

I 部

目 次

寄 語	京都大学工学部助手 中辻 博	1
1. 新システムの目標性能達成をめざして		
	分子研電子計算機センター 柏木 浩	2
1.1 新システムの打上から一次軌道に乗せるまで		2
1.2 達成された目標 — メモリ空間の拡大		3
1.3 達成された目標 — 入出力の高速化		3
1.4 CPU速度の目標到達後のイメージ		5
2. 新システムの特徴と利用方法		9
2.1 新システムの特徴		9
2.2 周辺機器		11
2.3 ソフトウェア		13
2.4 M-680HとS-810/10の両プロセサをともに使用するジョブの使い方		24
2.5 新しいジョブスケジュールとその下での主記憶(基本領域, 拡張領域), 拡張記憶装置(ES)およびパラレルI/Oの使い方		25
2.6 その他の運用について		30
3. 一般報告		32
3.1 スーパーコンピュータ・ワークショップ		32
3.2 分子研ライブラリプログラムの収集と開発		33
3.3 データベース開発状況		42
3.4 プログラム相談		43
3.5 研究会・学会報告		43
4. 昭和60年度稼動状況および利用状況		44
4.1 利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数		44
4.2 システム稼動状況		44

4.3	CPU時間	45
4.4	ジョブ件数	46
5.	速報抜粋 — 速報 (No. 38 ~No. 42) —	47
6.	資料	54
6.1	センター関連組織	54
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	55
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	56
6.4	電子計算機センター運営委員会委員	57
6.5	電子計算機センター職員 (昭和61年6月現在)	57
6.6	建物図	58
6.7	応用プログラム相談員一覧	59
6.8	端末設置状況 (昭和61年5月現在)	59
6.9	マニュアルの紹介と購入方法	60

楽 士 と 楽 想

京都大学工学部助手 中 辻 博

ベートーベンの交響曲の中でどれが一番好きかと聞かれると、「第七番」と答える人が意外と多い。ベートーベン自身もこの作品には相当自信があったようで、「今まで書いたどの曲よりも秀れた作品」と言ったという。パウル・ベッカーは「第七は高い山へ登る努力の表現」と評しているが、その旋律の調べとリズムの躍動には、聞く者の心を昇華させ、将来の歓喜を予想させるものがある。分子科学研究所のセンターレポートも第七集を迎え、我が国の計算機科学も定着した観がある。将来の展開が楽しみである。

計算機を楽器にたとえたとすれば、我々は楽士であり、ここにお届けしたレポートはさしずめ器楽曲のコンサートと言ったところであろうか。ひと頃のように、トンチンカンな音を出して聴衆の失笑を買うといった場面もなくなり、いろいろな楽士のキャラクターを楽しむことができるようになった。優美な旋律を追い求める人、荘重な響きを奏でる人、豪快な鳴らしっぷりを楽しんでいる人、いや、鳴らし続けることに意味があるのだという人、さまざまである。このコンサートを聴いてまず感じることは、正直、わが楽団もやるじゃないかという誇りであろう。これだけのレベルの研究を、これだけまとまって毎年出すことのできる力というのは、たいしたものである。分子研の計算機センターへの国の投資額は、国の研究予算の中ではごく僅かなものでしかないけれど、それをこれだけのものに育てあげている力は、まことにたいしたものである。分子研の計算センターと全国の分子科学者とのこの共同事業に、私達は拍手を惜しまない。

人間というのは欲の張った動物で、欲を言えばきりがないが、このコンサートにも一つ物足りないところがある。それは“芸術性”とでも言おうか？ 確かにそつなく一応のレベルをこなすことが出来るようになり、それなりに楽しいコンサートだが、感動に乏しい。皆んなの使っている弦や弓に国産が殆んどないせいだろうか？ そればかりではなさそうである。最も大きな原因は、曲を演奏している楽士が、そもそも自分の曲に感動していないためであるらしい。どうも既製の練習曲まがいの曲を弾きなれてしまっているためであるらしい。楽士にとって楽想はいのちである。弾くまえに、よくよく想を練りたいものである。

最近の科学の戦線の拡大とともに、理論を必要とする分野は急激にひろがっている。計算機の飛躍的な進歩は、理論の可能性を無限におし上げようとしている。心に血を流して書かれた楽想は、すぐれた楽士の手と楽器をへて、聴く者を深い感動にみちびかずにはおかない。分子科学研究所にも、大規模なパイプオルガンが入るらしい。優れた楽想がそのパイプラインを突き抜けるときの重厚にして軽快な響きを楽しみにしているのは私一人ではあるまい。その楽の音がろうろうと響きわたるであろう次のセンターレポートが、今から待たれるゆえんである。

1. 新システムの目標性能達成をめざして

分子研電子計算機センター 柏木 浩

1.1 新システムの打上から一次軌道に乗せるまで

新システムの立上は人工衛星の打上に似ている。爆発して灰燼に帰すというようなことこそないが、短期間になるべく高い軌道に正確に乗せなければならない点では同じである。一昨年の中頃から忙殺されるような日々が続いたが、新システムもようやく軌道はずれたり速度が足らなかつたりという初期不良がなくなって一息ついたところである。

ここで、日夜を忘れてシステムの構築と運用に努めてくれた日立の皆さんとセンター職員に御苦労様を言わせていただきたい。一緒に軌道の上をふらふらと迷走したユーザの皆さんも御苦労様。物事の出来不出来については色々の評価もあるが、それは別にして、多勢の人達の一人一人の誠実な仕事ぶりでここまで来たことを強調したい。センター職員は調査、機種選定、システムの構築、運用に4～5年の年月をかけた。分子研担当のS Eの諸君は、12月から5月までの間、およそ4週間分の夜間作業を含め連日のハードワークを続けた。特に年末年始の休日は1月1日だけ、5月の連休はまったくなくなってしまった。日立の各工場のエンジニア、特にソフトウェア工場のエンジニアは、分子研からの要求に対応し、期日に間に合わせ、発生する障害を排除するために、これまた過大な労力を求められたにちがいない。ユーザの皆さんもフライトをあびる舞台には出ない熱心で誠実な努力のあることを知っておいていただきたい。

新システムの目標はコンピュータメーカー各社の現実のレベルに比べかなり高いところに置いた。そのためまだかなりの部分が目標性能に達していない。スカラ性能がM-200Hの5倍以上、ベクトル性能が1.5 GFLOPS以上のスーパーコンピュータ上位機種は来年の初夏に導入される。高性能で使い易いコンパイラやアナライザは今年の秋から来春になる。所内ネットワークが充実するのは今年の秋以降になる。マンマシンインターフェースについては目標性能（定量的には定義が難しいが）に近づくのは来年の後半になりそうである。処理速度で言えば、スーパーコンピュータ上位機種の導入をもって新システムの目標到達と見なせるだろう。初期目標にはほぼ到達したのはメモリ空間の拡大である。処理速度の面で、これまでにはほぼ目標値に到達しているのは入出力速度である。まずメモリ空間の拡大について紹介し、次に入出力の性能について実測データを示しながら、来年の初夏に全体の処理速度がどの程度のものになるか予測してみよう。

1.2 達成された目標 — メモリ空間の拡大

メモリ空間は表 1.1 に見られるように飛躍的に拡大した。主記憶はハードの総容量が増えただけでなく、31 ビッドアドレス化によって 16 MB を越える領域にデータを置きプログラムを走らせることができるようになった。また、ジョブスケジュールの新方式により実記憶をジョブに効果的に分配できるようになった。この結果、一つのジョブが利用できるメモリ空間の上限が 7 MB から 66 MB (S-810) へ拡大した。

表 1.1 旧システムから新システムへのメモリ空間の拡大

	旧システム	新システム
主記憶	総量	32 MB
	ジョブ最大	7 MB
拡張記憶	総量	0
	ジョブ最大	0
パラレル IO ディスク	総量	0
	ジョブ最大	0
通常 IO ディスク	総量	33 GB
	ジョブ最大	数 GB
光ディスク	総量	0
	ジョブ最大	0

メモリ空間の拡大は質的にも行われ、拡張記憶、パラレル IO ディスク、光ディスクなどが新たに設けられた。前の二つは次節でふれることにして、まったく新種のメモリである光ディスクについて簡単に紹介しよう。画期的な点はプロジェクトごとに 2.6 GB 分 (1 枚) を常時システム上に置けることである。これは磁気テープ約 20 本をいつもマウントしておくのに等しい。従って電話端末と組合わせて使えば、分子研へわざわざやってくる回数をずっと減らすことができるはずである。遠隔地ユーザのコンピュータ利用の形態を変えてしまうだろう。

各種のメモリ空間の拡大は、より高速な計算、より大規模な計算を実現するためのベースであり、ユーザのプログラミングの労力やユーザ自身の移動の時間を削減するだろう。

1.3 達成された目標 — 入出力の高速化

入出力 (IO) 高速化の目玉は拡張記憶 (ES) とパラレル IO (PIO) である。スーパーコンピュータ

タのトータルな目標速度はM-200 Hのおよそ50倍である。それを実現するための4本の柱がスカラプロセッサ、ベクトルプロセッサとここに挙げる二種類のIO装置である。

拡張記憶は主記憶と同じような半導体メモリであるが、ディスク同様の使い方をする。現在1GB実装され、一つのジョブで最大768MBまで利用することができる。ハードのIO速度は500MB/secであるが、入出力制御のCPU時間がかかるので表1.2のような性能になる。

表1.2 IO SPEED OF EXTENDED STORAGE (ES)
(23472 BYTE) × 10000 TIMES WRITE AND READ
SEQUENTIAL ACCESS ON S-810

	DISK (SEC)		ES (SEC)	
	CPU	E-TIME	CPU	E-TIME
	5.10	675.72	2.53	2.55
	5.10	737.66	2.53	2.55
	5.11	711.43	2.53	2.55
	5.14	1236.63	2.53	2.54
AVERAGE RATIO	5.11	840.36	2.53 2.0	2.55 329.6

これは23KBのレコードを入力出力合わせて2万回行うIOばかりのジョブのデータである。多重ジョブの環境下で同じジョブを4回走らせた。拡張記憶ではCPU時間、実行時間ともにほとんど変動がなく、184MB/secの性能が出ている。ディスクの場合にはIOの際にCPUを他のジョブに明け渡すが、拡張記憶ではそのようなことがないので、ディスクの330倍も実行時間が短い。単一のIOで比較すると拡張記憶はディスクに比べ88倍速いというデータが得られている。

拡張記憶はこのように高速でランダムアクセスも得意であるが、作業用に限られ今のところ768MBまでしか使えない。そこで容量が大きく保存もできるパラレルIOの機構を準備した。分子研のパラレルIOディスクセットは16本のチャンネルと40GBのディスクから構成されている。1個のデータセットを16本のチャンネルを用いて並行IOを行う他に、レコードの連続IOのため3倍高速になるコマンドチェーンの機能を持っている。従って、パラレルIOは48倍高速になるはずである。表1.3に示すように、5バッファで46倍という実測値が得られた。標準値のバッファ数2の場合には表1.2から判るように28倍になる。このような高性能、多容量のパラレルIOディスクセットは世界で唯一である。

表1.8 PARALLEL IO TEST ON S-810/10
(23476 BYTE)×1200 TIMES WRITE

E-TIME (SEC) MAGNIFICATION			
1 S-2 B	39.55	1	
1 P-2 B/C	12.20	3.24	1
1 P-5 B/C	12.27	3.22	1
16 P-2 B/C	1.41	27.97	8.63
16 P-5 B/C	0.86	46.07	14.30
1 S: SEQUENTIAL		2 B: 2 BUFFER	
1 P: 1 PARALLEL		5 B: 5 BUFFER	
16 P: 16 PARALLEL		/C: COMMAND CHAIN	

1.4 CPU速度の目標到達後のイメージ

それではこのような高速IOの効果は実際のプロダクションランではどのように現われるだろうか。Ab initio SCF MO計算のプログラムJAMOL3を用いた図1.1の鉄ポルフィンと鉄フタロシアニンの結果が表1.4である。紺屋の白袴とはよく言ったもので、自分のプログラムのことはいつも後まわしになり、ようやくIO回数の削減とパラレルIOへの適合化が終ったところで、ベクトル化はまだこれからである。表1.4の計算では直接アクセスファイルに拡張記憶を、順アクセスファイルにパラレルIOを割当て、なるべくすいている時に走らせた。両方ともほとんど一多重で走ったようである。特に鉄ポルフィンの場合にはCPU時間と実行時間の差がわずか一分である。このジョブのIO回数は約4万回で、普通のディスクによるIO時間は30分弱と推定されるから、新IOの効果は著しい。多重ジョブの環境下ではIOが速すぎてもったいないように思われる。CPU時間がずっと短くなった時に新IOはほんとうの効果を表わすはずである。

表1.4 分子軌道計算における拡張記憶とパラレルIOの効果。プログラムはJAMOL3, パラレルIOのバッファ数は2。鉄フタロシアニンの場合, 1個のファイルのみ通常のディスクを用いている。

<FE-PORPHINE>		184 CGTO 'S	
COMPUTER S-810	CPU (MIN) 30	E-TIME(MIN) 31	RATIO 1.0
DIRECT: ES, SEQUENTIAL: PIO			
<FE-PHTHALOCYANINE>		284 CGTO 'S	
COMPUTER S-810	CPU (MIN) 79	E-TIME(MIN) 90	RATIO 1.1
DIRECT: ES, SEQUENTIAL: PIO			

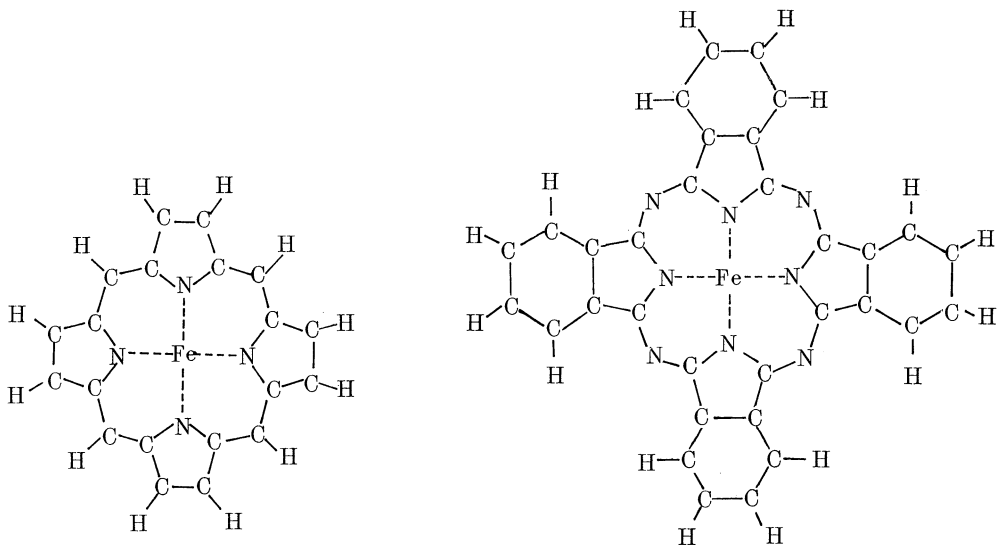


図 1.1 鉄ポルフィンと鉄タロシアニン

図 1.2 を見ていただきたい。表 1.4 の鉄ポルフィン計算の CPU 時間を過去から来年までプロットしたものである。実行時間はスケールが合わないので数値で記入してある。1987 年、すなわち来年になるとスーパーコンピュータ上位機種 S-XXX が入り、JAMOL 3 もたぶんベクトル化して JAMOL 4 になるだろう。労力のかげ方次第であるが、鉄ポルフィンの CPU 時間は 3 分位になるだろう。それに IO 時間 1 分を加えて 4 分というのが実行時間の予測である。さらに努力して CPU 時間が 1 分にでもなれば IO 時間の短かさがもっと生きてくる。鉄ポルフィンももはや小さな分子—これが新システムが目標性能に達したときのイメージである。

図 1.2 の 1975 年の北大での計算は鉄ポルフィンでなくコバルトポルフィンであるが、計算の規模はほとんど同じである。この時の実行時間すなわち計算を始めてから分子軌道を得るまでの時間が諸々の制約によりおよそ 2 年。1979 年に分子研センターを発足させた際に諸々の制約の大半を取除いた。1979 年から 1986 年までは皆さんの御存知の通りの推移である。プログラムについては、1975 年の JAMOL 2 から 1979 年の JAMOL 3 へは大幅に改善したが、その後は CPU 速度についてはプログラム上の大きな改善はない。図 1.2 に示されているように 1975 年から 1987 年は計算化学の激変の時代である。CPU 時間で 2 百分の 1、実行時間で 26 万分の 1、それでもなお計算化学はこれからもっと大きな変化に向おうとしているのである。

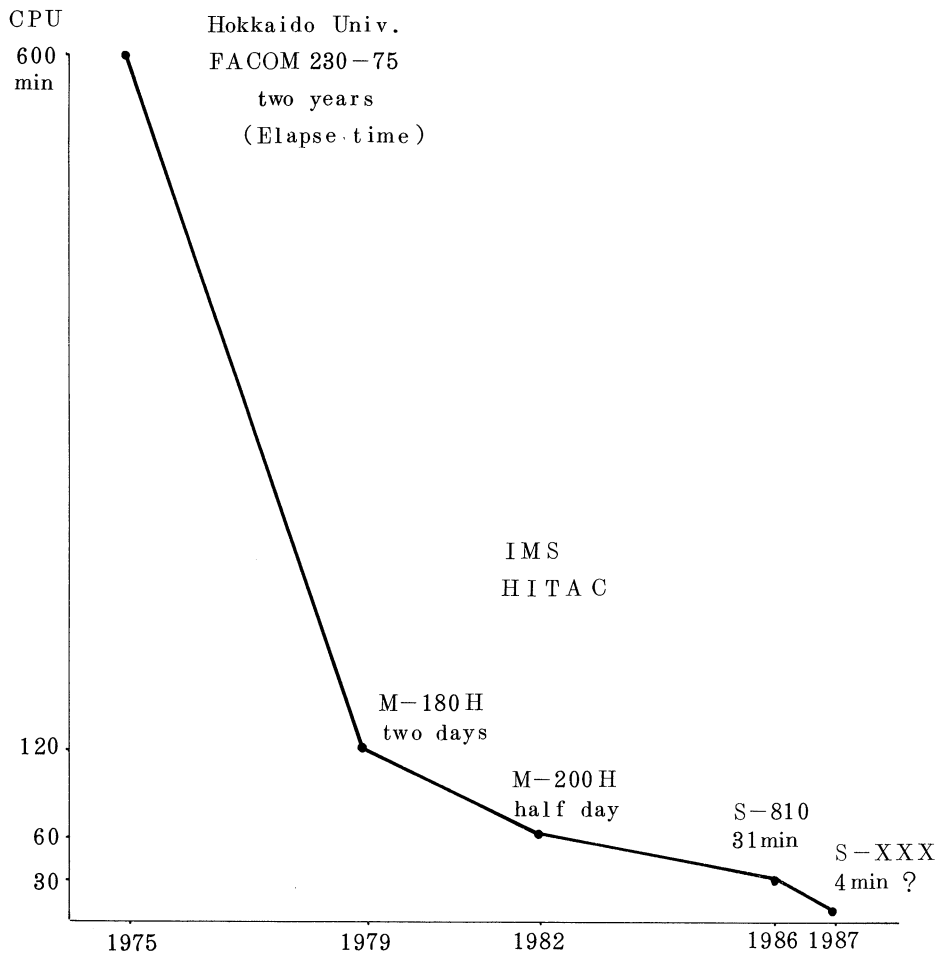


図 1.2 CPU時間と実行時間 (Elapse time) の短縮

JAMOLプログラムによる鉄ポルフィンの *ab initio* SCFMO計算。但し1975年の計算はコバルトポルフィン。計算時間の短縮はハードウェアの向上とプログラムの改善による。

恒例に従い最後にセンター発足以来の利用者数とCPU時間の推移を表1.5にして示した。図1.2と見比べると興味深い。

表 1.5 利用者数とCPU時間の推移

		53 年度	54 年度	55 年度	56 年度
計 算 機 シ ス テ ム 運 転 方 式		M-180 2 台 3 ヶ月 有 人	M-180 2 台 9 月から無 人	M-200H M-180 200H無 人,180有 人	M-200H,M-180 疎 結 合 無 人
利 用 者 数					
機 構 内 a		48	70	69	91
機 構 外		107	254	325	330
合 計		155	334	394	421
稼 動 時 間		1,087	6,071	6,553	6,721
利 C 用 U 申時 請間	(200H基準)				
	申 請	929	4,666	11,033	10,230
	許 可	816	3,171	7,427	8,306
申 請	485	2,253	4,583	5,929	
総 使 用 C P U 時 間 c		509	2,405	5,405	6,320
ジ ョ ブ 処 理 件 数 c		41,521	155,980	183,840	214,847
ライブラリプログラム新規登録数		0	20	43	20
データベース新規登録数		0	2	0	0
センター使用論文数 d		0	24	93	118

		57 年度	58 年度	59 年度	60 年度
計 算 機 シ ス テ ム 運 転 方 式		M-200H 2 台 疎 結 合 無 人	同 5 7 年度	同 5 7 年度	(~11月)同57年度 (1月~M-680H S-810/10)
利 用 者 数					
機 構 内 a		94	102	110	130
機 構 外		375	426	446	464
合 計		469	528	556	594
稼 動 時 間		6,305	6,170	6,316	6,016
利 C 用 U 申時 請間	(200H基準)				b
	申 請	11,938	13,053	14,799	15,536
	許 可	10,141	10,091	10,768	12,080
申 請	7,742	8,050	8,360	9,886	
総 使 用 C P U 時 間 c		8,205	8,489	8,508	12,770
ジ ョ ブ 処 理 件 数 c		239,771	236,519	226,727	274,431
ライブラリプログラム新規登録数		699	10	118	160
データベース新規登録数		3	3	0	1
センター使用論文数 d		190	185	202	206

a : 機構内利用者数にはアイドル課題のための重複を含まない。

b : 申請および使用の詳細については 4.1 項を参照

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

d : センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたもの。

2. 新システムの特徴と利用方法

新システムではハードウェア、ソフトウェア、運用面のすべてに亘って大幅な充実が行われた。

ここでは中でも特に利用者に関わりの深い項目をピックアップして紹介・説明する。

2.1 新システムの特徴

当センターのシステムは昭和61年1月より図2.1.1に示すようにHITAC M-680HとS-810/10との疎結合マルチプロセサ(LCMP)システムに置き替わっている。

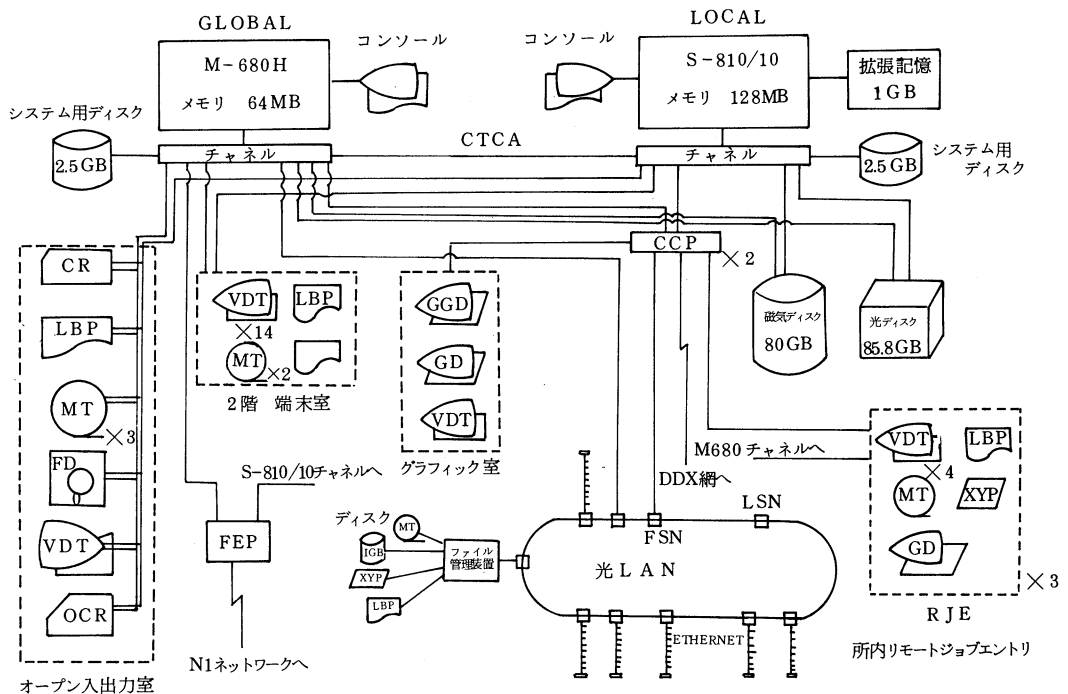


図 2.1.1 新システム 構成概念図

以下に本システムの特徴について述べる。

(1) 大きな主記憶容量

前システムM-200H×2の32MBに比べて合計192MBと6倍の主記憶容量を持っている。

M-680Hでは従来と同じ仮想記憶方式に加えて2GB(31ビットアドレッシング)の空間も扱えるよう

になる。また S-810/10はその高速性を生かすために実記憶方式で使用するようになるので 128 MBという大容量がついている。

(2) 拡張記憶 (S-810/10)

拡張記憶とはスーパーコンピュータの高速性を最大限に生かすために生み出された超高速の I/O を行うことのできる(ハード性能 500MB/S)補助記憶装置のことである。拡張記憶は作業用ファイルのために利用する。FORTRAN プログラムから READ, WRITE 文により利用できる。また、拡張記憶の確保は JCL あるいは OPEN 文にて行える。

入出力の実効性能は通常のディスク I/O に比較し約 80 倍であるが、多重ジョブの環境下でターンアラウンド時間が 300 分の 1 になったという例もある。

(3) 大きな磁気ディスク容量とパラレル I/O

磁気ディスクの合計容量は 85 GB であり前システムの 32 GB の約 2.5 倍になる。この内訳としてパラレル I/O 専用 40 GB, 一般入出力用 40 GB, システム 5 GB である。

パラレル I/O とは、CPU の高速性に比べてディスク I/O の低速性のネックを解消するために考案されたもので、1 データセットを複数のディスクに分散して並列に READ/WRITE を行う。このため入出力速度をディスクの分散台数(パラレル度)分に近い倍率まで上げることができる。さらに複数ブロックの先行入出力によって約 3 倍高速になる。新システムでは 16 のパラレル度なので、通常のディスク I/O に比べ最高 48 倍高速になる。テストプログラムの実行により 46 倍という値が実測されている。

パラレル I/O ディスクは作業用ファイル、短期保存ファイルとしての利用を考えている。

パラレル I/O の使用は JCL あるいは OPEN 文にて定義ができ、複数台のディスクに分散していても 1 個のファイルとして扱うことができる。

(4) 光ディスク

光ディスクは 1 枚に 2.6 GB もの情報を収容することのできる入出力媒体であり、現状のものは READ/WRITE はできるが、再書き込み(書き直し)はできない。当センターにはこの光ディスクを 32 枚、合計容量 83.2 GB をマウントできる光ディスクライブラリ装置が設置されている。光ディスクは 1 枚が 79,000 円で市販されている。光ディスクライブラリ装置は主に遠隔地ユーザにとって有用である。性能は平均アクセス時間 0.26 秒、最大転送速度 1.5 MB/S である。また、平均マウント時間は 9 秒である。

(5) ネットワーク

ネットワークについては大きく分けて次の 3 種類が利用できる。

① DDXパケット網 ② N1ネットワーク ③ 所内ネットワーク。特に①の DDXパケット網による TSSサービス（網間接続を含む）については遠隔地ユーザのために特に回線数、回線スピードなど今後大幅に充実していく考えである。②の N1ネットワークについては近い将来分子研の情報図書館と文献情報センターとの接続などを予定している。また、③の所内用ローカルエリアネットワーク（LAN）はループ内速度 32 MBPSの光ファイバケーブルを使った光 LANをメインとし、同軸ケーブルを使った ETHERNETをサブとして構成されている。光 LANと ETHERNETは 100KBPSのゲートウェイプロセッサ（GW）を介して接続される。

ETHERNET上には主に実験機器からのデータ収集のための端末が接続される。ホストコンピュータの M-680 Hとは 48KBPSの回線を利用してファイル転送などが行える。さらに 24時間の連続稼働のために光 LAN内に 1GBのディスク容量をもつファイル管理装置が設置されており、ここでは MT、レーザプリンタ、XYプロッタも利用できる。

ファイル管理装置とホストの M-680 Hコンピュータの間ではチャンネルインタフェースを介して高速ファイル転送が行える。

(6) TSS端末の性能向上とカット紙型レーザプリンタの分散配置

TSS端末はビットマップディスプレイとマルチウィンドを有する新端末が設置される予定である。（61年秋に導入の予定）。また新エディタとして画面エディタ ASPENが利用できる。

また小型のカット紙型レーザプリンタがセンター1・2階と RJEステーションに分散設置されているので図形を含む高品質の出力を容易に得ることができる。

2.2 周辺機器

(1) TSS 端末

- ① T560/20 タイプⅢ…………… 36台（ユーザオープン用は 14台）
- ② T560/20 MWS…………… 1台

両者とも漢字、図形、画像、カラーが扱え、フルスクリーンの新エディタ ASPEN、GKS準拠のグラフィックパッケージ KGRAF、BGRAFなどのソフトウェアが使用できる。

②の MWS（マルチワークステーション）には FAX、フロッピーディスク駆動装置（8インチ）が付いており画像データの入出力デバイスとしても用いることができる。

①の T560/20タイプⅢ端末は 61/11月にはカラービットマップディスプレイ付のニューワークステーション（2050）に置き替えられる予定である。

(2) レーザプリンタ

- いまままでのラインプリンタに替わってレーザープリンタには連続紙型（1台）とカット紙型（7台）が設置された。磁気カードによるデマンド方式をとる。
- A4連続用紙に出力する連続紙型レーザープリンタのメッセージクラスはD。比較的大量の出力を行うのに用いる。A4横のサイズの内紙を使用するので、縮小されて出力される。
- A4, B4, レターサイズなどのカット紙に出力するレーザープリンタのメッセージクラスはC。少量の出力および図形・画像（イメージ）の出力に用いる。A3横, A4縦横, B4縦横, レターなどのサイズがあり、ユーザが選択できる。
- コマンドのシスアウトクラスにD（連続紙）, またはC（カット紙）を指定するだけで出力することができる。ただし、バッチジョブから直接出力することは従来どおりできない。標準以外のサイズで出力するためには、LAM（レーザープリンタマネージャー）というソフトウェアが用意されている。

LAMでは

出力対象データセット

用紙サイズ

向き（縦, 横）

文字のサイズなど

を選択できるようになっている。

(3) 光ディスクライブラリ

利用申請が許可されている各プロジェクトは、50 MB（標準）分の光ディスクをいつでも使用することができる。これは共用光ディスクと呼ばれており、普通のディスクと同じように1つのボリュームに多数の利用者のファイルが混在している。また、希望すれば自分のプロジェクトだけで私有の1枚すべて（2.6 GB）を使用することができる。これは専用光ディスクと呼ばれており、大量のデータを扱うプロジェクトに許可される。光ディスクは1枚79,000円であり、ビットあたりのコストは磁気テープと大差がない。現在のところ光ディスクは書き直しができないが、大容量であることを考えると価値が大きい。

これらの光ディスクに対してプログラムやデータを読み書きするために光ディスク管理システム（ODM）が用意されており、操作についてはMTMとほぼ同じになっている。MTMと違うのは光ディスクのマウント/ディスクマウントが自動的に行われるために、遠隔地の端末からの使用ができることである。従来、ディスクデータセットのMTへのバックアップのため来所しておられた方もMTの代りに光ディスクを使えば、バックアップおよびリカバリのための来所の必要もなくなる。

(4) 高性能カラーグラフィックディスプレイ

高精細，多色のカラー画像を扱うことのできるタイプのグラフィックディスプレイとして，RAM TEK 9465がある。

インタフェースは高速とするためにチャンネルインタフェースとし，M-680H，S810/10の両方から接続利用できる。インタフェーススピードは約300KB/Sである。利用形態はTSS，バッチのどちらからでも使用できる。

以下にRAMTEK 9465の性能，オプションを示す。

- ・ディスプレイサイズ 20インチ
- ・分解能 1280×1024 インタレース方式
- ・色数 2^{15} 色 (R, G, B各32階調)
- ・付属機器 タブレット，トラックボール
- ・ソフトウェア FIPR (FORTRANコーラブル)

(運用) バッチジョブではGクラスでのみ利用可能とし，多重度は1である。

(5) 汎用グラフィックディスプレイ

蓄積型グラフィックディスプレイ (H-8844-19) レーザ方式ハードコピー付 4台
T560-20タイプⅢ ビデオライタ (HC) 付 3台

をそれぞれグラフィック用に設置した。

T560-20タイプⅢはカラーグラフィック機能付のTSS端末で，61/10月にはカラービットマップディスプレイ付のニューワークステーション (2050)に置き替えられる。2050は15インチCRTに，1120×750の分解能，16色(512色より)のカラー表示能力を有しているため，グラフィック端末としても十分機能する。

ソフトウェアはT560-20タイプⅢ，2050ともにGKS標準に準拠の新ソフトウェアKGRAFが利用でき，さらにグラフ作画専用のBGRAFも用意されている。H-8844-19は従来のGPSLによってそのまま利用できる。

2.3 ソフトウェア

2.3.1 FORTRAN と VECTIZER

昭和61年1月からのスーパーコンピュータ・システムの運用開始に伴い，新しいFORTRANを利用することになった。新しいFORTRANというのは従来のFORTRAN77コンパイラに31bitアドレッシングとパラレルI/Oの機能が追加されたもので，文法は従来のFORTRAN77コンパイラと

全く変わらない。昭和61年10月以降にFORTRANのレベルアップが予定されており、表のように昭和61年1月から9月までと10月以降でコンパイラが変わることになるので、別々に説明する。(ただし10月以降の変更期日については確定していない。)

VECTIZERと言うのは、ベクトル化コンパイラに種々の解析のためのツールが付加され、プログラムのベクトル化を支援するツールであるが、当初、運用される新しいFORTRANとベクトル化の機能について若干の違いがあるものが公開された。

FORTRANとVECTIZERの公開スケジュール

↔ は対応関係を示す

期 間	FORTRAN	VECTIZER
61年1～9月 (未確定)	FORT77/HAP (02-03)	VECTIZER (01-00)
		VECTIZER (01-00) 31ビット化されたもの
61年10月以降 (未確定)	FORT77/HAP (20-00)	VECTIZER (20-00) 31ビット化されたもの

(1) 昭和61年1月から9月まで

公開される新しいFORTRANは、FORT77/HAP (02-03) というもので、S-810/10とM-680 Hの両方に共通のコンパイラである。ただしS-810/10上で走らせるプログラムのコンパイルには、パラメータとしてHAPの指定が必要である。従来のFORTRAN77コンパイラ (OFORT77) と主に異なる所は、ベクトル化の機能があり、31bit アドレッシングとパラレルI/Oがサポートされることである。さらにスカラ最適化機能やベクトル化機能が強化されている。また、新FORTRANでは、大きさが16MBを越える大きなプログラムの場合、作業領域 (COMMON文で宣言して確保した領域) がJOB実行中に動的に確保される。そのためDATA文による初期値設定のあるCOMMON BLOCKを静的なものとする必要があるが、DCOMオプションを利用すればCOMMON BLOCK名を指定するだけで簡単に特定のCOMMON BLOCKを静的なものとしてすることができる。

MSL, MATRIX/HAP, GPSLは、31bit化されたものが当初より使用できる。またパラレルファイルを従来の順編成ファイルに変換するユーティリティや、31bitモードと24bitのモード変換のためのユーティリティ (これは、アセンブラやPL/I等で書かれたプログラムとFORTRANプログラムを混在して使用する場合に必要となる。) が公開される。PL/Iの31bit化は62年4月

の予定である。アセンブラの31bit化については、24bitアドレスを意識したもの、I/Oのあるものの以外については31bitモードで走らせる事ができる。

ベクトル化を支援するツールは、VECTIZER (01-00)が利用できる。

VECTIZER (01-00)は61年6月からは31ビットモードで利用できるようになり、大きなプログラムの解析ができるようになった。

(2) 昭和61年10月以降(期日未定)

10月頃FORTRANはレベルアップされてFORT 77/HAP (20-00)になる。S-810/10とM-680Hの両方に共通のコンパイラである。S-810/10で走らせるプログラムのコンパイルには、パラメータとしてHAPの指定が必要である。FORT77/HAP (02-03)に比べ、さらに次のような項目についてスカラ最適化機能やベクトル化機能が強化される。

- ① スカラ最適化機能；最適化対象変数の個数拡大
- ② 構造化プログラミング機能；DO構造，CASE構造の出力
：ソースリスト中にDO構造，CASE構造を図示する。
- ③ 日本語メッセージ出力機能；オプションで英語，日本語の切り替え可能
- ④ 文関数，ユーザ手続のインライン展開
- ⑤ TSSコマンド起動機能
：プログラム実行中にTSSコマンドが起動できる。
- ⑥ 引数の型，個数の個別チェック
- ⑦ メンバー名のワイルドカードサポート
：コンパイルのさいに*，?，%等を用いて代表名でメンバーを指定できる。
- ⑧ ベクトル化機能；ベクトル化対象領域の拡大，演算の並列度強化，診断メッセージの改善など
また，エディタのASPENとの連携が密になりエディタ中でコンパイル，リンク，実行，エラー個所のソース上での指摘，エラーメッセージの日本語表示，ソース修正といった一連の操作がすべてできるようになり，プログラムの編集作成が楽になる。FORT 77/HAP (02-03)によって作られたOBJECT MODULEは，このレベルアップされるFORT77/HAP (20-00)によって作られた新しいOBJECT MODULEと混在することができないので，全てのプログラムをもう一度コンパイルしなおす必要がある。

VECTIZERは，VECTIZER (01-00)の31bitモードサポート版と，VECTIZER (20-00)の2種類が公開される。

VECTIZER (01-00)が6月より31bitモードをサポートし，大きなプログラムの解析ができ

るようになっている。しかし、10月頃から公開のFORTRAN (FORT77/HAP (20-00))に対応したVECTIZER (20-00)が公開されるが、31bitモードを当面サポートしない。そのため、31bitアドレッシングを意識した大きな領域を使用するプログラムは、VECTIZER (01-00)にかけることしかできない。(ただし31bitモードでもオーバーレイのあるような、極めて大きなプログラムは、まだどちらのVECTIZERにもかけることができない。)VECTIZER (01-00)は10月頃からのFORT77/HAP (20-00)コンパイラに比べ、スカラ最適化機能やベクトル化機能が十分強化されていないので、新しいコンパイラでは自動的にベクトル化されるDOループが、VECTIZERでは“ベクトル化されない”と答えてくる事があるかもしれない。しかし一応ベクトル化の指針を得る事はできるので、レベルアップされるコンパイラとあわせて使える。VECTIZER (20-00)が31bitアドレッシングをサポートし、31bitアドレッシングを意識した大きな領域を使用するプログラムやオーバーレイのある大きなプログラムを、FORT77/HAP (20-00)に対応したVECTIZERにかけることができるようになるのは62年1月以降になる予定である。

(3) 各種 FORTRAN の計算速度

FORTRAN (FORT77/HAP (02-03))を用いて、M-680Hでリバモアループの測定を行うと、平均でM-200Hの約4.0倍の性能が出ている(日立調べ)。同じく分子軌道計算プログラム(GAUS82)を用いた数十種のテスト計算の平均速度をみると200Hの約3.5倍の性能となっている。なお61/10月頃公開予定のFORT77/HAP (20-00)を用いて、M-680Hでリバモアループの測定を行うと、平均でM-200Hの約4.5倍の性能が出ることになっていますので、約4.5倍というM-680Hの速度は、10月以降に公開されるFORTRANで実現されることになる。

2.3.2 ライブラリのベクトル化について

S-810の性能を最大限に利用し、研究効率を向上させるため、ライブラリプログラムのベクトル化は重要な課題である。従来の分子軌道計算のプログラムは、アルゴリズム、コーディング共にスーパーコンピュータに適したものはなっていないものが多い。既存プログラムについては、とにかくスーパーコンピュータで動作するようにすることが先決であった。これにはCOMMONブロックの整理・統合、31ビットアドレッシング化という、ベクトル化以前の作業も付随した。以下にベクトル版として登録されたプログラムを挙げる。

GAUS82 JAMOL3 GAUS80 GAMESS MICA3
MNDOM MM2 MELD GSCF3
NUNPACベクトル版

以上の中には単にコンパイラによる自動ベクトル化の段階（即ちアルゴリズム・コーディングの変更までは行っていない）にとどまっているものもあるが、GSCF3やNUMPACベクトル版のようにコーディング段階からベクトル化されているプログラムでは、ベクトル化による効率向上は非常に高い。またMICA3では対角化、GAUS82、GAUS80では post-HF計算（積分変換、摂動計算、CI計算）の部分でベクトル化が効いている。

ベクトル化によるcpu時間の短縮の例を以下に示す。

① GAUS 82

```

----- 1986-01-14 -----
PERFORMANCE OF S-810/10 AND ITS EXTENDED STORAGE (ES)
(1) RESULT OF NH3/RHF/MP4SDTQ/6-31G* CALCULATION BY GAUS82

```

	CPU-TIME (SEC)	ELAPSED-TIME (MIN)
S-810 WITH ES FOR FTO1 *	11.83	≈ 1
S-810 WITH ES FOR FTO1 **	13.73	≈ 1
S-810 WITHOUT ES **	16.81	12
M-680H	10.22	12
M-200H	32.38	----

```

(2) ETHYL RADICAL/UHF/MP4SDTQ/6-31G* CALCULATION BY GAUS82

```

	CPU-TIME (SEC)	ELAPSED-TIME (MIN)
S-810 WITH ES FOR ALL FILES *	9M,48.67	11
S-810 WITH ES FOR ALL FILES **	10M,52.75	16
S-810 WITHOUT ES **	11M,17.52	56
M-680H	6M,46.68	51
M-200H	28M,19.	----

```

* : HAP OPTION FOR ALL ROUTINES
** : HAP OPTION FOR LINK802 (TRANSFORMATION) ONLY
-----

```

② GSCF3

SiF₄ : 基底状態 SCF-CI計算
 SCF基底 : S : 「5321/521/1」
 F : 「621/57/1」
 79軌道
 CI基底 : 28 軌道, 1802 次元

ステップ	S-810/10	M-680H	コメント
A O積分	92.9	107.7	d軌道はベクトル化が効く
閉殻SCF (8回)	3.4	8.6	最大5倍程度 (NOHAPと比べて)
積分変換	42.1	285.5	最大10倍程度
CSF生成	37.0	20.9	
ハミルトニアン行列要素	10.0	7.4	
対角化 (3根, 5回)	1.9	7.1	最大10倍程度

表中の値はCPU時間 (秒)

ライブラリ・プログラムの検索方法の実際を以下に示す。サブコマンド「IPROG」,「GUIDE」,「CATP」を投入した後は、システムがSかVか(スカラ版かベクトル版か)を尋ねてくるので、「S」又は「V」を応答する。ソースプログラムやロードモジュールが格納されているデータセットはスカラ版では、▼SYS2.#～▼,ベクトル版では、▼SYS3.#～▼となっている。また、分野コードは4文字(例えばab initio MO法の分野コードはWF10)で表わされるが、スカラ版は末尾が0であるのに対し、分子科学プログラムパッケージのベクトル版は、末尾4文字目をVに、NUM-PACベクトル版は末尾をWとして区別するようになっている。

```

READY
FLIB
ENTER SUBCOMMAND('FIELD','LPROG','IPROG','LOOK','GUIDE','CATP',
                  'USER','HELP','QUIT') OR TSS COMMAND.
F/FIELD
*-----*
          ***** LIST OF FIELDS OF IMS PROGRAM LIBRARY *****
          ***** MOLECULAR SCIENCE PROGRAM PACKAGE (SCALAR) *****
NO. FIELD          FIELD TITLE                                     QUAN.
   CODE
  1 NM10  MATRIX,ALGEBRAIC AND ARITHMETIC UTILITY.                6
  2 NM40  SYMMETRY ANALYSIS.                                       1
  ~~~~~
21 DB10  DATA BASES.                                             7
22 SL10  SPECIAL LANGUAGES.                                       8
                                           2
                                           0
          ***** MOLECULAR SCIENCE PROGRAM PACKAGE (VECTOR) *****
  1 WF1V  WAVEFUNCTIONS BY AB INITIO METHODS.                     7
  2 WF2V  WAVEFUNCTIONS BY CNDO,INDO,AND MNDO METHOD.              1
  3 CR3V  MOLECULAR MECHANICS AND FORCE FIELD CALCULATIONS.       1

          ***** QCPE PROGRAM *****
  1 NM1Q  MATRIX,ALGEBRAIC AND ARITHMETIC UTILITY.                33
  2 NM2Q  EXPANSION AND SPECIAL FUNCTIONS.                        4
  3 NM3Q  EIGENVALUES AND EIGENVECTORS.                           14
  4 NM4Q  SYMMETRY ANALYSIS.                                       13
  5 MI1Q  MOLECULAR INTEGRALS.                                     31
E
*-----*
ENTER FIELD-CODE OR OTHER COMMAND.
F/LPROG WF1V
*-----*
          ***** LIST OF PROGRAMS IN THE GIVEN FIELD *****
FIELD CODE : WF1V
FIELD TITLE : WAVEFUNCTIONS BY AB INITIO METHODS.
NO. PROGRAM ID      PROGRAM TITLE
001 GAUS82  GAUSSIAN 82:AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS
002 JAMOL3   AB INITIO LCAO MO SCF CALCULATION
003 GAUS80  GAUSSIAN 80 : AB INITIO MO CALCULATION (HITAC VERSION)
004 GAMESS  GENERAL ATOMIC AND MOLECULAR ELECTRONIC STRUCTURE SYSTEM
005 MICA3   A PROGRAM SYSTEM FOR CONFIGURATION MIXING CALCULATION(CI)
006 MELD   PROGRAM FOR MANY ELECTRON DESCRIPTION
007 GSCF3   PROGRAM GSCF3 FOR SCF AND CI CALCULATION
*-----*
ENTER PROGRAM-ID OR OTHER COMMAND.
F/IPROG GAUS82
ENTER S (SCALAR) OR V (VECTOR)
V
*-----*
          ***** INDIVIDUAL LIBRARY PROGRAM INFORMATION *****

```

ENTRY NUMBER : 0001 PROGRAM ID : GAUS82 VERSION :
FIELD CODE : WF1V

----- PROGRAM TITLE -----
GAUSSIAN 82:AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS

----- PURPOSE -----
(1)RHF,UHF,ROHF SCF CALCULATION WITH S,P,D ANF F-TYPE CGTO'S
(2)MP2,MP3,MP4,CID,CISD,CCD AS POST-SCF CALCULATION
(3)GRADIENT OF RHF,UHF,MP2,CID AND UCISD ENERGIES
(4)HARMONIC VIBRATIONAL ANALYSIS
(5)TESTING THE STABILITY OF THE HARTREE-FOCK WAVEFUNCTION

----- CITATION OF THIS PROGRAM -----
WHEN YOU WRITE A PAPER FOR A RESERCH BY THE USE OF THIS
LIBRARY PROGRAM, YOU MUST CITE THE PROGRAM-ID, THE AUTHORS'
NAMES, AND THAT THE PROGRAM BELONGS TO THE PROGRAM LIBRARY
OF COMPUTER CENTER OF INSTITUTE FOR MOLECULER SCIENCE.

----- AUTHORS OF THIS PROGRAM -----
J.S.BINKLEY, M.J.FRISCH, D.J.DEFREES, K.RAGHAVACHARI,
R.A.WHITESIDE, H.B.SCHLEGEL AND J.A.POPLE, "GAUSSIAN-82",
CARNEGIE-MELLON CHEMISTRY PUBLISHING UNIT, PITTSBURGH, PA.
1984)
REGISTERED AS IMS PROGRAM LIBRARY BY NOBUAKI KOGA (IMS)

DEPOSITOR : J.A.POPLE
LANGUAGE : F7HAP,ASSEMBLY PROGRAM STEPS : 140000 REGION SIZE : 05000KB

		----- PROGRAM DATASETS -----			
		DSN	DEV.	UPDATE/NO.	CONTENT
COMPLETE	:	SYS3.#PROG(GAUS82)	DA	86.03.06 004	*
DATA PO	:	SYS3.#DATA.GAUS82	DA	86.01.10 000	
CATG-PROC	:	SYS3.#CATP(GAUS82VC)	DA	86.02.07 001	EXECUTION ON S-810
GUIDE	:	SYS3.#GUID(GAUS8200)	DA	86.01.10 000	USER'S GUIDE
GUIDE	:	SYS3.#GUID(GAUS8201)	DA	86.03.06 002	JCL FOR COMPILATION AND LINK
GUIDE	:	SYS3.#GUID(GAUS8202)	DA	86.02.07 001	CATA-PRO USAGE (H2O RHF)
GUIDE	:	SYS3.#GUID(GAUS8203)	DA	86.02.07 001	NH3 MP4 DATA
GUIDE	:	SYS3.#GUID(GAUS8204)	DA	86.02.07 000	ETHYL RADICAL DATA
GUIDE	:	SYS3.#GUID(GAUS8205)	DA	86.03.06 000	CU(PH3)H3BH DATA

----- HOW TO USE -----
REFER TO GUIDE WHERE MANUAL AND EXAMPLE INPUT DATA WITH JCL
ARE GIVEN. MANUAL CAN BE OBTAINED BY FOLLOWING COMMAND.
NPRINT 'SYS3.#GUID(GAUS8200)'
CATALOGUED PROCEDURE "GAUS82VC" IS AVAILABLE.
VARIOUS INPUT DATA ARE GIVEN IN 'SYS3.#DATA.GAUS82'.

----- COMMENT AND NEWS -----
THIS LOAD-MODULE WAS NEWLY CREATED (1986-01-14)
PIO, ES IS AVAILABLE
VECTORIZED VERSION.
LOAD-MODULE FOR M-680H EXISTS IN 'SYS2.#PROG'

CATALOGED PROCEDURE GAUS82VC IS AVAILABLE. WHERE ES IS
ALLOCATED 81MB FOR FT01 (DIRECT FILE), 174MB FOR FT19
(2-ELECTRON REPULSION INTEGRAL), TOTALLY 256MB. SPECIFY
ESTORAGE=256MB IN MAIN STATEMENT OF YOUR JCL.

F/QUIT
READY

2.3.3 プロジェクト管理，データセットの機密保護機能について

「データセット保護とプロジェクト管理」の方式がSAFEからTRUSTへの移行に伴ない変更になった。データセットの保護を強化するために、すでに作成済のデータセット及びこれから作成するデータセットは他の利用者から参照できないようにしてある（NONE）。ただしプロジェクト内の利用者間はお互いに参照ができるように設定してある（READ）。

アクセス権限は次のように多様になった。またアクセス権限のおよぶ範囲を4通りのレベルで指定できるようになった。

（アクセス権限の種類）

MASTER	データセットの作成ができる
EXTEND	データセットスペースの拡張ができる。
WRITE	データセットへの書込みができる
MEMBER	区分データセットのメンバーが作成できる
READ	データセットからの読み出しができる
USE	ロードモジュールの場合、実行できる
NONE	全くアクセスできない

（アクセス権限のおよぶ範囲を特定する種類）

ALLSAA	すべての利用者
GRPSAA	プロジェクト内の利用者
LOCK	利用者自身
RIGHT	個別（1つ又は複数のプロジェクト及び利用者）

また従来のSAFEではデータセットの共用や使用禁止といった操作がユーザ個人間でのみ可能でプロジェクト（グループ）単位での操作ができなかったが、TRUSTではコマンドパラメータの指定により個人単位でも、プロジェクト単位でも使えるようになっている。新たに個人又はプロジェクト間のデータセット所有者の変更（譲渡，受取）のための操作としてTRTRANS，TRRECEIVコマンドが用意されているので、プロジェクト間の円滑なデータセット運用が可能である。

2.3.4 新エディタASPENについて

ASPENは従来，用途によって別々に分かれて使用されていたEDIT，HQED，DESPといったラインエディタ，スクリーンエディタのよい所を取り入れて統合発展させた新エディタである。

(1) ASPENの特徴

① 編集機能

a 正規表現コマンドの使用

b 同時に 8 個までのファイルの表示編集ができる

画面分割によって 2 つの画面を同時に見ながら処理できる。

c UNDO (やり直し) 機能により、誤ってコマンドを投入しても、元の画面へ戻ることができる。

d スクリーンエディタとしても、ラインエディタとしても同じコマンド体系で使用できる。

② 開発作業の支援

a 編集作業を行いながら、コンパイラやユーティリティの実行ができる。

b コンパイラとの連携によって、コンパイルエラーメッセージとソースプログラムとを対応させて表示、エラー行にマークをつけるなどの機能が利用でき、ソースプログラムの修正が容易にできる。

c ASPEN の下で、TSS コマンドを使える。またスクロール機能を使って以前に入力したコマンド行やメッセージ行の再表示や再利用ができる。

③ 高操作性

a 画面分割、ページマップによるスクロール、ファイルの特定行の固定表示、一時的消去などの編集画面制御機能がある。

b 環境設定機能により利用者の用途に応じて利用者対応に操作上のオプションを決定できる。

c メニュー、コマンド HELP、メッセージ HELP などのガイダンス機能が豊富である。

d 機能別画面の切り替えが階層関係にとらわれずに柔軟にできる。

e 画面やメッセージの表示を、日本語と英文のどちらも選択できる。

f 日本語データの編集ができる。

④ パソコンなどの無手順端末のサポート

パソコンではスクリーンエディタ又はラインエディタとして ASPEN のサブセット機能が利用できる。

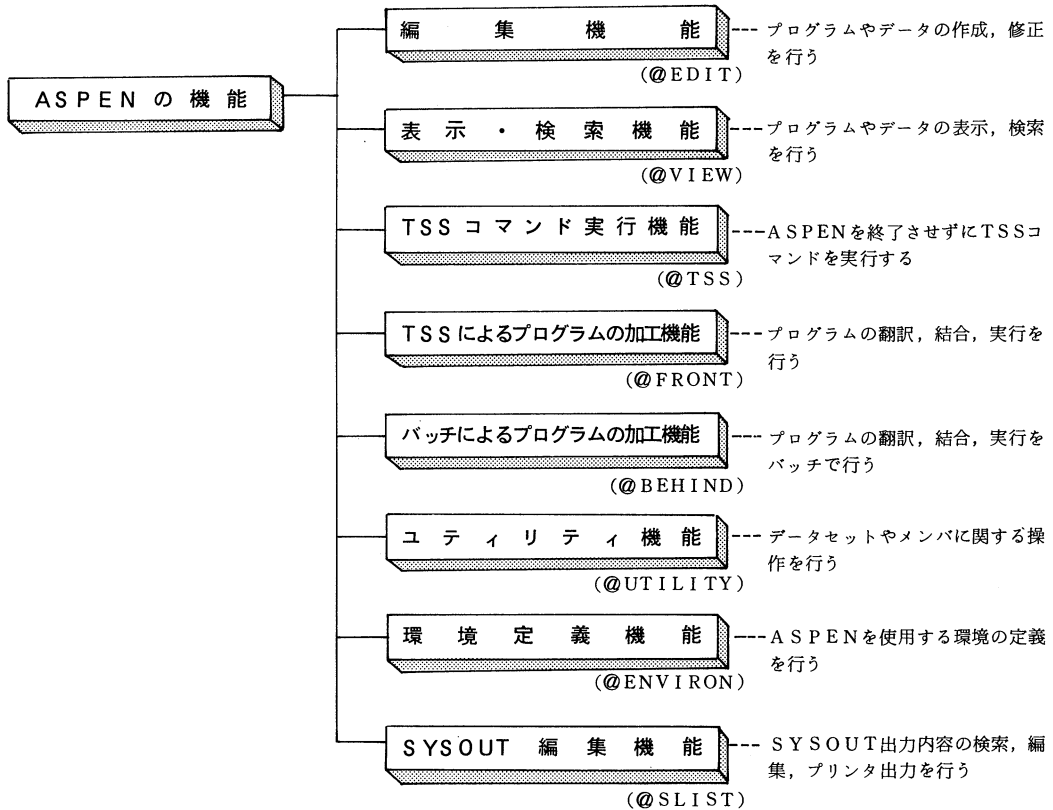
また一般無手順端末ではラインエディタとしての利用ができる。

⑤ SYSOUT 編集機能

スプール出力の内容を検索、編集してファイルへ出力したり、プリンタへ出力する SOM と同等の機能がある。

(2) ASPENの機能体系

ASPENには、次のような機能がある。



2.3.5 処理結果の取り出し、編集機能について

新エディタ ASPENに SOMの基本的な機能を持たせ順次移行する。基本的な機能は次の3点である。本機能の起動は SEDITサブコマンド又は@SLIST画面で行う。

- a. ジョブの取り出し (@SLIST)、データセットへの保存 (Wコマンド)
- b. 編集
- c. 編集結果のスプールへの出力 (WPコマンド)

これら一連の処理が ASPENエディタの中で ASPENエディタの豊富な機能と連携してできるため効率のよい作業ができる。

2.3.6 磁気テープの処理について

- ・MTMの機能に次の2点を追加した。
 - a. パラレルファイルも対象とする。
 - b. 圧縮入出力機能（転送スピードを1.2 MB/sから3 MB/sに高速化、ただし別機種や他社との互換性はなくなるが、圧縮するかしないかはユーザの選択による）。

2.3.7 メッセージヘルプについて

VOS3システム、VOS3-TSSメッセージ、システムコードの意味が分からないときはMSGHELP（メッセージヘルプ）コマンドを使ってその情報を得ることができる。

使い方は以下の通りである。

```
--FUNCTION--
MSGHELP-COMMAND DISPLAYS THE EXPLANATION OF MESSAGE AND SYSTEM-
CODE OF VOS3-SYSTEM AND VOS3-TSS IN JAPANESE.
IN MSGHELP-COMMAND, PF/PA-KEYS WILL CAUSE FOLLOWING FUNCTIONS.
--PF9 -- MOVES TO BACKWORD FRAME.
--PF10-- MOVES TO FORWARD FRAME.
--PF11-- EXITS MSGHELP COMMAND.
--PA1 -- RECOVERS THE LAST FRAME.
```

--SYNTAX--

```
-----
MSGHELP  'MESSAGE-ID'
- -      /'SYSTEM-CODE' {,COMP/,WAIT}          <<COMP>>
          {,EXPLAIN/,OPERATOR/,PROGRAMMER/,SYSTEM}
          {,ALL}
-----
```

NOTE :COMP/WAIT IS NOT ALLOWED TO BE SPECIFIED WITH 'MESSAGE-ID'.

```
--OPERAND--
'MESSAGE-ID'
: SPECIFY MESSAGE IDENTIFICATION.
'SYSTEM-CODE'
: SPECIFY SYSTEM-COMPLETION-CODE OR SYSTEM-WAIT-CODE
(MUST BE A 3-DIGIT HEXADECIMAL NUMBER).
COMP
: DISPLAYS DESCRIPTION OF SPECIFIED SYSTEM-COMPLETION-
CODE.
WAIT
: DISPLAYS DESCRIPTION OF SPECIFIED SYSTEM-WAIT-CODE.
EXPLAIN
: SETS THE FRAME AT THE TOP OF EXPLANATION.
PROGRAMMER
: SETS THE FRAME AT PROGRAMMER'S GUIDE.
OPERATOR
: SETS THE FRAME AT OPERATOR'S GUIDE.
SYSTEM
: SETS THE FRAME AT EXPLANATION OF ACTION OF SYSTEM.
ALL
: DISPLAYS ALL TEXT.
```

(使用例)

```
READY
MH
JET12012A ENTER MSGID/SYSTEM CODE-
QC4
```

***** M S G H E L P *****(O C 4)*****表示行(1-10/10)

OC4

プログラム割り込みが発生した。割り込みの種類は、S P I E マ
クロで指定したものでなかった。
プログラム割り込みの種類：記憶保護例外，セグメント交換例外
またはページ交換例外
S：プログラム割り込みを発生したタスクを異常終了させる。
P：プログラム割り込みを発生したアドレスを A B E N D ダン
プから知り，もしそれがユーザプログラムで発生したもの
でなければ，A B E N D ダンプを保存しておき，保守員に
連絡する。

***** P F 9：上方向 P F 1 0：下方向 P F 1 1：終了 P A 1：再表示 *****
***** スクロール [PAGE]

2.4 M-680HとS-810/10の両プロセサをともに使用するジョブの使い方

スーパーコンピュータ S-810/10の性能を十分引き出すために，S-810/10ではバッチ処理のみ，M-680HではTSS処理，ジョブの入出力処理，バッチ処理といった多面的サービスを行っている。しかしさらにS-810/10のハード性能を生かすためにはプログラムのコンパイル，リンクといった作業はS-810/10の仕事とせず，プログラムのロードモジュールの実行にもっぱら使用することが望ましい。このためひとつのジョブでコンパイラーリンクー実行といった一連の処理を行う場合でも，コンパイラーリンクはM-680Hで行い，実行はS-810/10で行うといった使い方ができるようになっている。

このような制御はジョブ制御文で行うことができMAIN文とRESOURCE文を使用する。

MAIN文 ジョブで使用する資源の量の予約値を指定する。また特定の資源の使用の有無を宣言する。

RESOURCE文 ジョブステップで使用する資源の量の予約値を指定する。また特定の資源の使用の有無を宣言する。

次に使用例を示す。

```
//AA1BB1XX JOB PASSWORD, CLASS=C
//*MAIN SYSTEM=M680, REGION=(xxxxK, xxM, xxxxK, xxM)
(//*RESOURCE SYSTEM=M680, STEP=STP1)
//*RESOURCE SYSTEM=S810, STEP=STP3. GO
//*RESOURCE SYSTEM=S810, STEP=STP2
//STP1 EXEC FORT7CL, PARM. FORT='-----'
//FORT. SYSIN DD DSN=CCCCC. FORT, DISP=SHR
```

```
//STP2 EXEC PGM=AAAAAA
```

```
//STP3 EXEC FORT7CLG, PARM. FORT='-----'
//FORT. SYSIN DD DSN=DDDDDD. FORT, DISP=SHR
```

//

2.5 新しいジョブスケジュールとその下での主記憶（基本領域，拡張領域），拡張記憶装置（ES）およびパラレルI/Oの使い方

2.5.1 ジョブクラスの構成

昭和61年5月から拡張REGION，パラレルI/O，拡張記憶装置等の各種資源と必要CPU時間とを総合的に考慮したジョブスケジュール機能により次表のように各クラスの利用可能資源上限値が大幅に引き上げられた。これにより主にクラスを分ける基準はCPU時間のみとなり，各種資源はどのクラスからでも同様に使えるようになった。

(M-680Hのクラス構成)

クラス	CPUtime (min)	基本REGION (MB)	拡張REGION (MB)	PIO	GRAPHIC
	MAX, STAN.	MAX, STAN.	MAX, STAN.		
A	1, 1	7, 2	28, 4	○	×
B	5, 5	7, 2	28, 4	○	×
C	30, 30	7, 2	28, 4	○	×
D	120, 30	7, 2	28, 4	○	×
G	30, 30	7, 2	28, 4	○	○
S	600, 30	max. 0.5	max. 4	○	×
TSS	1	2, 2	2,	(○)	○

(S-810/10のクラス構成)

クラス	CPU time (min.)	基本REGION (MB)	拡張REGION (MB)	ES (MB)	PIO	GRAPHIC
	MAX, STAN.	MAX, STAN.	MAX, STAN.	MAX, STAN.		
A	1, 1	2.0, 0.5	64, 4	768, 0	○	×
B	5, 5	2.0, 0.5	64, 4	768, 0	○	×
C	30, 30	2.0, 0.5	64, 4	768, 0	○	×
D	120, 30	2.0, 0.5	64, 4	768, 0	○	×
G	30, 30	4.0, 2.0	64, 4	768, 0	○	○
S	600, 30	max, 0.5	max, 4	max, 0	○	×

2.5.2 ユーザ課題についてのジョブ制御

(1) 同一課題のJOBの実行制御

従来は同一課題のJOBの実行がジョブクラス、イニシエータを占有して多重に流れることがあり、利用者にそういうJOB投入をしないよう勧告していたが、レベルアップによりシステムが自動的に監視、制御を行うようになった。

先頭7文字までが同一のJOB(例 AB1CD2XX, AB1CD2XY)は投入順に一つずつ実行される。8文字目はユーザがJOBを識別するためのもので、システムのJOB制御には関係がない。

システムの混雑度が低い場合には、7文字目が異なるジョブは複数取り出され実行される。システムの混雑度が高い場合には、同一ユーザのJOBは7文字目の指定に関係なく直列にしか取り出されない。

(2) 来所ユーザのJOB優先取り出し

所外から分子研電子計算機センターへ来られた利用者には限られた期間に効率よく研究を行ってもらえるように、分子研所内端末(LAN系を除く)よりJOBを投入した場合は他利用者(分子研所内、電話回線)のJOBよりも優先して取り出す。優先JOB数の保証率は全体のジョブ本数の30%までである。これを超えた後は他の利用者と同等の取り出し比率で扱われる。

2.5.3 主記憶領域(基本領域、拡張領域)、拡張記憶装置(ES)及びパラレルI/Oの総枠制御と使い方

5月のシステムのレベルアップに伴い、JOBスケジューラが主記憶領域やパラレルI/O等の計算機資源の総枠によって制御されることになり、今までより大きな計算機資源が利用できることになった。例えば、現在1GB実装されている拡張記憶装置(ES)が、以前の総枠制御の無い運用ではS-810のJOB多重度4が仮定されていたので、1JOBあたり1/4GB(256MB)までしか使えず、また

逆に 50 MBしか使わない場合も残りの 206MBは全く使われなかった。新しい JOBスケジュール制御の目的は、この 1 JOBあたり 256MBの固定枠を無くし、最大 768 MBまで使用する JOBも実行されるようにすることである。つまり等分割されたものより大きな計算機資源を使う JOBの実行を可能にすることが、この制御の目的である。この制御のもとでは資源の要求量の小さな JOBの実行が優先され、要求量の大きな JOBの待ち時間は長くなる。

この制御は全く新しい試みであり、この制御が効果を発揮するためには主記憶領域（基本領域、拡張領域）、拡張記憶装置（ES）等の計算機資源の指定には、必要最小限を指定するなどユーザの方々の協力が必要不可欠である。

計算機の資源をより有効に無駄なく利用していただくため、主記憶領域（基本領域、拡張領域）、拡張記憶装置（ES）及びパラレル I/Oの使い方について説明する。

(1) 主記憶領域（基本領域、拡張領域）の使い方

基本領域、拡張領域の使い方として、MAIN文の REGION パラメータの書き方を M-680H の JOB、S-810 の JOB についてそれぞれ説明する。FORTRAN で書かれたプログラムを使う方を念頭に置いて説明する。

① M-680H の JOB

a) 必要な主記憶領域が 7 MB 以下のとき

b) の方式をすすめるが、基本領域のみを使う場合には次のようにする。

M-680H では、基本領域の量も JOB スケジュール制御の対象になるので、必要最小限を確保するようにすること。例のように MAIN 文の REGION パラメータを指定すればよい。

(x x x x は実際に必要な量)

例 // *MAIN SYSTEM=M680,REGION=(x x x x K)

b) 必要な主記憶領域が 7 MB 以上のとき

拡張領域を使う。基本領域も使われるがシステムのデフォルト値で十分である。拡張領域の量は JOB スケジュール制御の対象になるので、必要以上に指定すると JOB の実行が後回しにされる。例のように MAIN 文の REGION パラメータを指定すればよい。(x x は実際に必要な量)

例 // *MAIN SYSTEM=M680,REGION=(, x x M)

なお、拡張領域を使うためには昭和61年1月以前に作られたオブジェクトモジュール、ロードモジュールは使えない。リンケージエディタ、ローダへのパラメータとして“EX=EA, LD=ANY”を指定する必要がある。

② S-810のJOB

全て拡張領域を使う基本領域もOSによって使われるが、その量はシステムのデフォルト値、(0.5 MB)で十分である。S-810では、基本領域の量、拡張領域の量ともJOBスケジュール制御の対象になるので、必要以上に指定するとJOBの実行が後回しにされる。例のようにMAIN文のREGIONパラメータを指定すればよい。(xxは実際に必要な量)

例 // *MAIN SYSTEM=S810, REGION=(, , , xx M)

(2) 拡張記憶装置 (ES) 及びパラレル I/Oの使い方

① 拡張記憶の概要

拡張記憶の容量は現在1 GBである。ハード性能は500 MB/Sで実効性能は磁気ディスクの約100倍ある。FORTRANの入出力文でディスクと同じように使用できます。JCLの指定もディスクと同じである。後続ステップにパスすることができるが、保存はできない。ディスクと拡張記憶のデータ転送ユーティリティが用意され、FORTRANプログラムからも呼び出せる。

② パラレル I/O概要

パラレル I/O専用のディスクの容量は40 GBである。64 ボリューム (630 MB/ボリューム) あり、パラレル度が16でチャンネル毎に4 ボリュームずつ接続している (SHRT専用2, WORK専用1, 共用1)。

チャンネルとボリュームの関係は次のようになっている。

	(チャンネル)
	CH01~CH16
(UNIT)	(ボリューム)
SHRT	IMS101~IMS116
SHRT	IMS201~IMS216
SHRT, WORK	IMS301~IMS316
WORK	IMS401~IMS416

- 16本の専用チャンネルを用意(16個のI/Oを同時処理)しており、さらにチャンネル毎にバッファを5面用意(5ブロック分のI/Oをまとめて処理)することで、最大で現在と比較しておよそ

16 × 3 (48) 倍高速になる。

③ 拡張記憶装置 (ES) 及びパラレル I/O の使い方は、5 月以前と変わらない。拡張記憶装置の量は、JOB スケジュール制御の対象になるので、必要以上に指定すると JOB の実行が後回しにされる。またパラレル I/O も JOB スケジュール制御の対象になる。こちらはパラレル I/O を使う JOB の多重度に対する制御が行われる。パラレル I/O を使う JOB の多重度は、M-680H, S-810 とともに 3 から 5 である。したがって全体では 6 から 10 多重となる。M680H では、JOB の多重度がほぼ 7 から 9 なので I/O 時間と CPU 時間の比が 7 から 9 以下の JOB は実質上 I/O バウンドにはならないので、パラレル I/O を使う必要はない。S-810 の JOB は、拡張記憶装置 (ES) 及びパラレル I/O を積極的に利用することをすすめる。拡張記憶装置の利用は、例 1 のように MAIN 文の ESTORAGE パラメータで全使用量を指定し、個々の DD 文でそれぞれのデータセットの容量を指定すればよい。パラレル I/O の指定は例 2 のように MAIN 文と DD 文に PRL パラメータを指定すればよい。(MAIN 文には、PRL=YES, DD 文には、PRL=* を指定)

例 1 拡張記憶装置 (ES) の指定の方法 (x x, y y y, z z は実際に必要な量)

```
// *MAIN SYSTEM=S810,
//          REGION=( , , x x M),
//          ESTORAGE=y y y M
.....
// FT10F001 DD DSN=&&WK1,
//          UNIT=ES, SPACE=(MB, (z z))
// FT11F001 DD DSN=&&WK2,
//          UNIT=ES, SPACE=(MB, (z z))
```

例 2 パラレル I/O の指定の方法

```
// *MAIN SYSTEM=S810,
//          REGION=( , , x x M),
//          PRL=YES
.....
// FT10F001 DD DSN= . . . , . . .
//          DCB=(OPTCD=C, BUFNO=5),
//          PRL=*
```

バッファ数 (BUFNO) のデフォルト値は 2 である。

2.6 その他の運用について

2.6.1 所外端末のための通信機能について

所外遠隔地より当センターを利用するための設備として、DDXパケット網、公衆電話網、両者の網間接続を使うことができる。

1) DDXパケット網(含網間接続)	15	回線
2) 公衆電話網	300	BPS 2回線
VADIC型	1200	BPS 3回線
V-22型	1200	BPS 2回線

(1) セッション制御

DDXパケット網(含網間接続)からの接続端末の場合、その回線料は接続時間には殆んど依存せず、データの送受信量にのみ依存することになる。このため回線の独占という事態が容易に起こり得る。少数のユーザによる回数の独占を避けるためにTSSセッションの接続時間を常時監視し、制限時間を越えたものは強制打ち切りを行う。但し、全DDX網回線の利用率が低い(一定基準以下)場合には強制打ち切りは行わず、接続時間の延長を行う。

2.6.2 運用時間

(1) オープン利用時間帯

オープン利用できる時間帯は従来と異なり、次のようになる。

1階	オープン入出力室 磁気テープ室 プロ相コーナー	} 9:00~17:30 (土曜日は17:00まで)	2階	端末室 グラフィック室 共同利用室 プログラム室	} 9:00~22:00
----	-------------------------------	-------------------------------	----	-----------------------------------	--------------

1階は毎日17:30になると消灯され、入口のドアが閉じられ入室できなくなる。しかし2階の各室は22:00までオープンしているため自由に利用できる。

(1階でしか利用できない機器)

- ・連続紙型レーザープリンタ(大量出力用)
- ・オンラインXYプロッタ
- ・文字・画像入力装置

(2階で利用できる機器)

- ・ T S S 端末
- ・ 磁気テープ装置
- ・ カット紙型レーザプリンタ（従来のラインプリンタに代るもの）
- ・ グラフィックディスプレイ

2.6.3 利用点数の算出について

利用点数の算出方法について説明する。利用点数は、以下の式とパラメータの値を用いて計算される。

計算式は以下のとおり

$$\text{CPU}m * a + (\text{CPU}s - \text{VPU}s) * b + \text{VPU}s * c \\ + \text{LP} * d + \text{DISK} * e$$

CPUm：全cpu time (M-680 H)

CPUs：全cpu time (S-810 / 10)

VPUs：ベクトル演算器のcpu time (S-810/10)

LP：出力枚数

DISK：DISK使用総量 (MB)

昭和61年4月以降のパラメータの値は、以下のとおり。

a：0.10 / sec.

b：0.045 / sec.

c：0.045 / sec.

d：0.045 / ページ

e：0.00067 / MB * hr

それぞれの計算機におけるCPU時間1時間当りの点数を以下に示す。

M-680 H 360 点

S-810 / 10 120 点 (ベクトル演算装置も同じ点数)

昭和61年4月以降は、ユーザの方々には、M-680Hの時間で申請していただいているので、許可時間もM-680Hの時間で計算している。

3. 一 般 報 告

3.1 スーパーコンピュータ・ワークショップ

新システムがどうにか軌道に乗った2月の末に第6回の公開講演会を開催した。ユーザの方々が新システムを早く使いこなせるよう、講習会の性格も合わせ持った会を企画した。ベクトル化による高速計算が研究面で成果を挙げている例もいくつか紹介された。今回の会の特徴の一つはマン・マシンインターフェースにおける大型機とパソコンや小型機とのギャップが浮き彫りにされたことである。講演と質疑応答の内容は次のようなものであった。

第6回公開講演会

(昭和61年2月27日午後)

- | | | |
|------------------------------------|---------------|-------|
| ○はじめに | 分子研センター | 諸熊 奎治 |
| ○新システムについて | 分子研センター | 柏木 浩 |
| ○新システムの構成と使い方 | 分子研センター | 西本 史雄 |
| ○新エディタ・ASPENの使い方 | 日立製作所ソフトウェア工場 | 片岡 雅憲 |
| ○拡張領域, 31ビットモード, 拡張記憶, パラレルI/Oの利用法 | ファコム・ハイタック | 伊藤 洋志 |
| ○新システムについての質問と要望, その一 | | |

(2月28日午前)

- | | | |
|--|-----|-------|
| ○多原子分子液体の分子動力学プログラムのベクトル化 | | |
| - CCP5 プログラムライブラリを参考にして - | 京大理 | 片岡 洋右 |
| ○化学反応系の Reactive Molecular Dynamics Simulation | 京大工 | 川勝 年洋 |
| ○Quantum Monte Carlo 法による Schrödinger 方程式の近似解法 | 北大理 | 志田 典弘 |
| ○S-810による GAUS 82 の実行 | 分子研 | 古賀 伸明 |

(2月28日午後)

- | | | |
|-------------------|-----|------|
| ○分子積分の新しい表式とプログラム | 京大理 | 小原 繁 |
|-------------------|-----|------|

○ VAXを経由したDDXによる分子研センターの利用 慶大理工 佐藤 信行

○ FORTRAN/HAP, VECTORIZERの特徴と使い方

日立製作所ソフトウェア工場

青山 明夫

○ 新システムについての質問と要望, その二

ワークショップについての意見

3.2 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・プログラムの収集と開発に努めてきているが、昭和60年度においては、表3.2.1にあるようにライブラリ開発計画を組んだ。ライブラリ開発の成果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・発展という形で実っている。

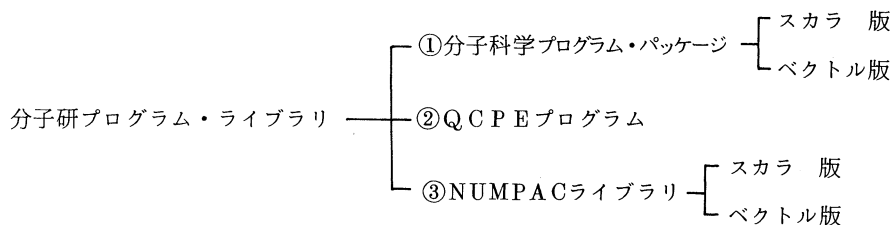
表 3.2.1 昭和60年度 分子研ライブラリプログラム開発作業一覧

1	安藤 勲 山延 健 安藤 慎治	東工大工 助教授 " 大学院生 " "	NMR スピンカップリング計算プログラムの開発整備
2	館脇 洋 友成 六美	北大触媒研 助手 " 大学院生	Gauss型関数を使用したAGTSCFの開発整備
3	小杉 信博	東大理 助手	分子軌道計算のプログラム群のベクトル化
4	片岡 洋右	京大理 助手	溶液のシミュレーションプログラムCCP5のベクトル化
5	竹田 宏 甲木 伸一 井口美佐子	九大教養 教授 " " 福岡女大・家 助手	モデルポテンシャルX α 法のプログラムMPXALPの開発
6	二宮 市三 秦野 甯世	中部大・経営情報 教授 名大大型センター 助手	汎用数学計算プログラムNUMPACのベクトル化
7	岩田 末廣 鎌田 慎一	慶大理工 教授 " 大学院生	分子軌道計算のプログラム群MOLYXの開発
8	佐藤 信行	慶大理工 大学院生	二自由度一般形のシュレディンガー方程式のプログラムFEMSE2の開発
9	今村 詮 青木百合子	広大理 教授 " 大学院生	拡張ヒュッケル法による一次元高分子の計算プログラムPOLEXHの開発
10	諫田 克哉	広大理 助手	MCS CFプログラムGAMESSのベクトル化

11	関谷 雅弘 佐々木不可止	北大理 大学院生 " 助教授	原子のCI計算のプログラムATOMCIの高速化
12	村上 明德 野呂 武司 望月 祐志	北大理 大学院生 " 助手 " 大学院生	CI計算のプログラムMICA3の開発整備
13	志田 典弘 田中 皓	北大理 大学院生 " 講師	分子振動計算プログラムVIBRの開発
14	田中 英次 荒川 透	阪工大, 一般教育 講師 阪市大理	CI計算のプログラムGSTDCIの開発
15	寺倉 清之 柳瀬 章	東大物性研 助教授 大阪府大・総合科学 教授	固体のバンド計算のプログラムFLAPWの開発
16	小浦 延幸	東京理大理工 助教授	分子動力学シミュレーションのプログラムMDANO3のベクトル化
17	堀 憲次	山口大教授 講師	Gaussian80のMP2及びMP3部分のベクトル化
18	伊藤 翼	東北大理 教授	UNICS3のレベルアップ
19	大沢 映二	北大理化2 助教授	半経験的分子軌道計算のパッケージMOPACの整備

昭和60年度1月よりスーパーコンピュータが導入されているが、スーパーコンピュータの性能を引出すにはコンパイラによる自動ベクトル化のみでは不十分であり、プログラムコードを書き直す必要がある。プログラム・ライブラリ管理システム（FLIB）もベクトル化に対応するため、スカラー版（従来のもの）とベクトル版両者を管理するよう変更した。

分子研プログラム・ライブラリは以下のような構成である。



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、並びに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約100件が収まっている。①のソースはデータセットとして磁気ディスク上にカタログされている。またその大部分については実行可能ロードモジュールもカタログされているので、ユーザは即座に使うことができる。実行可能ロー

ドモジュールの使用回数は昭和60年度で総計20,194回であった。

昭和60年度に新規登録した分子科学プログラム・パッケージは以下の13件である。

```
COLMBS COLUMBUS: A PROGRAM SYSTEM FOR SCF,MCSCF AND MR-SDCI CALC.
ATOMHF AB INITIO LCAO SCF OF ATOMS. GAUSSIAN ORBITALS ARE USED.
FPTSPN NMR SPIN-SPIN COUPLIN CONSTANT CALCULATION BY FPT INDO
CRYSTA PROGRAM SYSTEM FOR CRYSTAL STRUCTURE ANALYSIS
VREPRF FORTRAN PROGRAM ANALYZER FOR A VECTOR PROCESSOR.
ATOMST SCF PROGRAM FOR ATOMIC CONTRACTED STO CALCULATIONS
JHH 3JHH: NMR VICINAL COUPLING CONSTANTS
GAUS82 GAUSSIAN 82:AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS
BGSTR3 BIGSTRN3: A GENERAL PURPOSE EMPIRICAL FORCE FIELD PROGRAM
EXAFS GRAPHIC PROGRAM SYSTEM FOR EXAFS ANALYSIS
MICA3 A PROGRAM SYSTEM FOR CONFIGURATION MIXING CALCULATION(CI)
SAC85 SAC/SACCI PROGRAM FOR GROUND,EXCITED,IONIZED AND ANION STATE
GSCF3 PROGRAM GSCF3 FOR SCF AND CI CALCULATION
```

プログラム MNDO MNDOM で代替可能であるという理由でライブラリより削除した。総件数は130件である。

また以下のベクトル版プログラムを登録した。これらは既存プログラムをコンパイラによりベクトル化したものである。

```
MM2 GAUS82 JAMOL3 GAUS80 GAMESS MICA3 MELD
GSCF3 MNDOM
```

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415件である。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・化学のプログラムも含まれており、非常に有益なものである。ほとんどはFORTRANで書かれたプログラムで、ユーザには磁気テープによるソースプログラムの貸出しサービスを行っている。

昭和60年度に新規登録したQCPEプログラムは以下の41件のプログラムである。

```
QC0459 RPAC: ELECTRONIC EXCITATION PROPERTIES IN RPA
QC0460 FALLOFF-CURVES FOR UNIMOLECULAR AND TERMOLECULAR REACTIONS
QC0462 PCIO3: PERTURBATION CONFIGURATION INTERACTION (VERSION 3)
QC0463 PSEUROT: PSEUDOROTATIONAL ANALYSIS OF FIVE-MEMBERED RINGS
QC0464 MOPAC: GENERAL-PURPOSE SEMI-EMPIRICAL MO (IBM VERS. OF #406)
QC0465 XASW: X-ALPHA MO PACKAGE
QC0466 DNMR4: CHEMICALLY EXCHANGING NMR SPECTRA (REVISION OF #165)
QC0467 PARST: MOLECULAR PARAMETERS FROM CRYSTAL STRUCTURE ANALYSIS
QC0468 QATREX: RELATIVISTIC EXTENDED HUCKEL (CDC VERSION OF #387)
QC0469 FORTICON8: EXTENDED HUCKEL CALCULATION (CDC VERSION OF #344)
QC0470 DSYMPLOT: SIMULATION OF NMR SPECTRA
QC0471 ITCOOR: ITERATIVE SOLUTION FOR CARTESIAN COORDINATES
QC0472 TDPT: TIME-DEP. PERTURBATION THEORY FOR INELASTIC SCATTERING
QC0473 CLUSTR: ISOTOPE CLUSTER PREDICTION PROGRAM
QC0474 CNDO/2-U: ENHANCED CNDO CALCULATION
QC0475 DNAMP: DNA SEQUENCE MANIPULATION AND ANALYSIS PACKAGE
QC0476 MMHELP: MOLECULAR MECHANICS INPUT ASSIST
QC0477 INTENSITY: TRANSITION PROBABILITIES OF DIATOMIC MOLECULES
QC0478 SPLINE: TENSIONED SPLINE FIT PROGRAM
QC0479 POLYBOX: PARTICLES IN ONE-DIMENSIONAL ARRAYS OF BOXES
QC0480 IONPIT: PITZER ION INTERACTION APPROACH
QC0481 PCK83: A CRYSTAL MOLECULAR PACKING ANALYSIS PROGRAM
QC0482 HONDO5/MP2: HONDO + MOLLER-PLESSET 2 (DEC VERSION)
QC0483 DENPOT/80: ELECTRON AND SPIN DENSITY, ELEC-STATIC POTENTIAL
QC0484 SOGP: A PROGRAM FOR RECOGNIZING ORBITAL SYMMETRY
QC0485 GEOMO: MOLECULAR GEOMETRY AND ORBITAL (CDC VERSION OF #290)
```

QC0486 MOPAC: GENERAL-PURPOSE SEMI-EMPIRICAL MO (CDC VERS. OF #464)
 QC0487 GEOMO/RV: GEOMO + ROT-VIB PROPERTY (CDC VERSION OF #240,350)
 QC0488 RAPID INTERACTIVE STRUCTURE INPUT FOR MM2
 QC0489 MOLDYN: MOLECULAR DYNAMICS MODELS BY NMR DATA
 QC0490 MEPHISTO: MOLECULAR ELECTRONIC POTENTIALS
 QC0491 BIGMOLLI: GAUSSIAN INTEGRALS PACKAGE (IBM VERSION OF QC0328)
 QC0492 DENSITY: DENSITY PLOTS FROM MOPAC (VAX VERSION)
 QC0493 DRAW: MOLECULAR DRAWING PROGRAM FROM MOPAC (VAX VERSION)
 QC0494 MOHELP: HELP FOR MOPAC, DRAW, DENSITY PROGRAMS
 QC0495 MOSOL: MNDO SOLID STATE PROGRAM (VAX VERSION)
 QC0496 POLYMODE: VIBRATION OF COUPLED ANHARMONIC OSCILLATORS
 QC0497 PAIRS: ANALYSIS OF INFRARED SPECTRA (VAX VERSION)
 QC0498 SCF-ORBITAL: PERTURBATION FOR NUCLEAR-SPIN COUPLING CONSTANT
 QC0499 ISHTAR: ANALYSIS OF NMR AND QUADRUPOLAR RELAXATION
 QC0500 GAUSSIAN 80: IBM VERSION II

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ある。昭和60年度、新たに以下の106件のプログラムを追加登録し、総件数は808件になった。

ACCELD	ACCELS	AQIOSD	AQIOSS	AQ1DB	AQ1DC	AQ2DB
AQ2DC	AQ3DB	AQ3DC	BAND	BEIO	BEI1	BERO
BER1	BITLOG	BITRVC	BKEIO	BKEI1	BKERO	BKER1
CGKLZD	CGKLZQ	CGKLZS	CHOLFV	CHOLFW	CLANS	CUBICC
CUBICZ	DAWSN	DBEIO	DBEI1	DBERO	DBER1	DCLASN
DDAWSN	DEXI	DKEIO	DKEI1	DKERO	DKER1	DPLEGN
DRANDM	DTMFMP	DTMFRM	DZETA	EXI	FULL	GCSND
GCSNS	GLGND	GLGNS	HEQRVV	HEQRVW	HOBSVV	HOBSVW
HQQRVV	HQQRVW	HQRIVV	HQRIVW	IAND	ICOMPL	IDIF
IEOR	IEQV	IMPLY	INAND	INEQV	INOR	INOT
IOR	LEQLSB	LEQLSC	LEQLUV	LEQLUW	LEVIND	LEVINS
MCHLFV	MCHLFW	MINVV	MINVW	NOLEQD	NOLEQQ	NOLEQS
NOLLS1	PLEGN	POLEQB	POLEQC	POLEQZ	QUADRB	QUADRC
QUADRZ	QUARTB	QUARTC	QUARTZ	QUBICB	RANDOM	RTFNDD
RTFNDS	TMFMP	TMFRM	WYNNED	WYNNES	WYNNRD	WYNNRS
ZETA						

以下、表3.2.2に現在(昭和61年5月28日)登録されている分子科学プログラム・パッケージの一覧を示す。

表 3.2.2 分子科学プログラム・パッケージ一覧

==== IMS PROGRAM LIBRARY ====

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

FIELD CODE : AS10

FIELD TITLE : SOLID STATE AND SURFACE.

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

FIELD CODE : AS20

FIELD TITLE : POLYMER AND LIQUID CRISTAL.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE

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 : CR20

FIELD TITLE : CARTESIAN COODINATES OF ATOMS IN MOLECULES.

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

FIELD CODE : CR3V

FIELD TITLE : MOLECULAR MECHANICS AND FORCE FIELD CALCULATIONS.

NO. PROGRAM ID PROGRAM TITLE
001 MM2 MOLECULAR MECHANICS CALCULATION BY MM2 FORCE FIELD MODEL

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 MNIPI1 MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 100-ATOM MOLECULES
003 MMIPI3 MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 300-ATOM MOLECULES
004 MMIY3 MOLECULAR MECHANICS CALCULATION FOR 6-COORDINATED COMPOUNDS
005 MDANO3 MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE
006 CLAMPS CLAMPS: CLASSICAL MANY PARTICLE SIMULATOR
007 BGSTR3 BIGSTRN3: A GENERAL PURPOSE EMPIRICAL FORCE FIELD PROGRAM

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

FIELD CODE : EG10
FIELD TITLE : EDUCATIONAL TOOLS.

NO. PROGRAM ID PROGRAM TITLE
001 OTHELO *** OHELLO GAME FOR TSS EDUCATION ***

FIELD CODE : EG20
FIELD TITLE : GENERAL UTILITIES.

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

FIELD CODE : GP10
FIELD TITLE : GRAPHIC PROCESSING.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	JAPIC1	PLOTTER WRITING OF MO AND DENSITY BY AB INITIO METHODS
002	JAPIC2	PLOTTER AND GRAPHIC DISPLAY WRITING OF MO AND DENSITY
003	ORTEP	ORTEP DRAWING OF MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURE
004	GPQDD	GRAPHIC PROGRAM FOR QUANTITATIVE DRUG DESIGN
005	NDP	MOLECULAR DISPLAY PROGRAM
006	CRYSTA	PROGRAM SYSTEM FOR CRYSTAL STRUCTURE ANALYSIS
007	EXAFS	GRAPHIC PROGRAM SYSTEM FOR EXAFS ANALYSIS

FIELD CODE : MI10
 FIELD TITLE : MOLECULAR INTEGRALS.

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

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

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

FIELD CODE : NM40
 FIELD TITLE : SYMMETRY ANALYSIS.

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

FIELD CODE : SC10
 FIELD TITLE : SCATTERING AND TRAJECTORY.

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

FIELD CODE : SC20
 FIELD TITLE : CRYSTALLOGRAPHY.

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

014 PDB THE PROTEIN DATA BANK
 015 PRTXYZ XYZ COORDINATES OF MODEL STRUCTURE OF PROTEIN
 016 NLPLSQ LEAST-SQUARES PROGRAM FOR REFINING LIQUID STRUCTURE MODELS
 017 KURVLR PROGRAM FOR ANALYSING X-RAY DIFFRACTION DATA OF LIQUID
 018 CRYSTA PROGRAM SYSTEM FOR CRYSTAL STRUCTURE ANALYSIS
 019 EXAFS GRAPHIC PROGRAM SYSTEM FOR EXAFS ANALYSIS

FIELD CODE : SL10
 FIELD TITLE : SPECIAL LANGUAGES.

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

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

NO. PROGRAM ID PROGRAM TITLE
 001 DIAVIB CALC. OF NUMERICAL VIBRATIONAL WAVEFUNCTION FOR DIATOMICS
 002 DIAINT CALC. OF FCF AND ELECTRONIC SPECTRA OF DIATOMIC MOLECULES

FIELD CODE : SS30
 FIELD TITLE : NMR SPECTROSCOPY.

NO. PROGRAM ID PROGRAM TITLE
 001 DNMR3 SIMULATION OF EXCHNGE BROADENED NMR SPECTRA
 002 LAOCN3 ANALYSIS OF HIGH RESOLUTION NMR SPECTRA
 003 CHEMIC CHEMICS :AUTOMATED ORGANIC CHEMICAL STRUCTURE ELUCIDATION
 004 JHH 3JHH: NMR VICINAL COUPLING CONSTANTS

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

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

FIELD CODE : WF1V
 FIELD TITLE : WAVEFUNCTIONS BY AB INITIO METHODS.

NO. PROGRAM ID PROGRAM TITLE
 001 GAUS82 GAUSSIAN 82:AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS
 002 JAMOL3 AB INITIO LCAO MO SCF CALCULATION
 003 GAUS80 GAUSSIAN 80 : AB INITIO MO CALCULATION (HITAC VERSION)
 004 GAMESS GENERAL ATOMIC AND MOLECULAR ELECTRONIC STRUCTURE SYSTEM
 005 MICA3 A PROGRAM SYSTEM FOR CONFIGURATION MIXING CALCULATION(CI)
 006 MELD PROGRAM FOR MANY ELECTRON DESCRIPTION
 007 GSCF3 PROGRAM GSCF3 FOR SCF AND CI CALCULATION

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	RKNGAU	RIKEN GAUSSIAN70
008	IMSPAK	GEOMETRY OPTIMIZATION BY AB INITIO SCF-MO CALCULATIONS
009	COMICA	A PROGRAM SYSTEM FOR CONFIGURATION MIXING CALCULATION(CI)
010	IPCREP	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
032	GRAMOL	GRADIENT METHOD PROGRAM
033	COLMBS	COLUMBUS: A PROGRAM SYSTEM FOR SCF,MCSCF AND MR-SDCI CALC.
034	ATOMST	SCF PROGRAM FOR ATOMIC CONTRACTED STO CALCULATIONS
035	GAUS82	GAUSSIAN 82:AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS
036	MICA3	A FIGURATION SYSTEM FOR CONFIGURATION MIXING CALCULATION(CI)
037	SAC85	SAC/SACCI PROGRAM FOR GROUND,EXCITED,IONIZED AND ANION STATE
038	GSCF3	PROGRAM GSCF3 FOR SCF AND CI CALCULATION
039	QCBDB	QUANTUM CHEMISTRY BASIS SET DATA BASE

FIELD CODE : WF2V
FIELD TITLE : WAVEFUNCTIONS BY CNDO,INDO,AND MINDO METHOD.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MNDOM	MNDIFIED VERSION OF MNDO SCF MO CALCULATION PROGRAM

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MINDO3	MO CALCULATIONS BY MINDO/3 METHOD
002	CNINDO	MO CALCULATION BY CNDO AND INDO METHODS
003	MNDOM	MNDIFIED VERSION OF MNDO SCF MO CALCULATION PROGRAM
004	FPTNMR	CALCULATION OF NMR CHEMICAL SHIFT BY FPT-INDO/CNDO
005	CNDOS	CNDO/S-CI: MODIFIED CNDO AND CI METHOD
006	MNDOC	CORRELATED SEMIEMPIRICAL CALCULATIONS WITH GEOM.OPT.
007	FPTSPN	NMR SPIN-SPIN COUPLIN CONSTANT CALCULATION BY FPT INDO

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	HMO	HUECKEL MOLECULAR ORBITAL CALCULATION
002	DVSCAT	NUMERICAL-BASIS-SCC-DV-XALPHA MO AND CLUSTER CALCULATION
003	GPQDD	GRAPHIC PROGRAM FOR QUANTITATIVE DRUG DESIGN
004	PPP	SCF-CI-PI-MO PROGRAM WITH PPP APPROXIMATION
005	EHTB	EXTENDED HUCKEL METHOD FOR TWO DIMENSIONAL PERIODIC SYSTEMS
006	ICON	EXTENDED HUCKEL CALCULATIONS FOR MOLECULES
007	HUCKEL	HUCKEL CALCULATIONS FOR MOLECULES
008	MPXALP	MODEL POTENTIAL X-ALPHA METHOD

**** TOTAL NUMBER OF UNIQUE PROGRAMS ****
 132

**** SORTED UNIQUE PROGRAMS ****

ALCHEM	ALIS	ASA	ASSIGN	ATOMCI	ATOMHF	ATOMST
BCRES3	BC3	BENDER	BGSTR3	BSIP	CASSCF	CGTOFD
CGTORL	CHEMIC	CLAMPS	CMQCA	CNDOS	CNINDO	COLMBS
COMICA	CONVRT	COUNTF	CRYSTA	CSACST	CVOA	DIAINT
DIIVIB	DISMAP	DISPL3	DNMR3	DRAWDG	DVSCAT	EHTB
EMOR1	ENVLOP	EXAFS	FCBSD	FCMP	FLOW	FORDAP
FPTNMR	FPTSPN	GAMESS	GAUS76	GAUS80	GAUS82	GORDON
GPQDD	GRAMOL	GSCF2	GSCF3	GUGACI	HLISP	HMO
HONDOG	HUCKEL	ICON	IMSPAC	IMSPAK	INTCPY	IPCREF
IR2	ISLINE	JAMOL3	JANIE1	JAPIC1	JAPIC2	JHH
KURVLR	LAOCN3	LIBE	LSRES3	LSVR3	MDANO3	MDP
MDSALT	MELD	MICA3	MINDO3	MMIPI1	MMIPI3	MMIY3
NM2	MNDOC	MNDOM	MOLSCT	MPXALP	MULTAN	NASH
NCTB	NICER	NLPLSQ	ORTEP	OTHELO	OUTFIT	PA200
PA300	PA409	PA600	PDB	PFORTV	PGCCMB	PKIT
POTOPS	PPP	PROFIL	PRTXYZ	PSHOND	PSPART	PSTOPO
QCBDB	QCHECK	QCLDB	REDUCE	REPORT	RKNGAU	SAC85
SALS	SCEP	SERIES	SFORT	STEREO	STERIC	STINGY
SUPPOS	TASP	TSS517	UNICS3	VREPR	WIGNER	

IMS COMPUTER CENTER: LAST UPDATE = 86-05-28

3.3 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6件が登録されており、ユーザに公開している。

- (1) QCLDB (量子化学文献データベース)
- (2) CMQCA (Carnegie-Mellon 量子化学アーカイブ)
- (3) CHEMICS (有機化合物自動構造解析システム)
- (4) IR2 (赤外線スペクトルデータベース)
- (5) STERIC (立体化学計算プログラム基礎団データベース)

(6) QCBDB (量子化学基底関数データベース)

(6)のQCBDB (Quantum Chemistry Basis Set DataBase) は昭和60年度より開発が開始され、61年5月に仮公開に至っている。

3.4 プログラム相談

3.4.1 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, TSSコマンド及び操作, M T M, シスアウト編集, カタログドプロシジャ, 運用についての問い合わせなどである。

一般利用を行う上での相談を受けている。

(2) 応用プログラム相談

相談員は所内外の研究者 (主に理論系および電算センターの受託大学院学生) に委嘱している。相談内容は、ライブラリ・プログラム, その中でも特にGAUSSIAN 80, IMSPACK, JAMOL3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。

3.5 研究会・学会報告

60年度は新システムの導入に全力を挙げるため研究会・学会などの活動は控え目になった。

3.5.1 情報化学討論会

昭和60年10月6～7日 石川県社会福祉会館 (金沢)

○原子軌道データベースの開発 —— 分子軌道計算の知識ベースとして ——

- ・発表者 富樫雅文 (北大理), 館脇 洋 (北大触研), 岩田末廣 (慶大理工), 小杉信博 (東大理), 北浦和夫 (阪市大理), 山本茂義, ○柏木 浩 (分子研)

4. 昭和60年度稼働状況および利用状況

4.1 利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数

利用分野	利用区分	プロジェクト数	ユーザ数	時間			点数	
				申請	許可	実績	許可	実績
分子科学	施設利用	149	422	8,651	6,068	5,052	2,305,840	1,919,938
	課題研究	2	6	60	51	22	19,380	8,313
	協力研究	31	31	1,331	1,011	744	384,180	282,843
	所内							
	一般	41	130	2,040	1,840	1,467	699,200	557,339
	アイドル ^①	18	64	3,424	3,080	2,578	1,170,400	979,659
生理学	施設利用	2	4	18	18	11	6,840	4,164
基礎生物学	施設利用	1	1	12	12	12	4,560	4,572
合計		244	658	15,536	12,080	9,886	4,590,400	3,756,823

(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。ユーザ数は所内一般利用と重複している。

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。

4.2 システム稼働状況

表 4.2.1 システム稼働状況

年月	稼働時間		保守時間
	グローバル	ローカル	
60 / 4	573 : 00	572 : 00	18 : 00
5	496 : 00	494 : 00	18 : 00
6	502 : 00	500 : 00	19 : 00
7	573 : 00	563 : 00	24 : 00
8	511 : 00	510 : 00	22 : 00
9	474 : 00	472 : 00	21 : 00
10	539 : 00	538 : 00	22 : 00
11	540 : 00	538 : 00	16 : 00
12	—	—	—
61 / 1	447 : 00	443 : 00	14 : 00
2	498 : 30	469 : 30	39 : 30
3	628 : 00	624 : 00	21 : 00
計	5781 : 30	5723 : 30	234 : 30

注) 60/12はシステム入替のため全面停止。 60/1～11はM-200H×2 システム
61/1～3は M-680H(グローバル)+S-810/10(ローカル) システム

4.3 CPU時間

4.3.1 M-200H 2台のトータルCPU使用時間(60/4~11)

表 4.3.1 M-200H×2 月別CPU時間

(月)	〈ジョブクラス〉											
	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(I)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(TOTAL)
04	08:85:53	57:52:46	275:30:14	141:32:55	817:49:30	143:25:37	00:00:00	26:56:52	00:19:32	02:38:37	00:00:08	974:41:59
05	07:18:16	32:10:51	158:02:45	83:28:31	290:30:52	257:43:34	00:00:00	25:20:19	00:22:14	02:54:09	00:20:15	808:11:46
06	18:52:16	60:36:13	206:32:35	100:53:54	211:20:43	218:25:55	00:00:00	34:33:20	00:12:22	01:39:29	00:09:29	847:49:16
07	14:42:29	44:57:56	195:33:10	117:34:13	237:16:12	252:24:52	00:00:00	36:35:41	05:44:09	12:08:47	01:07:56	922:05:25
08	15:36:42	68:46:17	211:51:40	104:35:18	193:30:39	184:16:32	00:00:00	23:08:58	02:50:46	06:49:40	00:41:47	817:08:19
09	09:25:05	53:41:21	187:29:52	70:11:02	275:35:08	147:39:51	00:00:00	26:55:44	00:28:21	03:04:05	00:01:59	774:32:28
10	11:10:20	58:18:19	200:07:33	82:52:52	259:09:44	200:18:47	02:00:58	37:30:55	00:34:15	02:50:10	00:02:47	854:56:40
11	18:25:26	54:12:37	213:39:30	83:08:19	291:02:06	322:45:44	00:00:37	47:44:22	06:07:04	08:46:42	00:11:18	1046:03:40
(TOTAL)	99:06:27	480:36:20	1652:47:19	788:57:04	2016:14:54	1727:00:52	02:01:35	263:51:11	16:38:43	40:45:39	02:29:29	7040:29:33

4.3.2 M-680H, S-810/10のCPU使用時間(61/1~3)

表 4.3.2 M-680H 月別CPU時間

(月)	〈ジョブクラス〉											
	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(I)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(TOTAL)
01	21:26:22	31:52:38	74:57:07	31:05:54	12:34:46	42:53:31	00:00:00	32:44:28	07:00:49	05:35:41	01:39:40	261:50:51
02	14:28:18	41:38:35	70:53:33	52:27:04	38:05:31	39:10:39	00:00:00	20:18:38	03:58:30	04:08:27	03:48:31	288:57:41
03	14:26:50	59:26:39	152:55:08	110:50:07	58:41:22	31:14:01	00:00:00	32:07:33	06:36:32	05:25:08	00:16:57	472:00:17
(TOTAL)	50:21:30	132:57:47	298:45:48	194:23:05	109:21:39	113:18:11	00:00:00	85:10:34	17:35:51	15:09:16	05:45:08	1022:48:49

表 4.3.3 S-810/10 月別CPU時間

(月)	〈ジョブクラス〉											
	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(I)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(TOTAL)
01	07:18:40	13:54:34	32:55:36	24:43:35	38:48:24	20:02:32	00:00:00	00:00:01	03:42:37	04:13:01	03:26:08	149:05:08
02	09:17:55	21:34:20	64:58:04	41:21:59	153:29:23	38:29:16	00:00:00	00:00:00	01:33:01	00:48:07	00:39:21	332:11:26
03	03:00:23	33:54:28	107:41:41	137:08:40	209:22:50	50:12:28	00:00:00	00:00:00	00:03:43	00:44:29	00:00:10	542:08:52
(TOTAL)	19:36:58	69:23:22	205:35:21	203:14:14	401:40:37	108:44:16	00:00:00	00:00:01	05:19:21	05:45:37	04:05:39	1023:25:26

表 4.3.4 S-810/10 月別CPU時間

(月)	〈ジョブクラス〉											
	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(I)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(TOTAL)
01	01:33:45	03:01:57	06:14:15	07:31:58	19:43:21	03:24:21	00:00:00	00:00:00	00:55:37	00:22:02	00:01:03	42:48:19
02	02:20:22	06:53:19	14:14:57	09:13:16	122:16:47	08:51:01	00:00:00	00:00:00	00:16:27	00:16:26	00:05:25	164:28:00
03	00:33:10	10:30:27	41:07:14	33:29:08	148:31:09	03:04:25	00:00:00	00:00:00	00:00:00	00:13:27	00:00:00	292:29:00
(TOTAL)	04:27:17	20:25:43	61:36:26	100:14:22	290:31:17	20:19:47	00:00:00	00:00:00	01:12:04	00:51:55	00:06:28	499:45:19

4.4 ジョブ件数

4.4.1 M-200 H 2台のトータルジョブ件数 (60/4~11)

表 4.4.1 M-200 H×2 月別ジョブ件数

(月)	〈ジョブクラス〉											(TOTAL)
	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(I)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	
04	2,370	2,018	1,678	800	806	562	0	12,842	59	555	1	20,181
05	2,444	1,355	1,129	225	246	1,066	0	9,219	23	891	12	16,110
06	3,892	2,274	1,504	298	325	1,268	0	11,985	41	718	8	22,308
07	4,486	1,739	1,457	291	320	1,263	0	13,777	404	1,410	262	25,409
08	4,278	2,165	1,367	261	274	897	0	11,625	172	1,216	156	22,411
09	2,709	1,684	1,430	306	326	605	0	11,471	272	849	105	19,757
10	3,703	1,817	1,557	222	292	836	3	13,484	665	2,391	122	25,092
11	5,179	2,009	1,254	184	312	874	2	17,838	304	975	111	29,042
(TOTAL)	29,061	15,056	11,371	2,082	2,401	7,371	5	101,741	1,940	8,505	777	180,310

4.4.2 M-680 H , S-810/10のジョブ件数 (61/1~3)

表 4.4.2 M-680 H 月別ジョブ件数

(月)	〈ジョブクラス〉											(TOTAL)
	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(I)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	
01	5,221	1,645	861	120	65	331	0	15,272	253	727	187	24,632
02	5,047	1,828	821	252	111	396	0	16,135	744	1,095	327	26,756
03	5,501	2,340	1,341	353	129	178	0	21,819	500	898	367	33,426
(TOTAL)	15,769	5,813	3,023	725	305	905	0	53,226	1,497	2,720	881	84,864

表 4.4.3 S-810/10 月別ジョブ件数

(月)	〈ジョブクラス〉											(TOTAL)
	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(I)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	
01	920	513	481	101	124	232	0	3	77	320	91	2,862
02	1,074	704	532	115	136	301	0	0	126	107	84	3,179
03	694	1,016	685	235	149	177	0	0	102	114	44	3,216
(TOTAL)	2,688	2,233	1,698	451	409	710	0	3	305	541	219	9,257

5. 速報抜粋——速報 (No. 38 ~ No. 42)——

5.1 第5回大型計算成果発表会について (No. 38)

当センターでは大学計算センターでは実行できないような分子科学の大型計算を一つの特徴にしております。したがって大型計算課題の研究成果を公表し、今後のプログラム開発、センター運営、利用申請審査の参考とするため、下記のように「分子研電子計算機センター第5回大型計算成果発表会」を開催します。この研究会への出席は自由ですから奮って御参加ください。

「第5回大型計算成果発表会 - 使用プログラムの特徴と研究成果の報告 - 」

日 時 昭和60年9月12日(木) 9:30 ~ 12:30

場 所 分子研研究棟101号室

9:30 挨拶 センター長

9:35 岩田末廣, 長村吉洋, 佐藤信行, 井上敏宏, 鎌田慎一 (慶大理工)

分子の励起状態に関する理論的研究

10:05 安藤 勲, 山延 健, 安藤慎治, 黒子弘道 (東工大)

高分子鎖の電子構造とNMR化学シフト

10:35 相田美砂子, 斉藤 肇, 五百城義和, 中山 勉 (国立がんセンター研究所生物物理部)

生物機能に関する分子軌道法的研究

11:05 山辺信一, 古川真一 (奈教大教育)

親電子付加の経路の研究

11:35 前田松夫, 日比貞雄, 藤田健一, 鳥居隆司, 牧原正幸, 齊藤幹康, 鈴木浩司,

隅田克彦 (名工大)

高分子固体の巨視的変形に原因する分子運動の光学的ならびに力学的解析

12:05 小林 宏, 石田雅也, 木村仁史, 藤城義和, 久保田尚樹 (東工大理)

DV-X α 法による遷移金属錯体の電子状態

5.2 電子計算機センター運営委員会議事報告 (No. 39)

第10回運営委員会が昭和60年9月12日(木)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. 計算機稼働状況・利用状況および電力使用状況

M-200H×2 システムの稼働状況・障害状況・ジョブ件数・CPU時間が資料に基いて報告された。4～8月の間に小さな障害が2件程度あった以外はまったく順調な稼働状況である。この他に分野区分別使用状況、電話回線によるTSS利用状況、端末設置状況の報告がなされた。これによると、従来のVADIC型1200BPSモデムに代り、V22型モデム、DDXパケット網による利用がここ2ヶ月で急速に伸びてきている。したがってV22型の現在1回線を増設することの検討も考えている旨報告された。

次に電力事情に対する当センター運用の経過が説明された上で、電力使用状況が資料に基いて報告された。ここ2年の間に空調方式の見直し、新型パッケージへの入替により大幅に節電を計ることができていることが述べられた。

2. 昭和60年度予算と使途予定

3. 昭和60年度前期計算機配当状況、追加状況

分野、区分別の計算機時間配当状況のまとめが一覧表で示された。9月1日現在で195プロジェクト565名、申請12670時間、許可9824時間である。

次に59、60年度CPU時間追加状況が一覧表によって示された。さらに60年度の個人別の追加申請については評価集計表に基いて、評価結果の適否について議論された。

4. 昭和60年度前期施設利用旅費割当て状況

前期施設利用旅費206,770円の割当て状況が資料に基いて報告された。

また、割当て方針の説明があり、今後も小規模研究室遠隔地の利用者を優先して割当てるということで了解が得られた。

5. ライブラリプログラム開発状況

分子研プログラムライブラリの開発状況が資料に基いて報告された。分子科学プログラムパッケージ、QCPEプログラム、NUMPACライブラリの新規登録プログラムの紹介および総件数が述べられた。

前々回(第8回)委員会で懸案事項となっただけのライブラリプログラム開発の結果の履歴が資料としてまとめて示された。この中にはまだ登録に至っていないものもあり、今後フォローを行っていききたい旨が述べられた。

6. ライブラリ管理システム(FLIB)登録プログラムの存続、廃棄について

前々回(第8回)の運営委員会で要検討項目となっていた、古くなったライブラリプログラムや使用頻度の少ないライブラリプログラムの存続、廃棄の扱い方についての方針と今回の処置が示さ

れた。機能性の高い新しいプログラムで代替可能な場合は、古いあるいは使用頻度の低いプログラムを処分する方針に基いて、今回は削除1件、サービス縮小4件が資料によって報告された。

7. データベースの開発状況報告

現在、登録公開されている5件のデータベース、開発を援助している4件のデータベースの追加・更新状況が報告された。

8. 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

分子研プログラムライブラリ開発計画（計19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。また応用プログラム相談員およびセンター事務補佐に対する謝金の支払い状況が報告された。

9. 昭和61年度概算要求

61年度の概算要求の概要が資料に基いて報告された。基本は借料の平年度化と運営費の増額要求である。新システムの運転に見合うよう電気料の増額要求を行っているが、現在のところ見通しは非常に苦しい。場合によっては62年度あたりから運営費の一部をユーザに負担してもらう可能性も今後慎重に検討する必要がある旨が述べられた。

10. 昭和60年度後期利用申請審査

審査に先立ち、昭和60年度後期のCPU時間配分案が資料に基いて示された。本年度9～8月配当目標は1396時間（所内422時間、所外974時間）という厳しいものとなっているが、現実には空調機電力減少など節電の効果により電力面の余裕が見込めるため、この値よりはもう少し余分に配当できそうであるとの報告があった。具体的には1月頃に再度見直しを行って、その状況で配当を考えていくとの方針が示され了承された。

続いて予め各委員が採点した協力研究18件、施設利用B（2件）の審査が資料に基いて行われた。この中で特に問題となったのは協力研究と施設利用との重複申請に対する対応の仕方であり、類似の課題で重複申請を行わないようにユーザに知らせること、申請審査の参考とするため重複しているプロジェクトの関係を明確に申請書上に記載させるようにすること、重複プロジェクトの資料を審査資料として各委員に送付することが決定された。

11. 新システムの運用方針

本項の概要は2章にまとめてあるのでそちらを参照のこと。

5.3 新システムを使う時の注意事項について（No.41）

1) JOB文, MAIN文にエラーがある場合にエラーメッセージが表示されないことがあります。

パラメータの値に誤りがある場合ですので JCL リストをよく確認して下さい。

MAIN 文の書き方 (例)

・ M680 で実行させる

```
// *MAIN SYSTEM=M680
```

・ S810 で実行させる

```
// *MAIN SYSTEM=S810
```

・ M680 でのリージョン指定

```
// *MAIN REGION=(2000K, 2M)
```

次の指定はエラーになります (, , は不可)

```
REGION=(2000 K, 2M, , )
```

・ S810 でのリージョン指定

```
// *MAIN REGION=( , , 2000K, 2M)
```

・ S810 での拡張記憶指定

```
// *MAIN ESTORAGE=200M
```

・ パラレル I/O 指定

```
// *MAIN PRL=YES
```

2) S810 でテストのためにベクトル命令を使わないで実行させる場合には次の指定が必要です。

```
// EXEC FORT7CLG,
```

```
PARM.LKED='EX=EA,HAP'
```

3) JCL でのパラメータの書き方について

たとえば、FORTRAN コンパイラに対するパラメータの数が多くて、JCL が 1 行に収まらない場合は、コンマを使って以下のようにして複数行に継続することができます。

```
//FORT EXEC PGM=JNKFORT,  
// PARM=( 'INLINE,OPT(3),LEVEL(I),NOHAP,ANS77,FLAG(4),TERM',  
// 'NOEXPAND,NOCOMARY,DCOM,MEM')
```

5.4 スプールの保存期間の変更について (No.42)

DDX からの利用が多くなりシステムの継続的な使用が増えて計算結果を蓄えるスプールファイルがいっぱいになってきました。効率的にディスクを使用するために、4 月からスプールの保存期間を 2 週間 (最長 3 週間) から 1 週間に変更します。ただし、スプールの整理 (1 週間より前のジョブの消去) は週の初めのセンタ業務日に行いますので実際の保存期間は最長 14 日間になります。

例 4月21日(月) センター業務日の場合

整理対象は4月7日(月) から13日(日) の分

日	月	火	水	木	金	土	
		7	8	9	10	11	12
13	14	15	16	17	18	19	
22	㊦	22	23	24	25	26	

5.5 MSLおよびMSL 2のソースファイルについて (No.42)

数値計算副プログラムライブラリMSLおよびMSL 2のソースプログラムは次の区分ファイルに入れてあります。

SYS1.MSL.SOURCE

SYS1.MSL2.SOURCE

5.6 電子計算機センター運営委員会議事報告 (No.42)

第11回運営委員会が昭和61年3月1日(土)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事項に重点を置いてお知らせします。

1. 所長報告

61年度電算機センター予算内示の結果、増額借料の平年度化と電気代を含む電子計算機運営費の増額が認められたが、特に後者は今後のセンターの運営にきわめて重要な意義がある。

機構および国立大学共同利用機関共通の懸案として大学院大学の進行状況が話された。61年度は準備調査のための予算がつき、教授1名の定員枠が割り当てられた。63年度に開校、64年より学生を募集する計画である。

2. センターからの報告

- (1) 60年度計算機稼動および利用状況、電力使用状況
- (2) 60年度校費の使途
- (3) 60年度計算機時間配当、追加状況

各プロジェクトのCPU時間の月別、分野別追加状況が示された。前回委員会後郵便審査の結果配当を行った追加申請の各々に対して各委員の評価結果をもとに作成された評価集計票に基いて議論が行われた。この議論は特に各委員の評点に大きな開きの出たプロジェクトを中心として進められた。

申請書の出版・発表欄の記載対象として期間はどのくらいまで許すか、分子研センター以外の利用による論文も包含させるべきかどうかについて不明確なので、申請書記入要領においてこの点を明記することになった。

利用報告書の提出状況は審査の参考になるため、未提出のものがあれば、その旨を委員の送付審査資料に明記することになった。

初期申請時間に比べて大口の追加申請が再度出されているプロジェクトがいくつかあり、問題となった。この結果一般論としては特にルールは作らず、ケースバイケースで審査していくことになった。しかし、今後は追加申請の柔軟性は残すが再度の大量追加申請の審査はより厳しく行うことになった。

(4) 60年度施設利用旅費割当状況

施設利用旅費の割り当ては例年通り、小規模プロジェクトを中心に行われた。前期は201,580円を6プロジェクトに、後期は216,170円を6プロジェクトに割り当てた。

(5) ライブラリプログラム開発状況

分子科学プログラムパッケージのベクトル化状況、新規登録状況、削除状況、QCPEプログラム、NUMPACライブラリのサービス状況が報告された。

(6) データベース開発、サービス状況

5件のデータベース(QCLDB, CMQCA, CHEMICS, IR2, STERIC)の現状および61年4月より公開予定の量子化学基底関数データベース(QCBDB)の紹介が行われた。また分子研センターが昭和60年度開発援助しているデータベースはQCLDB, IR2, STERIC, QCBDBの4件であるとの報告があった。

(7) 60年度分子研ライブラリプログラム開発計画およびセンター業務補佐謝金割当状況

分子研ライブラリプログラム開発計画(計26件)と個々の旅費、謝金の割当状況が報告された。また応用プログラム相談員およびセンター業務補佐に対する謝金の支払い状況が示された。

(8) 61年度予算内示について

61年度の予算内示額が示され説明があった。このうち特に増額されたものは電子計算機経費であり、借料は60年度1～3月の新システム借料が平年度化された。光熱水料を含む電子計算機運営費の増額が認められた。

3. 61年度計算機運用方針

(1) 利用点数について

(A) 利用課全点数について

61年度からCPUの申請基準がM-200HからM-680Hに変更となることに伴ない利用課金点数の変更案が検討され決定した。

(B) 利用許可点数

申請に先立って通知したM-680HとM-200Hの速度比4.5倍はセンターの平均的ジョブに対しては3.6倍程度の速度比となっている。したがってこの差の一部を利用に補償するためCPU1時間を360点でなく、 $360 \text{点} \times 1.11 = 400 \text{点}$ として割り当てることになった。

(2) システムレベルアップの予定

2章を参照のこと。

(3) 所内利用有償化について

- ① 光熱水料など運営費の赤字を補填する。
- ② 利用者負担の原則
- ③ 有償であることにより、利用者がより慎重に計算を行うように。

以上3点の動機に基づく所内利用有償化のための案が示された。所内の有償化は機器センター等、他附属施設とのバランスを取ることで、利用者負担の原則に基づいている旨の説明があった。この件については3月の教授会議で結論が出る予定であるとの報告があった。

4. 61年度計算機時間配分案

61年度CPU時間の配分案が説明された。

申請許可率は所内は一率に90%、所外は平均許可率80%とすることになった。許可の所内外比は43:57(40:60を目標)で了承された。

61年度の推定許可総CPU時間(5月以降申請と追加を含む)は6616~6915時間となる見込みが述べられた。

5. 61年度利用申請審査

各委員によって予じめ評価・採点された協力研究17件、施設利用B57件、課題研究3件の審査が行われた。審査は主に各委員間の評点の巾が大きいもの、評価の低いもの、前年度の4倍以上の申請をしているものや重複申請の可能性のあるものに重点を置いて議論された。

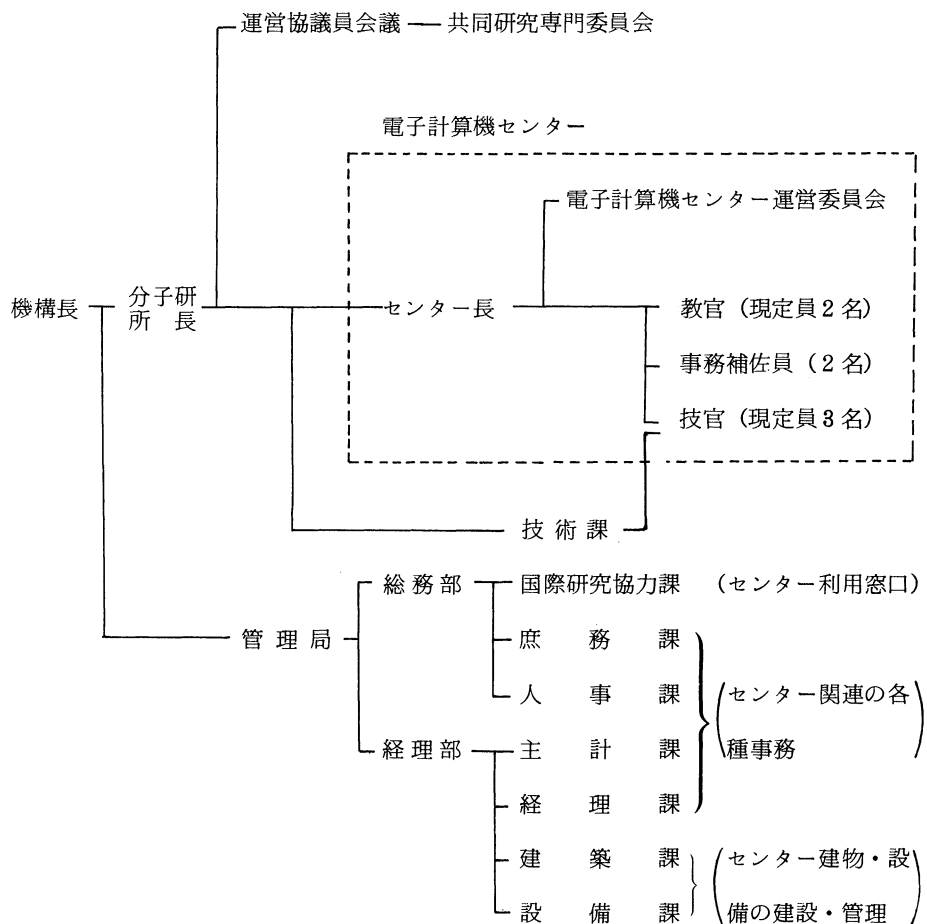
6. 資料

6.1 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。

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

分子研規則 第 4 号

昭和 56 年 4 月 14 月制定

(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。

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

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、あらかじめ委員多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。

6.4 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	分子研理論第一部門教授, センター長	センター委員
柏木浩	分子研電子計算機センター助教授	〃
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	分子研基礎光化学部門助教授	〃
土方克法	電通大教授	分子研所外委員
細矢治夫	お茶大理教授	〃
岩田末廣	慶大理工助教授	〃
平尾公彦	名大教養助教授	〃
亘弘	生理研教授	生理研委員
中研一	基生研教授	基生研委員

(昭和60～61年度)

諸熊奎治	分子研理論第一部門教授, センター長	センター委員
柏木浩	分子研電子計算機センター助教授	〃
中村宏樹	分子研理論第二部門教授	分子研所内委員
北川禎三	分子研分子動力学部門教授	〃
大野公男	北大理教授	分子研所外委員
郷信広	九大理助教授	〃
塚田捷	東大理助教授	〃
寺倉清之	東大物性研助教授	〃
亘弘	生理研教授	生理研委員
中研一	基生研教授	基生研委員

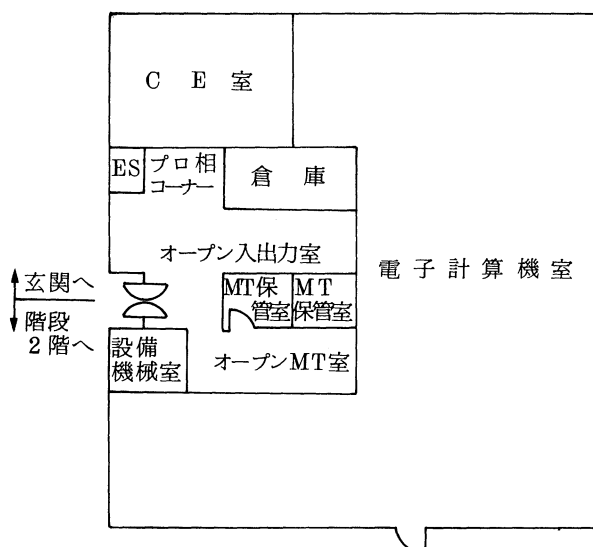
6.5 電子計算機センター職員 (昭和61年7月現在)

諸熊奎治	センター長 (併任)
柏木浩	助教授
長嶋雲兵	助手
伊奈諭	技官 (係長)
西本史雄	技官
山本茂義	技官

- 加藤 真由美 事務補佐員（昭和60年10月退職）
 加藤 景子 事務補佐員
 泉谷 浩美 事務補佐員（昭和60年11月採用）
 泉谷 浩美 事務補佐員（昭和61年7月退職）

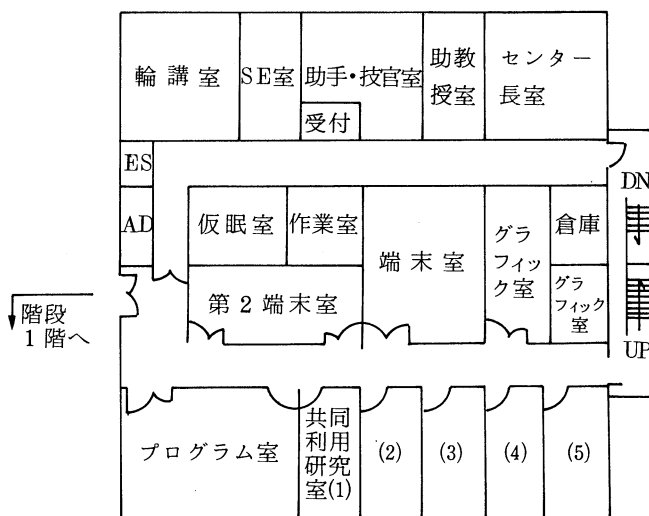
6.6 建物図

1階



- (1) プログラム相談コーナー
 プログラムとシステムに関する相談指導を行う。
- (2) オープン入出力室
 カードの入出力，レーザプリンタ出力，XYプロッタ出力，ジョブ状態表示のためのオープン利用室。
- (3) オープンMT室
 オープンMTシステムの利用を行う。
- (4) ユーザ用MT保管室
 ユーザ用MTを置くが，センターは保管の責任を負わない。

2階



1) プログラム室

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

2) 共同利用研究室

遠隔地ユーザの居室。センターの許可を受けて利用する。

3) 端末室，第2 端末室

ディスプレイ型の各種TSS端末が置かれ，自由に利用できる。

4) グラフィック室

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

6.7 応用プログラム相談員一覧

斎藤 稔 名大理，研究生

昭和60年4月～昭和61年3月

神谷 健秀 東大工，大学院生

//

6.8 端末設置状況（昭和61年5月現在）

(1) リモートステーション

(分子研) 所内 実験棟 MT, LBP, TSS 端末

	研究棟	MT, LBP, TSS 端末
	UVSOR	MT, LBP, TSS 端末
生理学研究所		HITAC M-150
機構情報図書館		HITAC L-330

(2) 電話回線

300	BPS	2回線	設置端末数	17
1200	BPS	5回線	設置端末数	35

(3) DDX

	設置端末数	31
--	-------	----

(4) 構内回線 (専用線) ポートセレクター経由

9600	BPS	設置端末数	70
1200	BPS		

6.9 マニュアルの紹介と購入方法

よく利用されているマニュアルには以下のようなものがある。センターでは端末室などに置いてあるが、個人で購入を希望する時の申し込み先は次の通り。

〒113 東京都文京区本郷7-3-1

東大構内財団法人好仁会内

アカデミービジネスサービス (株)

電話03-811-7786

FORTRAN77関係 (HAPを含む)

最適化FORTRAN77言語・・・・・・・・・・・・・・・・ 8080-3-257

最適化FORTRAN77使用の手引・・・・・・・・・・・・ 8080-3-258

TSS

TSSコマンド・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 8091-3-037

TSS操作・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 8091-9-034

TSSメッセージ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 8091-9-035

TSS解説・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 8091-3-032

TMP4 E2・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 8091-3-074

TSDUT	8090-3-313
TSL OG	8090-3-135
ASPEN, MODE	
ASPEN使用の手引	8090-3-330
MODE1解説	8090-3-333
KGRAF解説	8090-3-339
BGRAF解説	8090-3-338
データベース	
ORION利用の手引	8090-6-502
メッセージ	
システムメッセージ/コード	8091-9-010
サービスプログラムメッセージ	8091-9-063
MSL2, MATRIX/HAP	
MSL2機能編第1分冊	8080-7-120
MSL2機能編第2分冊	8080-7-121
MSL2機能編第3分冊	8080-7-141
MSL2操作編	8080-7-122
MATRIX/HAP	8090-7-035
ジョブ管理	
ジョブ制御言語	8091-3-017
ジョブ管理解説	8091-3-016
リンケージエディタ/ローダ	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	8091-3-042
ユーティリティ	
ユーティリティ第2分冊	8080-3-303
数学関係	
数学関数	8080-3-218

TRUST

TRUST利用者エンドユーザー向け使用の手引・・・ 8080-3-257

GPSL, PREVIEW

GPSL機能編第1分冊基本・機能ルーチン・・・・・・ 8080-7-096

プレビュープログラムPREVIEW・・・・・・ 8080-7-130

文書処理

日本語文書エディタDEDIT・・・・・・ 8090-7-020

日本語清書プログラムDRUNOFF・・・・・・ 8090-7-027

RUNOFF・・・・・・ 8090-3-312