

# I 部

## 目 次

寄 語 .....	阪大基礎工学部教授 笹野 高之 .....	1
1. 電子計算機センターの経緯と現状 .....		2
2. スーパーコンピュータの導入のための調査とワークショップの活動 .....		4
2.1 次期システム検討委員会について .....		4
2.2 大規模科学計算の推進をめぐる最近のアメリカの動き .....		5
2.3 スーパーコンピュータの性能 .....		6
2.4 スーパーコンピュータ・ワークショップ公開講演会とレポート 3 の発刊について .....		10
3. 計算機システムと運用について .....		14
3.1 計算機システムの特徴 .....		14
3.2 ジョブクラスの構成 .....		15
3.3 運用時間 .....		15
3.4 利用点数 .....		15
3.5 センターの主なサービス .....		16
4. 研究開発レポート .....		17
4.1 電算機センターの省電力化について .....	係 長 伊奈 諭.....	17
	助教授 柏木 浩	
	ファコム・ハ イタック(株) 村井 一郎	
	日立製 作所(株) 頭士鎮夫・国谷 剛	
4.2 ライブラリ管理システム (FLIB) の機能拡充 .....	技 官 山本 茂義 ...	22
— 「READ」はできるが「COPY」は	ファコム・ハ イタック(株) 瀬瀬 裕志	
できない公開方式 —		
4.3 カラーグラフィックスの応用その後 .....	係 長 伊奈 諭 ...	27
	助教授 柏木 浩	
4.4 パソコンを使ったカラーグラフィックスの応用について ...	係 長 伊奈 諭 ...	28

5. 一般報告 .....	34
5.1 分子研ライブラリ・プログラムの収集と開発 .....	34
5.2 データベース開発状況 .....	41
5.3 プログラム相談 .....	41
5.4 研究会・学会報告 .....	42
6. 昭和58年度稼動状況および利用者数 .....	44
6.1 利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数 .....	44
6.2 システム稼動状況 .....	44
6.3 ジョブ処理件数 .....	45
6.4 CPU時間 .....	45
7. 速報抜粋 —— 速報 (No. 26～No. 31) から抜粋 —— .....	46
8. 資 料 .....	68
8.1 センター関連組織 .....	68
8.2 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 .....	64
8.3 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 .....	65
8.4 電子計算機センター運営委員会委員 .....	66
8.5 電子計算機センター職員 (昭和59年6月現在) .....	66
8.6 建 物 図 .....	67
8.7 応用プログラム相談員一覧 .....	68
8.8 端末設置状況 (昭和59年5月現在) .....	68
8.9 マニュアルの紹介と購入方法 .....	68

寄 語

## 計算機センターに託する夢

大阪大学教授 笛野 高之

当所計算機センターの利用は年とともに盛んになり、これにともなって、わが国の理論化学における大規模計算活動も実質的な国際競争力を身につけてきたようである。まことに喜ばしいことである。その点で、センターは尽大な国家的役割を果たしているといつてよい。センターレポートはその具体的な証でもある。センター長をはじめとするセンターの職員の皆様に、心からなる敬意と謝意とを申し述べたい。

ここ2、3年の間、私個人も当センターを大いに利用させていただいた。その間、好奇心のままにときどき思い切った大ジョブを走らせてもらった。今になって振り返ってみると、そのようなとき、ややもすると計算機のほうのペースに巻きこまれて、あまりものを考えない羽目に陥りがちであったように思う。さほど創意工夫をこらさなくても、好奇心はかなりの程度にまで満たされていた。それ自体は結構なことであるが、これが習性になると、単なる労働に明け暮れて、あまりものを考えなくなるのではないかと気がかりであった。創造の喜びを味わうことなく、労働の結果だけが高能率に蓄積されてしまうのがぞろ恐ろしくさえあった。これにまひしてしまうと、将来スーパー・コンピュータが導入されたとき、大変なことになりそうである。

そこで自ら戒めたいことは、センターの利用が単なる知的労働に終始してしまつてはいけないということである。高邁な目標意識のもとに、能動的にこの優れた道具の機能を利用するべきである。いまや、腕力を誇示して自己満足するかのとき開拓時代ではない。分子科学のロマンを育てること、ひいては人類の文化を創造していく努力のほうに計算化学を踏み出させるべき時機であると思う。センターは、そのような夢を語り合う場としても機能してほしい。自らの反省をこめて、このことを願うや切である。

# 1. 電子計算機センターの経緯と現状

助教授 柏 木 浩

ワークショップ・レポートへの海外からの寄稿文の中で、次のような話が引用されている。ある国際シンポジウムでの発言で、「1960年代には量子力学計算の重心は北アメリカにあったが、70年代にはヨーロッパの方へ（大西洋のまん中へ）移動した。そして、80年代には日本の方向へ移動しつつある。」こういう発言は割引いて評価しなければならないが、分子研電子計算機センターの設立は分子科学、特に計算化学の分野で国際的に強いインパクトを与えたことはまちがいない。少し前に設立されたアメリカの国立化学計算施設（NRCC）が閉鎖された時だけに、分子研センターの成果は注目に値するものであったろう。

しかし、分子研センターの現状は楽観を許さない厳しい現実に直面している。現在の主力計算機M-200Hの約100倍の最高速度を持つスーパーコンピュータの導入を計画し、57～58年度に概算要求を行ったが、大蔵省の認めるところとはならなかった。表1.1.1に見られるように、使用されたCPU時間の総計は57年度から頭打ちとなり、59年度もほぼ同じようなわくで利用を制限しなければならない状況である。ユーザの利用申請に対する平均許可率は、57年度81%、58年度71%、59年度62%と年々低下して深刻な事態となっている。これはシステムの変更がなく、電力料金の問題で配分可能なCPU時間が前年度並に押さえられたことによる。現在年間約3,200万円の光熱水料が文部省から配当されているが、毎年約数百万円の赤字になっている。4.に示されているようなセンターの節電の努力にもかかわらず問題は解消されていない。このために、速報No.30（1984.3.10）に公開したように各研究プロジェクトの申請に対して、電子計算機センター運営委員会による厳しい査定が下されている。

センターの創設当初、主な利用目的は分子科学、生物科学の大規模科学計算におかれ、全国の関連分野の研究者が利用者として設定された。数少ないセンター職員で、このような大きな目標に答えるために、運転開始後8ヶ月の昭和54年9月から全国初の夜間、休祭日の完全無人運転を実施した。この運転方式では、ジョブ数が一定数以下になるとシステムは自動的にジョブを凍結し、電源を止め停止することによって効率のよい運転を実現できる。しかし反面では、多数のジョブが混み合ってCPUを取り合うという状況が頻発するので、ジョブの結果を取り出すまでの時間が長くなり、遠隔地からわざわざ来所した利用者が十分な結果を得ることなしに帰るといったような事態も発生している。

分子科学計算特有の大量の中間データを処理するために、センター発足当時、最高速のディスク記憶装置を多数設置しユーザに開放した。このために他センターではできないような大規模な分子軌道

計算も実行できるようになり、当センターのきわだった特徴の一つとなっている。発足以来、何回かのレベルアップによりディスクの増設を行って来たが、これもユーザ数の増加、計算規模の拡大のために、ほとんど一杯になるという状態がしばしば発生し、計算の実行が妨げられることも起きている。もう一つの大きな問題点はディスクの入出力速度が、この6年間向上していないために計算実行上の隘路になりつつあることである。これを解決するためには最新の高速ディスクと高速チャネルの導入、複数のディスクボリュームとの並行入出力（パラレル I/O）ができるシステムの設置、半導体外部記憶装置の導入などをはからねばならない。このように当センターの現状は、CPU能力の限界、ディスク容量と入出力速度の不足、光熱水料からの制限などによって頭打ちの状態にたちいたっている。

分子科学は人間生活のあらゆる面に密接した基礎科学であり、近い将来の科学技術は分子科学の基礎なくしては発展し得ない。分子研センターは分子科学のための世界で唯一の大規模センターである。アメリカ、カナダ、西ドイツ、ポーランド、韓国などの研究者が岡崎に滞在して、電子計算機を使用し高度な研究を展開している。当センターは国際的な研究施設として、ますますその機能を高め海外の研究者により多くの大規模計算の機会を与えられるようになることが求められている。今年度も、再度、スーパーコンピュータの導入を軸として、約40%の予算の増額を求める概算要求を提出している。各方面の理解と支持が切に望まれる。

表 1.1.1 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	M-180	M-180	M-200 H	M-200 H M-180	M-200 H 2台	同左
運転方式	2台 3ヶ月 有人	2台 9月から 無人	M-180 200 H無人 180 有人	疎結合 無人	疎結合 無人	
利用者数 <sup>a</sup>						
所内	48	84	101	128	146	155
所外	107	254	325	330	375	426
合計	155	338	426	458	521	581
稼働時間	1,087	6,071	6,558	6,721	6,305	6,170
利C 用P 申U 時 請 間						
(200 H基準) 申請	929	4,666	11,033	10,230	11,938	13,059 <sup>b</sup>
許可	816	3,171	7,427	8,306	10,141	10,091
使用	485	2,253	4,583	5,929	7,742	8,050
総使用CPU時間 <sup>c</sup>	509	2,405	5,405	6,320	8,205	8,489
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>	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 <sup>d</sup> 論文数	0	24	93	118	190	185

a：所内利用者数はアイドル課題のための重複を含むのべ人数

b：申請および使用の詳細については6-1項を参照

c：ここでの値は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。

## 2. スーパーコンピュータの導入のための調査と ワークショップの活動

### 2.1 次期システム検討委員会について

分子研電子計算機センターは昭和58年度に、59年度スーパーコンピュータ導入計画をたて、概算要求を行った。衆知のように、これは大蔵省の認めるところとはならなかったが、準備の必要上次期システム検討委員会を58年10月に発足させた。この委員会の目的は次期システムの目標の設定、ベンチマークテストの実施、もし予算が付けば機種を検討を行うことになっていた。この委員会は電子計算機センター運営委員会の下部組織で次の5名の運営委員により構成された。

岩田末廣（慶大理工）、大野公男（北大理、分子研究員）、正島宏祐（分子研）、  
諸熊奎治（分子研センター）、柏木 浩（分子研センター）

委員会は10月8日、11月19日、12月17日の3回開かれ、センター職員と共同してベンチマークテストの準備・実施・分析と次期システムの青写真の立案までを行った。ベンチマークテストは次の三つの部分から構成された。

- 1) 分子研センターで現在使用されている代表的プログラムについてのコンパイラによる自動ベクトル化による性能テスト
- 2) 小型のサンプルプログラムについてのソース書き換えをともなう最適ベクトル化による性能テスト
- 3) ディスクおよび拡張記憶装置の入出力性能テスト

数社によってベンチマークテストが実施されたが、概算要求の回答の出る前の時期であること、またある種のハードウェア、ソフトウェアが未完成のため、報告された結果は会社によってはかなり限定されたものであった。しかし、スーパーコンピュータの性能の高さを知るには十分であった。ベンチマークテストの実施と並行して、次の3点を目標として次期システムの構成が検討された。

- 1) 総合処理能力の増強
- 2) 超高速演算による研究者の“夢”の実現
- 3) 使い易さの追求

要求が認められなかったため、検討委員会は休止状態にあるが、来年度もひきつづき活動を行うことになっている。これまでの検討の結果得た内容は大変基礎的なものであり、これが再開後の審議の出発点になるであろう。

## 2.2 大規模科学計算の推進をめぐる最近のアメリカの動き

センター長 諸 熊 奎 治

よく知られているように、アメリカは大規模科学計算のメッカであり、従来からこの方面の研究で世界のリーダーを自任してきた。しかし、この十年ほどの動きをみると、CRAYやCYBERなどのいわゆるスーパーコンピュータはLos Alamos, Lawrence Livermore, NASAなどの特殊な研究所に限られ、純粋の科学研究のために使用される機会は極めて少かった。一方、大学の計算センターが老朽化しコストパフォーマンスが低下したので、研究者はVAXやFPSアタッチドプロセッサとといったいわゆるスーパーミニコンを自分の教室や研究室に設置して、計算研究を進めて来た。スーパーミニコン対スーパーコンの長短が多くの機会に論じられ、一時は“スーパーミニで出来ない計算はない”という人も出るほどであった。

ところが、1980年になって、日本製をはじめとするより強力な新世代スーパーコンピュータの開発が伝えられると、今までの大規模計算の10倍から100倍の計算を基礎とし、実験・理論と並ぶ第3の方法論として計算科学の可能性が論じられるようになった。たとえば、1981年3月にはアメリカ科学財団(NSF)物理学助言委員会(ノーベル物理学受賞のケン・ウィルソン教授や固体物理学のアート・フリーマン教授を含む)が「計算物理学の可能性」という報告書を作成、原子・分子や固体物理学を含む物理学で、スーパーコンピュータの利用により、計算物理学が大変重要な研究方法になりうることを指摘した。さらに、1982年12月には、NSFの科学・工学における大規模計算に関するパネルは、科学や工学の広い分野からの研究者の意見を統合して、今後大規模計算の重要性が激増すること、国家的プロジェクトとしてスーパーコンピュータの開発ならびに普及をはかるべきことを提唱している(通称Laxレポート)。

これを受けて、NSFでは具体化の方法を検討し、1983年7月には「学術研究のための計算機ワーキンググループ」が「学術研究のための国家的計算環境」と題する報告書(通称Bardonレポート)を提出、今後3年間に、10台のスーパーコンピュータを含んで、学術研究のための計算環境の樹立を提案した。NSFではこれに対応するため、1984年早々に財団内の高等科学計算事務局を発足させ、局長に量子化学者ジョン・コナリー博士を任命、また各学界の権威からなる高等科学計算資源のための助言委員会を発足させた。Bardonレポートの実現へのNSFの動きはきわめて迅速かつ有効である。まず、スーパーコンピュータ購入までには時間がかかるので、それまでのつなぎとして、1984会計年度(1983.10～1984.9)には、NSFが自己の予算6百万ドル(約14億円)で、スーパーコンピュータの計算時間8,000時間(1台1年分に相当する)をLos Alamos, NASAなどの国立研究所などから購入することに決定し、これをNSF科学研究費を受けている研究者に申請により無料で使わせることになった。すでに配分がはじまっていると聞く。さらに、1985会計年度のNSF予算要求の中に

4,700 万ドル (約 113 億円) を計上, スーパーコンピュータセンター設置を予定している。この予算要求に対する最終的な結論はまだ出ていないが, Physics Today 5月号に面白い話が出ている。これによると, 上記 4,700 万ドルの要求は, 予算局によって 2,000 万ドルに削減させられて国会に提出されたが, 国会での審議の結果 4,000 万ドルが上積みされ, 当初要求を上回る予算がつきそうな情勢だという。

これらの米国での大規模科学計算の推進をめぐる動きには, 上述の通り日本での新世代スーパーコンピュータの開発が一つの引金となっている。スーパーコンピュータの持つ新しい可能性をいち早く察知し, 計算分子科学を提唱した分子研電子計算機センターの概算要求はまだ認められていない。スーパーミニコン万能であった米国よりむしろわれわれの方がこのような可能性をみとめたのは早かったと思われるのに, 最近の迅速・有効な米国の対応には全く目を見はるものがあるといえよう。

## 2.3 スーパーコンピュータの性能

助手 長嶋雲兵

昨年暮から今年の初めにかけて東大大型計算機センターの HITAC S810/20 及び名大プラズマ研計算機センターの FACOM VP100 を用いていくつかのテストを行ったが, そのうち NISHIMOTO LOOP と SEKIWA LOOP の 2 つの測定について報告する。

### 1. NISHIMOTO LOOP

当センターの西本史雄技官作成のプログラム "NISHIMOTO LOOP" は, Table 1 に示すように 29 の式からなる。測定機種は, HITAC S810/20 (東大大型計算機センター), FACOM VP100 (名大プラズマ研電子計算機センター) 及び HITAC M200H (当センター) の三種類である。HITAC S810/20 については, HAP (PP), HAP (NOHAP), NOHAP の三つのモードで測定を行った。(HAP というのは, High speed Array Processor の略でベクトル化されたオブジェクトを作るか否かを示すオプションである。PP というのは Pair Processing の略で 1 つのベクトルを奇数番目及び偶数番目の要素からなる二つのベクトルと見なして演算するというモードである。) HITAC M200H については, IAP, NOIAP の二つのモードで測定した。(IAP というのは Integrated Array Processor の略で, M200H が内蔵するアレイプロセッサを用いるか否かを示すオプションである。) FACOM VP100 については, ベクトルプロセッシングモードのみの測定を行った。各々の式に対するループ長は一万であり, それを百回繰返すことにより総計百万回の実行時間を測定した。

結果を Table 2 に示した。単位は MFLOPS である。1 MFLOPS というのは 1 秒間に百万回の演算を行なうということの意味している。ただしこの Table では「=」, すなわち代入も演算の中に含めてあることに注意されたい。平均値を最後に示してあるが, HITAC S810/20 (PP) (以後

S 810 (PP) と略記), HITAC S 810/20 (NOPP) (以後 S 810 (NOPP) と略記), FACOM VP100 (以後 VP100 と略記)の三つとも 100 MFLOPS を越えており, HITAC M200H(NOIAP) (以後 M 200 H (SP) と略記) の約 30 ~ 60 倍の速度を持っていることが判る。最高は S 810 (PP) のループ 22 の 480 MFLOPS であり, これは驚くべき数値である。スカラー性能を見てみよう。HITAC S 810/20 (NOHAP) (以後 S 810 (SP) と略記) と M 200 H (SP) を比較すると平均で 1.8 倍ほど S 810 (SP) が M 200 H (SP) よりも速い。個々の式についても 1.5 倍から 2 倍程度速くなっている。ループ 29 はベクトル化されないため, S 810 (PP), S 810 (NOPP) 及び S 810 (SP) で同じ値を示さなければならぬと思われるが S 810 (SP) のほうが速くなっている。この件については目下詳細を調査しているところである。FACOM VP100 についてはスカラーの値を測定していないため議論できない。ベクトル性能に目を移すと, 各々の計算機の特徴が見えて来る。まず HITAC S 810/20 の特徴であるが, S 810 (PP) と S 810 (NOPP) の性能が約 2 倍違うのは PP モードにより演算に用いられる演算パイプラインの数が 2 倍であることに対応している。ループ 9, 12, 13, 22, 25, 26 に見られるように多項の演算が速いというのが HITAC S 810/20 の特徴である。これは演算パイプラインの多さを反映している。またループ 5, 8 に見られるように, 割算が M 200 H (SP) に比べ非常に速くなっている。S 810 (PP) の場合, 単精度で M 200 H (SP) の約 80 倍, 倍精度で約 100 倍である。また単精度演算よりも倍精度演算のほうがわずかに速くなっており, 倍精度演算の多い科学技術計算に適していると言えよう。FACOM VP100 は平均するとほぼ S 810 (NOPP) に等しい性能を示している。VP100 の特徴はループ 20, 21, 23, 24 に見られるように, 倍精度の内積型演算が早いということである。単精度演算に比べて倍精度演算が速いというのは S 810 と同じであるが, S 810 (NOPP) に比較すると単精度の多項の演算が遅い様である。VP100 のもう一つの特徴は, ループ 27, 28 に見られるように, 単精度から倍精度に, またはその逆といった変数の型の変換が速いことである。以上が NISHIMOTO LOOP による測定結果であるが, この測定はループ長が一万でありベクトル化の能率がほぼ極限に達している場合の結果であるということに注意しておきたい。

TABLE 1 NISHIMOTO 29 LOOPS

LOOP SIZE=10000

NO.	KIND OF DO-LOOP	S=SINGLE, D=DOUBLE
1	SZ(I)=SX(I)	
2	SZ(I)=SX(I)+SY(I)	
3	SZ(I)=SX(I)-SY(I)	
4	SZ(I)=SX(I)*SY(I)	
5	SZ(I)=SX(I)/SY(I)	
6	SZ(I)=-SX(I)	
7	SF=SF+SX(I)	
8	SF=SF+SX(I)*SY(I)	
9	SZ(I)=SX(I)+SY(I)+SZ(I)-1	
10	SF=SF-SX(I)	
11	SF=SF-SX(I)*SY(I)	
12	SZ(I)=SZ(I)+SX(I)*SY(I)	
13	SZ(I)=SZ(I)-SX(I)*SY(I)	
14	DZ(I)=DX(I)	
15	DZ(I)=DX(I)+DY(I)	
16	DZ(I)=DX(I)-DY(I)	
17	DZ(I)=DX(I)*DY(I)	
18	DZ(I)=DX(I)/DY(I)	
19	DZ(I)=-DX(I)	
20	DF=DF+DX(I)	
21	DF=DF+DX(I)*DY(I)	
22	DZ(I)=DX(I)+DY(I)+DZ(I)-1	
23	DF=DF-DX(I)	
24	DF=DF-DX(I)*DY(I)	
25	DZ(I)=DZ(I)+DX(I)*DY(I)	
26	DZ(I)=DZ(I)-DX(I)*DY(I)	
27	D(I)=S(I)	
28	S(I)=D(I)	
29	CONTINUE	

TABLE 2 NISHIMOTO 29 LOOP (MFLOPS)

LOOP SIZE=10000

NO.	NOP.	S810(PP)	S810(NOPP)	VP100(VP)	M200H(IAP)	S810(SP)	M200H(SP)	EQUATION
1	1	117.	53.3	60.8	22.4	5.07	2.58	SZ(I)=SX(I)
2	2	191.	121.	86.0	45.0	7.89	4.39	SZ(I)=SX(I)+SY(I)
3	2	184.	121.	86.1	31.8	7.90	4.39	SZ(I)=SX(I)-SY(I)
4	2	191.	119.	122.	45.2	7.88	4.02	SZ(I)=SX(I)*SY(I)
5	2	123.	61.9	32.6	2.1	2.54	1.54	SZ(I)=SX(I)/SY(I)
6	2	228.	123.	83.7	45.2	7.84	4.62	SZ(I)=-SX(I)
7	2	240.	121.	116.	23.6	10.1	6.66	SF=SF+SX(I)
8	3	351.	184.	119.	35.3	10.7	5.70	SF=SF+SX(I)*SY(I)
9	4	314.	243.	84.6	26.6	10.1	5.77	SZ(I)=SX(I)+SY(I)+SZ(I)-1
10	2	234.	123.	115.	23.3	10.1	6.65	SF=SF-SX(I)
11	3	360.	182.	119.	35.2	10.7	5.70	SF=SF-SX(I)*SY(I)
12	3	261.	175.	75.7	33.0	9.01	4.93	SZ(I)=SZ(I)+SX(I)*SY(I)
13	3	257.	175.	75.4	33.8	8.21	4.63	SZ(I)=SZ(I)-SX(I)*SY(I)
14	1	123.	55.8	48.0	11.0	5.06	2.32	DZ(I)=DX(I)
15	2	240.	123.	111.	22.2	7.88	3.88	DZ(I)=DX(I)+DY(I)
16	2	218.	123.	134.	22.5	7.90	3.87	DZ(I)=DX(I)-DY(I)
17	2	246.	121.	134.	21.2	6.46	3.33	DZ(I)=DX(I)*DY(I)
18	2	123.	61.9	31.5	7.75	2.09	1.23	DZ(I)=DX(I)/DY(I)
19	2	246.	123.	147.	22.1	8.88	4.11	DZ(I)=-DX(I)
20	2	246.	124.	195.	23.3	10.1	5.62	DF=DF+DX(I)
21	3	360.	182.	278.	34.9	9.73	4.74	DF=DF+DX(I)*DY(I)
22	4	480.	225.	211.	14.5	9.43	4.86	DZ(I)=DX(I)+DY(I)+DZ(I)-1
23	2	246.	121.	196.	23.5	10.19	5.60	DF=DF-DX(I)
24	3	360.	184.	282.	34.8	9.73	4.73	DF=DF-DX(I)*DY(I)
25	3	334.	182.	162.	14.3	8.17	4.08	DZ(I)=DZ(I)+DX(I)*DY(I)
26	3	313.	184.	161.	14.3	7.06	3.88	DZ(I)=DZ(I)-DX(I)*DY(I)
27	1	48.0	45.2	55.1	16.9	5.05	2.39	D(I)=S(I)
28	1	92.3	44.8	81.3	13.5	3.95	2.58	S(I)=D(I)
29	1	5.94	5.94	7.40	4.73	7.13	4.73	CONTINUE
AVER.		232.4	128.1	117.8	24.1	7.83	4.27	

M200H(S) AT IHS C.C.  
M200H(IAP) AT IHS C.C.  
VP-100 AT IPP C.C. NAGOYA UNIV.  
S810/20 AT TOKYO UNIV. C.C. (PP,NOPP,SP)

## 2. SEKIWA LOOP

SEKIWA LOOPというのは $A(I) = A(I) + S * V(I)$ という式をループ長 100 で実行した時の速度を測定したものであり、アメリカ製の計算機についてのデータと国産の計算機についてのデータを比較した。Table 3 で、計算機名の前に \* の付いたものは国産の計算機で、今回新たに測定し加えたものである。Table 3 には計算機名の他、単精度演算 (S) か倍精度演算 (D) かを示す Type とコンパイラ及び速度が示してある。速度はMFLOPSで示してあり、上からMFLOPSの大きい順に並べてあるが、このTableで10 MFLOPS以上のものをスーパーコンピュータと呼ぶことができよう。国産のスーパーコンピュータ FACOM VP100 と HITAC S810/20 はどれもループ長 100 程度で 100 MFLOPS を越えるかまたはそれに近い値を示している。先の NISHIMOTO LOOP のループ長が一万という条件では S810 (PP) が VP100 より平均約 2 倍程度速かったが、ループ長 100 の場合は逆に VP100 のほうが速い。これは VP100 のループ長に対するベクトル性能の立上りの速さを示しているものであろう。S810/20 の PP と PP の無いもので約 2 倍の差があるのは、先の NISHIMOTO LOOP の所で説明したように PP モードの時に用いられる演算パイプラインの数が NOPP モードで用いられるその 2 倍であることに対応している。注目したいのは CRAY や CYBER 等のアメリカ製の計算機の性能が、コンパイラにより大きく変化するということである。具体的には CRAY 1S の CFT (INLINE) (INLINE というのは、ループのインライン展開を行うモードである。) と CFT で約 4 倍の差があり、CYBER 205 に至っては FTN (BLAS) (BLAS というのは、ベクトル化サブルーチンコールのモードであるが詳細は不明である。) と FTN (INLINE) で約 8 倍の差がある。CRAY や CYBER のコンパイラの内容は詳しく判らないが、この差は大きいといえよう。HITAC M280H 及び M200H の IAP が単精度演算で 24 ~ 23 MFLOPS を出しており、これを上手に使うならば非常に有効である。しかしながら IAP はベクトル化の範囲がかなり狭いために実際のプログラムでは特殊なものを除いてあまり有効に働かない。このことは良く知られている所である。聞く所によるとアメリカ製の計算機も国産の FACOM VP100 や HITAC S810/20 等に比べてベクトル化の範囲が狭く、特別に速いプログラムを手にするためには、アセンブラを駆使しなければならない。これを考慮すると実際に我々が用いている FORTRAN で書かれたプログラムを国産のスーパーコンピュータにかけた場合と CRAY 等アメリカ製のスーパーコンピュータにかけた場合の差は、この Table で示されるものより大きなものになるであろう。

最後にスーパーコンピュータの利用について便宜をはかってくださった東大大型計算機センター及び名大プラズマ研電子計算機センターの皆様へ厚く御礼申し上げます。

```

*****
TABLE 3 SEKIWA LOOP
*****
COMPUTER      TYPE  COMPILER      MFLOPS
* FACOM VP100  S    FORTRAN77/VP  123.1
* FACOM VP100  D    FORTRAN77/VP  123.0
* HITAC S810/20 D    FORT77/HAP PP 104.4
* HITAC S810/20 S    FORT77/HAP PP  92.3
  CRAY X-MP     S    CFT(INLINE)    82.1
  CRAY X-MP     S    CFT(BLAS)      74.8
* HITAC S810/20 D    FORT77/HAP     62.7
* HITAC S810/20 S    FORT77/HAP     59.6
  CYBER 205     S    FTN(BLAS)      25.4
* HITAC M280H  S    FORT77/IAP     24.2
* HITAC M200H  S    FORT77/IAP     23.2
  CRAY 1S       S    CFT(INLINE)    19.1
  CRAY 1S       S    CFT(BLAS)      18.1
* HITAC M200H  D    FORT77/IAP     15.7
* HITAC M280H  D    FORT77/IAP     14.7
  CRAY 1S       S    CFT             12.3
  CYBER 205     S    FTN            8.37
* FACOM M382   S    FORT77/(OPT 3) 7.32
* FACOM M382   D    FORT77/(OPT 3) 6.52
* FACOM M382   S    FORT77/(OPT 1) 6.54
* FACOM M382   D    FORT77/(OPT 1) 6.16
* HITAC S810/20 S    FORT77/(OPT 3) 5.87
* HITAC M280H  S    FORT77/(OPT 3) 5.44
* HITAC S810/20 D    FORT77/(OPT 3) 5.43
* HITAC M280H  D    FORT77/(OPT 3) 5.02
  CYBER 205     S    FTN(UNROLLED)  5.28
  CRAY 1S       S    CFT(UNROLLED)  5.12
  CDC 7600      S    FTN(BLAS)      4.64
* ACOS 1000    S    FORT77/(OPT 3) 4.54
* HITAC M200H  S    FORT77/(OPT 3) 3.90
* ACOS 1000    D    FORT77/(OPT 3) 3.90
* HITAC M200H  D    FORT77/(OPT 3) 3.62
  CYBER 205     S    FTN(INLINE)    3.27
  CDC 7600      S    FTN            3.27
  FPS-164       S    (BLAS)         2.33
*****
EQUATION      A(I)=A(I)+S*V(I)
LOOP SIZE= 100
*****

```

## 2.4 スーパーコンピュータ・ワークショップ公開講演会とレポート3の発刊について

57年度に発足したワークショップも2年目を迎え、下記のように2回の公開講演会を開催した。

### 1) 第2回公開講演会

9月19日(月)午後

- 次期システムの構想 分子研センター 柏木 浩
  - スーパーコンピュータVPの紹介 富士通 本体事業部 内田啓一郎
  - スーパーコンピュータSXの紹介 日電 情報処理企画室 岩屋 暁宏
  - スーパーコンピュータと新しい科学計算用言語DEQSOL 日立 中研 梅谷 征雄
- 懇親会

### ワークショップ・セミナー

9月20日(火)午前

- スーパーコンピュータHITAC S-810のためのプログラミング 日立ソフトウェア工場 後 保範
- スーパーコンピュータ向け積分変換のアルゴリズム 分子研センター 長嶋 雲兵
- パラレルプロセッサ開発の動向 日立 中研 梅谷 征雄

## ワークショップ・打ち合わせ会

9月20日(火) 午後

### 話 題

- 分子研次期システムへの要望
- ベンチマーク・プログラムについての希望
- 東大センターの利用について
- 今後のアルゴリズムとプログラムの開発について

## 2) 第3回公開講演会

3月26日 13:00～17:20

- |                              |           |       |
|------------------------------|-----------|-------|
| ○ワークショップのはじめに                | 分子研センター   | 柏木 浩  |
| ○第5世代コンピュータシステムのアーキテクチャ      | 東大工       | 田中 英彦 |
| ○並列計算機PAXとモレキュラーダイナミックスへの応用例 | 慶大理工      | 川合 敏雄 |
| ○核融合研究用コードのVPによる性能           | プラズマ研センター | 武本 行正 |
| ○S-810の効果的な使い方               | 日立製作所     | 後 保範  |

3月27日 9:30～17:10

- |                                      |         |       |
|--------------------------------------|---------|-------|
| ○HITAC S-810の特色について                  | 東大センター  | 唐木幸比古 |
| ○次期システムによせる実験科学者の期待                  | 分子研     | 遠藤 泰樹 |
| ○二次元水模型のMonte Carlo計算                | 京大理     | 片岡 洋右 |
| ○三次元水模型のMD Simulation用プログラムのベクトル化の試み | 京大理     | 岡田 謙吉 |
| ○結晶の溶解の分子動力学シミュレーションに使用した場合について      | 東工大総合理工 | 岡田 勲  |
| ○蛋白質の構造転移現象のスーパーコンピュータによる計算機実験       | 九大センター  | 武富 敬  |
| ○蛋白質の分子構造エネルギーの計算                    | 早大理工    | 輪湖 博  |
| ○固体物性論におけるスーパーコンピュータ利用の2, 3の例        | 東大物性研   | 寺倉 清之 |
| ○スーパーコンピュータ性能比較                      | 分子研センター | 長嶋 雲兵 |
| ○名大数学ライブラリーにおけるベクトル化率                | 名大センター  | 泰野 甯世 |
| ○S-810を使ってCoupled equationを解いて       | 北里大医    | 小池 文博 |
| ○Gaussian 80のグラジエント部分のベクトル化の試み       | 分子研     | 古賀 伸明 |
| ○Gaussian 80のCI部分のベクトル化の試み           | 分子研     | 太田 勝久 |

- Gaussian 80 のCI 部分の IAP によるベクトル化 京 大 工 寺前 裕之
- 北大におけるスーパーコンピュータの利用の可能性と問題点について 北 大 理 志田 典弘
- 対角化プログラムの高速化 北 大 理 寺嶋 秀美・野呂 武司
- 英国におけるスーパーコンピュータの利用と GSCF 2 のベクトル化 東 大 理 小杉 信博
- S-810 についてのパネルディスカッション ハードウェア：日立製作所 河辺 峻  
コンパイラ：日立製作所 高貫 隆二  
システム：FHL 村井 一郎

### § ワークショップ・打ち合わせ会

上記の二つの講演会の内容を中心にして、SUPERCOMPUTER・WORKSHOP Report 3 が発刊された。内容は次の通りである。

## 【SUPERCOMPUTER WORKSHOP REPORT 3】 目 次

- はじめに — 米国での計算科学の推進に後れをとらないように — 諸熊奎治 (分子研センター)
- § 1 スーパーコンピュータをめぐる内外の動向
  - 1983—1984 サニベル・シンポジウム “Impact of Computers on the Quantum Theory of Matter” に出席して 中辻 博 (京大工)
  - 和製スーパーコンピュータと ab initio 分子軌道法 — Daresbury Laboratory から帰って来て — 小杉信博 (東大理)
  - スーパーコンピュータの必要性 梅山秀明 (北里大薬)
  - 実験科学者の新システムへの期待 遠藤泰樹 (分子研)
- § 2 スーパーコンピュータの性能と効果的な利用法
  - スーパーコンピュータの性能 長嶋雲兵 (分子研センター)
  - スーパーコンピュータ S-810 の特徴 唐木幸比右 (東大大型センター)
  - VP による核融合研究用コードの適合性 武本行正、阿部芳彦 (プラズマ研センター)
  - NEC スーパーコンピュータ SX システム 岩屋暁宏 (日電情報処理企画室)
  - HITAC S-810 の効果的な使い方 後 保範 (日立ソフトウェア工場)

### § 3 スーパーコンピュータ試用報告

- 分子軌道計算におけるスーパーコンピュータの有効利用  
柏木 浩 (分子研センター)
- GAUSSIAN80 の高速化について — IAP を用いた MP・CI 部分のベクトル化 —  
寺前裕之 (京大工)
- 対角化プログラムにおけるベクタプロセッサの効果  
寺嶋秀美、野呂武司 (北大理)
- 時間に依存する半古典シュレディンガー方程式と S-810/20  
小池文博 (北里大医)
- 固体物理における大型計算の 2, 3 の例  
寺倉清之 (東大物性研)
- 二次元水模型の Monte Carlo 計算  
片岡洋右 (京大理)
- 三次元水模型の MD Simulation 用プログラムのベクトル化の試み  
岡田謙吉 (京大理)
- 結晶の溶解の分子動力学シミュレーションに使用した場合について  
岡田 勲 (東工大総合理工)
- 蛋白質分子の構造エネルギー計算  
輪湖 博 (早大理工)
- 蛋白質の構造転移現象のスーパーコンピュータによる計算機実験  
武富 敬 (九大大型センター)
- 名大数学ライブラリ NUMPAC に於けるベクトル化率  
泰野甯也 (名大大型センター)

### § 4 次世代コンピュータの可能性

- 並列計算機 PAX と科学計算への応用  
川合敏雄 (慶大理工)  
星野 力 (筑波大構造工学系)
- 第 5 世代コンピュータのアーキテクチャ  
田中英彦 (東大工)
- スーパーコンピュータ用言語 DEQSOL について  
梅谷征雄 (日立中研)

### § 5 ワークショップ記事

- 次期システムの導入準備について
- 第 2 回公開講演会プログラム
- 第 3 回公開講演会プログラム
- 電子計算機センター運営委員会議事報告抜粋

### 3. 計算機システムと運用について

#### 3.1 計算機システムの特徴

当センターのシステム（昭和58年4月～59年3月）は図3.1.1に示すようにHITAC M-200 H 2台からなるLCMP（疎結合マルチプロセッサ）システムである。主記憶容量はそれぞれ16MBで合計32MBである。グローバルプロセッサ側にはベクトル演算高速化のための内蔵アレイプロセッサ（IAP）を所有している。グローバルプロセッサではジョブの入出力の管理，TSSサービスを中心に行い，かつバッチ処理も行う。一方ローカルプロセッサでは大型ジョブを中心にバッチ処理のみを行う。ディスク容量はシステムディスクが1,600MB，共用ディスクが12,700MBである。周辺機器としてはカードリーダー（1台），ラインプリンタ（2台），レーザビームプリンタ（1台），グラフィックディスプレイ（1台），カラーグラフィックディスプレイ（2台），XYプロッタ（1台），TSS端末（館内用18台），フロッピー入出力装置（1台）などがある。また所内の各研究室，実験室に設置される個人用端末の増大に対応するためにポートセレクター（1種の通信回線自動交換機）が1台ある。

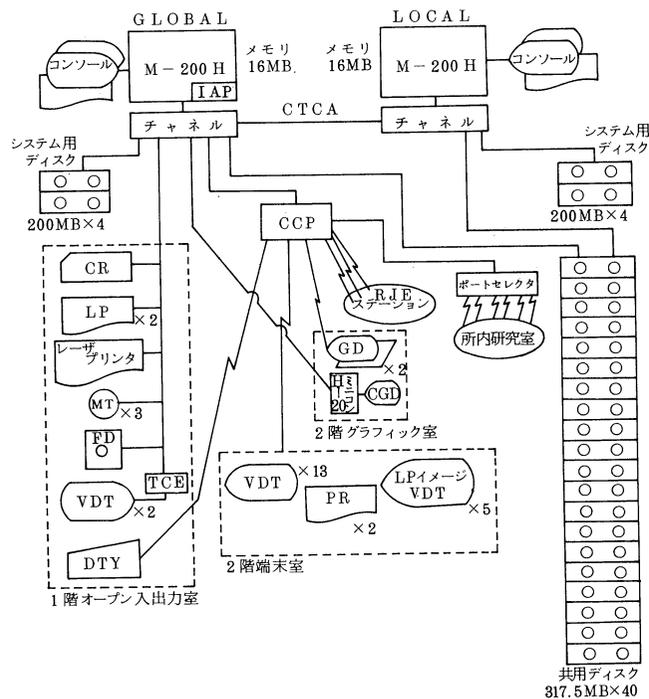


図 3.1.1 機器構成（昭和58年度）

### 3.2 ジョブクラスの構成

ジョブクラスの構成はセンター設立当初からの方針で長時間ジョブを主体としたものとなっている。

表 3.2.1 にジョブクラスの構成を示す。

表 3.2.1 ジョブクラスの構成

ジョブクラス	C P U タイム (分)		R E G I O N (KB)	
	標 準	上 限	標 準	上 限
A	1	1	512	7,000
B	5	5	1,024	7,000
C	30	30	1,024	7,000
D	30	60	2,048	7,000
E	30	120	2,048	7,000
I	30	30	2,048	7,000
J	30	120	2,048	7,000
S	30	1,430	2,048	7,000
T S S	2	2	1,024	2,048

ここで I, J クラスはアイドルジョブ用のクラスで所内プロジェクトのみ利用できる。

### 3.3 運用時間

運用時間は昭和 54 年 9 月以来次の通りである。

- |   |     |                                |
|---|-----|--------------------------------|
| } | 月曜日 | 13:30 ~ 22:00 (午前中は保守, センター業務) |
|   | 平日  | 9:00 ~ 22:00                   |
|   | 土曜日 | 9:00 ~ 17:00                   |
- ・オープン利用時間帯
- ・無人運転時間帯 深夜・休祭日

### 3.4 利用点数

利用点数 P は次の式に従ってジョブごとに算出される。

$$P = a \times (\text{CPU時間}) + b \times (\text{LP用紙枚数}) + c \times (\text{恒久的データセット使用量})$$

$$a = 0.1 \text{ 点/秒} \quad b = 0.1 \text{ 点/頁} \quad c = 0.000006 \text{ 点/KB} \cdot \text{時}$$

### 3.5 センターの主なサービス

- オープンバッチサービス

ジョブの入出力はユーザ自身で行うオープン方式である。カードリーダー, 各種TSS端末, ラインプリンタ, オープン磁気テープ装置, オープンフロッピー入出力装置などが自由に利用できる。ジョブの入力, 実行, 出力状況は専用のディスプレイによって逐次表示される。

- TSS・RJEサービス

センター2階のTSS端末室および分子研所内の研究室にある各種TSS端末からの専用回線によるTSS利用, および公衆回線(300ボー/1,200ボー)による所外のTSS端末からの利用が行われる。さらに所内および生理研, 基生研のリモートステーションに対するRJE(Remote Job Entry)サービスも行っている。

- 量子化学文献データベース(QCLDB)

QCLDBは非経験的分子軌道法に関する文献データベースである。データの収集作業は全国10ヶ所の理論化学研究室の大学院生, 教官によって行われ, データの再チェック, データベースへの登録を担当している。一般利用者へのサービスは昭和54年6月から開始しており既に1977年~1983年の文献約5,000件を収容している。

- プログラムライブラリ

分子科学および生物科学のための高度のプログラムライブラリの開発・整備・提供を行っている。プログラムの検索はライブラリ管理システムを利用することによりTSS端末から容易に行うことができ, ただちに実行することもできる。

登録されたプログラムは大きく分けて次の2種類である。

- (1) 国内の研究者, 他計算センターなどにより提供または開発されたもの。
- (2) アメリカのQCPE(Quantum Chemistry Program Exchange)から購入したもの。

## 4. 研究開発レポート

### 4.1 電算機センターの省電力化について

係 長 伊 奈 諭  
助 教 授 柏 木 浩  
ファコム・村 井 一 郎  
ハイタック(株)  
日立製作所(株) 頭 士 鎮 夫  
" 国 谷 剛

当センターでは限られた計算機資源をより有効に使うために昭和54年9月以来24時間連続運転を前提とした完全無人運転を完成・実施し、計算サービス時間の延長に成功している。しかし稼働時間の増加に伴って電力料金の問題が無視できなくなり、特に昭和55年6月の電力料大幅値上げ以来大きなダメージを受けてきた。一方システムはM-180×2からM-200H×2へと順次レベルアップしてきており、計算機能力は向上させてきたが、それに伴って消費電力量が大きくなった。また利用者数は年々増加の一途をたどり、大型計算の増加が目立って、申請されるCPU時間はうなぎ昇りである。そのために電力料金の制約から許可するCPU時間を逆に抑えるという苦肉の策を取らざるを得ないようになってきている。こうした状況を少しでも緩和し、利用者により多くのCPU時間を割り当てられるように各種の節電対策を行ってきたので以下に簡単に紹介する。

#### 4.1.1 無人運転とフリーズ停止

無人運転といってもむやみに電源を入れっ放しにするのではなく、節電をはかるため無人運転時間帯（平日22:00以降）は絶えずプロセッサの稼働状況を監視して、一定時間一定本数以上のジョブが流れていなければ実行を中止（フリーズ）し、電算機と空調機の電源を切断する。実行中止されたジョブは翌朝から再実行されることになる。現在はM-200H×2システムで長時間ジョブ（C, D, E, I, Jクラス）の合計が4本以下でフリーズ停止する条件にしている。また個人の専有になるのを防ぐために一利用者がジョブ名を変えての多重投入を禁止している。このフリーズ条件の変更は節電を考える上での最後の切り札であるが、あくまでも利用者の利益を優先的に考慮した上で稼働率が極端に悪くならない線で設定している。

#### 4.1.2 可変計画停止

通常最も稼働率が落ちるのは日曜日から月曜日にかけてである。これは月曜日午前中にはハードウェア保守またはセンタ業務が必ず入るため、それまでにすべてのジョブを一本残らず消化させようとするためである（フリーズ停止モードでは支障がある）。これを計画停止と呼んでいるが、このモードは低い多重度でずると長時間運転することが多いため、フリーズ停止と同様にジョブ本数の監視を行い、一定時間一定本数以下になったらすぐに全ジョブクラスのイニシエータを一斉にホールドして以後の投入を受付けないようにした。以降は実行中の全ジョブが終了するのを待ってシステム停止、電源断となる。これを可変計画停止と呼んでいる。これによって土曜日～月曜日朝にかけての無駄使い（稼働率が低い状態）をかなり防ぐことができています。

#### 4.1.3 オープン入出力装置および居室用空調パッケージの電源断

無人運転時には居室照明、室内通常電源による端末類の電源を切断するのは勿論であるがC V C F（定電圧定周波電源）装置から電源を取っている装置のうち、ラインプリンタ、カードリーダー、XYプロッタ、磁気テープ装置、フロッピー入出力装置等オープン入出力室にあつて使用されない機器の電源もコンソール入力によって切断するようにしている。またセンター1階の居室用空調パッケージも手動により切断している。これらによる節電量は約30KW/hであり、全体の約1割にあたる。

#### 4.1.4 空調方式の見直し

空調機はすべてパッケージ型であり、10トン5台、15トン1台が計算機冷却のために使用されている。この他に一階居室冷房用のパッケージが1台ある。従来から空調系の消費電力は、計算機系のそれよりもかなり大きいと推測されていたため、空調系と計算機系の正確な消費電力の把握と空調系の節電対策を検討し実施した。以下にその概要を示す。

##### (1) 調査項目

- ① パッケージの床下、入気 温湿度設定値
- ② 室内、床下の温湿度分布（49ヶ所）
- ③ 区別消費電力量の計測（パッケージ他の計15ヶ所に積算メータを取付）
- ④ パッケージの稼働状況（メータ、ランプ類）

##### (2) 対 策

- ① パッケージの床下、入気 温湿度設定値の変更  
設定値を次のように変更した。

	旧		新	
	温 度	湿 度	温 度	湿 度
床 下	18 °C	75 %	16 °C	70 %
入 気	16~25.5 °C	—	28 °C	—

ここでは特に温度設定の意味が重要である。床下の設定を18°C→16°Cとしたのはパッケージのヒータを無意味にするためである。ヒータはコンプレッサによって過冷却された空気を再熱するためかなり大きな電力（最高 26 KW）を消費する。このヒータを働かなくさせるためには設定温度を下げる方がよいわけである。次に入気の温度設定であるが、これはコンプレッサを働かせるか否かの境界温度となっているため、できるだけ高い方がコンプレッサを回さなくて済むわけである。

### ② 低負荷地帯のパッケージコンプレッサの部分切断

パッケージには2台のコンプレッサが内蔵されている。調査の②により明らかとなった低負荷地帯のパッケージは強制的に1台のコンプレッサを断にした。現状では6台のうちの1台についてのみこの操作が可能であった。

### ③ 加湿器の部分切断

パッケージは加湿器を2段階でコントロールできる。同じく調査②の結果から3台のパッケージについては加湿器を半分にすることができた。

以上の対策①～③のネライは計算機室の温湿度のコントロールをパッケージの不十分な自動制御（主にヒータのON/OFF, コンプレッサのON/OFF）に頼っていた部分を完全に不要とするような定常状態を作り出すことにより、ヒータとコンプレッサの無駄な電力消費を完全に抑えるという点にある。ちなみに現在の温度は平均して床上27～29°C, 床下20°Cで定常状態にあるため、ヒータは完全に死んでいるわけである。

## (3) 成 果

結論から言うと表4.1.1の電力日誌のメータが示すように30～40 KW/hの電力消費の減少が現われた。これは全体の電力消費量の約10%であり、空調パッケージ系だけの比では23%の節電となっている。この結果電算機系と空調系の電力消費比率は、1：1.07 → 1：0.84となり、ついにその割合が逆転してしまったのである。（注 空調パッケージ系には居室用パッケージも含む。）ちなみに対策前後の電算機系とパッケージ系の消費電力を次に示す。

	電 算 機 系	パ ッ ケ ー ジ 系
対 策 前	142 KW/h	153 KW/h
対 策 後		119 KW/h

表 4.1.1 電力日誌のメータ表示

時刻	4月2日(月)対策前		時刻	5月8日(火)対策後	
	管 理 棟			管 理 棟	
	管理棟・ 図書 電力	電 算 機 セ ン タ 電 力 量		管理棟・ 図書 電力	電 算 機 セ ン タ 電 力 量
時 分	KWH	KWH	時 分	KWH	KWH
09 01	40	230	09 00	30	140
10 00	60	340	10 00	70	300
11 00	50	350	11 00	60	300
12 00	60	330	12 00	70	310
13 00	60	340	13 00	70	300
14 00	50	330	14 00	60	310
15 00	50	340	15 00	70	300
16 00	60	340	16 00	60	310
17 00	60	330	17 01	70	310
18 00	50	340	18 00	60	310
19 00	50	330	19 00	60	300
20 00	40	330	20 00	50	300
21 00	30	330	21 00	40	300
22 00	40	320	22 00	20	300
23 00	30	300	23 00	20	270
00 00	20	300	00 00	20	270
01 00	20	310	01 00	10	270
02 00	10	300	02 00	10	270
03 00	20	20	03 00	10	140
04 00	10	20	04 00	10	20
05 00	20	10	05 00	10	20
06 00	20	20	06 00	0	10
07 00	10	20	07 00	10	20
08 02	20	10	08 02	10	20

#### 4.1.5 節電対策の実施時期とシステムの推移

先に述べた各節電対策の実施開始年度および消費電力，システム構成，CPU使用状況の一覧表を表 4.1.2 に示す

#### 4.1.6 今後の省電力化について

省電力化に貢献する項目としては上記の事柄以外にも数多くある。処理しなければならないジョブの量は大体において一定であるから，いかに効率よく資源を利用してシステムのスループットを向上させるかによってその稼動時間は影響を受けるはずである。したがってジョブ管理，資源管理の面から，イニシエータ構成，多重度の設定，サービス率の調整，システムディスク，ワークファイルの構成等を考慮していく必要があり，いくつかは試みている。こうした適性化は今後も続けていかなければならない。

次に再び空調パッケージであるが，最近販売されているものは冷媒レヒート方式といってヒータを必要としないばかりでなく，冷却能力が向上したうえにコンプレッサ，加湿器の消費電力が大幅に低下しているため，こうしたものに置き替えるだけでも，さらに 16 KW/h の省電力化をできることが計算できる。

計算機の能力とともに，いままではとかく見逃されがちであった消費電力や効率のよい空調方式，安全対策に対する考慮などはもっともっとメーカーに本腰を入れて考えていただきたい事柄である。

表 4.1.2 節電対策の実施年度

年 度	使用電力	電力単位	システム 構 成	総CPU時間 (M-200H基準) 伸 び 率	システムの運転形態と節電対策
53 (3ヶ月)	KWH 305, 120	円 11. 22	M-180×2 TCMP	509 <sup>H</sup> 1	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 有人運転 (22:00 まで)</li> <li>・ 週 2 日終夜運転</li> </ul>
54	1, 405, 933	11. 22	M-180×2 TCMP	2, 405 4. 7	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 週 5 日終夜運転 (8 月まで)</li> <li>・ 無人運転 (9 月～)</li> <li>・ フリーズ・計画停止方式の導入</li> <li>・ 空調パッケージと電算機との同期電源切断の採用</li> </ul>
55	1, 753, 790	11. 22 ↓ 6 月 値上り 22	M-200 H + M-180 独立システム	5, 405 10. 6	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ M-180 は 22:00 まで有人運転</li> <li>・ M-200 H のみ無人運転 (22:00 ～)</li> <li>・ 22:00 以降 居室空調 オープン I/O 室機器 } 切断を開始</li> </ul>
56	1, 963, 809	22	M-200 H + M-180 LCMP	6, 320 12. 4	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 無人運転での両系 (M-200 H + M-180) の同時フリーズ, 計画停止方式</li> </ul>
57	1, 914, 150	22	M-200H×2  LCMP	8, 205 16. 1	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 曜日別制御 (火～金) …両系同時フリーズ停止 (月) …LOCAL プロセッサ強制停止 (土, 日) …可変計画停止</li> </ul>
58	1, 946, 977	22	M-200H×2 LCMP	8, 489 16. 7	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 曜日別制御 (月～金) …両系同時フリーズ停止 (土, 日) …可変計画停止</li> </ul>
59	?	?	同 上	?	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 同上</li> <li>・ 空調系の見直し</li> </ul>

## 4.2 ライブラリ管理システム（FLIB）の機能拡充

— 「READ」はできるが「COPY」はできない公開方式 —

技 官 山 本 茂 義  
ファコム・(株) 額 額 裕 志  
ハイタック

### 4.2.1 はじめに

分子科学研究所電子計算機センターは、ライブラリ管理システム（FLIB）を昭和59年1月30日付で改訂を行った。これは主としてソフトウェアの保護、特にプログラムソースの保護を目的としたものである。

### 4.2.2 ライブラリ・プログラムの公開についての問題点

昨今、コンピュータ・プログラムの無断複写に起因する法的問題がクローズアップされている（文献1）。この問題はキャッシュカードの偽造による犯罪などとも関連させて、広くコンピュータ犯罪ということでもとめることもできようが（文献2）、当センターは純粋学術研究を目的に運用されている機関であり、もっぱら、ソフトウェア製作、提供者の権利保護及びソフトウェア公開による学术交流という点に議論を制限することができると考える。

そもそも、プログラム保護の理由であるが、中山氏（文献1）は以下の3点に要約している。

- ① 先行投資者の保護
- ② 重複投資の防止
- ③ 流通の促進

現代科学において、コンピュータによる数値計算または計算機実験の果たす役割が絶大であることは言うまでもないが、この数値計算の実現までには、以下の図式に見られる如く各段階毎に研究者の創意・工夫が必要となる。

- (1) 第一原理の発見 （例 Schrodinger 方程式）  
↓
- (2) 解法パラダイムの確立 （例 CI法, LCAO）  
↓
- (3) アルゴリズムの導出 （例 Davidson 対角化法）  
↓

(4) コーディング

↓

(5) 数値計算

↓

(6) 新しい科学的発見

この図式の(1), (2), (6)においては, 物理学, 化学の専門的知識・素養が必要であり, (3)の段階では数学・数値解法の知識が, また(4)においてはコンピュータのハードウェア・ソフトウェアについての知識が必要である。これらの各段階で研究者の心血が活かれるわけである。この例として, 量子化学の分野で非常によく使われる *ab initio* 分子軌道法プログラム, 「GAUSSIAN 80」を挙げることができる。このプログラムの作製には, J.A. Pople のグループ数 10 名による, 10 数年の歳月がかかっている。

しかしながら, 現在の学会の流れにあつては, (1), (2), (3), (6)は業績として名誉を付されるが, (4)または(5)がそれ自身において評価されることは少ない。コーディングの結果はプログラムという形で結実するわけであるが, これはその創作には多大の困難と費用を伴うのにかかわらず, その複写は極めて容易に行うことができる。この点に, 学術分野におけるソフトウェアの保護の根拠が存在する。先行投資者, つまりプログラマー, 広くはプログラムを他のハードウェアへ移植するためのコンバージョン作業に従事した人たちの権利を守る必要がある。

ところで, 一旦プログラムが完成し, その汎用性が高い場合には, それをライブラリとして登録し第三者の使用に供することは, 学術交流の促進・重複投資の防止という点で非常に有益なことである。同じようなプログラムを複数のグループで別個に製作するという無駄を防ぐというだけでなく, 既に出上がったプログラムを別のグループが, 製作者とは異なった新しい立場で利用し新しい科学的発見を導いたり, また新しいさらに高度のプログラム作製へと飛躍させる刺激を与えることになる。

とどの詰まり, プログラムは無断複写はされない形で一般に公開し, 使用されることが望まれる。すなわち, 「READ」「EXECUTE」は許すが, 「COPY」は許さないということになろうか。が, ここに二律背反が存在することに, 読者は気づかれていることだろう。「COPY」を防止する。最も簡単な方法はプログラムを非公開にしておくことである。が, これでは当然プログラムを見ること, 「READ」(「EXECUTE」)は不可能だからである。

ソフトウェアの保護について, 法的根拠あるいはコンセンサスが確立されていれば, 事態はまだ容易であろうが, 残念ながら現在のところ, 法的根拠はまだ確立されていない。ソフトウェアの法的保護のための要綱案が, 1984年2月14日文化庁と通産省で別個にまとまったが, 文化庁が現行著作権法の枠内での法的保護を重点を置いているのに対し, 通産省は産業政策の立場から新立法による保護をねらっている等, 両者の立場には食い違いが多く, 今後の調整が待たれるところである。識者の間

でも議論が分かれている（文献1）。

しかし我々センター運営者としては、両者の結論を待って、ただ手をこまねいているわけにもいかない。想定しうるようなトラブルの発生は未然に防いでおくことが望ましい。我々はソフトウェアの保護、特にソースプログラムの無断複写の防止を目的として、ライブラリ管理システムの機能拡充を行った。

#### 4.2.3 改訂にあたっての考え方

ライブラリ管理システムの改訂にあたって、我々が選んだ基本的立場は、結局「ユーザーの学者的良心を信頼する」という極めて単純な考えに帰着する。

無断複写を防止するため、考えられ得るあらゆる手口に対して万全を期して、複雑怪奇なシステムを構築することは可能かもしれない。しかし、それは我々が本来望むものではないし、またそのようなシステムを作ったとしても、それをしのぐ悪知恵を働かす人が現われ、またその手口に対し防御策を構ずるといようなイタチごっこに陥ってしまうだろう。

我々は、新システムが満たす最少限の条件として、以下の3条件に限定した。

- (1) プログラムの無断複写はプログラム製作・提供者の権利を犯すものであるという認識をユーザーにもってもらふこと。
- (2) ソースプログラムについて閲覧はできるが、複写はできないという公開方式を設ける。
- (3) ライブラリプログラム（特にソース）へのアクセス情報をセンターが管理できるシステムであること。

#### 4.2.4 新システムの内容

旧版のライブラリ管理システムではソースプログラムの公開は「公開」「非公開」の二者択一となっていた。「公開」の場合、ソースプログラムの存在するデータセット名がFLIBコマンドによって知ることができ、ユーザはセルフサービスで、自由に閲覧・複写ができた。「非公開」の場合、無断複写は不可能なわけだが、コーディングの詳細を知りたい場合など不便であった。

新システムではこの2段階から、以下に示すように5段階に細分化した。

- (1) ソースの閲覧に関するレベル
  - ① 全く自由にソースの中身を見ることができる。
  - ② 新システムに新しく設ける Look サブコマンドを用いれば、またその場合に限りソースを閲覧できる。
  - ③ 閲覧不可

(2) ソースプログラムをユーザデータセットに複写することに関するレベル

- ① 自由に複写可能
- ② 通常は複写不可。ただしユーザが複写の申請をすれば、センターが「認可」して、ソースをユーザデータセットに複写する。その際、ユーザ名・日付・プログラム名等の情報を自動的に記録に残す。プログラム提供者は必要に応じて、この記録を見ることができる。
- ③ 複写不可

以上(1), (2)の組合せにより表 4.2.1 のように公開レベルを 5 段階に設定する。

表 4.2.1

公開レベル	閲 覧	複 写	備 考
1	可 能	可 能	旧版の「公開」と同じ
2	Look サブコマンドのみ可	認可時のみ可	
3	同 上	不 可	
4	不 可	認可時のみ可	
5	不 可	不 可	旧版の「非公開」と同じ

公開レベル 2～4 のソースプログラムは暗号化して管理。これはソースを無断で複写されるのを防止するためである。

公開レベル 2～3 のソースプログラムの検索はライブラリ管理システム下の特定のコマンド(Look サブコマンド) を介してのみ可能とする。Look サブコマンドには、

LIST, FIND, SFIND, TOP  
BOTTOM, DOWN, UP, HELP, END

といった EDIT と同様のサブコマンドを設ける。ソースの画面表示は LIST サブコマンドにより可能とするが、1 画面 20 行表示とし、無断複写禁止のメッセージを付加する。これは先に述べたように、ユーザに無断複写がプログラム提供者の権利を犯すものであるという認識を持ってもらうためである。次画面の表示は送信キーの押下で行う。また Look サブコマンド実行中は TSLOG 機能を抑止する。

以上が新システムの概要である。ソフトウェア保護のための機能拡充のほか、FLIB コマンド を使 い易く する ため、HELP サブコマンドの充実を行った。また、FLIB コマンドモードにおいて、一般の T S S コマンドを投入できるようにした。

#### 4.2.5 終わりに

新システムについて不備な点，改良すべき点等，お気づきになりましたらセンターまでご意見を寄せてほしい。

センターではさらに今後のソフトウェア保護についての社会的状況の変化に対応しつつ，さらにライブラリ管理システムの充実に務めたい。

#### 参 考 文 献

1. 「ジュリスト」№ 784，1983年2月15日号  
特にP 14 中山信弘「コンピュータ・プログラムの法的保護」
2. 「情報処理」vol. 25，1984，№ 6

### 4.3 カラーグラフィックスの応用その後

係 長 伊 奈 諭  
助 教 授 柏 木 浩

以前 (No. 2) 原子軌道の電子密度分布の立体表示および分子軌道の電子密度分布の断面表示を紹介した。次ステップとしては分子軌道の立体表示へと発展したい所であるが、大規模分子の計算には膨大な計算時間が必要なうえに、立体表示するためには何層もの断面情報が必要となるため現計算機の計算能力ではまだ実施段階ではない。しかし分子内の電子分布の立体像を把握したいという願望は捨てがたいため、次のような方法を考案した。すなわち数少ない電子分布断面図からその立体的変化を推測させるような表示方法を採用した。

#### (1) 垂直二断面の交差表示

X-Y平面の断面図およびZ-X (またはY)平面の断面図の二枚を、垂直に交差する二平面にそれぞれマッピングした上で隠面消去を考慮して画素全体を透視投影変換することによって図 4.3.1のような表示が得られる。複雑な立体構造を推測するにはまだ情報量が足りないが、従来別々に見ていた2断面を1画面に結合表示するだけでかなり分かり易くなる。

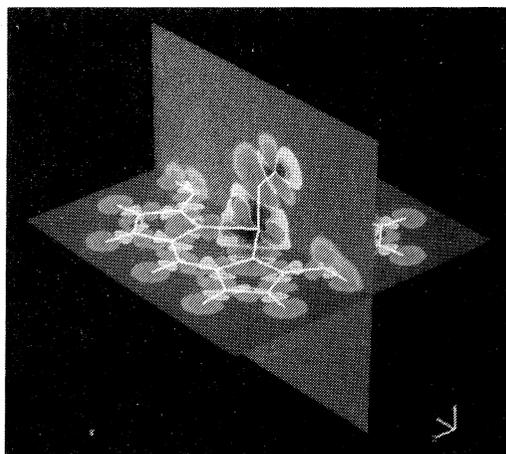


図 4.3.1 垂直二断面の交差表示

#### (2) 平行断面の並列表示

次にポイントとなる断面のうち数枚 (3~4枚) を平行に配列した平面 (たとえば X-Y面) の上にそれぞれマッピングし、(1)と同様に透視投影変換することによって図 4.3.2のような表示が得られる。面と面の間隔は現実の断面間距離比率とはまったく異なりあくまでも模式的な表示であるが、分子面および分子面から離れるに従ってどのような変化が起こっているかが1画面から把握できる点で意味がある。

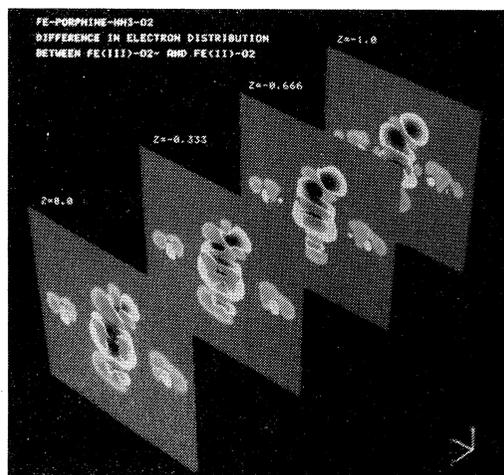


図 4.3.2 平行断面の並列表示

## 4.4 パソコンを使ったカラーグラフィックスの応用について

係 長 伊 奈 諭

当センターでは従来から高級型カラーグラフィックシステムを使った応用例をいくつか作成してこれまでもいくつか発表してきた。このシステムは利用者の方々にも公開して使っていただけるようになっているが、普通の端末と使い勝手が違うためしきいが高いのか有効に利用されていない。気軽に使うにはやはり重いシステムであるかなという気がしているので、今回は非常に軽いパソコンを使ってほぼ同様の応用を行ってみた。高級型カラーグラフィックシステムと比べるとやはり画質は落ちるけれども使い方によってはかなりいけるとの感触を得たので以下に報告する。パソコンのいい所はおしきせでなく、自分の手作りの味を楽しむことができる点が大いなので興味のある方は自分のパソコンで試みてはいかがだろうか。

### 4.4.1 システム構成

使用したパソコンのシステム構成を参考までに図 4.4.1 に示す。

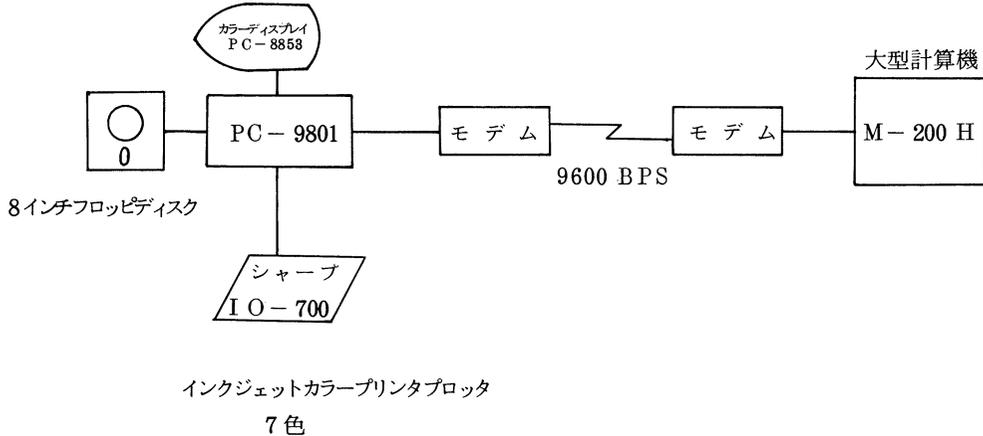


図 4.4.1 パソコンシステムの構成

### 4.4.2 ソフトウェア

N 88 - DISK - BASIC

IO-700 (シャープ) 用ハードコピーソフト

ファイルトランスレータ (N88-DISK-BASIC ↔ IBM形式)

} これらは市販品である。

自作のソフトウェアについてはあとで説明する。

#### 4.4.3 グラフィックスの能力

使用したパソコンのグラフィックス能力と既設の高級カラーグラフィックスとの比較を表 4.4.1 に示す。性能上では圧倒的に劣るが後で述べる方法を用いればかなり迫ることができる。

表 4.4.1 グラフィックスの能力

	パソコングラフィックス	高級カラーグラフィックス
画面サイズ	14 インチ	20 インチ
精 度	640 × 400 ピクセル	512 × 512 ピクセル
階 調	2 (R, G, B)	64 (R, G, B)
色 数	$2^3 - 1$	$64^3 - 1$
インタフェース	R S - 232 C	チャンネル, DMA インタフェース
伝 送 速 度	9,600 B P S 以下	50 K B Y T E / S 程度

#### 4.4.4 パソコンカラーグラフィックスの適用表示例

(1) 分子内電子密度分布断面画像の表示

図 4.4.2 にカラーハードコピーで示す。

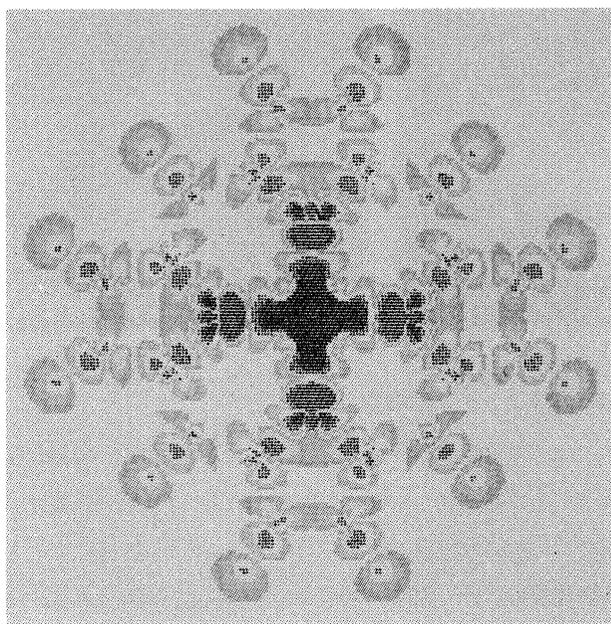


図 4.4.2

## (2) 原子内電子密度分布の立体表示

S,  $P_x$ ,  $D_{xz}$ ,  $D_{z^2}$  軌道の例を図 4.4.3, 図 4.4.4, 図 4.4.5, 図 4.4.6 にカラーハードコピーで示す。

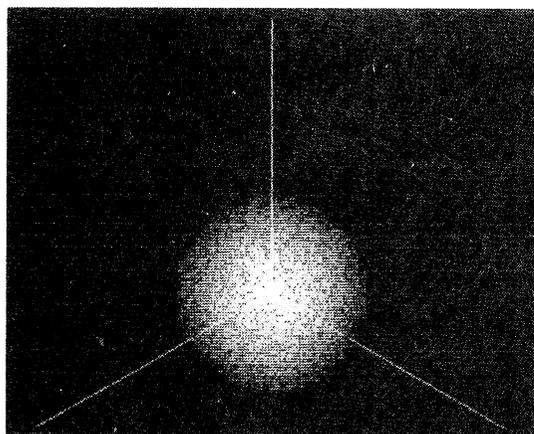


図 4.4.3

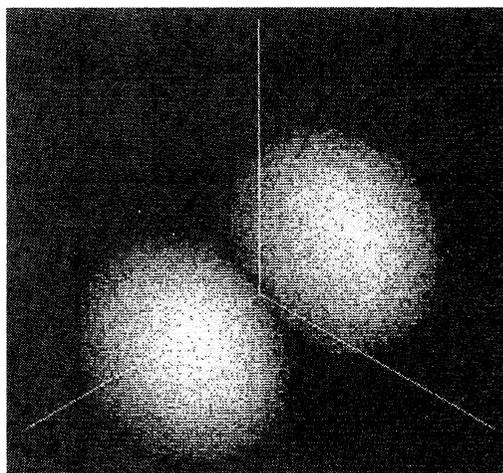


図 4.4.4

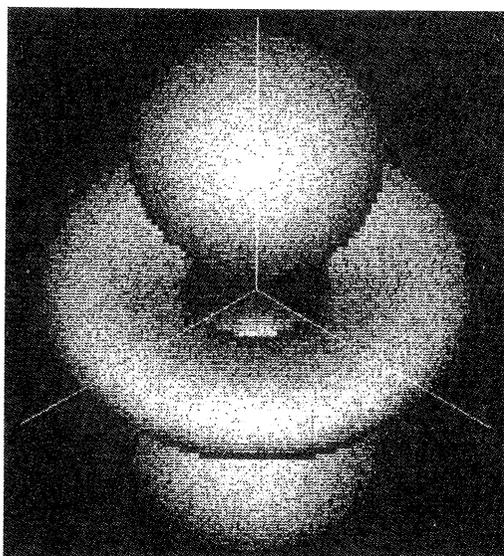


図 4.4.5

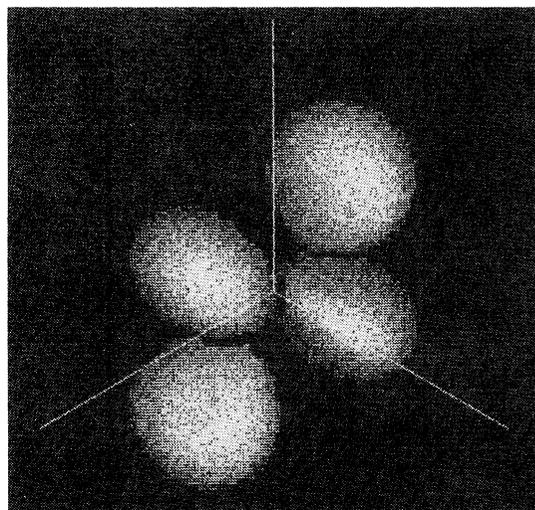


図 4.4.6

### 4.4.5 使用したパソコングラフィックスの手法

パソコンは主流が16ビットとなり高性能化し科学技術分野, ビジネス分野へ急速に普及しているがパソコン単体でできる仕事はまだまだ限られている。また逆にパソコンが高性能化すればする程他計算機との係わりは増大するはずである。今回のパソコングラフィックスの応用においても計算量, 効率の面から主要な計算は大型計算機で行い, 画像・図形データを通信回線経由あるいはフロッピーディスク渡してパソコン側で受け取って加工表示する形をとった。使った主な手法は次の通りである。

(1) 画像の濃淡表示

高級カラーグラフィックスであれば三原色それぞれに対して 64 階調以上の濃淡値をもち合計で  $64^3 - 1$  色以上の表現ができ、1 ピクセルごとに微妙な色合いの変化をつけられる。ところが現状のパソコンでは高精細カラーモードにしたとき三原色それぞれ 2 階調 (0, 1) で  $2^3 - 1 = 7$  色の表現しかできない。したがってこのままでは微妙な色合い (中間色) は使えない。そこでここでは

図 4.4.7 のように 4 ピクセルを 1 ドットとして三原色それぞれ 5 階調 (0~4) をもたせることにした。これにより 1 ドット当り  $5^3 - 1 = 124$  色まで擬似的に出せる。これを使って表示した画像が図 4.4.8 である。

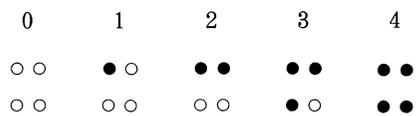


図 4.4.7 パソコングラフィックスのドットの階調

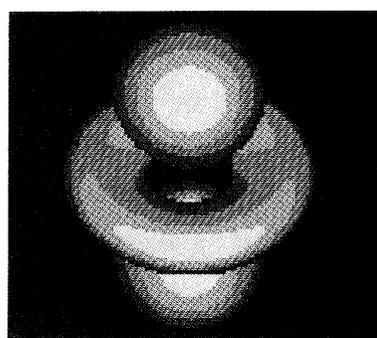


図 4.4.8

(2) ランダムディザ法

(1)で述べたような不連続な濃度値をもつ各ドット値に対して一定幅の乱数 (ノイズ) を加え濃度値を分散させると濃度値の不連続による不自然さをとり除くことができる。図 4.4.3~図 4.4.6はこれを用いた例である。

(3) T S Sモードでのファイル転送

N 88 - BASIC標準装備のTERMコマンドを使えば簡単にT S Sモードにすることができ大型計算機の無手順端末とすることができる。さらにN 88 - DISK - BASICのリモートBASICプロトコル (エスケープシーケンス) を使ってファイル転送を行うことができる。まず大型計算機側では  $400 \times 400$  ピクセル ( $200 \times 200$  ドット) の画像データを三原色別々に生成する。次に画像データを図 4.4.9 のように左から 4 ビットずつ取り出して 16 進数 (0~F) で表し、これを文字 (1 バイト) に変換して 1 行を 100 バイト (文字) の文字列として表現しておく。これを 1 レコードとして三原色それぞれ 400 レコードの文字列データとして一画像が構成できる。データ量は (100 バイ



(5) ハードコピーについて

カラーハードコピーとしては低価格のシャープ IO-700 を使用した。インクジェットタイプで7色まで表示できる。インクジェットタイプの難点は作画時間が長いことと OHP 用紙にコピーできない点である。OHP へ作画するには現状ではやはり熱転写方式の方がよいようである。

#### 4.4.6 おわりに

パソコンはもともと単体として十分使用できるような能力をもっているが、実務規模が大きくなってくるとパソコン単独の仕事では済まず、他計算機や他ソフトとのインタフェースを意識せざるを得なくなる。それは通信であったりフロッピー互換であったりする。大型計算機をジェット旅客機にたとえればパソコンは近距離に便利な自家用車である。ジェット旅客機に自家用車の手軽さを求めるのは無理である。両者は共存共栄してより大きな価値をもつ。今後も両者の最適な役割分担を念頭において大型計算機に足りない部分を補助する意味でパソコンを有効利用する必要性を感じている。

## 5. 一般報告

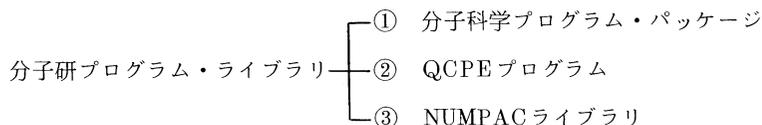
### 5.1 分子研ライブラリ・プログラムの収集と開発

当センターは開設以来、ライブラリ・プログラムの収集・開発に務めており、83年度においても表5.1.1にあるようにライブラリ開発計画を組み、その成果は新規登録プログラムあるいは、既存プログラムの改良・発展という形で結実している。

表 5.1.1 昭和58年度 分子研ライブラリプログラム開発作業一覧

1	小 杉 信 博	東大理 助手	ab initio SCFプログラムGSCF3及びアレイプロセッサのためのアルゴリズムの開発
2	中 辻 博 牛 尾 二郎 諫 田 克哉 波 田 雅彦	京大工 助手 " 大学院学生 " " " "	クラスター展開法によるSACプログラムの開発整備
3	岩 田 末 廣 青 柳 睦 佐 藤 信 行	慶大理工 助教授 " 大学院学生	CI計算のプログラムEFCIのレベルアップ及び振動波動関数計算のプログラムDIAVIBの開発整備
4	二 宮 市 三 秦 野 甯 世	名工大 教授 名大大型計算機センター 助手	汎用数値計算プログラムの整備・提供
5	三 好 永 作	福岡歯科大 助教授	原子核のまわりの電子数計算プログラムの開発
6	大 沢 映 二 藤 吉 照 代 P. Ivanov A. Buda	北大理 助教授 " 大学院学生 " 研究生 " "	分子力場計算プログラムBGSTN3, NMR結合定数計算プログラム3JHHの開発・整備
7	長 村 吉 洋	慶大理工 助手	MCSCF計算のプログラムGAMESSのレベルアップ
8	鈴 木 令 子 野 村 令 子 生 田 興 雄 須 藤 茂 進	筑波大理工学系 大学院学生 理研 研究員 都立大理 助手 弘前大理 講師	衝突断面積計算のプログラムの開発 分子軌道計算のプログラムECPHONDOの開発整備
10	鈴 木 博 子 大 石 雅 寿	東大野辺山宇宙電波観測所 研究員 東大理 大学院学生	星間分子の分子線検索システムISLINEの開発整備
11	安 藤 勲 甲 本 忠 山 延 健	東工大工 助教授 " 助手 " 大学院学生	NMR化学シフト計算のプログラムFPTCHTの開発整備

現在、分子研プログラム・ライブラリの構成は以下に示すように、3本柱から成り立っている。



①の分子科学プログラム・パッケージには、国内及び国外の研究者から提供されたプログラム、②のQCPEプログラムからHITAC Mシリーズにコンバートされたプログラムなど約100本が収まっている。これらのプログラムのソースはデータセットとしてライブラリ用磁気ディスク上にカタログされ、その大部分は実行可能ロードモジュールとしてもカタログされているので、ユーザーは即時使用することができ、その使用回数は昭和58年度が総計14,737回にも達している。

昭和58年度に新規登録プログラムとして、新たに追加されたプログラム10件を以下に示す。

```
KURVLR PROGRAM FOR ANALYSING X-RAY DIFFRACTION DATA OF LIQUID
CMQCA  CARNEGIE-MELLON QUANTUM CHEMISTRY ARCHIVE
MNDOM  MNDIFIED VERSION OF MNDO SCF MO CALCULATION PROGRAM
COUNT FORMAT TRANSFORMER FOR FORTRAN77 EXECUTION MAP
ATOMCI CONFIGURATION INTERACTION PROGRAM FOR ATOMS
CA'SSCF A PROGRAM FOR COMPLETE ACTIVE SPACE SCF CALCULATIONS
FPTNMR CALCULATION OF NMR CHEMICAL SHIFT BY FPT-INDO/CNDO
WIGNER MAGNITUDES OF 3-J AND 6-J SYMBOLS
PSHOND PSEUDOPOTENTIAL VERSION OF MO PROGRAM HONDO
TSS517 PROGRAM FOR TELECOMMUNICATION BY NEC PC-8801 COMPUTER
```

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、現在約400本ある。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、広く数学・物理・化学の分野のプログラムも含まれており、非常に有益なものである。ほとんどはFORTRANで書かれたプログラムで、ユーザーには磁気テープによりソースプログラムの貸出しサービスを行っている。

昭和57年には以下に示す12件のプログラムを新規登録した。(昭和57年12月21日付)

```
QC0443 VESCF:VARIABLE ELECTRONEGATIVITY SELF-CONSISTENT FIELD
QC0444 MATH:MATH PROCESSING FACILITY
QC0445 RISMIX:RISM EQUATION FOR MULTICOMPONENT MOLECULAR FLUIDS
QC0448 MM2:MINICOMPUTER PERKIN-ELMER VERSION OF MM2
QC0450 DNMR3H:MODIFIED DNMR3 FOR NMR LINE SHAPES
QC0451 HOTATOM:STOCHASTIC PROGRAM FOR SIMULATED COLLISION EVENTS
QC0452 EUCLID:INTERACTIVE SYSTEM FOR GEOMETRY CALCULATIONS
QC0453 MERCURY:A GENERAL MONTE CARLO CLASSICAL TRAJECTORY PROGRAM
QC0454 ECPEP:EMPIRICAL CONFORMATION ENERGY PROGRAM FOR PEPTIDES
QC0456 NMR:INTERACTIVE SIMULATION OF NMR SPECTRA OF I-1/2 SYSTEMS
QC0457 FERMI:FERMI CONTACT NUCLEAR SPIN COUPLING CONSTANTS
QC0458 LAOCN-5:ANALYSIS OF NMR SPECTRA OF SPIN-1/2 SYSTEMS
```

③のNUMPACライブラリは、二宮市三教授その他の方々の製作による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、現在 603 件である。固有値問題・連立一次方程式等の線形代数、数値微積分、フーリエ解析、常微分方程式、特殊関数、最適化問題等を扱うことができる。今後も改良・追加を行っていく予定である。

以下表 5.1.2 に現在（昭和 59 年 6 月 16 日）登録されている分子科学プログラム・パッケージの一覧表を示す。

表 5.1.2 分子科学プログラム・パッケージ一覧

```

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

***** LIST OF PROGRAMS IN THE GIVEN FIELD *****
FIELD CODE   : 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

FIELD CODE   : NM40
FIELD TITLE  : SYMMETRY ANALYSIS.

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

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   : 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  HOND0G        AB INITIO LCAO-SCF-MO METHOD AND GRADIENT METHOD
005  SCEP          SELF-CONSISTENT ELECTRON PAIRS METHOD
006  IMSPAC        AB INITIO SCF MO CALCULATIONS
007  RKNGAU        RIKEN GAUSSIAN70
008  IMSPAK        GEOMETRY OPTIMIZATION BY AB INITIO SCF-MO CALCULATIONS
009  COMICA        A PROGRAM SYSTEM FOR CONFIGURATION MIXING CALCULATION(CI)
010  IPCREF        EFFECTIVE HAMILTONIAN MATRIX CONFIGURATION INTERACTION(EFCI)
011  PA200         LIST OF ONE- AND TWO-ELECTRON INTEGRAL LABELLS
012  PA300         EVALUATE ONE- AND TWO-ELECTRON INTEGRALS
013  PA409        CLOSED-SHELL SCF AND POPULATION ANALYSIS PACKAGE

```

014 PA600 ONE-ELECTRON PROPERTIES PACKAGE  
 015 INTCPY INTEGRAL COPY ROUTINE OF POLYATOM SYSTEM  
 016 GAUS76 AB INITIO MO CALCULATION. GAUSSIAN 76 M-VERSION.  
 017 ALIS AB INITIO MCSCF PROGRAM FOR ATOMS AND MOLECULES  
 018 JAPIC1 PLOTTER WRITING OF MO AND DENSITY BY AB INITIO METHODS  
 019 JAPIC2 PLOTTER AND GRAPHIC DISPLAY WRITING OF MO AND DENSITY  
 020 GUGACI GRAPHICAL UNITARY GROUP APPROACH CI BY ISAIAH SHAVITT  
 021 DRAWDG DIAGRAM:GENERATION OF GOLDSTONE AND BLOCH-BRANDOW DIAGRAMS  
 022 GSCF2 PROGRAM GSCF2 WITH ONE-HAMILTONIAN AND PARTIAL SCF METHOD  
 023 GAMESS GENERAL ATOMIC AND MOLECULAR ELECTRONIC STRUCTURE SYSTEM  
 024 GAUS80 GAUSSIAN 80 : AB INITIO MO CALCULATION (HITAC VERSION)  
 025 ALCHEM ALCHEMY:AB INITIO ELECTRONIC STRUCTURE CALCULATION PACKAGE  
 026 CMQCA CARNEGIE-MELLON QUANTUM CHEMISTRY ARCHIVE  
 027 ATOMCI CONFIGURATION INTERACTION PROGRAM FOR ATOMS  
 028 CASSCF A PROGRAM FOR COMPLETE ACTIVE SPACE SCF CALCULATIONS  
 029 PSHOND PSEUDOPOTENTIAL VERSION OF MO PROGRAM HONDO  
 030 MELD PROGRAM FOR MANY ELECTRON DESCRIPTION  
 031 JANIE1 NUMERICAL INTEGRATION OF ELECTRON DENSITY

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MNDO	MNDO SCF CALCULATIONS
002	MINDO3	MO CALCULATIONS BY MINDO/3 METHOD
003	CNINDO	MO CALCULATION BY CNDO AND INDO METHODS
004	MNDOM	MNDIFIED VERSION OF MNDO SCF MO CALCULATION PROGRAM
005	FPTNMR	CALCULATION OF NMR CHEMICAL SHIFT BY FPT-INDO/CNDO

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

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

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	DISMAT	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

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

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

NO. PROGRAM ID PROGRAM TITLE  
001 NCTB NORMAL COORDINATE TREATMENT OF MOLECULAR VIBRATIONS  
002 CVOA NORMAL COORDINATE TREATMENT OF CRYSTAL VIBRATIONS  
003 LSVR3 LEAST-SQUARES ANALYSIS OF VIB-ROT SPECTRA OF AN ASYM. TOP  
004 LSRES3 L.S. ANALYSIS OF VIB-ROT SPECTRA OF ASYM. TOP IN RESONANCE  
005 BC3 CALCULATION OF VIB-ROT SPECTRA OF ASYMMETRIC TOP  
006 BCRES3 CALC. OF VIB-ROT SPECTRA IN RESONANCE FOR AN ASYMM. TOP  
007 ENVLOP CALCULATION OF BAND ENVELOPES OF VIB-ROT SPECTRA  
008 DISPL3 DISPLAY OF THEORETICAL VIB-ROT SPECTRA  
009 ASSIGN ASSIGN DIAGRAM FOR THE ASSIGNMENT OF VIB-ROT SPECTRA  
010 ISLINE ATOMIC AND MOLECULAR SPECTRAL LINE DATA RETRIEVAL SYSTEM  
011 CHEMIC CHEMICS :AUTOMATED ORGANIC CHEMICAL STRUCTURE ELUCIDATION  
012 IR2 INFRARED SPECTRAL RETRIEVAL SYSTEM

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

FIELD CODE : AS10  
FIELD TITLE : SOLID STATE AND SURFACE.

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

FIELD CODE : 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

FIELD CODE : BI10  
FIELD TITLE : BIOMOLECULES.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	NASH	SEARCH FOR NEAR ATOMS IN A PROTEIN
002	STEREO	STEREO DRAWING OF SKELETAL MODEL OF PROTEINS.
003	CONVRT	CONVERSION OF BNL DATA FORMATS TO 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 : 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

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

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

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

\*\*\*\* TOTAL NUMBER OF UNIQUE PROGRAMS \*\*\*\*  
109

\*\*\*\* SORTED UNIQUE PROGRAMS \*\*\*\*

ALCHEM	ALIS	ASA	ASSIGN	ATOMCI	ATOMHF	BCRES3
BC3	BENDER	BSIP	CASSCF	CGTOFD	CGTORL	CHEMIC
CLAMPS	CMQCA	CNINDO	COMICA	CONVRT	COUNTF	CSACST
CVOA	DISMAP	DISPL3	DNMR3	DRAWDG	DVSCAT	EHTB
ENVLOP	FCBSD	FCMP	FLOW	FORDAP	FPTNMR	GAMESS
GAUS76	GAUS80	GPQDD	GSCF2	GUGACI	HLISP	HMO
HONDOG	IMSPAC	IMSPAK	INTCPY	IPCREF	IR2	ISLINE
JAMOL3	JANIE1	JAPIC1	JAPIC2	KURVLR	LAOCN3	LIBE
LSRES3	LSVR3	MDANO3	MDP	MDSALT	MELD	MINDO3
MMIPI1	MMIPI3	MMIY3	MM2	MNDO	MNDOM	MOLSCT
MULTAN	NASH	NCTB	NICER	NLPLSQ	ORTEP	OTHELO
OUTFIT	PA200	PA300	PA409	PA600	PDB	PFORTV
PGCCMB	PKIT	POTOPS	PPP	PROFIL	PRTXYZ	PSHOND
PSPART	PSTOPO	QCHECK	QCLDB	REDUCE	REPORT	RKNGAU
SALS	SCEP	SFORT	STEREO	STERIC	STINGY	SUPPOS
TASP	TSS517	UNICS3	WIGNER			

IMS COMPUTER CENTER: LAST UPDATE = 84-06-15

## 5.2 データベース開発状況

データベースは以下の4件が一般公開されている。(2)を除く4件のデータベースについては、データの増補、データベース管理プログラムの機能拡張等が行われた。

- (1) QCLDB (量子化学分献データベース)
- (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 (IRDC スペクトルデータベース)

なお、昭和59年4月より、データベース STERIC が公開された。このデータベースは、東海大学開発技術研究所、米田幸夫教授作製によるもので、有機化合物の構造を推定するシステムである。

## 5.3 プログラム相談

### 5.3.1 プログラム相談

プログラム相談は、一般プログラム相談と応用プログラム相談の2本立てで行っている。

#### (1) 一般プログラム相談

時間帯は昼休みを除いた計算機オープンサービス時間内にプログラム相談室で行っている。相談内容は FORTRAN 言語 (コンパイラ)、オープンバッチの利用方法、データセットについて、T S S コマンド及び操作、M T M について、シスアウト編集、カタログドプロシジャ、運用についての問い合わせなどである。

一般利用を行う上での相談を受けている。

#### (2) 応用プログラム相談

相談員は所内外の研究者 (主に理論系受託大学院学生) に委嘱している。相談内容は、ライブラリ・プログラム、その中でも特に GAUSSIAN 80, IMSPACK, JAMOL 3 といった大型 *ab initio* 計算プログラムの使い方等である。所外から共同研究者・施設利用者が多く利用している。一般プログラム相談に比べ、個々のプログラムの内容にまで立ち入った、より高度な問題を扱うことを主眼としており、研究者の便宜に供している。この意味で、応用プログラム相談員は所外からの共同利用者と施設利用者にとって、貴重な人的資源であるということができ、またセンターの円滑的、効率的運営においても欠くことのできない存在である。

## 5.4 研究会・学会報告

### 5.4.1 情報処理学会

昭和58年10月18～20日 名古屋大学工学部

○スーパーコンピュータへの期待（パネル討論）

- 発表者 柏木 浩

（内容） 分子科学におけるスーパーコンピュータの利用について、現状についての問題点と将来における可能性を紹介した。

### 5.4.2 東大大型計算機センター・ユーザ研究会

昭和58年10月27～28日 東大大型計算機センター

○スーパーコンピュータ・ワークショップ報告

- 発表者 柏木 浩

（内容） 分子研センターのスーパーコンピュータ・ワークショップの活動状況を報告した。

### 5.4.3 第5回全国共同利用大型計算機センター研究開発連合発表講演会

昭和58年12月1日 大阪大学大型計算機センター

○MTMの機能拡充

- 発表者 西本史雄, 柏木 浩, 近藤久人\*, 相浦勝市\* (\*ファコム・ハイタック㈱)

（内容） MTMの機能について概要を報告し、特に今回強化した機能について使用例を述べた。

### 5.4.4 情報化学討論会

昭和58年12月6～7日 京都大学薬学部

○アレイプロセッサのための分子積分変換のアルゴリズム

- 発表者 柏木 浩, 長嶋雲兵, 加藤 充\* (\*ファコム・ハイタック㈱)

（内容） アレイプロセッサ向きのアルゴリズムを採用した分子積分変換のプログラムとS-810/20によるテストランの結果を報告した。

#### 5.4.5 第12回分子研技術研究会

昭和59年3月2～3日 分子科学研究所

- 電子計算機部門オーガナイザ 伊 奈 諭

(内容) 電子計算機部門としては全国から30名の参加を得て9件の発表・討論が行われた。次年度は名大プラズマ研究所で開催される予定である。

#### 5.4.6 東大大型計算機センター・ユーザ研究会

昭和59年3月5～6日 東大大型計算機センター

○分子積分変換のアルゴリズムとベクトル化

- 発表者 長嶋雲兵, 柏木 浩

(内容) アレイプロセッサ向きのアルゴリズムを採用した分子積分変換のプログラムとS-810/20によるテストランの結果を報告した。

## 6. 昭和58年度稼働状況および利用者数

### 6.1 利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数

利用分野	利用区分	プロジェクト数	ユーザ数	時間			点数	
				申請	許可	実績	許可	実績
分子科学	施設利用	139	383	8,215	5,525	4,660	2,099,500	1,770,708
	共同研究	1	5	30	26	26	9,880	9,744
	協力研究	28	28	1,106	843	411	320,340	156,107
	所内		27	102	1,269	1,269	910	482,220
アイドル <sup>(注)</sup>		14	53	2,400	2,400	2,030	912,000	771,471
生理学	施設利用	2	6	18	18	7	6,840	2,554
基礎	施設利用	1	3	10	7	6	2,660	2,354
生物学	協力研究	1	1	5	3	0	1,140	0
合計		213	581	13,053	10,091	8,050	3,834,580	3,058,833

(注) ① アイドルとはコンピュータの空き時間を利用して実行されるバックグラウンドジョブ専用の利用区分であり、コンピュータの有効利用のために所内でのみ利用可能とした。

② ここでのCPU時間実績は点数管理の方から(点数/380)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使用時間とはなっていないことに注意。

### 6.2 システム稼働状況

表 6.2.1 M-200H×2 システム稼働状況

年 月	稼働時間		保守時間	システム障害
	グローバル	ローカル		
58/ 4	594 : 00	566 : 00	18 : 00	0 : 00
5	553 : 00	504 : 00	18 : 00	0 : 30
6	567 : 00	565 : 00	18 : 00	0 : 00
7	559 : 00	524 : 00	20 : 00	0 : 12
8	555 : 00	543 : 00	22 : 00	0 : 00
9	387 : 30	373 : 00	24 : 00	0 : 00
10	443 : 30	418 : 30	18 : 30	11 : 00
11	396 : 00	363 : 00	22 : 00	0 : 00
12	444 : 00	428 : 00	20 : 00	0 : 00
59/ 1	456 : 00	454 : 00	9 : 00	0 : 00
2	435 : 00	411 : 00	31 : 00	2 : 24
3	525 : 00	517 : 00	21 : 00	0 : 00

### 6.3 ジョブ処理件数

M-200H2台のトータルジョブ処理件数の月別、クラス別内訳を表6.3.1、図6.3.1に示す。

### 6.4 CPU時間

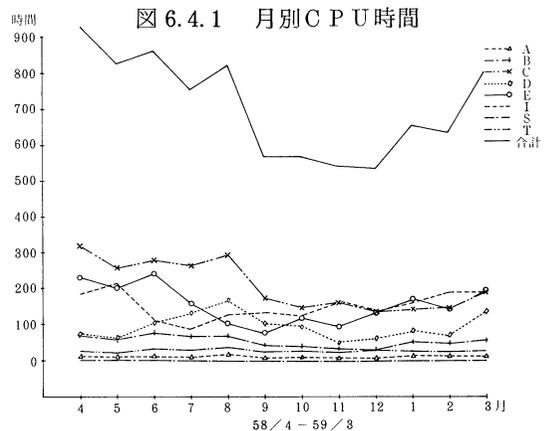
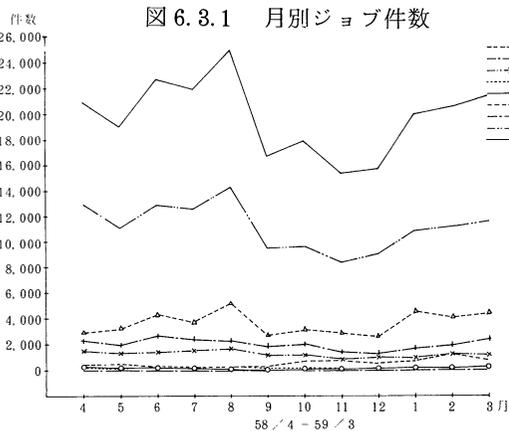
M-200H2台のトータルCPU使用時間の月別、クラス別内訳を表6.4.1、図6.4.1に示す。

表 6.3.1 月別ジョブ件数

***** ショボノ クラス *****												
< ショボノクラス >												
( 月 )	( A )	( B )	( C )	( D )	( E )	( I )	( S )	( T )	( X )	( Y )	( Z )	( TOTAL )
04	2,896	2,312	1,528	175	244	439	0	12,962	58	272	0	20,886
05	3,230	1,970	1,371	140	227	506	0	11,093	33	428	1	18,999
06	4,368	2,692	1,460	270	236	362	0	12,914	73	267	0	22,642
07	3,777	2,435	1,587	254	199	310	0	12,603	131	551	0	21,847
08	5,226	2,319	1,719	360	117	317	0	14,286	104	417	0	24,865
09	2,728	1,897	1,219	215	74	357	0	9,512	88	576	0	16,666
10	3,156	2,046	1,235	261	136	716	0	9,603	117	586	4	17,858
11	2,878	1,441	917	119	110	769	0	8,401	202	466	15	15,318
12	2,615	1,317	1,055	134	188	594	0	9,037	73	634	6	15,653
01	4,529	1,718	997	211	214	756	0	10,858	59	568	7	19,917
02	4,088	1,917	1,254	184	200	1,214	0	11,183	48	345	58	20,491
03	4,415	2,395	1,172	320	241	792	0	11,614	21	368	39	21,377
(TOTAL)	43,906	24,459	15,512	2,643	2,186	7,132	0	134,066	1,007	5,478	130	236,519

表 6.4.1 月別CPU時間

***** CPU シカク *****												
< ショボノクラス >												
( 月 )	( A )	( B )	( C )	( D )	( E )	( I )	( S )	( T )	( X )	( Y )	( Z )	( TOTAL )
04	11:17:14	70:26:57	318:33:52	73:03:27	229:50:35	183:11:25	00:00:00	25:53:24	10:49:10	05:02:19	00:00:00	928:08:23
05	09:50:54	57:46:06	257:35:41	61:31:25	200:51:07	213:45:31	00:00:00	21:56:21	00:02:21	02:50:52	00:08:21	826:18:39
06	11:31:19	76:10:12	278:34:20	103:47:51	241:43:07	112:40:51	00:00:00	32:58:17	01:31:26	00:35:20	00:00:00	859:32:43
07	10:03:11	67:52:18	264:10:00	131:05:24	158:43:41	88:46:54	00:00:00	29:19:36	01:17:33	01:30:20	00:00:00	752:48:57
08	18:02:15	68:43:16	292:58:37	165:12:15	102:47:01	127:23:31	00:00:00	37:24:57	04:31:14	01:56:18	00:00:00	818:59:24
09	08:18:20	42:59:58	175:12:38	102:58:51	76:09:35	133:01:37	00:00:00	25:29:49	02:29:37	02:57:06	00:00:00	567:17:31
10	10:06:07	40:38:51	146:31:07	95:04:59	116:22:48	124:09:41	00:00:00	27:11:36	00:40:43	06:38:42	00:00:00	567:24:34
11	08:46:20	34:00:38	162:13:13	50:18:45	93:50:17	159:04:12	00:00:00	24:01:51	02:10:23	05:35:02	00:06:56	540:07:37
12	07:34:39	31:13:07	133:41:50	61:01:36	131:03:23	137:53:33	00:00:00	29:28:02	00:08:31	02:41:55	00:02:12	534:48:48
01	14:09:22	52:28:06	142:06:40	81:16:46	170:40:15	160:08:28	00:00:00	27:25:12	03:04:22	02:58:10	00:00:07	654:17:28
02	13:33:18	46:54:27	146:43:00	69:12:35	141:40:39	189:52:11	00:00:00	25:20:37	00:10:19	01:35:02	00:07:09	635:09:17
03	11:42:17	55:43:36	188:23:30	134:36:20	194:22:28	190:12:55	00:00:00	27:31:36	00:00:16	01:53:23	00:00:11	804:26:32
(TOTAL)	134:55:16	644:57:32	2504:44:28	1128:50:14	1658:04:56	1820:10:49	00:00:00	334:01:18	26:55:55	36:14:29	00:24:56	8489:19:53



## 7. 速報抜粋 —— 速報 (No. 26 ~ No. 31) からの抜粋 ——

### 7.1 TSS 電話回線の構成変更について (No. 25)

5月末から TSS 電話回線の構成を次のように変更してサービスします。

速 度	従 来	5 月 末 に
300 BPS	3 回線	2 回線
1200 BPS	4	5

電話番号は次の通りです。

1200 BPS 53-6114 (代) (6115, 6116, 6117, 6118)

300 BPS 53-6111 (代) (6112)

これは 1200 BPS の需要増, 300 BPS の需要減に伴う変更です。

### 7.2 JOB 投入に関する注意事項 (No. 25)

3月, 4月と大変混雑していますが, システムを効率よく利用する上で次の点に留意されるようにお願いします。

#### (1) プロセサの選択 (IAP, NOIAP の指定)

通常のジョブ (どちらのプロセサで実行してもよいジョブ) はシステムがそれぞれの空き状態に応じて理想的にバランスよくジョブを振り分けます。プロセサ指定 (JCLの// \* MAIN 文) が必要なのは普通 IAP (アレイプロセサ) を使用する場合に限られます。したがってそれ以外のジョブではプロセサ指定をしない (JCLの// \* MAIN 文を抜く) ようにしてください。 (ただし 3 で述べるワーキングセットサイズの大きなジョブに関してはこの例にもれます。)

#### (2) REGION サイズの指定

JOB 文または EXEC 文での REGION サイズ指定は必要以上に大きくしないこと。それぞれのジョブの実質的な大きさに合った指定をするようにしてください。それは次の二つの理由によります。

##### ① 同時に実行できるジョブの合計 REGION サイズは 32MB まで。

プロセサごとに同時に実行しているジョブの REGION サイズ合計が 32MB を超えると以後のジョブはジョブクラスに空きがあっても実行に入れません。すべてのジョブで 7MB の REGION サイズが指定されると 4 本しか同時に流れないこととなります。A ジョブが長時間実行されないことがあります, この理由によるものがよくあります。

- ② 小さいREGIONサイズのジョブほど取り出されやすく、大きいREGIONサイズのジョブほど取り出されにくい。

①で述べたようにREGIONサイズ合計が32MBの上限で押えられているが、続いて実行に入るジョブの選択は残りREGIONサイズの空きと見比べて選択されるため、小さいものはジョブの投入が後でも先にどんどん追い越して実行されることとなります。

(3) 実質ジョブサイズ（ワーキングセットサイズ）の大きなジョブの制限

REGIONサイズではなく実メモリ上で実際に占める領域（ワーキングセットサイズ）の大きなジョブは他のジョブやTSSのターンアラウンドタイムに大きな悪影響を及ぼします。特にIAP側で流れると、TSSとバッチジョブの両方の負荷があるため、TSSの応答が非常に悪くなります。したがってできるだけジョブのワーキングセットサイズを小さくしてください。

このためには次の方法が考えられます。

- ① 最適なオーバーレイ構造をとる。
- ② DIMENSION宣言などで過大なデータ領域をとらないようにする。
- ③ 配列の参照・書き込みは効率のよい方法で行う。

詳細は速報No.21を参照してください。

また止むを得ず大きなワーキングセットサイズのジョブを実行する場合には次のことに留意してください。

- ① 夜間、休日などの閑散時間帯に投入実行する。
- ② NOIAP側で実行するように指定する。（TSSの負荷がないので少しは効率がよい。）

### 7.3 MTMのすすめ（No.25）

MTMの機能が強化され使いやすくなりました。

MTMは磁気テープも含めた利用者のデータセットを総合的に管理できるシステムで次の機能を持っています。

- ① ディスク上のデータセットを一括して磁気テープにコピーする。  
コピーしたデータセットの情報はMTM情報として利用者のデータセットに保存、蓄積される。
- ② 磁気テープ上のデータセットをディスクに一括してリストアする。  
リストアするときの磁気テープのデータセットの情報は、MTM情報からラベルより得る。
- ③ MTM情報を常に最新の状態に保つために再編集、再構成する。
- ④ MTM情報を効率良く検索して必要な部分を抽出する。
- ⑤ 利用者が持っているデータセット名リストをデータセットに作成する。（この情報は(1)、(2)で対象とするデータセットを選択するのに使用できる。）

⑥ TSS コマンドを実行する。

③, ④, ⑤の機能も実行できる。

ほとんどメニュー化されているので、操作方法は画面からの指示を見ながら進めて行くことができます。

詳細は、利用の手引「TSS コマンド編」を参照

## 7.4 新規登録 TSS コマンドプロシジャ (No. 25)

以下の TSS コマンドプロシジャが利用できます。

### (1) NUMPACLP

機能 : 名古屋大学大型計算機センターより移植した数値計算プログラムライブラリ NUMPAC のプログラム一覧表の印刷, 印刷出力先の標準値は D (デマンド, センター 1 階ライプリンター) です。D 以外を指定したい場合は MSGCLASS オペランドを用いて下さい。

使用例 : (i) NUMPACLP  
(ii) NUMPACLP MSGCLASS (1)

### (2) IR2

機能 : 赤外線スペクトルデータベース検索システム IR2 の起動

使用例 : IR2

使用方法の詳細は IR2 のガイドをご参照ください。

以上のコマンドは CHELP コマンドで説明を得ることができます。

## 7.5 IMS データベースの紹介 (No. 25)

現在分子研センターで一般公開されているデータベースは以下の 4 件がある。

- ① QCLDB (量子化学データベース)
- 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 (IRDC スペクトルデータベース)

このうち(3), (4)は今年度 4 月よりサービスを開始したもので, それらについて紹介する。

### (1) CHEMICS (有機化合物自動構造解析システム)

- ・作成者代表 : 佐々木慎一 (豊橋技科大)
- ・内容 : ある未知物の物性値 ( $^1\text{H-NMR}$ ,  $^{13}\text{C-NMR}$ , MS, IR など) を入力すれば, それらが部分構造に変換され, さらに得られた部分構造から全構造が創出される

プログラム・データベース・システム。

- ・使用方法 : マニュアルがセンターにある。TSS コマンド **▼ CHEMICS ▼** によって本システムが起動される。

## (2) IR2 (IRDC スペクトルデータベース)

- ・作成者代表 : 鈴木 功 (筑波大)
- ・内容 : IRDC (日本赤外データ委員会) から赤外スペクトルデータカード (IRDC カード) が刊行されているが、本システムはこれをコンピュータシステムとしてデータベース化したもので、現在 6200 種の化合物のデータが含まれている。
- ・使用方法 : ガイドを FLIB コマンドで検索できる。TSS コマンド **▼ IR2 ▼** によって本システムが起動される。

## 7.6 システム新機能紹介 (No. 26)

7 月下旬のオペレーティングシステム (VOS 3) のレベルアップ (08-02 から 08-03 へ) で新たに次の機能が追加または変更されます。

### (1) TSS コマンド

#### ① CONDENSE コマンド

CONDENSE コマンドは、区分データセットの各メンバーの内容の変更をくりかえすことで生じる無効領域を再使用できるようにするコマンドです。いままでの CONDENSE コマンドは、バックアップデータセット (処理が正常に終われば消去される) に保存データセットの CONDENSE . BACKUP1 が割り当てられていたので少し大きめのデータセットや短期のデータセットのコンデンスは利用者の保存データセットの上限を超えてしまうため使いにくい面がありました。今回、センターの標準値として **@@ BACKUP . CONDENSE** をバックアップデータセットとして設定しましたので、これからは CONDENSE コマンドを気軽に使うことができます。なお、複数の順データセットを 1 つの区分データセットにまとめると、ディスク 1 台に収容できるデータセットの個数を増すことができ、スペース効率もよくなりますので、区分データセットの活用をおすすめします。

CONDENSE コマンドの使い方

CONDENSE 区分データセット名 [, SAVE (@@ BACKUP . CONDENSE)]

#### ② RUN コマンド

RUN コマンドは、FORTRAN プログラムなどをコンパイルして実行させるコマンドです。従来 RUN コマンドを使うとオブジェクトモジュールが短期または保存データセットに作られ実行後も残っていましたが、今回センターの標準値として一時的データセットにオブジェクトモジュールが作られるようにしました。

なお、FORTRAN 77プログラムの実行に限ってはRUNコマンドよりGOFORT 77コマンド(省略形GOF7)をおすすめします。

## (2) FORTRAN 77での指数アンダーフローエラーの抑止

これまではFORTRANではプログラムの実行において

浮動小数点演算の結果の絶対値が $16^{-63}$ より小さくなると指数アンダーフロー割込が発生し、エラーメッセージが出力されました。指数アンダーフロー割込が頻繁に起きるとM-200Hの処理能力が大幅に低下します。今回よりFORTRAN 77では指数アンダーフロー割込の抑止をセンターの標準としますので、指数アンダーフローの発生を知りたい場合には、IMSUFL(サブ)ルーチンをコールし、指数アンダーフロー割込の解除を指定します。

IMSUFL(サブ)ルーチンの使い方

CALL IMSUFL(0)またはIMSUFL — アンダーフロー割込を抑止する。

CALL IMSUFL(1) — アンダーフロー割込を抑止しない。

最適化および拡張FORTRANについては従来どおり指数アンダーフロー割込の抑止はしません  
が、IMSUFL(サブ)ルーチンを用いて抑止ができるようになります。

## 7.7 システム新機能(No.27)

### (1) 新しいリンケージエディタ/ローダについて

従来のリンケージエディタ/ローダと比較して、より高速で性能を向上させた新しいリンケージエディタ/ローダが使用可能になりました。従来のリンケージエディタ/ローダもそのまま残しますので、利用者が必要な場合に新しいリンケージエディタ/ローダを選択して使用することになります。新しいローダの場合にローダ自身で96KBのメモリー(従来のローダより48KB増加)を占有しますので、指定してあるリージョンいっぱいプログラムで使っている場合にはJOB文及びEXEC文でリージョンの大きさを変更する必要があります。

バッチジョブでの使用方法

```
//AB1CD2X3 JOB PSWD, CLASS=A
```

```
//JOB LIB DD DSN=SYS1.XLINKLIB, DISP=SHR
```

```
//EXEC FORT7CG
```

```
}
```

① JCLを展開形で書いている場合に指定するリンケージエディタ/ローダのプログラム名称  
リンケージエディタ(LNKEDT-XLNKEDT)、ローダ(LOADER-XLOADER)

② TSSでの使用方法

```
LIB ▼ SYS1. XLINKLIB ▼ (新しいリンケージエディタ/ローダを使えるようにする)
```

```
}
```

```
RUN A.FORT FORT77 又は GOFORT77 A
```

```
}
```

```
LIB (元のリンケージエディタ/ローダを使えるようにする)
```

- (2) コマンドプロシジャの中でのXコマンドのサポートについて

サブコマンドのモードで、コマンドを実行するためにXコマンドがありますが、コマンドプロシジャの中でもXコマンドが使えるようになりました。

- (3) SOMでのジョブ取り出しの表示選択化について

SOMにSELECT (S) サブコマンドを追加しました。SELECTサブコマンドは下図のように画面にジョブ名リストを表示させ、その中から取り出したいジョブを番号で選ぶことができ、ジョブ名サブコマンドのようにジョブ名、ジョブ通し番号を入力しなくてもよくなっています。

(同一ジョブ名がない場合はジョブ名サブコマンドの方が早く取り出すことができます)

SOM

S/S @2SYSOUT (データセット名を省略すると@@SYSOUTが仮定される)

```
1 JOB AB1CD2X3 (J123456) IN OUTPUT QUEUE
```

```
2 JOB AB1CD2X4 (J234567) IN OUTPUT QUEUE
```

```
3 JOB AB1CD2X4 (J345678) IN OUTPUT QUEUE
```

```
SELECT JOB?
```

2

```
JOB:AB1CD2X4 (J234567) SELECTED
```

```
|
```

```
完了情報の表示
```

```
|
```

S/

この機能は利用者がコマンドプロファイルのデータセットを持っていないと使うことができません。コマンドプロファイルのデータセット (SYSPROF) はReady モードでSYSPROF1のコマンドを入力することにより作られ、次のTSSセッションから有効となります。

- (4) SOEDITの機能追加について

SOEDIT (スプール上の出力結果の検索・編集を行うコマンド) はすべての端末で使用可能になっていますが、操作の能率を上げるために次の3つのサブコマンドが追加されました。

DJ : ジョブ選択画面で指定した(範囲の)ジョブを削除する。

(例) DJ 1 □ 5

ジョブ選択画面に表示されているジョブの1～5番目までのジョブを削除する。

DD : データセット選択画面で指定した(範囲)のデータセットを削除する。

(例) DD 1 □ 3

データセット選択画面に表示されているデータセットの1～3番目までのデータセットを削除する。

データセット 1 - JCLリスト

データセット 2 - ジョブ・ジョブステップ情報・システムメッセージ

データセット 3 - コンパイルリスト

データセット 4 - 実行結果

EE : SOEDITを終了し、READYモードに戻る

#### (5) ジョブの実行順序についての注意

バッチジョブの処理において、ジョブ名が同じ場合通常投入した順に実行されますが、次のような場合に順序が入れかわります。

ジョブの投入

Aジョブ(1), Cジョブ(1), Cジョブ(2), Aジョブ(2)

実行順序

Aジョブ(1), Aジョブ(2), Cジョブ(1), Cジョブ(2), 最後に投入したAジョブ(2)がCジョブ(1)より先に実行されるのはAジョブの方がCジョブよりジョブの取り出しのプライオリティが高いためです。ジョブの取り出しのプライオリティは次のようになっています。

A>B>C>D>E (アイドルプロジェクトはA>I>J)

## 7.8 分子研プログラムライブラリの利用にあたっての注意 (No. 27)

### (1) 名 称

今後、分子科学研究所電子計算機センター所有のプログラムライブラリを分子研プログラム・ライブラリと総称します。国内の研究者等によって開発あるいは提供されたプログラム及び海外のプログラムを移植したもの(QCPEとNUMPACを除く)を分子科学プログラムパッケージと称することにします。現在、分子研プログラム・ライブラリは分子科学プログラムパッケージ、QCPEプログラム及びNUMPACパッケージから構成されることとなります。

### (2) 利用における遵守義務

分子研ライブラリプログラムの利用者は以下の事項を守って下さい。これはソフトウェア作成者・

提供者の権利を守ることを目的としています。

- ① 分子研プログラムライブラリの利用は、原則として、分子研電子計算機センター（以後『分子研センター』と略す）の利用有資格者に限る。従ってプログラムライブラリを第三者に利用させることは禁止する。
- ② プログラムライブラリを分子研センター以外の場所で利用するのは、たとえば大学附属の計算機センターで、学術研究を目的として、分子研センターのユーザーが個人的に利用する場合に限る。  
ソースプログラムを公開しているプログラムといえども、これ以外の目的で、プログラムを分子研センター以外の場所へ持ち出してはならない。
- ③ 引用義務のあるライブラリプログラムに対しては、そのプログラムを利用して得られた成果を発表する際は、必ずプログラム名を記す。
- ④ ライブラリプログラム中に誤りを発見した場合は分子研センターへ報告する。
- ⑤ ライブラリプログラムを利用した結果については利用者が責任を持つ、分子研センター及びプログラム作成者・提供者は責任を負わない。

## 7.9 電子計算機センター運営委員会議事報告（No.28）

第5回運営委員会が昭和58年8月17日（水）に開かれました。この席での報告、議事内容、決定事項のうち利用者に関わりの深い項目についてお知らせします。

- ① 計算機使用電力料が昭和56年度より恒常的に900万円程度赤字となっているため、対策を検討することになった。ユーザ負担金収集についても実状を調査することとなった。
- ② 昭和58年度の計算機利用時間割当では、8月16日現在でプロジェクト数187件（531名）、CPU時間で申請10,546時間のうち8,499時間を割り当て済みで前年度比約20%増である。
- ③ ソフトウェア保護のため、ライブラリ管理システムを機能拡張して、5段階の公開レベルを設ける。新システムの特徴はソースコードの暗号化により見ることはできるが、コピーはできないというLOOK属性を活用することにある。
- ④ データベースの開発計画について、量子化学文献データベース（QCLDB）、カーネギーメロン量子化学アーカイブ（CMQCA）、有機化合物自動構造解析システム（CHEMICS）、赤外線スペクトルデータベース（IRDC）の4件のデータベースがすでに登録公開されているが、今年度はQCLDB、CHEMICS、IRDCは引き続きデータの追加登録を行う予定である。また新規データベースとしては種々の候補の中から最も実用的と考えられるケモグラム（STERIC等）を対象としてその導入、サービスの可否について検討中である。
- ⑤ スーパーコンピュータ導入に向けての昭和59年度概算要求の詳細と導入のスケジュール概要が提示、討論された。

- ⑥ 遠隔地からのセンター利用について利用者負担の少ないDDXパケット網のサポートを検討していくことになった。
- ⑦ 昭和58年度後期計算機利用申請の審査については電力料金とのからみで、昨年度CPU時間使用実績の10%増で見積ることになった。

## 7.10 ライブラリ管理システムのレベルアップについて (No. 28)

ソフトウェアの保護を主要な目的として、昭和59年初めよりライブラリ管理システムをレベルアップします。

これに伴いライブラリ関連のデータセットは現行のSYS1よりSYS2に変更します。従ってライブラリ実行用のJCL, コマンド等をプライベートに持っておられるユーザは、データセット名を直していただく必要が生じますのでよろしくお願いします。

ソースプログラムの公開に関するレベルは現在、「公開」か「非公開」かの二者択一となっています。新システムでは下記の表のように、これを5段階とし、よりきめの細かいソースプログラムの管理を可能とします。

公開レベル	閲 覧	複 写	備 考
1	可能	可能	従来の「公開」と同じ
2	検索コマンドのみ可能	認可時のみ可能	
3	同上	不可	
4	不可	認可時のみ可能	
5	不可	不可	従来の「非公開」と同じ

上記公開レベル2及び3のソースプログラムの検索はライブラリ管理システムに新しく設ける特定のコマンドを使用するときのみ可能とします。

また、上記公開レベル2及び4のソースの複写についてはユーザから複写の申請があれば、センターが認可し、ユーザデータセットに複写します。同時にユーザ名、日付、プログラム名等の情報を記録に残します。

これにより、センターの管理の及ばないところでソースが無断に複写されるのを防止します。新しい公開レベルの再指定については、プログラム登録者の御意見を反映させて行う方針です。

## 7.11 昭和59年度利用申請の審査結果について (No. 30)

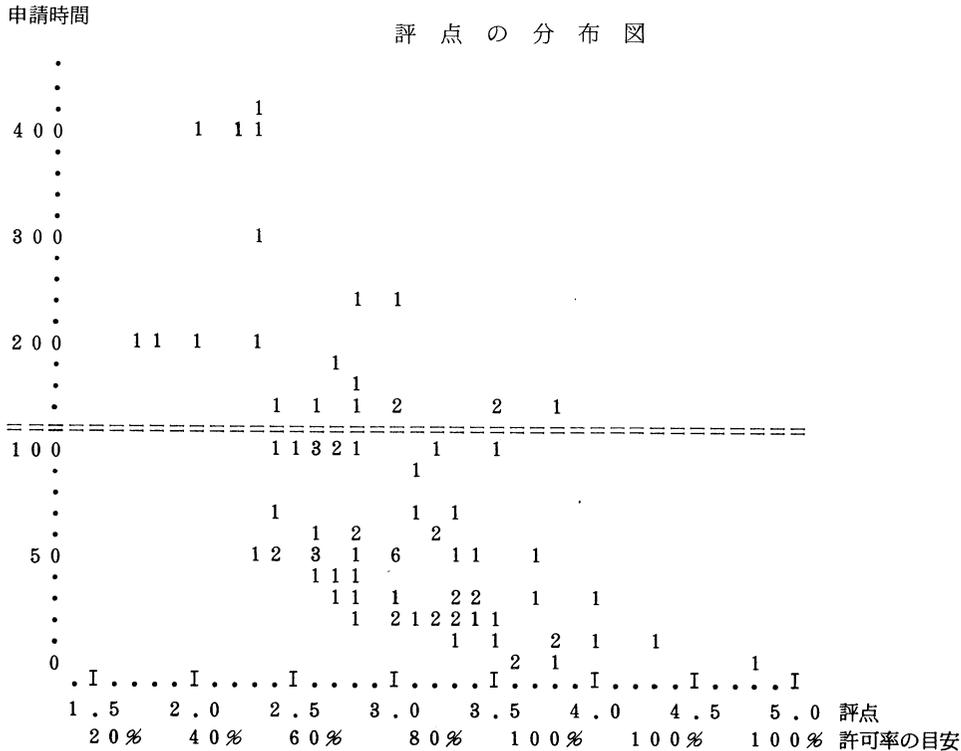
第6回電子計算機センター運営委員会における審査の結果、各プロジェクトの評価及び許可時間が決りました。各プロジェクトへの通知は8月下旬に郵送されます。評点は運営委員の個別の採点(0

～5点)の平均値に基づいています。許可率は、各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ます。許可時間は申請時間に許可率をかけたものです。

今年度の平均許可率は62%になりました。58年度の71%、57年度の81%に比べて低下しています。これは4月から利用申請が前年度に比べ14%増加したにもかかわらず、システムの変更がなく、電力料金(現在年間約4800万円で文部省から出る光熱水料と比べて約1000万円の赤字になっている)の問題で配分可能なCPU時間が前年度並に押さえられたことによります。

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ます。また評価には申請時間が研究内容や共同研究者数に対して適切かどうかの判断ももちろん含まれます。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するよう努めてください。

各プロジェクトの評価が他のプロジェクトと比べてどのような位置にあるかを示す評点の分布図を添付しました。図に見られるように評点は1.78から4.88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28%から100%にわたっています。



## 7.12 電子計算機センター運営委員会議事報告 (No. 30)

第6回運営委員会が昭和59年2月20日(月)に開かれました。この席での報告、議事内容、決定事項のうち利用者に関わりのある事項を中心にお知らせします。

- (1) 昭和58年度概算要求を行っていたスーパーコンピュータ導入計画は認められなかった旨報告があった。

- (2) 計算機稼動および利用状況報告

M-200H×2システムの稼動状況・障害状況、ジョブ件数・CPU時間、分野区分別使用状況、電話回線によるTSS利用状況、端末設置状況が報告された。電話回線については1200BPSの利用率が圧倒的に高く1ヶ月平均1500件であるが現在の5回線で今の所充分であろうとの判断がなされた。また電力使用については、昭和58年度は前年度とほぼ同じ消費量に抑えられそうである。

- (3) 計算機時間配当、追加状況報告

昭和58年度の計算機利用割当て状況が資料に基いて報告された。2月16日現在でプロジェクト数223件(602名)、CPU時間は申請13,180時間、許可10,319時間となっている。続いて前回委員会後の申請および追加申請の書面による評価およびそれに基づく許可状況が資料に基いて報告され討議の後了承された。特に分子科学あるいはその関連分野に入るかということで分野の面で疑問のあった申請1件に関しては可3名、否7名の結果となって申請不承認の通知を出したが、この件についても了承された。

また前回警告文を出すことになっていたプロジェクトに対する個別の警告文面が示された。

これら警告文に対する回答が1件あり各委員に回覧された。

- (4) 昭和58年度校費の使途報告
- (5) 昭和58年度施設利用旅費割当状況報告
- (6) 昭和58年度ライブラリ開発状況報告
- (7) ライブラリ管理システムの機能拡張報告

ライブラリプログラムの権利保護のため行ったライブラリ管理システムの機能拡張の概要が資料に基いて説明された。また本システムの実施に当りプログラムの公開レベルの提供者による再指定が行われており、その詳細が一覧表として示された。

- (8) データベース開発状況報告

QCLDB(量子化学文献データベース)、CMQCA(カーネギーメロン量子化学アーカイブ)、CHEMICS(有機化合物自動構造解析システム)、IR2(赤外線スペクトルデータベース)、STERIC(ケモグラム)の5件のデータベースについて開発、公開状況が報告された。

- (9) 昭和58年度分子研プログラムライブラリ開発計画およびセンター補佐謝金割当状況報告

分子研プログラムライブラリの開発状況（計13件）と個々の旅費，謝金の割当状況が資料に基いて報告された。

(10) スーパーコンピュータの導入について

スーパーコンピュータの導入計画についての経過報告，次期システム検討委員会の設立と活動状況に関する報告がなされた。次期システム検討委員会は運営委員会の下部組織として昨年9月教授会議の承認を得て発足した。委員は大野，岩田，正島，柏木，諸熊の5名である。検討委員会の目的は次期システムに対する資料収集と提案作成要領の作成と提案の評価の作業であり，その結果は運営委員会で審議される。

検討委員会はこれまでベンチマークテストの実施結果，独自の収集データ，提案作成要領の作成を行った。

センター側より来年度も引き続き概算要求を行いスーパーコンピュータの導入の努力を続けたいとの意志表示がなされ了承された。

続いてスーパーコンピュータの性能の調査結果についての報告がなされた。

(11) 昭和59年度予算について

(12) 昭和59年度センター運用方針について

昭和59年度は大規模なシステム変更はなく，利用者の使い勝手の向上と電力消費量の低減化を促進することを目標とする旨が述べられた。具体的な実施予定事項として新型CCPと関連通信ソフトウェアの導入によるDDXパケット網経由のTSSサポート（電話網との網間接続を含む）がある。

(13) 昭和59年度利用申請審査について

昭和59年度前期のCPU時間配分案が資料に基いて提案，議論された。4月分からの利用申請は10,961時間で前年同期比で14%増であった。光熱水料の制限をふまえて本年度の配当可能CPU時間を設定することにより，平均許可率は57年度は81%，58年度71%であったが，59年度に関しては62.5%～65%の間とすることでセンター側に一任された。平均許可率が年々低くなっていることに対する懸念が委員から表明された。

続いて利用申請に対して委員によって予め評価採点された結果をまとめた原案をもとに個別の申請について議論が交わされた。この結果，課題研究1件，協力研究14件は評価通り行うことで了承された。次に施設利用74件については，特に委員の評価点数の開きが大きい（4点以上）ものや全体的に低い平均点数（2点以下）となったプロジェクトに対して入念に検証が行われた。この結果評点は各委員の採点通り承認された。また申請の仕方に問題のあるものがいくつか含まれているため，今後申請者に審査の実態を知ってもらうために次の2点を実施することになった。

① 評価のされ方，審査の方法などについての一般的な現状を速報などの広報を通じて利用者に公表する。

- ② 各プロジェクトごとに許可通知に添付して、評価内容、平均点数全体での位置付などを送付する。また分子科学か否かの境界領域の申請が問題となった。従来は境界領域をできるだけ広く解釈してきたが、平均許可率が低下している現状ではある程度の見直しもやむを得ないと了解が得られた。今回は4プロジェクトが問題ありとされ、警告文を発送することになった。

### 7.13 ライブラリプログラムの開発公募について (No.30)

分子科学・基礎生物学及び生理学研究のために重要で汎用性の高いライブラリプログラムの公募を行います。センターが採択したプログラムの整備または開発をされる方に対してある程度の謝金、旅費、CPU時間を配分します。単独では開発できないが協力者がいれば共同開発する意志のある方、ご自分で開発する意志はないが有用なプログラムについて情報もしくは希望を持っている方もご遠慮なくお知らせください。

今年度もデータベースのデータチェックと管理、アレイプロセッサのためのアルゴリズムの開発についてセンターを援助してくださる人を求めています。応募または情報提供される方は、下記の事項を記入して郵送して下さい。

- ① 所属、身分、氏名、連絡先、電話番号
- ② 整備、開発、情報提供の別
- ③ プログラム、機能、規模、使用言語、機種など
- ④ プログラムの作成者、管理者など
- ⑤ 謝金、旅費、CPU時間の希望
- ⑥ その他ご希望

あて先 ☎ 444

愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38番地

分子科学研究所電子計算機センター

### 7.14 DDXパケット交換網、網間接続サービスによるTSS利用の見通し (No.31)

高信頼、低価格利用を目的としてDDXパケット交換網のサービスが開始されて以来久しいが、種々の事情から必ずしも広く普及しているとは言えない。しかし、今年5～6月頃には新たに既存の電話公衆網とDDX網との網間接続サービスが開始される予定であり、利用者にとってはより使い易い環境が提供されることとなります。しかし、DDX網でTSSサービスを行うにはセンター側に新たなハードウェアとソフトウェアが必要であり、現在秋(10月)頃サービス開始を目標に準備を進めていますのでもうしばらくお待ちください。

利用者からみた上記サービスの利点、必要となる準備等について簡単に説明します。詳細はセンタ

一侧のハードウェアとソフトウェアがそろってサービスが間近になった時点で再度お知らせします。

### (1) 特 徴

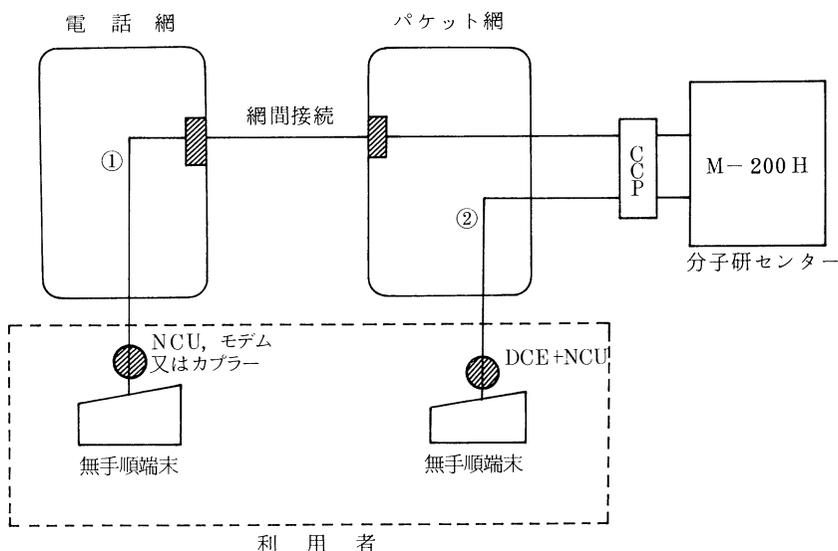
- ① 従来の電話公衆網に比べて回線品質が格段によく、信頼性が高い。
- ② 料金体系は従量制となっているため、原則として接続時間には関係がなく、やりとりしたデータ量に比例して課金される。

ただし、網間接続利用の場合には網間接続料として3分ごとに20円の課金が付加される。

- ③ 従来の電話のように距離依存性がほとんどなく、東京でも北海道でも、九州でも全国からほとんど同じ料金で利用できる。

### (2) 利用形態

DDXパケット網を利用するには、本来は専用のパケット端末が必要であるが、当センターでは従来からよく使用されている無手順端末でもそのままDDXパケット網および網間接続で利用できる方法をとる。また回線スピードは、従来の電話網と同じく300BPSと1200BPSとする。



パケット網の利用形態には、上図のように二通りの方法がある。

- ① 網間接続を使って既存の電話網経由で利用する。
- ② パケット網に直接加入して利用する。

### (3) 利用者の準備

(2)項の①、②の分類に従って利用者が準備する必要のある事柄について述べる。

- ① 網間接続で利用する場合

(i) 無手順端末装置

(ii) 音響カプラーまたはNCU（網制御装置）＋モデム

300 BPSでは従来電話網で使われていた音響カプラーの多くがそのまま使用できる。しかし、1200 BPS用に使われていたカプラー（VADIC 3412J）はここでは使えない。このため、新たにNCU＋モデム（CCITT V.22準拠）を購入設置する必要がある。価格は18万円前後で市販されているようである。

(iii) 会社への申請

既設黒電話のある人は網間接続利用申請を会社に提出するだけでよい。手数料は800円程度で約3週間程度で許可が降りる見込みである。

② パケット網直接加入で利用の場合

(i) 無手順端末装置

(ii) DCE（回線終端装置）とNCU（網制御装置）

これらは(iii)の会社への申請によって設置あるいは借用できる。NCUの借料は7000<sup>円</sup>/月で、初期の工事費は12,000円である。

(iii) 会社への申請

パケット交換サービス加入申込書（NPT用<sup>\*</sup>）に必要事項を記入、および必要書類を添付して会社に提出する。記入要領等は会社に用意されている。特にPAD（パケット組立分解機能）を必要とする旨を明記しておくこと。許可が降りるまでの日数は地域によって格差はあるが、3ヶ月程度はかかりそうである。

\* NPTとは非パケット端末の意味

(4) 費用

① 網間接続の場合（既設黒電話を使用）

(i) 初期費用

- ・ 800円（申請手数料）
- ・ NCU、モデム購入設置料（300 BPSでカプラーが使える場合は不要）

(ii) 毎月の費用

- ・ 電話基本料
- ・ 市内通話料＋パケット交換網通信料＋網間接続料（3分ごとに20円）

パケット交換通信料は②パケット網直接加入の通信料に同じ。

② パケット網直接加入の場合

	300BPS	1200BPS
加入料	300 円	
設備料	110,000 円	140,000 円
基本料 / 月	16,000 円	22,000 円
通信料 (128 バイトごとに)	~100 km	0.4 円
	~500 km	0.5 円
	500 km以上	0.6 円

} 初期費用

NCUの借料は別途 7,000円/月で初期の工事費は12,000円

(5) 網間接続のサービス区域と今後の予定

前項の①, ②のどちらの利用形態にしても利用者は自分の地域にパケット交換網が来ているのか、また網間接続のサービス区域に入っているのかどうかを確認しなければならない。昭和59年度中に網間接続サービスが開始されるのは以下の21区域であるが、今後一年間でその数は286区域にまで増加する予定である。

札幌, 仙台, 東京, 横浜, 日吉, 川崎, 登戸, 千葉, 新潟, 金沢, 名古屋, 静岡, 大阪, 豊中, 千里, 京都, 神戸, 広島, 松山, 福岡, 北九州

## 7.15 FORTRANプログラムでの効率的なファイル入出力の方法について (No. 31)

大容量のデータファイル(中間ファイルを含む)の入出力を行う場合、FORTRANのプログラムでは書式なしのREAD文, WRITEを用いますが、ファイルをブロッキングすることにより効率を大幅に向上させることができます。

ブロッキングをしない場合とした場合の比較を次に示します。1回のREAD/WRITE文で入出力するデータ量(レコードサイズ)に関係なく、ブロッキングを行いブロックサイズを1トラック内で最大にすることで効率が良くなります。

データ量 10MB

RECFM	BLKSIZE	READ/ WRITE	経過時間	CPU時間	I/O回数	占有スペース
VBS	19000 バイト	WRITE READ	18.2 秒 28.4 秒	0.35 秒 0.37 秒	525 526	525トラック
VS	800 バイト	WRITE READ	275.3 秒 257.6 秒	2.86 秒 2.69 秒	12630 12631	665トラック

この表は10MBのデータを読み書きするテストジョブを実行させて作成したものです。経過時間については十数倍もの差があります。又、CPU時間や占有スペースにも注目してください。

ブロッキングをするためにはDD文のDCBパラメータを次のように指定します。

DCB = (RECFM = VBS, BLKSIZE = 19000\*)

(\*ブロックサイズは19069まで指定できる)

レコードサイズは書式なし入出力では指定しないこと。レコードサイズはそれぞれのWRITE文での出力並びで可変となります。

最近、経過時間が十数時間にわたるI/O効率の悪いジョブをみかけます。FORTRANの書式なし入出力を行う場合、必ずRECFM = VBS, BLKSIZE = 19069をDD文のDCBパラメータで指定してください。

## 7.16 利用者用パーソナルコンピュータの増設について (No. 31)

日本電気の16ビットパーソナルコンピュータ(PC-9801)を端末室に設置します。(6月1日予定)

周辺装置は従来のPC-8801と共用しており大型コンピュータと1200BPSおよび9600BPSで接続されています。

フロッピーは8インチおよび5インチ(倍トラック型を除く)が使用できます。なお、パーソナルコンピュータを使用するためのソフトウェアは各利用者が忘れないよう持参してください。

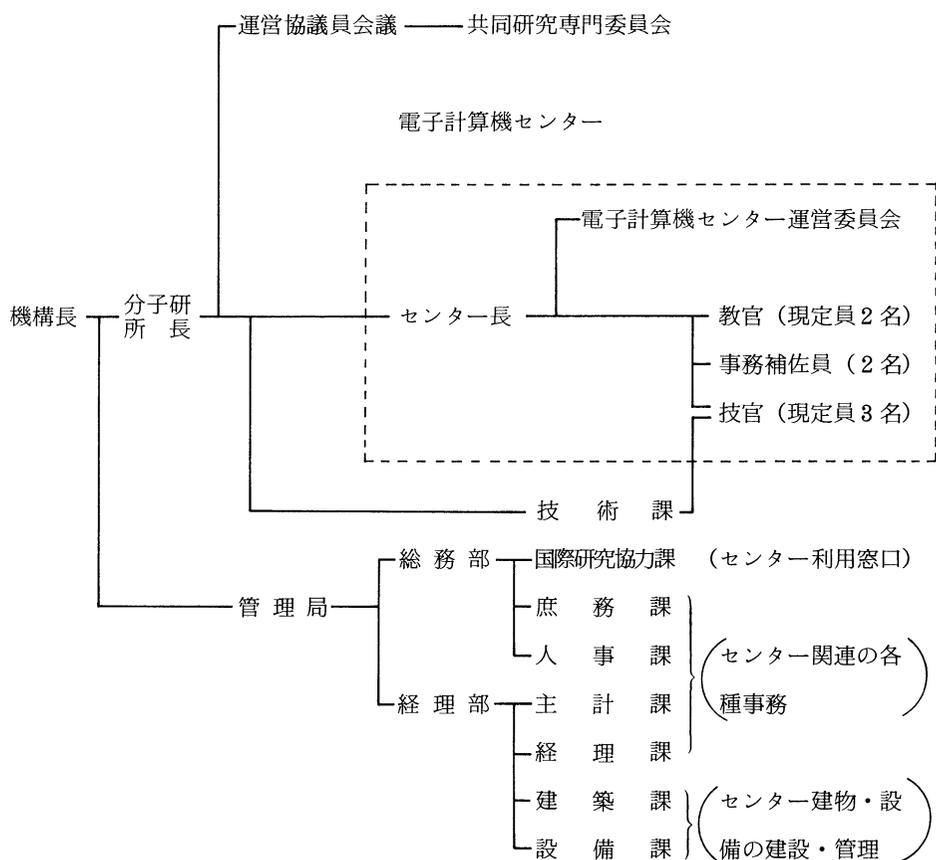
## 8. 資 料

### 8.1 センター関連組織

センター関連組織は図に示す通りである。

共同・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 8.2, 8.3, 8.4 を参照されたい。



## 8.2 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

分子研規則第4号

昭和56年4月14日制定

(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 センターに、センターの管理運営に関する重要事項を審議し、センター長に助言するため、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。

### 8.3 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

分子研規則第9号

昭和56年4月14日制定

(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1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。

1. センター長
  2. センターの助教授
  3. 分子科学研究所の教授又は助教授2名
  4. 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
  5. 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 前条第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、委員の互選による。

- 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、委員の三分の二以上の出席がなければ、議事を開き、議決することができない。

(委員以外の者の出席)

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

(庶務)

第7条 運営委員会の庶務は、総務部国際研究協力課において処理する。

附 則

この規則は、昭和56年4月14日から施行する。

#### 8.4 電子計算機センター運営委員会委員

(昭和58～59年度)

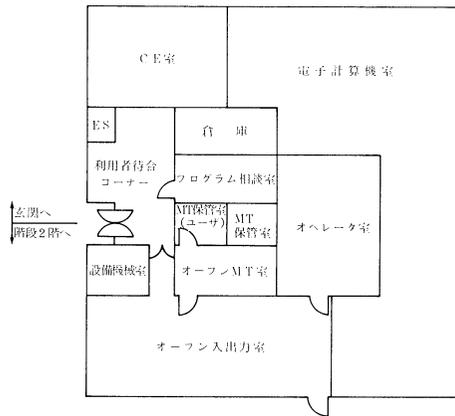
諸熊奎治	分子研教授, センター長	センター委員
柏木浩	分子研電子計算機センター助教授	〃
大野公男	北大理教授, 分子研客員教授	分子研所内委員
正畠宏祐	分子研助教授	〃
土方克法	電通大教授	分子研所外委員
細矢治夫	お茶大理助教授	〃
岩田末広	慶大理工助教授	〃
平尾公彦	名大教養講師	〃
亘弘	生理研教授	生理研委員
中研一	基生研教授	基生研委員

#### 8.5 電子計算機センター職員(昭和59年6月現在)

諸熊奎治	センター長(併任)
柏木浩	助教授
長嶋雲兵	助手(昭和58年9月着任)
伊奈諭	技官(係長)
西本史雄	技官
山本茂義	技官
中根三恵	事務補佐員(昭和59年3月退職)
中島裕紀	事務補佐員
加藤景子	事務補佐員(昭和59年4月着任)

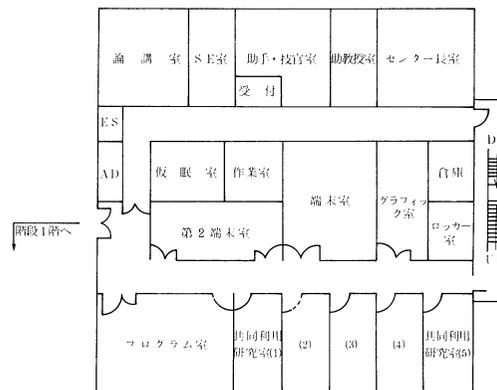
## 8.6 建 物 図

### 1 階



- (1) 利用者待合コーナー  
計算結果の出力待ちなどのためのコーナー
- (2) プログラム相談室  
プログラムとシステムに関する相談指導を行う。
- (3) オープン入出力室  
カードの入出力，ラインプリンタ出力，XYプロッタ出力，ジョブ状態表示のためのオープン利用室。
- (4) オープンM T室  
オープンM Tシステムの利用を行う。
- (5) ユーザ用M T保管室  
ユーザ用M Tを置くが，センターは保管の責任を負わない。

### 2 階



## 8.7 応用プログラム相談員一覧

齋藤 稔	名大理, 分子研受託大学院生	昭和58年4月～昭和59年3月
神谷 健秀	東大工, 分子研受託大学院生	〃
酒井 章吾	関西大工, 研究生	〃

## 8.8 端末設置状況(昭和59年5月現在)

### (1) RJEステーション

(分子研) 所内	実験棟	HT 540/30
	研究棟	〃
生理学研究所		HITAC M-150
		HITAC 20
機構総合図書館		HITAC L-330

### (2) 電話回線

300 ボー	2 回線	設置端末数	67 回線
1200 ボー	5 回線	〃	27 回線

### (3) 構内回線(専用線)……………ポートセレクター経由

1200 ボー	59
---------	----

## 8.9 マニュアルの紹介と購入方法

よく利用されているマニュアルには以下のようなものがある。センターではプログラム室に常設しているが、個人で購入を希望するときの申し込み先は次の通り。

☎113 東京都文京区本郷7-3-1

東大構内財団法人 好仁会内

アカデミービジネスサービス株式会社 TEL 03-811-7786

FORTRAN77 関係	最適化 FORTRAN77 言語 ……………	8080-3-257
	〃 〃 使用の手引 ……………	8080-3-258
	最適化 FORTRAN77 端末使用の手引 ……………	8090-3-222
	〃 〃 ソース解析機能 ……………	8080-3-272
HQED	HQED 文法 ……………	8090-3-309
	〃 使用の手引(基礎編) ……………	8090-3-008
	〃 〃 (応用編) ……………	8090-3-009

	TSS入門 (HQED編) .....	8090-3-011
TSS	TSSコマンド .....	8090-3-120
	TSS操作 .....	8090-9-105
	TSSメッセージ .....	8090-9-106
	TSS解説 .....	8090-3-136
	TMP 4 .....	8090-3-148
	TSDUT .....	8090-3-313
	TSL OG .....	8090-3-135
データベース	ORION利用の手引 .....	8090-6-502
メッセージ	システムメッセージコード .....	8090-9-703
	サービスプログラムメッセージ .....	8080-9-301
MSL II	MSL II 機能編第1分冊 .....	8080-7-120
	"    "    第2分冊 .....	8080-7-121
	"    "    第3分冊 .....	8080-7-141
ジョブ管理	ジョブ制御言語 .....	8090-3-102
	ジョブ管理解説 .....	8090-3-101
	リンケージエディタ/ローダ .....	8080-3-301
	リンケージエディタ/ローダ LNK/LD2 .....	8090-3-317
データ管理	データ管理解説 .....	8080-3-105
ユーティリティ	ユーティリティ第2分冊 (データセットユーティリティ)	
	.....	8080-3-303
DESP	構造化プログラミング用画面エディタDESP操作...	8090-3-308
	"                    DESP .....	8090-3-307
	TSS入門 (DESP編) .....	8090-3-012
GPSL	汎用図形出力ルーチン集GPSL機能編	
	第1分冊 基本・機能ルーチン .....	8080-7-096
	第2分冊 幾何形状・製図ルーチン .....	8080-7-097
	第3分冊 ビジネスルーチン .....	8080-7-098
FORTRAN関係	FORTRAN言語 .....	8080-3-205
	最適化FORTRAN使用の手引 .....	8080-3-208
	"    "    端末使用の手引 .....	8090-3-215
数学関数	数学関数 .....	8080-3-218

SAFE	SAFE使用の手引 .....	8090-3-127
RUNOFF	RUNOFF .....	8090-3-312
PREVIEW	PREVIEW .....	8080-7-130
LINEPLOT	LINEPLOT .....	8080-7-129