該当される方、気になさらないで)の一人として処遇して頂いていることに、まず感謝の意を表さねばなりません。非電解質水溶液のMDやMCシミュレーションで大規模な計画が可能となったのも、センターあればこそです。

このような研究の流れは、いわばマクロからミクロへのものですが、計算で得られる結果は、マクロのアプローチでは得られないミクロの情報を含んでいるものの、計算の妥当性を判断するとなると、極め手はやはり熱力学量の実験値との対応です。だとすると、ミクロの手法とは、所詮はマクロの世界である、大仏様の掌の上で走りまわっている孫悟空の類にすぎないのではないかという気も致します。最近、化学便覧や実験化学講座の改訂のお手伝いをさせて頂いて、強く感じるのですが、熱力学や相平衡に関する研究のみに携さわっている研究室が激減して、この方面の知識や実験技術の継承が困難となり、この方面の実験法やデータについて熟知している研究者を集めること自体むつかしい現状に、危機感を持っています。そんな訳で、かの長島氏(ウンベイさんではありません)に倣って「化学熱力学は不滅です！」と叫ぶ必要があるのではないか、つまり、「マクロからミクロへの深化とミクロからマクロへの回帰」というバランス感覚が必要ではないかと考えています。

とはいうものの、ミクロへの流れは、何としても魅力のあるもので、私共の立場からはこの流れは「分子から分子集団へ」というスローガンの下に大いに推進すべきものと考えます。すでにセンターでもそのような動きがあるとのことですが、下に述べるM-M(マルチM)計画とでもいべき巨大なパッケージプログラムの整備が今後行われることになるでしょう。その内容は、さし当って次の7項目(何故かすべてMから始まる)ではないでしょうか。

MO: スーパーモレキュールに対する分子軌道計算, GAUSSIANを流用する。

MP: ポテンシャル関数とmulti-parameter optimizationという勝手に作った言葉の自由な略称。

MM: 複雑な分子の分子設計を分子力学法でおこなう。

MD: 諸種の分子動力学計算

MC：諸種のモンテカルロ計算

MF：分子分布関数(molecular distribution function) への理論的アプローチの自由な略称

MZ：神経を使う仕事で、脳や胃を痛めないよう、モーツァルトの室内楽を聴く。

最後に、この種のパッケージが物性の（評価されたデータの）データベースと有機的に結合されることを望みます。

1. 分子研計算機センターでのこの一年

分子研電子計算機センター 北浦和夫

平成元年7月1日付けで柏木浩前助教授（現九工大情報工学部教授）の後任として当センターに赴任してはや一年が過ぎました。計算機異常を告げる警報ベルに歓迎（と言うより侵入者に対する警告と言った方がより適切でしょうか）されるという事態に始まって、計算機運用に関わる日常業務になれるのに精いっぱい的一年であったような気がします。本項は本レポートの創刊から10年に渡って柏木先生が当センターの経緯を記してこられました、私もこれを引き継いでいきたいと思えます。ただし、今回は私にとって初めての執筆になりますので、経緯と言うよりは今後のセンターの運用について考えたことをいくつか述べます。

当センターでは創設以来「大学の計算機では出来ないような大型計算が行えるセンター」として計算能力の増強と運用上の工夫がなされてきました。スーパーコンピュータと超大型汎用機が導入されている現システムは創設時に比べて数百倍の演算能力を持つに至っていますが、計算分子科学者の需要を満たすにはほど遠いと言うのが現状だと思います。従って今までと同様、当センターにとって最も重要なことは計算能力を増強することにあります。前号で柏木先生も指摘されているように、日米間の政治・経済問題がらみで従来どおりの計算機更新のペースが維持できるかどうか難しい局面に直面しています。

当センターの計算機システムは、いまさら言うまでもないことですが、計算分子科学向けに工夫された特徴あるシステムになっています。特にab initio MO計算など大量の中間データを扱う必要のある計算のために大容量の補助記憶装置を備え、さらにそれらを高速にアクセスするためにパラレルI/Oが発案され実現されてきました。Ab initio MO計算は計算分子科学の基本であり、今後この分野がどのような発展を遂げるにしてもその基礎になるものであり、引続きab initio MO計算のためにハード・ソフト両面からの工夫が必要だと思います。最近、ギガバイトオーダーのメモリを実装した計算機で全ての中間データをメモリ上に置くことにより、従来の補助記憶を使う計算に比べて10倍程度高速化できることが示されています。今後目指すべき一つの方向であると思えます。

従来から当センターで行われている計算の圧倒的多数はab initio MO計算ですが、反応動力学や凝縮系の動力学シミュレーション(MD)などの計算が徐々に増えてきています。平成2年度の利用申請によると、約25%のプロジェクトでこれらの計算が計画されています。（これらのプロジェクトの大部分はab initio MO計算も含みます）。シミュレーションの比重は益々大きくなるでしょうから、今後の計算機システムはこれらにも対応した工夫が必要になってくるとい

ます。MD計算はスーパーコンピューターで数十倍の高速化がすでに達成されていますので、今後はパラレルスーパーコンピューターまたは超高並列コンピューターに期待できます。長期的にはab initio MD計算が行えることが目標でしょう。

当センターは、冒頭にも述べたように、「他ではできない大型計算のためのセンター」として計算機システムの能力を増強していかなければならないのは当然ですが、最近はワークステーション（WS）の高性能化・低価格化によりグループまたは個人で数年前の大型計算機に匹敵する計算力を持てる状況になり、近い将来、一計算機センターの増強のペースに比べ比較にならない程の規模とペースで、計算分子科学全体で使える計算能力が増加することが期待されます。分野全体の計算機資源を有効に活用するために、目的に合わせてそれぞれの手持ちの計算機と当センターの計算機の使い分けができるような分散処理体制を構築する必要があると思います。当センターの計算機は昨年7月より学情ネットワーク経由で利用できるようになり、当初の9600BPSから本年3月48KBPSへ、さらに来年学情のノードが岡崎に設置されればより高速な通信が可能になります。一方、本年6月構内ネットワークとしてFDDI LANを導入しWSからTELNET,FTPベースでホスト計算機が使えるようになっていきます。本年末にはM680HでNFSがサポートされる予定であり、分散処理のための基盤整備が着々と進んでいます。所外からの利用についても同様な環境をできるだけ早く整備したいと思います。

以上、計算機システムに関わることを述べましたがこれとは別に当センターにとって重要なことがあります。創設から始まって昨年まで、当センターの総てを作り上げて下さった柏木先生が将来計画として作成され所内で提案された当センターの拡充計画を実現することです。本レポートNo.10に柏木先生自らが書かれているようにユーザの皆様の強力な支援が必要です。

最後に、センター職員のバトンタッチを記します。1980年以来データベースとライブラリプログラムを担当して下さった山本さんが本年4月より中京大学教養部助教授として転出されました。この間、何も無いところからデータベースとライブラリプログラムの開発、整備、運用のための体制を作り上げて頂きました。現在これらは当センターの大きな財産になっています。山本さんの後任には4月より本多一彦さんがこられました。事務補佐をして頂いた安達奈美さんが本年1月に、加藤景子さんが4月に退職されました。両氏とも献身的な働きで増える一方の事務的仕事を処理して下さいました。後任には5月から加納聖子さんと石井敦子さんがこられました。

2. 計算機システムの運用および使い方

2.1 システムの構成と特徴

当センターのシステムは図2.1.1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。

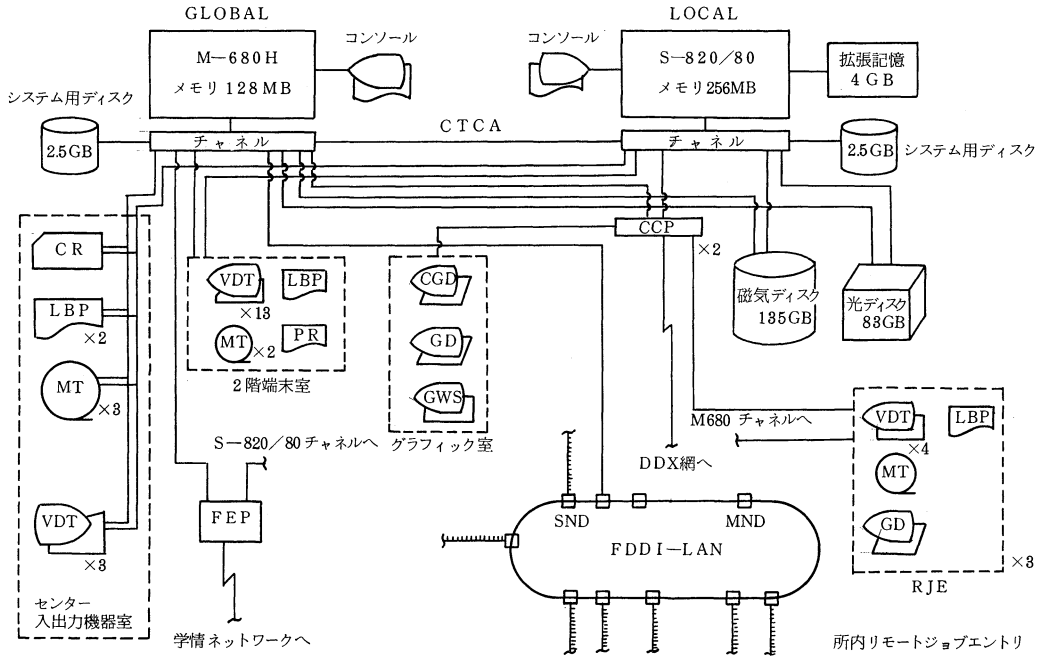


図2.1.1 システム構成概念図

- M-680HではTSS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TSS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。
- 機構内にFDDI準拠の100Mbps光ループLANを張り巡らしており、所内はもちろんのこと、三研究所のサブネットワーク（TCP/IP, DECNETなど）間を統合的に接続・利用で

きる。

- ・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。

2.2 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	64	4	—	—
B	5	5	7	2	64	4	—	—
C	30	30	7	2	64	4	—	—
D	120	30	7	2	64	4	—	—
E	300	30	7	2	64	4	—	—
S	600	30	7	0.5	96	4	—	—
TSS	3	3	7	4	32	4	—	—

ただし、Sジョブは許可制である。Eジョブは月曜日13:30から土曜日8:30までに投入されたものについて処理を行う。月曜日の7:00までにジョブが終了しない場合はキャンセルすることがある。

2.3 利用課金点数

平成2年度からM-680Hの利用点数をCPU1秒あたり現在の0.10から0.09に引き下げた。

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

CPUM : 全CPU時間 (M-680H)

CPU_s : 全CPU時間 (S-820)

VPU_s : ベクトル演算器の全CPU時間 (S-820)

LP : 出力枚数

DISK : DISK使用総量 (MB*hour)

係数の値は以下の通り。

a : 0.09/sec (改訂前 : 0.10)

b : 0.175/sec

c : 0.175/sec

d : 0.045/ページ

e : 0.00067/MB *hour

各々の計算機におけるCPU 1時間当りの利用点数は、以下のようになる。

M-680H 324点 S-820 630点

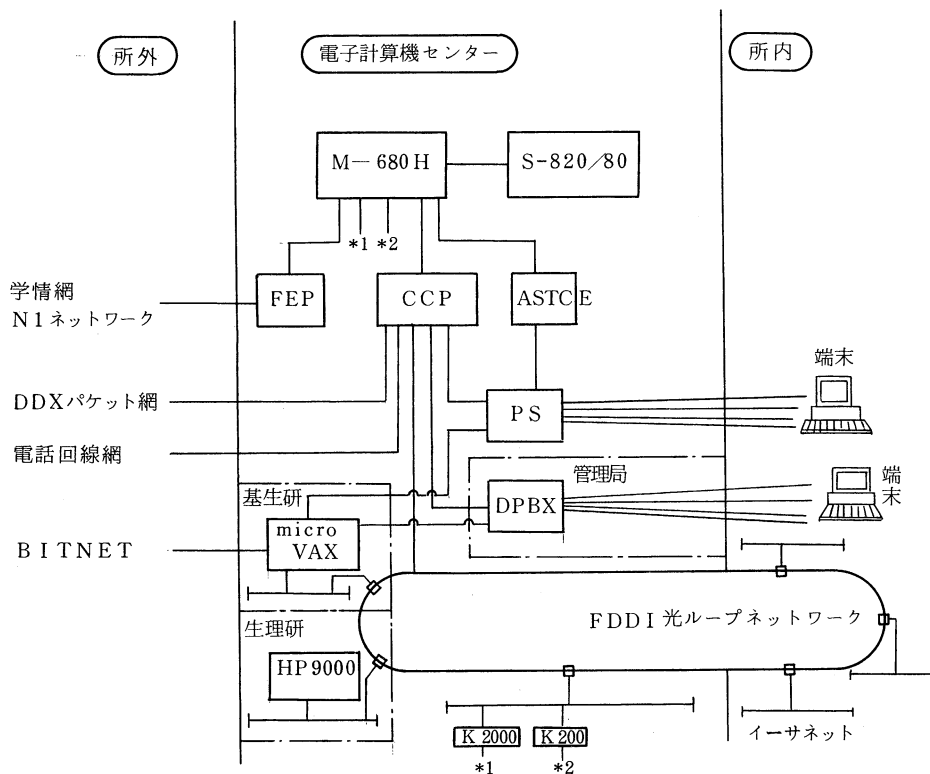
ただし、許可時間はCPU 1時間に対し昨年通り400点が割り当てられる。

なお、S-820で実行するジョブのVPUがCPU比でおよそ20%以下の場合、利用点数をより多く消費することになるので、許可CPU時間を有効に使用するためにもM-680Hとうまく使い分けることが望まれる。

2.4 通信・ネットワーク

当センターの関連するネットワークの構成概念図を図2.4.1に示す。

図2.4.1 ネットワーク構成概念図



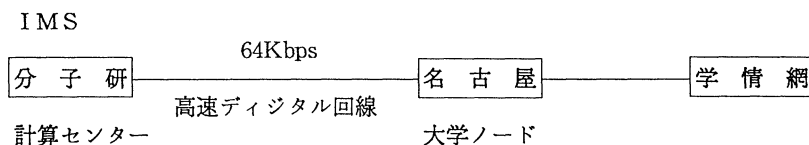
CCP : 通信制御装置
ASTCE : アスキーターミナルコントローラ
FEP : フロントエンドプロセッサ

PS : ポートセクタ
DPBX : デジタル交換機

2.4.1 所外通信回線・ネットワーク

(1) 学術情報網経由で大学間ネットワーク

分子研計算機センターでは平成元年7月3日より、N1-TSSのサーバー/ユーザ機能を正式公開している。N1-RJE機能の公開は行っていない。当センターは次図のように学情網経由で名古屋大学と64Kbpsの高速デジタル回線でつながっている。平成2年3月19日より従来の9600bpsから64Kbpsへ変更を行なった。



① 利用できる機関とホスト名称 (平成2年6月末現在)

分子研計算機センターはサーバー/ユーザとして登録されている。

分子研計算機センターのサーバーホスト名: IMS

現在分子研計算機センターと接続可能な計算機センターは以下の通り。

機関名	ホスト名	利用形態	使用計算機名
		T S S	
北海道大学	HOKKAIDO	サーバ/ユーザ	HITAC M-682H
東北大学	TOHOKU	サーバ/ユーザ	ACOS S-2000
東京大学	TOKYO	サーバ/ユーザ	HITAC M-682H
〃	TOKYO1	ユーザ	HITAC M-682H
名古屋大学	NAGOYA	サーバ/ユーザ	FACOM M-780/20
京都大学	KYOTO	サーバ/ユーザ	FACOM M-780/30
大阪大学	OSAKA	サーバ/ユーザ	ACOS S-2000
九州大学	KYUSHU	サーバ/ユーザ	FACOM M-780/20
学情センター	NAC SIS	サーバ	HITAC M-680H
〃	SIMAIL	サーバ	ACOS S-1000/10
奈良女子大学	NARAJO	サーバ/ユーザ	FACOM M-760/6
広島大学	HIRODAI	サーバ/ユーザ	HITAC M-680H
埼玉大学	SAITAMA	サーバ/ユーザ	HITAC M-260K
お茶の水大学	OCHA	ユーザ	IBM4381-R24
京大化学研究所	KAKEN	ユーザ	FACOM M-380Q
弘前大学	HIROSAKI	ユーザ	ACOS-850/10
大阪府立大学	OFUDAI	サーバ/ユーザ	ACOS S-930/10
千葉大学	CHIBA	サーバ/ユーザ	HITAC M-680D
東大物性研究所	ISSP	サーバ/ユーザ	FACOM M-380R
熊本大学	KUMAUNIV	ユーザ	FACOM M-360
愛媛大学	EHIME	サーバ/ユーザ	FACOM M-360AP
静岡大学	SUIPC	ユーザ	ECLIPSE MV-15000/20

前ページの大学経由以外で直接分子研計算機センターに乗り入れたい希望がある場合は所属機関の計算機センター担当者と相談の上、分子研計算機センターまでお申し出てください。ただし、学情網経由の利用に限られる。

② N1-TSSの使い方

1) 他センターから分子研計算機センターを利用する場合

- (a) ユーザホストのTSSセッションを開く
- (b) 分子研計算機センターとの接続コマンド入力
 - (日立機) NTSS HOST (IMS)
 - (富士通機) NVT IMS
 - (日電機) NTSS IMS
- (c) 分子研計算機のTSSセッションを開く
LOGON ユーザID/PASSWORD
- (d) 分子研計算機のTSS操作
- (e) LOGOFF
- (f) ユーザホストのTSS操作
- (g) LOGOFF

他センターのTSSおよびN1-TSSの詳細については各センターの利用の手引を参照のこと。

2) 分子研計算機センターから他センターを利用する場合

- (a) 分子研計算機のTSSセッションを開く
- (b) 他センターとの接続コマンド入力
NTSS HOST (サーバホスト名)
- (c) 他センターのTSSセッションを開く
- (d) 他センターのTSS操作
- (e) 他センターセッション終了LOGOFF
- (f) 分子研センターのTSS操作
- (g) 分子研センターセッション終了LOGOFF

3) NTSSコマンドの種類と機能

相手ホストとの接続使用中に割り込みキーを押すとNTSSモードになる。このときNTSS>のプロンプトがでる。このモードでは次の二つの目的に利用できる。

- (a) 相手ホストへの割り込み
NTSS>のプロンプトに対して空送信 (RETURNキー) をするとサーバホストにアテンション割り込みがかかる。

あるいは

NTSS>SEND AOと入力する。

(b) NTSSサブコマンドの入力

以下のようなサブコマンドが使用できる。

HELP	HELPメッセージの表示
END	サーバーホストとの回線切断
SEND AYT	サーバホスト名の確認
SEND AO	サーバホストへのアテンション割り込み
SET	サブコマンド接頭文字列の指定
LIST	サブコマンド接頭文字列の表示
EXEC	コマンドプロシジャによるコマンド送出
ALLOC	コマンドプロシジャ内でのデータセット割当
FREE	データセットの解放
Q	サブコマンド処理の打ち切り

③ 漢字あるいはグラフィックの利用

1) 他センターから分子研センターを使う場合

他センターの漢字端末, グラフィック端末から分子研センターを利用する場合には分子研センターのセッションに入ってからREADYモードで以下のようにTERMINALコマンドを使用することによって属性を設定できる。

READY

TERMINAL TERMTYPE (NVT22) 漢字入出力を可能とする。

TERMINAL TERMTYPE (NVT23) グラフィックを可能とする。

TERMINAL TERMTYPE (NVT21) 基本モードにする。

2) 分子研センターから他センターを使う場合

READYモードでNTSSコマンドに以下のパラメータを選択して指定する。ただし, 漢字入出力, グラフィックともに, それぞれの機能を有する端末装置を前提としている。

NTSS H (サーバホスト名), $\left[\begin{array}{l} \text{NKANJ I} \\ \text{GRAPHIC} \end{array} \right]$

④ コマンドプロシジャによるNTSSの起動とサーバホストとのTSS開始

例) 分子研センター (IMS) →SIMAIL→IMSの場合

1) コマンドプロシジャ例

CONTROL PROMPT

```

NTSS H (SIMAIL), NKANJI
DATA PROMPT
ユーザID                      —SIMAILの開設
PASSWORD
LOGON ユーザID/PASSWORD—分子研センターの開設
TERM TE (KANJI)
ENDDATA

```

⑤ N1-RJEサービスの導入停止およびファイル転送について

平成元年7月よりN1-TSSのサービスを行っているが、N1-RJEのサービスについては、センターで調査検討の結果、機密保護機能の面で問題があることが指摘された。そのため分子研センターではN1-RJEのサービスを行わないことになった。従来N1-RJEはファイル転送、バッチジョブの実行の二通りの目的に使われてきた。RJE機能の便利さのすべてをカバーすることはできないが、それぞれの使い方について代替機能を使えばかなり間に合う。まずファイル転送のためにはLIST系コマンドを使用する簡易ファイル転送機能がほとんどのセンターに用意されているのでこれを使う。以下にユーザの属するホスト計算機が日立と富士通の計算機の場合の使い方を示す。

(日立機)

ユーザホスト計算機にN1NES/FTFが組み込まれていればGET, PUTコマンドを使用できる。

a) PUTの使用方法 (ユーザホストファイル→分子研ファイル)

ユーザホスト上のXX. DATAを分子研計算機上のYY. DATAへ転送

```

READY
NTSS H (IMS), NKANJI
:
LOGON USERID/PASSWORD          分子研のTSSセッション開始
:
READY
EDIT YY. DATA, NEW, NONUM, ASIS
INPUT
(割込キー)
NTSS>PUT XX. DATA, NOLIST
:
** nn RECORD PROCESSED

```

EDIT

END S

READY

LOGOFF

分子研のTSSセッション終了

:

READY

LOGOFF

b) GETの使用法 (分子研ファイル→ユーザホストファイル)

分子研計算機上のYY. DATAをユーザホスト上のXX. DATAへ転送

READY

NTSS H (IMS), NKANJI

:

LOGON USERID/PASSWORD

分子研のTSSセッション開始

:

READY

(割込キー)

NTSS>GET XX. DATA, EOF

LIST YY. DATA, NONUM

:

** nn RECORD PROCESSED

READY

LOGOFF

分子研のTSSセッション終了

:

READY

LOGOFF

(富士通機)

NVTの@IMPORT, @EXPORTコマンドが使用できる。

a) @EXPORTの使用法 (ユーザホストファイル→分子研ファイル)

ユーザホスト上のXX. DATAを分子研計算機上のYY. DATAへ転送

READY

NVT

KCQ10101 I N1TSS-G USER STARTED

:

NVT

```

OPEN IMS
KCQ10124 I CONNECTED TO HOST-IMS
LOGON USERID/PASSWORD      分子研のTSSセッション開始
:
:
READY
EDIT YY. DATA NONUM NEW
INPUT
00100:@EXPORT XX. DATA NOLIST
KCQ10114 I FILE TRANSFER STARTED
KCQ10116 I END OF FILE
KCQ10115 I FILE TRANSFER ENDED
EDIT
END SAVE
JTD5355 I SAVED TO NEW DATA SET (.....
READY
LOGOFF                      分子研のTSSセッション終了
:

```

- b) @IMPORTの使用方法 (分子研ファイル→ユーザホストファイル)
分子研計算機上のYY. DATAをユーザホスト上のXX.DATAへ転送

```

READY
NVT
KCQ10101 I NITSS-G USER STARTED
:
NVT
OPEN IMS
KCQ10124 I CONNECTED TO HOST-IMS
:
:
READY
@X ATTR A LRECL(132) BLKSIZE(3036) +
RECM(F B) DSORG(PS)
NVT
@X ALLOC DA(XX. DATA) USING(A) NEW TR +

```

SP (1 0 1 0)

NVT

@IMPORT XX. DATA NOLIST

LIST YY. DATA NONUM

KCQ10114I FILE TRANSFER STARTED

READY

KCQ10115I FILE TRANSFER ENDED

(2) 電話回線, DDX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	0564-53-6113 (代) 0564-53-6117
	1200BPS (VADIC)	3回線 廃止(平成2年度)	TTY	(0564-53-6114 (代) 0564-53-6115 0564-53-6116)
	300BPS (V. 21)	2回線 廃止(平成2年度)	TTY	(0564-53-6111 (代) 0564-53-6112)
DDX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。

1) TSS電話回線のサービス縮小

第2種DDXパケット網回線や学情網N1-TSSのサービス普及にともない従来から使われていた電話回線の使用率が大幅に減少してきた。したがって、特に利用者が少なく、使用頻度も少ない300bps(2回線)とVADIC型モデムによる1200bps(3回線)のサービスを廃止した。

2) テレホンガイドの廃止

センター発足以来10年に亘ってサービスを行ってきたテレホンガイド(0564-53-4625)は、電話回線利用者の激減、パソコン端末の所有者の一般化により、その使用頻度が非常に低くなっている上に、そのテープ録音という機能性質上タイムリー性にも欠けているため、廃止することにした。今後はセンターからの速報、TSS端末によるNEWS、SENDメッセージ、HOTNEWSなどの利用を促進していく。

(3) BITNET通信サービス

海外ネットワークBITNETに加入し、電子メールサービスを行っている。ノード名はJRNONRIである。

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

分子研からはポートセレクタ2回線(1200bps)またはDPBX2回線(9600bps)を経由して利用する。平成2年9月からはFDDI光ループ系を介してethernetからも利用できるよ

うになる予定である。

平成2年度中にはHITACの大型計算機上にもBITNETを導入し、基生研micro VAXと接続する計画がある。

平成元年度の使用状況を表2.4.1に示す。

表2.4.1 BITNET利用状況 平成元年4月1日～平成2年3月31日

	送 信		受 信		合 計	
	行 数	回 数	行 数	回 数	行 数	回 数
分子研	236,968	4,683	444,911	5,767	681,879	10,450
基生研	47,811	1,097	313,832	1,972	361,643	3,069
生理研	66,092	1,230	68,131	1,812	134,223	3,042
合 計	350,871	7,010	826,874	9,551	1,177,745	16,561

図2.4.2(次ページ)に平成2年6月現在の国内のノード接続状況を示す。

2.4.2 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 (主に南実験棟用)

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)項のポートセレクトに替って、この形態の接続が主流となると予測されるが、全交換機の置き換えにはもう少し時間がかかりそうである。

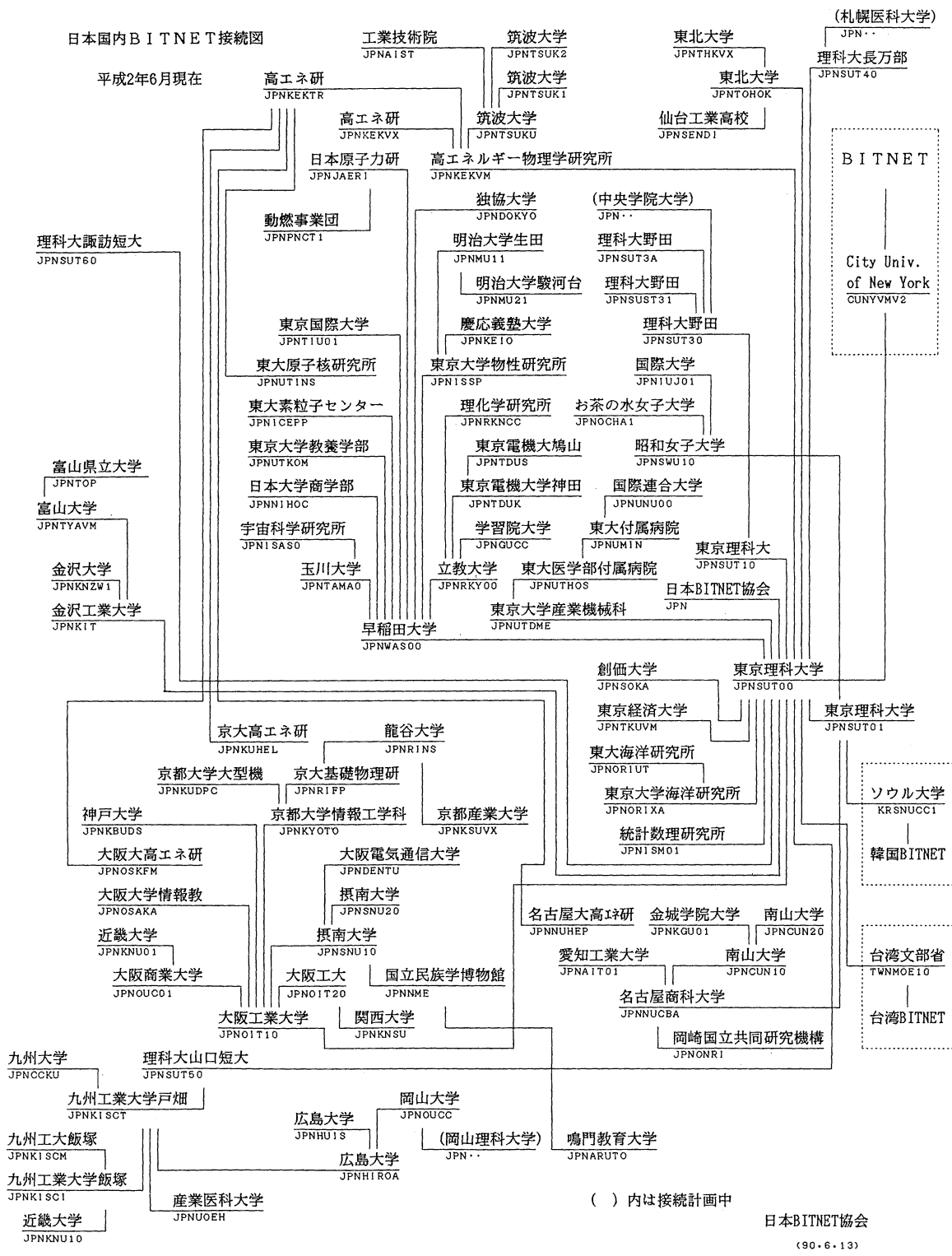
(2) ポートセレクトによる通信

ポートセレクト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。

この形態で使用されている端末はまだ約70端末ある。

	通信速度	画面モード	ポート数	ポートセレクトクラス
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 μVAX	1200BPS	ラインモード	2ポート	50

図 2. 4. 2 日本国内 BITNET 接続図



() 内は接続計画中

日本BITNET協会

(90.6.13)

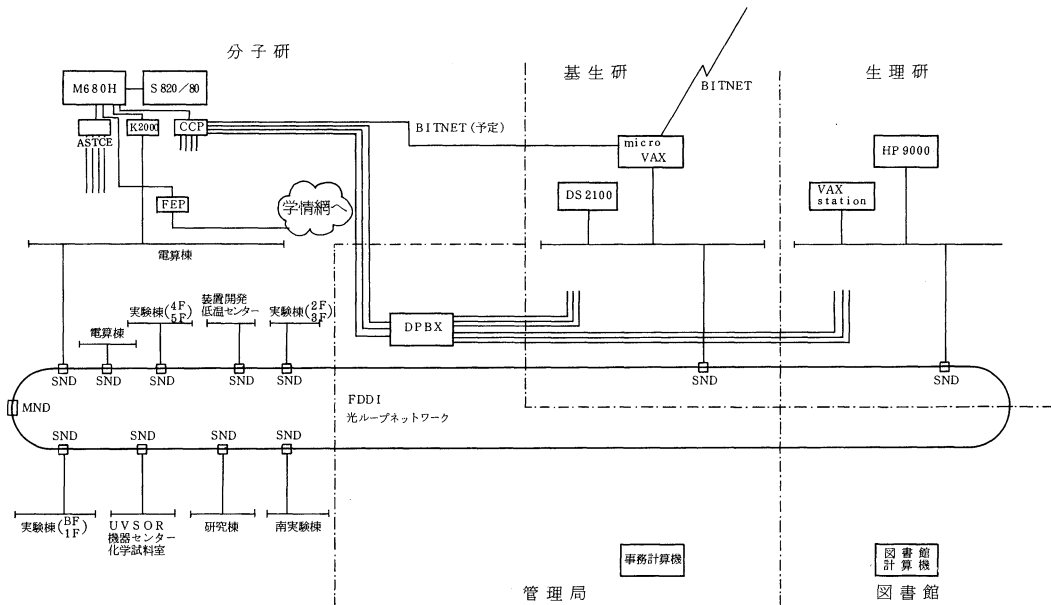
(3) FDDI光ケーブルを基幹とするLAN

32Mbps日立8644光ループネットワークを廃止してFDDI規格に準拠した100Mbps基幹ループネットワークを構築した。この基幹ネットワークは分子研所内のみでなく基生研、生理研の方にも延長されている。基幹ループ上のノードには日立のBN100を使用しノードにはサブネットワークとして、イーサネット、DECNETなどを接続できる。これにより現在のワークステーション(WS)、パソコンのLANの主流となって普及しているTCP/IPプロトコルに基づいた通信が自由に行えることになり、岡崎機構内の相互データ通信事情が大幅に改善された。大型計算機(M680H, S820)とのTCP/IPに基づく通信はKNET/K2000ゲートウェイシステムを導入することによって実現している。これにより各パソコン、WSから大型計算機のTSS下でフルスクリーンモード、日本語の使用が可能となった。

さらに平成2年度末にはNFS-FEP(ネットワークファイリングシステム用フロントエンドプロセッサ)を導入することにより大型計算機のディスクシステムをNFS用ファイルとして利用できるようになる予定である。

図2.4.3にFDDI光ループネットワークを中心とするLANの接続構成を示す。

図2.4.3 機構内LAN接続系統図



機構内LANの普及および外部LANとの相互接続の可能性の増大に伴って、正式ネットワークアドレス（IPアドレス）の登録申請を行い、クラスBで以下のようにIPアドレスの割り当てを行うことになった。機構内部ではホストアドレスをさらにサブネットアドレス6ビットとホストアドレス10ビットに分割している。ネットワーク名はORIONである。

インターネットアドレスの割当

ネットワークアドレス		サブネットアドレス			ホストアドレス
133	48	3ビット	3ビット	2ビット	8ビット

			000	管理局
			001	基研生
			010	生理研
			100	分子研
			101	〃
			110	〃
管理局	133.48.	04.	1~1023	
		~		
		28		
基研生	133.48.	32.	1~1023	
		~		
		60		
生理研	133.48.	64.	1~1023	
		~		
		92		
分子研	133.48.128.	1~1023		
		~		
		191		

2.5 ワークステーションの導入設置

一般的に標準として使用されている下記のワークステーションを順次設置しユーザーに公開した。導入の主な理由は、ユーザーが自分の研究室で使用しているワークステーションをセンターにも設置しておくことにより、大型システムを使用する上で不自由しないようにするためである。また、LANに接続してワークステーションを含めた分散処理システムの構築のための実験システムとしても活用する。

製品総称名	製品型名	メーカー
NEWS	NEWS1460	ソニー
マッキントッシュ	MAC2Ci	アップル
IBM-PC	PS55/5530T	IBM
2050	2050G/ET	日立

2.6 Fortranのバージョンアップ

分子研計算機センターで公開していたバージョン22-01(V22)から、これにいくつかの新機能を付け加えたバージョン23-00(V23)への変更を行った。

平成元年4月よりV23のテストを当センターのライブラリプログラムを用いて行ってきたが、このテストの結果を見る限りV22とほぼ同じ性能をもっている。またプログラムによってはLINPACKのベンチマークプログラムのように、新機能がよく働き、V22にくらべ数倍の性能が出ているものもある。

このバージョンは平成元年6月下旬から東大でユーザに公開中のものである。公開に際してはユーザ側で変更することは何もない。V22で作ったロードモジュールとの混在も何等问题はない。

V23で追加された機能の主なものは、ユーザ手続きのインライン展開(UINL I N E)，実行時にループ長を判断しスカラ実行とベクタ実行を選択する機能(S V O B J)，2バイト整数型及び1バイト論理型配列のベクトル化機能(I 2 V E C，L 1 V E C)である。

テストは、V22とV23に対して、Gaussian82, J A M O L，G A M E S S，K O T O，J A S O Nを用いコンパイル時間といくつかのサンプルデータを用いたJ O B (総計18本)の実行時間の比較を行った。新機能の効果についても測定を行った。

新機能を使わない場合のV23の性能は、コンパイル性能、実行性能ともほぼV22と同等であり0.94倍から1.03倍の性能比の中に収まっている。新機能を利用するとコンパイル時間が、V22(V23の新機能無しとほぼ同じ)の1.11倍から1.83倍と増大するが、テストに用いたJ O Bの実行時間の著しい性能向上は見られなかった。新機能の有効性はプログラムにかなり依存するものと思われる。

2.7 オンラインマニュアルおよび手引き

従来、H A P F O R T R A N 7 7関係のオンラインマニュアルを公開していたが、リンケージエディタやT S D U Tなどのオンラインマニュアルも揃ってきた。参照方法は、日立標準版(A S P E N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2通りある。どちらでもマニュアルテキストは同一である。日立標準版の使用方法

```
ASPENエディタ中で )TUTORコマンドまたはTUTORコマンドを入力する。
)TUTOR                マニュアル選択コマンドプロシジャを実行する。
TUTOR MENU            どのようなマニュアルがあるかを知る。
TUTOR FORT77L         言語マニュアルを参照する。
TUTOR FORT77G        使用の手引マニュアルを参照する。
TUTOR . . . . .      . . . . .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マニュアルの種類を選択する。

マニュアル一覧 (TUTORで指定するマニュアルID)

マニュアルID マニュアルの種類

《日立マニュアル》

FORT77G	: HAP	FORTRAN	使用の手引
FORT77L	: HAP	FORTRAN	言語
MSL2#1	: MSL2	第1分冊	行列計算
MSL2#2	: MSL2	第2分冊	関数計算
MSL2#3	: MSL2	第3分冊	統計計算
MATRIX	: MATRIX	/HAP	
GPSL#1	: GPSL	第1分冊	基本・機能ルーチン
GPSL#2	: GPSL	第2分冊	幾何形状・製図ルーチン
GPSL#3	: GPSL	第3分冊	ビジネス・レポートルーチン
GPSL#4	: GPSL	第4分冊	作図データ管理ルーチン
KGRAF	: KGRAF	E2	解説
LKED	: LNK	/LD2	(UT含)
TMP4	: TMP4	E2	
TSDUT	: TSDUT	E2	
TSSC	: TSS	コマンド	
TSSO	: TSS	操作	
VOS3HAP	: VOS3	/HAP	/ES

《センター手引》

マニュアルID マニュアルの種類

IMS#1	: 利用の手引	運用編
IMS#2	: 利用の手引	システム概説編
TSSG	: 利用の手引	TSSコマンド編
TRMANAGE	: 利用の手引	プロジェクト管理・データセット保護編
FLIB	: 利用の手引	ライブラリの登録と検索編
GRAF#1	: 利用の手引	KGRAF編
GRAF#2	: 利用の手引	図形処理編

ODM : 利用の手引 ODM操作編

以上のマニュアル、手引のうち一部まだ準備できていないものもある。なお、利用の手引はオンライン化にともない、印刷物としての配布は今後おこなわない。

2.8 COPYコマンドの機能強化

実体のコピーと一緒にデータセット保護情報もコピーできる。

例 COPY A1. FORT A2. FORT DSP

パラレルデータセット変換（逆変換）ができる。

例 COPY @S. DATA @P. DATA PRL (*)

例 COPY @P. DATA @S2. DATA PRL (*, 0)

データセット群を一括コピーできる。

例 COPY A. % @BACKUP. A. % DSG

A.FORT, A.DATAなどが@BACKUP.A.FORT,@BACKUP.A.
DATAにコピーされる。

2.9 MSGHELPのメッセージ内容の充実

MSGHELPでほとんどのメッセージIDを指定することができるようになっている。

例 MH JBB041I (データ管理)

MH ABNDSOC4 (ABEND)

MH JOK880I, JAPANESE (FORTRAN)

SETCSコマンドで次のように環境変数を設定すると英文での出力を標準にすることが
できる。

SETCS ¥MSGHELPLANGTYPE VAL (ENGLISH)

2.10 データセット検索システムFFF (Flexible File Finder)

FFFはVOS3/TSS環境下においてデータセットの検索・操作を容易にするためのシステムで、日立提供のTSSコマンドLISTCAT, LISTDS, LISTSP, LISTPD等の機能を包含している。さらに、内蔵する強力なWILDカード機能により、UNIX等
に比して貧弱なVOS3/TSS機能を補強するソフトウェアとしても機能するように設計されている。FFFはreadyとモードにおいてFFFコマンドを投入することにより駆動する。

検索は、1-KEYS, 2-ITEMS, 3-DEVICE, FORMAT, 4-NEXTの順に進めていく。以上の各場面をステージと呼ぶ。最初のステージで検索条件を指定し、2番目で出力すべき項目を指定し、3番目で出力先、出力フォーマットを指定する。最後にさらに検索

条件を課して検索を続けるか、今までに指定した検索条件を消去して新たに検索を行うかを指定する。preferencesサブコマンドでdefault値を設定できるので、応答のほとんどをc/r(改行)で済ませるようにすることも可能。各ステージでHELPサブコマンドによって使用方法を知ることができるし、TSSコマンドを発行することもできる。検索によって得られたデータセット名のリストをTSSコマンドのオペランドとして渡すこともできる。

例として生成日付が1990年2月1日から2月14日までで、ファイル容量が10MBから20MBの範囲で、レコード形式がFBの区分データセットで、XYZという文字列を含むようなデータセットをすべて消去したいといった場合を考えてみる。最初のステージで、

```
CDATE (900201:900214) ALLOC (10:20,MB) RECFM (FB)
```

```
DSORG (PO) TEXT (XYZ)
```

と指定する。この条件を満足するデータセットが、A. TEXT B. FORT C. DATAの3個のデータセットであったとして、さらに、以下のようなTSSコマンドを投入する。

```
DEL <&>
```

ここで、<&>は検索によって得られたデータセット名を表しており、DEL <&>は

```
DEL A. TEXT
```

```
DEL B. FORT
```

```
DEL C. DATA
```

と自動的に展開され、該当データセットを一括消去することができる。

以上の他にも、ABCで始まるメンバー名を持つデータセットを捜すといったこともできる。

2.11 グラフィックワークステーション (IRIS4D) 用 分子グラフィックスソフトウェアの公開

分子研計算機センターのUNIX機IRIS4D上で使用できる分子グラフィックス用のソフトウェアとして以下の二種を公開する。

IRIS4Dと大型計算機(M680H)との通信にはイーサネット経由でtelnet,ftpが使用できる。

```
IRIS4Dのホスト名 : IRIS
```

```
M680Hのホスト名 : VOS3KNET
```

(1) KORIN/IRIS

分子研で開発されたソフトウェアでその主目的は分子軌道計算結果のビジュアル化にある。従ってモデル化の特長もMO、電子密度等の物理量の等値面、断面が表示できることにあるが、通常のボールスティックモデルやスペースフィルモデル等の表示も各種合成組み合わせで表示できる。またマウスやダイアルボタンを使ってリアルタイム回転・拡大縮小等の会話操作が可能である。制作画像は最終的にはカラー出力装置にA4サイズで出力できる。

(2) Midasplus

カリフォルニア大学サンフランシスコ校で開発された、たんぱく分子のシミュレーション表示プログラムである。PDB (Protein Data Bank) 形式のデータやMidas独自データベース形式のデータを読み込んで分子構造図、ファン・デア・ワールス面の表示、たんぱくのリボン表示、スペースフィルモデルの表示、ステレオ図の表示等ができる。そのほか静電ポテンシアル面の計算など多くの機能がある。制作画像はカラー出力装置にA4サイズで出力できる。

2.12 データセットの内容を圧縮してスペース効率、 データ伝送効率を上げるコマンド

データセットの中身である計算結果やプログラム、データには多くの空白文字（スペースまたはブランク）が含まれており、そのままディスクに格納すると貴重なディスクスペースがすぐいっぱいになってしまったり、ネットワークでデータセットを伝送するのに必要以上に時間がかかることになる。そこであまり複雑でなく、扱いやすい圧縮・展開プログラムを公開する。エディタによる編集（コメント行の挿入や他の圧縮データとの連結）も可能、データセットの形式も変えていないので同じ区分データセットに非圧縮・圧縮データを混在して保管できる。

[コマンド名]

SOPACK (圧縮), SOUNPK (展開)

計算結果 (RECFM=FB, LRECL=137) の場合、

CDPACK (圧縮), CDUNPK (展開)

プログラム、データセット (RECFM=FB, LRECL=80) の場合

[使用例]

```
SOPACK @@SYSOUT. OUTLIST
```

```
@@SYSOUT. OUTLIST
```

```
--> @@SYSOUT. OUTLIST. SOPACK
```

```
SOUNPK @@SYSOUT. OUTLIST
```

```
@@SYSOUT. OUTLIST. SOPACK
```

```
--> @@SYSOUT. OUTLIST. SOUNPK
```

[注意事項]

出力データセットはRENEW (再作成) になっている。

××PACKでは出力データセット名に「. ××PACK」が、

××UNPKでは入力データセット名に「. ××PACK」

出力データセット名に「. ××UNPK」がコマンド内で付加される。

[制約事項]

指定できるデータセットは順データセット，短期データセットのみ。

漢字シフトコードを含む場合，圧縮不可。

表示可能文字以外のコードを含む場合（バイナリーなど），圧縮不可。

[圧縮データの構造（概要）]

```
／＊  89-09-01  12:00:00  DSN=@@SYSOUT
      2Z1I    D1    D//AAB1CD2X3  JOB  **D
      :
      :
      !PG=C02VD  !!A@7Z
```

第1カラムに文字（／や＊など）があるとコメント行と解釈する。

圧縮データのブロックは2Zで始まり7Zで終わる

（展開では連結された複数ブロックの一括処理が可能）

同じ文字が連続して現れた場合にその文字を圧縮する。

2.13 平成2年度利用申請審査結果

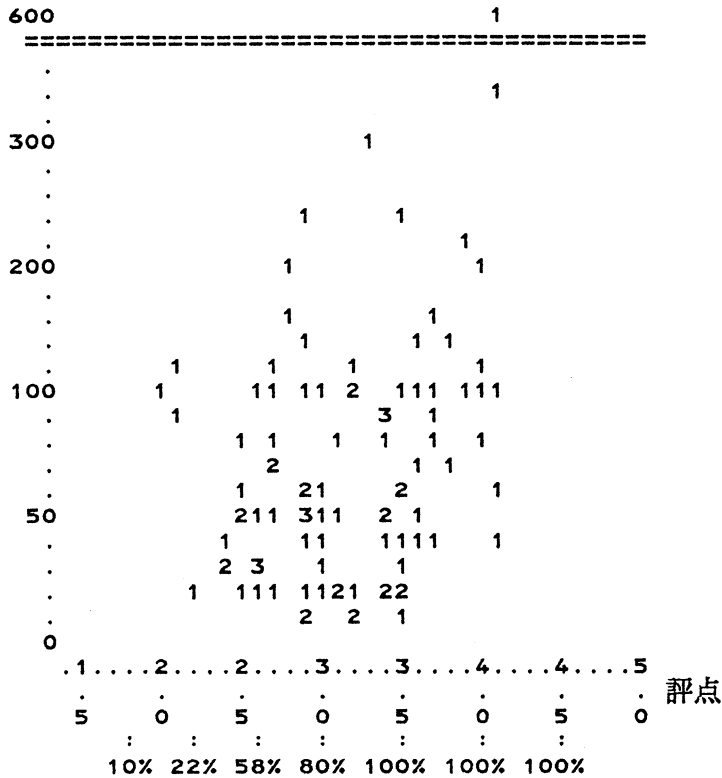
第19回電子計算機センター運営委員会における審査の結果，各プロジェクトの評価および許可時間が決まった。評点は運営委員の個別の採点（0～5）の平均値に基いている。許可率は所外利用者に配分可能な全CPU時間に依存する簡単な関係式を用いて評点および前年度使用率から算出される。許可時間は申請時間に許可率をかけたものである。今年度の平均許可率は80%になった。

各申請の評価は申請書に記述された研究内容，研究計画，継続の場合は利用報告や発表論文などにあらわれた過去の実績，また関連分野の場合分子科学への波及効果の期待などが考慮され，委員の採点と委員会における討議によって決められる。また，評価には申請時間や研究内容や共同研究者数に適切かどうかの判断ももちろん含む。

研究内容が高く，計画のしっかりした申請時間の妥当な提案をされることが望まれる。次図に見られるように評点は2.00から4.14まできわめて幅広く分布しており，これによって許可率も10%から100%にわたっている。

申請時間

評点の分布



グラフの中の数字はプロジェクトの数

2. 14 保存データセットの申請について

申請書に記入する保存データセット容量は、標準値の10MBにとらわれずに理由を明記して、必要な分申請すること。平成元年6月の磁気ディスク装置の増設によりディスク容量に余裕があるので、平成元年度・2年度は許可率が緩和されている。参考までに2年度の申請の分布を次図に示す。

申請	件数	保存データセットの申請分布
10	81	#####
11-20	12	#####
21-30	11	#####
31-40	6	#####
41-50	9	#####
51-60	1	#
61-70	1	#
71-80	2	##
81-90	1	#
91-100	9	#####
101-200	1	#
201-300	1	#

2.15 SE/CE室，プロ相コーナーの移転とプログラム室の廃止

平成2年1月4日よりSE/CE室，プロ相コーナーを2階に移転し，プログラム室を廃止して，そこにSE/CE室，プロ相コーナーを設置した。これは計算機の装置が増加して1階主機室が狭くなったこと，学情ネットの普及によりセンターへの直接来訪利用者が少なくなってきたことなどの理由による。

プログラム室などに置かれている予約制貸出ロッカーはそのまま利用できるが，一般の開放カードロッカーや整理棚，整理箱に置かれているものはすべて撤去された。

2.16 センター1階の閉鎖及び磁気テープ倉庫の廃止

平成2年1月4日よりセンター1階を閉鎖することとし，1階にあったユーザ用磁気テープ倉庫も廃止した。したがって利用者はすべて2階の利用のみとなった。

また，1階に置かれている連続紙レーザープリンタのオープン利用もできなくなった。

3. 一 般 報 告

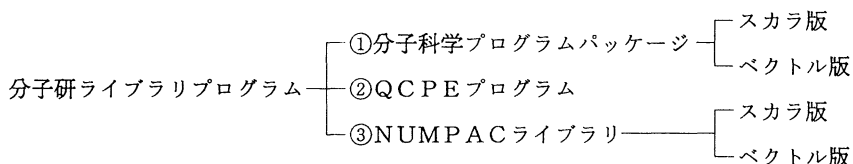
3. 1 分子研ライブラリプログラムの収集と開発

平成元年度のライブラリ開発計画を表3. 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3. 1. 1 平成元年度 分子研ライブラリプログラム開発作業一覧

1	二宮 市三 秦野 甯世	中部大 中京大	教 授 助教授	汎用数学計算のプログラムNUMPACのベクトル化
2	藪下 聡 古賀 伸明 諸熊 奎治	広島大 分子研	助 手 助 手 教 授	分子軌道計算のプログラムCOLMBSの開発整備
3	小原 繁 本多 卓 中野 晴之 坂野 文洋 高田 彰二 三宅 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
4	柏木 浩 山本 茂義 長嶋 雲兵	九工大 分子研	教 授 技 官 助 手	RHF計算のプログラムJAMOL4とCASSCF計算のプログラムJASON2の開発整備
5	別府 良孝	愛知技術短大	講 師	高性能固有値ルーチンANGELの開発
6	酒井 嘉子 三好 永作 冨樫 雅文	九 大 九 大 北 大	助教授 助教授 研究生	モデルポテンシャルの関数データの整備
7	寺倉 清之 柳瀬 章 播磨 尚朝	東 大 大阪府大	助教授 教 授 助 手	固体バンド計算のプログラムFLPAWの開発
8	冨樫 雅文 J.M. Rudzinski	北 大	研究生 大学院生	汎用分子力場プログラムBIGSTRN-3の移植
9	岩田 末廣 橋本 健朗 南部 伸孝 入沢 潤	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MOLYXの開発と整備
10	天辰 禎晃	分子研	技 官	分子軌道計算のプログラムCOLMBSの開発整備 (PSIのテスト計算)
11	正村 眞佐雄	岡山大	助 手	CHELPとNBOの移植
12	平尾 公彦 和佐田裕昭 小畑 繁樹	名 大	教 授 大学院生 大学院生	HONDO (V7.0)のチューニング及びバグの修正・マニュアルの整備
13	田中 秀樹 稲田 勲 西村 徹 林 治尚 吉岡研二郎	京 大	助 手 大学院生 大学院生 大学院生 大学院生	溶液の計算機シミュレーションのためのプログラム開発
14	Andrea Dorigo	分子研	特別協力研究員	分子軌道計算のプログラムCOLMBSの開発整備
15	高田 彰二 佐藤 菊枝	京 大	大学院生 大学院生	QCBDB基底関数のGAUSSIAN型の形式への変換
16	斎藤 俊和	早稲田高校	教 諭	差分法による分子振動解析
17	本多 一彦 麻田 俊雄 浦下 真治	大阪市大	大学院生 大学院生 大学院生	IMSPACKのUNIXワークステーションへの移植

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。



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、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146件が納まっている。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。

平成元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3本である。

GAUS86 GAUSSIAN 86: AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS
 CRY88 CRYSTAL 88: AB INITIO LCAO-HF PROGRAM FOR CRYSTAL SYSTEMS
 FLAPW SELF-CONSISTENT ENERGY BAND CALCULATION BY FLAPW METHOD

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537本である。量子化学の分野でよく使われる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いる。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。

平成元年度に新規登録したQCPEプログラムは以下の32件である。

QC0553 ZMAKER: Z-MATRIX GENERATION FROM CARTESIAN COORDINATES
 QC0554 GEPOL/87: AREA AND VOLUME OF MOLECULES
 QC0555 BOLTZMAN: BOLTZMANN DISTRIBUTION PROGRAM
 QC0556 RPAC: EL. EXCITATION PROP. & NUCL. MAGN. SHIELDING IN RPA
 QC0557 TSTPST: STATISTICAL THEORY PACKAGE FOR RRKM/QET/TST/PST
 QC0558 ECEPP/2: EMPIRICAL CONFORMATIONAL ENERGY FOR PEPTIDES
 QC0559 BIGSTRN-3: EMPIRICAL FORCE-FIELD PROGRAM (IBM 3090)
 QC0560 MOPAC VER 4.0: A GENERAL MO PROGRAM (IBM 3090 VF)
 QC0561 MOLDYN: MOL. DYN. MODELLING FOR NMR SPIN-RELAXATION (IBM)
 QC0562 A GENERAL FITTING PGM FOR RESOLUTION OF COMPLEX PROFILES
 QC0563 CLAMPS: CLASSICAL MANY PARTICLE SIMULATOR
 QC0564 HONDO5: AB INITIO HF SCF PROGRAM (ETA/10 VER.)
 QC0565 BOXTRAN: SOLUTIONS OF THE 1D SCHROEDINGER EQUATION
 QC0566 USURF: GENERATION OF SMOOTH MOLECULAR DOT SURFACES
 QC0567 SEA: STERIC & EL.STATIC ALIGNMENT MOL. SUPERPOSITION (VAX)
 QC0568 PDM88: NET ATOMIC CHARGES / SITE MULTIPOLES FROM MOL.EL.POT.

QC0569 DNMR5: NMR PGM FOR UNSATURATED EXCHANGE-BROADENED BANDSHAPES
 QC0570 ENERO: SHORTEST DISTANCE FOR RODS MODELLING LINEAR MOLECULES
 QC0571 EXTENDED HUCKEL MOLECULAR, CRYSTAL & PROPERTIES PACKAGE
 QC0572 AMPGAUSS: AMPAC TO GAUSSIAN INTERFACE PROGRAM
 QC0573 CONSTRAINED ITERATIVE SPECTRAL DECONVOLUTIONS (2D-NMR)
 QC0574 PFIIP: PORTABLE IMPLEMENTATION OF PRISM
 QC0575 MOLGRATH: MOLECULAR GRAPHICS TOOL FOR THEORETICAL CHEMISTRY
 QC0576 GENERAL VIBRATIONAL ANALYSIS SYSTEM
 QC0577 CRYSTAL 88: AB INITIO LCAO-HF PROGRAM FOR CRYSTAL SYSTEMS
 QC0578 CMAP: CHEMICAL MODELING APPLICATIONS PLATFORM
 QC0579 LPT: LINEAR PREDICTIVE SPECTRAL ANALYSIS
 QC0580 MELDF: GAUSSIAN-BASED SYSTEM FOR AB INITIO CALCULATIONS
 QC0581 MOPAC VERSION 5: SCALAR VERSION FOR IBM 3090
 QC0582 PENTE: MOLECULAR OPTIMIZATION DRIVER
 QC0583 MOLECULE: GKS GRAPHICAL DISPLAY PACKAGE
 QC0584 GEOMOS: SOLVENT EFFECTS AND SOLID SURFACE ADSORPTION

③のNUMPACプログラムは二宮市三教授（中部大）、秦野脩世助教授（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861本である。

以下、表3. 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3. 1. 2 分子化学プログラムパッケージ欄

```

==== 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
004 FLAPW SELF-CONSISTENT ENERGY BAND CALCULATION BY FLAPW MEHOD

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 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 : B110
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 PSPCS 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	PRTXYZ	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	PRTXYZ	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	VREPR	FORTRAN 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	NIGER	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 PSPCS 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	DIAINT	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 EXCHNGE 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 ASYM. 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	DIAINT	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 ISAAH 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	FEMSE2	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.
048	GAUS86	GAUSSIAN 86:AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS
049	CRYS88	CRYSTAL 88: AB INITIO LCAO-HF PROGRAM FOR CRYSTAL SYSTEMS

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
009	FLAPW	SELF-CONSISTENT ENERGY BAND CALCULATION BY FLAPW MEHOD

**** TOTAL NUMBER OF UNIQUE PROGRAMS ****
 146

**** 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	CRYS88
CSACST	CVOA	DIAINT	DIAVIB	DISMAP	DISPL3	DNMR3
DRAWDG	DVSCAT	EHTB	EMOR1	ENVLOP	EXAFS	FCBSD
FCMP	FEMSE2	FLAPW	FLOW	FORDAP	FPTNMR	FPTSPN
GAMESS	GAUS76	GAUS80	GAUS82	GAUS86	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	MDANO3	MDP	MDSALT	MELD	MICA3
MINDO3	MMIPI1	MMIPI3	MMIY3	MM2	MNDOC	MNDOM
MOLSCCT	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	SCMOLX	SERIES	SFORT	STEREO	STERIC	STINGY
SUPPOS	TASP	TSS517	UNICS3	VREPRT	WIGNER	

IMS COMPUTER CENTER: LAST UPDATE = 90-06-14

3. 2 データベース開発状況

データベースとして以下の7件を登録し、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)

3. 3 電子計算機センター運営委員会

3. 3. 1 第18回電子計算機センター運営委員会議事報告

第18回電子計算機センター運営委員会が平成元年8月17日(木)に開かれた。以下に議事の要約を掲載する。

1. 前回議事録朗読
2. センターからの報告

- (1) センターの北浦助教授の着任の紹介が行われた。

前回議事録に記載のあったシステム変更, RJE移設, CVCE電源入れ替え, 学情ネット加入, PSIプログラム, FORTRAN (22-00)の各項目に関して経過報告があった。

- (2) 平成元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。電力使用量, 稼働時間などだいたい昨年並みであるがM680HとS820/80の負荷バランスが今年の1月頃よりよくなってきたため両プロセッサが効率よく使われているとの説明があった。

次に, 分野区分別のCPU使用状況が示された。このなかでCPU使用時間が所外ではM680H>S820, 所内ではS820>M680Hとなっている点に関して説明があった。これは所内では水のシミュレーションやGAUSSIANプログラムへのKOTOの採用, SCF計算のベクトル化などによりS-820/80の利用が有利になってきたためである。ベクトル化GAUSSIANはライブラリとして一般公開を準備中との報告もあった。続いて回線によるTSSの利用状況が示された。それによると7月から正式サービスを始めたN1ネットワーク経由での利用の伸びが著しく, 逆にDDX回線経由, VADIC型モデルによる利用量が大幅に減少している。300bpsとVADIC型1200bpsの電話回線は遠からず廃止したいとの希望が述べられ了承された。

(3) 平成元年度予算と使途予定

電算経費、附属施設経費の配当額およびその使途が資料に基づいて示された。前年度の電源改修などによる借金で520万円支出をはじめとして各支出予定項目が説明された。これによると今年度も運営費はかなり窮屈な見通しである。

(4) 平成元年度前期計算時間配当状況、追加状況

CPU時間の利用区分別配当追加状況が一覧表によって示された。8月7日現在での三分野合計では202件、626人、総申請時間12234時間、許可時間10224時間となっている。所外平均許可率は80%である。

また今年度の各プロジェクトの申請と許可状況および追加状況が一覧表で示された。8月7日現在で追加申請合計は401時間、許可は359時間となっている。

続いて前回(第17回)委員会で注意の手紙を発することになっていた七プロジェクトに対して送付された文面が資料として示され、説明があった。また前回委員会で低い点数でも申請時間が大きいと実質的にはかなりの配分をもらえてしまうとして問題になった、評価点数に対する許可時間の計算式の見直しの結果が説明された。線形でない計算式を採用したので、審査の実感により近くなったとして了承された。

(5) 平成元年度前期施設利用旅費割り当て状況

旅費の割当方針について従来、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ってきたことが説明された。

前期の割当一覧が示され説明があった。前期は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227,040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) ライブラリプロジェクト開発状況

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。FORTRANの22-00版への対応状況が説明された。GAUSSIAN86のベクトル版(KOTO対応)は近く登録公開される予定である。またGAUSSIAN88の取扱いとコンバージョンの現状に関して説明があった。

(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、今年度開発計画としてQCLDB, FCDBの2件に開発を援助しているとの報告があった。

(8) 平成元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11件)と個々の旅費、謝金の割当状況が資料に基づいて報告された。また謝金旅費については今のところ余裕があるのでその有効な使い方

に対するアイデア、意見をお聞かせ願いたいとの申し出が委員にたいしてなされた。

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状況が示された。今年度の相談員は一名が確保できた。

3. 所長報告

4. 平成元年度後期および平成2年度計算機運用方針

次の各項目について資料に基づいた説明があった後、議論が行なわれ了承された。

- (1) FORRAN (23-00)の機能、テスト状況、性能について報告があり、ユーザ公開の見通しが述べられた。

また委員会からFORRANの実行性能はコンパイルオプションの指定によってかなり変化するようなので、最適な指定の仕方についてのガイドが必要であるとの意見が出された。この点に関しては今後速報などで通知していくようにしたいとの回答があった。

- (2) 学情網ネットワークの運用サービス状況および今後の予定が述べられた。N1-TSSの正式サービス(7月)以来の使用量は1ヶ月1448件にも上り、9600bpsの回線スピードでは対応しきれない見通しであり、本年度中に回線スピードを48Kbpsに置き換える方針が示された。このために新たに必要となる機器、機器置き換えにともなう代替返却機器を検討していることや、回線料の増額への対応などについても説明があった。

またN1-RJEのサービスについては、機密保護の点で重大な問題があり、その導入を行わないとのセンター提案があり、RJE機能の代替としてはN1-TSSとファイル転送機能の併用で可能であるとの見通しなどもあり、了承された。

- (3) M680へのBITNETの導入に関して検討しているとの報告があり、その機能概要、導入方法、接続形態、必要となる機器について説明があった。
- (4) クーリングタワー2系統の置き換えについて説明があった。センター発足以来10年にわたって稼働してきたクーリングタワーが寿命となってきたので今回営繕要求により取り替えることとなった旨が報告された。

5. 平成元年度後期計算機時間配分表

平成元年度後期のCPU時間配分案が資料に基づいて説明・検討された。

6. 平成元年度後期利用申請審査

協力研究後期15件、施設利用(B)後期1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。この結果次のプロジェクトには以下の処置を行なうこととした。また委員から協力研究では小口の申請は審査にかける必要が無いのではないかと意見が出され、討論された結果、10時間以内の申請に対しては、センター長の判断で問題がない場合、各個に採点はせず一律に100%を与えることで了承され、今回から適用することになった。ただ

し、重複などの問題があるときは別途取り上げるようになった。

(協力研究後期)

- A P氏のプロジェクトと重複が認められるため、A氏の許可点数から21時間を減らすこととした。この旨を手紙で通知することになった。
- B 前回に続いて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。またその返事を求める旨も記すことになった。但し点数は審査通りで許可することとした。
- C 施設利用と重複がみとめられるので2時間を減らすことになった。この旨を手紙で通知することになった。
- D 施設利用と重複が認められるので2時間を減らすことになった。この旨を手紙で通知することになった。

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。最後に委員長から今後の審査について手順の説明があり、各委員に対して協力のお願いがあった。

3. 3. 2 第19回電子計算機センター運営委員会議事報告

第19回電子計算機センター運営委員会が平成2年3月7日(水)に開かれた。以下に議事の要約を掲載する。

1. 前回議事録朗読

2. センターからの報告

- (1) センターの人事異動およびその予定が述べられた。
- (2) 平成元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。今年度の消費電力量がかなり減少している理由はCVCF電源を運転負荷のない瞬低対策装置へ置き換えたためであるとの説明があった。運営費の面から、使用電力料金についてはまだ20%位余裕があるとの判断が述べられた。またCPU時間の比較からM680HとS820の負荷バランスではS820が定常的にM680を上回って使われるようになってきていることが報告された。

次に、分野区分別のCPU使用状況、所外からのTSSの利用状況が示された。300bpsとVADIC型モデムによる1200bps電話回線サービスは利用がほとんどなくなっており、N1ネットワーク経由に移行してきているため本年3月一杯で廃止したい旨が報告された。また学情ネットワークに関して3月中旬に通信速度を9600bpsから48Kbpsに変更する予定であること、平成3年度には岡崎にノードが設置される予定があることなどが報告された。

(3) 平成元年度予算と使途

電算経費、附属施設経費の予算額、および追加配当額などの総枠が示され、その使途が資料に基づいて説明され了承された。

(4) 平成元年度計算機時間配当状況、追加状況

利用区分別のCPU時間の割り当て申請、追加申請と許可状況のまとめが一覧表によって示され承認を受けた。

続いて前回（第18回）委員会で警告書簡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および回答が示された。

次に、前回委員会後の追加申請にたいする審査の結果17件に対する評価状況が示され評点通りで承認された。

(5) 平成元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221,950円が割り当てられた。後期は13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203,900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った旨が報告された。

(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。

(8) 平成元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19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が資料に基づいて示された。

3. 平成2年度 計算機運用方針案

(1) 利用点数の変更

M680に較べてS820の負荷が大きくなってきていることに伴い、両プロセサの負荷バランスをとるためにM680の課金点数を1割下げてCPU1秒あたり0.10から0.09に設定したいとの案がセンターから示され討論の結果了承された。

- (2) F D D I 光ループを基幹とする L A N の構築
従来の 32Mbps H8644 光ループに替わって 100Mbps F D D I 光ループを導入する計画およびそのメリットが述べられた。
- (3) ワークステーションの導入
標準的なワークステーション 5 種類の導入計画と用途の説明がなされた。
- (4) 光磁気ディスクシステムの導入
大容量で書換え可能な光磁気ディスクシステムの紹介と今秋予定の導入計画が述べられた。
- (5) ディスクの運用
保存データセット, 短期データセット, 作業データセット, パラレルデータセット, 光ディスクの現状の総容量と割当方針の説明がなされ, 各プロジェクトへの割当状況が示された。
- (6) B I T N E T の導入
日立の大型計算機の下で国際メールシステム B I T N E T を導入サービスする計画が述べられた。
- (7) 動画像出力システムの導入
S 820/80 の拡張記憶を利用する動画像出力システムの機能と導入予定が述べられた。

4. 平成 2 年度計算機時間配分表

平成元年度の C P U 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% とすることになった。通年許可目標時間は合計 13295 時間 (所内 4888 時間, 所外 8407 時間) であった。

許可所内外比は 36.8:63.2 となっている。

5. 平成元年度利用申請審査

前回決定したような小口 (10 時間以内) の協力研究課題は審査を行わずセンター長の判断で一律 100% が与えられた。それ以外のものについて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 7 件, 施設利用 (B) 89 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, 評点の低いものに重点をおいて議論された。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。

(協力研究前期) A (施設利用 B) B, C, D, E, F, G	}	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になった。但し点数は審査通りで許可することになった。
--	---	---

H……………研究分野が分子科学かどうか問題があるため、次回申請からは分子科学であることが明確に分かるように記載することを含めたコメントを手紙で通知することになった。

I……………J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12%を減らすことになった。この旨を手紙で通知することになった。但しJ氏のプロジェクトはそのままとする。

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。

3.4 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にしている。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9回大型計算成果発表

『使用プログラムの特徴と研究成果の報告』

日 時：平成元年8月17日（木） 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 塚田 捷, 島 信幸, 田仲田喜夫, 影島博之, 常行真司 (東大 理)

表面・界面・クラスターの電子構造とダイナミクス

10:05 円谷和雄, 渡辺 誠, 近藤鋭治, 青木 優, 渡辺圭一, 高木伸一, 小高秀文,

中田慎二, 馬場秀成 (明治大 工)

分子動力学法による過冷却液体の構造変化

10:35 寺倉清之, 石田 浩, 滝沢 聡, 小林一昭 (東大 物性研)

固体表面と遷移金属の電子状態

—金属表面でのアルカリ吸着およびSiO₂の高圧相—

11:05 山口 兆 (阪大 基礎工)

金属酸化物のCASSCF CI計算

—磁氣的相互作用のab initio計算—

11:35 里子允敏, 久保康則 (日大 文理)

分子, 固体および表面の電子状態の理論的研究

—R_B (R=L a, C e, P r, N d) の陽電子消滅—

12:05 平尾公彦, 丹羽 淳, 茂木孝一 (名大 教養), 和佐田裕昭, 小畑繁樹 (名大 理)

分子の電子状態と化学反応に関する研究

4. 平成元年度稼働状況および利用者数

4. 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	ユーザ数	時 間			点 数	
				申 請	許 可	実 績	許 可	実 績
分子科学	施設利用	156	503	8,168	6,660	5,444	2,664,000	1,959,708
	協力研究	26	26	1,041	743	578	297,200	208,096
	所 内	51	143	5,398	4,862	4,597	1,944,800	1,654,971
生 理 学	施設利用	3	6	22	19	9	7,600	3,271
基礎生物学	施設利用	2	9	60	58	50	23,200	18,174
	所 内	1	3	5	5	0	2,000	27
合 計		239	690	14,694	12,347	10,678	4,938,800	3,844,247

(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。

4. 2 システム稼働状況

年 月	稼 働 時 間		保 守 時 間
	M-680H	S-820/80	
平成元/4	496 : 30	493 : 30	15 : 30
5	500 : 00	408 : 00	15 : 00
6	474 : 30	470 : 30	26 : 30
7	492 : 30	490 : 30	12 : 30
8	490 : 00	487 : 00	14 : 00
9	409 : 00	406 : 00	12 : 00
10	411 : 00	397 : 00	13 : 00
11	470 : 00	468 : 00	16 : 00
12	277 : 00	276 : 00	8 : 00
平成2/1	528 : 30	525 : 30	12 : 30
2	465 : 30	469 : 30	12 : 30
3	576 : 30	574 : 30	10 : 30
計	5591 : 00	5466 : 00	168 : 00

4. 3 CPU使用時間

(M-680H CPU使用時間)

(月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(合計)
04	8:29:04	43:19:27	118:42:17	152:10:33	0:00:04	0:00:00	14:34:20	5:52:53	4:25:45	6:27:23	354:01:46
05	7:06:49	45:23:46	115:15:33	119:56:47	0:00:00	0:00:00	15:02:54	3:47:04	4:46:09	3:14:09	314:33:11
06	5:31:50	31:46:09	114:24:25	168:48:46	0:00:00	0:00:00	20:15:39	0:31:27	0:29:54	2:06:47	343:54:57
07	5:54:26	37:55:55	116:49:55	204:17:47	0:00:00	0:18:47	18:02:26	0:27:52	1:11:10	2:49:50	387:48:08
08	4:27:10	29:46:25	103:02:31	187:21:27	0:00:00	0:00:00	18:00:13	0:24:41	0:12:00	1:56:57	345:11:24
09	5:42:25	26:45:28	94:46:31	111:37:45	0:00:00	0:00:00	18:32:32	2:46:00	2:49:33	2:12:49	265:13:03
10	6:22:36	19:30:57	77:27:16	98:36:16	0:00:00	0:00:00	18:18:35	2:32:12	0:32:36	4:07:35	227:28:03
11	7:34:16	23:17:29	88:58:18	95:48:52	0:00:00	0:00:00	18:50:22	1:30:49	3:23:52	3:21:21	242:45:19
12	9:40:24	30:03:47	58:56:27	75:16:32	0:00:00	0:00:00	10:53:01	13:49:52	2:43:13	1:08:07	202:31:23
01	6:31:32	36:41:43	168:28:06	152:43:42	0:00:00	0:00:00	14:51:27	0:08:16	1:15:37	3:34:59	384:15:22
02	7:21:36	29:37:53	149:24:08	100:23:48	0:00:00	0:00:00	15:01:09	15:06:35	1:30:24	7:02:23	325:27:56
03	7:48:40	33:58:39	213:25:57	187:25:46	0:00:00	0:00:00	21:11:43	1:30:00	4:22:06	5:49:09	475:32:00
(合計)	82:30:48	388:07:38	1419:41:24	1654:28:01	0:00:04	0:18:47	203:34:21	48:27:41	27:42:19	43:51:29	3868:42:32

(S-820/80 CPU使用時間)

(月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(合計)
04	3:03:22	26:48:34	84:36:10	136:09:12	0:01:23	0:00:00	0:18:32	0:00:00	12:32:30	0:00:00	263:29:43
05	3:07:48	23:03:55	113:12:09	200:01:14	0:00:16	0:00:00	0:45:36	0:00:00	18:36:02	0:00:00	358:47:00
06	6:03:17	37:14:41	110:42:31	137:14:03	0:01:25	0:00:00	0:26:17	0:00:00	3:03:22	0:00:00	294:45:36
07	3:16:55	34:57:41	120:06:33	194:27:50	0:00:07	0:00:00	0:45:21	0:00:00	0:26:55	0:00:00	354:01:22
08	2:30:03	27:46:35	149:53:34	196:45:11	0:02:21	0:00:00	0:39:14	0:00:00	3:43:42	0:00:00	381:20:40
09	5:19:32	31:42:58	92:31:25	176:26:20	0:00:22	0:00:00	0:30:21	0:00:00	1:07:09	0:00:00	307:38:07
10	1:21:00	13:47:53	109:10:00	139:55:46	0:00:00	0:00:00	0:08:25	0:00:00	12:10:37	0:00:00	276:33:41
11	4:28:01	41:16:04	155:48:01	204:59:20	0:00:00	0:00:00	1:11:06	0:00:00	0:27:58	0:00:00	408:10:30
12	2:04:29	23:10:01	79:19:11	108:46:00	0:00:00	0:00:00	0:09:12	0:00:00	0:02:39	0:00:00	213:31:32
01	4:22:25	32:13:13	139:34:42	206:28:07	0:00:00	0:00:00	0:01:29	0:00:00	1:22:28	0:00:00	384:02:24
02	3:37:56	31:29:34	82:57:51	215:38:37	0:00:00	0:00:00	0:01:09	0:00:00	0:43:28	0:00:00	334:28:35
03	4:44:44	32:53:17	128:08:10	284:31:11	0:00:00	0:00:00	0:02:22	0:00:00	0:52:14	0:00:00	451:11:58
(合計)	43:59:32	356:24:26	1366:00:17	2201:22:51	0:05:54	0:00:00	4:59:04	0:00:00	55:09:04	0:00:00	4028:01:08

(S-820/80 VPU時間)

(月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(合計)
04	0:59:36	7:36:28	30:35:38	34:51:16	0:00:10	0:00:00	0:03:05	0:00:00	0:30:06	0:00:00	74:36:19
05	0:22:00	3:09:12	22:13:13	26:20:28	0:00:00	0:00:00	0:02:59	0:00:00	3:04:39	0:00:00	55:12:31
06	1:28:55	9:30:59	25:27:03	18:57:54	0:00:00	0:00:00	0:08:15	0:00:00	0:00:00	0:00:00	55:33:06
07	0:19:23	7:01:56	27:36:38	56:10:14	0:00:00	0:00:00	0:11:04	0:00:00	0:00:00	0:00:00	91:19:15
08	0:25:37	7:34:36	24:33:50	39:26:40	0:00:00	0:00:00	0:01:17	0:00:00	0:11:07	0:00:00	72:13:07
09	0:33:48	7:06:06	23:24:46	34:31:05	0:00:00	0:00:00	0:01:53	0:00:00	0:07:14	0:00:00	65:44:52
10	0:11:18	2:50:04	30:19:06	55:21:19	0:00:00	0:00:00	0:00:20	0:00:00	1:36:54	0:00:00	90:19:01
11	0:45:06	12:18:25	48:53:47	96:46:23	0:00:00	0:00:00	0:03:15	0:00:00	0:00:32	0:00:00	158:47:28
12	0:32:00	6:09:32	26:12:28	54:25:52	0:00:00	0:00:00	0:00:22	0:00:00	0:00:00	0:00:00	87:20:14
01	1:08:30	8:18:18	58:04:49	78:14:12	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:16:22	0:00:00	146:02:11
02	1:19:54	10:28:56	25:00:21	114:44:55	0:00:00	0:00:00	0:00:09	0:00:00	0:18:49	0:00:00	151:53:04
03	0:48:37	9:41:51	36:31:16	86:04:58	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:16	0:00:00	133:06:58
(合計)	8:54:44	91:46:23	378:52:55	695:55:16	0:00:10	0:00:00	0:32:39	0:00:00	6:05:59	0:00:00	1182:08:06

4.4 ジョブ処理件数

(M-680H ジョブ処理件数)

(月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(合計)
04	3,212	1,643	1,021	311	5	0	9,943	539	689	378	17,741
05	4,985	2,016	2,652	288	0	0	8,297	399	725	249	19,611
06	3,166	1,719	1,130	370	0	0	9,603	352	260	183	16,783
07	4,152	1,768	1,081	424	9	5	9,765	274	342	237	18,057
08	2,993	2,144	994	394	0	0	9,448	413	346	110	16,842
09	3,383	1,674	951	375	0	0	9,339	178	234	126	16,260
10	3,636	1,303	956	301	0	0	8,742	140	176	163	15,417
11	4,114	1,561	860	275	0	0	9,899	118	209	131	17,167
12	3,313	1,179	510	144	0	0	6,601	61	58	42	11,908
01	3,735	1,352	1,180	299	1	0	9,817	209	180	90	16,863
02	4,149	1,424	1,110	262	0	0	9,394	182	241	161	16,923
03	4,248	1,601	1,226	341	0	0	11,540	203	227	272	19,658
(合計)	45,086	19,384	13,671	3,784	15	5	112,388	3,068	3,687	2,142	203,230

(S-820/80 ジョブ処理件数)

(月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(合計)
04	1,176	1,030	968	403	12	0	103	0	815	0	4,507
05	1,219	1,171	871	374	1	0	102	0	427	1	4,166
06	1,559	1,592	839	404	1	0	123	0	137	1	4,656
07	981	1,432	945	363	1	0	71	0	53	0	3,846
08	776	1,350	1,245	398	1	0	94	0	105	0	3,969
09	1,321	1,648	985	412	1	0	63	0	78	0	4,508
10	822	1,174	1,156	484	0	0	49	0	105	0	3,790
11	1,171	1,958	1,199	537	0	0	66	0	32	0	4,963
12	888	1,031	647	233	0	0	15	0	48	0	2,862
01	1,353	1,346	814	466	0	0	34	0	166	0	4,179
02	1,310	1,299	695	288	0	0	15	0	197	0	3,804
03	1,776	1,641	1,011	400	1	0	34	0	75	0	4,938
(合計)	14,352	16,672	11,375	4,762	18	0	769	0	2,238	2	50,188

4.5 所外ネットワーク・通信回線の利用状況 (セッション数)

4.5.1 DDXパケット網の利用状況

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月
回線1	875	596	629	478	317	314	272	318	216	634	534	528
回線2	475	399	450	194	118	214	149	137	105	194	228	215
回線3	288	206	258	71	37	109	65	56	45	30	48	95
回線4	149	80	124	11	8	27	9	12	7	3	4	11
回線5	61	37	36	1			1	3	2			4
回線6	21	2	12									1
回線7	10		2									
合計	1879	1320	1511	755	480	664	496	526	375	861	814	854

4. 5. 2 300bps電話回線の利用状況

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月
回線1	77	68	59	66	21	1		3	3	4	1	5
回線2	2	2	1	1	1						1	
合計	79	70	60	67	22	1	0	3	3	4	2	5

4. 5. 3 1200bps電話回線 (VADIC) の利用状況

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月
回線1	96	103	57	10		1	1	4	1	9	4	51
回線2	2	5	2							1		
合計	98	108	59	10	0	1	1	4	1	10	4	51

4. 5. 4 1200bps電話回線 (V. 2 2) の利用状況

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月
回線1	611	684	487	391	370	279	270	301	147	351	264	349
回線2	125	166	109	95	49	77	46	44	33	37	57	74
合計	736	850	596	486	419	356	316	345	180	388	321	423

4. 5. 5 N1ネットワークの利用状況

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月
北海道大学				187	306	398	285	185	110	242	169	205
東北大学				36	16	9	19	39	58	88	16	9
東京大学				474	330	720	482	939	800	1144	1340	1330
東京大学1				107	97	187	27	69	64	126	97	272
名古屋大学				247	169	154	98	195	357	213	243	347
京都大学				291	391	697	511	631	507	730	554	637
大阪大学				9	28	205	285	396	329	282	249	175
九州大学				95	50	33	90	45	42	52	92	53
学情センター				2	3	2		3	20	28	23	15
埼玉大学						1						
奈良女子大学					13	15	160	49	128	90	54	50
広島大学						206	156	122	92	101	62	75
大阪府立大学												12
合計	0	0	0	1448	1403	2627	2113	2674	2517	3112	2931	3181

4. 6 所内ネットワーク・通信回線の利用状況 (セッション数)

以下の統計には基生研VAXへの接続は含まない。

4. 6. 1 DPBX回線 (9600bps)

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月
回線1	123	94	168	215	220	197	169	148	62	92	99	420
回線2	151	122	111	157	138	124	166	152	97	41	60	115
回線3	99	87	64	101	107	101	131	158	133	106	117	37
回線4	38	37	84	135	88	77	62	137	49	23	22	108
合計	411	340	427	608	553	499	528	595	341	262	298	680

4. 6. 2 構内ポートセレクト回線 (9600bps)

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月
回線1	401	370	403	445	519	431	318	409	259	488	284	623
回線2	325	307	304	336	384	310	277	303	220	338	287	436
回線3	217	187	164	20	250	181	191	245	147	209	161	233
回線4	159	127	134	137	107	144	124	173	124	131	69	104
回線5	90	59	76	52	69	74	83	110	69	63	31	16
回線6	35	20	41	19	37	30	41	56	30	26	18	3
回線7	10	10	14	7	10	5	15	41	23	15	2	1
回線8	2	8	2	11		1	2	6	4	6		
合計	1239	1088	1138	1207	1376	1176	1051	1343	876	1276	852	1416

4. 6. 3 構内ポートセレクト回線 (1200bps)

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月
回線1	1			1	7							
回線2	7		1	9				2			1	
回線3	1				1							
回線4	1	1	1	2							1	
回線5	14	16	19	19	22	15	9	50	9	49	15	8
合計	24	17	21	31	30	15	9	52	9	49	17	8

4. 6. 4 所内LAN (H8644光ループネットワーク+ethernet系)

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月
回線1	177	148	149	102	194	96	53	100	87	73	91	112
回線2	42	34	43	15	10	4	3	22	21	10	15	10
回線3	4	1	2					1	3			
合計	223	183	194	117	204	100	56	123	111	83	106	122

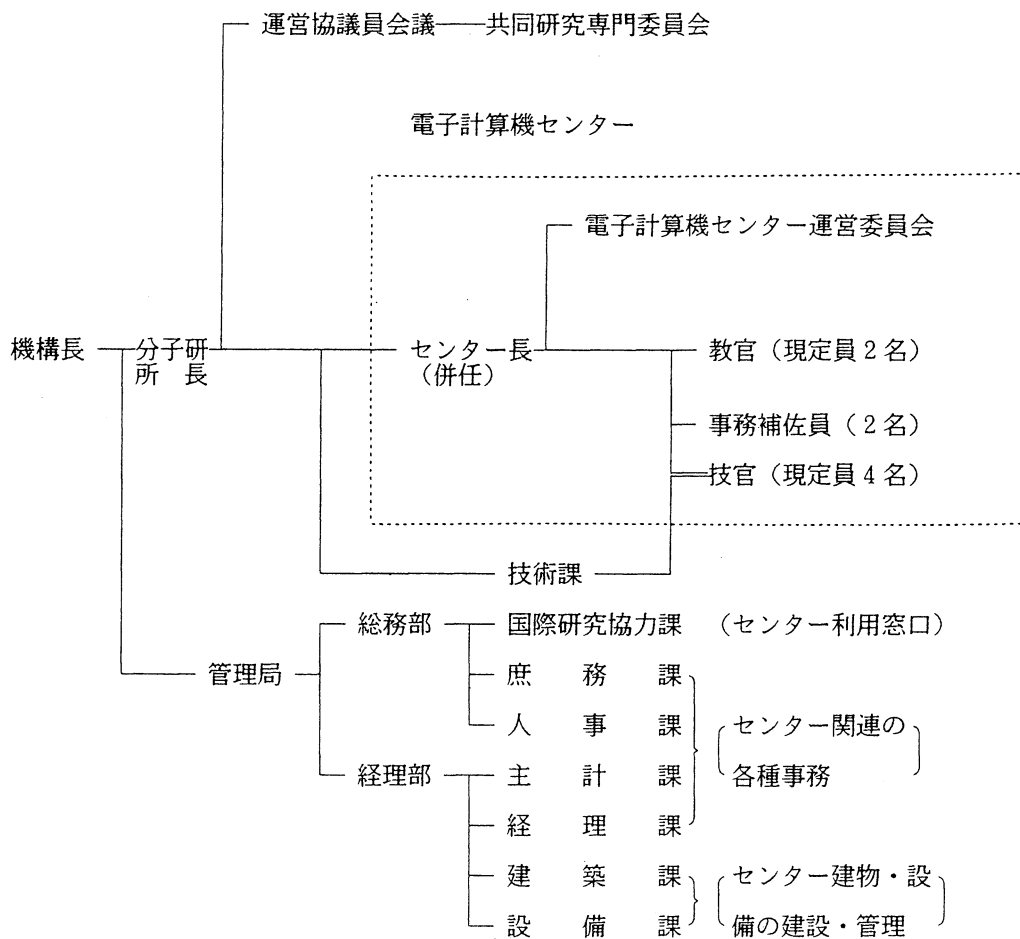
5. 資 料

5.1 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5.2, 5.3, 5.4を参照されたい。



5. 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。

5. 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ものに出席を求め、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。

5. 4 電子計算機センター運営委員会委員

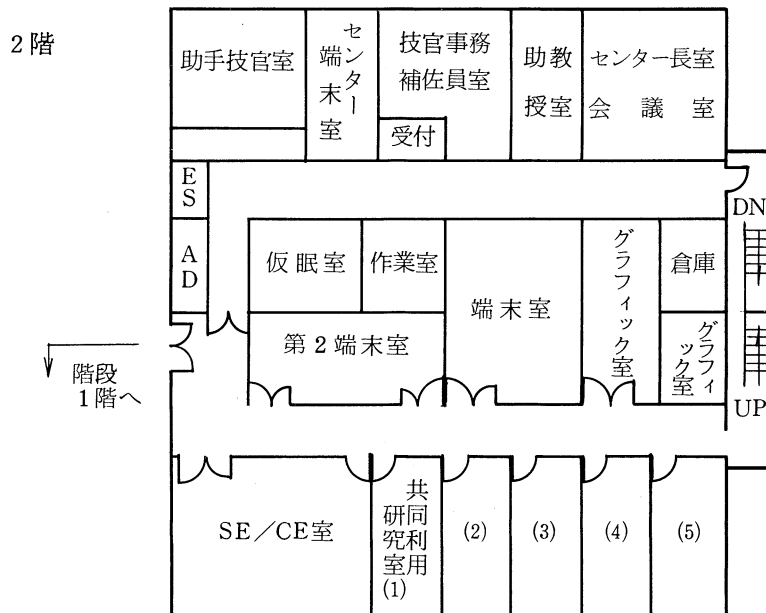
(平成元年度～2年度)

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

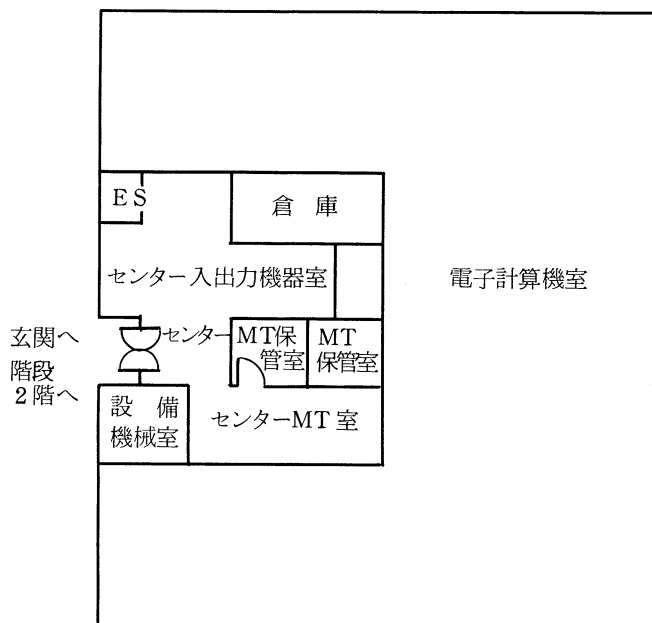
5. 5 電子計算機センター職員 (平成2年7月現在)

諸熊奎治	センター長 (併任)
北浦和夫	助教授
長嶋雲兵	助手
山本茂義	助手 (平成2年1月助手, 4月中京大助教授に転出)
伊奈諭	技官 (班長)
西本史雄	技官 (係長)
本多一彦	技官 (平成2年4月採用)
手島史綱	技官
加藤景子	事務補佐員 (平成2年4月辞職)
安達奈美	事務補佐員 (平成2年1月辞職)
加納聖子	事務補佐員 (平成2年4月採用)
石井教子	事務補佐員 (平成2年5月採用)

5.6 建物図



1階



5.7 応用プログラム相談員一覧

沢 辺 恭 一	分子研受託大学院生	平成元年4月—平成2年5月
藤 井 俊 明	総研大大大学院生	平成2年4月—
高 田 彰 二	総研大大大学院生	平成2年4月—

5. 8 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 運 転 方 式		M-180 2台	M-180 2台	M-200H M-180 200H無人	M-200H M-180 疎結合 無 人	M-200H 2台 疎結合 無 人	同57年度
		3カ月 有人	9月から無人	180 有人			
プロジェクト数		63	176	192	183	198	199
利 用 者 数	機 構 内 a	48	70	69	91	94	102
	機 構 外	107	254	325	330	375	426
合 計		155	334	394	421	469	528
稼働時間		1,087	6,071	6,553	6,721	6,305	6,170
利 用 申 請 時 間	申 請 許 可	(200H基準)					
			929	4,666	11,033	10,230	11,938
		816	3,171	7,427	8,306	10,141	10,091
総使用CPU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
センター使用論文数 d		0	24	93	118	190	185

		59年度	60年度	61年度	62年度	63年度	平成元年度
計算機システム 運 転 方 式		同57年度	(~11月) 同57年度 (1月~)M-680H S-810/10	M-680H S-810/10 疎結合 無 人	M-680H (~1月)S-810/10 (2月~)S-820/80 疎結合	M-680H S-820/80 疎結合	同63年度
プロジェクト数		207	226	234	213	231	239
利 用 者 数	機 構 内 a	110	130	141	143	137	146
	機 構 外	446	464	496	520	515	544
合 計		556	594	637	663	652	690
稼働時間		6,316	6,016	6,368	6,444	6,091	5,694
利 用 申 請 時 間	申 請 許 可	(200H基準)			(M680-H基準)b		
			14,799	15,536	33,832/8,458*	9,880	12,439
		10,768	12,080	28,184/7,046*	7,978	10,418	12,347
総使用CPU時間 c		8,508	12,770	20,092/5,023**	6,624*	7,872	8,300
ジョブ処理件数 c		226,727	274,431	289,915	278,956	278,104	253,418
ライブラリプログラム新規登録数		118	160	39	4	7	3
データベース新規登録数		0	1	0	1	0	0
センター使用論文数 d		202	206	237	223	211	218

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4.1項を参照。

c : ここでの値はCPU時間、件数ともにライブラリ開発、センター業務使用分などのすべてを含む。

d : センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたもの。

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-680H基準