

# I 部

## 目 次

寄 語	慶応義塾大学理工学部教授 岩田 末廣	1
1. 電子計算機センターの経緯と計算環境の変化		
	分子研電子計算機センター 柏木 浩	3
1.1 7年で7倍		3
1.2 超高速計算機の動向		3
1.3 32ビットパソコンとマイクロフレームリンク		4
1.4 通信と智能化		6
2. スーパーコンピュータワークショップの活動		7
3. 計算機システムの運用と使い方		9
4. 一般報告		29
4.1 分子研ライブラリプログラムの収集と開発		29
4.2 データベース開発状況		38
4.3 BITNETへの加入と試用		38
4.4 プログラム相談		39
4.5 研究会, 学会報告		39
5. 昭和61年度稼働状況および利用状況		42
5.1 利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数		42
5.2 システム稼働状況		42
5.3 CPU時間		43
5.4 ジョブ件数		43
6. 速報抜粋 — 速報 (No. 43 ~ 49) —		44
7. 資 料		64
7.1 センター関連組織		64
7.2 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則		65
7.3 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター運営委員会規則		66
7.4 電子計算機センター運営委員会委員		67
7.5 電子計算機センター職員 (昭和62年7月現在)		67
7.6 建物図		68
7.7 応用プログラム相談員一覧		69
7.8 端末設置状況 (昭和62年6月現在)		69
7.9 マニュアルの紹介と購入方法		70



## 寄 語

慶応義塾大学理工学部教授 岩 田 末 廣

ソフトウェア危機という言葉を目にして久しい。一方、この数年のハードウェアの進歩と低価格化は目ざましい。8ビットのパーソナルコンピュータの時代は、2、3年で過ぎ去り、研究室や自宅のコンピュータは16ビットに置き換わっている。更に、最近発売されたある16ビット用のソフトウェアの説明書の前書きには32ビットパーソナルコンピュータ時代の幕開けが唱われている。実際、32ビットコンピュータの低価格化はこの一年間のうちに進んだ。個人用としてはまだ高価だが、一層の低価格化は確実に実現されるであろう。これらパーソナルコンピュータの市販されているソフトウェアの多くは高い性能を持っている。少しほめ過ぎになるかも知れないが、ソフトウェア危機という言葉をお忘れさせる様なものもある。私は、いま16ビットコンピュータでは、3種のエディター（ワードプロセッサ）を、32ビットミニコンピュータでは一つのエディターを使っているが、それらの操作性の良さとヘルプ機能の利便さにはかなり満足している。これらを使っていると、どうしても、分子研の計算機センターで使うDESPやASPENと比較することになる。ソフトウェアの貧困は、特に大型計算機と大型計算機センターに顕著になっているように思える。これは、プログラム開発用の道具だてについても言える。数個以上の単位からできているプログラムを開発するのに今の私には make とよばれるプログラム開発支援ソフトが不可欠になっているが、これは16ビットコンピュータでも今では使えるのに、もちろん分子研のような大型計算機（センター）にはそんなものはまだない。分子研にあらたに導入された新FORTRAN compiler は、従来の3倍以上時間を必要とすると報告されているが、このことなどは、大型機をめぐるソフトウェアの貧困を最も顕著に表していることの一つであろう。

ところで、分子研の計算機の全cpu時間のほとんどを外国から輸入したプログラムを使った化学計算が占めているという。この背景にはいくつかの問題があるが、そのうちの一つは分子研におけるプログラム開発環境である。実際、外からの利用者にとって、分子研でプログラムを開発するのは困難を極めている。私の場合、テープで持ち込んだプログラムを半日で計算できるようにできたならば、大変幸せと思わなければならない。ところが、最近私は、ある32ビットミニコンピュータへ、私達が開発しているMOLYX-SCF-CIの全プログラムを転送することから始めて、応用計算を開始するまで、3時間で済ませることが出来た。

分子研計算機センターの利用も最近では電話回線を利用することが進んでいるが、これも、計

算ジョブを投入したり、出力を見たりすることには使えても、プログラム開発には事実上使えない。手元のミニコンピュータで開発したプログラムを確実に送るには、受け側の分子研計算機が対応してくれない。手元のパーソナルコンピュータにはよいソフトがあるし、また自分達でそのプログラムを書くことは出来るのだが、大型機はそのどちらも許されない。

分子科学研究所の計算機センターの最大の目的は、ほかでは実行できない大計算をすることにあったし、今でもそれは変わっていないと思う。しかし、計算機センターが出来てほぼ10年たち、身の回りの計算機事情も大きく変わった。ここらで新しい優先権の検討が必要と思う。その第一は新しい考え方による大規模計算のプログラム開発の環境をよくする努力をすることである。細かい運営方法から始まり、日立側への強い要求までいろいろやれることがあると思う。8ビットや16ビットのコンピュータのソフトウェアがよくなったのは、いろいろなソフトウェアハウスが競争で開発したことにある。従来の compiler より3倍時間のかかるものを何の対策もなく納入できるメーカーの神経を疑ってしまう。親方日の丸という昔懐かしいレッテルを貼りたくもなる。第二は、全国のおよび世界的なネットワークの中での位置づけである。手元の計算機と分子研の計算機とを目的に応じて使い分けることが研究の能率を上げるのにも、広い意味のコストパフォーマンスの点でも大切となる。電子郵便も不可欠になろう。このためには、電話回線を効率よく利用するソフトを整備させなければならない。

プログラム開発も、目的があつてのものである。計算によって明らかにしたいこと、試してみたい理論が最も大切なのは言うまでもない。幸いにも現在では、一たびこれらをもてば、環境はかなり整っている。研究の主要部分を最も大切な方に注げるはずである。スーパーコンピュータの進歩や専用並列計算機の出現にももちろん期待したい。と同時に、現存しているハードウェアもまだ十分に使いこなしていないという感がする。特に、ハードウェアが高価なものになればなるほど、その持てる性能を生かしきっていない。

# 1. 電子計算機センターの経緯と計算環境の変化

分子研電子計算機センター 柏木 浩

## 1.1 7年で7倍

例年のように掲載している次頁の表もだんだん大きくなってきて一頁には入りきれなくなりそうである。3ヶ月運転の53年度を除き、稼動時間は毎年6千時間台を記録している。これは盆も正月も入れて、1日平均17~18時間稼動していることになる。稼動時間が毎年ほぼ一定であり、CPU時間は200H規準に換算してあるので、総使用CPU時間の増加が演算量の伸びを示している。ただしベクトルプロセッサによるユーザジョブの実際の加速率は数えられていない。これを考慮に入れると61年度の200H相当のCPU時間は3~4万時間になるだろう。これは57~59年度のM-200Hの時代に比べると4~5倍、54年度のM-180の時代に比べると十数倍演算量が増えたことになる。54年度からのユーザ数の増加は約2倍であるから、個々のユーザは7年前より7倍前後多い演算を行ったことになる。

7年で7倍、これを実感としてはどのように感じられているだろうか。それぞれの研究目標から見るとこれで満足と思っている人は少ないだろう。粒子の数や格子点の数の3乗、4乗に比例する計算にとって7倍位ではものたりないというのが実感のはずである。ベクトル化や拡張記憶の利用で高い加速率を達成したグループのみが上昇感を持つことができたかもしれない。ユーザとしての感覚はともかくとして、表のような急成長は物事の変化としては稀なことである。世界でも日本とアメリカでしか起きていない事態である。今後の先行きを支配しそうでないいくつかの要因について考えてみよう。

## 1.2 超高速計算機の動向

昨年9月と今年3月の2回アメリカに行く機会があった。この半年の間にアメリカにおける並列計算にかなり顕著な変化が見られた。一つは、CRAY-XMPなどでこれまで複数のプロセッサを別ジョブでしか使えなかったのが、オペレーティングシステムが発展して一つのジョブで最大4CPUまで使うことができるようになったことである。オーバーヘッドは小さくてほぼ4倍の性能がでるそうである。2~3年先には16並列のベクトルプロセッサが出てくる見込みである。もう一つは、フローティングポイントシステムズ社のFPS-Tのようなパラレルプロセッサが何種類か発表されているが、この上で走る科学計算用のプログラムが開発され、分子積分とか固体の計算などの成果が出てきたことである。アメリカの研究者は新しい計算機が出てくると、

すぐに大きなプログラムを開発して計算する。このような開拓者精神が日本では稀なのはどうか。うわけだろうか。

日本では昭和64年度に通産省のスーパーコンピュータに関する大型プロジェクトが最終年を迎え、何らかの形の並列計算機が発表されるだろう。そのあたりから日本も並列計算機の時代に入って行くだろう。さらには最近話題になっている高温超電導がある。実用化が進めば数年先にはジョセフソンコンピュータが出てくる可能性もある。技術的な観点から見ると将来の展望は大変明るく、10年後にはS-810クラスの100～1000倍高速なコンピュータが使えるようになるだろう。

### 1.3 32ビットパソコンとマイクロフレームリンク

今年には国産の32ビットパソコンがでさろう年である。8MB程度のメモリがあり、M-180の数分の一の計算速度があるので *ab initio* MO 計算もできる。この計算機を手に入れて一番喜々としているのが40代の先生達である。若い人達は、それほどのことでもないという顔をしている。大学の大型計算機センターの発足の頃から苦労しながら計算機を使い続けてきた世代が、人生の前半にしてようやく手に入れたマイコンコンピュータに恋心に似た気持を抱く。アメリカでは研究室ごとにVAXのような計算機を専有して使うというのが主流であって、むしろ最近になって大型計算機センターの建設と充実に力を入れ出している。日本では大型計算機センターにしか計算機がなかったので、大きな計算も小さな計算も皆なそれを使ってきた。パーソナルコンピュータの普及とともにこの傾向は緩和されてきたが、16ビットパソコンではまだ計算能力が不足であった。32ビットパソコンの登場で初めて研究室の中で自分の計算機で計算ができるようになったわけである。

32ビットパソコンの登場と関連してマイクロフレームリンクが本格的に取り上げられるようになった。これまでのIBM型の計算機とパソコンとは使い勝手がまるで違い、データの互換性はほとんどない。これではそれぞれの特徴を生かした分散処理をしようとしてもうまくいかない。そこでパソコン（マイクロ）と大型計算機（フレーム）を統一した手続きで使えるようにしようというのがマイクロフレームリンクである。今年の4月にIBMがそのような統合のためのソフトウェアを発表し、日立や富士通もこれに追随しつつある。

このような動向は日本の科学計算の環境を急速に改善することになるだろう。ユーザは大部分のデータ処理を使い勝手のよいパソコンの上で行い、それではできないような大型計算や大型のデータベースなどをセンターに求めることになる。超電導の技術が成功してジョセフソンパソコンが登場するようにでもなれば研究者の受ける福音は計り知れない。

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
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無入 180 有人	M-200H M-180 疎結合 無 人	M-200H 2台 疎結合 無 人
プ ロ ジ ェ ク ト 数		63	176	192	183	198
利 用 者 数						
機 構 内 <sup>a</sup>		48	70	69	91	94
機 構 外		107	254	325	330	375
合 計		155	334	394	421	469
稼 動 時 間		1,087	6,071	6,553	6,721	6,305
利 用 申 請 時 間	(200H基準)					
	申 請	929	4,666	11,033	10,230	11,938
	許 可	816	3,171	7,427	8,306	10,141
総 使 用 C P U 時 間 <sup>c</sup>		509	2,405	5,405	6,320	8,205
ジ ョ ブ 処 理 件 数 <sup>c</sup>		41,521	155,980	183,840	214,847	239,771
ライブラリプログラム新規登録数		0	20	43	20	699
データベース新規登録数		0	2	0	0	3
センター使用論文数 <sup>d</sup>		0	24	93	118	190

		58年度	59年度	60年度	61年度
計 算 機 シ ス テ ム 運 転 方 式		同57年度	同57年度	(~11月)同57年度 (1月~)M-680H S-810/10	M-680H S-810/10 疎結合 無 人
プ ロ ジ ェ ク ト 数		199	207	226	234
利 用 者 数					
機 構 内 <sup>a</sup>		102	110	130	141
機 構 外		426	446	464	496
合 計		528	556	594	637
稼 動 時 間		6,170	6,316	6,016	6,368
利 用 申 請 時 間	(200H基準)				<sup>b</sup>
	申 請	13,053	14,799	15,536	33,832/ 8,458*
	許 可	10,091	10,768	12,080	28,184/ 7,046*
総 使 用 C P U 時 間 <sup>c</sup>		8,489	8,508	12,770	20,092/ 5,023 <sup>e</sup> *
ジ ョ ブ 処 理 件 数 <sup>c</sup>		236,519	226,727	274,431	289,915
ライブラリプログラム新規登録数		10	118	160	39
データベース新規登録数		3	0	1	0
センター使用論文数 <sup>d</sup>		185	202	206	237

a : 機構内利用者にはアイドル課題のための重複を含まない。

b : 申請および使用の詳細については5.1項を参照

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

d : センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたもの。

e : S-810についてはSPUとVPUのCPU時間の単純な和である。

\* : 下段はM-680H基準

#### 1.4 通信と知能化

分子研の中では光ファイバーとイーサネットの組み合わせによるネットワークができて、実験装置と大型計算機がつながるようになった。BITNETもつながってアメリカやヨーロッパと情報のやりとりができるようになった。そうしてみると、国内の大学との間でデータ通信ができないのが何とも奇妙に見えてくる。最近のパソコンゲームからもわかるように計算機の方も知的能力を拡張しつつある。これからは人間と計算機が入り混って通信し合い、思考し合う、そういうことが今まで以上に一般化しそうである。

これまで述べてきたような状況の中で研究者はどのように行動すべきだろうか。パソコンやスーパーコンピュータの科学研究における位置付けを再検討することも必要だろう。人間と計算機との役割分担も考えなければならないだろう。計算する科学における独創性とは何か。我々が考えていかなければならないことが沢山ありそうである。



## 2. スーパーコンピュータ・ワークショップの活動

シミュレーションムービーと新開発の大型プログラムパッケージと題して第7回講演会を開催した。最近我が国でも数万行の分子科学のための大型プログラムが開発されたので、4人の開発者に来ていただいて講演をお願いした。外国製の輸入でなく独自のプログラムが次々に開発されるようになったことは研究の独創性のためにも大変喜ばしいことである。

計算の規模が大きくなり、量的質的に複雑なデータが得られるようになるに従い、計算結果を画像化することがますます重要になりつつある。特に物質系の時間的変化を追跡するシミュレーション計算の場合にはムービーとして表現することが研究の過程においても得られた知識の普及のためにも重要になっている。この会では5組の16mmやビデオの上映があり、カラフルでダイナミックな映像を楽しませてもらった。講演の内容は以下のようなものであった。これらはスーパーコンピュータ・ワークショップ レポート5にまとめられ、近く出版される予定である。

### 第7回公開講演会

(昭和62年2月19日午後)

☆ はじめに

分子研センター 柏木 浩

☆ CASSCFプログラムJASONの機能と高速化について

分子研センター 山本 茂義, 長嶋 雲兵  
柏木 浩

☆ 分子軌道グラフィックスと化学反応のシミュレーション (ビデオ)

日本アイ・ビー・エム基礎研  
小出 昭夫

☆ MOLYX ab initio program system

および一次元と二次元シュレジンガー方程式の数値解

慶大理工 岩田 末廣

☆ スーパーコンピュータによる流れのシミュレーション (16 mm)

宇宙科学研究所 桑原 邦郎

(昭和62年2月20日午前)

☆ 分子のCI計算プログラムKAMUYの特徴と機能

北大理 佐々木不可止, 田中 皓  
野呂 武司, 野村 力  
富樫 雅文, 関谷 雅弘

☆ 蛋白質内外における静電場・電位の数値計算

東大工 中村 春木

☆ 水の構造とエネルギーのゆらぎ (ビデオ)

分子研 田中 秀樹

(昭和62年2月20日午後)

☆ 分子軌道計算における大規模ソートについて

京大工 北尾 修

☆ SAC 85 について

京大工 中辻 博

☆ CGMSによるモレキュラダイナミックスのシミュレーション (ビデオ)

富士通 松浦 幸男

☆ 発熱反応をともなう多粒子系の計算機実験

京大工 川勝 年洋

☆ 蛋白質の立体構造のダイナミックス (16 mm)

九大理 郷 信広

### 3. 計算機システムの運用と使い方

#### 3.1 システムの特徴

当センターのシステムは昭和61年1月より図3.1.1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。

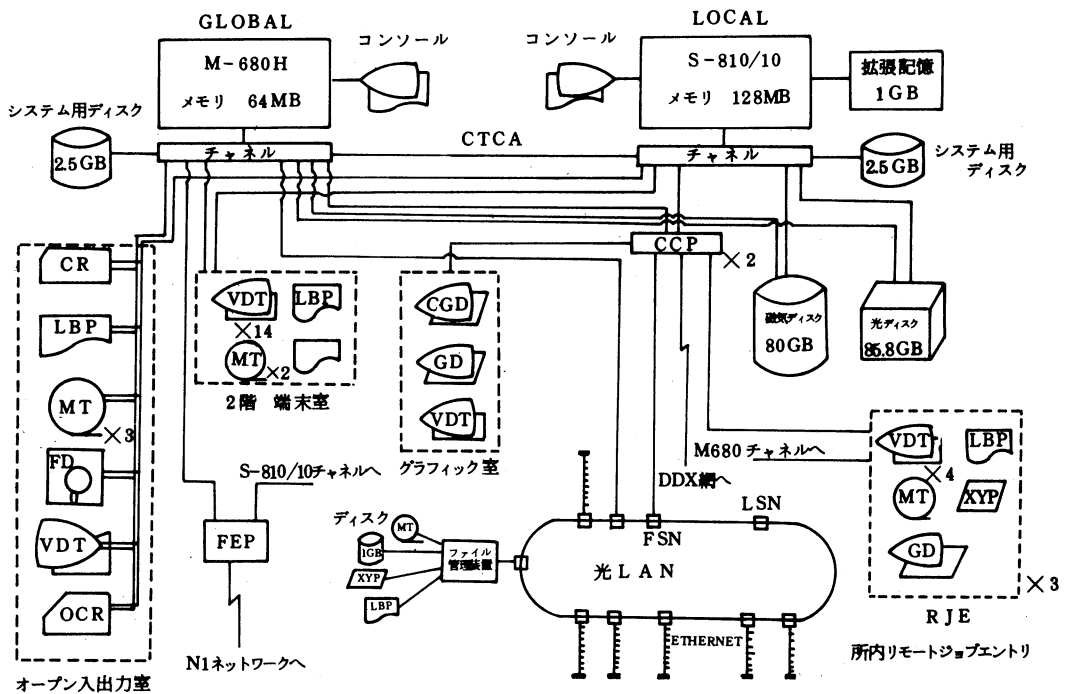


図 3.1.1 新システム 構成概念図

主記憶容量はM-680Hが64MB、S-810/10が128MBである。S-810/10には1GBの拡張記憶装置が付加されており、超高速のファイル入出力を行うことができる。

磁気ディスク容量は合計で85GBであり、そのうち5GBはシステム用、40GBは一般共用入出力用、残り40GBはパラレル入出力用に使われている。光ディスクは合計容量83.2GBを実装できる光ディスクライブラリが利用できる。

また所内には光ループネットワークとEthernetが張りめぐらされており、両者はゲートウェイを介して接続されている。またネットワーク内には24時間連続運転のサブホスト計算機としてフ

ファイル管理装置が設置され、実験データの収集・解析に利用されている。

### 3.2 ジョブクラスの構成とジョブ制御

#### M-680Hのクラス構成

クラス	CPUtime		基本REGION		拡張REGION		PIO	GRAPHIC
	(min.)		(MB)		(MB)			
	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	CPUtime		基本REGION		拡張REGION		ES	PIO	GRAPHIC	
	(min)		(MB)		(MB)					
	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	○	×

ジョブ制御の主な点は次の通り。

#### ① 資源管理（メモリ、パラレルI/O、拡張記憶等）の充実

各クラス共通にメモリ量、パラレルI/Oファイル数、拡張記憶容量といった利用可能資源が大きくなっているため、こうした大規模JOBを効率よく流すために柔軟な資源管理がな

される。

例えば、先のジョブクラス表のようにS-810では実装メモリの半分の実メモリを一個のジョブで要求できるとか拡張記憶の75%を要求できるなど。これは分子研固有のジョブスケジュール方式である。

## ② 遠隔地からの来所ユーザのJOB優先取り出し

遠隔地より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いただけるように、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数の保証枠は全体の30%である。これを越えた分は他の利用者と同等に扱われる。

## ③ 同一課題JOBの実行制御

従来は同一課題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、利用者の皆様にそういうJOB投入のないよう勧告していたが、今回システムが自動的に監視、制御を行うようになった。また全体多重度が低い場合には同一課題JOBであっても多重に実行する機能がある。

### 3.3 S-810の利用点数の改訂

S-810の利用率が高まり、M-680Hの利用率とのバランスを取るためにS-810の利用点数を改訂した。従来はベクトル化率が5%程度以上あるジョブはS-810で実行したほうが少ない点数で処理されるという設定であったが、今回の改訂ではベクトル化率が20%程度以上あるジョブでないと少なくなる。

具体的にはGAUSSIAN82を使う計算の場合、d軌道を含むHartree-Fock計算及びMP2などのPost-Hartree-Fock計算以外はM-680Hで実行したほうが少ない点数で処理されることになる。従来どおりベクトル化率が高ければ高いほどS-810で実行したほうが少ない点数で処理されるという設定はかわらない。

新しい利用点数の算出式は以下の通り。

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

CPU<sub>m</sub> : 全CPU時間 (M-680H)

CPU<sub>s</sub> : 全CPU時間 (S-810)

VPU<sub>s</sub> : ベクトル演算器のCPU時間 (S-810)

LP : 出力枚数

DISK : DISK使用総量 (MB)

パラメータの値は、以下の通り。

- a : 0.10/sec. (変更なし)
- b : 0.055/sec. (旧: 0.045)
- c : 0.055/sec. (旧: 0.045)
- d : 0.045/ページ (変更なし)
- e : 0.00067/MB \* hr (変更なし)

各々の計算機におけるCPU 1時間当りの点数は、以下のようになる。

M-680H	360点
S-810	198点

ただし、許可された計算機1時間に対し400点が割り当てられた。

### 3.4 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

#### 3.4.1 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こと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7MB以下のとき

基本領域のみで使える。M-680Hでは、基本領域の量はJOBスケジュール制御の対象にならない。必要最小限を確保するように、例のようにMAIN文のREGIONパラメータを指定する。(xxxxは実際に必要な量)

```
例 // * MAIN SYSTEM = M 6 8 0 ,  
    //           REGION = (xxxxK)
```

###### b) 必要な主記憶領域が7MB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る。

(xxは実際に必要な量)

```
例 // * MAIN SYSTEM = M 6 8 0 ,
```

／／ REGION=(, xxM)

なお、拡張領域を使うためにはリンクエディタ、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(0.5MB)で十分である。M-810では、基本領域の量、拡張領域の量ともJOBスケジューリング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る。(xxは実際に必要な量)

例 例／／\*MAIN SYSTEM=S810,

／／ REGION=(, , , xxM)

### 3.4.2 拡張記憶装置(ES)及びパラレルI/Oの使い方

拡張記憶装置の量は、JOBスケジューリング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スケジューリング制御の対象になる。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とも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。M-680H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。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る。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る。

(MAIN文には、PRL=YES, DD文には、PRL=\*を指定する。)

例1 拡張記憶装置(ES)の指定の方法(xx, yyy, zzは実際に必要な量)

／／\*MAIN SYSTEM=S810,

／／ REGION=(, , , xxM),

／／ ESTORAGE=yyyM

.....

／／ FT10F001 DD DSN=&&WK1,

／／ UNIT=ES, SPACE=(MB, (zz))

／／ 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=.....,  
// PRL=*
```

拡張記憶 (ES) は従来の磁気ディスクと同じような JCL を書いて使えるが、磁気ディスクと異なり領域を増やす際に最大 16 回までの増分という制限がない。しかも ES は非常に I/O 速度が高速であり、この領域拡大に要する実時間はわずかである。また、DCB パラメータも指定する必要がない。従って例えば以下のように JCL を書くだけで充分である。

```
// FT99F001 DD UNIT=ES, SPACE=(MB, (1, 1))
```

### 3.5 プロジェクト管理, データセット保護機能 (TRUST) の使い方

5月6日より「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への変更になった。データセットの保護を強化するために、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はお互いに参照ができるように設定してある (READ)。既存のデータセットの属性は従来 (SAFE) の設定のままとなっている。これらも含めてすべて属性変更するには以下のTRCHANGE コマンドのデータセット名のところで \*, \* のようなワイルドカードを使用すれば一括して変更できる。

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び範囲を4通りのレベルで指定できるようになった。権限の変更や許可を行うコマンドも変わったのでSAFEとTRUSTのコマンドの簡単な対応表を示す。

(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き込みができる
MEMBER	区分データセットのメンバーを作成できる
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)

(SAFE/TRUST コマンド対応表)

<u>SAFE</u>		<u>TRUST</u>		
コマンド	パラメータ	コマンド	オブジェクト	パラメータ
DSLIST	DATASET ( )	TRLIST	DATASET	NAME ( )
PERMIT	データセット名 ID ( ) ACCESS	TRPERMIT	DATASET	データセット名 TO ( ) RIGHT ( )
INHIBIT	データセット名 ID ( )	TRINHIBT	DATASET	データセット名 TO ( )
DSALTER	データセット名 DAA ( ) — LOCK UNLOCK	TRCHANGE	DATASET	データセット名 ALLSAA ( ) GRPSAA ( ) LOCK UNLOCK
ACCOUNT		TRMANAGE		
CHANGE	(ユーザ登録名) BGT ( ) NT1 ( ) NT2 ( )	CHANGE	USER	(ユーザ登録名) BGT ( ) NT1 ( ) NT2 ( )
CHGBGT	(ユーザ登録名) UF (00)	CHANGE	USERRESULT	ユーザ登録名 UF (00)
LIST	(ユーザ登録名)	LIST	USER	ユーザ登録名
LISTGRP		LIST	GROUP	

以下にはSAFEに比べて新しく加わった機能を中心として、ユーザの権限情報や属性情報を変更する方法を示す。

- (1) 全ユーザに対する標準アクセス権限をNONEからUSEに変更する。

```
TRCHANGE UATTR DSALLSAA (USE)
```

- (2) グループ内ユーザに対する標準アクセス権限をREADからUSEに変更する。

```
TRCHANGE UATTR DSGRPSAA (USE)
```

- (3) 標準アクセス権限を指定したモデルデータセットに対して与えられているアクセス権限とする。

```
TRCHANGE UATTR MODEL (M. DATA)
```

たとえばM. DATAのデータセットに与えられているアクセス権限が全ユーザに対してNONE、グループ内ユーザに対してREAD、AB1CD2のユーザに対してMEMBERになっているとすると今後新たに作成されるデータセットには同じアクセス権限が付与される。

※この機能を使うことによってほかのユーザやグループに対する指定が容易にできる。データセットに対して特定のユーザやグループの許可および禁止の情報を与えるにはTRPERMIT, TRINHIBTコマンドを使う。

- (4) パスワードをABCDに変更する。

```
TRCHANGE PASSWORD ABCD
```

- (5) ユーザの属性、予実算、データセット保護の情報を表示する。

```
TRLIST UATTR
```

```
TRLIST URSLT
```

```
TRLIST DS
```

- (6) プロジェクトの代表者がメンバの属性、予算の情報を変更する。(TRMANAGEのサブコマンド)

- A. メンバAB1CD3に1時間を与える。

```
CH U, (AB1CD3), BGT (400)
```

- B. メンバAB1CD3に保存データセット容量1MBを与える。

```
CH U, (AB1CD3), NT1 (1000)
```

- C. メンバAB1CD3の実算超過フラグをクリアする。

```
CH URSLT, AB1CD3, UFLAG (00)
```

### 3.6 ASPENの機能強化

10月よりASPENエディタは機能強化されて02-00バージョンになった。主な変更点は以下の通り。

#### (1) HELP情報のプリンタへの出力

ASPD OC コマンドによりASPENの使い方のマニュアル（HELP情報）をレーザープリンタに出力できる。

ASPD OC NATIVE (NまたはE) SYSOUT (D)

N : 日本語 E : 英語

#### (2) SYSOUT編集機能の追加

機能選択メニューで8または@SLISTを指定すると、SYSOUT編集を行うことができる。

ジョブを選択するとスクラッチ上での編集となり、データセットに出力させる場合には、Wコマンドを使用する。

W @@SYSOUT. OUTLIST

@EDITのように複数のスクラッチをもっていないので、SYSOUT編集は1ジョブずつしか処理できない。スクラッチをプリンタに出力する場合はWPコマンドを使用できる。ただし、現在のところすべてベタ出力（改ページ制御は行われない）になる。

WP CLASS (C)

#### (3) RETURN, BACKコマンドは削除, HOMEコマンドを追加

RETURN, BACKコマンドは削除された。現在行っている機能を終了させて、元の画面に戻す場合にはQUITコマンドを使う。QUITコマンドにRETURNコマンドの機能が追加されている。

コマンド投入領域にカーソルをもどすHOMEコマンドが追加された。いままでは、復改（送信）でいつもコマンド投入領域にカーソルがもどっていたが、今回HOMEコマンドによってカーソルをもどすように変更し、復改（送信）ではカーソルはそのままとなっている。HOMEコマンドはPFキーの12番（PF12）に定義されている。

#### (4) RPコマンドでの複数行指定の複製

いままで単一行指定の複製しかできなかったのを、行範囲指定で複数行の複製ができるようにした。

#### (5) 行モードでの機能追加

シスアウト編集、TSSコマンド実行機能が使用できる。編集の時、EDITと同じように

疑似スクリーン編集（行単位）ができる。（行番号指定のテキスト入力が

10 > TEXT…………でも

10 < TEXT…………でもどちらでもよくなった）

行モードでの起動方法

ASPEN データセット名 LINE

ASPEN + JOB（ジョブ名）LINE

(6) パソコン端末での機能追加

シスアウト編集，TSS コマンド実行機能が使用できる。

ASPENの画面制御に対応できるパソコン用通信プログラムがパソコン側に必要である。このプログラムがない場合には，行モードで使用のこと。

この機能を使う場合には，TSSセッション開設時のターミナルタイプに必ずTERMDを指定する。

（起動方法）

ASPEN データセット名 PSCM

ASPEN + JOB PSCM

(7) 画面コマンドをリセットするRSコマンドのサポート

固定表示行，一時消去行，16進表示行，スケール行，Lコマンドによる表示行などの表示を解除し，通常の表示にもどす。

(8) Lコマンドのサポート

指定または検索した行のみを表示する。

Lコマンドで表示されたデータに対して，DDコマンドなどの行範囲を指定するコマンドを使用する場合には，表示されていない行でも行範囲に入っていれば対象になることに注意。

例 ABCDを含む行を全て画面に表示する。

G / ABCD / L

(9) A，Fコマンドでのくりかえし指定のサポート

AおよびFコマンドをオペランドなしで投入すると前回の動作を繰り返すことができる。

（AコマンドはRF13に，FコマンドはPF14に定義済み）

### 3.7 新FORTRANの公開

昭和62年4月より新FORTRANを公開した。

新FORTRANの主な特徴は、最適化機能（ベクトル機能も含む）の強化、ステートメント数等の量的制限の撤廃にある。今までの調査では、新FORTRANでコンパイルしたプログラムの実行速度は、多くの場合以前のものに比べ1.0～1.3倍ほど速くなる。ただしこの比率はプログラムやデータによって変化する。

使用方法は従来とほとんど同じで、バッチジョブの場合、FORTECLG, FORTECL, FORTECGのようにFORTの後にEのつくカタプロを使用する。展開形を使用する場合は、'SYS1. FORTELIB'をJOB LIBやSTEPLIBに定義する。TSSではLIBコマンドやリンケージのLIBオペランドで'SYS1. FORTELIB'を指定する。

M680で走らせるプログラムの場合は、コンパイルオプションにSOPTを指定するとかなり最適化される。ただし結果のチェックを忘れないように。

・注意事項としては、

- 1) コンパイル時に必要なメモリサイズがプログラムによって変わるということである。拡張領域がメモリとして主に使用されるが、サブルーチン等のプログラムモジュールのソース枚数が500枚の時、コンパイルオプションOPT(3), NOHAP指定時で1.2MB程度、HAP指定時だと1.4MB程度必要である。1,000枚になると、NOHAPで2.0MB程度、HAPで2.3MB程度必要となる。ただしモジュール内のCOMMON変数や引用するサブルーチンの数が多い場合は、更にメモリを必要とする。
- 2) コンパイルにかかるCPU時間が4倍程度長くなる。63/3末に改善される見込み。
- 3) 新旧オブジェクトモジュールの混在は、I/Oをしているモジュールとアセンブラルーチンと呼んでいるもの以外は可能である。混在させる場合は実行時ルーチンの取り込みに際し、以前のものを先に取り込むようにすること。具体的にはLINKの際にSYSLIBを以下のように指定する。

・バッチJOBの場合

```
// SYSLIB DD DSN='SYS1.FORT7LIB', DISP=SHR
.....以前の実行時ルーチンライブラリ
// DD DSN='SYS1.FORTELIB', DISP=SHR
.....新しい実行時ルーチンライブラリ
```

・TSSJOBの場合

RUN.....LIB (#SYS1. FORT7LIB, #SYS1. FORTELIB)

または

LIB (#SYS1. FORT7LIB, #SYS1. FORTELIB)

### 3.8 新ベクタイザの公開

62/4月より新FORTRANコンパイラの公開にともない、ベクタイザの新FORTRAN対応版を公開した。従来より当センターで開発し、公開していたVREPOとほぼ同じ機能を含んでいる。ただし以前のベクタイザに比べ、実行回数等の精度が若干悪くなっている。(現在改造中)

使用法は以前と変わらない。以下のカタプロを使用できる。

VELOOP.....以前のVECDOSOに対応

VECMODU.....以前のVECTMAPに対応

### 3.9 PL/1の31ビットアドレスサポート

従来からの御要望のあったPL/1の31ビットアドレス化が61/10月よりできるようになった。ただし入出力機能、ビット操作機能に一部制限がある。次のものは31ビットモードでは使用できない。

- (1) マルチタスク機能
- (2) COBOLとの言語間連絡機能
- (3) DELAY文及びEXIT文
- (4) 共同ライブラリ機能
- (5) ライブラリ呼び出しとなるビット列操作及びライブラリ呼び出しになるビット列のデータ変換

但し、ライブラリ呼び出しとなるビット列の代入と比較については演算項にSUBSTR組み込み関数、SUBSTR擬変数、DEFIND変数が出現しない範囲でサポートする。

- (6) GET STRING文及びPUT STRING文でのビット列操作
- (7) ビット列変数に対するCHECK条件の標準システム動作
- (8) レコード入出力機能(但し、TOTALオプションのないCONSECUTIVE BUFFEREDファイルのみ使用可能)

PL/1は2つの入出力機能を提供している。

① 流れ入出力 (GET文, PUT文)

② レコード入出力 (READ文, WRITE文等)

レコード入出力はデータセット編成により, 下表のように分類される。31ビットサポート範囲及び代替手段との関係を表に示す。

ファイル種別	31ビットサポート範囲	制限機能の代替手段
CONSECUTIVE	TOTALオプションのない BUFFEREDファイルのみサポート	1. TOTALオプションの指定を削除する。 2. EVENTオプションによる非同期入出力は, EVENTオプションと対応するWAIT文を削除し,同期入出力にする。
VSAM	BUFFEREDファイルのみサポート (EXCLUSIVE属性はサポートしない)	1. EXCLUSIVE属性による入出力排他制御は代替手段なし。 2. CONSECUTIVEファイルの2項と同様に同期入出力を使用する。
REGIONAL (1) REGIONAL (2) REGIONAL (3)	サポートしない	1. REGIONAL (1)はVSAMのRRDSへ移行する。 2. REGIONAL (2), REGIONAL (3)は代替手段なし。
INDEXED	サポートしない	VSAMのKSDSへ移行する。

(9) チェックポイント/リスタート機能

(10) 漢字機能のうち, PLIKCNV, PLIFORM, PLIFCBL組み込みサブルーチン

(11) コンパイラ組み込み時のOPLIOPT1及びOPLIOPT2マクロ呼び出し文のTSTAMPオプション

### 3.10 KGRAF, BGRAF

日立製作所提供の図形処理ソフトウェアKGRAF, BGRAFが利用できる。従来のGPSLとの相異点は,

(1) グラフィックスの国際標準 GKS (Graphical Kernel System) に準拠したユーザーインターフェース。

(2) T-560/20, カット紙型レーザプリンタに出力できる。T-560/20に対しては色の指定

も可能。

(3) MODE/FNTと連携し、高品質図形文字を表示できる。アルファベットに関してはさまざまな字体が用意されている。

KGRAFは線、マーカー、円、領域の塗りつぶしなどのプリミティブな作画を行うためのサブルーチン群で、BGRAFはこれらを用いて事務処理でより使われる折れ線グラフ、棒グラフ、円グラフ等の作画を行うためのサブルーチン群である。

KGRAF、BGRAFコマンドを投入することにより、KGRAF、BGRAFのサンプルプログラムを起動し、T-560/20のディスプレイ上に図を表示させることができる。また、マニュアルは下記のものでセンター端末室に設置されている。

「汎用グラフ作成プログラム KGRAF 解説」 8090-3-339

「ビジネスグラフ作成プログラム BGRAF 解説」 8090-3-338

### 3.11 光ディスクシステムの利用

利用申請が許可されている各プロジェクトは、50MB（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する。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（2.6GB）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きかないが、大容量であることを考えると実用上あまり支障はないと思われる。

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/ディスマウントが自動で行われるために、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する人も多かったようだが、MTの代わ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とと思われる。

### 3.12 DBM（Data Base Manager）

DBMは、日立提供のリレーショナルデータベース管理システムRDB1を用いて個人用のリレーショナルデータベースを使用できるようにするために、センターが開発したシステムである。



RDB1を用いて個人データベースを構築する場合や後述するDSM(Data Set Manager)を使用する場合に、データベースの利用申請をこのシステムを用いて行う。利用申請した次の週の月曜日からデータベースを利用できるようになる。

データベースの更新、検索などの作業は日立提供のソフトウェアACE3(スクリーンモード)やEQL(ラインモード)によって行う。データベースが格納されるデータセット名は固定でRDB.DATAというユーザデータセット(VSAM編成)になる。このデータセットの中に複数のデータベース(テーブル)が作られる。

### 3.13 DSM(Data Set Manager)

ユーザデータセット情報を管理するためのシステム、DSM(Data Set Manager)をセンターとFHLで開発した。計算機の性能向上にともないユーザデータセットの数は増大する一方であるが、このシステムはデータセット情報の管理を支援するためのソフトウェアである。これには日立提供のリレーショナルデータベース管理システムRDB1が使われている。

ユーザデータセット情報を以下の4個のテーブル(データベース)に格納する。これらのデータベースをDSDB(Data Set Data Base)と総称する。データセット作成日付、削除日付、DCB情報などが自動的に蓄積されていく。

- ① ユーザの全データセットの情報
- ② ロードモジュール以外の区分編成データセットのメンバー情報
- ③ ロードモジュールデータセットのメンバー情報
- ④ ユーザジョブの情報

上記の④のテーブルにはバッチジョブを流した場合に、ロードモジュールを核にしたデータセットの参照関係が自動的に格納される。ジョブの通し番号、JCL中のコメント、CPU時間、リターンコード、ステップ名などの情報も格納されるので、ジョブの管理にも役立つ。

このシステムの利用を希望する方はまず、コマンド「DBM」を投入する。このコマンドによってこのシステムの利用申請を行う。申請をすると次の月曜日から自動的にこのシステムが使えるようになる。DSDBの中のデータセット情報(テーブル①-③)は毎朝システム立ち上げ時に最新のものに更新される。その後に情報を更新したい場合は、新設のコマンド「DSM」を使って更新できる。テーブル④はジョブの終了後にデータが更新される。

### 3.14 DDX-TP PADパラメータの自動設定

DDX-TP（第2種DDXパケット網）では申し込み時にPADパラメータの設定として標準プロフィールの14を指定しているが実際のところ、これでは端末の属性を十分にいかすためには不十分であった。従って今迄は端末側から毎回設定の変更が必要であった。そこで此の度このパラメータの属性をホスト計算機（M-680H）側から最適なものに自動修正する機能ができたのでより使いやすくなった。

パラメータの修正は以下のように行われる。

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
標準プロフィール14	1	0	2	0	1	1	1	0	130	80	2,3,8	1	0	6
修正後	1	0	2	0	1	1	21	0	0	0	2,3,8	1	0	0

### 3.15 新端末の導入予定

現在センターとRJEステーションに設置してあるT-560/20 端末をワークステーション 2020 Eに置き換える。これは2020の上位機種であり、導入時期は62年度秋ごろの予定。ハードウェア構成、ソフトウェア構成については現在詳細を検討中で、T-560/20の機能はすべて備えているだけでなく、以下のような新しい機能が使えるようになる。

- 1) 漢字、英小文字、カナが扱える。
- 2) フロッピーディスクを内蔵しており、MS-DOSが使用できる。
- 3) ホストとの高速なファイル転送機能を持っている。

### 3.16 Ethernet 端末の設置

分子研究所内のEthernetが本格稼働を始めた。これに伴いセンター2階の端末室にも1台Ethernet 端末（PC9800E）を設置した。これは主にファイル転送（IFIT-TSS）に利用すると便利である。利用できる媒体は5インチ2HD、2DD、3.5インチFDである。転送速度はレコード長に依存するが、1280BYTE長るとき24KBPS程度となっている。最高1.5KBまでのレコード長が許される。

### 3.17 各種コマンドの追加

#### 3.17.1 SOMへのPRINT2（PR2）サブコマンドの追加

SOMのサブコマンドとしてPRINT2を登録した。PRINT2は、カット紙型レーザープリ

ンタに出力する場合に、n, n-1, ---, 3, 2, 1 ページの順に出力することにより、全ページ終了後ページの並びかえをしないでよいようになっている。あわせて左上ページにページ番号、ユーザ登録名、出力日時が印刷される。PRINT 2 は出力クラス C で A 4 横のみをサポートしている。なお、200 ページをこえて出力することはできない。

### 3.17.2 ジョブの動作状況の表示コマンド

ジョブの動作状況を表示する JOBUS コマンドを作成した。

ジョブの CPU, VPU, I/O, 拡張リジョン, ES の使用状況がわかる。情報収集はコマンド投入時ではなく、数分間隔でシステムが自動的に収集したものを表示している。従って、その時点で実行していないジョブの情報は表示されない。次に示す表示例には他のユーザのジョブも表示されているが、実際のコマンドでは自分のジョブだけが表示される。

* M680 : CPU *	CPU	CPU	I/O					
	USE	WAIT	WAIT					
AD4DZ7AL DTHU1	46%	54%	0%					
CD1EJ6BR EX1	38%	62%	0%					
AI3FG6BB EX	4%	1%	95%	} I/O のためになかなか CPU がもらえない				
AI3FG6ST EX	3%	0%	97%					
ZA1AM7N1 NCP01	0%	3%	97%					
TOTAL	98%							
* M680 : I/O *	DDNAME	BUSY						
AI3FG6ST EX	FT03F001	100%	} I/O の割合が高い場合は、単位時間あたりの I/O をへらす工夫をしたりパラレル I/O を使うようにするとよい					
ZA1AM7N1 NCP01	SYSPUNCH	100%						
AI3FG6BB EX	FT03F001	100%						
* S810 : CPU *	VPU	CPU	CPU	I/O				
	USE	USE	WAIT	WAIT				
AA6BF9V4 JASON2	54%	69%	31%	0%	} --- ES を使っているため I/O 時間がなく CPU をたくさんもらえている			
BLOAC1EE MARINA1	24%	31%	31%	38%				
TOTAL	77%	100%						
* S810 : I/O *	DDNAME	BUSY						
BLOAC1EE MARINA1	FT56F001	35%						
* S810 : EX-REGION *	UNUSE	USE	RESERVE	FREE				
AA6BF9V4 JASON2	10092K	6292K	16M	} システム全体で空いている量				
BLOAC1EE MARINA1	5764K	2428K	8M					
TOTAL			24M	88M				
* S810 : ES *	FILE							
	DDNAME	UNUSE	USE	RESERVE	UNUSE	USE	RESERVE	FREE
AA6BF9V4 JASON2	FT46F001	20M	OK	20M	37M	43M	80M	} DD 文で指定した量
	FT93F001	136K	13M	13M				
	FT99F001	1012K	12K	1M				
	FT95F001	1024K	OK	1M				
	FT94F001	980K	44K	1M				
	FT92F001	1000K	24K	1M				
	FT91F001	988K	36K	1M				
	FT65F001	1012K	12K	1M				
	FT62F001	988K	36K	1M				
	FT49F001	874K	148K	1M				
	FT48F001	992K	32K	1M				
	FT61F001	984K	40K	1M				
TOTAL					80M	944M		

### 3.17.3 ジョブ実行待ちの理由の表示

ジョブの実行状況や待ちジョブの状況はJOBSCコマンドでみることができる。

実行待ちジョブの待ち理由がわかるように、JOBSCコマンドで表示される情報に理由のマークを付けた。

ジョブが待たされる理由には次のようなことがあげられる。それぞれの場合@や&マークの位置は次のようになる。理由がいくつも重なっている場合でも1個のマークしか付かない。

- (1) 最大多重度に達している。プロセッサ名の横に&で表示。

(所外の利用者がセンターに来てジョブを実行させる場合、優先処理をするために最大多重度は若干変動する。)

- (2) そのクラスのイニシエータがみんな使われている。

ジョブクラスの横に@で表示。

- (3) メモリと拡張記憶の資源がみんな使われている。

資源の要求量の横に&で表示。

- (4) メモリと拡張記憶の枠がみんな使われている。

資源の要求量の横に@で表示。

(枠は多くの資源を使うジョブと少ししか使わないジョブがバランスよく流れるように設けられている。)

- (5) 一定以上混雑している場合は、同一ユーザのジョブは1本ずつ処理される。ジョブ名の横に@で表示。

- (6) ジョブ名が7文字まで同じジョブは順番に処理される。

後続のジョブは待たされる。

ジョブ名の横に@で表示。

表示例

JOBSC		M680		S810		ES		PIO	
#	DATE=86-10-31 TIME=15:54	BASIC	EXTEND	BASIC	EXTEND				
* EXECUTING JOB		KB	MB	KB	MB				
B	CH2BE100(60594)	M680	2000	4	0	0	0	0	0
C	CE3EY3C5(59471)	M680	3000	4	0	0	0	0	0
D	CE6EV8BB(60412)	M680	7168	4	0	0	0	0	0
D	AC7BY3Z1(60512)	M680	7000	4	0	0	0	0	0
D	AD4DZ7T0(60525)	M680	7000	20	0	0	0	0	0
B	AI4FG8H2(60436)	S810	0	0	1000	2	0	0	0
B	BO1AJ4D2(60558)	S810	0	0	1000	11	240	0	0
C	CC7BG2C3(60406)	S810	0	0	2000	5	0	0	0
C	CZ0DQ5PH(60410)	S810	0	0	1000	28	128	0	0
D	AI5FI6MI(60264)	S810	0	0	1000	15	450	0	0
D	CC1AL7CI(60505)	S810	0	0	1000	27	0	0	0
* AWAITING JOB									
A	AI5FI6TM(60506)	S810	0	0	1000	15	450	0	0
B	BO1AJ4S2(60601)	S810	0	0	1000	11	0	0	0

### 3.17.4 文字列検索のためのFINDPコマンドの新設

東京大学大型計算機センターに登録されているFINDPコマンドを当センターに移植した。このコマンドは、区分編成ファイルの全メンバー（メンバーを選択することもできる）、順編成ファイルの中の文字列を検索するものである。簡単な使用方法を以下に示す。

```
FINDP DSN [, MEMBER (      )]
```

MEMBERパラメータはデータセットが区分の場合で、特定のメンバーを選択したいときに使う。

以下に実際の使用例を示す。abc.fort という区分編成ファイルの中の文字列“SUBROUTINE”を捜す場合である。

```
READY
findp abc.fort
Findp V-2.2 ( 27 SEP 85):   1 MAY 87 - 12.55.43
Enter search pattern after '@'-prompt.  C/R to END.
@SUBROUTINE
VHKH01 : _____メンバー名
  1:      SUBROUTINE VHKH01(V,W,NSTAT,NL,NFT,NRX,AA,HH,JJ)
VHKH02 :
  1:      SUBROUTINE VHKH02(V,W,NSTAT,NL,NFT,NRX,HH,JJ)
VHKOR3 :
  1:      SUBROUTINE VHKOR3(NFT,NWKS,H,NRX,HBUF,JJ,JORD,NS)
  20:      + '**** SUBROUTINE VHKOR3 START'
  42:      + '**** SUBROUTINE VHKOR3 ENDED'
VHKRV4 :
  1:      SUBROUTINE VHKRV4(C)
@
End time: 12.55.56.  CPU time:133-Ms
READY
```

### 3.17.5 ABACUSコマンドの新設

上田和紀さん（東大・工・計数）が作成され、東京大学大型計算機センターに登録されているABACUSコマンドを移植した。ABACUSは、TSSコマンドのレベルで簡単な算術式の計算を行う。変数、関数も扱えるので大型計算機上で関数電卓と同等のことができる。ちょっとした計算をする時に便利である。簡単な使い方の例を以下に示す。

下線はユーザの入力

```
READY
ABACUS
1000 * 40.0 / 199.11
200.893978203
10**2
100.000000000
A=3.333
A=3.33300000000
```

```

SQRT(A)
. 1.82565056898
A**2
11.1088890000
A = 1E-02 * (3.0 + 5.3)
A=8.300000000000E-02
SQRT(A**3)
2.39120680829E-02

READY

```

関数としては以下のものができる。

EXP .....	指数関数 (底はe)	SQRT .....	平方根
LN, LOG, LOGE .....	自然対数	CBRT .....	立方根
LOG 10 .....	常用対数		
SIN .....	正弦関数	ARCSIN, ASIN .....	逆正弦関数
COS .....	余弦関数	ARCCOS, ACOS .....	逆余弦関数
TAN .....	正接関数	ARCTAN, ATAN .....	逆正接関数
COT, COTAN .....	余接関数		

注) 三角関数, 逆三角関数は弧度法による。

また定数には以下のものがある。

```

PI .....
```

円周率

```

RAD .....
```

180 / PI

```

WIDTH .....
```

12

WIDTHは、数値を印字するときの有効数字のけた数。ユーザが変更することもできる。

## 4. 一 般 報 告

### 4.1 分子研ライブラリプログラムの収集と開発

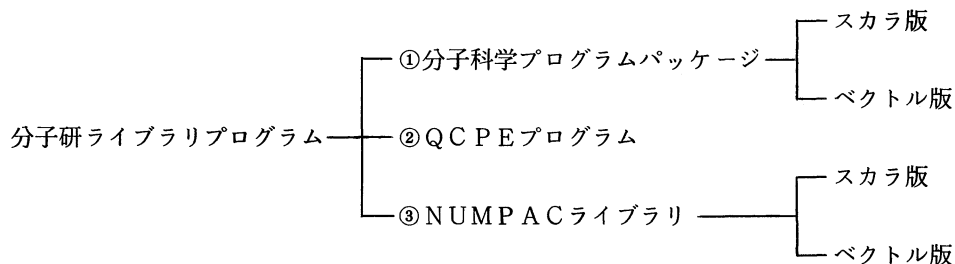
昭和61年度のライブラリ開発計画を表4.1.1に示す。開発されたライブラリは新規プログラムの登録あるいは既存プログラムの改良・発展というかたちでライブラリ管理システムを介してユーザに公開されている。

表 4.1.1 昭和61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 黒子 弘道	東工大 助教授 研究生 大学院生 大学院生	NMRカップリング計算プログラムの開発
2	小杉 信博	東大 助手	分子軌道計算プログラム群のベクトル化
3	寺倉 清之 柳瀬 章 石田 浩	東大 助教授 大阪府大 教授 東大 助手	固体バンド計算のプログラムFLAPWの開発
4	片岡 洋右	京大 助手	CCP5のプログラムパッケージの整備登録
5	佐々木 不可止 田中 皓 岩城 宏明	北大 助教授 講師 大学院生	新CIプログラムKAMUYのレベルアップ
6	田中英次 荒川 透	阪工大 非常勤講師 阪市大 研究生	CI計算プログラムGSDTCIの開発
7	二宮 市三 秦野 甯世	中部大 教授 中京大 助教授	汎用数学計算プログラムNUMPACのベクトル化
8	小浦 延幸 高見 則雄	東理大 助教授 大学院生	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
9	岩田 末廣 依田 信幸 森山 誠司 橋本 健朗	慶応大 教授 大学院生 大学院生 大学院生	分子軌道計算のプログラム群MOLYXの開発

10	武藤良弘	慶応大 大学院生	有限要素法によるシュレディンガー方程式計算プログラムの開発
11	野村興雄	理研 研究員	MCSCFプログラムGAMESSのCADP AC版の整備
12	酒井嘉子 三好永作 富樫雅文	九大 助手 福岡歯大 助手 北大 研究生	モデルポテンシャルの関数データの整備
13	井川明 福留秀雄	東京電気大 助教授 京大 助教授	General Spin Orbital Hartree-Fock 計算のプログラムの開発
14	富樫雅文 イエジ・ルビンスキー	北大 研究生 大学院生	半経験的分子軌道計算プログラムMOPACの開発整備

分子研ライブラリプログラムの構成は以下の様に3部構成になっている。



①の分子科学プログラムパッケージには、国内および国外の研究者から提供されたプログラム、②のQCPEプログラムを現行システムにコンバートしたものなど約100件が収まっている。①のソースプログラムはデータセットとして磁気ディスク上にカタログされている。汎用機（M-680H）で実行させるためのスカラ版とスーパーコンピュータ（S-810）で実行させるためのベクトル版の2種を用意している。ライブラリプログラムの大部分については実行可能ロードモジュールも登録されているので、ユーザは即座にプログラムを実行することができる。

昭和61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6本である。

MPXALP MODEL POTENTIAL X-ALPHA METHOD  
 QCBDB QUANTUM CHEMISTRY BASIS SET DATA BASE  
 MOPAC A GENERAL MOLECULAR ORBITAL PACKAGE  
 JASON2 CASSCF CALCULATION WITH LARGE BASIS SET  
 SCMOLX MOLYX-SCF  
 CIMOLX MOLYX-CI



プログラム COMICA は MICA 3 で代替可能であるためライブラリより削除した。総件数は 135 件である。

②の QCPE プログラムは米国インディアナ大学に登録されている QCPE (Quantum Chemistry Program Exchange) プログラムを購入しているものであり、現在総件数 467 本である。量子化学の分野でよく使われる有名なプログラムのみならず、数学・物理・化学一般のプログラムも含まれており、非常に有益なものである。ほとんどは FORTRAN で書かれたプログラムで、ユーザには磁気テープによるソースプログラムの貸出サービスを行っている。

昭和 61 年度に新規登録した QCPE プログラムは以下の 12 件である。

```
QC0501  MM2: MOLECULAR MECHANICS II (VAX-READY VERSION OF QCPE 395)
QC0502  BILD: MULTICOLORED PLOTS OF 2-DIM. MANIFOLDS IN 3-DIM. SPACE
QC0503  IDS: ATOMIC INITIAL DENSITY FOR AB-INITIO SCF CALCULATION
QC0504  NBO: NATURAL BOND-ORBITAL WAVEFUNCTION ANALYSIS PROGRAM
QC0505  SURVIB: SURFACE FITTING AND VIBRATIONAL ANALYSIS PROGRAM
QC0506  AMPAC: SEMI-EMPIRICAL MO PACKAGE FOR CHEMICAL REACTIONS (VAX)
QC0507  DISGEO: DISTANCE GEOMETRY PROGRAM (VAX)
QC0508  POAV2: PI-ORBITAL AXIS VECTOR ANALYSIS
QC0509  CALCULATION OF MOLECULAR VOLUME AND SURFACE AREA
QC0510  RNGCFM: EXPLORATION OF MEDIUM SIZED RING CONFORMATIONS
QC0511  CYCPEP: SEQUENCE DETERMINATION OF CYCLIC PEPTIDES
QC0512  STRUCTURE: RAPID INTERACTIVE STRUCTURE INPUT AND GEOM.OPT.
```

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

昭和 61 年度、新たに以下の 21 本のプログラムを追加登録し、総件数は 826 本となった。

AGFBS	AGFBD	AGFB2S	AGFB2D	AICGAM	DICGAM	BESKNC
BESKNB	BESYNC	BESYNB	BYF	DYF	BKF	DKF
BESJFC	BESJFB	BESIFC	BESIFB	BROYDV	BROYDW	

以下、表 4.1.2 に現在登録されている分子科学プログラムパッケージの一覧を掲げる。

表 4.1.2 分子科学プログラムパッケージ一覧

==== IMS PROGRAM LIBRARY ====

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

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

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

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
-----	------------	---------------

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 MMIPI1 MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 100-ATOM MOLECULES  
003 MMIPI3 MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 300-ATOM MOLECULES  
004 MMIY3 MOLECULAR MECHANICS CALCULATION FOR 6-COORDINATED COMPOUNDS  
005 MDANO3 MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE  
006 CLAMPS CLAMPS: CLASSICAL MANY PARTICLE SIMULATOR  
007 BGSTR3 BIGSTRN3: A GENERAL PURPOSE EMPIRICAL FORCE FIELD PROGRAM

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 VREPRF FORTRAN PROGRAM ANALYZER FOR A VECTOR PROCESSOR.

FIELD CODE : GP10  
FIELD TITLE : GRAPHIC PROCESSING.

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

FIELD CODE : MI10  
 FIELD TITLE : MOLECULAR INTEGRALS.

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

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	SALS	STATISTICAL ANALYSIS WITH LEAST SQUARES FITTING
002	REDUCE	REDUCE-2 SYMBOLIC AND ALGEBRAIC PROGRAMMING SYSTEM
003	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 ANALISIS OF HIGH RESOLUTION NMR SPECTRA  
003 CHEMIC CHEMICS :AUTOMATED ORGANIC CHEMICAL STRUCTURE ELUCIDATION  
004 JHH 3JHH: NMR VICINAL COUPLING CONSTANTS  
005 FPTSPN NMR SPIN-SPIN COUPLIN CONSTANT CALCULATION BY FPT INDO  
006 FPTNMR CALCULATION OF NMR CHEMICAL SHIFT BY FPT-INDO/CNDO

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

NO. PROGRAM ID PROGRAM TITLE  
001 NCTB NORMAL COORDINATE TREATMENT OF MOLECULAR VIBRATIONS  
002 CVOA NORMAL COORDINATE TREATMENT OF CRYSTAL VIBRATIONS  
003 LSVR3 LEAST-SQUARES ANALYSIS OF VIB-ROT SPECTRA OF AN ASYM. TOP  
004 LSRES3 L.S. ANALYSIS OF VIB-ROT SPECTRA OF ASYM. TOP IN RESONANCE  
005 BC3 CALCULATION OF VIB-ROT SPECTRA OF ASYMMETRIC TOP  
006 BCRES3 CALC. OF VIB-ROT SPECTRA IN RESONANCE FOR AN ASYMM. TOP  
007 ENVLOP CALCULATION OF BAND ENVELOPES OF VIB-ROT SPECTRA  
008 DISPL3 DISPLAY OF THEORETICAL VIB-ROT SPECTRA  
009 ASSIGN ASSIGN DIAGRAM FOR THE ASSIGNMENT OF VIB-ROT SPECTRA  
010 ISLINE ATOMIC AND MOLECULAR SPECTRAL LINE DATA RETRIEVAL SYSTEM  
011 CHEMIC CHEMICS :AUTOMATED ORGANIC CHEMICAL STRUCTURE ELUCIDATION  
012 IR2 INFRARED SPECTRAL RETRIEVAL SYSTEM  
013 SERIES LOOMIS-WOOD DIAGRAM FOR FINDING LINE SERIES  
014 DIAVIB CALC. OF NUMERICAL VIBRATIONAL WAVEFUNCTION FOR DIATOMICS  
015 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	IPCREP	EFFECTIVE HAMILTONIAN MATRIX CONFIGURATION INTERACTION(EFCI)
010	PA200	LIST OF ONE- AND TWO-ELECTRON INTEGRAL LABELLS
011	PA300	EVALUATE ONE- AND TWO-ELECTRON INTEGRALS
012	PA409	CLOSED-SHELL SCF AND POPULATION ANALYSIS PACKAGE
013	PA600	ONE-ELECTRON PROPERTIES PACKAGE
014	INTCPY	INTEGRAL COPY ROUTINE OF POLYATOM SYSTEM
015	GAUS76	AB INITIO MO CALCULATION. GAUSSIAN 76 M-VERSION.
016	ALIS	AB INITIO MCSCF PROGRAM FOR ATOMS AND MOLECULES
017	JAPIC1	PLOTTER WRITING OF MO AND DENSITY BY AB INITIO METHODS
018	JAPIC2	PLOTTER AND GRAPHIC DISPLAY WRITING OF MO AND DENSITY
019	GUGACI	GRAPHICAL UNITARY GROUP APPROACH CI BY ISAAH SHAVITT
020	DRAWDG	DIAGRAM:GENERATION OF GOLDSTONE AND BLOCH-BRANDOW DIAGRAMS
021	GSCF2	PROGRAM GSCF2 WITH ONE-HAMILTONIAN AND PARTIAL SCF METHOD
022	GAMESS	GENERAL ATOMIC AND MOLECULAR ELECTRONIC STRUCTURE SYSTEM
023	GAUS80	GAUSSIAN 80 : AB INITIO MO CALCULATION (HITAC VERSION)
024	ALCHEM	ALCHEMY:AB INITIO ELECTRONIC STRUCTURE CALCULATION PACKAGE
025	CMQCA	CARNEGIE-MELLON QUANTUM CHEMISTRY ARCHIVE
026	ATOMCI	CONFIGURATION INTERACTION PROGRAM FOR ATOMS
027	CASSCF	A PROGRAM FOR COMPLETE ACTIVE SPACE SCF CALCULATIONS
028	PSHOND	PSEUDOPOTENTIAL VERSION OF MO PROGRAM HONDO
029	MELD	PROGRAM FOR MANY ELECTRON DESCRIPTION
030	JANIE1	NUMERICAL INTEGRATION OF ELECTRON DENSITY
031	GRAMOL	GRADIENT METHOD PROGRAM
032	COLMBS	COLUMBUS: A PROGRAM SYSTEM FOR SCF,MCSCF AND MR-SDCI CALC.
033	ATOMST	SCF PROGRAM FOR ATOMIC CONTRACTED STO CALCULATIONS
034	GAUS82	GAUSSIAN 82:AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS
035	MICA3	A PROGRAM SYSTEM FOR CONFIGURATION MIXING CALCULATION(CI)
036	SAC85	SAC/SACCI PROGRAM FOR GROUND,EXCITED,IONIZED AND ANION STATE
037	GSCF3	PROGRAM GSCF3 FOR SCF AND CI CALCULATION
038	QCBDB	QUANTUM CHEMISTRY BASIS SET DATA BASE
039	JASON2	CASSCF CALCULATION WITH LARGE BASIS SET
040	SCMOLX	MOLYX-SCF
041	CIMOLX	MOLYX-CI

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  
 008 MOPAC A GENERAL MOLECULAR ORBITAL PACKAGE

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	HMO	HUECKEL MOLECULAR ORBITAL CALCULATION
002	DVSCAT	NUMERICAL-BASIS-SCC-DV-XALPHA MO AND CLUSTER CALCULATION
003	GPQDD	GRAPHIC PROGRAM FOR QUANTITATIVE DRUG DESIGN
004	PPP	SCF-CI-PI-MO PROGRAM WITH PPP APPROXIMATION
005	HTB	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 \*\*\*\*  
 135

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

ALCHEM	ALIS	ASA	ASSIGN	ATOMCI	ATOMHF	ATOMST
BCRES3	BC3	BENDER	BGSTR3	BSIP	CASSCF	CGTOFD
CGTORL	CHEMIC	CIMOLX	CLAMPS	CMQCA	CNDOS	CNINDO
COLMBS	CONVRT	COUNTF	CRYSTA	CSACST	CVOA	DIAINT
DIABIB	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	JASON2
JHH	KURVLR	LAOCN3	LIBE	LSRES3	LSVR3	MDANO3
MDP	MDSALT	MELD	MICA3	MINDO3	MMIPI1	MMIPI3
NMIY3	MM2	MNDOC	MNDOM	MOLSCT	MOPAC	MPXALP
MULTAN	NASH	NCTB	NICER	NLPLSQ	ORTEP	OTHELO
OUTFIT	PA200	PA300	PA409	PA600	FDB	PFORTV
PGCCMB	PKIT	POTOPS	PPP	PROFIL	PRTXYZ	PSHOND
PSPART	PSTOPO	QCBDB	QCHECK	QLCDB	REDUCE	REPORT
RKNGAU	SAC85	SALS	SCEP	SCMOLX	SERIES	SFORT
STEREO	STERIC	STINGY	SUPPOS	TASP	TSS517	UNICS3
VREPR	WIGNER					

IMS COMPUTER CENTER: , LAST UPDATE = 87-06-16

## 4.2 データベース開発状況

分子研データベースとして以下の6件が登録されており、ユーザに公開している。

- (1) QCLDB (電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)

## 4.3 BITNETへの加入と試用

BITNETは世界21か国以上で利用されている最大規模の国際ネットワークである。これに含まれるノード数は毎月50ノードほど増え続けているので正確には把握できないが現在約2000ノードと推定できる。ニューヨーク市立大学(CUNY)が全体の世話役をしている。BITNETの機能は、IBM社のOSであるVM(Virtual Machine)の一つの通信機能であるRSCS(Remote Spooling Communication Subsystem)のプロトコルを使用して作られている。ノード間の接続は9600BPSの専用線を使用してストア&フォワード方式で情報転送が行われる。

使用目的は次の通り。

- (1) 電子メール
- (2) ファイル転送
- (3) 対話式メッセージ交換(おしゃべり)
- (4) データベースの検索(BITSERVE)

欧米の研究者の間ではプログラムも、実験データも、手紙も、論文下書きも全てBITNETで送るという状況になりつつある。送り出されたメールは各地のノードを経由して1時間から1日程度で先方へ到着するのが普通である。

岡崎国立研究機構内でも、分子研、基生研、生理研等から設置の希望が出ており、また欧米の研究者からも早く設置して欲しいとの声がよく聞かれた。日本でのキーノード(CUNYに専用線で繋がっている)は東京理科大で、そこにIBM機を持っている金沢工大、大阪工大、名商大等が接続されている。機構がこれに参加するには現状ではIBM機かDEC機のVAXを持ついることが必要であったため、基礎生物研のVAX-11/780をノード機とすることにした。接続先としては最も機構に近い名商大に接続することにした。こうした1年近くの準備ののち、6月1



日より1年間試験的に加入し、試用することが可能となった。今回の試用はあくまで機構内利用者に限って試験的ということになっている。

なお、BITNETによるメールの送・受信についてのエンドユーザの費用負担はない。

なお、機構内一般公開に先立ち6月1日13:30より職員会館2階でBITNET説明会を開催し同時に手引きの配布を行った。これには60名を超える参加者があった。

#### 4.4 プログラム相談

プログラム相談

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

##### (1) 一般プログラム相談

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

一般利用を行う上での相談を受けている。

##### (2) 応用プログラム相談

相談員は所内外の研究者（主に理論系および電算機センターの受託大学院学生）に委嘱している。相談内容は、ライブラリ・プログラム、その中でも特にGAUSSIAN80, 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。

#### 4.5 研究会・学会報告

##### 4.5.1 Gordon Research Conference on Computational Chemistry

昭和61年8月18～22日 Colby Sawyer College, New Hampshire, U.S.A.

- New Supercomputer System, Quantum Chemistry Databases and Some Calculations on Metal Complexes

- 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システムの特徴、量子化学文献および基底関数データベース、金属錯体の分子軌道計算とコンピュータグラフィックスについて紹介した。

#### 4.5.2 情報化学討論会

昭和61年10月17～19日

- 分子軌道大規模計算の現状

- 発表者 柏木 浩, 長嶋雲兵, 山本茂義, 斎藤 稔

(内容) 分子研のスーパーコンピュータシステムを用いて行った大規模なSCFおよびCAS SCF計算について紹介した。

- 分子軌道, 電子密度の図形表示システム

- 発表者 秦野甯世, 秦野和郎, 柏木 浩

(内容) 分子軌道, 電子密度の図形表示のための会話型ソフトウェアJAPIC3を開発したので, それについて報告した。

#### 4.5.3 第8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61年11月27日 名古屋大学大型計算機センター

- 新システムの特徴とジョブスケジュールの新方式

- 発表者 西本史雄, 長嶋雲兵, 伊奈 諭, 柏木 浩, 伊藤洋志, 木村伊九夫, 豊本英文

#### 4.5.4 CBI研究会「分子軌道法講習会」

昭和61年12月11日 リクルートコスモスビル(東京)

- スーパーコンピュータと分子軌道計算 — その現状と将来 —

- 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システムの特徴, 分子軌道計算の現在と将来の可能性について講演した。

#### 4.5.5 北海道大学大型計算機センター研究会「超大型計算とスーパーコンピュータ」

昭和62年1月20日 北海道大学大型計算機センター

- 分子科学計算と分子研スーパーコンピュータシステムの特徴

- 発表者 柏木 浩

(内容) 分子軌道計算の最近の成果，分子研のスーパーコンピュータシステムの特徴について紹介した。

#### 4.5.6 技術研究会

昭和62年3月19～20日 分子科学研究所

◦新システムの特徴とジョブスケジュールの新方式

•発表者 西本史雄，長嶋雲兵，伊奈 諭，柏木 浩，伊藤洋志，木村伊九夫，豊本英文

## 5. 昭和61年度稼動状況および利用状況

### 5.1 利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数

利用分野	利用区分	プロジェクト数	ユーザ数	時間			点数	
				申請	許可	実績	許可	実績
分子科学	施設利用	153	458	4,389	3,406	3,019	1,362,400	1,086,826
	課題研究	2	4	91	69	66	27,600	23,910
	協力研究	33	34	761	669	425	267,600	152,877
	所内	42	133	3,186	2,876	2,149	1,150,400	773,677
生理学	施設利用	2	4	17	12	1	4,800	185
基礎生物学	施設利用	2	4	14	14	4	5,600	1,508
合計		234	637	8,458	7,046	5,664	2,818,400	2,038,983

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

### 5.2 システム稼動状況

表 4.2.1 システム稼動状況

年月	稼動時間		保守時間
	グローバル	ローカル	
61 / 4	5 6 8 : 0 0	5 6 8 : 0 0	4 : 0 0
5	5 4 8 : 0 0	5 4 5 : 0 0	7 : 0 0
6	4 5 8 : 0 0	4 5 9 : 0 0	1 3 : 0 0
7	5 5 2 : 3 0	5 4 8 : 3 0	2 3 : 3 0
8	5 5 3 : 0 0	5 5 2 : 0 0	1 8 : 0 0
9	5 2 3 : 3 0	5 2 0 : 3 0	1 4 : 3 0
10	5 7 1 : 3 0	5 6 8 : 3 0	1 3 : 3 0
11	4 2 1 : 0 0	4 1 2 : 0 0	2 9 : 0 0
12	4 6 6 : 3 0	4 6 3 : 3 0	9 : 3 0
62 / 1	4 6 6 : 1 5	4 6 5 : 1 5	1 6 : 4 5
2	4 7 2 : 3 0	4 7 0 : 3 0	1 6 : 3 0
3	5 8 8 : 3 0	5 8 0 : 3 0	1 3 : 3 0
計	6 1 8 9 : 1 5	6 1 5 3 : 1 0	1 7 8 : 4 5



## 6. 速報抜粋——速報 (No.43~No.49)

### 6.1 分子研ライブラリプログラムの紹介 (No. 43)

#### (1) G S C F 3

- 分野コード：WF10, WF1V
- 作 製 者：小杉信博（東大理）

ad initio 分子軌道法により Hartree-Fock-SCF 計算及び C I（配置間相互作用）計算を行うためのプログラム。G S C F 2をスーパーコンピュータ向けに書き換えたものですが、2電子積分ファイルの構造は異なりますので、互換性はありません。

SCF部分は東京大学大型計算機センターのライブラリプログラムとして登録されているものと同じで、同センターニュース Vol.17No.9・10（1985年10月号）P.90を参照してください。

SiF<sub>4</sub>分子での計算の結果を以下に示しますが、非常にベクトル化が効いていることがわかります。

SiF<sub>4</sub>：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-680 H	コメント
AO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）

参考文献

- (1) N. Kosugi and H. Kuroda, Chem, Phys, Lett. 74(1980)490
- (2) N. Kosugi, J. Comput. Phys. 55(1984)426
- (3) N. Kosugi, Supercomputer Workshop Report. 4(1985)109

(2) GAUS82, GAUS80におけるランダムアクセスファイルの使用について

GAUS82, GAUS80ではFock行列, MOの格納用にランダムアクセスファイルを使用しています。SCF計算や構造最適化計算だけならば, このファイルは小さくて済みますが, post-HF計算つまりMP (Möller-Plessett摂動)計算やCI計算を行う場合はこのファイルを積分の格納としても用いますので大きな容量が必要になります。このファイルの大きさはOPEN文のMAXRECパラメータの値で決まりますが, この値が大きいと最初の初期書き込みの際に実時間(経過時間)が長くなってしまいます。

post-HF計算ではベクトル化が非常に効きますので, post-HF計算はS-810を用いた方が有利ですし, S-810のES(拡張記憶)をこのファイルに割り当てれば経過時間を大巾に短縮することができます。

以上の点を考慮し, ライブラリでは以下の表のようにMAXRECの標準値を設定してあります。この値はFT99のファイルから入力して変更することもできます。(FORTRANのfree format入力)。

```
例 //FT99F001 DD *
      4000
//*
```

レコード長は19040バイトですので, MAXREC=4000の場合, ファイル容量は80MB (19040 × 4000 バイト) となります。

プログラム名	ランダムアクセス ファイル論理番号	バージョン	MAXREC	ファイル容量 (MB)	カタログド プロシジャ名
GAUS82	FT01	スカラー	500	10	GAUS82SC
		ベクトル	4000	80	GAUS82VC
GAUS80	FT18	スカラー	550	3	GAUS8000
		ベクトル	4000	80	GAUS80VC

カタログドプロシジャはGAUS82, GAUS80の実行用のもので, スカラーバージョン,

ベクトルバージョンはそれぞれ、M-680 H, S-810 上で走らせるためのものです。ベクトルバージョンでは S-810 の拡張記憶 (ES) をランダムアクセスファイルに割当てています。他のファイル (2 電子積分等) は、全て通常の磁気ディスクデータセットを割当てています。もちろん、全てのファイルを ES に割当てることも可能ですが、分子の大きさ、基底関数の大きさによって 2 電子積分ファイルの大きさも変わりますので、カタログドプロシジャでは 2 電子積分ファイルは磁気ディスクを割当てています。

S-810 でカタログドプロシジャを実行するには JCL 中の MAIN 文で ESTORAGE を指定する必要があります。JCL の例を以下に示します。

```
// * MAIN □ SYSTEM=S810, ESTORAGE=80M, REGION=(,, 11M)
```

```
// CAUS82EX □ EXEC □ GAUS82VC
```

```
// SYSIN □ DD □ *
```

(入力データ)

## 6.2 大型計算成果発表会について (No.44)

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。

大型計算課題の研究成果を公表し、今後のプログラム開発、センター運営、利用申請審査の参考とするため、下記のように「分子研電子計算機センター大型計算成果発表会」を開催します。

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。

「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」プログラム

日 時 昭和 61 年 8 月 7 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 能勢修一, 米沢富美子, 中西 秀, 坂本昇一, 佐藤文俊, 森 弘之, 青木圭子, 石田慶子, 鈴木哲広, 富谷茂隆 (慶応大 理工)

金属およびその混合物のガラス状態のシミュレーション

10:05 山邊時雄, 川村 尚, 田中一義, 立花明知, 小泉雅彦, 浅井美博, 長岡正隆, 小池恒明, 井上貴之, 笹野博之, 池内省五, 鈴木哲夫 (京大 工)

化学反応の動的過程に関する理論的研究

10:35 山口 克, 小林久芳 (京府大 生活科学), 吉田郷弘, 川上博史, 田中庸裕 (京大 工)



金属および金属酸化物クラスターの電子状態と反応性に関する量子化学的研究

11:05 岡本 宏, 杉山 勝, 白田成男 (名工大 工)

鎖状および粒子状分子集合体における密度相関と相安定性の研究

—多数の格子ポリマーよりなる系の統計とくりこみ群の文脈との整合性—

11:35 蒲池幹治 (阪大 理)

重合反応の反応規制や立体規制に関する研究

12:05 今村 詮, 大作 勝, 諫田克哉, 角本輝充, 谷 誠治, 岡島俊哉, 是本敏宏, 渡辺栄次郎, 青木百合子 (広島大 理)

気相, 液相, 固相における分子の電子状態の研究

### 6.3 分子研電算センター利用の手引き (英語版) の公開について (No.44)

◦ 分子研センターの利用の方法について簡単に説明した利用の手引き英語版 (10頁) を作成しました。これは主に, 分子研を利用する外国人研究者の便宜のために作ったものですが, データセットに収められているのでオンラインでみることができ, 日本人ユーザにとっても便利かと思います。

◦ テキストは

```
▽ SYS7. IMSGUIDE. TEXT ▽
```

というデータセットにカタログされています。

◦ レーザプリンタに印刷したい場合は,

```
ROFF7 ▽ SYS7. IMSGUIDE. LOAD ▽
```

とタイプインするか, あるいは

```
NPRINT ▽ SYS7. IMSGUIDE. TEXT ▽ ▽ C ▽ Y ▽ A4T1
```

とタイプインして下さい。

### 6.4 ユーザからの要望と回答 (No. 45)

2月17日のスーパーコンピュータワークショップ第6回講演会の席上および4月以降 ▽ SYS7. LETTER. DATA ▽ ファイルへ投書をいただいた新システムに対する要望, 意見とそれに対する回答を掲載します。なお, 新しい要望, ご意見がございましたら今後ともお寄せください。

## 1. TSS関係

- (1) JCL, FORTRAN, FILENAME等で, EBCDICとEBCDIKを区別しないで使用できるようにしてほしい。

回答……メーカ側でサポートを検討中ですが, 近くサポート内容が明らかにされる予定です。

- (2) WILD CARDを統一的にかつ広い範囲で使えるようにしてほしい。

回答……メーカ側でサポートを検討中です。重要なものから順次公開される予定です。

- (3) メッセージヘルプが一般の無手順端末でも使えるようにしてほしい。

回答……62年1月以降にサポートされる予定です。

- (4) PADがTSSで使えるようにしてほしい。さらにFORTRANプログラムをPAD図に変換する機能を持たせてほしい。

回答……メーカよりPADエディタ, PADからFORTRANへの変換(62/上期末) FORTRANからPADへの変換(63/上期末)の予定でサポートする方針が示されました。

- (5) 4800BPS以上でフルスクリーン端末(EDIT)を公衆回線でサポートしてほしい。パソコン上でのエミュレータでもよい。

回答……NTTのサービス状況, 通信機器の普及度, 価格等を反映して安価なハード構成, 手軽な通信ソフト, 安い回線料で広範囲の人々が共通に利用できる所外回線サービスとして現在の公衆回線, 第2種パケット網回線による無手順300BPS, 1200BPSサービスが普及しています。従って現状では4800BPS以上の回線を利用するには専用線を引くか, 第1種パケット網へ加入するのが一般的です。このうち専用線はセンターの通信資源に限界があり一般ユーザにオープンすることは問題があります。残るは第1種パケット交換サービスに同期式端末またはX.25端末として加入する方法です。一般パソコン用通信ソフトは無手順非同期式用ですから, これをハイレベル(HDLC)手順の同期端末として作り直すか, X.25非同期無手順変換装置を介して接続する方法が考えられます。いずれにしても現状では高価な装置が必要となったり, 初期費用や通信基本料が必要であるうえ, まだ実績のない使い方ですので実行に移す場合はセンターにご相談ください。

また無手順ASPENを利用して無手順フルスクリーン端末として使用することが可能です。

- (6) いくつかまたはすべてのFILE中の任意の文字列を搜したり変更したりできる(例えば, VAXのGREPコマンドのような)コマンドがほしい。また, VAXのTAILのような

コマンドがほしい。

回答……当面メーカー側から提供される予定がありません。

(7) ATTRIBUTE と ALLOCATE を結合したコマンドがほしい。

回答……当面メーカー側から提供される予定がありません。

(8) SAVE FILE NAME だけをLISTできるとか、より細かに CATALOG LIST ができるコマンドがほしい。

回答……当面メーカー側から提供される予定がありません。

(9) ASPENで小文字の正規表現を用いたコマンドを登録できるようにしてほしい。

回答……メーカー側でサポートを検討中です。

(10) ASPENのEDITでメンバーを選択する画面でメンバー名のワイルドカードを許すとか FINDでメンバー名を捜すことができるようにしてほしい。数百のメンバーがある場合にはこういった機能なしで自分の目で目的のものを捜さなければならないのではEDITに入れない。

回答……10月から新版でサポートされます。

## 2. FORTRAN関係

(1) OPEN文によるFILEの定義(特にダイナミックアロケーション時に)がより細かに行えるようにしてほしい。SPACE, DCBの定義がOSにとって必要不可欠のものならば、それがDD文だけでしか定義できないのは不便です。

回答……62年下期よりサポートされます。

(2) DCOM(+ : . . . . .), COMARYというのは大変煩わしいのでコンパイラかリンケージエディタが自動的に判断するようにしてほしい。

回答……メーカー側で62年下期よりサポートする予定でコンパイラおよびリンケージエディタの双方について検討を進めています。

(3) プログラムが走ってからはじめて「COMMON BLOCKの大きさが前の時より大きい」という理由で止まるのはこまる。せめて最大のSIZEをリンケージエディタが自動的に調べてそれだけの領域を確保してほしい。

回答……62年下期よりサポートされます。

(4) ベクタライザをせめて他社の会話型ベクトライザ並にしてください。

回答……62年1月以降に公開されるFORT/PSEでサポートされます。

(5) コンパイラからのメッセージを減らせるようなオプションを作って欲しい。TSSの際に…… cut by half や…… expanded や…… is not used が多数行出て来て大変

煩わしいので。

回答……FORTANのFLAGオプション可能です。RUNコマンドを利用される場合は、オプションがセンターで決められていますのでFLAGオプションは使用できません。そのためソースプログラムの先頭に、PROCESS文を置いてオプションの指定を行ってください。

### 3. その他

(1) 各社のソフトが相互乗入れできるように入口、出口を標準化してください。現在の大型機のソフトはその会社のOSやソフト開発能力に縛られて、ユーザと計算機とのインターフェイスのところパソコンと較べて遅れているように見えます。欠けている所を容易に補えるようにするために是非やっていただきたい。

回答……メーカ側で仕様を検討中です。

(2) MTMおよびOPENMTに、ANSI-FORMATのMT、特にVAXの標準MTを読むようにオプションを追加してほしい。

回答……メーカ側でサポートを検討中で、実際の作業に入っています。

(3) 図形データをレーザプリンタに出力するためのグラフィックルーチンをサポートしてほしい。現在公開されているFOGINT2は使いにくく、またGPSLで作成した図形データをすべて表示できないことがある。できればGPSL等の中で直接呼べる形にしてほしい。

回答……KGRAF等の新しいプログラムプロダクトが用意されています。GPSLで作成した図形データをレーザプリンタに出力するためには今の所FOGINT2しかありません。

## 6.5 第12回電子計算機センター運営委員会議事報告 (No. 45)

### 1. センターからの報告

(1) 61年度 計算機稼働および利用状況、電力使用状況

M-680H, S-810/10システムの電力使用状況、稼働状況、ジョブ件数、CPU時間が資料に基づいて報告された。

電力使用量は当初の予想通り約400kwであったこと、4～6月のCPU稼働率は昨年などに比べて低いが、これはレベルアップに伴って計算機に現在やや余裕があることを示すものでもあるとの説明があった。

障害状況については一覧表が示され、新システムになって以来、ハード/ソフト障害が多く発生していることに関して状況の説明が行なわれた。次に、分野区分別の使用状況、電話

回線による TSS の利用状況が示された。

(2) 61 年度 予算の使途予定；62 年度 概算要求

借料，光熱水料，運営費，附属施設経費の予算額，それから共通経費を差し引いた電算経費，附属施設経費の配当額とその使途予定が資料に基づいて説明された。この他，所内有償負担金が本年度後期にはじめて移管される予定である。

また62年度の概算要求については，借料，運営費，附属施設経費とも前年（61年度）と同額であるとの説明があった。

(3) 61 年度前期 計算機時間配当状況，追加状況

CPU 時間の月別，利用区分別割り当て状況が一覧表によって示された。8 月 1 日現在で，192 プロジェクト，565 名，申請時間合計 6,679 時間に対して許可 5,514 時間となっている。

続いて，前回（第 11 回）委員会で問題となり警告を発することになっていたプロジェクトおよび協力研究と施設利用の重複で配当削減することになっていたプロジェクトに対する文面が資料として示され，説明があった。

また前回委員会審査当時 CPU 時間申請基準確認書の添付がなかった二プロジェクトに対して，確認書の提出を求めたところ，当初申請に比べ CPU 時間を減少したので，郵送による再審査を行なった旨の報告があり，再審査の結果が示された。

次に追加申請の状況が表として示され，7 月の時点での 6 件のプロジェクトが問題になり，前回委員会の判断に準じてセンターから送付した警告の文面が示された。

続いて，このような早期，大規模な追加申請に対する委員会としての対応が問題になり議論が行なわれた。結論としては警告を発したことで委員会の意向は通じると考えられるので，その後は様子を見ることとし，再度このような追加申請が行なわれた場合には改めて対策を考えることになった。

また，前回委員会後にまとまった資料として，60 年度の CPU 時間追加状況一覧表が示された。

(4) 61 年度前期 施設利用旅費割り当て状況

施設利用旅費の割り当ては例年通り比較的遠隔地で小規模プロジェクトを中心に行なわれた。214,340 円を 6 プロジェクトに割り当てた旨が資料に基づいて報告された。

(5) ライブラリプログラム開発状況

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

(6) データベース開発・サービス状況

登録，サービスを行っている6件のデータベース（QCLDB，CMQCA，CHEMICS，IR2，STERIC，QCBDB）について現状の報告があった。また，今年度外注分（QCLDB，IR2，STERIC，QCBDB）について説明があった。

(7) 61年度 ライブラリプログラム開発計画およびセンター業務補佐謝金割り当て状況

分子研ライブラリプログラム開発計画（計9件）と個々の旅費，謝金の割り当て状況が資料に基づいて報告された。

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

## 2. 61年度後期および62年度 計算機運用方針案

61年度後期の運用方針案として今後予定されている主な作業項目（ソフト，ハード）の一覧が示され，次のような説明があった。

ニューワークステーション2050の導入は，TSS操作性にまだ問題があり，改善要求を出すとともに機種，時期を再検討している。従って61年10月末の導入は悲観的である。

Ethernetの導入は，所内ケーブル工事費の目途が立っていないため，本格稼働は工事期間を考慮すれば62年になりそうである。

FORTRAN77／HAP（20-00）の導入は，メーカ側の都合で61年10月末から61年12月末に変更となった。この延期は速度面，大規模プログラムのコンパイルなどの点で問題を含んでいる。

62年度の運用方針案としては，S-810／10の後継機の導入に関して説明があった。メーカ側は現在論理テスト中であり，速度，構成についての説明はまだない。センター側としては秋頃より具体的検討を始める予定である。

続いて，新しいジョブスケジュールの考え方の説明，現状報告があった。

最後に，ASPENエディタのレベルアップ予定が示された。

討論の後，これらの運用の基本方針が了承された。

## 3. 61年度後期 計算機時間配分案

61年度後期CPU時間配分案が資料に基づいて説明された。その結果，後期（10月～3月）配当目標は合計1118時間。

## 4. 61年度後期 利用申請審査

各委員によってあらかじめ評価，採点された施設利用(B)2件，協力研究（後期）16件の審査が資料に基づいて行なわれた。審査は主に各委員間の評点の巾の大きなもの，評価の低いもの，

重複申請の可能性のあるものに重点をおいて議論された。

(協力研究後期) 一プロジェクトの60年度利用報告書が未提出のため、提出があるまで使用を許可しないという旨の手紙をセンター長名で出すことになった。

討論の結果、各課題とも採点通りの許可が認められた。

## 5. その他

(1) 大型計算成果発表会に対する意見、感想が述べられ議論された。次のような意見があった。

- ・ 計算機を使った部分の話が殆どされていない発表があった。発表者に会の主旨をもっと徹底するなど会の目的の明確化を行なった方がよい。その際、代表者でなく講演者に直接手紙を出すようにした方がよい。
- ・ 講演のフォーマットを決めて、それに沿って話をしてもらったらどうか。  
センター側から、主だったユーザは大体一通り発表してもらっているのだから、今後は大規模ユーザに2度目の発表を行なってもらうことになることが述べられた。

## 6.6 ジョブの実行についてお願い (No. 46)

ジョブを実行させる場合、MAINで指定する資源の大きさは実際に使用する分だけを指定するようにしてください。使わない分まで多めに指定すると他のジョブが流れにくくなり、他のジョブの実行をさまたげ、システムの処理能力が低下します。メモリの必要量はジョブの実行結果のシステムメッセージのジョブステップ終了メッセージ行で見ることができます。(HAP リージョンで実行されたジョブについては、現時点では値がセットされていません。)

システムメッセージの出力例

```
ESの情報
JDJ795I STEP(GO ) START 86.10.30(303) 17.20
JDJ796I STEP(GO ) STOP 86.10.30(303) 17.20 CPU TIME=( 0MIN.00.10SEC) REAL STORAGE= 1340KB
JDJ962I EXTENDED STORAGE ALLOCATED= 60MB USED= 78KB
JDJ797I JOB (AB1CD2T8) START 86.10.30(303) 17.20
JDJ798I JOB (AB1CD2T8) STOP 86.10.30(303) 17.20 CPU TIME=( 0MIN.06.24SEC)
*8610 CPU TIME= 0MIN. 6SEC VPU TIME= 0MIN. 3SEC ACCOUNT/THIS JOB= 1
使用したメモリ
VPUの情報
```

JCLの最後に

// EXEC JOBUS

を入れると、ジョブのCPU (VPU), I/O の使用状況, メモリやESの使用状況が出力されます。この情報はシステムが数分間隔で収集しているものなので、その時点でジョブが実行されていなかった場合何も出力されません。出力内容についてはJOBUSコマンドと同じです。

## 6.7 分子研ライブラリプログラムの紹介 (SAC85) (No. 47)

### ◦ SAC85

- ・分野コード：WF 10
- ・作成者：中辻 博
- ・登録：中辻 博, 北尾 修 (京大工)
- ・タイトル：SAC/SACCI PROGRAM FOR GROUND EXCITED  
IONIZED AND ANION STATE
- ・使用目的：SAC (Symmetry Adapted Cluster 展開法) 及び SAC-CI 理論により電子  
相関をとりいれた基底状態, 一重項, 三重項励起状態, イオン状態を計算。

プログラムシステム“SAC85”が分子研の計算機センターに登録されてから1年近く経ち、しだいに使われ成果を上げている様に聞いております。本プログラムでは singlet の閉殻系を SAC 法<sup>1)</sup>によって計算し、その励起状態 (一重項と三重項) とイオン化状態, アニオン状態 (ともに二重項状態) を SAC-CI 法<sup>2)</sup>によって計算しています。理論的な理由によって、普通の CI 法に比べ計算の次元が格段に小さくなること, 上記のようないろいろの状態を一度に同程度の精度で計算できること, などが主な利点です。プログラムの理論的背景, 応用例の詳細については文献3を見ていただくことにし、本稿では主に計算機時間についてまとめます。具体例として最近計算を行った Benzene を取り上げました。この研究内容は発表済み<sup>4)</sup>ですが、その時の次元数, 計算結果, 計算機時間を表1~3にまとめました。 $\pi$ -space のみの小次元の計算については、参考のため、Hay と Shavitt による MR-CI の結果<sup>5)</sup>と比較しました。SAC と SAC-CI を使えば彼らと同程度か、少し良い結果を彼らの  $4/5 \sim 1/4$  の次元で求められる事がわかります。一般にこの差は、計算の規模が大きくなればなる程大きくなります。各 step の詳細は文献3か、SAC85 のメンバーの1つとして用意した manual を読んで下さい。2電子励起までの linked operator の生成を PRES で行い、その perturbation selection を CIMX で行います。CIMX, ULINT1, ULINT2 は主に行列要素の計算, CID と SCIV は行列の対角比, SAC では連立一次方程式を反復法により解いています。DENS で natural orbital を計算し, PROP ではそれを用いて one electron operator の期待値を求めています。小次元の問題の場合、直接法 (DAS, DSAC) を用いれば、ベクトル計算機による加速がとくに有利になります。35 $\pi$  + 45 $\sigma$  の SCIV は計算途中のリストを保存しなかったため具体的な時間の記録はありませんが、同様な場合で、約1800秒 (30分) でした。

[参考文献]

- (1) 中辻, 平尾, J. Chem. Phys. **68**, 2053 (1978).



- (2) 中辻, Chem. Phys. Lett. 59, 362 (1978); 67, 329, 334 (1979).
- (3) 中辻, 京都大学大型計算機センター広報, 19, 290 とその参考文献 (1986).
- (4) 北尾, 中辻, 米沢, 分子構造総合討論会講演要旨集, p. 900 (1986).
- (5) P. J. Hay and I. Shavitt, J. Chem. Phys. 60, 2865 (1974).

TABLE 1 . Dimensions of the SAC and SAC-CI calculations for the valence excitations of benzene.

State		SDT-CI (HS <sup>a</sup> )		SAC and SAC-CI	
D <sub>6h</sub>	D <sub>2h</sub>	23π [SD], 18π [T]		35π	35π+45σ
Ground <sup>1</sup> A <sub>1g</sub>	<sup>1</sup> A <sub>g</sub>	903		400	1089
Excited					
<sup>1</sup> E <sub>2g</sub>	<sup>1</sup> A <sub>g</sub>	1766		610	2592
<sup>1</sup> B <sub>1u</sub> , <sup>1</sup> E <sub>1u</sub>	<sup>1</sup> B <sub>2u</sub>	889, 1758		645	2965
<sup>1</sup> B <sub>2u</sub>	<sup>1</sup> B <sub>3u</sub>	872		691	3054
<sup>3</sup> E <sub>2g</sub>	<sup>3</sup> A <sub>g</sub>	2628		828	3813
<sup>3</sup> B <sub>1u</sub> , <sup>3</sup> E <sub>1u</sub>	<sup>3</sup> B <sub>2u</sub>	1316, 2636		633	2567
<sup>3</sup> B <sub>2u</sub>	<sup>3</sup> B <sub>3u</sub>	1323		574	2289

<sup>a</sup> Reference 5 .

TABLE 2 . The valence π<sub>2</sub>-π<sub>3</sub> excitation energy of benzene.

State	Excitation Energy (eV)				Oscillator		
	SDT-CI (HS <sup>a</sup> )		SAC-CI		Exptl.	Strength	
	23π [SD], 18π [T] (Δ <sup>b</sup> )	35π (Δ)	35π+45σ (Δ)	35π		35π+45σ	Exptl.
<sup>1</sup> B <sub>2u</sub> (S <sub>1</sub> )	5.00 (0.10)	5.25 (0.35)	5.25 (0.35)	4.90	0.0	0.0	
<sup>1</sup> B <sub>1u</sub> (S <sub>2</sub> )	7.64 (1.44)	7.31 (1.11)	6.60 (0.40)	6.20	0.0	0.0	
<sup>1</sup> E <sub>1u</sub> (S <sub>3</sub> )	8.34 (1.39)	8.25 (1.30)	7.47 (0.52)	6.95	0.61	1.03	0.60~1.25 (y, z)
<sup>3</sup> B <sub>1u</sub> (T <sub>1</sub> )	3.83 (-0.12)	3.80 (-0.15)	4.06 (0.11)	3.95			
<sup>3</sup> E <sub>1u</sub> (T <sub>2</sub> )	4.98 (0.23)	5.05 (0.30)	5.02 (0.27)	4.75			
<sup>3</sup> B <sub>2u</sub> (T <sub>3</sub> )	7.00 (1.40)	6.65 (1.05)	6.02 (0.42)	5.60			

<sup>a</sup> Reference 5 .

<sup>b</sup> Δ shows the difference from the experimental value.

TABLE 3. CPU time in sec. elapsed for SAC and SAC-CI calculations of the singlet ground ( $S_0$ ) and excited states ( $S_1, S_2, S_3$ ) of benzene.†

step		$35\pi$ <sup>a)</sup>	$35\pi + 45\sigma$ <sup>b)</sup>
SAC ( $S_0$ state)	PRES	0.3	25
	CIMX	19	347
	CID	4	27
	ULINT1	4	106
	SAC	24	68
SAC-CI ( $S_1, S_2, S_3$ states)	ULINT2	35	391
	SCIV	134	* <sup>c)</sup>
	DENS	67	351
	PROP	31	35

- a. HITAC M680H computer at IMS is used.  
 b. HITAC S810/10 computer at IMS is used.  
 c. Timing data is not available, but approximately 1800 sec.

† CPU time for SCF and integral transformation is not given.

## 6.8 分子研データベースについて (No. 47)

### (1) QCLDB (量子化学文献データベース)

北大富樫雅文氏作製の簡易検索システム第2版が使えるようになりました。使い方はORIONと同様ですが、ORIONよりも豊富な検索機能を持っています。(中間一致、ワイルドカード等)。

コマンドQCLDBを投入した後、復改キーを押せばORION版、▼P▼キーを押せば簡易検索版が起動します。

## 6.9 第13回電子計算機センター運営委員会議事報告 (No. 49)

第13回電子計算機センター運営委員会が、昭和62年2月21日(土)に開催されました。以下にその議事の要約をお知らせします。

## 1. センターからの報告

### (1) 61年度 計算機稼働および利用状況、電力使用状況

M-680H, S-810 の稼働状況、ジョブ件数、CPU 時間が資料に基づいて報告された。S-810 のジョブの平均ベクトル化率が約30%以下であること、M-680H, S-810 のCPU 使用時間がそれぞれ 2760, 3120 時間であり、M-680H に比べ S-810 の使用時間が多くアンバランスであることが指摘された。

また、分野区分別使用状況、電話回線による TSS 利用状況の報告があった。300 BPS の利用がまだ多いこと、1200BPS では Vadic から V.22 への乗り移りが61/11ごろから顕著であることなどの報告があった。

次に、電力使用状況の説明がなされた。61年4月から62年1月までの稼働時間は 5278 時間であった。398 kw/H の消費電力となっているとの報告があった。

### (2) 61年度 予算の使途

電算経費、附属施設経費の割り当て額内訳が示され、その使途の実績が説明された。特に Ethernet 導入のための経費の内訳と出所について詳しい説明があった。またデータベースのなかで使用頻度が高い QCLDB は収集データ量が増えたので、今回作製費を増額したとの報告があった。

また、基礎生物学研究所電子計算機室と協力して、BITNET に1年間実験的に加入するとの報告があった。ただし、利用は当面所内に限られる。

### (3) 60年度 計算機時間配当状況、追加状況

CPU 時間の月別、利用区分別割り当て状況が示された。2月16日現在で 233 プロジェクト、636名、申請時間総計 8363 時間に対して許可 6964 時間となっている。

次に各プロジェクトの CPU 時間の月別、分野別追加状況が一覧表として示された。その後、前回委員会後郵便審査の結果配当を行な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した評価集計表に基づいた議論が行なわれた。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。この中で問題となったこと、議論されたこと、結論の出たことは以下の点である。

昭和61年9月付の一つの申請に対し、分子科学に属するか否かについて意見が分かれたが、今回はとりあえず承認することとした。ただし、今後利用を断わる可能性がある旨を当人に手紙で伝えるという処理をとったことが了承された。

昭和60年度の利用報告書が未提出であった5名には警告書を送ったが、そのうちの2名からは、いまだ提出がないので、62年度の申請があった場合、利用許可を保留することが確認

された。

(4) 61年度 施設利用旅費割り当て状況

施設利用旅費の割り当ては従来の方針通り小規模プロジェクトを中心に行なわれた。前期は209,360円を6プロジェクトに、後期は162,340円を5プロジェクトに割り当てたことが報告された。

この割り当て方針に対して、旅費割当の希望を利用者から聞いた方がよいという意見が出され、旅費の申請書を新たに追加し、旅費希望の理由を明記して提出してもらうこととなった。その用紙には、施設利用旅費が半年に約15万円程度しかないことも説明することとなった。

(5) ライブラリプログラム開発状況

分子科学プログラムパッケージのベクトル化状況、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

6件のデータベース（QCLDB, CMQCA, CHEMICS, IR2, STERIC, QCBDB）の現状が報告された。また、分子研センターが昭和61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) 61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り当て状況

分子研ライブラリプログラム開発計画（計18件）と個々の旅費、謝金の割り当て状況が報告された。

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。応用プログラム相談員の不足が問題になっていることが説明された。

(8) 62年度 予算内示について

62年度の予算内示額について説明が行なわれた。基本的に昨年度と同じである。電気料金の値下げを反映し、光熱水料が216万円減額となっている。

## 2. 62年度 計算機運用方針

(1) 利用課金点数について

現在、S-810のCPU使用時間がM-680Hに比べ多く、システム運用上バランスがとれていない。特に深夜S-810のみジョブが流れる傾向にあり、運用効率上問題である。これはベクトル化があまり効いていないジョブでもS-810の方が利用点数で有利なためであることが資料を用いて説明された。対策として利用課金点数の変更案が示された。検討の結果、課金点数を以下のように改訂することになった。これは使用料の値上げに相当するので、

バランスをとるため一時的措置であった1時間400点という設定を据え置くことにした。

	(改訂)	(現行)
M-680HのCPU時間	$a = 0.10$ 点/秒	← 0.10
S-810のSPU時間	$b = 0.055$ 点/秒	← 0.045
S-810のVPU時間	$c = 0.055$ 点/秒	← 0.045
出力枚数	$d = 0.045$ 点/枚	← 0.045
ディスク使用量	$e = 0.00067$ 点/MB・時間	← 0.00067

(2) 新FORTRANコンパイラの公開

新FORTRANコンパイラの運用について資料に基づく説明があった。昭和62年4月にFORTRAN77/HAP(20-00)の公開を行なう。高速化、機能強化が期待できるが、バグも多いと予想されるため、当面従来のFORTRANコンパイラと並行運用することが了承された。

(3) 新ワークステーションの導入について

新ワークステーションの導入について、メーカー側から出されている2つの案について説明があり、議論された。

(4) S-810後継機について

62年度第2四半期に予定されていたS-810後継機の導入は、メーカー側の開発の遅れにより10月に延期されていたが、さらに遅れて冬期になる見通しである旨、報告があった。後継機の性能や運用について議論が行なわれたが、センター側で引き続き検討することになった。

### 3. 62年度 計算機時間配分方針

62年度CPU時間配分方針が説明され、所内許可率は一律に90%（昨年通り）、所外平均許可率75%（昨年80%）とすることとなった。これは今年度は所外の申請が昨年比34%増しになっている状況を反映している。許可所内外比は37:63となる。これにより62年度の推定許可総CPU時間は8455時間となる見込みである。

### 4. 62年度 利用申請審査

各委員によってあらかじめ評価、採点された施設利用(B)65件（分子科学64件、基礎生物学1件）、協力研究（前期）9件、課題研究2件の審査が資料に基づいて行なわれた。議論は主に各委員間の評点の中の大きなもの、特に評価の低いものや重複申請の可能性のあるものに重点をおいて行なわれた。

（施設利用B）の一プロジェクトに対して申請CPU時間（120時間）はひとりとしては多すぎる、発表論文が少ないとの意見があった。審査の評価が低かったこと、成果

を論文に発表することの2点を明記し、警告の手紙を出すことになった。

(協力研究前期)の二プロジェクトに対してひとつは申請 CPU 時間 (100 時間) がひとりで半年分としては多すぎることを、施設利用課題と研究が完全に独立とは認めがたいことの2点の理由で点数を削減した旨、手紙を出すことになった。過去の例にならい、3割減とした。もうひとつは身分の変更による研究環境の変化を考慮し、CPU時間を3割減にすることになった。

### 6.10 ライブラリプログラム GAUS 82 について (No. 49)

(1) QCPE BULLETIN Vol.7, No.1, P23 (1987) に D. Peeters, M. Sana, B. Lavoisier が Gaussian82 (IBM版)をCRAY XMP, IBM 3090 等のコンピュータで走らせた場合のCPU時間、ファイル容量を報告しています。他機種との比較、計算規模を知るのに便利かと思えます。同じテストデータを用いて当センターのライブラリプログラム GAUS 82 を M-680 H及び S-810/10 で実行してみましたので報告します。当センターのライブラリプログラム "GAUS 82" は、post-HF 計算の部分が、強制ベクトル化その他によりベクトル化が効くよう書き直されています。各機種の性能とCPU時間を以下に示します。

XMP : CRAY X-MP 22

2 プロセッサ

クロックタイム 9.5 ns

400 MFLOPS (最高)

3090 : IBM 3090 / 400

4 \* 4 プロセッサ

クロックタイム 18ns

M-680H : HITAC M-680H

S-810 / 10 : HITAC S-810 / 10

1 プロセッサ

315 MFLOPS (最高)

なお MIPS, MFLOPS の値は測定条件によりバラツキがあり、比較する場合は注意が必要です。post-HF 計算では、ベクトルが効きスーパーコンピュータが有利になることがわかります。表中の値はすべて単位は秒です。CPU時間の斜線より後の値は XMP を 1.0 として比較し、CPU時間がその何倍になるかを示しています。

TEST 1: NO2-CHF-CH3  
 HF/6-31G FORCE  
 62 CGTOs / 10 atoms / 24 internal coordinate

Link	XMP	3090	M-680H	S-810/10
311 2e- integrals	49.8/1.	64.0/1.3	38.4/.77	74.5/1.5
501 RHF	165.0/1.	81.1/.49	61.8/.37	85.3/.52
702 Gradient	59.7/1.	93.2/1.6	44.1/.74	105.3/1.8
Total CPU	284.0/1.	247.8/.87	151.3/.53	276.2/.97

TEST 2: CH3-CF3  
 HF/6-31G FREQ SCFCYC=150  
 51 CGTOs / 8 atoms / 18 internal coordinates

Link	XMP	3090	M-680H	S-810/10
311 2e- sp integrals	23.0/1.	30.1/1.9	18.0/.78	35.2/1.5
307 1e- derivatives	2.4/1.	2.4/1.0	1.4/.58	2.8/1.2
316 2e- derivatives	164.6/1.	258.8/1.6	152.1/.92	279.2/1.7
501 RHF	67.4/1.	65.5/1.0	41.5/.62	86.1/1.3
802 Molecular Int.	61.8/1.	123.4/2.0	72.4/1.2	101.4/1.6
901 UMP2	4.3/1.	12.6/2.9	13.3/3.1	4.1/.95
1002 D2E SCF	71.9/1.	190.9/2.7	153.8/2.2	95.8/1.3
707 1e- contribution	10.4/1.	7.5/1.0	4.5/.43	11.5/1.1
708 2e- contribution	735.5/1.	730.9/1.0	333.8/.45	578.0/1.1
716 Frequencies	6.3/1.	7.4/1.2	6.9/1.1	10.6/1.7
Total CPU	1151.7/1.	1433.6/1.2	797.8/.69	1207.9/1.0

TEST 3: NH2F  
 RMP4=SDTQ/6-31G\*\* NOPOP  
 40 CGTOs / 4 atoms / 6 internal coordinates

Link	XMP	3090	M-680H	S-810/10
311 2e- sp integral	2.0/1.	3.2/1.6	2.0/1.0	3.8/1.9
314 2e- spdf int.	9.9/1.	11.3/1.1	7.8/.79	10.0/1.0
501 RHF	27.2/1.	24.6/0.9	16.4/.60	33.1/1.2
802 Molecular Int.	9.1/1.	16.4/1.8	11.8/1.3	12.6/1.4
901 UMP2	0.96/1.	2.4/2.5	2.9/3.0	0.94/.98
911 CI iter.	15.9/1.	28.1/1.8	12.5/.79	12.5/.79
912 CI iter.	0.76/1.	6.3/8.4	5.2/6.8	0.99/1.3
913 E(MP4)	27.8/1.	190.6/6.9	107.0/3.8	32.0/1.2
Total CPU	95.3/1.	285.0/3.0	167.0/1.8	107.6/1.1

TEST 4: NO2-CH2-NO2  
 RHF/6-31G FREQ SCFCYC=150  
 67 CGTOs / 9 atoms / 21 internal coordinates

Link	XMP	3090	M-680H	S-810/10
311 2e- sp integrals	55.8/1.	-----	42.7/.77	82.9/1.5
307 1e- derivatives	4.7/1.	-----	2.7/.57	5.3/1.1
316 2e- derivatives	381.6/1.	-----	352.3/.92	621.1/1.6
501 RHF	388.3/1.	-----	310.8/.80	663.5/1.7
802 Molecular Int.	216.6/1.	-----	323.8/1.5	358.5/1.7
901 UMP2	15.4/1.	-----	37.5/2.4	15.3/1.0
1002 D2E SCF	232.1/1.	-----	809.0/3.5	332.3/1.4
707 1e- contribution	19.7/1.	-----	8.4/.43	22.0/1.1
708 2e- contribution	1772.6/1.	-----	766.8/.43	1331.7/.75
716 Frequencies	16.2/1.	-----	18.2/1.1	27.8/1.7
Total CPU	3099.5/1.	-----	2669.7/.86	3461.0/1.1



(2) 引用義務

ライブラリプログラム GAUS82 を用いて得られた結果を論文等に投稿する場合は分子研ライブラリプログラム GAUS82 を用いた旨、並びに製作者 Pople グループを必ず引用するようにお願いします。

(3) S-810上で GAUS82 を走らせる場合の注意

S-810 上で GAUS82 を走らせる場合、データセットに ES (拡張記憶) やパラレル I/O を用いて I/O 時間を減らすようにしてください。(ただし、パラレル I/O はランダムアクセスファイル、GAUS82 の場合 FT01 及び FT02 には使えません。)

JCL の例を以下に示します。

```
//AB1CD2G8 JOB PASSWORD,CLASS=B,NOTIFY=AB1CD2,TIME=5
//*MAIN SYSTEM=S810,REGION=(,500K,11M),ESTORAGE=86M,PRL=YES
//*
//GAUS82 EXEC PGM=GAUS82
//STEPLIB DD DSN='SYS3.#PROG',DISP=SHR
//FT02F001 DD SPACE=(MB,(1,1),RLSE),UNIT=ES,
// DISP=(NEW,DELETE),DCB=(RECFM=F,BLKSIZE=19040)
//FT20F001 DD UNIT=WORK,SPACE=(CYL,(5,5),RLSE),
// DISP=(NEW,DELETE),
// DCB=(RECFM=VBS,BLKSIZE=23476,OPTCD=C),PRL=*
//FT19F001 DD UNIT=WORK,SPACE=(CYL,(20,20),RLSE),
// DISP=(NEW,DELETE),
// DCB=(RECFM=VBS,BLKSIZE=23476,OPTCD=C),PRL=*
//FT01F001 DD UNIT=ES,SPACE=(MB,(80)),
// DISP=(NEW,DELETE)
//FT06F001 DD SYSOUT=*
//FT07F001 DD SYSOUT=*
//FT05F001 DD *
```

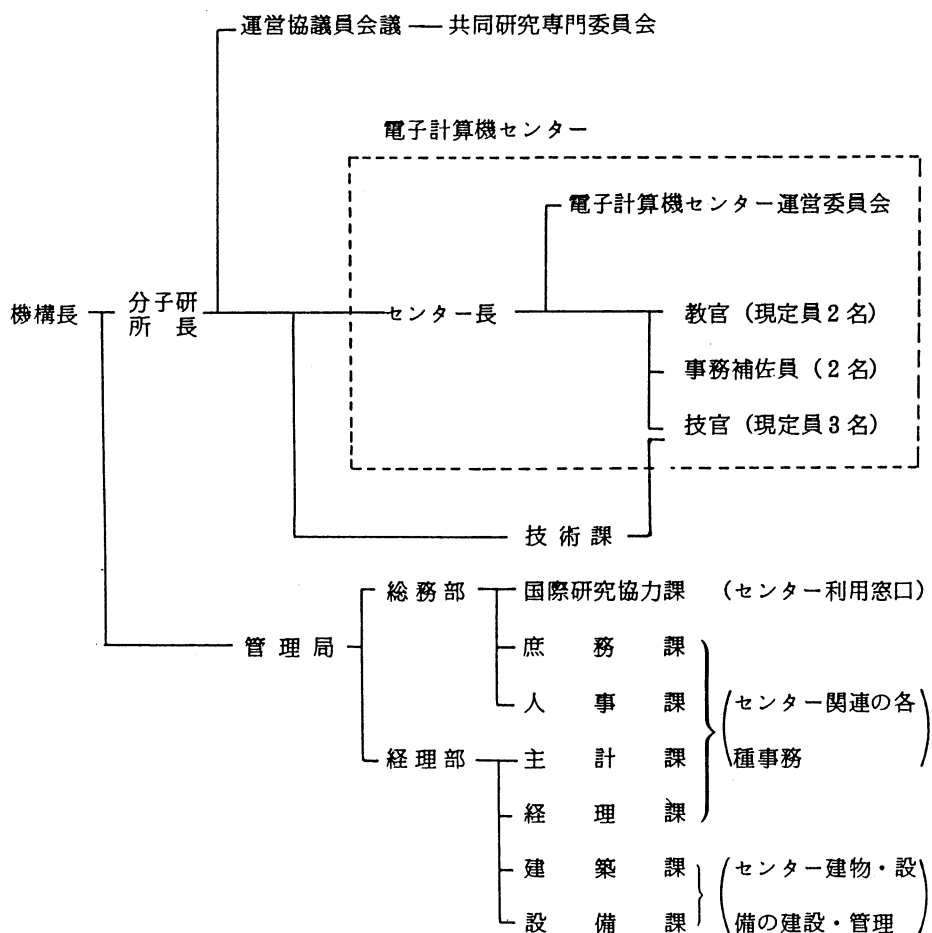
## 7. 資 料

### 7.1 センター関連組織

センター関連組織は下図に示す通りである。

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

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



## 7.2 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則

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研算機センター（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。

### 7.3 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター運営委員会規則

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。

#### 7.4 電子計算機センター運営委員会委員

(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

(昭和62～63年度)

諸 熊 奎 治	分子研理論第一部門教授, センター長	センター委員
柏 木 浩	分子研電子計算機センター助教授	〃
中 村 宏 樹	分子研理論第二部門教授	分子研所内委員
西 信 之	分子研電子状態動力学部門助教授	〃
今 村 詮	広大理教授	分子研所外委員
中 西 浩一郎	京大工教授	〃
岩 田 末 廣	慶大理工教授	〃
塚 田 捷	東大理助教授	〃
亘 弘	生理研教授	生理研委員
中 研 一	基生研教授	基生研委員

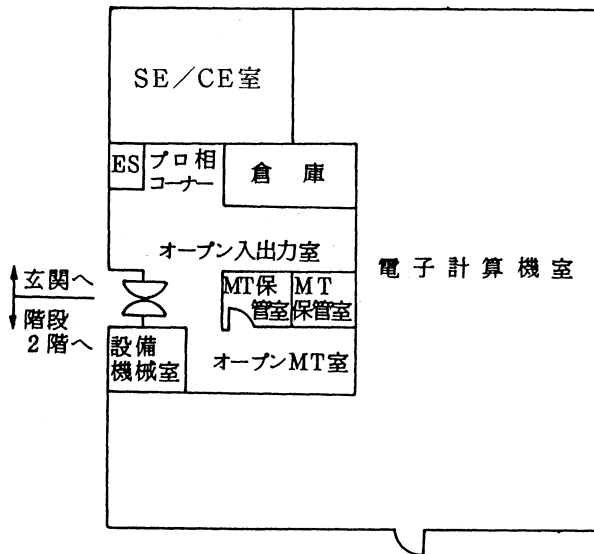
#### 7.5 電子計算機センター職員 (昭和62年7月現在)

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 景子 事務補佐員  
 桐山 久美子 事務補佐員（昭和61年9月採用，昭和62年2月退職）  
 安達 奈美 事務補佐員（昭和62年4月採用）

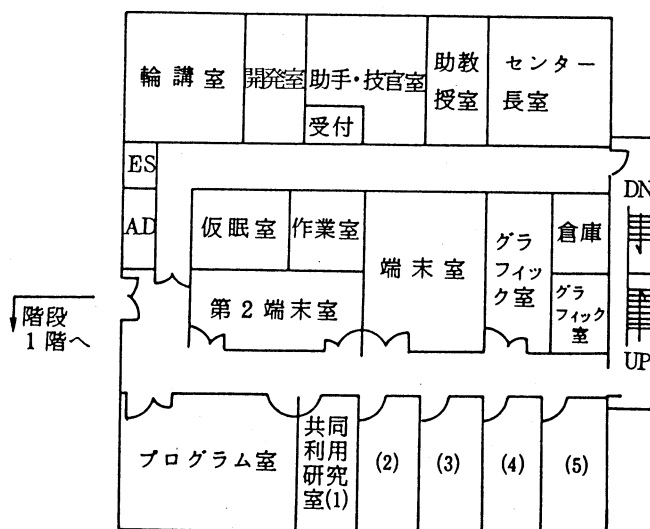
## 7.6 建物図

1階



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

## 2階



### 1) プログラム室

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

### 2) 共同利用研究室

遠隔地ユーザの居室。センターの許可を受けて利用する。

### 3) 端末室，第2 端末室

ディスプレイ型の各種T S S 端末が置かれ，自由に利用できる。

### 4) グラフィック室

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

## 7.7 応用プログラム相談員一覧

神谷 健秀 東大工，大学院生 昭和61年4月—昭和62年1月

関谷 雅弘 北大理，大学院生 昭和61年5月—昭和62年3月

## 7.8 端末設置状況（昭和62年6月現在）

### (1) リモートステーション

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

研究棟 MT 1 台, LBP 1 台, TSS 端末 4 台  
 UVSOR MT 1 台, LBP 1 台, TSS 端末 5 台, XYプロッタ 1 台,  
 グラフィック端末 1 台

(生理研) HITAC M-150

(機構情報図書館) HITAC L-330

(2) 構内回線 (ポートセレクト経由)

1200 BPS 2 4 ポート

9600 BPS 8 ポート

接続端末数 7 4 端末

(3) 電話回線

300 BPS 2 回線

1200 BPS (V.22) 2 回線

1200 BPS (VADIC) 3 回線

設置端局数 7 8 端末

(4) DDXバケット網

9600 BPS 1 回線 (論理多重度 15 回線)

設置端局数 5 4 端末

## 7.9 マニュアルの紹介と購入方法

よく利用されているマニュアルには以下のようなものがある。

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

〒113 東京都文京区本郷7-3-1

東大構内財団法人好仁会内

アカデミービジネスサービス (株)

電話 03-811-7786

FORTRAN 77 関係 (HAPを含む)

最適化FORTRAN 77 言語 . . . . . 8090-3-761

最適化FORTRAN 77 使用の手引 . . . . . 8090-3-765

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
TSLOG	8090-3-135
ASPEN, MODE	
ASPEN使用の手引	8090-3-330
MODE1解説	8090-3-333
KGRAF解説	8090-3-359
BGRAF解説	8090-3-360
データベース	
ORION利用の手引	8090-6-502
メッセージ	
システムメッセージ/コード	8091-9-010
サービスプログラムメッセージ	8091-9-063
MSL2, MATRIX/HAP	
MSL2機能編第1分冊	8080-7-120
MSL2機能編第2分冊	8080-7-121
MSL2機能編第3分冊	8080-7-141
MSL2操作編	8080-7-122
MATRIX/HAP	8090-7-035
ジョブ管理	
ジョブ制御言語	8091-3-017
ジョブ管理解説	8091-3-016
リンケージエディタ/ローダLNK/LD2	8090-3-317
データ管理	
データ管理解説	8091-3-042
ユーティリティ	
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・・・・ 8090-3-352

GPSL, PREVIEW

GPSL機能編第1分冊基本・機能ルーチン・・・・・・ 8080-7-096

プレビュープログラムPREVIEW・・・・・・・・・・・・ 8080-7-130

文書処理

日本語文書エディタDEDIT・・・・・・・・・・・・・・・・ 8090-7-020

日本語清書プログラム・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 8090-7-027

RUNOFF・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 8090-3-312