

I 部

目 次

寄語	新たな発展を！	分子研教授 中 村 宏 樹	1
1.	電子計算機センターでの1年半	青 柳 睦	2
2.	スーパーコンピュータワークショップの活動	-----	4
3.	計算機システムの運用および使い方	-----	6
	3. 1 システムの構成と特徴	-----	6
	3. 2 ジョブクラスの構成	-----	9
	3. 3 利用課金点数	-----	10
	3. 4 通信・ネットワーク	-----	11
4.	一般報告	-----	17
	4. 1 分子研ライブラリプログラムの収集と開発	-----	17
	4. 2 データベース開発状況	-----	28
	4. 3 大型計算成果発表会	-----	30
5.	平成4年度稼働状況および利用者数	-----	31
	5. 1 利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数	-----	31
	5. 2 システム稼働状況	-----	31
	5. 3 CPU、VPU使用時間	-----	32
	5. 4 ジョブ処理件数	-----	34
	5. 5 所外ネットワーク・通信回線の利用状況	-----	35
	5. 6 所内ネットワーク・通信回線の利用状況	-----	36
	5. 7 T I S N 経由の利用状況	-----	37
6.	資料	-----	38
	6. 1 センター関連組織	-----	38
	6. 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	-----	39
	6. 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	-----	40
	6. 4 電子計算機センター運営委員会委員	-----	41
	6. 5 電子計算機センター職員	-----	42
	6. 6 応用プログラム相談員	-----	42
	6. 7 建物図	-----	43
	6. 8 マニュアルの紹介と購入方法	-----	45
	6. 9 利用者数とCPU時間の推移	-----	48
7.	ニュースシステムの運用開始について	-----	50
8.	グループにおける利用点数(課金)、ファイル容量の管理	-----	67



## 新たなる発展を！

分子科学研究所 中村宏樹

新聞紙上を賑わした理不尽とも言える政治問題化の騒動を経て、昨年、分子研電算センターへの日本電気製新スーパーコンピュータ SX-3/34R の導入が決り、本年1月の搬入とともにその後順調に運用が進められています。これは、岡崎国立共同研究機構長、同局長、分子科学研究所長、電算センター職員及び管理局職員の皆様方の献身的努力のたまものです。私自身も、本当に感無量であります。

今年度に入り、岩田新センター長の下汎用機の更新手続きも順調に進み、平成7年1月からは日本電気製の新機種及びIBMワークステーションを基体とする全く新しい汎用高速計算機システムが導入され、分子研電算センターのハード的機能は飛躍的に増大される事となりました。研究内容（計算内容）の違いによる電算機システムの有効な使い分け・多様な使い方が出来る様になります。分子研電算センター及びその利用者にとって正に一大転換期を迎えていると言っても過言ではないのではないのでしょうか。

この機会に、是非とも分子科学の各分野で、利用者の1人1人が世界をリードしていくのだという意気込みを持って新しい研究プロジェクトを立案し実行して行っていただきたいと思えます。電算センター側も、新しい優れた研究プロジェクトを支援する為の思い切った特別施策を考えていかれるでしょう。前号のセンターレポートの加藤教授の寄語標題の如く、正に「量とともに新しい質をもたらすブレークスルー的研究」を生み出して育てていく必要があります。いわゆるパッケージプログラムによる応用的研究も大事で一層推進されてしかるべきだと思いますが、それにも増してやはり新しい独自プログラムの開発によるブレークスルーを奨励していくべきでしょう。これには利用者が開発しているプログラムに関する情報交換（機密の問題が生じない範囲での）あるいはその為の情報ライブラリーの様なもの

を設けるのも良いかもしれません。また、全体のシステムを有効に利用していく為には、色々と模索も必要になると考えられます。センター職員も一層努力されるとは思いますが、とに角職員の数に限られており、あまり多くの負担をかける訳にはいきません。利用者間の情報交換・交流協力をより一層効率良く行える様に工夫するとともに、センターを通じてメーカー側への要望もどんどん出していく様にすると良いと思えます。何はともあれ、利用者の1人1人が分子科学理論と計算の新時代を日本から開くのだという意気込みで研究を推進していく事が一番肝心だと思います。

最後に、分子研のこの計算機資源を世界的規模で有効利用すること、特にアジアの科学研究水準を高揚する為の支援策の1つとして同地域の研究者（例えば共同研究者）に便宜を提供していく事も今後真剣に検討していく必要があると思われ

ます。

新たなる発展を心よりお祈り致します。

## 電子計算機センターでの1年半

平成5年6月につくばからこちらに赴任し1年7カ月が過ぎました。着任と同時にスーパーコンの更新作業を前任の北浦先生から引き継ぎ、前センター長の中村教授、大阪府大の北浦教授、管理局の関係部署の方々とともに、当時は色々な意味で政治問題化していた「スーパーコン調達」と格闘し、毎日が緊張の連続でした。同年7月にスーパーコンの機種が決まると、次は平成6年1月の稼働へ向けて新スーパーコンシステムを公開運用するための準備作業を始めました。メーカーが日立から日電に替わっただけでなく、新電算棟の建築工事がスーパーコンの準備作業と並行して行われており、限られた期間（8月から12月）の間に新しく準備することが多すぎて毎日が目が回る思いでした。

平成6年1月、新スーパーコンが無事に起動すると、次は平成7年1月の起動へ向けての汎用コン調達の準備を始めました。汎用コンの場合は、スーパーコンのように政治的な規制はあまりなく、調達手続きそのものに過度の神経を使わずに済んだことは幸いでした。しかし前年のスーパーコン更新では、調達に関する規制のために、センターの演算能力を飛躍的に増強できたとは言にくい結果となったので、今回の汎用コンではそれをある程度とりもどすために、限られた予算内でなるべく高い演算性能を要求するための方策などについて、仕様策定委員の方々とは知恵を絞りました。その後8月に機種が決定し、1月の起動へ向けて運用のための調整作業が始まりました。汎用コンの導入によりセンターの全ての計算機のOSがUNIXとなるため、ネットワークで接続されている個々の計算機にそれぞれ得意な処理を分散処理させることが可能となります。しかし、センターのように千人近い利用者を持つ機関で分散システムを効率よく、また利用者からは一つのまとまったシステムとして利用できるように運用するためには、各種の処理を分散した結果、それを総合的に管理するための「仕掛け」が必要です（管理する対象はジョブ管理、課金管理、ファイル管理、利用者ID管理、ライブラリ管理など多岐にわたります）。元来UNIXは、数十人程度の利用環境を対象に開発され発展してきたため、メーカーが提供するOSだけではセンター運用に必要な仕掛けがあまり整備されておらず、それらをメーカーのSEさんたちと共にほとんど初めから設計・開発しなければなりません。また汎用コンシステムを構成する計算機のメーカーがIBMと日電の2社になったことも、統合的な管理をさらに難しくしました。約4カ月間の準備期間を経、メーカーと管理局関係者そしてセンター職員の努力によって、本年1月には、新スーパーコンと連携したネットワーク分散システムとして、なんとか新汎用コンの運用を開始することができました。

この1年半の間にセンターの計算機だけでなくセンターの職員も目まぐるしく入れ替わりました。中村 前センター長、北浦 前助教授の努力によって10年以上の間切望されていた2人目の助手のポストがセンターに認められ、平成6年2月に高見利也さんが着任しました。平成6年4月には岩田末広教授がセンター長に就任されました。前センター長の中村宏樹教授は所内の基幹的な組織での激務をこなしながら北浦 前助教授と共に、新スーパーコン調達、新電算棟概算要求、センター助手増員要求など多大な功績を残されました。また同年12月にはセンターの計算機業務に加えて研究所のネットワークの構築に大きな貢献をされた田中邦彦 技官が愛知大学に転出されました。

平成7年1月で、センターのスーパーコン・汎用コンの両計算機システムの更新が一段落しましたが、計算機環境が今までのVOS3から激変したため利用環境にまだ不十分な点が多く利用者の方々にご迷惑をおかけしていることと思います。次のスーパーコン更新を4年後に控え、これからの1～2年間はマルチベンダーでのUNIX分散システムにおいてこれらの環境整備を進めると共に、「分子研センターの将来」に関わる重要な事項をセンター長、運営委員の方々、利用者の皆様とともに真剣に考察する期間であると思います。例えば、

○分子科学研究にピークが出せるような計算機ハード・ソフトの構築

- ・一般利用者の持つ高性能低価格WSとセンターの計算機の棲み分け
- ・将来的に国際化、CPU時間の集中配分を行うかなどの運営上の決断
- ・センターにおけるライブラリプログラム、データベースの今後の位置づけ
- ・所内外ネットワーク組織、情報化学関連業務との係わり

上のような事柄についてのセンターの決断は、4年後のスーパーコン更新に関わるだけでなく10年先のセンターの存在自体にまで影響するような気がしてなりません。今後は今まで以上に利用者の皆様との情報交換の機会を増やし、将来に向けての適切な判断ができるようセンター長、センター職員と共に分子科学計算分野の発展に寄与できるよう努力して行きたいと考えています。

## スーパーコンピュータワークショップの活動

平成6年1月4日より、新スーパーコンピュータ SX-3/34R が電子計算機センターに導入されたことに伴い、SX-3 システムのユーザーを対象に、「新システム SX-3/34R の可能性」という主題で、スーパーコンピュータワークショップ'94 を開催しました。このワークショップは、

(1) SX-3R システムについて。

日本電気(株)の専門家によるハード及びソフトの説明。

SX-3の性能を最大限に引き出すためのノウハウ等。

(2) 分子科学分野への応用について。

当センタースーパーコン利用者(旧機 S820 利用者を含む)の応用例。

分子科学プログラムのベンチマーク結果等。

(3) 他機関における利用(含他分野)または運用形態の紹介。

テーマは、SX-3 システムを利用または運用されている機関の方から幅広く。

という3つのテーマを取り上げ、実際にSX-3/34R を使った方々にご講演していただき、新スーパーコンピュータの未知なる可能性を探求することを目的に活発な議論が行われた。

## スーパーコンピュータワークショップ'94 プログラム

会場 分子科学研究所 電子計算機センター

平成6年3月24日(木)

- ・ 開 会 (分子研 岩田末広)
- ・ 「SX-3Rのハードウェア」 (日本電気 古井利幸)
- ・ 「SX-3Rのソフトウェア」 (日本電気 左近彰一)
- ・ 「FORTRANプログラムの移植と最適化」 (日本電気 西澤かおり)
- ・ 利用者からセンター及び日本電気への質問・要望等(討論)

平成 6 年 3 月 25 日 (金)

- ・ 「分子軌道計算：スーパーコンピュータ対ワークステーション」 (分子研 小杉信博)
- ・ 「並列計算の可能性」 (お茶大 長嶋雲兵)
- ・ 「高速モンテカルロ装置の運用」 (原子力研 富山峰秀)
- ・ 「新システムへの要望」 (中京大 山本茂義)
- ・ 「分子科学計算の将来：パネルディスカッション」 (分子研 岩田末廣)
- ・ 閉 会 (分子研 岩田末廣)

### 3 計算機システムの運用および使い方

#### 3.1 システムの構成と特徴

分子科学研究所電子計算機センター(以後計算機センターとする)のシステムは平成5年12月までは図3.1.1に示しますように汎用計算機(日立製作所製 M-680H)とスーパーコンピュータ(日立製作所製 S-820/80)との疎結合マルチプロセッサ(LCMP)システムでした。平成6年1月以降は図3.1.2.1おと図3.1.2.2に示すように汎用計算機(日立製作所製 M-680H)とスーパーコンピュータ(日本電気製 SX-3/34R)との、全く独立したシステム構成です。

##### 3.1.1 平成5年12月までのシステムの構成と特徴

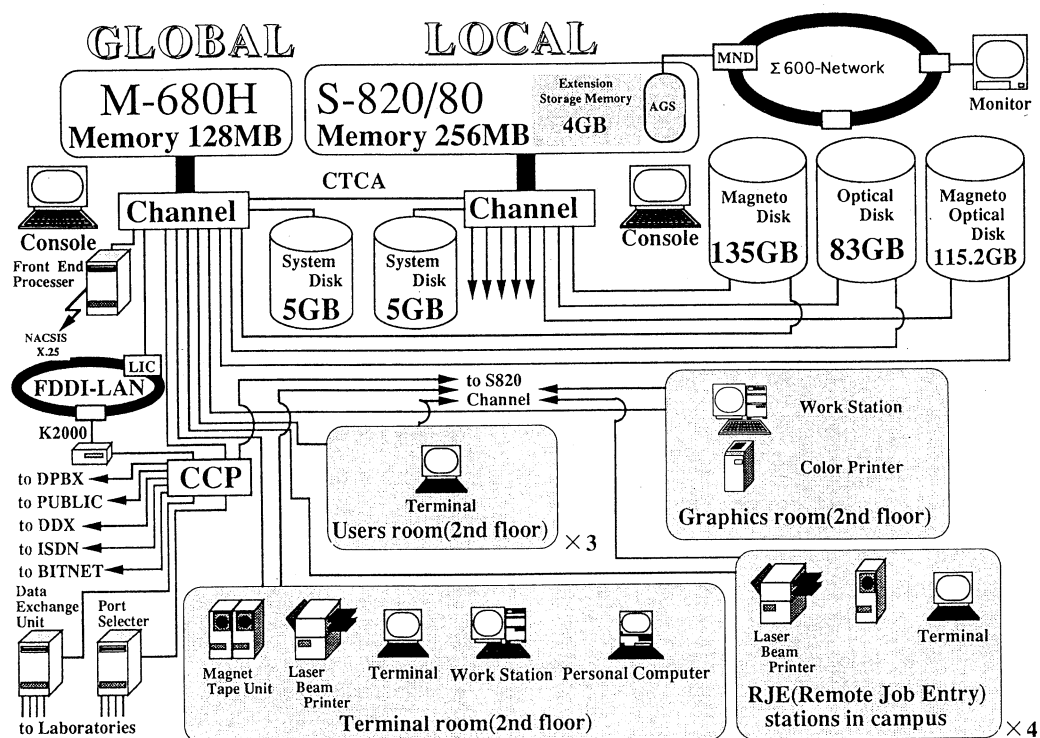


図3.1.1 システム構成概念図

- ・ 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っています。また、S-820/80でもTSS処理のサービスを行っています。
- ・ 自動ジョブスケジュール機能(日立製作所と共同開発)により各ジョブの要求する各種資源を柔軟かつ最適に割り当ててスケジュールしています。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ます。
- ・ 総計145GBの磁気ディスク容量を有し、CPUの高速化とあわせて大規模科学計算を可能としています。
- ・ 機構内にFDDI準拠の600Mbps光ループLANを張り巡らせており、所内はもちろんのこと三研究所(分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所)のサブネットワーク(TCP/IP、DEC netなど)間を統合的に接続・利用できます。
- ・ 大容量の光ディスク装置(83GB)を用意し、所外の遠隔地ユーザの便に共しています。



- ・TISN(東大理学部国際理学ネットワーク)、SINET(学術情報センター インターネットバックボーン)を経由しインターネットにアクセスできます。
- ・ネットワーク新時代に備えてISDN経由のホスト接続を可能としています。
- ・M-680HではBITNETのサービスを行っています。
- ・総計約115GBの光磁気ディスク(書換可能)を用意し、磁気ディスクの有効利用を計っています。
- ・動画出力システム(AGS)によって、スーパーコンピュータの計算結果の視覚化を可能としています。

### 3.1.2 平成6年1月以降のシステムの構成と特徴

#### 3.1.2.1 大型汎用計算機システム(日立製作所製 M-680H)

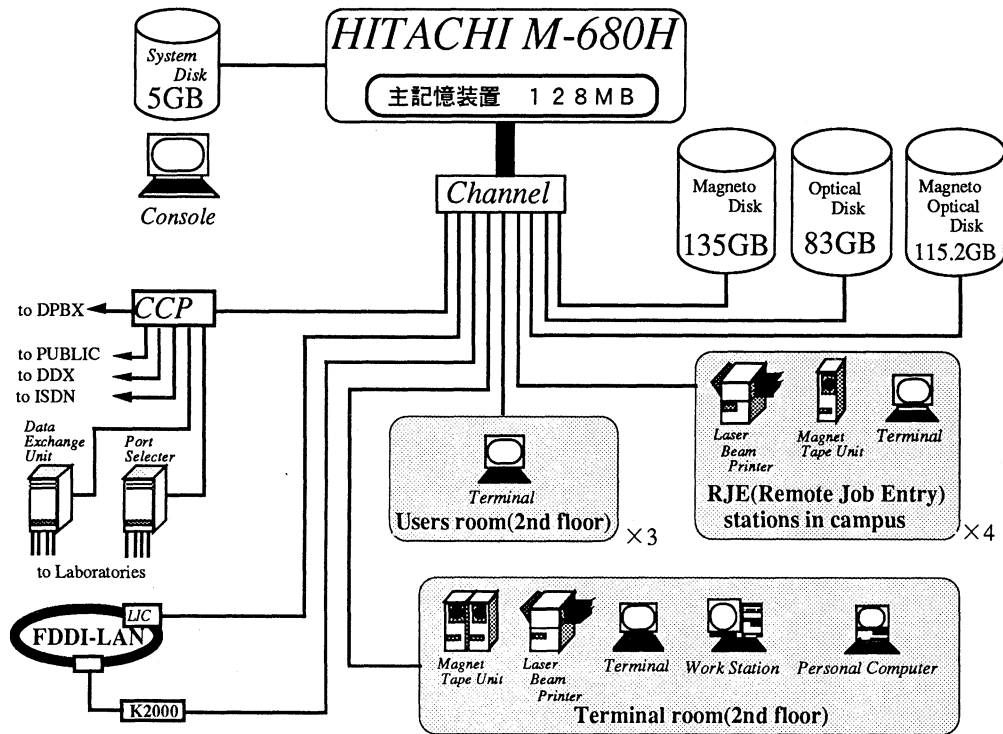


図3.1.2.1 大型汎用計算機システム(日立製作所製 M-680H)

- ・M-680HではTSS処理、ジョブ管理、バッチ処理を行っています。
- ・自動ジョブスケジュール機能(日立製作所と共同開発)により各ジョブの要求する各種資源を柔軟かつ最適に割り当ててスケジュールしています。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ます。
- ・総計140GBの磁気ディスク容量を有し、CPUの高速化とあわせて大規模科学計算を可能としています。
- ・機構内にFDDI準拠の600Mbps光ループLANを張り巡らせており、所内はもちろんのこと三研究所(分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所)のサブネットワーク(TCP/IP、DEC netなど)間を統合的に接続・利用できます。
- ・大容量の光ディスク装置(83GB)を用意し、所外の遠隔地ユーザの便に共しています。
- ・TISN(東大理学部国際理学ネットワーク)、SINET(学術情報センター インターネットバックボーン)を

経由しインターネットにアクセスできます。

- ・ネットワーク新時代に備えてISDN経由のホスト接続を可能としています。
- ・M-680HではBITNETのサービスを行っています。
- ・総計約115GBの光磁気ディスク(書換可能)を用意し、磁気ディスクの有効利用を計っています。

### 3.1.2.2 スーパーコンピュータシステム(日本電気製 SX-3/34R)

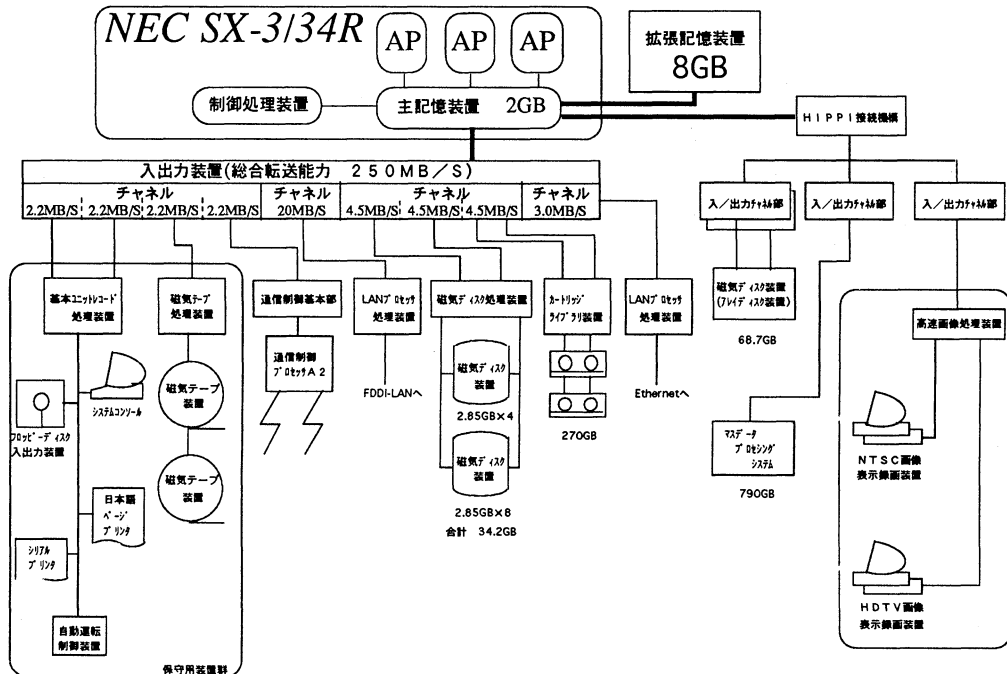


図3.1.2.2 スーパーコンピュータシステム(日本電気製 SX-3/34R)

- ・SX-3/34RではTSS処理、ジョブ管理、バッチ処理(NQS)を行っています。
- ・機構内にFDDI準拠の600Mbps光ループLANを張り巡らせており、所内はもちろんのこと三研究所(分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所)のサブネットワーク(TCP/UIP、DEC netなど)間を統合的に接続・利用できます。
- ・大容量のCGMT装置(270GB)を用意し、所外の遠隔地ユーザの便に共しています。
- ・TISN(東大理学部国際学ネットワーク)、SINET(学術情報センター インターネットバックボーン)を経由しインターネットにアクセスできます。
- ・約34.2GBの磁気ディスクと約68.6GBの磁気アレイディスクの総容量約103GBを有しています。
- ・約790GBの光磁気ディスク(書換可能)を用意し、磁気ディスクの有効利用を計っている。この光磁気ディスクは、通常の磁気ファイルシステムとして使用しています。
- ・動画出力システムによって、スーパーコンピュータの計算結果の視覚化を可能としています。

### 3.2 ジョブクラスの構成

#### <M-680H>

クラス	CPU時間 (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	-	-
G	30	30	7	2	64	4	-	-
S	600	30	7	2	96	4	-	-
TSS	3	3	7	4	32	4	-	-

ただし、Sジョブは許可制です。

#### <S-820/80>

クラス	CPU時間 (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	MSX	STD	MAX	STD	MAX	STD
A	1	1	4	1	128	8	1920	0
B	5	5	4	1	128	8	1920	0
C	30	30	4	1	128	8	1920	0
D	120	30	4	1	128	8	1920	0
E	300	30	4	1	128	8	1920	0
G	30	30	4	1	128	8	1920	0
S	600	30	7	1	224	8	1920	0
TSS	3	3	7	4	32	8	192	0

ただし、Sジョブは許可制です。

<SX-3/34R>

キュー名	CPU時間 (MB)	主記憶 (MB)	多重度	ccomplex	備 考
A	1	256	3	4	A、B併せて多重度が4
B	30	256	3		
C	60	512	2	3	C、D,E併せて多重度が3
D	180	512	2		
E	720	1024	1		
S	4320	2048	1	1	特別申請ジョブ
TSS	10	32	-	-	

ただし、Sジョブは許可制です。

### 3.3 利用課金点数

#### 3.3.1 平成5年4月1日から平成5年12月31日まで利用課金点数

平成5年4月1日から平成5年12月31日までは下記のP1がユーザの利用課金です。

$$P1 = \text{CPU}_m \times a + (\text{CPU}_s - \text{VPU}_s) \times b + \text{VPU}_s \times c + \text{LP} \times d + \text{DISK} \times e$$

CPU<sub>m</sub> : M-680Hの全CPU時間

CPU<sub>s</sub> : S-820/80の全CPU時間

VPU<sub>s</sub> : S-820/80のベクトル演算器の全CPU時間

LP : 出力枚数

DISK : DISK使用量(MB×hour)

係数の値は以下の通りです。

a : 0.06/sec(改訂前 : 0.08)

b : 0.12/sec

c : 0.12/sec

d : 0.045/ページ

e : 0.00067MB×hour

各々の計算機におけるCPU1時間当たりの利用点数は、以下のようになります。

M-680H : 216点

S-820/80 : 432点

ただし、許可時間はCPU時間1時間に対し400点が割り当てられます。

#### 3.3.2 平成6年1月4日からの利用課金点数

平成6年1月4日からは下記のP2がユーザの利用課金です。

$$P2 = \text{CPU}_m \times a' + (\text{CPU}_{sx} - \text{VPU}_{sx}) \times b' + \text{VPU}_{sx} \times c'$$

CPU<sub>m</sub> : M-680H全CPU時間  
 CPU<sub>sx</sub> : SX-3/34Rの全CPU時間  
 VPU<sub>sx</sub> : SX-3/34Rのベクトル演算器の全CPU時間  
 パラメータの値は、以下の通りです。

a' : 0.06/sec  
 b' : 0.12/sec  
 c' : 0.12/sec

各々の計算機におけるCPU1時間当たりの利用点数は、以下のようになります。

M-680H : 216点  
 SX-3/34R : 432点

ただし、許可時間はCPU時間1時間に対し400点が割り当てられます。

### 3.4 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3.4に示します

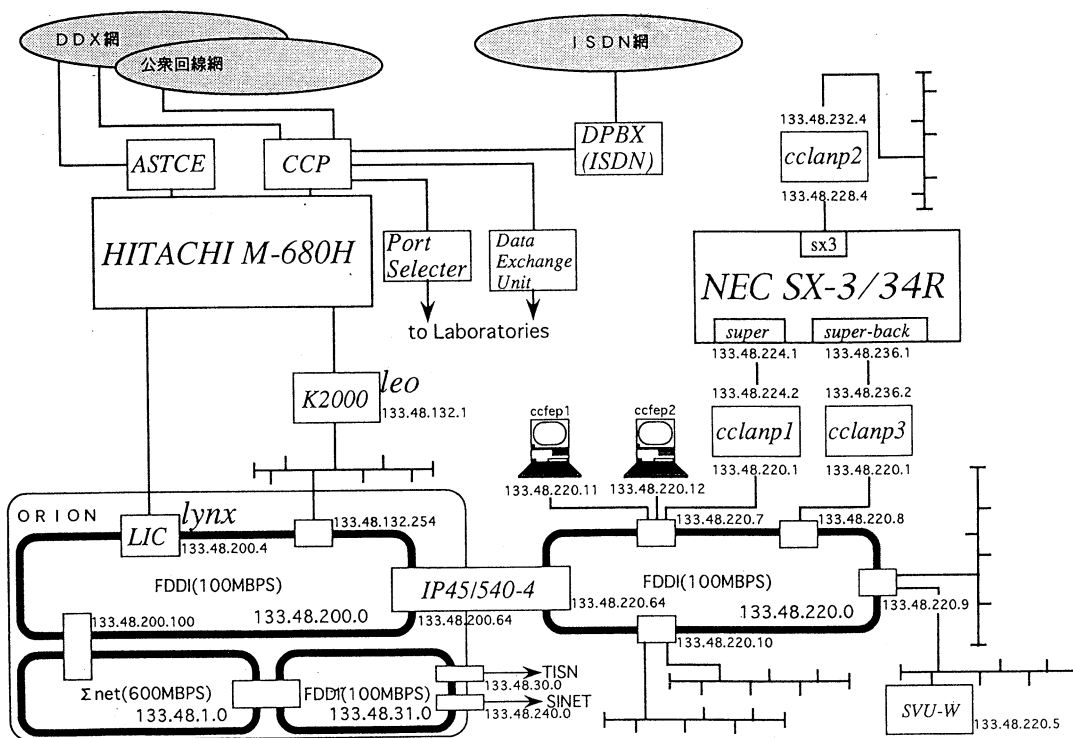


図3.4 ネットワーク構成概念図

#### 3.4.1 所外通信回線・ネットワーク

##### (1) N-1ネットワーク

計算機センターでは平成元年7月3日より、N-ITSSのサーバ/ユーザ機能を公開している。N-1RJE機能の公開は行っていません。当センターは岡崎国立共同研究機構内に設置されている岡崎ノードとつながっています。

利用できる機関とホスト名称一覧(平成5年5月末現在)

当センターはサーバ/ユーザとして登録しています。

当センターのサーバホスト名称 : IMS

機 関 名	ホ ス ト 名 称	利用形態	使 用 計 算 機 名
		T S S	
北海道大学	HOKKAIDO	ユ-ザ/機-ハ'	HITAC M-682H
東北大学	TOHOKU	ユ-ザ/機-ハ'	ACOS S-2000
東京大学	TOKYO	ユ-ザ/機-ハ'	HITAC M-682H
〃	TOKYO1	ユ-ザ/機-ハ'	HITAC M-682H
名古屋大学	NAGOYA	ユ-ザ/機-ハ'	FACOM M-780/20
京都大学	KYOTO	ユ-ザ/機-ハ'	FACOM M-780/30
大阪大学	OSAKA	ユ-ザ/機-ハ'	ACOS S-2000
九州大学	KYUSHU	ユ-ザ/機-ハ'	FACOM M-780/20
学術情報センター	NAC SIS	機-ハ'	HITAC M-680H
〃	S I M A I L	機-ハ'	ACOS S-1000/10
埼玉大学	SAITAMA	ユ-ザ/機-ハ'	HITAC M-260K
奈良女子大学	NARAJ O	ユ-ザ/機-ハ'	FACOM M-760/6
広島大学	HIRODAI	ユ-ザ/機-ハ'	HITAC M-680H
お茶の水女子大学	OCHA	ユ-ザ'	IBM 4381-R24
京大化学研究所	KAKEN	ユ-ザ'	FACOM M-380Q
弘前大学	HIROSAKI	ユ-ザ'	ACOS 850/10
大阪府立大学	OFUDAI	ユ-ザ/機-ハ'	ACOS 930/10
千葉大学	CHIBA	ユ-ザ/機-ハ'	HITAC M-680D
東大物性研究所	I S S P	ユ-ザ/機-ハ'	FACOM M-380R
熊本大学	KUMAMOTO	ユ-ザ'	FACOM M-780/10Q
愛媛大学	EHIME	ユ-ザ/機-ハ'	FACOM M-360AP
静岡大学	SUIPC	ユ-ザ/機-ハ'	平成6年1月1日付け接続解除

豊橋技術科学大学	TOYOGI	ユーザ' / # - ハ'	ECLIPSE MV/20000 MODEL1
金城学院大学	KINJO	ユーザ' / # - ハ'	FACOM M760/4
信州大学	SHINI	ユーザ'	HITAC M260D
横浜国立大学	YOKOI	ユーザ' / # - ハ'	HITAC M280D
電気通信大学	UEC	ユーザ'	IBM 3090/180S
東洋大学 (川越校舎)	TOYOK	ユーザ'	ECLIPSE MV2500D
岡山理科大学	OKARIDAI	ユーザ' / # - ハ'	FACOM M380
東京工業大学	KODAI	ユーザ' / # - ハ'	HITAC M-640/20E
奈良教育大学	NARAKYO	ユーザ'	ECLIPSE MV/9500
金沢大学	KANAZAWA	ユーザ' / # - ハ'	FACOM M-760/20
岐阜大学	GIFUDAI	ユーザ' / # - ハ'	FACOM M-760/6
岡山大学	OKAYAMA	ユーザ' / # - ハ'	ACOS 2010
宮崎大学	MIYAZAKI	ユーザ' / # - ハ'	FACOM M-760/6
大阪工業大学	DAIKODAI	ユーザ' / # - ハ'	FACOM VP-50E
東京都立大学	TORITU	ユーザ'	IBM 3090-30J
富山大学	TOYAMA	ユーザ'	IBM 3081-KX4
関西学院大学	KWANSEI	ユーザ'	HITAC M-680H

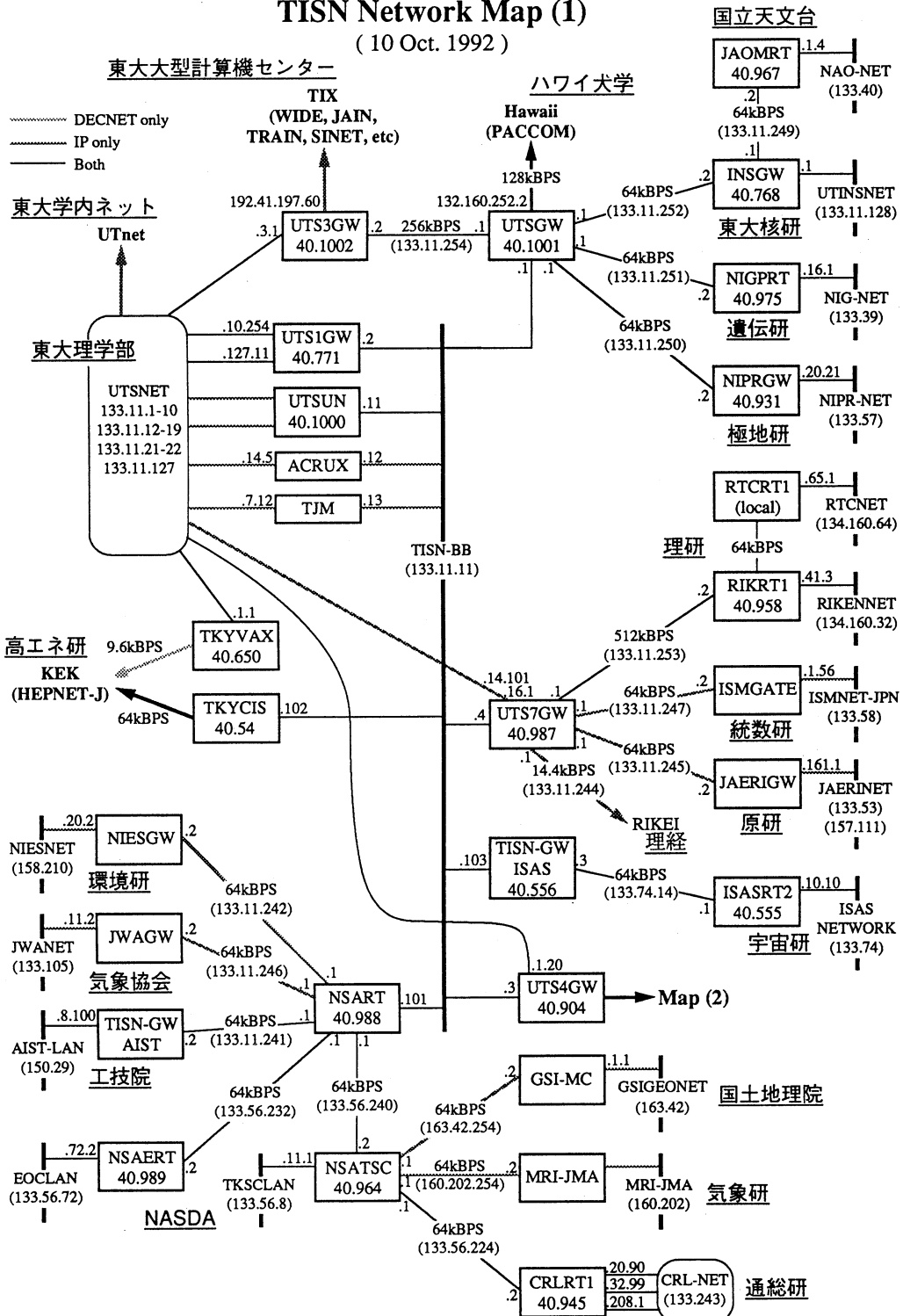
## (2) 東京大学理学部国際理学ネットワーク(TISN)

平成3年度よりTISNに加入し、国内外のインターネットへの接続を可能にしています。サービス内容はIPプロトコルによる通信で、リモートログイン(TELNET)、ファイル転送(FTP)、電子メール(SMTP)などです。計算機センターにおいても東京大学理学部と64Kbpsで接続され、そこを經由してアメリカ、ヨーロッパ、オーストラリアなどに接続されています。これにより計算機センター内の大型計算機(M-680H、SX-3/34R)にもK2000/KNET、LIC装置を經由して接続出来るようになりました。TSSのフルスクリーン利用も容易です。

TISNのネットワークポロジは次の2ページの通りです。

# TISN Network Map (1)

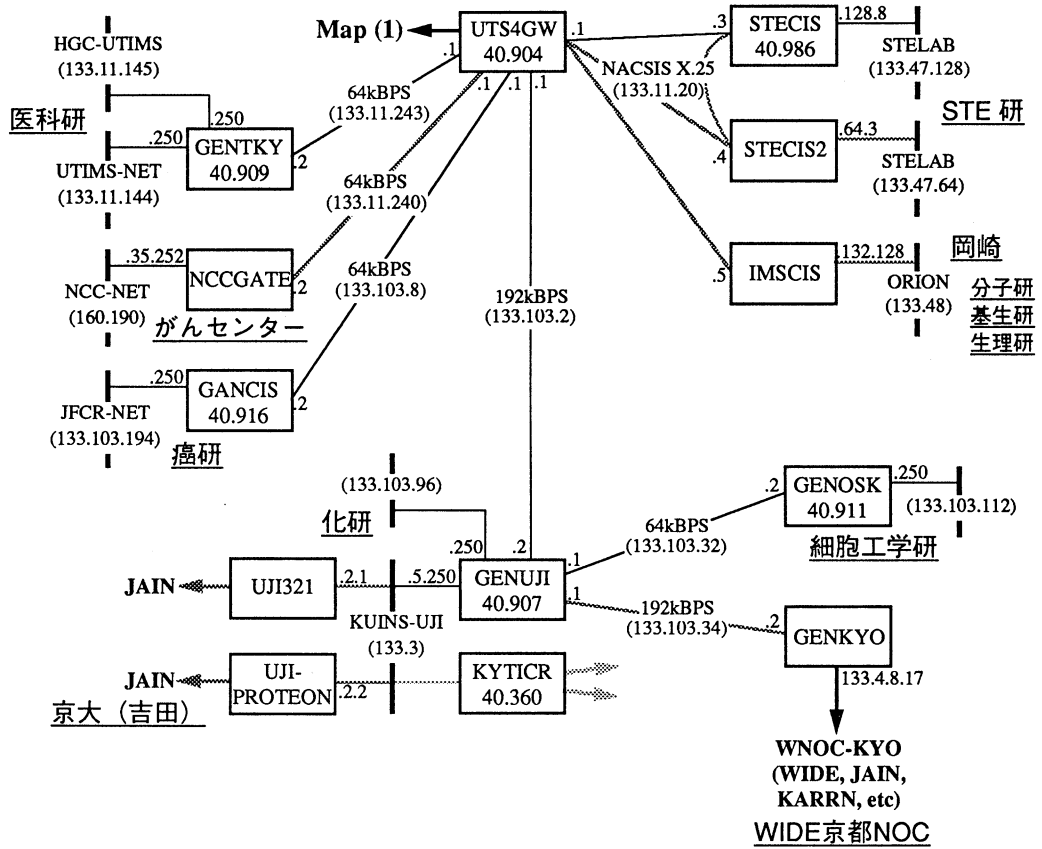
(10 Oct. 1992)





# TISN Network Map (2)

( 10 Oct. 1992 )



### (3) BITNET

平成3年6月よりM-680HによるBITNETのサービスを開始しています。  
利用はTSS上でUMAILコマンドで行います。利用方法は以下の通りです。

- (1) 作業環境の作成(初めて利用する場合のみ)

UMNICK

- (2) UMAILの実行

UMAIL

詳細はASPENのTUTORコマンドで参照できます。なお、UMAILコマンドは、HOAPMAIL(日立製作所製)を基盤として作られているため、他のBITNET専用ソフトで可能な機能でもサポートしていない場合があります。

### (4) 公衆網、DDX、ISDNサービス

	通信速度	回線数	手順	電話番号
電話回線	1200bos(V.22)	2	TTY	0564-53-6113(代)
DDX回線	9600bps	2	TTY	163-060-5722107
ISDN回線	9600bps(Bch)	2	TTY	0564-57-1170,1171

DDX回線は物理的には1回線しかありませんが、論理的に多重化しているために15端末まで同時に接続可能になっています。

#### 3.4.2 構内通信回線、ローカルエリアネットワーク

##### (1) 構内データ交換機

ポートセクタの老朽化に伴い、ISDN対応のデータ交換機を設置し、順次移行を行っています。また、岡崎国立共同研究機構においてもデジタルPBXが設置され、機構内のデジタル電話からのアクセスも可能です。

	通信速度	回線数	手順	電話番号
ISDN回線	9600bps	2	TTY	7164,7172,7176
機構DPBX	9600bps	10	TTY	内線 7270(代)

#### 4 一般報告

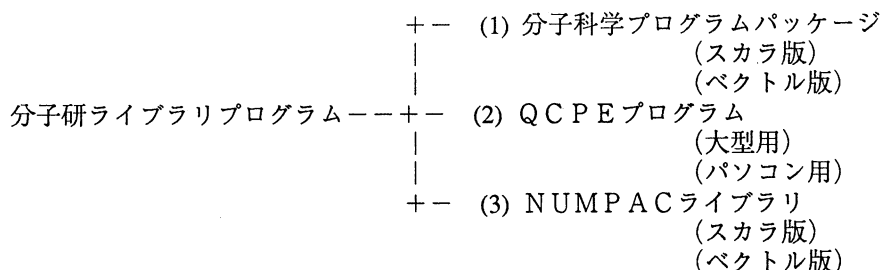
##### 4.1 分子研ライブラリプログラムの収集と開発

平成5年度のライブラリ開発計画を表4.1.1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4. 1. 1 平成5年度分子研ライブラリプログラム開発作業一覧

名前	所属	職名	内 容
田中秀樹 山本量一 沈 君偉 甲賀研一郎 木戸督 井上良二 岡部一郎 北浦和夫	京大工 京大工 京大工 京大工 京大工 京大工 京大工 大阪府大	助手 大学院生 大学院生 大学院生 大学院生 大学院生 大学院生 教授	計算機シミュレーションによる水の動的性質の 解析プログラムの開発
数下聡	千葉大	助教授	分子軌道計算のプログラムCOLMBSの開発整備
二宮市三 山本茂義 秦野 甯世	中部大 中京大 中京大	教授 助教授 教授	数学ライブラリNUMPACの開発・移植
酒井嘉子 三好永作 富樫雅文	九州大 九州大 お茶大	教授 教授 助手	モデルポテンシャルの関数データの整備
八尋秀一 柏木浩	九工大 九工大	研究生 教授	ab initio 分子軌道計算における電子間反発 積分計算プログラムの開発
別府良孝 上田誠	聖徳女子 東海産短	助教授 教授	高速固有値ルーチン
南野智 富樫雅文	分子研 お茶大	技官 助手	FCDB 検索プログラムの開発・移植
南野智 富樫雅文	分子研 お茶大	技官 助手	QCLDB 検索プログラムのバージョンアップ版の移植
小杉信博	分子研	教授	ab initio SCF-CI プログラム「GSCF3」の開発整備
南野智 富樫雅文	分子研 お茶大	技官 助手	プログラムライブラリ管理・検索システム SLIMの開発・整備
後藤仁志	北大	大学院生	配座発生プログラム「CONFLEX3」の
後藤仁志	北大	大学院生	配座発生プログラム「CONFLEX3」の移植
岡崎進	東工大	助手	生体膜の動画システム
長島雲兵 日向寺祥子 香田美紀	お茶大 お茶大 お茶大	助教授 大学院生 大学院生	ネットワーク対応 QCLDB 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。



(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150件が収まっている。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(SX-3)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バイナリファイ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6年1月より新スーパーコンピュータSX-3が稼働し始めたのに伴い、S-820のプログラムライブラリの一部をSX-3用にコンバートした。平成5年度にSX-3用にコンバートした分子科学プログラムパッケージは以下の8本である。

colmbs1	Columbus (アルゴンヌ国立研版)
colmbs2	Columbus (分子研版)
crys88	Crystal 88 (QCPE 577)
gamess	GAMESS (NDSU version)
hondo7	HONDO version 7
hondo8	HONDO version 8.4
koto	KOTO 89
mm2	MM2 (QCPE 544)

さらに以下の2件を新規登録した。

g92	Gaussian 92
mopac7	MOPAC version 7

よって、現在登録されているライブラリプログラムは総件数165である。

(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593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。ほとんどのプログラムはFORTRANで書かれている。

また今までのQCPEプログラム(主に汎用大型機用)に加えパーソナルコンピュータ版(IBM-PC、マッキントッシュ)のQCPEプログラムを公開している。インタラクティブな操作に優れた分子グラフィックスなどのプログラムを含む。IBM-PC用が127件、マッキントッシュ用が18件である。

ユーザにはQCPE(主に汎用大型機用)は磁気テープによる、QCPEパーソナルコン

ピュータ版は3.5インチフロッピーディスクによる貸出しサービスをセンター窓口で行っている。

平成5年度に新規登録したQ C P Eプログラムは以下の17件である。(ただし、バージョンアップ2件を含む。)

QC0626 INTERCHEM : A Comprehensive Molecular Modelling System.  
QC0627 mdXvu : X11-Based AMBER Molecular Dynamic Viewing/Analysis Program.  
QC0628 REDONG and VISUVIB  
QC0629 KICO : Kinetic Constants Calculation Program.  
QC0630 MOLFIT : Superposition of Two Molecules.  
QC0631 FCARTP : A Series of Programs Used to Generate a Predicted Set of Fundamental Vibrational Frequencies.  
QC0632 Implementation and Use of the Method of Prudent Ascent in Conformational Analysis Using Molecular Mechanics.  
QC0633 DNMR6 : Calculation of NMR Spectra Subject to the Effects of Chemical Exchange.  
QC0634 SEAL : An Alternate Method for the Alignment of Molecular Structures.  
QC0635 SIMVOL : A Program to Calculate the Volumes, Areas, RMS Overlap, and Percent Similarity and Identicality of Two Molecules.  
QC0636 NOEMOL : Nuclear Overhauser Effects in NMR Spectroscopy.  
QC0637 MAXWELL : Calculation of Electrostatic Interaction Energies.  
QC0638 PEPA : Poly-Electron Population Analysis Program.  
QC0639 ASYM20 : A Program for Force Constant and Normal Coordinate Analysis.  
QC0640 SIMLYS2.0 : Analysis of Simulation Results.

#### バージョンアップ版 (2件)

QC0455 MOPAC Version 7.0  
QC0606 AMSOL Version 4.0

・ Q C P Eパーソナルコンピュータ版。

I B M / P C 版で以下の14件を新規登録した。(総数127件)

QCMP117 RLINEAR/RMULT  
QCMP118 VIBMOL : Graphic Visualization of Molecular Vibrations in the Harmonic Approximation.  
QCMP119 FALLOFF  
QCMP120 VIBRAM : Vibrational Animation of Molecules.  
QCMP121 INTERVAR : Radical Recombination by Inversion of Interpolated Partition Function.  
QCMP122 CSPEC : Computer Program for Shift Prediction and Spectral Simulation.  
QCMP123 SPECTRA-PLOT : PC Plotting Software for the VAX DNMR6/LORSHP Dynamic NMR Simulation Package.  
QCMP124 SIMVOL/PLTSIM Package.  
QCMP125 DISMAP : A DOS Program to Graphically Display Distance Maps

of Molecules.

QCMP126 VISION3 : Surface and Contour Plot Generating Software for Double Dihedral Angle Driver Calculations of Molecular Mechanics (MM2/87).

QCMP127 SILMUT : A Program for the Identification of Regions Suitable for Silent Mutagenesis to Introduce Restriction Enzyme Recognition Sequences.

QCMP128 ASYM20 : A Program for Force Constant and Normal Coordinate Analysis.

QCMP129 CHEMICAL-2 : Combined Handling of Estimation Methods Intended for Completely Automated Log p Calculations.

QCMP130 MOPAC7 : Molecular Orbital Package Version 7.

・Macintosh 版

以下の2件を新規登録した。(総数18件)

QMAC017 MOLSVMAC : Program for the Calculation of Molecular Volume and Surface Area.

QMAC018 VSSMAC : Molecular Electrostatic Potential Mapping Program.

(3)のNUMPACプログラムは二宮市三教授(中部大)、秦野甯世教授(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870件である。

以下、表4.1.2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4.1.2 ライブラリプログラム一覧

```

====  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  MDAN03 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	MDAN03	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
007	MDH208	MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION FOR PURE WATER

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
009	IMPACT	INTEGRATED MODELING PROGRAM USING APPLIED CHEMICAL THEORY

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	MMIP11	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 100-ATOM MOLECULES
003	MMIP13	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 300-ATOM MOLECULES
004	MMIY3	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION FOR 6-COORDINATED COMPOUNDS
005	MDAN03	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	OTHELO	*** 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 BLOCHBRANDOW 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 VREPRF FORTRAN PROGRAM ANALYZER FOR A VECTOR PROCESSOR.  
020 ASPPRT TERMINAL EMULATOR FOR MAC  
021 FPOPOP DIVIDING A FORTRAN PROGRAM INTO SUBPROGRAMS

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
008	IMPACT	INTEGRATED MODELING PROGRAM USING APPLIED CHEMICAL THEORY

FIELD CODE : M110  
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 FITTIG
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	MOLSCT	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 PROGRAMSYSTEM
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 DIRECTMETHOD
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
020	SHELX	PROGRAM FOR CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION

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	DIIVIB	CALC. OF NUMERICAL VIBRATIONAL WAVEFUNCTION FOR DIATOMICS
002	DIADINT	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 COUPLING CONSTANT CALCULATION BY FPTINDO
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	CV0A	NORMAL COORDINATE TREATMENT OF CRYSTAL VIBRATIONS
003	LSVR3	LEAST-SQUARES ANALYSIS OF VIB-ROT SPECTRA OF ANASYM. 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	ENVELOP	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	DIIVIB	CALC. OF NUMERICAL VIBRATIONAL WAVEFUNCTION FOR DIATOMICS
015	DIADINT	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	GUGAC1	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	ATOMC1	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 MND0C CORRELATED SEMIEMPIRICAL CALCULATIONS WITH GEOM.OPT.  
 048 GAUS86 GAUSSIAN 86:AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS  
 049 CRY88 CRYSTAL 88: AB INITIO LCAO-HF PROGRAM FOR CRYSTAL SYSTEMS  
 050 CHELP NET ATOMIC CHARGES FROM AB INITIO ELECTROSTATIC  
       POTENTIALS  
 051 NBO NBO:NATURAL BOND-ORBITAL WAVEFUNCTION ANALYSIS PROGRAM  
 052 GAUS88 GAUSSIAN 88:AB INITIO MOLECULAR ORBITALCALCULATIONS

FIELD CODE : WF20

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MIND03	MO CALCULATIONS BY MINDO/3 METHOD
002	CNINDO	MO CALCULATION BY CNDO AND INDO METHODS
003	MNDOM	MNDIFIED VERSION OF MND0 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	MND0C	CORRELATED SEMIEMPIRICAL CALCULATIONS WITHGEOM.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

FIELD CODE :

FIELD TITLE : THE PROGRAM FOR UNIX MACHINES

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	colmbs1	COLUMBUS: A PROGRAM SYSTEM FOR SCF, MCSCF AND MR-SDCI CALC.
002	colmbs2	COLUMBUS: A PROGRAM SYSTEM FOR SCF, MCSCF AND MR-SDCI CALC.

```

003  crys88 CRYSTAL 88: AB INITIO LCAO-HF PROGRAM FOR CRYSTAL SYSTEMS
004  g92    GAUSSIAN 92:AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS
005  gamess GENERAL ATOMIC AND MOLECULAR ELECTRONIC STRUCTURE SYSTEM
006  hondo7 HONDO7 AB INITIO LCAO-SCF-MO METHOD AND GRADIENT METHOD
007  koto   KOTO: AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS
008  mm2    MOLECULAR MECHANICS CALCULATION BY MM2 FORCE FIELD MODEL
009  mopac7 A GENERAL MOLECULAR ORBITAL PACKAGE

```

```

**** TOTAL NUMBER OF UNIQUE PROGRAMS ****
      165

```

```

**** SORTED UNIQUE PROGRAMS(M680H) ****

```

```

ALCHEM  ALIS  ASA  ASPPRT  ASSIGN  ATOMC1  ATOMHF
ATOMST  BAND1 BCRES3 BC3  BENDER  BGSTR3  BSIP
CASSCF  CCP5  CGTOFD  CGTORL  CHELP  CHEMIC  CIMOLX
CLAMPS  CMQCA  CNDOS  CNINDO  COLMBS  CONVRT  COUNTF
CRYSTA  CRY88  CSACST  CVOA  DIAINT  DIAVIB  DISMAP
DISPL3  DNMR3  DRAWDG  DVSCAT  EHTB  EMOR1  ENVLOP
EXAFS  FCBSD  FCMP  FEMSE2  FLAPW  FLEX32  FLOW
FORDAP  FPOPUP  FPTNMR  FPTSPN  GAMESS  GAUS76  GAUS80
GAUS82  GAUS86  GAUS88  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  MDH208  MDP  MDSALT  MELD  MICA3  MIND03
MIP11  MIP13  MMIY3  MM2  MNDOC  MNDOM  MOLSCF
MOPAC  MPBDB  MPXALP  MULTAN  NASH  NBO  NCTB
NICER  NLPLSQ  ORTEP  OTHLO  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  VREPT  WIGNE

```

```

**** SORTED UNIQUE PROGRAMS(SX-3) ****

```

```

colmbs1  colmbs2  crys88  g92  gamess  hondo7  hondo8
koto  mm2  mopac7

```

## 4.2 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8件が登録されており、ユーザに公開している。(ただし、(8)のFCDBは試験公開中である。)

- (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) I R 2 (赤外線スペクトルデータベース)
- (5) S T E R I C (立体化学計算プログラム基礎団データベース)
- (6) Q C B D B (量子化学基底関数データベース)
- (7) M P B D B (モデルポテンシャル関数データ)
- (8) F C D B (力の定数のデータベース)

#### 4. 3 大型計算成果発表会

当センターでは大学の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が行えることを特徴にしている。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13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 : 平成5年9月10日(金) 9:40~12:15

場所 : 分子研 研究棟 101号室

9:40 挨拶 センター長

9:45 森永正彦、江崎尚和、井上 聡、斉藤淳一、湯川 宏、  
高橋泰夫、南部智憲、福森淳三(豊技大 工)  
遷移金属化合物および合金の電子構造  
—軽合金の機械的性質への応用—

10:15 石田俊正(静大 教養)  
高励起状態の関与する化学反応の理論的研究

10:45 田隅三生、古川行夫、岡本裕巳、鳥居 肇、坂本 章、  
山北佳宏、増田 聡、内田靖恵、横沼奈美(東大 理)  
種々の巨大分子とそのモデル化合物の構造と振動スペクトル

11:15 中辻 博、杉本豊成、波田雅彦、中井浩己、江原正博、  
福西快文、吉本正美、阿井敏通、東大路卓司、森田裕史、  
安田耕二、小川博司、高島 一、田中陽子、  
長谷川淳也(京大 工)  
励起状態と表面—分子相互作用系の電子状態と化学反応

11:45 能勢修一、米沢富美子、中西 秀、五味壮平、小松川浩、  
青木圭子、藤原 進、土井茂生、八木容子、  
寺尾 豊(慶大 理工)、山口俊夫(東女医大 物理)  
電子状態も考慮した分子動力学シミュレーションによる固体  
物性の研究  
—カルコゲン系の電子状態と構造—



5 平成5年度稼働状況および利用者数

5.1 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	161	561	11730.5	10103	8941	4041200	3576428
	協力研究	13	17	300	276	39	110400	15516
	課題研究	1	5	30	21	0	8400	89
	所内	45	126	6110	5501	2897	2200400	1158996
生理学	施設利用	4	6	130	117	39	46800	15419
基礎生物学	所内	1	1	10	9	0	3600	4
合計		225	716	18310.5	16027	11916	6410800	4766452

5.2 システム稼働状況

<M-680H、S-820/80>

年月	稼働時間		保守時間
	M-680H	S-820/80	
平成5年4月	606:00	604:00	5:00
5月	686:00	687:00	4:00
6月	622:00	618:00	5:00
7月	468:00	466:00	5:00
8月	488:00	484:00	5:00
9月	455:30	451:30	4:30
10月	442:30	437:30	4:30
11月	462:30	457:30	4:30
12月	710:30	707:30	4:30
平成6年1月	424:00	0:00	5:00
2月	604:30	0:00	4:30
3月	718:00	0:00	4:00
合計	6688:30	4913:00	55:30

<SX-3/34R>

年月	稼働時間	保守時間
平成6年1月	741:00	6:30
2月	672:00	20:00
3月	744:00	30:00
合計	2157:00	56:30

5.3 CPU、VPU使用時間

(M-680H CPU使用時間)

M-680H	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(G)	(O)	(P)	(Q)	(R)	(S)	(X)	(Y)	(Z)	TSS	合計
平成5年4月	1:50:14	25:48:23	85:26:29	301:20:31	150:26:58	0:00:00	0:00:00	0:00:03	0:00:00	0:01:36	6:46:43	0:27:59	0:15:26	29:50:48	12:43:13	614:58:23
5月	2:27:57	19:39:50	130:11:08	228:59:30	96:33:14	0:00:00	0:00:23	0:00:00	0:00:00	0:00:32	0:00:00	4:04:34	0:20:31	13:43:46	15:40:55	511:42:20
6月	3:11:24	20:06:51	122:43:01	210:13:02	44:46:35	0:00:03	0:00:22	0:00:00	0:00:00	0:04:34	0:00:00	15:37:24	3:35:56	32:56:23	20:19:21	473:34:56
7月	1:24:29	28:25:00	85:15:46	127:03:52	70:15:14	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:51	0:00:00	0:00:37	0:11:23	0:33:41	14:37:41	327:48:34
8月	2:59:37	11:51:58	52:05:33	114:01:37	52:48:43	0:00:00	0:03:54	0:00:00	0:00:00	0:00:14	0:00:00	6:50:39	2:55:23	9:35:01	12:22:43	265:35:22
9月	3:30:22	32:24:24	103:11:33	154:30:22	91:53:23	0:00:00	0:03:39	0:00:20	0:00:00	0:00:17	0:00:00	0:55:25	1:04:08	2:13:54	19:40:15	409:28:02
10月	2:22:56	16:51:53	92:16:55	108:11:12	1:17:20	0:00:00	0:00:42	0:00:00	0:00:00	0:01:15	0:00:00	1:06:29	0:14:17	0:56:03	15:09:39	238:28:41
11月	2:09:42	14:17:47	37:28:56	105:26:01	45:38:06	0:00:00	0:05:16	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:45:31	1:26:58	4:12:34	15:42:12	227:13:03
12月	2:54:00	11:30:29	47:46:49	127:45:52	87:58:42	0:00:00	0:13:45	0:00:03	0:00:00	0:00:27	0:00:00	0:51:43	0:17:44	0:17:36	23:17:01	302:54:11
平成6年1月	5:12:28	12:22:08	55:06:42	190:35:28	31:01:20	0:00:00	0:02:19	0:00:00	0:00:00	0:00:01	0:00:00	6:51:55	0:19:51	0:50:18	7:49:14	310:11:44
2月	5:01:14	13:32:36	40:29:41	149:28:33	50:52:27	0:00:00	0:00:45	0:00:00	0:00:00	0:00:07	0:00:00	0:06:58	4:58:34	1:18:15	7:45:17	273:34:27
3月	2:12:32	9:52:45	22:46:29	345:51:48	133:28:19	0:00:00	0:00:48	0:00:00	0:00:00	0:00:10	0:00:00	0:08:32	1:21:22	0:28:47	16:10:50	532:22:22
合計	35:16:55	216:44:04	874:49:02	2163:27:48	857:00:21	0:00:03	0:31:53	0:00:26	0:00:00	0:10:04	6:46:43	37:47:46	17:01:33	96:57:06	181:18:21	4487:52:05

(S-820/80 CPU使用時間 (平成5年12月28日をもって稼働停止))

S-820/80	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(G)	(O)	(P)	(Q)	(R)	(S)	(X)	(Y)	(Z)	TSS	合計
平成5年4月	1:54:03	26:40:18	108:05:15	286:27:23	9:11:01	0:11:54	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	4:56:56	0:00:00	0:02:35	0:00:00	0:12:17	437:41:42
5月	1:53:57	37:41:52	96:32:50	326:27:15	23:14:24	0:08:49	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1:37:27	0:00:00	0:36:41	488:13:15
6月	2:47:31	17:30:30	113:11:29	285:34:22	35:57:41	0:06:50	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:32:56	0:00:00	2:04:13	0:00:00	1:23:46	459:09:18
7月	1:32:03	14:21:04	69:03:47	256:32:25	23:15:28	4:27:57	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1:52:44	0:00:00	1:25:09	0:00:00	0:50:19	373:20:56
8月	0:45:34	17:18:29	64:29:22	190:57:20	54:53:03	2:17:16	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	16:57:42	0:04:33	2:34:24	350:17:43
9月	1:51:15	18:22:17	107:16:08	207:01:24	2:52:31	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	16:15:43	0:00:00	7:45:07	361:24:25
10月	1:19:21	14:17:45	58:52:28	209:54:06	22:49:01	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	11:51:57	0:00:00	3:41:05	322:45:43
11月	0:49:57	11:31:32	84:34:47	186:07:15	89:58:20	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1:21:46	0:00:00	4:41:41	379:05:18
12月	0:56:18	16:12:59	94:53:50	217:10:27	30:15:35	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:24:40	0:00:00	8:22:14	368:16:03
合計	13:49:59	173:56:46	796:59:56	2166:11:57	292:27:04	7:12:46	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	7:22:36	0:00:00	52:01:12	0:04:33	30:07:34	3540:14:23

(SX-3/34R CPU使用時間 (平成6年1月4日より稼働開始))

SX-3/34R	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(S)	(MDPS)	合計
平成6年1月	5:28:57	338:8:49	100:39:1	449:46:27	283:0:46	0:00:00	0:42:50	1177:46:50
2月	9:28:47	371:7:56	157:43:29	465:44:10	324:6:39	0:00:00	0:01:38	1328:12:39
3月	10:51:38	242:17:10	199:37:24	618:55:35	384:37:43	0:00:00	0:00:43	1456:20:13
合計	25:49:22	951:33:55	457:59:54	1534:26:12	991:45:8	0:00:00	0:45:11	3962:19:42

## (S-820/80 VPU使用時間 (平成5年12月28日をもって稼働停止))

S-820/80	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(G)	(O)	(P)	(Q)	(R)	(S)	(X)	(Y)	(Z)	TSS	合計
平成5年4月	0:19:24	11:39:25	36:00:30	122:29:49	4:22:29	0:02:36	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1:31:16	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:01:49	176:27:18
5月	0:20:08	19:50:57	39:31:22	165:25:32	5:26:37	0:02:03	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:08:59	0:00:00	0:01:13	230:46:51
6月	0:43:28	5:45:30	48:44:29	135:13:27	15:45:21	0:00:03	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:28:21	0:00:00	0:11:40	0:00:00	0:23:07	207:15:26
7月	0:18:18	4:06:36	27:26:43	87:33:32	8:48:05	0:32:48	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:02:44	0:00:00	0:06:23	0:00:00	0:04:04	128:59:13
8月	0:10:42	5:42:46	25:01:04	81:32:49	22:17:37	0:35:48	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:09:56	0:01:05	1:59:52	137:31:39
9月	0:22:05	7:12:00	46:33:02	107:45:44	1:25:59	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:09:14	0:00:00	6:12:32	169:40:36
10月	0:19:29	5:05:08	23:56:47	88:26:24	5:36:11	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:06:32	0:00:00	2:46:27	126:16:58
11月	0:16:24	3:48:03	41:41:57	95:29:48	33:54:16	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:04:17	0:00:00	3:39:32	178:54:17
12月	0:19:27	5:13:45	34:45:14	128:14:09	10:37:52	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:12:22	0:00:00	6:18:20	185:41:09
合計	3:09:25	68:24:10	323:41:08	1012:11:14	108:14:27	1:13:18	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	2:02:21	0:00:00	1:09:23	0:01:05	21:26:56	348:30:39

## (SX-3/34R VPU使用時間 (平成6年1月4日より稼働開始))

SX-3/34R	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(S)	(MDPS)	合計
平成6年1月	1:08:20	122:47:16	29:40:29	135:03:26	80:34:55	0:00:00	0:00:00	369:14:26
2月	3:01:08	72:56:45	34:4:45	124:8:55	105:2:58	0:00:00	0:00:00	339:14:31
3月	8:51:26	148:6:53	77:40:4	363:6:10	258:53:20	0:00:00	0:00:00	856:37:53
合計	13:00:54	343:50:54	141:25:18	622:18:31	444:31:13	0:00:00	0:00:00	1565:6:50

5.4 ジョブ処理件数

(M-680H ジョブ処理件数)

M-680H	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(G)	(O)	(P)	(Q)	(R)	(S)	(X)	(Y)	(Z)	TSS	合計
平成5年4月	1,352	1,229	952	569	57	0	0	5	0	123	1	53	112	48	10,437	14,938
5月	1,334	1,061	1,358	456	42	0	2	4	0	46	0	106	119	179	9,101	13,808
6月	1,510	1,119	1,407	475	34	1	3	1	0	155	0	111	185	165	9,248	14,414
7月	1,433	1,191	1,060	308	43	0	1	0	0	23	0	57	170	53	8,795	13,134
8月	1,575	739	781	332	24	0	11	4	0	16	0	122	258	117	7,736	11,715
9月	1,681	1,095	1,318	406	42	0	11	4	0	31	0	89	208	35	8,985	13,905
10月	1,097	1,005	1,068	256	3	0	3	0	0	24	0	36	93	20	6,804	10,409
11月	1,602	776	618	289	40	0	23	1	0	3	0	65	151	36	7,561	11,165
12月	1,701	1,004	635	253	25	0	29	6	2	19	0	87	175	106	7,480	11,522
平成6年1月	1,642	583	562	405	8	0	6	0	0	39	0	154	133	76	4,780	8,388
2月	1,309	742	507	349	28	0	12	11	10	24	0	48	174	28	4,105	7,347
3月	797	466	277	526	61	0	3	0	0	43	0	35	68	22	3,856	6,154
合計	17,033	11,010	10,543	4,624	407	1	104	36	12	546	1	963	1,846	885	88,888	136,899

(S-820/80 VPU使用時間 (平成5年12月28日をもって稼働停止))

S-820/80	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(G)	(O)	(P)	(Q)	(R)	(S)	(X)	(Y)	(Z)	TSS	合計
平成5年4月	534	987	794	449	4	9	0	0	0	0	18	0	69	0	125	2,989
5月	640	1,238	780	422	12	3	0	0	0	0	0	0	229	0	112	3,436
6月	823	765	1,080	435	9	9	0	0	0	0	3	0	125	0	62	3,311
7月	681	703	645	395	10	13	0	0	0	0	4	0	125	0	85	2,661
8月	219	917	739	356	33	39	0	0	0	0	0	0	454	4	109	2,870
9月	556	923	879	310	4	0	0	0	0	0	0	0	368	0	125	3,165
10月	571	651	589	310	14	0	0	0	0	0	0	0	271	0	75	2,481
11月	333	664	825	372	38	0	0	0	0	0	0	0	124	0	186	2,542
12月	361	720	930	418	30	0	0	0	0	0	0	0	93	0	151	2,703
合計	4,718	7,568	7,261	3,467	154	73	0	0	0	0	25	0	1,858	4	1,030	26,158

(SX-3/34R CPU使用時間 (平成6年1月4日より稼働開始))

SX-3/34R	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(MDPS)	合計
平成6年1月	1,457	4,544	314	471	109	56	6,951
2月	2,510	15,311	441	9,996	89	72	28,419
3月	1,558	4,520	557	544	124	31	7,334
合計	5,525	24,375	1,312	11,011	322	159	42,704

5.5 所外ネットワーク・通信回線の利用状況(セッション数)

5.5.1 N1ネットワークの利用状況

	平成5年4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	平成6年1月	2月	3月	合計
北海道大学	129	165	366	212	101	181	67	97	65	96	100	84	1663
東北大学	134	211	29	34	126	177	4	48	36	0	0	12	811
東京大学	537	96	89	118	50	146	157	146	150	62	139	59	1749
東京大学1	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3
名古屋大学	217	314	167	111	155	92	67	34	83	86	30	16	1372
京都大学	307	329	464	375	222	209	187	115	184	137	98	114	2741
大阪大学	357	290	159	116	78	88	17	231	116	101	168	6	1727
九州大学	181	73	35	25	32	26	8	3	44	12	9	4	452
奈良女子大学	73	19	21	13	1	27	1	21	27	20	22	8	253
広島大学	32	48	11	39	13	45	91	63	89	92	20	0	543
大阪府立大学	50	31	28	40	19	32	15	9	16	92	34	3	369
千葉大学	78	21	10	0	0	6	8	25	0	1	0	2	151
京大化学研究所	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
弘前大学	0	0	0	41	17	0	0	1	0	5	15	19	98
お茶の水女子大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
東大物性研究所	52	98	100	15	213	207	419	284	144	22	19	6	1579
熊本大学	558	470	601	431	272	288	394	167	279	59	16	36	3571
愛媛大学	1	0	1	70	40	0	0	0	0	0	0	0	112
金城学院大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
豊橋技術科学大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
信州大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
横浜国立大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
電気通信大学	8	2	2	18	0	0	0	0	0	0	0	0	30
東洋大学(川越校舎)	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
岡山理科大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
東京工業大学	42	177	104	125	103	90	132	151	268	84	56	75	1407
奈良教育大学	2	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3
金沢大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
岐阜大学	0	0	36	6	3	1	0	0	1	0	3	0	50
岡山大学	1	2	0	0	0	9	0	0	0	18	137	154	321
宮崎大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
大阪工業大学	5	0	0	0	0	0	0	2	38	11	42	42	140
東京都立大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

富山大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
関西学院大学	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3
合 計	2767	2349	2224	1789	1445	1624	1567	1397	1540	898	908	640	19148	

### 5.5.2 DDXパケット網の利用状況

	平成5年4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	平成6年1月	2月	3月	合 計
回 線 1	80	56	17	33	7	5	6	15	22	11	7	24	283
回 線 2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
合 計	81	56	17	33	7	5	6	15	22	11	7	24	284

### 5.5.3 1200bps電話回線(V.22)の利用状況

	平成5年4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	平成6年1月	2月	3月	合 計
回 線 1	163	94	160	197	144	95	40	83	83	66	89	47	1261
回 線 2	30	9	5	14	12	4	0	6	3	2	1	1	87
合 計	193	103	165	211	156	99	40	89	86	68	90	48	1348

## 5.6 所内ネットワーク、通信回線の利用状況(セッション数)

### 5.6.1 DPBX回線(9600bps)の利用状況

	平成5年4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	平成6年1月	2月	3月	合 計
回 線 1	391	359	273	138	135	131	283	259	240	19	8	4	2240
回 線 2	5	19	16	13	11	7	17	14	9	1	0	0	112
回 線 3	14	1	1	0	2	3	2	3	4	1	27	23	81
回 線 4	28	7	40	121	118	144	25	24	78	42	14	18	659
回 線 5	18	55	7	25	3	5	5	19	17	9	8	11	182
回 線 6	1	0	0	0	0	1	3	0	0	0	0	0	5
合 計	457	441	337	297	269	291	335	319	348	72	57	56	3279

### 5.6.2 構内ポートセレクト回線(9600bps)の利用状況

	平成5年4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	平成6年1月	2月	3月	合 計
回 線 1	68	101	97	173	127	76	77	107	53	33	40	103	1055
回 線 2	12	12	16	40	17	8	12	13	5	2	5	10	152
回 線 3	0	0	0	7	1	0	0	0	0	0	0	3	11

回線 4	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1
合計	80	113	113	221	145	84	89	120	58	35	45	116	1219

5.6.3 構内ポートセクタ回線(1200bps)の利用状況

	平成5年4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	平成6年1月	2月	3月	合計
回線 1	0	1	0	15	0	0	1	0	1	9	15	5	47
回線 2	0	2	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	3
合計	0	3	0	16	0	0	1	0	1	9	15	5	50

5.7 TISN経由の利用状況(telnet、ftp)

	平成5年4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	平成6年1月	2月	3月	合計
フル・スクリーン・モード'	2477	1981	2381	1800	1504	1645	1362	1932	1696	1209	972	791	19750
ライン・モード'	2546	3035	2755	3199	2757	3778	3085	2777	2840	1622	1379	1523	31296
合計	5023	5016	5136	4999	4261	5423	4447	4709	4536	2831	2351	2314	51046

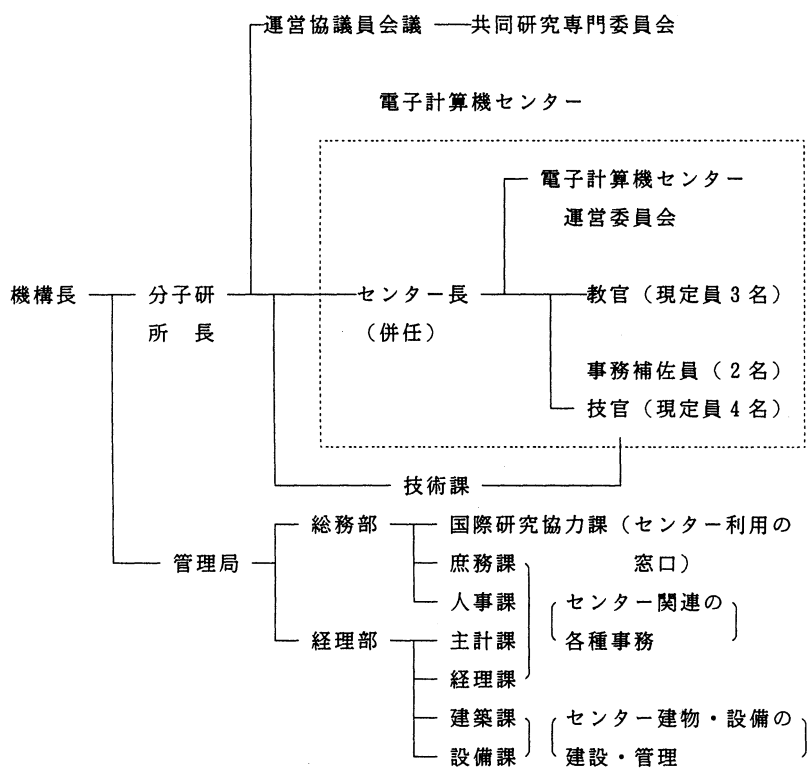
6. 資料

6. 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6. 2、6. 3、  
6. 4を参照されたい。





6. 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。

附 則

この規則は、昭和56年4月14日から施行する。

附 則（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。

6. 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 前号第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条から第5条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。

付 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。

付 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。

付 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。

#### 6. 4 電子計算機センター運営委員会委員

(平成5年度)

中 村 宏 樹	分子研理論研究系教授、センター長	センター委員
青 柳 睦	分子研電子計算機センター助教授	〃
大 峰 巖	分子研理論研究系助教授	分子研所内委員
小 杉 信 博	分子研極端紫外光科学研究系教授	〃
岡 田 勲	東工大教授	分子研所外委員
中 辻 博	京大工教授	〃
山 口 兆	阪大理教授	〃
里 子 允 敏	日大文理助教授	〃
上 野 孝 治	基生研発生物学研究系助教授	基生研委員
巨 弘	生理研分子生理研究系教授	生理研委員

(平成6年度)

岩田末廣	分子研理論研究系教授、センター長	センター委員
青柳睦	分子研電子計算機センター助教授	〃
中村宏樹	分子研理論研究系教授	分子研所内委員
小杉信博	分子研極端紫外光科学研究系教授	〃
岡田勲	東工大教授	分子研所外委員
中辻博	京大工教授	〃
山口兆	阪大理教授	〃
里子允敏	日大文理助教授	〃
上野孝治	基生研発生生物学研究系助教授	基生研委員
亘弘	生理研分子生理研究系教授	生理研委員

#### 6.5 電子計算機センター職員(平成7年1月現在)

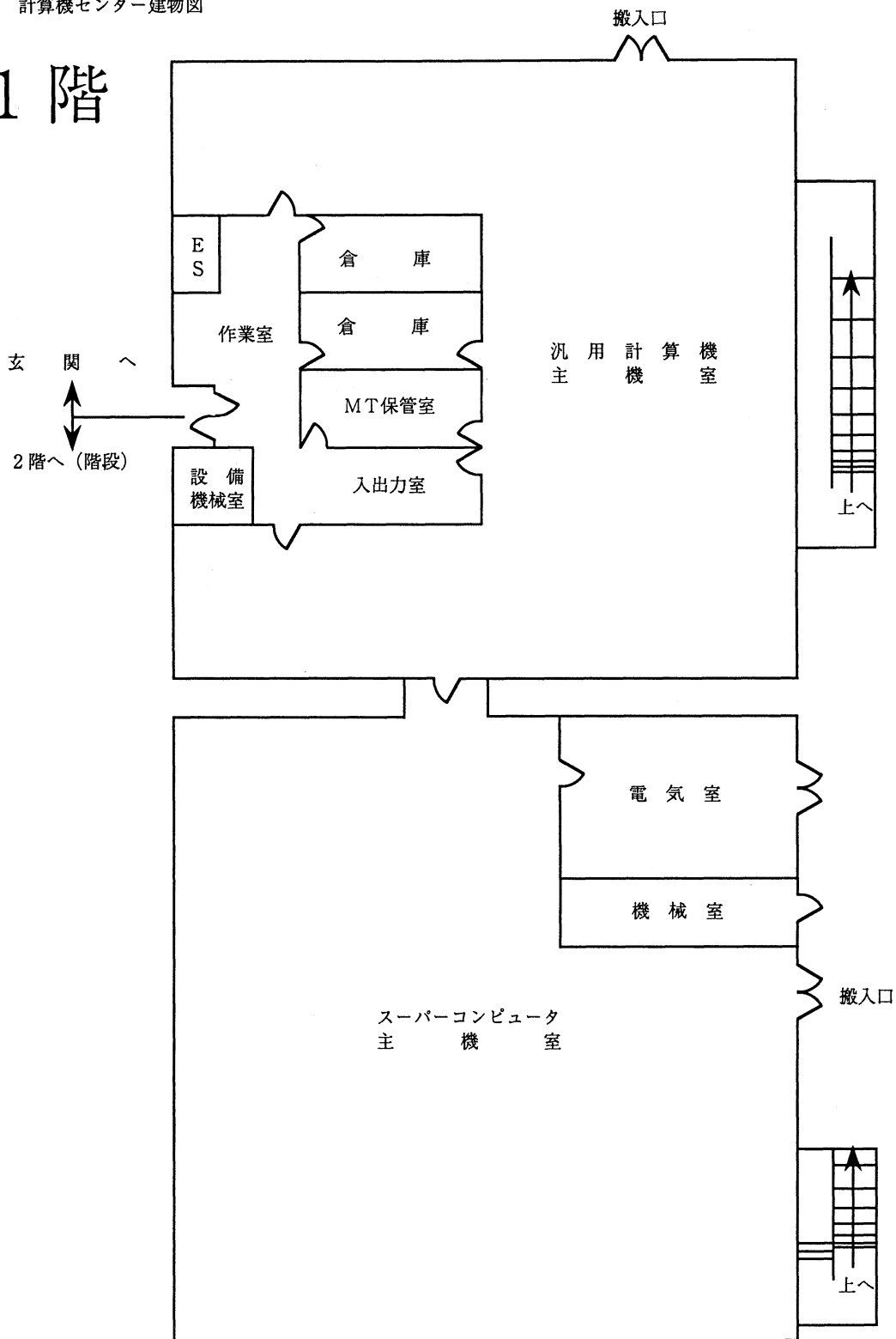
岩田末廣	センター長(併任、平成6年4月1日より)
青柳睦	助教授
南部伸孝	助手
高見利也	助手(平成6年2月1日より)
南野智	技官
西本史雄	技官(係長)
手島史綱	技官
加納聖子	事務補佐員
齊藤敦子	事務補佐員

#### 6.6 応用プログラム相談員一覧

小松崎民樹	総研大大学院生	平成5年	5月～平成6年3月
松本正和	総研大大学院生	平成5年	7月～平成6年3月

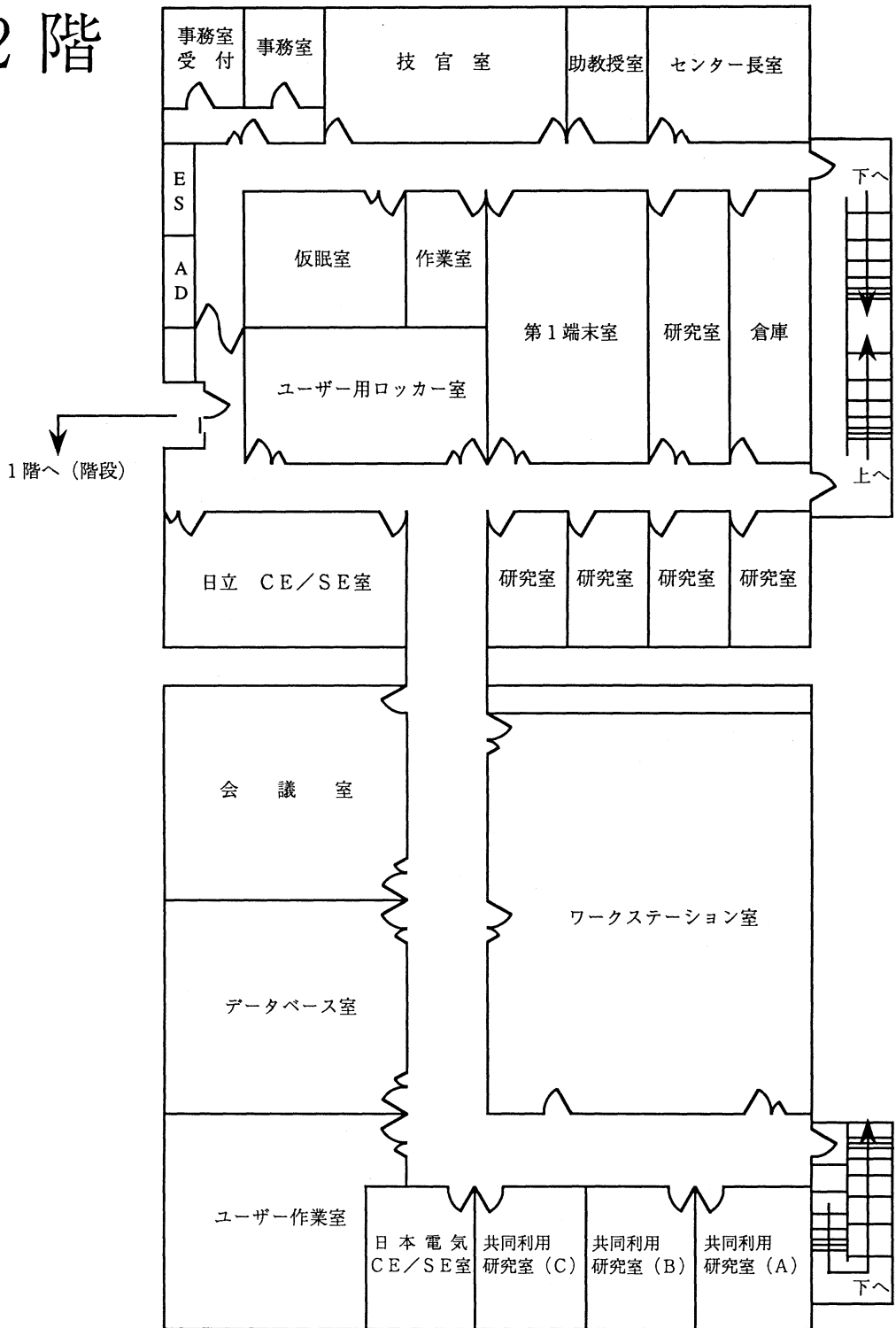
6.7 計算機センター建物図

# 1 階



1階はセンターの業務に関わる作業室と計算機システムの主機室のみ

# 2階



## 6.8 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ります。

センターでは端末室などに置いてありますが、個人での購入を希望される時の申込み先は次のとおりです。

### 6.8.1 日立M-680H関係マニュアル

〒113 東京都文京区本郷7-3-1

東京大学構内 財団法人好仁会内

アカデミービジネスサービス(株)

電話 03-3811-7786

#### FORTRAN関係(HAPを含む)

最適化FORTRAN77言語	6180-3-731
最適化FORTRAN77使用の手引き	6180-3-732
FORTRAN開発支援システム	6180-3-733

#### TSS関係

TSS入門(ASPEN E2編)	6180-3-482
TSS解説	6180-3-160
TSSコマンド	6180-3-162
TSS操作	6180-3-163
TSSメッセージ	6180-3-164
TMP4 E3	6180-3-370
TSDUT E2	8091-3-069
TSDUT E2 入門書	8090-3-016
TSS端末入出力ロギング TSLOG	6180-3-374
ファイル伝送プログラム IFIT-TSS E2	6180-3-375

#### プログラミング支援エディタ関係

ASPEN E2 使用の手引き	6180-3-480
ASPENメール機能 ASPEN/MF	6180-3-481
ASPENシンセサイザ機能 ASPEN/SF	6180-3-477

#### データベース関係

ORION概説	8090-6-501
ORION使用の手引き	8090-6-502

#### メッセージ関係

システムメッセージ/システムコード	6180-3-103
サービスプログラムメッセージ	6180-3-222
TSSメッセージ	6180-3-164

#### 行列計算副プログラムライブラリ関係

MATRIX/HAP MATRIX/M . . . . . 8090-7-035

#### 数値計算副プログラムライブラリ関係

MSL2機能編 第1分冊 行列計算 . . . . . 8090-7-120

MSL2機能編 第2分冊 関数計算 . . . . . 8090-7-121

MSL2機能編 第3分冊 統計計算 . . . . . 8080-7-141

MSL2操作編 . . . . . 8080-7-122

#### ジョブ管理関係

ジョブ制御文 使用の手引き . . . . . 6190-3-142

ジョブ制御言語 . . . . . 6180-3-144

ジョブ管理概説 . . . . . 6180-3-140

リンケージエディタ/ローダ . . . . . 6180-3-220

#### データ管理関係

データ管理解説 . . . . . 6180-3-183

#### ユティリティ関係

データセットユティリティ . . . . . 6180-3-225

#### 数学関係

数学関数 . . . . . 8080-3-218

#### ユーザ管理関係

TRUST E2 コマンド . . . . . 8090-3-412

#### グラフ作成関係

KGRAF E2 GKS編 . . . . . 6180-7-119

KGRAF E2 KGRAF編 . . . . . 6180-7-120

#### 図形出力関係

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

#### データセットバックアップ関係

DMP/BKUP使用の手引き . . . . . 6180-3-400

### 6.8.2 日本電気SX-3/34R関係マニュアル

〒460 名古屋市中区栄四丁目15-32(日建・住生ビル)

日本電気株式会社中部支社第二販売部 担当 城(たち)、今井

電話 052-262-3257

利用者の手引 . . . . . GUA 11-6

コマンド操作ハンドブック . . . . . GUA 12-6

プログラミングの手引 . . . . . GUB 11-2





6.9 利用者数とCPU時間の推移

	昭和53年度	昭和54年度	昭和55年度	昭和56年度	昭和57年度
計算機システム	M-180 2台	M-180 2台	M-200H M-180	M-200H M-180	M-200H 2台
運 転 方 式	3カ月 有人	9月から無人	200H 無人 180 有人	疎結合 無 人	疎結合 無 人
プロジェクト数	63	176	192	183	198
利用者数					
機構内 <sup>a</sup>	48	70	69	91	94
機構外	107	254	325	330	375
合計	155	334	394	421	469
稼働時間	1,087	6,071	6,553	6,721	6,305
CPU時間利用申請	(200H基準)				
申請	929	4,666	11,033	10,230	11,938
許可	816	3,171	7,427	8,306	10,141
総使用CPU時間 <sup>c</sup>	509	2,405	5,405	6,320	8,205
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	41,521	155,980	183,840	214,847	239,771
ライブラリプログラム新規登録数	0	20	43	20	699
データベース新規登録数	0	2	0	0	3
センター使用論文数 <sup>d</sup>	0	24	93	118	190

	昭和58年度	昭和59年度	昭和60年度	昭和61年度	昭和62年度
計算機システム	同57年度	同57年度	(~11月) 同57年度 (1月~) M-680H S-810/10	M-680H S-8210/10 疎結合	M-680H (~1月) S-810/10 (2月~) S-820/80 疎結合
運 転 方 式	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	199	207	226	234	213
利用者数					
機構内 <sup>a</sup>	102	110	130	141	143
機構外	426	446	464	496	520
合計	528	556	594	637	663
稼働時間	6,170	6,316	6,016	6,368	6,444
CPU時間利用申請	(200H基準)				(M-680H基準) <sup>b</sup>
申請	13,053	14,799	15,536	33,832/8,458*	9,880
許可	10,091	10,768	12,080	28,184/7,046*	7,978
総使用CPU時間 <sup>c</sup>	8,489	8,508	12,770	20,092/5,023*	6624*
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	236,519	226,727	274,431	289,915	278,956
ライブラリプログラム新規登録数	10	118	160	39	4
データベース新規登録数	3	0	1	0	1
センター使用論文数 <sup>d</sup>	185	202	206	237	223

	昭和63年度	平成元年度	平成2年度	平成3年度	平成4年度
計算機システム	M-680H S-820/80	同63年度	同63年度	同63年度	同63年度
運 転 方 式	疎結合				
	無 人	無 人	無 人	無 人	無 人
プロジェクト数	231	239	256	272	271
利用者数					
機構内 <sup>a</sup>	137	146	140	158	143
機構外	515	544	593	623	661
合計	652	690	733	781	804
稼働時間	6,091	5,694	6,768	6,749	7,156
CPU時間利用申請	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>	(M-680H基準) <sup>b</sup>
申請	12,439	14,694	16,622	20,606	21,153
許可	10,418	12,347	14,626	17,846	19,110
総使用CPU時間 <sup>c</sup>	7,872	8,300	11,975	11,874	12,491
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	278,104	253,418	295,503	346,987	297,638
ライブラリプログラム新規登録数	7	3	0	0	0
データベース新規登録数	0	0	0	0	0
センター使用論文数 <sup>d</sup>	211	218	248	229	282

	平成5年度
計算機システム	M-680H (～12月) S-820/80 (1月～) SX-3/34R 未結合
運 転 方 式	無 人
プロジェクト数	225
利用者数	
機構内 <sup>a</sup>	127
機構外	589
合計	716
稼働時間	(M-680H系) 6,689 (SX-3/34R) 2,101
CPU時間利用申請	(M-680H基準) <sup>b</sup>
申請	18,311
許可	16,027
総使用CPU時間 <sup>c</sup>	16,306
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	227,650
ライブラリプログラム新規登録数	10
データベース新規登録数	1
センター使用論文数 <sup>d</sup>	

<sup>a</sup>:機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含めません。

<sup>b</sup>:申請および使用の詳細は5.1項を参照してください。

<sup>c</sup>:ここでの値はCPU時間、件数ともライブラリ開発センター業務使用分などの全てを含んでいます。

<sup>d</sup>:計算機センターを使用した計算機に基づく論文として計算機センターに提出されたものです。

<sup>e</sup>:S-810、S-820についてはSPUとVPUのCPU時間の単純な和です。

\*:後者はM-680H基準です。

## 7 ニュースシステムの運用開始について

### ニュース導入の経緯

計算機センターでは、平成6年5月から、ローカルニュースシステムの運用を始めました。ニュースシステムというのは、e-mail と似た形式の記事をやりとりして情報交換を行なうためのもので、ニュースリーダというソフトを使って、ニュースサーバにアクセスすることで、任意の記事を読んだり投稿したりすることができるようになっていました。これらの記事を、ネットワーク上に分散化されたニュースサーバでバケツリレー式に相互転送することで、世界中の人たちとの情報交換も可能です。各大学の化学の研究室でも、ワークステーションを使用しているところであれば、インターネットへ高速アクセスが可能になった数年前ごろから、こういったネットワークニュースの導入を始めた所が増えてきていることと思われます。

現在、日本国内最大のニュースグループfjでは、fj.sources や fj.binaries.msos などのグループにおいて、ワークステーションやパソコンを利用する時に有用なフリーのソフトが多数配送されています。これらのニュースグループからは、企業の提供した有料のソフトよりもはるかに優れたものが手に入るのが特徴で、コピーや再配布の条件に気をつけることと利用者の責任において管理しないといけないことを除いては、非常に重宝しています。その他、fj.sci.chemやfj.sci.physicsなどでは、化学や物理の話題が、身近な問題から現在の最先端の分野まで幅広く議論されていたりします。このように、ネットワークニュースの利用によって、計算機環境の改善から研究に関しての情報交換に至るまで、広い範囲のサービスを受けることができるようになってるのが現状です。

このような状況を考慮して、当計算機センターにおいても、ニュースシステムを導入することにしました。現段階では、センター内のローカルなニュースグループだけの運用になっていますが、計算機関連および化学関連のグループに関しては、将来購読を始めることも考えています。今後の利用のされ方を見て決めていきたいと思っています。当計算機センターにおけるニュースシステムの導入の理由を、具体的に上げると次のようになります。

- ・計算機利用に関する質問の受付・回答をスムーズに行ない、それによる知識の蓄積を図ることができる。
- ・計算機センターからのお知らせなどが、比較的容易に提供できる(従来のセンター速報上でお知らせする場合などと比べて、事務手続きの簡略化および速報性が期待できる)。
- ・利用者間の情報交換が容易である。例えば、利用者の皆さんが独自に開発されたライブラリなどを公開する場所としての利用など。

現在のニュースグループと、おおまかな内容は次のようになっています。

imsc.general:	センターからのお知らせ、一般の情報交換など
imsc.question:	質問と回答 (imsc@draco.ims.ac.jpへの質問はここに自動ポストされる)
imsc.misc:	その他
imsc.rec:	お遊びや趣味の情報など
imsc.cluster:	クラスタシステムに関するお知らせ
imsc.cluster.question:	クラスタシステムに関する質問と回答

また、テスト用のグループとして、imsc.junk、imsc.test、junk、testがあります。ポストやフォローアップのテストなどに使っていただいても構いません。

### ニュースの利用方法

計算機センターのローカルニュースを利用するには、フロントエンドマシン `ccfep1.ims.ac.jp` や `ccfep2.ims.ac.jp` にログインして、ニュースリーダを立ち上げることで可能です。ニュースリーダは現在のところ、`mnews` と `gnus` をインストールしてあります。これらのコマンドは、デフォルトで計算機センターのニュースサーバ `ccnews.ims.ac.jp` (IPアドレス 133.48.140.50) につながるように設定されています。以下にその利用方法を簡単に述べます。詳しくは、それぞれのオンラインマニュアル等を参考して下さい。

・ `mnews` の使い方:

シェルのコマンドプロンプトが出ている状態で `mnews` と打ち込みます。うまく立ち上がった後は、スペースキーを何度か押すだけでニュースの内容を読むことができます。詳しくは、`man mnews` を参照して下さい。

(注意) `man mnews` とした時に、`"No manual entry for mnews."` と出るようでしたら、環境変数 `LANG` をセットし直す必要があります。`"setenv LANG japan"` あるいは `"setenv LANG ja*_JP.EUC"` とした後でもう一度 `man mnews` として下さい。また、`mnews` のオプションの説明は、コマンドライン上で `mnews -h` で見る事が可能です。

・ `gnus` の使い方:

`gnus` は、汎用エディタ `emacs` 上でニュースを読み書きするためのコマンドです。`emacs` の中で `ESC-x gnus` とすれば立ち上がります。詳しい使い方は、`emacs` に入った後 `ESC-x info` で `info` マニュアルのモードに入って、`gnus` のところを参照して下さい。

・ 他のマシンからの接続:

計算機センターのニュースには、`nntp` を使って岡崎共同研究機構内のすべての(インターネットアドレス 133.48.\*\*.\* を持つ)マシンからの接続が可能です。機構内の方は、研究室のワークステーションに `mnews` 等のニュースリーダをインストールすれば、読み書きすることができます。また、Mac からもニュースリーダさえあれば、アクセスすることができます。接続するホストは、`ccnews.ims.ac.jp` です。現在のところ、機構外のマシンからのアクセスは許可しておりませんので、外部から利用する場合は `ccfep1` か `ccfep2` にログインしてからお使い下さい。

質問等の受け付け窓口の変更について

計算機に関する質問は、実行環境の説明やコンパイルオプションの明記など、電話や口頭では伝えにくい内容を含むものが非常に多くあります。そのような状況を考えて、これまでは e-mail によるものだけを受付けてきましたが、フォートランに関する質問やシステム固有のコマンドの利用方法など、独立に同じ質問が寄せられることも多く、必ずしも効率の良い運用形態であるとは言えない状況でした。今回、ニュースシステムを利用することになって、今後は `imscquestion` というグループを、質問用の窓口として運用していくことになりました。以前に回答されている同じ質問に関しては該当する記事を参照するだけで良くなりますし、質問を契機にわかったシステムのバグ情報等に関してもニュース上で知識として蓄えることが可能になりました。また、センター職員では不十分な回答しかできないような場合にも、一般の利用者の方々の中で詳しい方からの回答で補っていただくことが可能です。

なお、`imsc@draco.ims.ac.jp` への質問の e-mail は、これまで通り受け付けております。ここに来た e-mail は `imscquestion` に自動的にポストされるように設定されていますが、ネットワークアクセスの可能な方はできるだけ早いうちにニュースを御利用いただくようお願いします。

ニュースダイジェスト(平成6年8月25日まで)

これまでに投稿されたニュースの項目のうち、主なものを簡単にまとめてみました。今のところ投稿の大部分は、imscc@draco.ims.ac.jp へのメールでの問い合わせです。内訳を、次の表に示しておきます。

ニュースグループ名	投稿数 (メール)	記事の内容				
		質問	要望	回答	情報	その他
imscc.general	28(0)	0	1	1	23	3
imscc.question	138(85)	47	14	63	0	14
imscc.cluster	6(0)	1	0	0	5	0
imscc.cluster.question	20(0)	5	2	10	0	3
imscc.misc	4(0)	0	0	0	1	3
imscc.rec	6(0)	0	0	0	0	6

これまでに投稿されたニュースのダイジェスト

\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$

\$\$ imsc.general \$\$

\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$

[4月28日]

1:+[ 0:taka@draco.im] Welcome to imsc.general !!

新しいニュースシステム開設のお知らせと、このニュースグループの目的。

このニュースグループ imsc.general は、

- ・定期点検の日取りなど運用に関するお知らせ
- ・新しく入ったライブラリー等の情報

など、センターから皆さんへ情報を御提供する窓口としてだけでなく、利用者の皆さんからの御意見・御要望を受け付けるとともに、広く計算機の利用に関する情報交換の場として運用していきたいと思っております。

...

-

[5月2日]

2: [ 0:tetsu@draco.i] STOP! Network

3: [ 0:tetsu@draco.i] A program of system maintenance

5: [ 0:matto@aqua.ch]

4: [ 0:tetsu@draco.i] a program of network stop

6: [ 0:tetsu@draco.i] Re:A program of system maintenance

ネットワーク一時停止と、システムメンテナンスのお知らせ。

-

[5月13日]

7: [ 0:tetsu@draco.i] Hard Error

8: [ 0:tetsu@draco.i] about MDPS

5月13日12:00頃のMD P Sの障害の報告。

-

[5月26日]

9: [ 0:aoyagi@draco.] FreeWare to be installed (ccfep1/2)

10: [ 0:matto@og4.che]

エントリーマシン上でインストールしてほしいソフトはありませんか、という呼掛けとそれに対する反応。

-

[May. 27]

11: [ 0:tetsu@draco.i] about SYSTEM stop

分電盤テストに伴うシステム停止のお知らせ

-

[May. 30]

12: [ 0:tetsu@draco.i] SX-3 STOP

13: [ 0:tetsu@draco.i]

15: [ 0:tetsu@draco.i]

ファイルシステム /week 再構築のためのシステム停止のお知らせ

-

[Jun 27]

16: [ 0:tetsu@draco.i] グループのcpu 点数使用、上限値参照コマンド  
17: [ 0:tetsu@draco.i] グループの各ファイルシステムの使用、上限値参照コマンド  
showlim コマンドの使い方。

[Jul. 19]

18: [ 0:minamino@ims.] To g92 users  
Gaussian92 に関する情報として、マニュアルに書いてある以上にDirect SCF法が有理になるというテスト結果の報告。

[Jul. 22]

20: [ 0:hh5@alkaid10.] about AppleTalk File Server  
21: [ 0:nanbu@eyring.]  
ワークステーションクラスタに関する要望と、それに対する回答。

[Jul. 24]

22: [ 0:ayogi@draco.] Array HD trouble & MDPS maintenance  
23日の Array Disk の障害復旧と MDPS のメンテのためのシステム運用のお知らせ。

[Jul. 25]

23: [ 13:ay0@ccfep2.im] abend job  
23日の障害に伴う abend ジョブのリスト

[Aug. 4]

24: [ 5:ay0@ccfep1.im] N1-Network stop  
N1 ネットワーク一時停止のお知らせ

[Aug. 10]

25: [213:am3@ccfep1.im] Sokuhou No.83 (imscc)  
No. 83 センター速報

[Aug. 20]

26: [ 9:am3@ccfep1.im] system-down 8/20 17:50  
雷による瞬時停電(8月20日17:00頃)に起因するシステムダウンの報告

[Aug. 21]

27: [ 10:am3@ccfep1.im] nqs-close 8/21 06:15  
28: [ 8:ay0@ccfep1.im] Abend job  
8月21日6:00頃のハードディスク障害にともなう NQS 停止と abend job のお知らせ。

\$

\$\$ imsc.question \$\$

\$

[Apr. 28]

1:+[ 0:taka@draco.im] Welcome to imsc.question  
ニュースグループ開設のお知らせ。

...



このニュースグループ imscq.question は、これまで e-mail にて行なってきた、質問とその回答のやりとりを公開し、センター利用の knowhow を一般の利用者の方々にも広めていくためのものです。また、質問等の内容によっては、センター職員よりも利用者の方々の皆さんの方がお詳しい場合も多々あります。そのような場合には、皆さんの研究室において蓄積された knowhow をお知らせいただくことによって、的確な対応がなされることを期待しております。

なお e-mail による質問の受け付けは、これまで通り imscq@draco.ims.ac.jp にて行なっております。ただし、今後 e-mail によって届けられた御質問は、自動的にこのニュースグループへポストされるように設定しますために、imscq@draco への e-mail は内容が公開されるということを御了承下さい。

...

-

[Apr. 28]

2: [ 0:kk6@ccfep2.im] showlim on ccfeqs.

6: [ 0:taka@draco.im]

showlim を ccfep1,2 から使う方法についての質問と回答。

UNIX には、標準でリモートシェルコマンド(rsh)というのがあり、これを使うことで、わざわざログインしなくても実行することができます。コマンドライン上で、showlim -disk とか showlim -cpu する代わりに、

```
rsh super showlim -disk
```

あるいは、

```
rsh super showlim -cpu
```

として下さい。

...

-

[Apr. 30]

4: [ 0:tamtam@center] MOPAC7/COSMO\_on\_SX3

MOPAC7 で無限ループに入るというトラブルの報告。

なお、このトラブルは、SX-3 特有のものではなく、もともとの MOPAC7 上でも起きることが判明しています。

-

[May 8]

9: [ 0:amatatsu@quar] None

12: [ 0:matto@aqua.ch]

15: [ 0:nanbu@eyring.]

14: [ 0:nanbu@eyring.]

フォートランでバイナリーで書き出した数値データの互換性に関する質問と回答。

この相違が起きた理由は恐らく浮動小数点データ形式の差異だと思えます。ワークステーションでは一般に IEEE 形式を採用しています。しかし、スーパーコンである SX3 では IBM 形式を採用しています。そのため、起きたものと思われれます。

そこで、対処方法がないかというところではありません。

フォートラン実行時環境オプションの中の

F\_UFMTIEEE

により形式変換が可能です。指定方法は C-Shell(csh) 環境であれば、  
setenv F\_UFMTIEEE u[,u] .....  
但し、u は形式変換を行なう外部装置識別子を指定する。です。

これにより、指定された装置識別番号に接続された書式なしファイルは IEEE 形式であると判断し、実行されたプログラムが動作している IBM 形式との間で形式変換をしながら入出力が行なわれます。シェルスクリプトとしての例はセンター発行の「利用の手引き」66頁上から8行目にあります。(この中では装置番号8番を指定している。)

-

[May 11]

16: [ 0:takahasi@poin] question

18: [ 0:nanbu@eyring.]

17: [ 0:takahasi@poin] question

19: [ 0:nanbu@eyring.]

フォートランのオブティマイザー fopp のバグ報告と、バージョンアップによる解決のお知らせ。

-

[May 17]

20: [ 0:mito@aqua.che] How to refer C-shell environment?

21: [ 0:taka@draco.im]

C で getenv() という関数の使い方についての質問と回答。

mito> 環境変数からファイル名を取ってきたいと思い、CのLibraryのgetenvを  
mito> 使ってみました。SX-3のマニュアルによれば、

```
>GETENV(3C)          STANDARD C LIBRARY          GETENV(3C)
```

```
>
```

```
> (省略)
```

```
mito> コマンドラインから testsx.csh をうごかすと、hp9000 ではうまく動くの
```

```
mito> に、SX-3 では
```

```
> セグメンテーション違反
```

```
mito> と出て core を吐いて止まってしまいます。
```

```
mito> SX-3 の C は特殊で使い方に特別の注意でも必要なのでしょうか？
```

SX-3 上のマニュアルによれば、

```
> getenv(3C) を使用する場合には、型宣言が必要です。
```

```
~~~~~
```

ということなので、cc でコンパイルする場合には、char \*getenv(); という行を入れて、char のポインタを返すということを宣言してやらないといけません。

...

-

[May 18]

24: [ 0:mito@aqua.che] Passing C string data to FORTRAN

25: [ 0:taka@draco.im]

27: [ 0:mito@aqua.che] Re: Passing C string data to FORTRAN

フォートランから C の関数をリンクする時の方法に関する議論と、環境変数を取り込むためのサブルーティン getenv について。

...

まず一つは、フォートランからの call の場合、引数は普通、ポインターで渡されるということ。だから、C の方では

```
long *lenFilename
```

と受けてやらないといけません。

二つめは、getenv(name) は文字列を指すポインターを返すだけなので、

```
filename = getenv(name)
```

では、文字列のコピーまでは行なわれないということです。

...

-

[May 18]

```
28: [ 0:hx2@super.ims] None
```

```
29: [ 0:taka@draco.im]
```

環境変数 LANG の設定方法についての質問と回答。

-

[May 19]

```
30: [ 0:wshinoda@nc.t] None
```

```
32: [ 0:tetsu@draco.i]
```

光磁気ディスクの容量に関する問い合わせと回答。

結局、申請書に書かれている光磁気ディスク容量は、M 6 8 0 H での光磁気ディスクであり、/save /month は、別の申請が必要という回答。

追加申請は、既存の計算機利用追加申請の所定の用紙に記入する。手元に追加申請書が無い場合は、センター受け付け(電話0564-55-7462)に請求。

-

[May 19]

```
31: [ 0:hx2@super.ims] None
```

```
34: [ 0:taka@draco.im]
```

バッチで実行した場合に返される、

```
stty: Not a typewriter
```

のメッセージについての問い合わせと回答。

-

[May 19]

```
33: [ 0:mito@aqua.che] Temporary Data Sets on M680
```

M680 上の一時データセットについての質問。

-

[May 25]

```
35: [ 0:g44088a@nucc.] error
```

```
36: [ 0:nanbu@eyring.]
```

フォートランで書いたプログラムがセグメンテーション違反で動かないのだが、どこに相談すればいいのかという問い合わせとそれに対する回答。

...

imscc@draco.ims.ac.jp へ電子メールで連絡して頂くかまたは、ccfep1.ims.ac.jp あるいは ccfep2.ims.ac.jp へログインし、ローカルニュースを利用して頂くことになります。但し、電子メールでの質問も自動的に

ローカルニュースのニュースグループimscc.questionへ投稿されることになります。十分配慮して下さい。

...

-

[May 25]

39: [ 0:shoji@mmm.t.u] [Mail Delivery Subsystem: Returned mail: Host unknown]

40: [ 0:taka@draco.im]

superからのメールが届かないのだが、という問い合わせ。

利用の手引の53ページの.forwardファイルの書き方のところで、

login\_name@user\_IP\_address

は

login\_name@[user\_IP\_address]

の違い。

-

[May 26]

42: [ 0:msakurai@bio.] Use of Library

47: [ 0:tetsu@draco.i]

Sx-3数値計算ライブラリー (ASL/SX or MATHLIB/SX)のソースを見ることはできるか、オンラインマニュアルはあるのかとの問いに対して、

ソースを見ることはできない。オンラインマニュアルはあるにはあるが、概略的なものにすぎないので、詳しいオプションとかを知りたい場合は、個人で購入していただかなくてはならない旨回答。

-

[May 27]

43: [ 0:yamato@cc.tua] None

44: [ 0:tetsu@draco.i] Re:

SX-3で利用可能な磁気テープについて

1/4inchのものではなく、フォーマットはIBM形式である。しかし、自由に持ち出すことは原則としてできず、一般のWSでそのまま読めるかどうか保証できない。

-

[May 27]

45: [ 0:jkoketsu@isc.] re thanks and question

46: [ 0:tetsu@draco.i]

QCLDBはどのようにして利用すればいいのかという質問に対して、

日立の汎用機M-680Hに接続すればQCLDBを利用でき、方法は、TSSのREADYモードでQCLDBコマンドを使用する、と回答。

-

[May 30]

48: [ 0:hx2@super.ims] None

51: [ 0:hx2@super.ims] None

52: [ 0:nanbu@eyring.]

libals1.aをリンクする方法についての問い合わせ。

利用の手引60ページに誤りがあり、

f77sx source.f -l-las11 [return]

か、

f77 source.f -lasl1 [return]

が正しいという回答。

-

[May 31]

49: [ 0:msakurai@bio.] User's report

50: [ 0:tetsu@draco.i]

利用報告書を速達で送ったというユーザさんからの報告と、それに対して、もう少し早く送って欲しいというセンター側からの回答。

-

[Jun 1]

53: [ 0:kohara@koura0] Gaussian(CW7DJ0)

54: [ 0:tetsu@draco.i] Re: Gaussian(CW7DJ0)

Gaussian で計算するために、24時間ジョブを使いたいのが構わないのかという質問に対して、

24時間のジョブクラスは特別な申請は必要ないので、御自由に使っていて構わないという回答。また、一時ファイルは、NQS からの利用である限り、特にユーザの方で気にする必要はないというアドバイス。

-

[Jun 3]

55: [ 0:takeuchi@kour] SX-3(CW7DJ0)

56: [ 0:tetsu@draco.i] Re: SX-3(CW7DJ0)

SX-3 の追加申請を5月13日に行なったが、いつから使えるようになるのか、という問い合わせに対し、

来週の頭からになると思われるという回答。

-

[Jun 3, 11]

57: [ 0:shinji@aqua.c] io-error on month

59: [ 0:shinji@aqua.c] mcopy...

60: [ 0:tetsu@draco.i] Re: mcopy...

61: [ 0:shinji@aqua.c] Thank you for your quick reply.

62: [ 0:tetsu@draco.i] Re: Thank you for your quick reply.

mcopy の障害に関する問い合わせと回答。

なお、この報告により、mcopy のスクリプトのバグが発見された。

-

[Jun 16]

64: [ 0:saikawa@sc.ni] None

66: [ 0:tetsu@draco.i]

共同利用者の追加を行なうための手続きについて

-

[Jun 23]

67: [ 0:a40316a@nucc.] None

68: [ 0:nanbu@eyring.]

良くわからないエラーが出るがどうしてかという問いに対して、

ちょうどその時 /tmp ディレクトリーが溢れていたの、そのための副作用ではないか？という回答が

示された。

-

[Jun 25]

69: [ 0:Takeuchi@kour] None

Gaussian92 を使っているが、その計算の原理について説明した文献はないかという問い。

-

[Jun 25]

70: [ 0:shinji@aqua.c] IO error ..

mcopy の IO エラーの報告。

-

[Jul. 14]

74: [ 0:shinji@aqua.c] disc trouble on /home

自分の実行モジュールの最初に、他の人のファイルが書き込まれてしまっていたというとんでもない障害の報告。

-

[Jul. 15]

75: [ 0:shoji@mmm.t.u] file owner

自分のディレクトリーの下のファイルが他の人の持ち物になってしまっているというとんでもない障害の報告。

-

これら二つの障害は、NEC の方で調査してもらっています。

-

[Jul. 15]

76: [ 0:takada@nag2.i] None

78: [ 27:taka@draco.im]

ワークステーションクラスタがダウンしているみたいだがという問い合わせと、それに対するセンター側の回答。

-

[Jul. 18]

80: [ 0:s-itoh@ics.ka] 94 Center Report

81: [ 0:tetsu@draco.i] Re: 94 Center Report

利用報告書の原稿に間違いが発見されたので、修正したいが間に合うかという問いに対して、速達で出していただければまだ間に合うという回答。

-

[Jul. 21]

82: [ 0:mito@aqua.che] Q:WS cluster

83: [ 0:nanbu@eyring.]

WS クラスタの拡張に関する問い合わせと回答。

-

[Jul. 22]

84: [ 0:hh5@alkaid10.] about rcp

85: [ 26:taka@draco.im]

クラスタで rcp ができなくなってしまったがどうしたのかという問いに対して、こちらの設定ミスでしたというセンター側の回答。

-

[Jul. 23]

86: [ 0:shinji@aqua.c] trouble on /week and /work ?

87: [ 0:am3@draco.ims] None  
7月23日に /week と /work に障害が起きたという指摘と報告。

-

[Jul. 23]

88: [ 0:mito@aqua.che] Are local variables of FORTRAN allocated in stack?

91: [ 0:nanbu@eyring.]

92: [ 0:mito@aqua.che]

93: [ 0:nanbu@eyring.]

95: [ 0:mito@aqua.che] Thank you for your answer.

フォートランの局所変数のアロケーションについて。

M680 では、局所変数のすべてをデータセグメントへ割り付けているのに対して、並列処理を指定した場合 SX-3 では stack に割り付けられるので、明示的に save 文で指定してやらないと変数の内容が保存されなくなる。しかし、並列処理を指定しない場合でもデータセグメントへの割り付けは今後変更される可能性もあるので、暗黙のうちに変数の保存を仮定しているようなプログラムは書かない方がいいのではないかという議論。

-

[Aug. 1]

96: [ 0:takano@ims.ac] question

97: [ 0:kiri@alkaid10]

98: [ 0:takano@ims.ac] question

99: [ 0:takano@ims.ac] question2

100: [ 0:am3@draco.ims] None

M680 での区分データセットに対して、頻繁に condense の要求が出ることについて。

-

[Aug. 10]

103: [ 0:ishida-t@la.s] None

104: [ 43:taka@draco.im]

105: [ 0:nanbu@eyring.]

107: [ 0:ishida-t@la.s] None

108: [ 0:nanbu@eyring.]

109: [ 0:ishida-t@la.s] None

HP のフォートランコンパイラのオプション、および、ニュースシステムに関する質問と回答。

+OP1P というオプションを付けたがうまく働かないのは、LANG がデフォルトで japanese になっていたため、/usr/lib/nls/\$LANG/ftnopp.cat を見に行こうとして失敗していたのが原因であった。いまは、/usr/lib/nls/japanese を作り直したため、解決している。

ホームディレクトリが全く異なる super と WS クラスタで .newsrsrc ファイルを共通化するには、ニュースリーダを立ち上げる前に最新の .newsrsrc ファイルをコピーする以外の方法を思いつかない。

-

[Aug. 10]

106: [ 0:okada@pchem1.] question about how to use CMQCA

CMQCA の使い方などを教えて下さいという要求。

-

[Aug. 11]

110: [ 0:kenro@si.fi.a] files left

111: [ 25:taka@draco.im]

116: [ 0:kenro@si.fi.a] Thanks

WS クラスタのバッチマシン上に中間ファイルが残ってしまったような気がするが、どのようにして消したらいいいのかという問いに対して、

バッチで実行している範囲内では、特にトラブルでもない限りワークファイルを明示的に消す必要はない。システムの方で、自動的に消去するようになっているという回答。

-

[Aug. 11]

112: [ 0:matto@aqua.ch] link fortran subroutine to main()

117: [ 39:taka@draco.im]

132: [ 0:matto@aqua.ch]

C とフォートランのリンクの方法についての質問に対して、

オブジェクトファイルのページングは一致させておいた方がいいという回答が示された。ライブラリのリンクに関して、

さて、問題のリンクフェイズですが、一番の問題は、フォートランの組み込み関数を引用する場合のライブラリの指定です。必要に応じて、

```
% cc hogemain.o hogesub.o -lu77sx -lp77sx -lv77sx -lf77sx -li77sx
```

などと指定しなければなりません。あるいは、ちょっと気持ち悪いのですが、

```
% f77sx hogemain.o hogesub.o
```

と、f77sx を使ってリンクするという裏技(?)もあるようです。

...

という方法があるという回答。

-

[Aug. 11]

113: [ 0:Iwata@ims.ac.] qsub & qstat

114: [ 53:taka@draco.im]

126: [ 0:kiri@alkaid10]

WS クラスタの qsub があまりにもお馬鹿さんなのは、どうにかならないのかという要求に対して、空いているマシンを探してキューに放り込むように少し賢くなりましたという回答。

-

[Aug. 11]

115: [ 0:Iwata@ims.ac.] Re: qsub & qstat

120: [ 32:taka@draco.im]

ccfep1,2 の上から、super のキューを見るにはどうしたらいいのかという質問に対して、利用の手引の記述は不十分であるが、

```
qstat @super
```

などで見ることができるという回答が示された。

-

[Aug. 12]

118: [ 0:ishida-t@la.s] None

119: [ 0:kiri@alkaid10]

qsub で実行しようとしたが、

```
stty: : タイプライターではありません。
```

```
term: Undefined variable.
```



というエラーが出て実行できなかったが、どうしたらいいのかという質問に対して、各自の .login の中の stty や set term の設定を外す必要があるという回答。

-

[Aug. 15]

123: [ 0:kq6@alkaid10.] fj.lang.c++

125: [ 0:kiri@alkaid10]

127: [ 0:kq6@alkaid10.]

ims1 でのニュースに関する質問と回答。

これは本来、ims1 のローカルなニュースグループへ問い合わせるべき問題。

-

[Aug. 15]

124: [ 0:mogi@qcl.t.u.-] library program gramol

134: [ 0:minamino@ims.] Re:library program gramol

ライブラリプログラム gramol に関する問い合わせと回答。

-

[Aug. 17]

129: [ 0:ll7@ccfep1.im] None

131: [ 65:taka@draco.im]

showlim で見える内容は、現在の状態をそのまま反映していないのではないかという問いに対して、確かに、showlim は依然に調べた内容を表示するだけなので、実際の状況を反映するまで少し時間がかかるという答え。

-

[Aug. 19]

133: [ 0:shinji@aqua.c] ..

135: [ 0:nanbu@eyring.]

mcopy が終了しないが、他の人が MDPS 上で mv を実行しているのが原因ではないかという問い合わせと回答。

センターの方から、mv を実行していたユーザーさんに対してプロセスを止めていただくように連絡した旨の報告と、MDPS 上での mv は、できないことはないが非常に遅いので、やめていただく方がいいという内容のコメント。

-

[Aug. 19]

136: [ 0:yamagen@sunfl] about f77

137: [ 0:nanbu@eyring.]

138: [ 0:nanbu@eyring.]

139: [ 0:nanbu@eyring.]

自作の乱数発生プログラムの実行結果がおかしいのだがという問い合わせに対して、

最適化を行わないように指示行を入れることによって、正しく動くようになるという回答が示された。その後、これはコンパイラのバグではなく、内部で 64 ビットレジスタ上で演算しているために、期待した通りオーバーフローが起こらないことが原因と判明。処理系依存のプログラムは、できるだけ使わないようにする方がいいという例。

-

[Aug. 20]

142: [ 0:kosugi@ims.ac] WS cluster の計算時間設定

IBM クラスタにおいて、ジョブの時間設定がうまくできないのだがという問い合わせ。

\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$

\$\$ imsc.rec \$\$

\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$

[Apr. 28]

1: [ 0:taka@draco.im] Welcome to imsc.rec !!

ニュースグループ imsc.rec 開設のお知らせ。

...

このニュースグループ imsc.rec は、recreation のための情報交換を主な目的とするグループです。皆さんの趣味の領域での議論や、お遊びに関する耳寄りな情報など、分子研あるいは機構内外で研究生生活を楽しく送るための情報なら何でも大歓迎です。

-

[Aug. 13]

2: [ 0:kq6@alkaid10.] script 'birthday'

誕生日データファイルを使って、その日が誕生日であるという人を表示するプログラム。

-

[Aug. 23]

3: [ 0:shinji@aqua.c] sh's for showlim and qstat

4: [ 79:iw4@ccfep1.im]

showlim や qstat の出力を見やすくするためのスクリプトとその改良版。

\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$

\$\$ imsc.cluster \$\$

\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$

[Jul. 21]

1: [ 0:aoyagi@draco.] Start WS-Cluster System

ワークステーションクラスタ試験システム公開のお知らせ。および、ワークステーションクラスタの利用の手引。

-

[Jul. 22]

2: [ 22:taka@draco.im] Welcome to newsgroups for workstation cluster.

WS クラスタ用のニュースグループのお知らせ。

-

[Aug. 2]

4: [ 0:en0@alkaid10.] HHowdy ?

クラスタシステム上のワークファイルに関する問い合わせ。

-

[Aug. 16]

5: [ 0:kiri@alkaid10] Version UP Mule 2.0

クラスタ上のエディターのバージョンアップのお知らせ。

-

[Aug. 17]

6: [ 20:taka@draco.im] Work on batch machines

これまで分割されていたワークディレクトリを一つに統合したというお知らせ。

-

[Aug. 22]

7: [ 0:aoyagi@draco.] System Maintenance on 8/29  
クラスタシステムのメンテを8月29日に行なうというお知らせ。

\$  
\$\$ imsc.cluster.question \$\$  
\$

[Jul. 22]  
1:+[ 22:taka@draco.im] Welcome to newsgroups for workstation cluster.  
ニュースグループ imsc.cluster.question 開設のお知らせ  
...

Cluster の運用等に関する御要望等は imsc.cluster へ、また、御質問は imsc.cluster.question へ投稿下さい。このグループ分けは、それほど厳密なものではありませんので、どちらのグループでも構いませんので、お気軽に投稿していただきたいと思います。

-  
[Jul. 22]  
2: [ 26:taka@draco.im] Re: about rcp  
rcp が出来なくなっていたことに対するお詫びと、もと通り復活したことのお知らせ。

-  
[Jul. 26]  
3: [ 0:kq6@alkaid10.] g++ library  
4: [ 20:taka@draco.im]  
5: [ 0:kiri@alkaid10]  
6: [ 0:kq6@alkaid10.]  
g++ のライブラリがないが使えないのかという質問に対して、gcc-2.6.0 をフルセットで再びインストールしましたという回答。

-  
[Jul. 28]  
7: [ 0:kq6@alkaid10.] execute permission of output file  
10: [ 16:taka@draco.im]  
14: [ 0:kiri@alkaid10]  
Qsub の出力ファイルに実行パーミッションが付くのはどうしてかという質問に対して、NQS のソースが悪いことがわかったので、次のメンテの時に修正するとの回答。

-  
[Jul. 30]  
8: [ 15:jr5@ccfep1.im] Why can't we use a remote shell?  
9: [ 38:taka@draco.im]  
[Aug. 19]  
18: [ 0:mito@aqua.che] Remote shell, please.  
19: [ 0:ao0@alkaid10.]  
20:+[ 0:mito@aqua.che] Using remote shell.  
クラスタシステムからリモートシェルが使えないのをどうにかして欲しいという要望に対して、サポートしましたという回答と、クラスタシステムから手元のプリンタに出力するためのリモートシェルの使い方例。

-  
[Aug. 1]  
11: [ 0:mito@aqua.che] ? qsub -x -q ibm ???  
15: [ 0:kiri@alkaid10]

IBM クラスタにジョブを投入した場合、スクリプトの実行シェルが `csh` にならないことに対する質問。

-

[Aug. 2]

12: [ 0:kq6@alkaid10.] time limit of a job

13: [ 0:ao0@alkaid10.]

qstat での実行時間の見方に関する質問と回答。および、時間切れでジョブが切られた場合にメールで通知するようにしたことの報告。

-

[Aug. 3]

16: [ 0:ae6@alkaid10.] date

17: [ 0:kiri@alkaid10]

ジョブ投入時刻がおかしくなっているのではないかという質問に対して、何らかの理由で、キュー `hp5` のログの出力がおかしかったようで、現在は時刻が狂うという現象も起きなくなっているという回答。

\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$

\$\$ imsc.misc \$\$

\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$

[Apr. 28]

1:+[ 0:taka@draco.im] Welcome to imsc.misc !!

ニュースグループ `imsc.misc` 開設のお知らせ。

. . .

このニュースグループ `imsc.misc` は、他のグループに分類するのが難しいような内容の議論や、利用者の皆さんが開発されたツール類の展示や公開、売ります・買いますの揭示版、機構あるいは分子研内の耳寄りな情報の御提供など、文字通り「その他」のニュースグループとして幅広く運用していきたいと思えます。

-

[Jul. 1]

2: [ 64:taka@draco.im] New C compiler

3: [ 0:matto@aqua.ch]

4: [ 26:taka@draco.im]

SX-3 の C コンパイラがバージョンアップしたお知らせ。

この結果、数学関数のインライン展開ができ、関数呼び出しを含むループのベクトル化が可能になった。また、ポインター参照を含むループもベクトル化できるようになった。

## 8 グループにおける利用点数(課金)、ファイル容量の管理

NEC製のスーパーコンピュータ(SX-3/34R)、高速演算サーバシステム(HSP)においては、ユーザ個別の課金、ファイル容量管理は出来るもののグループ単位での管理は出来ません。そこで、OSへの機能追加を要望しています。当面は運用に支障をきたさない様に、グループ単位で管理するためのプログラムを作成し管理しています。現在は一日6回(4時間おき。今後一日に実行する回数を増やすように努めています。)グループ単位での課金管理およびファイル容量管理を行っています。ここでは、どのようにグループ単位での課金管理(以後GSBUとする)、ファイル容量管理(以後GQUOTAとする)を行っているかを記述します。これらの管理は3システム共通です。

### 8.1 GSBU、GQUOTA機能の概要

#### 8.1.1 GSBU

グループの代表利用者(以後グループ長とする)は、必要がある場合にはグループ内の各ユーザ毎に利用点数上限値の制限をすることができます。

#### 8.1.2 GQUOTA

グループの代表利用者は、必要がある場合には各ファイルシステム毎にグループ内ユーザのディスク使用上限値の制限をすることができます。

その制限の仕方を以下に述べます。

#### 8.1.3 複数グループに属しているユーザの制限方法

複数のグループに属しているユーザの場合、属しているグループのうちの1つでも、グループ全体の使用実績がグループ全体の使用上限値を越えると、このユーザは全くログインできなくなります。

## 8.2 制限方法

### 8.2.1 グループ内ユーザ単位での制限

- ・ /local/GSBU/グループ名/use (実績ファイル)  
グループ内のユーザ毎のCPU使用実績を記録しています。
- ・ /local/GSBU/グループ名/lim (制限ファイル)  
グループ長が設定を行います。  
グループの各ユーザ毎の利用点数上限値の設定を行います。

qp3	5	→	qp3	10
qp4	10		qp4	20
qp5	40		qp5	30
実績ファイル			制限ファイル	

\* /local/GSBU/グループ名/use中のユーザの使用実績が、/local/GSBU/グループ名/lim中の使用上限値を越えた場合に対象ユーザがログイン不可になります。

### 8.2.2 利用方法

ユーザでグループ長が使用できるのは、8.2.1で示した/local/GSBU/グループ名/limファイルのみです。以下にその利用方法を記します。

(例) zz0グループ

グループ長はqp3で、グループ全体の利用点数上限値は3600点、現在までの利用点数実績は40点とし、グループ内にはグループ長の他にグループ内ユーザとしてqp4、qp5、qp6の3人がいるとします。

qp3	24313	20
qp4	24314	15
qp5	24315	5
qp6	24316	0

/local/GSBU/zz0/useファイル

このファイルは、グループ内ユーザは読むことはできます。

第一カラムはログイン名、第二カラムはユーザID、第三カラムは、現在の利用実績を示しています。

・グループ別利用点数上限値ファイル(/local/GSBU/グループ名/lim)の内容

サービス開始後はこのファイルは存在しません。この制限を利用したい代表利用者は以下のコマンドを実行してファイルを作成してください。

```
% mv /local/GSBU/グループ名/lim.default /local/GSBU/グループ名/lim
```

qp3	24313	3600
qp4	24314	3600
qp5	24315	3600
qp6	24316	3600

/local/GSBU/zz0/limファイル

このファイルもグループ内ユーザは読むことができ、グループ長のみが読み書き可能です。

グループ長は第三カラムのみ変更できます。

各ユーザ毎の利用点数上限値の初期値は、各グループの利用点数上限値と同じ値です。

zz0グループの利用点数上限値が3600点の場合、グループ内ユーザ各々の初期値も3600点です。

### 8.3 GQUOTA

#### 8.3.1 相違点

・通常のquotaシステムとGQUOTAシステムとの相違点は以下の通りです。

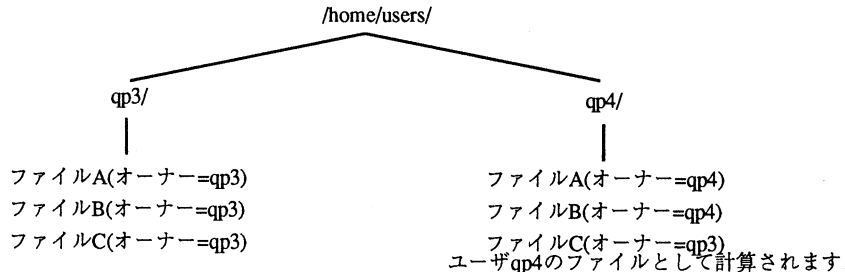
(1) リアルタイムではありません。

4時間毎に実行するため、ファイル使用実績のシステムへの反映はリアルタイムではありません。

(2) ファイル所有者の判別は、以下の通りです。

ユーザのディレクトリの配下のファイルは、オーナーが他のユーザであってもそのユーザの所有の物として計算します。

(例)



\*他のファイルシステム(/week/users、/month/users、/save/users)についても同様です。

#### 8.3.2 グループ内ユーザ単位での制限

・/local/GQUOTA/グループ名/use.ディレクトリ名 (実績ファイル)

グループ内のユーザ毎のディスク使用実績を記録しています。

- ・ /local/GQUOTA/グループ名/lim.ディレクトリ名 (制限ファイル)  
グループ長が設定を行います。  
グループ内のユーザ毎のディスク使用上限値を設定します。

実績ファイル	<table border="1"> <tr><td>qp3</td><td>3000</td></tr> <tr><td>qp4</td><td>10000</td></tr> <tr><td>qp5</td><td>35000</td></tr> </table>	qp3	3000	qp4	10000	qp5	35000	→	制限ファイル	<table border="1"> <tr><td>qp3</td><td>10000</td></tr> <tr><td>qp4</td><td>20000</td></tr> <tr><td>qp5</td><td>30000</td></tr> </table>	qp3	10000	qp4	20000	qp5	30000	qp5のログインが制限されます。
qp3	3000																
qp4	10000																
qp5	35000																
qp3	10000																
qp4	20000																
qp5	30000																

\* /local/GQUOTA/グループ名/use.ディレクトリ名 中のディスク使用実績が、/local/GUOQTA/グループ名/lim.ディレクトリ名 中のディスク使用上限値を越えた場合、対象ユーザがログイン不可になります。

ファイル名: /local/GQUOTA/グループ名/lim.home  
/local/GQUOTA/グループ名/lim.week  
/local/GQUOTA/グループ名/lim.month  
/local/GQUOTA/グループ名/lim.save

### 8.3.3 利用方法

グループ長が変更できるのは、B.4.3.2で示した/local/GQUOTA/グループ名/lim.ディレクトリ名 ファイルのみです。以下にその利用方法を記します。

(例) zz0グループ

グループ長はqp3で、グループ全体の/homeのディスク使用上限値は200MBとし、グループ内にはグループ長の他にグループ内ユーザとしてqp4、qp5、qp6の3人がいるとします。

qp3	24313	13000
qp4	24314	9000
qp5	24315	19000
qp6	24316	15000

/local/GQUOTA/グループ名/use.ディレクトリ名

このファイルは、グループ内ユーザは読むことができます。

第一カラムはログイン名、第二カラムはユーザID、第三カラムはファイル利用実績を示しています。各ファイルシステム毎にあります。

- ・ グループ別のディスク使用上限値ファイル(/local/GQUOTA/グループ名/lim.ディレクトリ名)

サービス開始後はこのファイルは存在しません。この制限を利用したい代表利用者は以下のコマンドを実行してファイルを作成してください。

```
% mv /local/GQUOTA/グループ名/lim.home.default /local/GSBU/グループ名/lim.home
% mv /local/GQUOTA/グループ名/lim.week.default /local/GSBU/グループ名/lim.week
% mv /local/GQUOTA/グループ名/lim.month.default /local/GSBU/グループ名/lim.month
% mv /local/GQUOTA/グループ名/lim.save.default /local/GSBU/グループ名/lim.save
```

qp3	24313	200000
qp4	24314	200000
qp5	24315	200000
qp6	24316	200000

/local/GQUOTA/zz0/lim.home

このファイルもグループ内ユーザは読むことができ、グループ長のみが読み書き可能です。

グループ長は第三カラムのみ変更できます。

各ユーザ毎のディスク使用上限値の初期値は、各グループ全体のディスク使用上限値と同じ値です。zz0グループの/homeの利用上限値が200MBの場合は、グループ内ユーザ各々の初期値も200MBです。