

# I 音 信

## 目 次

寄 語	大阪市立大学教授 西 本 吉 助	1
1. 計算機センターのこの1年		
	分子研電算機センター 北 浦 和 夫	3
2. スーパーコンピュータ・ワークショップの活動		5
3. 計算機システムの運用および使い方		7
3. 1 システムの構成と特徴		7
3. 2 ジョブクラスの構成		8
3. 3 利用課金点数		9
3. 4 通信・ネットワーク		9
3. 5 FORTRANのバージョンアップについて		13
3. 6 書換え可能な光磁気ディスクの運用について		13
3. 7 動画像出力システムについて		14
3. 8 ワークステーションの設置について		14
3. 9 平成3年度利用申請審査結果について		14
4. 一般報告		16
4. 1 分子研ライブラリプログラムの収集と開発		16
4. 2 データベース開発状況		25
4. 3 電子計算機センター運営委員会		26
4. 4 大型計算成果発表会		33
5. 平成2年度稼働状況および利用者数		34
5. 1 利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数		34
5. 2 システム稼働状況		34
5. 3 CPU時間		35
5. 4 ジョブ処理件数		36

5.5	所外ネットワーク・通信回線の利用状況	37
5.6	所内ネットワーク・通信回線の利用状況	38
6.	資料	39
6.1	センター関連組織	39
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	40
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	41
6.4	電子計算機センター運営委員会委員	42
6.5	電子計算機センター職員	42
6.6	建物図	43
6.7	応用プログラム相談員	43
6.8	端末設置状況（平成3年6月現在）	44
6.9	マニュアルの紹介と購入方法	45
6.10	利用者数とCPU時間の推移	47

## コンピュータと量子化学

大阪市立大学理学部教授 西本吉助

分子研電子計算機センターのご好意に甘えて、手回しの計算器（計算機ではない！）で量子化学計算を始めてから、足掛け38年、量子化学の魅力にとりつかれて、それから離れられない一研究者のつぶやきを聞いていただくことにしよう。

私が量子化学計算を始めたのは、1954年卒業研究のため故小泉正夫先生の研究室へ入ったときからである。卒業研究に与えられたテーマは“励起分子の酸化還元反応”であった。まず、励起分子のイオン化ポテンシャルを計算するため、電子遷移エネルギー、すなわち、電子スペクトルの量子化学計算をおこなった。最初は紙と鉛筆で計算したが、小泉研の加藤俊二先生が日本橋で中古の手回しのタイガー計算器を買ってきて下さり、毎日、チンジャラジャラと音をたてながら、数値計算をした。40歳以下の量子化学者は、このような経験をする機会はなかったであろう。たとえば、 $123456 \times 755$  を筆算でおこなうと、30秒はかかる。また、筆算では間違ふことだってある。これを手回し計算器で計算すると、123456とセットするのに約6秒かかり、7回ジャラジャラと回し、一桁ずらして5回回し、また一桁ずらして5回回すのに5秒かかる。したがって、この計算で11秒はかかることになる。ところが、現在、研究室にあるデスクトップのワークステーションSUN-4で同じ計算をすると、200万分の1秒で計算してしまう。つまり、小さなSUN-4は人力の6000万倍の速さで（すなわち、6000万人分の仕事）計算を正確におこなうという38年前では想像もできなかった超能力をもっている。分子研のスーパーコンピュータはSUN-4の100倍の能力をもっているから、想像を絶する数値演算機といえよう。1964年、アメリカに渡り、IBM7094という当時、世界で最高性能のコンピュータを使ってFORTRAN言語でMO計算をし感激した。なにしろ、1962年に半年かけて計算したのがわずかに5分で正確に計算できたのだから……。ところが、今では同じ計算は1秒もかからない。

人間は辛いときには知恵を働かせる。私たちは量子化学計算の簡略化の工夫をし、そのために群論や複素関数の勉強を一生懸命したものである。この過程で、いろいろな知恵がつき、アイデアがわいてきた。そして、量子化学者はそれぞれ自分自身の理論を発表し、量子化学的自然像や自然観を作り上げることができた。

約25年前、化学同人の音頭で量子化学の将来像について、座談会が開かれたことがある。そのとき、私の夢は辛い数値計算を機械がしてくれて、その結果を掘りごたつに足を突っ込んでコーヒーを飲みながら眺め、理論的な思考を巡らすことだと叫んだ。ところが、今はコーヒーを飲む時間もない位、素早くコンピュータは必要な計算をやってしまう。本当ならば、夢が実現すると、飛び上がって喜ぶところであろうが、今の私にはあまりにも早くて呆気なく、むなしい気さへする。多分これは、コンピュータのあまりにも速い進歩についていけない人間がこぼしている愚痴として笑われることであろう。しかし、はっきりいえることは、我々の年代の量子化学者は、数値計算の苦しみから逃れたいためにいろいろの工夫をし、アイデアを出し、理論を発表したが、数値計算の苦勞をまったくしなくてよい、ある意味で楽をしている現代の量子化学者がすごい理論の傑作をどんどん出していくのだろうかという心配もある。

何はともあれ、今は数値演算の超能力をもつコンピュータを友にして量子化学計算を楽しめる時代となった。学問はまず、好きになり、そしてそれが楽しめるとき、最も素晴らしいものとなる。未来豊かな若い量子化学者たちは、この夢の時代で何か素晴らしいもの、something new を発見し、研究者としての自信と誇りをもってほしいと思う。

日本の量子化学計算で常々感じていたことは、量子化学計算のプログラムを作るだけでは研究業績にならなかったことである。そのため、量子化学計算のプログラムはQCPEなどから輸入されていた。これは、現代の日本の量子化学が欧米に比べて少し後れを取った原因となっている。幸い、企業ではコンピュータ化学の重要性が認識され、良いプログラムを作れば、高く売れて金儲けができるようになった。これからは、企業の人達と大学や研究所の人達が手を結んで、理論とプログラムを分担して開発していくことにより、日本の量子化学は世界をリードできるのではないかと考える。今後、真剣に考えていかなければならない大きな問題である。

## 1. 計算機センターのこの1年

分子研電子計算機センター 北浦和夫

この1年間に当センターで行ってきた活動の概要を紹介する。

### 1. 1 スーパーコンピュータの更新に向けて

「ジョブが混んでいて結果がなかなかでてこないの、研究が思いどおりに進まない。」というユーザーの声がますます頻繁に聞こえてくるようになってきた。早急に計算処理能力を増強し事態を改善しなければ、計算分子科学の研究に重大な支障をきたすことになるという危機感が一層つづっている。一昨年より、スーパーコンピュータの更新を目指して取り組んできた結果、平成3年7月18日の官報に当センターのスーパーコンピュータ更新に関する資料招請が公告された。更新に向けてやっと第一歩を踏みだしたところであり、計画の実現にはさらに努力が必要で楽観はできないが、一筋の光が見えてきたと言えるだろう。

### 1. 2 ネットワークの整備

昨年来、ネットワークを利用した計算機利用環境を充実させるために、TCP/IPベースの機構内ネットワークを構築し、所外からもTCP/IPベースで当センターの計算機にアクセスできるようにするための整備を行ってきた。幸い、平成3年1月に学術情報ネットワークのノードが本機構に設置されたので、4月から国際理学ネットワーク(TISN)に加入し、学情網を利用したTCP/IPの通信ができる体制が整った。4月以降、一部のユーザーに試用して頂いて正式運用のための整備を進め、8月より全てのユーザーを対象にした試験運用に入った。ワークステーションを使っているユーザーにとっては利用環境が格段に改善されることと思う。従来からサポートしているNIネットワークとともに活用されることを期待する。

### 1. 3 計算の大規模化への対応

計算が大規模化してきたことに対応するために、従来最長ジョブは2時間であったが、新たに5時間のジョブクラスを新設した。長時間ジョブを処理するためには、長期間の連続運転を行う必要があり、いままで毎週月曜日に保守とセンター業務を行ってきたが、これらを月に一度（第一月曜日）にして、運用サイクルを一週間単位から一ヶ月単位に延長した。これにより、将来さらに長時間のジョブクラスを新設する可能性を含めて、今後数年間は計算の大規模化に対応できると考えている。

### 1. 4 S-820 動画システムの導入

当センターでは、前助教授・柏木浩（現九工大教授）、前班長・伊奈諭（現筑波情報短大助教授）を中心にグラフィックワークステーションIRISで稼働する、分子構造と波動関数の表示のための高機能な分子グラフィックスプログラム（KORIN）が開発され公開されてきた。一方、動画像を出力するためのシステムが、分子動力学法などで分子や分子集合体の動的過程の研究を行っているユーザーに切望されていた。この要望に答えるため、昨年末、S-820の動画像作成システムを導入し、FHLの協力のもと、分子構造をグラフィックス表示するための基本的なプログラムの開発と整備を進めてきた。このシステムは近いうちにユーザーに公開する予定である。これにより、研究が大幅に効率化できるものと確信している。是非、活用して頂きたい。

以上述べたように、計算処理能力の増強を追求しつつ、あわせて計算力にバランスした使いやすい計算機システムの構築と利用環境の改善に取り組んできた。これらすべて、当分の間（永遠に？）満足できる段階に到達できるとは考えられない。本センターの計算機システムを常に最高レベルに維持していくには、ユーザーの協力と支援が是非とも必要である。ご協力をお願いします。

## 2. スーパーコンピュータ・ワークショップの活動

北 浦 和 夫

柏木前助教授の後を受けて、スーパーコンピュータワークショップの第10回講演会を、平成3年3月5日～6日に開催した。主題は、「スーパーコンピュータとネットワークコンピューティング」で、副題は、「計算化学におけるワークステーション活用の現状と将来」である。

昨年、10MFLOPS程度の計算能力を持った低価格ワークステーションが出現した。これは、計算能力だけ見ればM680Hの1/2程度の性能であり、*ab initio* MO計算を含めて、分子計算に充分たえうる能力を持っている。今後、分子科学分野の分野の研究グループに、このレベルあるいはこれ以上の高性能ワークステーションが急速に普及することは間違いないであろう。

このような状況をふまえると、当センターのスーパーコンピュータとユーザーのワークステーション含めたコンピュータネットワークを構築し、それぞれの特徴を活かした分散処理体制を構築することが急務であると思われる。このような認識のもと、今回のワークショップでは、ワークステーション利用の現状、ネットワークの現状と将来、等の講演を核にして、計算化学分野のための分散処理体制のあり方を探った。

第10回講演会は約80名の参加をえて、盛会の中に終わった。この成果は、レポートNo. 8にまとめて発刊する予定である。

### 第10回公開講演会

(平成3年3月5日午後)

☆ はじめに

分子研センター 諸熊奎治

☆ 大型機とワークステーションを結ぶネットワークについて

慶応大 南部伸孝

☆ GAUSSIANとpower station、S820

分子研 古賀伸明

☆ ワークステーションと大規模計算

京都大 小杉信博

☆ SUNワークステーションによる分子計算

大阪市大 松下叔夫

☆ グラフィックワークステーションTITANによる  
分子シミュレーション

京都大 高橋勝利

☆ 計算機シミュレーションにおけるワークステーションの利用

京都大 田中秀樹

☆ スーパーコンピュータS-820/80の動画システムの紹介

ファコム・ハイタック 後藤稔

(平成3年3月6日午前)

☆ 高エネ研データ処理センターにおけるネットワークの現状

高エネ研 八代茂夫

☆ 三菱化成(株)総合研究所におけるコンピュータシステム  
構築の戦略

三菱化成 佐藤信行

☆ 国立天文台天文学データ解析センターのFACOM

M780/10SとSUN WS群を中心としたLANの現状

国立天文台 畑中至純

☆ 分子研電算機センターのネットワーク環境

分子研 長島雲兵

(平成3年3月6日午後)

☆ IFCにおけるコンピューティング環境と実例

基礎化研 長岡正隆

☆ 住友化学におけるクレイスーパーコンピュータの利用環境

住友化学 雪浦和雄

☆ 終わりに



### 3. 計算機システムの運用および使い方

#### 3.1 システムの構成と特徴

当センターのシステムは図 3.1.1 に示すように汎用計算機 M-680H とスーパーコンピュータ S-820/80 との疎結合マルチプロセッサ (LCMP) 構成となっている。

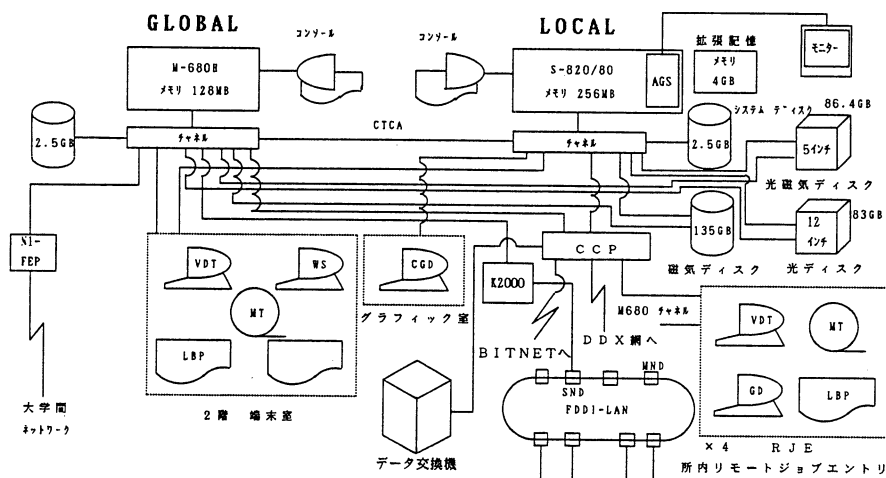


図3.1.1 システム構成概念図

- M-680HではTSS処理、ジョブ管理、バッチ処理を行い、S-820/80ではベクトル演算向けのバッチ処理を行う。しかしS-820/80でもTSS処理のサービスは行っている。
- 自動ジョブスケジュール機能（日立製作所と共同開発）により各種資源の柔軟かつ最適な割当が行える。また各種資源を最大限に必要とする大規模ジョブも他のジョブと混在させてシステム全体を有効に使うことができる。
- S-820/80では拡張記憶4GBを有し、通常の磁気ディスクと同様な使い方で2GB/秒の高速入出力を行うことができる。
- 総計140GBの磁気ディスク容量を擁し、CPUの高速化とあわせて大規模科学計算を可能としている。
- 機構内にFDDI準拠の100Mbps光ループLANを張り巡らしており、所内はもちろんのこと、三研究所のサブネットワーク（TCP/IP、DECNETなど）間を統合的に接続・利用できる。

- ・大容量の光ディスク装置を遠隔磁気テープ倉庫の代替機能として利用でき、所外の遠隔地ユーザの便に供している。
- ・T I S Nを経由しインターネットにアクセスできる。
- ・ネットワーク新時代に備えてI S D N経由のホスト接続を可能としている。
- ・M 6 8 0 HでB I T N E Tのサービスをしている。
- ・総計86.4MBの光磁気ディスク（書換え可能）を用意し、磁気ディスクの有効利用と遠隔地ユーザの利用制約をある程度解消している。
- ・動画像出力システム（A G S）によって、スーパーコンピュータでの計算結果の視覚化を可能にしている。

T I S N: (Today International Science Network)

### 3. 2 ジョブクラスの構成 < S-820/80 >

クラス	CPUタイム (分)		基本リージョン (MB)		拡張リージョン (MB)		ES (拡張記憶) (MB)	
	MAX	STD	MAX	STD	MAX	STD	MAX	STD
A	1	1	4	1	128	8	1920	0
B	5	5	4	1	128	8	1920	0
C	30	30	4	1	128	8	1920	0
D	120	30	4	1	128	8	1920	0
G	30	30	4	1	128	8	1920	0
S	600	30	7	1	224	8	3328	0
T S S	3	3	7	4	32	8	192	0

### < M-680H >

クラス	CPUタイム (分)		基本リージョン (MB)		拡張リージョン (MB)		ES (拡張記憶) (MB)	
	MAX	STD	MAX	STD	MAX	STD	MAX	STD
A	1	1	7	2	64	4	-	-
B	5	5	7	2	64	4	-	-
C	30	30	7	2	64	4	-	-
D	120	30	7	2	64	4	-	-
E	300	30	7	2	64	4	-	-
G	30	30	7	2	64	4	-	-
S	600	30	7	2	96	4	-	-
T S S	3	3	7	4	32	4	-	-

ただし、Sジョブは許可制である。Eジョブは夜間及び週末に処理される。

### 3.3 利用課金点数

平成3年度からM-680Hの利用点数をCPU1秒あたり現在の0.09から0.08に引き下げた。

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

CPU<sub>m</sub> : 全CPU時間 (M-680 H)

CPU<sub>s</sub> : 全CPU時間 (S-820 )

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

LP : 出力枚数

DISK : DISK使用総量 (MB \* hour)

係数の値は以下の通り。

a : 0.08/sec (改定前: 0.09)

b : 0.175/sec

c : 0.175/sec

d : 0.045/ページ

e : 0.00067/MB \* hour

各々の計算機におけるCPU1時間当りの利用点数は、以下のようになる。

M-680H 288点 S-820 630点

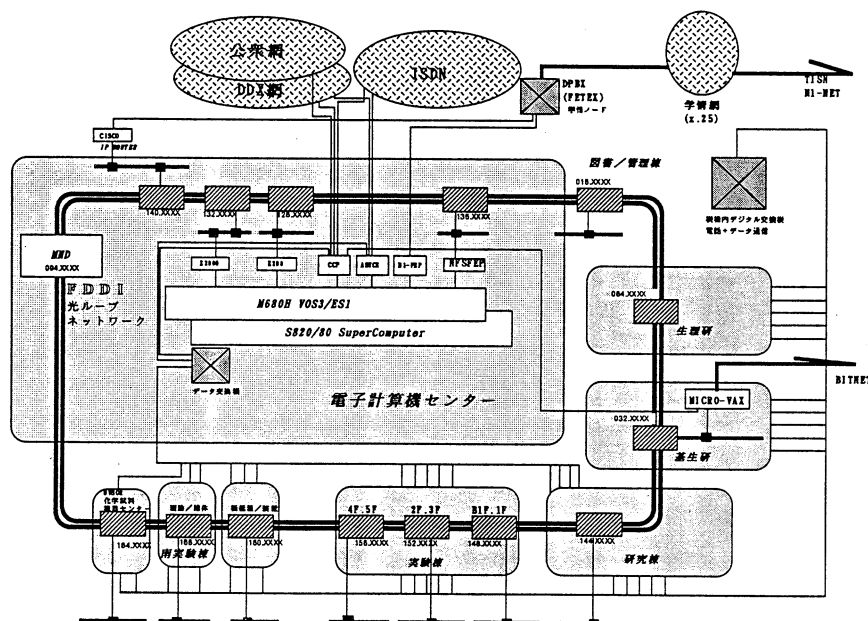
ただし、許可時間はCPU1時間に対し昨年通り400点が割り当てられる。

なお、S-820で実行するジョブのVPUがCPU比でおよそ25%以下の場合、利用点数をより多く消費することになるので、許可CPU時間を有効に使用するためにもM-680Hとうまく使い分けることが望まれる。

### 3.4 通信・ネットワーク

当センターの関連するネットワークの構成概念図を図3.4.1に示す。

図3.4.1 ネットワークの構成概念図



3. 4. 1 所外通信回線・ネットワーク

(1) N-1 ネットワーク

分子研計算機センターでは平成元年7月3日より、N1-TSSのサーバー・ユーザ機能を正式公開している。N1-RJE機能の公開は行っていない。当センターは岡崎国立共同研究機構内に設置されている岡崎ノードとつながっている。

利用できる機関とホスト名称（平成3年6月末現在）

分子研計算センターはサーバー・ユーザとして登録している。

分子研計算センターのサーバーホスト名：IMS

現在分子研計算センターと接続可能な計算センターは以下の通り。

機 関 名	ホ ス ト 名	利 用 形 態	使 用 計 算 機 名
		T S S	
北海道大学	HOKKAIDO	ユーザ/サーバ	HITAC M-682H
東北大学	TOHOKU	ユーザ/サーバ	ACOS S-2000
東京大学	TOKYO	ユーザ/サーバ	HITAC M-682H
東京大学	TOKYO1	ユーザ/サーバ	HITAC M-682H
名古屋大学	NAGOYA	ユーザ/サーバ	FACOM M-780/20
京都大学	KYOTO	ユーザ/サーバ	FACOM M-780/30
大阪大学	OSAKA	ユーザ/サーバ	ACOS S-2000
九州大学	KYUSHU	ユーザ/サーバ	FACOM M-780/20
学情センター	NACISIS	サーバ	HITAC M-680H
〃	SIMAIL	サーバ	ACOS S-1000/10
埼玉大学	SAITAMA	ユーザ/サーバ	HITAC M-260K
奈良女子大学	NARAJO	ユーザ/サーバ	FACOM M-760/6
広島大学	HIRODAI	ユーザ/サーバ	HITAC M-680H
お茶の水女子大学	OCHA	ユーザ	IBM4381-R24
京大化学研究所	KAKEN	ユーザ	FACOM M-380Q
弘前大学	HIROSAKI	ユーザ	ACOS-850/10
大阪府立大学	OFUDA I	ユーザ/サーバ	ACOS S-930/10
千葉大学	CHIBA	ユーザ/サーバ	HITAC M-680D
東大物性研究所	ISSP	ユーザ/サーバ	FACOM M-380R
熊本大学	KUMAMOTO	ユーザ	FACOM M-360
愛媛大学	EHIME	ユーザ/サーバ	FACOM M-360AP
静岡大学	SUIPC	ユーザ	ECLIPSE MV-15000/20
豊橋技術科学大学	TOYOGI	ユーザ/サーバ	ECLIPSE MV/2000 model1
金城学院大学	KINJO	ユーザ/サーバ	FACOM M760/4
信州大学	SHINI	ユーザ	HITAC M-260D
横浜国立大学	YOKOI	ユーザ/サーバ	HITAC M-280D
電気通信大学	UEC	ユーザ	IBM-3090/180S
東洋大学（川越校舎）	TOYOK	ユーザ	MV250DC
岡山理科大学	OKARIDA I	ユーザ/サーバ	FACOM M380
東京工業大学	KODAI	ユーザ/サーバ	HITAC M-640/20E
奈良教育大学	NARAKYO	ユーザ	ECLIPSE MV/9500
金沢大学	KANAZAWA	ユーザ/サーバ	FACOM M-760/20
岐阜大学	GIFUDA I	ユーザ/サーバ	FACOM M-760/6
岡山大学	OKAYAMA	ユーザ/サーバ	ACOS 2010
宮崎大学	MIYAZAKI	ユーザ/サーバ	FACOM M-760/6

接続機関一覧



(3) BITNET

平成3年6月よりM680HによるBITNETのサービスを開始した。

これにより、今まで所内ユーザに限られていたサービスを所外ユーザでも利用できるようになった。利用はTSS上でUMAILコマンドでおこなう。

① 利用方法は以下のとおりである。

a) 作業環境の作成 (初めて利用する場合のみ)

UMNICK

b) UMAILの実行

UMAIL

詳細はASPENのTUTORコマンドで参照できる。

② お断わり

UMAILコマンドは、HOAPMAIL (日立製) を基盤として作られているため、他のBITNET専用ソフトで可能な機能でもサポートしていない場合がある。

(4) 公衆網、DDX、ISDNサービス

	通信速度	回線数	手順	電話番号
電話回線	1200bps (V.22)	2回線	TTY	0564-53-6113 (代)
DDX回線	9600bps	1回線	TTY	163-060-5722107
ISDN回線	9600bps (Bch)	2回線	TTY	0564-57-1170、1171

DDX回線は物理的には1回線しかないが論理的に多重化しているため15端末まで同時に接続可能になっている。

3. 4. 2 構内通信回線、ローカルエリアネットワーク

(1) 構内データ交換機

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

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

## (2) A S T C E

無手順端末から560/20端末にエミュレートするACTCE の設置がされている。現在、所内からのアクセスのみ可能であるが、所外ユーザの利用もできるよう準備中である。これによりK2000-KNET経由と同様に大型機でのエディタ利用などがフルスクリーンで可能である。

## (3) N F S - F E P

大型機のファイルが共用ファイル（NFS 用ファイル）としてWSより利用可能になっている。現在、SUN,NEWS, 2050で動作確認されており、今後他機種に対しても利用できるよう準備中である。利用する場合はWS側にNFS-クライアントのインストールが必要である。

### 3. 5 F O R T R A Nのバージョンアップについて

現在一般公開中の23-00を平成2年10月29日（月）から24-00にレベルアップした。センター内で各種のテストを行ったが、24-00は大きなバグもなくかなり安定したコンパイラとなっている。

24-00で新たに拡張された主な機能は以下の通り。

- 1) 直接アクセスファイルの増分割当機能
- 2) P I Oファイルのopen文でのappend指定
- 3) 入出力書式に於ける英小文字指定及び英小文字を含む数値データの入力
- 4) I / Oチューニング機能に於ける実行時間推定機能
- 5) F O R T / V F 静的性能予測機能
- 6) 変数名31文字化（8文字） F 8 X仕様
- 7) 変数名にアンダースコア（" \_ "）使用可 F 8 X仕様
- 8) 暗黙的型指定の無効化（IMPLICIT NONE）可能 F 8 X仕様
- 9) H A P時のSUBCHK（添え字範囲チェック）
- 10) デバッグ総称オプション

この他にも関数の性能や実行性能向上のための改善がなされている。

### 3. 6 書換え可能な光磁気ディスクの運用について

平成3年1月に書換え可能な光磁気ディスクライブラリ装置（3台）を導入しサービスを開始した。光磁気ディスクは主にファイルの二重化や計算結果の蓄積、当面使用しないファイルの退避などに使用してもらい、磁気ディスクの有効利用と遠隔地からの利用の制約をできるだけなくすことを運用の主眼としている。

光磁気ディスクはプロジェクトに1ボリュームずつ無償貸与している。

プロジェクトが希望すれば2ボリューム以上使用することができる。この場合、各プロジェクトで光磁気ディスク媒体を購入し、センターに提供して頂く。無償貸与とは二者択一となる。ただし、ライブラリ装置に格納できる枚数に限りがあることからプロジェクトの希望に添えない場合もある。

### 光磁気ディスクライブラリの仕様

5インチ書換え可能型 3台導入(144枚・288ボリューム)

48枚/台、2ボリューム/枚、300MB/ボリューム

光磁気ディスク媒体の価格 3万円(定価)

### 3.7 動画像出力システムについて

スーパーコンピュータによる動画像出力システムの運用を4月から開始している。現在のところおよそ最大40秒間の動画の一括表示ができる。ソフトウェアはKGRAF MOVIEおよび分子モデル動画像作成サブルーチンパッケージが使用できる。

問い合わせ先: 電算機センター(担当 西本)

### 3.8 ワークステーションの設置について

一般的に標準として使用されているワークステーションやパソコンをセンター端末室に設置しユーザーに公開している。新たにSUNのワークステーションを設置すると共に従来のワークステーションの拡充・強化を行っている。

- 1) Sun SPARC Station 2GS --- 新規設置  
日本語 OpenWindows 2.0  
3次元フルカラーグラフィック(SunPHIGS)  
DOS Window
- 2) SONY NEWS 1460  
NEWS-OS 4.0 DESKTOP
- 3) Apple MACintosh Ci  
Kanji Talk 6.0.7
- 4) IBM PS55/5530T  
MS Windows 3.0  
DOS/V J4.0
- 5) NEC PC9801DA/U7  
日本語 MS Windows 3.0  
PC-UX (V3.2) 日本語 OpenDesktop

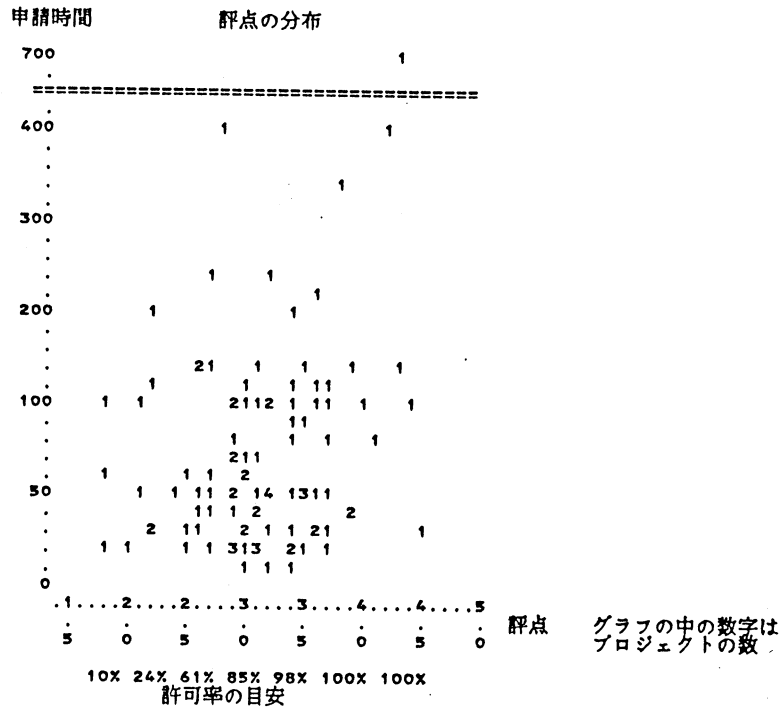
### 3.9 平成3年度利用申請審査結果について

第21回電子計算機センター運営委員会における審査の結果、各プロジェクトの評価および許可時間が決まった。評点は運営委員の個別の採点(0~5)の平均値に基いている。許可率は所外利用者に分配可能な全CPU時間に依存する簡単な関係式を用いて評点および前年度使用率から算出される。許可時間は申請時間に許可率をかけたものである今年度の平均許可率は85%になった。

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



研究内容が高く、計画のしっかりした申請時間の妥当な提案をされることが望まれる。次図に見られるように評点は1.88から4.50まできわめて幅広く分布しており、これによって許可率も9%から100%にわたっている。



#### 4. 一般報告

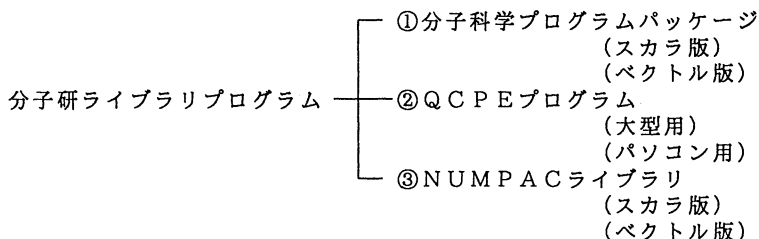
##### 4. 1 分子研ライブラリプログラムの収集と開発

平成2年度のライブラリ開発計画を表4. 1. 1に示す。開発されたライブラリは新規プログラムの登録あるいは既存プログラムの改良・発展というかたちでライブラリ管理システムを介してユーザに公開されている。

表4.1.1 平成2年度 分子研ライブラリプログラム開発作業一覧

1	正村 眞佐雄	岡山大	助手	CHELP とNBO の移植
2	斎藤 俊和	早稲田高校	教諭	差分法による分子振動解析
3	二宮 市三 桑野 南茂 山 茂義	中京大 中京大 中京大	教授 教授 助教授	数学ライブラリNUMPAC の開発、移植
4	寺倉 清之 柳瀬 尚朝	東大 阪府大	教授 教授 助手	固体バンド計算のプログラム FLAPWの開発
5	岩田 末廣 橋本 健朗 南 伸孝 松入 秀則	慶応大 慶応大	教授 博士 大学院生 大学院生	MOLYX-SCF-CIシステム
6	藏下 聡 上川 寿 高橋 修	広島大	助手 大学院生 大学院生	分子軌道計算のプログラム COLMBSの開発整備
7	田中 秀樹 北尾 修 西村 徹 林 治 吉松 研 本 正和	京大	助手 大学院生 大学院生 大学院生 大学院生 大学院生	溶液の計算機シミュレーションの ためのプログラム開発
8	別府 良孝	聖徳学園 女子短大	助教授	高性能固有値ルーチン
9	酒井 嘉子 三好 永作 富 種文	九大 九大 北大	教授 助教授 助教授	モデルポテンシャル関数データの 整備
10	後藤 仁志 J.M. Rudzinski	北大	大学院生 大学院生	分子力場計算法における アプリケーションソフトの開発
11	柏木 浩	九工大	教授	分子軌道関連のプログラム KORIN, JAMOL, JASONの開発整備
12	古賀 伸明 藤井 俊	分子研	助手 大学院生	分子軌道計算プログラム GAUSS88の整備
13	本多 一彦 富 雅文	分子研 北大	技官 研究生	QCLDB 検索プログラムの バージョンアップ版の移植
14	長嶋 雲兵衛 富 雅文 本 一彦	分子研 北大 分子研	助手 研究生 技官	プログラムライブラリ管理 システムの開発
15	酒井 章吾 影 海琳	阪産大	助教授 研究生	GAMESSノースダコタ版の HITACHI マシンへのコンバート
16	成田 進樹 原 樹己 林 修己	信州大	助教授 大学院生 大学院生	マッキントッシュ用ターミナル エミュレータの開発
17	松下 叔夫 麻田 雄治 浦下 真	阪市大	助手 大学院生 大学院生	HONDO7のSUN ワークステーション への移植
18	志田 典弘 竹下 幸裕 山 裕一	分子研 東大 北大	助手 講師 助手	Hermit-Sirius-Abacus, Vibr4 プログラムシステムの移植
19	小原 繁 中島 徹	京大	助手 大学院生	KOIOのメンテナンスと機能拡張

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Q C P Eプログラムを現行システムにコンバートしたものなど150件が収まっている。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-820)で実行させるためのベクトル版の2種を用意している。ライブラリプログラムの大部分については実行可能ロードモジュールも登録されているので、ユーザは即座にプログラムを実行することができる。

平成2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4本である。

CHELP NET ATOMIC CHARGES FROM AB INITIO ELECTROSTATIC POTENTIALS  
NBO NBO:NATURAL BOND-ORBITAL WAVEFUNCTION ANALYSIS PROGRAM  
MDH208 MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION FOR PURE WATER  
ASPPRT TERMINAL EMULATOR FOR MAC

②のQ C P Eプログラムは米国インディアナ大学に登録されているQ C P E (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544本である。量子化学の分野でよく使われる有名なプログラムのみならず、数学・物理・化学一般のプログラムも含まれており、非常に有益なものである。ほとんどのプログラムはFORTRANで書かれている。

また平成2年9月より、主に汎用大型機用Q C P Eプログラムに加えパーソナルコンピュータ版(IBM-PC、マッキントッシュ)のQ C P Eプログラムを公開している。インタラクティブな操作に優れた分子グラフィックスなどのプログラムを含む。IBM-PC用が80件、マッキントッシュ用が14件である。一覧は、'SYS7.NEWS.DATA(IBMPC)'と'SYS7.NEWS.DATA(MAC)'にある。

ユーザにはQ C P E(主に汎用大型機用)は磁気テープによる、Q C P Eパーソナルコンピュータ版は3.5インチフロッピーディスクによる貸出しサービスをセンター窓口で行っている。

平成2年度に新規登録したQ C P Eプログラムは以下の7件である。

QC0585 MAGOPS: ONE-ELECTRON OPERATOR PROGRAM  
QC0586 CND0-SIGMA\*: ENERGIES OF SIGMA\* ORBITALS  
QC0587 ATOMIC SELF-CONSISTENT-FIELD PROGRAM (BIELEFELD VERSION)  
QC0588 RANDOM INCREMENTAL PULSE SEAECH  
QC0589 MOPAC 5.0 ESP (ELECTROSTATIC POTENTIAL)  
QC0591 3JHH2:NMR VICINAL PROTON-PROTON COUPLING CONSTANT PACKAGES  
QC0592 GENERATION OF RING CONFORMERS BY CORNER-FLAPPING ALGORITHM

③のNUMPACプログラムは二宮市三教授（中部大）、秦野甯世教授（中京大）らにより製作された名古屋大学大型計算機センターの数値計算ライブラリプログラムを移植したものである。総件数は861本である。

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

表4.1.2 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 MDAN03 MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE
002 DVSCAT NUMERICAL-BASIS-SCC-DV-XALPHA MO AND CLUSTER CALCULATION
003 EHTB  EXTENDED HUCKEL METHOD FOR TWO DIMENSIONAL PERIODIC SYSTEMS
004 FLAPW  SELF-CONSISTENT ENERGY BAND CALCULATION BY FLAPW MEHOD

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

NO. PROGRAM ID      PROGRAM TITLE
001 BAND1  EXTENDED HUCKEL CALCULATIONS OF ONE-DIMENSIONAL POLYMERS

FIELD CODE : AS30
FIELD TITLE : LIQUID AND SOLUTION.

NO. PROGRAM ID      PROGRAM TITLE
001 MDAN03 MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE
002 MDSALT MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION FOR MOLTEN SALT
003 CLAMPS CLAMPS: CLASSICAL MANY PARTICLE SIMULATOR
004 NLPLSQ LEAST-SQUARES PROGRAM FOR REFINING LIQUID STRUCTURE MODELS
005 KURVLR PROGRAM FOR ANALYSING X-RAY DIFFRACTION DATA OF LIQUID
006 CCP5   CCP5 SIMULATION PROGRAMS
007 MDH208 MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION FOR PURE WATER

FIELD CODE : 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 : 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	MMPI1	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 100-ATOM MOLECULES
003	MMPI3	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 300-ATOM MOLECULES
004	MMIY3	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION FOR 6-COORDINATED COMPOUNDS
005	MDANO3	MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE
006	CLAMPS	CLAMPS: CLASSICAL MANY PARTICLE SIMULATOR
007	BGSTR3	BIGSTRN3: A GENERAL PURPOSE EMPIRICAL FORCE FIELD PROGRAM
008	CCP5	CCP5 SIMULATION PROGRAMS

FIELD CODE : DB10

FIELD TITLE : DATA BASES.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	QCLDB	QUANTUM CHEMISTRY LITERATURE DATA BASE SYSTEM
002	QCHECK	CHECK ROUTINE OF QUANTUM CHEMISTRY LITERATURE DATA BASE
003	ISLINE	ATOMIC AND MOLECULAR SPECTRAL LINE DATA RETRIEVAL SYSTEM
004	CHEMIC	CHEMICS :AUTOMATED ORGANIC CHEMICAL STRUCTURE ELUCIDATION
005	IR2	INFRARED SPECTRAL RETRIEVAL SYSTEM
006	CMQCA	CARNEGIE-MELLON QUANTUM CHEMISTRY ARCHIVE
007	STERIC	STEREOCHEMISTRY BY INPUT OF CHEMO
008	QCBDB	QUANTUM CHEMISTRY BASIS SET DATA BASE
009	MPBDB	MODEL POTENTIAL BASIS SET DATA BASE

FIELD CODE : EG10  
FIELD TITLE : EDUCATIONAL TOOLS.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	OTHELLO	*** OTHELLO GAME FOR TSS EDUCATION ***

FIELD CODE : EG20  
FIELD TITLE : GENERAL UTILITIES.

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

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	EMORI	EXTENDED METHOD OF OPTIMAL RELAXATION FOR EIGENPROBLEMS

FIELD CODE : NM40  
FIELD TITLE : SYMMETRY ANALYSIS.

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

FIELD CODE : SC10  
FIELD TITLE : SCATTERING AND TRAJECTORY.

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

FIELD CODE : SC20  
FIELD TITLE : CRYSTALLOGRAPHY.

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

017 KURVLR PROGRAM FOR ANALYSING X-RAY DIFFRACTION DATA OF LIQUID  
018 CRYSTA PROGRAM SYSTEM FOR CRYSTAL STRUCTURE ANALYSIS  
019 EXAFS GRAPHIC PROGRAM SYSTEM FOR EXAFS ANALYSIS

FIELD CODE : SL10  
FIELD TITLE : SPECIAL LANGUAGES.

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

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

NO. PROGRAM ID PROGRAM TITLE  
001 DIAVIB CALC. OF NUMERICAL VIBRATIONAL WAVEFUNCTION FOR DIATOMICS  
002 DIAINT CALC. OF FCF AND ELECTRONIC SPECTRA OF DIATOMIC MOLECULES  
003 MMPI1 MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 100-ATOM MOLECULES  
004 MMPI3 MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 300-ATOM MOLECULES

FIELD CODE : SS30  
FIELD TITLE : NMR SPECTROSCOPY.

NO. PROGRAM ID PROGRAM TITLE  
001 DNMR3 SIMULATION OF EXCHNGE BROADENED NMR SPECTRA  
002 LAOCN3 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  
 016 FEMSE2 FINITE ELEMENT METHOD FOR 2-DIMENSIONAL SCHRODINGER EQ.

FIELD CODE : WF10

FIELD TITLE : WAVEFUNCTIONS BY AB INITIO METHODS.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	QCLDB	QUANTUM CHEMISTRY LITERATURE DATA BASE SYSTEM
002	JAMOL3	AB INITIO LCAO MO SCF CALCULATION
003	ATOMHF	AB INITIO LCAO SCF OF ATOMS. GAUSSIAN ORBITALS ARE USED.
004	HONDOG	AB INITIO LCAO-SCF-MO METHOD AND GRADIENT METHOD
005	SCEP	SELF-CONSISTENT ELECTRON PAIRS METHOD
006	IMSPAC	AB INITIO SCF MO CALCULATIONS
007	IMSPAK	GEOMETRY OPTIMIZATION BY AB INITIO SCF-MO CALCULATIONS
008	PA200	LIST OF ONE- AND TWO-ELECTRON INTEGRAL LABELLS
009	PA300	EVALUATE ONE- AND TWO-ELECTRON INTEGRALS
010	PA409	CLOSED-SHELL SCF AND POPULATION ANALYSIS PACKAGE
011	PA600	ONE-ELECTRON PROPERTIES PACKAGE
012	INTCPY	INTEGRAL COPY ROUTINE OF POLYATOM SYSTEM
013	GAUS76	AB INITIO MO CALCULATION. GAUSSIAN 76 M-VERSION.
014	ALIS	AB INITIO MCSCF PROGRAM FOR ATOMS AND MOLECULES
015	JAPIC1	PLOTTER WRITING OF MO AND DENSITY BY AB INITIO METHODS
016	JAPIC2	PLOTTER AND GRAPHIC DISPLAY WRITING OF MO AND DENSITY
017	GUGACI	GRAPHICAL UNITARY GROUP APPROACH CI BY ISAIAH SHAVITT
018	DRAWDG	DIAGRAM:GENERATION OF GOLDSTONE AND BLOCH-BRANDOW DIAGRAMS
019	GSCF2	PROGRAM GSCF2 WITH ONE-HAMILTONIAN AND PARTIAL SCF METHOD
020	GAMESS	GENERAL ATOMIC AND MOLECULAR ELECTRONIC STRUCTURE SYSTEM
021	GAUS80	GAUSSIAN 80 : AB INITIO MO CALCULATION (HITAC VERSION)
022	ALCHEM	ALCHEMY:AB INITIO ELECTRONIC STRUCTURE CALCULATION PACKAGE
023	CMQCA	CARNEGIE-MELLON QUANTUM CHEMISTRY ARCHIVE
024	ATOMCI	CONFIGURATION INTERACTION PROGRAM FOR ATOMS
025	CASSCF	A PROGRAM FOR COMPLETE ACTIVE SPACE SCF CALCULATIONS
026	PSHOND	PSEUDOPOTENTIAL VERSION OF MO PROGRAM HONDO
027	MELD	PROGRAM FOR MANY ELECTRON DESCRIPTION
028	JANIE1	NUMERICAL INTEGRATION OF ELECTRON DENSITY
029	GRAMOL	GRADIENT METHOD PROGRAM
030	COLMBS	COLUMBUS: A PROGRAM SYSTEM FOR SCF,MCSCF AND MR-SDCI CALC.
031	ATOMST	SCF PROGRAM FOR ATOMIC CONTRACTED STO CALCULATIONS
032	GAUS82	GAUSSIAN 82:AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS
033	MICA3	A PROGRAM SYSTEM FOR CONFIGURATION MIXING CALCULATION(CI)
034	SAC85	SAC/SACCI PROGRAM FOR GROUND,EXCITED,IONIZED AND ANION STATE
035	GSCF3	PROGRAM GSCF3 FOR SCF AND CI CALCULATION
036	QCBDB	QUANTUM CHEMISTRY BASIS SET DATA BASE
037	JASON2	CASSCF CALCULATION WITH LARGE BASIS SET
038	SCMOLX	MOLYX-SCF
039	CIMOLX	MOLYX-CI
040	KAMUY	KAMUY:AB INITIO CI CALCULATION OF ELECTRONIC STRUCTURE
041	FEMSE2	FINITE ELEMENT METHOD FOR 2-DIMENSIONAL SCHRODINGER EQ.
042	MPBDB	MODEL POTENTIAL BASIS SET DATA BASE
043	JAMOL4	AB INITIO LCAO MO SCF CALCULATION

044 HONDO7 HONDO VERSION 7.0: AB INITIO MO CALCULATION  
 045 PSI A SUITE OF AB INITIO QUANTUM MECHANICAL PROGRAMS  
 046 KOTO KOTO: AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS  
 047 MND0C CORRELATED SEMIEMPIRICAL CALCULATIONS WITH GEOM.OPT.  
 048 GAUS86 GAUSSIAN 86:AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS  
 049 CRY88 CRYSTAL 88: AB INITIO LCAO-HF PROGRAM FOR CRYSTAL SYSTEMS  
 050 CHELP NET ATOMIC CHARGES FROM AB INITIO ELECTROSTATIC POTENTIALS  
 051 NBO NBO:NATURAL BOND-ORBITAL WAVEFUNCTION ANALYSIS PROGRAM

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MIND03	MO CALCULATIONS BY MINDO/3 METHOD
002	CNINDO	MO CALCULATION BY CNDO AND INDO METHODS
003	MNDOM	MODIFIED VERSION OF MND0 SCF MO CALCULATION PROGRAM
004	FPTNMR	CALCULATION OF NMR CHEMICAL SHIFT BY FPT-INDO/CNDO
005	CNDOS	CNDO/S-CI: MODIFIED CNDO AND CI METHOD
006	MND0C	CORRELATED SEMIEMPIRICAL CALCULATIONS WITH GEOM.OPT.
007	FPTSPN	NMR SPIN-SPIN COUPLIN CONSTANT CALCULATION BY FPT INDO
008	GHFID	GENERAL HARTREE-FOCK CALCULATION
009	BAND1	EXTENDED HUCKEL CALCULATIONS OF ONE-DIMENSIONAL POLYMERS
010	MOPAC	A GENERAL MOLECULAR ORBITAL PACKAGE

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

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

\*\*\*\* TOTAL NUMBER OF UNIQUE PROGRAMS \*\*\*\*  
 150

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

ALCHEM	ALIS	ASA	ASPPRT	ASSIGN	ATOMCI	ATOMHF
ATOMST	BAND1	BCRES3	BC3	BENDER	BGSTR3	BSIP
CASSCF	CCP5	CGTOFD	CGTORL	CHELP	CHEMIC	CIMOLX
CLAMPS	CMQCA	CNDOS	CNINDO	COLMBS	CONVRT	COUNTF
CRYSTA	CRY88	CSACST	CVOA	DIABNT	DIABIV	DISMAP
DISPL3	DNMR3	DRAWDG	DVSCAT	EHTB	EMOR1	ENVLOP
EXAFS	FCBSD	FCMP	FEMSE2	FLAPW	FLOW	FORDAP

FPTNMR	FPTSPN	GAMESS	GAUS76	GAUS80	GAUS82	GAUS86
GHFID	GORDON	GPQDD	GRAMOL	GSCF2	GSCF3	GUGAC1
HLISP	HMO	HONDOG	HONDO7	HUCKEL	ICON	IMSPAC
IMSPAK	INTCPY	IR2	ISLINE	JAMOL3	JAMOL4	JANIE1
JAPIC1	JAPIC2	JASON2	JHH	KAMUY	KOTO	KURVLR
LAOCN3	LIBE	LSRES3	LSVR3	MDAN03	MDH208	MDP
MDSALT	MELD	MICA3	MIND03	MMIPI1	MMIPI3	MMIY3
MM2	MNDOC	MNDOM	MOLSC1	MOPAC	MPBDB	MPXALP
MULTAN	NASH	NBO	NCTB	NICER	NLPLSQ	ORTEP
OTHELO	OUTFIT	PA200	PA300	PA409	PA600	PDB
PFORTV	PGCCMB	PKIT	POTOPS	PPP	PROFIL	PRTXYZ
PSHOND	PSI	PSPART	PSTOPO	QCBDB	QCHECK	QLDB
REDUCE	REPORT	SAC85	SALS	SCEP	SCMOLX	SERIES
SFORT	STEREO	STERIC	STINGY	SUPPOS	TASP	TSS517
UNICS3	VREPRT	WIGNER				

#### 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7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)
- (7) MPBDB (モデルポテンシャル関数データ)

#### 4. 3 電子計算機センター運営委員会

##### 4. 3. 1 第20回電子計算機センター運営委員会議事報告

第20回電子計算機センター運営委員会が平成2年9月11日（火）に開かれた。以下に議事の要約を掲載する。

##### 1. 所長報告

##### 2. 前回議事録朗読

##### 3. センターからの報告

#### (1) センターの人事異動およびその予定が述べられた。

前回議事録に記載されているプログラム相談の統計、S820利用時のWARNING出力、パラレルI/Oの奨励、磁気ディスクの許可量についての広報、利用点数の変更についての経過報告があった。

#### (2) 平成2年度計算機稼働および利用状況、電力使用状況

M-680H、S-820/80システムの電力使用状況、稼働状況、ジョブ件数、CPU時間が資料に基づいて報告された。

運営費の面から、使用電力料金についてはまだ余裕があるとの判断が述べられた。またCPU時間の比較からM680HとS820はバランス良く使われていること、S820のジョブのベクトル化が進んでいることが報告された。次に、分野区分別のCPU使用状況、所外からのTSSの利用状況が示された。所外ではM680Hが、所内ではS820がよく使われていること、公衆網の1200bpsとDDXからの利用が2割程減っていること、N1の通信速度を48Kbpsにして回線の接続待ちがなくなったことが報告された。

#### (3) 平成2年度予算と使途

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

#### (4) 平成2年度計算機時間配当状況、追加状況

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

続いて前回（第19回）委員会で警告書簡を発することになっていた九プロジェ

クトに対して送付された手紙の文面が示された。

次に、前回委員会後の追加申請にたいする審査の結果5件に対する評価状況が示され評点通りで承認された。

(5) 平成2年度施設利用旅費割り当て状況

前期の割当一覧が示され説明があった。前期は6プロジェクトに対して220,780円が割り当てられた。旅費の割当方針は従来通りで遠方、小規模な研究室、最近割当をもらっていない研究室を中心に行なった旨が報告された。

(6) ライブラリプログラム開発状況

分子科学プログラムパッケージ、QCPEプログラム、NUMPACライブラリの登録、サービス状況が資料によって報告された。今年QCPEプログラムのパソコン版(PC用80件、MAC用14件)を購入し、現在公開準備中であるとの報告があった。

(7) データベース開発・サービス状況

登録、サービスを行っている7件のデータベース(QCLDB、CMQCA、CHEMICS、IR2、STERIC、QCBDB、MPBDB)について現状の報告があった。また、今年度開発計画についてはQCLDB、FCDBの2件に絞って開発を援助しており、来年にはFCDBを公開できそうであるとの報告があった。

(8) 平成2年度ライブラリプログラム開発計画及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(13件)と個々の旅費、謝金の割り当て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。

4. 平成2年度後期および平成3年度計算機運用方針

運用方針案が提出され、いずれも了承された。

(1) 学情ノードの設置

平成3年1月に学情ノードが岡崎機構内に設置されるとの説明があった。

(2) SCIENCE NETの導入

平成3年度中を目標にSCIENCE NET(国際理学ネットワーク)に加入する計画について説明があった。

(3) BITNETの導入

M680HでのBITNETの運用について説明があった。宛て先をユーザーIDにしないでニックネームでできるようにするため正式運用は来年度になるとの見通しが述べられた。

(4) BN100ルータの導入

FDDIループネットにルータの機能を付加する予定であるとの説明があった。

(5) デジタルPBXの導入

ポートセレクタの後継機としてデジタル交換機を導入する計画について説明がなされた。次世代通信網であるISDNを活用して多様なサービスに対応できるように準備するとの説明があった。

(6) VOS3/NFSの導入

平成2年12月末に大型システムのディスクをワークステーションやパソコンなどから共用できるシステムを導入する計画が述べられた。

(7) SUNワークステーションの導入

ワークステーションの整備の一環として、今年度はSUNのワークステーションを導入するとの説明がなされた。

(8) FORTRANコンパイラのバージョンアップについて

FORTRAN(24-00)の機能、テスト状況、性能について報告があり、ユーザ公開の見通しが述べられた。

(9) 光磁気ディスクライブラリの導入

平成2年12月末に導入する光磁気ディスクライブラリの運用について、当初は保存データセットのバックアップ用としてユーザーに公開したいとの説明があった各プロジェクトに片面(300MB)ずつ用意し、その分の光磁気ディスク媒体はセンターで購入する旨が述べられた。また、サポートソフトウェアはDMF/BKUPを使用するが、遠隔地のすべてのユーザーが使用できるようにメーカーに要望中であるとの説明がなされた。

(10) 週間運用から月間運用への変更

一週間単位の運用形態から一ヶ月単位の運用形態へ変更することにより、週初めのセンター業務・保守のための週末の計画停止をなくして長時間ジョブに対応できるようにすることを現在検討中であるとの説明がなされた。

#### 5. 平成2年度後期計算機時間配分案

平成2年度後期のCPU時間配分案が資料に基づいて説明・検討された。

#### 6. 平成2年度後期利用申請審査

協力研究後期8件、施設利用(B)後期2件の審査が資料に基づいて行なわれた。

審査は主に重複申請の可能性のあるもの、各委員間の評点の中の大きなもの、評価の低いものに重点をおいて議論された。この結果次のプロジェクトには以下の処置を行なうこととした。

(協力研究後期)

A 施設利用と重複が認められるので6時間を減らすことになった。

この旨を手紙で通知することになった。

C D氏のプロジェクトと重複が認められるため、D氏の許可点数

から22時間を減らすこととした。この旨を手紙で通知する

ことになった。

E F氏のプロジェクトと重複が認められるため、F氏の許可点数

から8時間を減らすことになった。この旨を手紙で通知する

ことになった。

討論の結果、そのほかの各課題は採点通りの許可が認められた。

#### 4. 3. 2 第21回電子計算機センター運営委員会議事報告

第21回電子計算機センター運営委員会が平成3年2月28日(木)に開かれた。以下に議事の要約を掲載する。

##### 1. 所長挨拶

##### 2. 前回議事録朗読

##### 3. センターからの報告

(1) センターの人事異動の予定が述べられた。

(2) 次期委員の予定が述べられた。

(3) 平成2年度計算機稼働および利用状況、電力使用状況

M-680H、S-820/80システムの電力使用状況、稼働状況、ジョブ件

数、CPU時間が資料に基づいて報告された。平成2年度はフリーズ回数が減少し稼働率が上がっていることが報告された。次に、分野区分別のCPU使用状況、所外からのTSSの利用状況が示された。全般的にCPUの使用効率は上がっていること、N1での利用度が高まっていることが報告された。

(4) 平成2年度予算と使途

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

(5) 平成2年度計算機時間配当状況、追加状況

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

続いて前回(第20回)委員会で重複について書簡を発することになっていた3つのプロジェクトに対して送付された手紙の文面が示された。

次に、前回委員会後の追加申請にたいする審査の結果16件に対する評価状況が示され評点通りで承認された。

(6) 平成2年度施設利用旅費割り当て状況

割当一覧が示され説明があった。後期は6プロジェクトに対して231,300円が割り当てられた。旅費の割当方針は従来通りで遠方、小規模な研究室、最近割当をもらっていない研究室を中心に行なった旨が報告された。

(7) ライブラリプログラム開発状況

分子科学プログラムパッケージ、QCPEプログラム、NUMPACライブラリの登録、サービス状況が資料によって報告された。今年QCPEプログラムのパソコン版(PC用80件、MAC用14件)を購入し、公開したとの報告があった。

(8) データベース開発・サービス状況

登録、サービスを行っている7件のデータベース(QCLDB、CMQCA、CHEMICS、IR2、STERIC、QCBDB、MPBDB)について現状の報告があった。

(9) 平成2年度ライブラリプログラム開発計画およびセンター業務補佐謝金割り当て状況

分子研ライブラリプログラム開発計画(計19件)と個々の旅費、謝金の割り当て状況が資料に基づいて報告された。



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

#### 4. 次期システムについて

次期システムについて議論が行われた。

#### 5. 電算機センターの短期、中期、長期将来構想について

電算機センターの短期、中期、長期の将来構想について配布資料を中心に議論が行われた。

#### 6. 平成3年度計算機運用方針

運用方針案として以下の10件が提出され、いずれも了承された。

##### (1) 利用点数の変更について

M-680Hの1秒あたりの点数を0.09から0.08に引き下げることが提案され了承された。

##### (2) 週間運用から月間運用への移行について

平成3年3月あるいは4月から月間運用の試験を行う予定であるとの説明がなされた。また、土曜日の職員一斉休日に伴う運用の変更について説明がなされ了承された。

##### (3) システムの部分的増強について

メモリ、ディスク、OS、端末について増強及び変更の予定について説明がなされた。

##### (4) 高性能ワークステーションについて

平成3年度中に導入することを検討しているとの説明がなされた。

##### (5) 動画像出力システムについて

ユーザーへの公開は平成3年4月頃になるとの説明がなされた。

##### (6) BITNETの導入

平成3年春頃には運用開始できるとの説明がなされた。

##### (7) 国際理学ネットワークについて

国際理学ネットワークについての説明がなされた。

##### (8) 所内ネットワークについて

FDDIループネットにルータ機能を追加する時期が平成3年初夏になること、VOS3NFSについては運用テスト中であるとの説明がなされた。

(9) Σ600 (次世代) ネットワークについて

動画像やホスト・ワークステーション間の高速転送を行うために試験的に導入する予定であるとの説明がなされた。

(10) データ中継機 (ISDN対応) について

4月頃からサービスができるように整備中であるとの説明がなされた。

7. 平成3年度前期計算機時間配分案

平成3年度のCPU時間配分案が資料に基づいて説明・検討がなされた。特に、本年度は所内への配分比率が全配分時間の40%より大きくなりそうな状況に対し、所内で時間配分のあり方を検討すべきであるとの意見が出され、所内打合せ会を行うことになった。所外の許可率を85%とすることになった。

8. 平成3年度前期利用申請審査

協力研究前期6件、施設利用(B)96件、基礎生物学施設利用(B)1件の審査が資料に基づいて行なわれた。審査は主に重複申請の可能性のあるもの、各委員間の評点の中の大きなもの、評価の低いものに重点をおいて議論された。この結果次のプロジェクトには以下の処置を行なうこととした。

(協力研究前期)

A 研究分野が分子科学かどうかが問題になり、共同研究専門委員会に対してどのように判断を下したか問い合わせることになった。

(施設利用A)

B 所属が財団法人のため利用資格が問題になり、センター長が所長と相談・検討することになった。

(施設利用B)

C, D, E } 評価点数が非常に低かったため、委員からのコメントと点数を手紙で  
F, G, H } 通知することとした。  
I, J, K }

L 協力研究と重複が認められるので7時間減らすこととし、この旨を手紙で通知することになった。

M N氏の協力研究と重複が認められるため、16時間減らすこととし、この旨を手紙で通知することになった。

討論の結果、そのほかの各課題は採点通りの許可が認められた。

#### 4. 4 大型計算成果発表会について

当センターでは大学計算センターでは実行できないような分子科学の大型計算を一つの特徴にしている。大型計算課題の研究成果を公表し、今後のプログラム開発、センター運営、利用申請審査の参考とするため、下記のように「分子研電算機センター大型計算成果発表会」を開催した。

電子計算機センター第10回大型計算成果発表会

『使用プログラムの特徴と研究成果の報告』

日 時：平成2年9月11日（火） 9：30～12：35

場 所：分子研 研究棟 101号室

9：30 挨拶 センター長

9：35 浅田寿生、星野敏春（静大 工業短大）

表面および不純物系の電子状態

10：05 津田 穰、笈川節子（千葉大）

光化学反応機構に関する量子化学的研究

10：35 志田忠正、加藤立久、百瀬孝昌、山口 真、松下道雄、高橋順子、

河島 整、村木直樹（京大 理）

有機化合物のラジカルイオンの電子状態に関する研究

11：05 笹野高之、山口 兆、横田静夫、中野雅由、横山啓一、高根慎也、

奥村光隆、北川淳一、三宅克二（阪大 基礎工）

素反応過程の経路と動力学機構の研究

11：35 榎 茂好、水谷裕喜（熊本大 工）

非ウェルナー型遷移金属錯体の構造、電子状態、触媒活性に

関する ab initio MO 研究

12：05 菅田 宏、（阪大 蛋白質研究所）

分子振動の旋光強度の理論計算

5. 平成2年度稼働状況および利用者数

5.1 利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数

利用分野	利用区分	プロジェクト数	ユーザ数	時間			点数	
				申請	許可	実績	許可	実績
分子科学	施設利用	176	550	8959	7455	6901	2982000	2484317
	協力研究	30	30	1078	1106	978	442400	351914
	所内	45	138	6488	6092	5744	2436800	2067935
生理学	施設利用	3	6	30	24	10	9600	3672
基礎生物学	施設利用	1	8	70	70	31	28000	11015
	所内	1	4	10	9	0	3600	26
合計		256	736	16635	14756	13664	5902400	4918879

(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、純粹のCPU使用時間となっていないことに注意が必要である。

5.2 システム稼働状況

年月	稼働時間		保守時間
	M-680H	S-820/80	
平成2年/4	560 : 00	559 : 00	12 : 00
5	528 : 00	526 : 00	20 : 00
6	561 : 00	562 : 00	16 : 00
7	551 : 00	548 : 00	16 : 00
8	570 : 00	568 : 00	16 : 00
9	539 : 00	539 : 00	16 : 00
10	555 : 00	553 : 00	19 : 00
11	526 : 30	525 : 30	13 : 30
12	531 : 00	526 : 00	12 : 00
平成3年/1	551 : 30	550 : 30	17 : 30
2	473 : 00	470 : 00	12 : 00
3	638 : 00	636 : 00	14 : 00
合計	6584 : 00	6563 : 00	184 : 00

### 5. 3 CPU時間

#### (M-680H CPU使用時間)

(月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(合計)
04	4:16:30	28:58:46	134:39:36	168:11:08	0:00:00	0:00:00	0:00:00	12:26:59	0:19:31	0:10:17	1:45:05	350:47:52
05	6:09:36	36:00:54	96:49:38	215:25:20	6:36:34	0:00:02	0:00:00	16:15:22	1:13:45	0:14:35	3:11:38	381:57:24
06	9:59:49	51:04:55	163:24:04	180:06:40	24:45:56	0:00:00	0:00:00	15:44:09	1:27:40	1:19:51	2:11:15	450:04:19
07	12:21:14	53:50:35	141:19:06	160:48:24	13:56:32	0:00:00	0:00:00	18:48:04	4:11:08	1:04:37	4:45:49	411:05:29
08	8:56:54	35:25:20	169:52:11	231:12:29	20:08:45	0:00:00	0:00:00	17:50:44	5:25:32	0:07:23	3:51:53	492:51:11
09	16:51:52	47:51:37	153:05:33	153:24:00	51:02:43	0:00:00	0:00:00	16:42:55	3:11:26	0:35:39	2:24:12	445:09:57
10	14:57:10	45:20:53	120:50:48	136:57:31	22:00:33	0:00:00	0:00:00	16:33:16	0:35:00	2:07:58	6:38:06	366:01:15
11	10:02:58	36:51:37	176:37:37	143:10:11	0:00:00	0:00:13	0:00:00	18:56:01	0:37:10	0:46:43	40:26:37	427:29:07
12	7:23:08	28:49:19	111:17:32	106:52:38	7:17:26	0:00:00	0:00:00	16:19:07	0:09:19	0:22:11	5:34:01	284:04:41
01	11:05:45	37:49:55	107:35:45	339:40:54	30:16:55	0:00:00	0:00:00	21:10:03	0:37:23	0:41:01	0:50:07	549:47:48
02	12:17:40	42:46:27	99:52:20	185:46:48	0:07:30	0:00:00	0:00:00	20:33:10	0:23:06	0:40:15	4:03:18	366:30:34
03	10:22:37	33:07:51	101:24:23	227:18:51	9:38:32	0:00:00	0:00:00	21:10:16	3:48:28	0:17:51	2:16:33	409:25:22
(合計)	124:45:13	477:58:09	1576:48:33	2248:54:54	185:51:26	0:00:15	0:00:00	212:30:06	21:59:28	8:28:21	77:58:34	4935:14:59

#### (S-820/80 CPU使用時間)

(月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(合計)
04	4:21:21	43:49:51	134:25:46	219:03:13	0:00:00	0:00:00	0:07:56	0:00:00	0:25:04	0:00:00	402:13:11
05	4:16:21	24:57:20	119:44:25	238:21:52	0:00:14	0:00:00	0:00:25	0:00:00	0:12:03	0:00:00	447:32:40
06	4:19:50	34:20:00	130:44:41	260:53:32	0:00:00	0:00:00	0:02:12	0:00:00	0:11:32	0:00:00	430:31:47
07	4:02:32	29:34:43	105:37:34	201:23:52	0:00:06	0:00:00	0:01:23	0:00:00	2:17:23	0:00:00	342:57:33
08	5:19:28	25:05:34	90:28:37	236:20:18	0:00:00	0:00:00	0:00:04	0:00:00	1:40:57	0:00:00	418:54:58
09	11:53:22	38:25:37	113:02:51	289:11:00	0:00:00	0:00:00	0:42:02	0:00:00	8:54:33	0:00:00	462:09:25
10	5:53:57	26:15:58	117:35:13	238:24:20	0:00:00	0:00:00	0:00:32	0:00:00	1:20:39	0:00:00	419:30:39
11	5:42:52	43:06:32	104:07:55	287:14:56	0:00:00	0:00:00	0:24:47	0:00:00	10:44:16	0:00:00	451:21:18
12	4:30:42	39:15:39	92:32:30	218:42:28	0:00:00	0:00:00	3:44:06	0:00:00	0:11:12	0:00:00	358:56:37
01	5:44:44	37:00:36	154:59:44	272:49:41	0:00:00	0:00:00	1:22:36	0:00:00	3:35:56	0:00:00	475:33:17
02	8:41:00	40:10:49	81:19:17	263:32:59	0:01:08	0:00:00	3:42:10	0:00:00	8:08:56	0:00:00	405:36:19
03	13:56:44	50:08:51	153:50:35	318:26:25	0:00:00	0:00:00	1:22:31	0:00:00	6:00:39	0:00:00	543:45:45
(合計)	78:42:53	432:11:30	1398:29:08	3194:24:36	0:01:28	0:00:00	11:30:44	0:00:00	43:43:10	0:00:00	5159:03:29

#### (S-820/80 VPU時間)

(月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(合計)
04	0:48:35	11:45:45	57:11:09	88:18:36	0:00:00	0:00:00	0:00:18	0:00:00	0:04:39	0:00:00	158:09:02
05	0:48:04	6:30:32	31:52:56	131:52:30	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:12	0:00:00	171:04:14
06	0:58:13	9:27:15	41:54:23	117:15:13	0:00:00	0:00:00	0:00:26	0:00:00	0:01:44	0:00:00	169:37:14
07	1:09:33	8:37:10	23:30:22	76:19:02	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:14:21	0:00:00	109:50:28
08	1:29:24	10:59:23	33:06:50	130:52:23	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:07:00	0:00:00	176:35:00
09	1:54:43	13:13:55	43:02:50	129:01:39	0:00:00	0:00:00	0:00:59	0:00:00	0:21:47	0:00:00	187:35:53
10	1:21:53	7:16:42	31:42:26	114:45:14	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:06:42	0:00:00	155:12:57
11	1:07:53	12:55:09	30:05:54	116:45:17	0:00:00	0:00:00	0:01:08	0:00:00	0:45:32	0:00:00	161:40:53
12	0:50:23	10:42:02	28:41:35	79:01:17	0:00:00	0:00:00	1:27:37	0:00:00	0:00:48	0:00:00	120:43:42
01	0:58:11	9:33:38	51:43:11	92:43:33	0:00:00	0:00:00	0:20:56	0:00:00	0:03:21	0:00:00	155:22:50
02	1:25:56	13:33:47	22:00:50	112:48:49	0:00:00	0:00:00	1:17:44	0:00:00	0:21:30	0:00:00	151:28:36
03	2:00:21	13:40:11	47:40:41	141:46:58	0:00:00	0:00:00	0:10:50	0:00:00	0:48:15	0:00:00	206:07:16
(合計)	14:53:09	128:15:29	442:33:07	1331:30:31	0:00:00	0:00:00	3:19:58	0:00:00	2:55:51	0:00:00	1923:28:05

5. 4 ジョブ処理件数

(M-680H ジョブ処理件数)

(月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(合計)
04	2,503	924	1,168	237	0	0	0	8,708	104	183	136	13,953
05	3,155	1,758	838	344	10	15	7	10,137	247	135	78	16,724
06	4,226	2,071	1,025	297	14	5	0	11,428	188	257	38	19,549
07	6,109	2,159	1,325	306	9	0	0	11,752	907	589	68	23,224
08	4,139	1,629	1,658	362	14	0	0	9,640	435	203	138	18,218
09	5,688	2,303	1,361	335	25	0	0	12,435	175	270	32	22,624
10	4,011	2,466	937	302	9	0	0	10,550	362	186	101	18,924
11	3,989	2,022	1,177	339	0	3	0	10,638	398	223	66	18,855
12	3,403	1,381	974	217	8	1	0	9,332	302	103	51	15,772
01	4,004	2,197	1,137	488	11	1	0	11,229	346	259	92	19,764
02	5,222	2,160	925	380	4	0	0	10,299	104	172	224	19,490
03	4,665	1,760	1,018	456	6	3	0	12,287	455	277	381	21,338
(合計)	51,144	22,830	13,543	4,063	110	28	7	128,435	4,023	2,857	1,405	228,445

(S-820/80 ジョブ処理件数)

(月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(合計)
04	1,347	1,557	708	346	0	0	18	0	177	0	4,163
05	1,238	1,246	794	458	2	0	8	0	104	0	3,880
06	1,436	1,776	926	368	0	0	92	0	85	0	4,743
07	1,218	1,660	879	374	1	0	57	0	81	0	4,270
08	1,645	1,165	674	423	0	0	10	0	90	0	4,007
09	5,857	1,522	750	388	0	0	69	0	118	0	8,714
10	2,435	1,166	971	330	0	0	50	0	115	0	5,067
11	2,588	1,775	871	382	0	0	88	0	202	0	5,906
12	1,036	1,413	707	452	5	0	233	0	86	0	3,932
01	3,077	1,494	888	462	0	0	113	0	213	0	6,247
02	3,778	1,709	651	484	1	0	268	0	185	0	7,076
03	4,519	2,403	971	517	6	0	181	0	456	0	9,053
(合計)	30,274	18,896	9,790	4,984	15	0	1,187	0	1,912	0	67,058

5.5 所外ネットワーク・通信回線の利用状況（セッション数）

5.5.1 DDXパケット網の利用状況

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月
回線1	855	612	424	411	307	526	271	448	276	341	290	340
回線2	349	209	214	275	217	278	151	208	120	113	112	110
回線3	79	30	42	106	65	88	42	48	36	40	37	20
回線4	6	1	8	21	17	32	4	5	5	9	14	2
回線5			2	6		1		1	2			
回線6				2								
合計	1289	852	690	821	606	925	468	710	439	503	453	472

5.5.2 1200bps電話回線（V.22）の利用状況

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月
回線1	444	534	222	286	475	548	360	354	193	283	306	409
回線2	84	75	20	64	88	131	120	79	39	64	63	97
合計	528	609	242	350	563	679	480	433	232	347	369	506

5.5.3 N1ネットワークの利用状況

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月	
北海道大学		229	98	121	122	69	418	59	178	194	121	566	323
東北大学		201	38	76	85	2	111	75	102	61	3	8	3
東京大学		1666	1090	1500	1778	822	1280	956	1359	990	1165	660	867
東京大学1		443	170	107	143	87							16
名古屋大学		546	665	402	376	401	506	445	503	603	520	273	409
京都大学		995	1060	1259	759	1012	1296	1248	1538	940	764	1027	851
大阪大学		255	306	262	231	160	304	388	328	220	321	160	89
九州大学		51	155	75	49	101	11	35	43	272	155	279	393
学情センター(SIMAIL)		24	7	22	9	15	12						
奈良女子大学		198	140	158	327	262	176	98	100	151	92	205	32
広島大学		498	553	202	254	103	395	305	352	501	864	450	151
お茶の水女子大学		16	29	8		2							1
京大化学研究所									1			3	1
弘前大学		22	18	10	16			3			13	1	
大阪府立大学		103	159	108	45	62	39	13	75	110	78	84	9
千葉大学		255	618	454	282	7	130	297	66	103	69	104	65
東大物性研究所		28	147	9	101	26	11	12	63	191	137	42	47
熊本大学		10	149	271	255	216	499	407	488	332	282	244	51
愛媛大学			2	24	39	10	23	17	17	26	4	23	42
静岡大学				6	3	8	54	16	87	121	193	271	313
豊橋技術科学大学									14	10	17	3	3
金城学院大学						3	1	1	6	2		1	1
信州大学								1				18	8
横浜国立大学									5		2		
電気通信大学									4	10	80	33	3
東洋大学（川越校舎）													5
合計		5540	5404	5074	4874	3368	5266	4376	5328	4838	4881	4455	3683

5. 6 所内ネットワーク・通信回線の利用状況（セッション数）

5. 6. 1 DPBX回線（9600bps）の利用状況

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月
回線1	60	215	96	174	209	242	251	331	182	164	207	278
回線2	103	187	95	120	77	91	106	185	79	53	76	105
回線3	6	69	97	56	37	30	36	78	31	11	28	185
回線4	46	25	20	1	11	24	17	15	12	125	25	15
合計	215	496	308	351	334	387	410	609	304	353	336	583

5. 6. 2 構内ポートセレクト回線（9600bps）の利用状況

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月
回線1	357	535	403	417	378	463	425	391	319	333	321	304
回線2	211	414	327	242	275	244	190	247	215	249	245	255
回線3	120	253	174	135	152	152	92	151	188	151	170	158
回線4	66	158	57	56	96	81	28	123	115	75	110	98
回線5	21	92	18	14	27	26	15	59	73	60	60	54
回線6	13	34	6	8	8	10	6	35	44	24	41	18
回線7	8	16		4	3	2	3	8	19	6	23	6
回線8	1	1					1	5	4		10	4
合計	797	1503	985	876	939	978	760	1019	977	898	980	897

5. 6. 3 構内ポートセレクト回線（1200bps）の利用状況

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月
回線1												1
回線2				2								1
回線3												1
回線4		7			2	1	2	2	3			
回線5	99	155	12	48	66	66	89	9	44	4	5	2
合計	99	162	12	50	68	67	91	11	47	4	5	5

5. 6. 4 所内LANの利用状況

（4月～6月 H8644光ループネットワーク+Ethernet系+  
6月～3月 FDDI光ループネットワーク+Ethernet系）

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月
FSモード			482	139	72	78	97	197	83	238	314	446
Lモード	12	119	341	148	112	68	166	195	120	266	233	356
合計	12	119	823	287	184	146	263	392	203	504	547	802

※FSモード：フルスクリーンモード  
Lモード：ラインモード

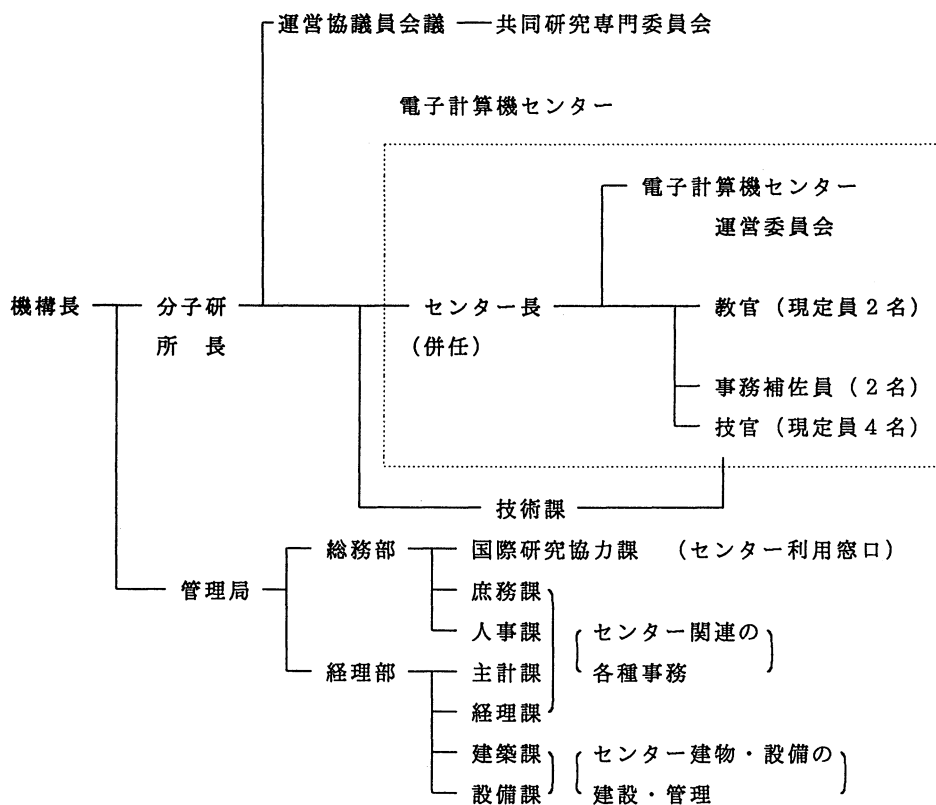


## 6. 資料

### 6.1 センター関連組織

センター関連組織は下図に示す通りである。

課題・協力研究の運営は運営協議員会議及びその共同研究専門委員会で行われている。  
電子計算機センター運営委員会の規則と委員については資料6.2、6.3、6.4を参照されたい。



6. 2 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則

{ 昭和56年4月14日  
分子研規則第4号 }

最終改正 昭和62年3月30日

岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則

(目的)

第1条 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター（以下「センター」という）は、センターの大型計算機システムを分子科学の大型計算機等のために分子科学研究所内外の研究者の利用に供するとともに、これに必要な研究開発を行い、かつ、岡崎国立共同研究機構に置かれる研究所の研究に関する計算を処理することを目的とする。

(職員)

第2条 センターに、次の職員を置く。

- 一 センター長
- 二 助教授
- 三 助手
- 四 その他必要な職員

(センター長)

第3条 センター長は、分子科学研究所の教授又は助教授をもって充てる。

2 センター長は、センターの業務を掌理する。

(運営委員会)

第4条 分子科学研究所に、センターの管理運営に関する重要事項を審議し、分子科学研究所長の諮問に応じるため、分子科学研究所電子計算機センター運営委員会（以下「運営委員会」という）を置く。

2 運営委員会の組織及び運営に関し必要な事項は、分子科学研究所長が定める。

この規則は、昭和56年4月14日から施行する。

(昭和62年分子研規則第1号)

この規則は、昭和62年4月1日から施行する。

6. 3 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター運営委員会規則

{ 昭和56年4月14日  
分子研規則第9号 }

最終改正 昭和62年3月30日

岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター運営委員会規則

(目的)

第1条 この規則は、岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則（昭和56年分子研規則第4号）第4条第2項の規定に基づき、分子科学研究所電子計算機センター（以下「センター」という）の運営委員会の組織及び運営に関し必要な事項を定めることを目的とする。

(組織)

第2条 運営委員会は、次の各号に掲げる委員をもって組織する。

- 一 センター長
  - 二 センターの助教授
  - 三 分子科学研究所の教授又は助教授2名
  - 四 基礎生物学研究所及び生理学研究所の教授又は助教授各1名
  - 五 岡崎国立共同研究機構の職員以外の分子科学に関する学識経験者4名
- 2 前号第3号から第5号に掲げる委員は、分子科学研究所長が委嘱する。

(任期)

第3条 前項第3条から第5条に掲げる委員の任期は、2年とし、再任を妨げない。  
ただし、補欠の委員の任期は、前任者の残任期間とする。

(委員長)

第4条 運営委員会に委員長を置き、センター長をもって充てる。

- 2 委員長は、運営委員会を招集し、その議長となる。
- 3 委員長に事故あるときは、あらかじめ委員長が指名する委員がその職務を代行する。

(議事)

第5条 運営委員会は、委員の3分の2以上の出席がなければ、議事を開き、議決することができない。

(委員以外の者の出席)

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

(庶務)

第7条 運営委員会の庶務は、総務部国際研究協力課において処理する。

付則

- 1 この規則は、昭和56年4月14日から施行する。
- 2 昭和60年6月1日任命に係る委員の任期は、第3条の規定にかかわらず、昭和62年3月31日までとする。

付則 (昭和60年分子研規則第3号)

この規則は、昭和60年4月1日から施行する。

付則 (昭和62年分子研規則第2号)  
この規則は、昭和62年4月1日から施行する。

6. 4 電子計算機センター運営委員会委員  
(平成元年度～2年度)

諸熊 奎 治	分子研理論第一部門教授、センター長	センター委員
北浦 和 夫	分子研電子計算機センター助教授	〃
中村 宏 樹	分子研理論第二部門教授	分子研所内委員
宇田川 康 夫	分子研分子動力学部門助教授	〃
今村 詮	広大理教授	分子研所外委員
中西 浩一郎	京大工教授	〃
足立 裕 彦	兵庫教育大教授	〃
加藤 重 樹	京大理教授	〃
大森 治 紀	生理研教授	生理研委員
村田 紀 夫	基生研教授	基生研委員

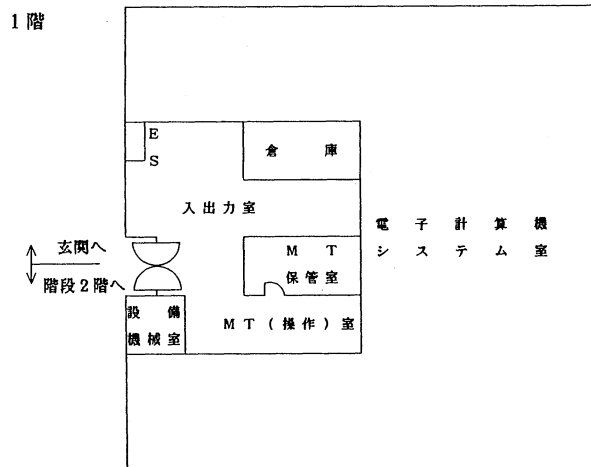
(平成3年度～4年度)

諸熊 奎 治	分子研理論第一部門教授、センター長	センター委員
北浦 和 夫	分子研電子計算機センター助教授	〃
中村 宏 樹	分子研理論第二部門教授	分子研所内委員
薬師 久 彌	分子研物性化学部門教授	〃
加藤 重 樹	京大理教授	分子研所外委員
足立 裕 彦	兵庫教育大教授	〃
岡田 勲	東工大教授	〃
中辻 博	京大工教授	〃
大森 治 紀	生理研教授	生理研委員
鈴木 義 昭	基生研教授	基生研委員

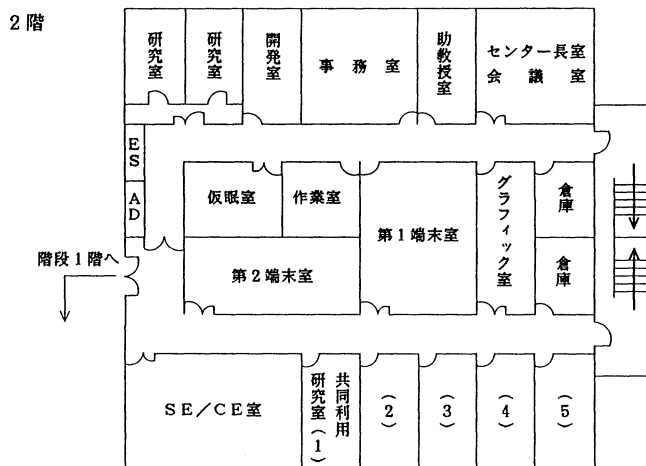
6. 5 電子計算機センター職員 (平成3年7月現在)

諸熊 奎 治	センター長 (併任)
北浦 和 夫	助 教 授
長嶋 雲 兵	助 手
本多 一 彦	技 官
西本 史 雄	技 官 (係長)
田中 邦 彦	技 官 (平成2年8月採用)
手島 史 綱	技 官
加納 聖 子	事務補佐員
石井 敦 子	事務補佐員

## 6. 6 建物図



1階はセンターの業務に関わる作業室と計算機システムの主機室のみ。



## 6. 7 応用プログラム相談員一覧

沢辺 恭一	分子研受託大学院生	平成2年5月
藤井 俊明	総研大大学院生	平成2年5月～平成3年3月
高田 彰二	総研大大学院生	平成2年5月～平成2年10月

6. 8 端末設置状況 (平成3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、 グラフィック 端末2台
	研究棟	MT 1台、LBP 1台、TSS 端末4台
	南実験棟	MT 1台、LBP 1台、TSS 端末4台
	UVSOR	TSS 端末1台

(2) 構内回線 (HITAC M-680H接続分)

a. ポートセクタ経由

1200bps	8ポート
9600bps	16ポート
接続端末数	約60端末

b. データ交換機経由

9600bps	10ポート
---------	-------

c. デジタル交換機経由

1200bps	3ポート
9600bps	4ポート

(3) 電話回線

1200bps (V22)	2回線
---------------	-----

(4) DDXパケット網

9600bps	1回線 (論理多重度15回線)
---------	-----------------

(5) 学術情報網大学間ネットワーク (N1) TSSサーバ/ユーザ

48kbps	1回線 (論理多重度31回線)
ホスト名称	IMS
経由ノード	岡崎

## 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ります。

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

〒113 東京都文京区本郷7-3-1

東京大学構内 財団法人好仁会内

アカデミービジネスサービス(株)

電話 03-3811-7786

### FORTRAN 77 関係 (HAPを含む)

最適化FORTRAN 77 言語 .....	6180 - 3 - 731
最適化FORTRAN 77 使用の手引 .....	6180 - 3 - 732
FORTRAN 開発支援システム .....	6180 - 3 - 733

### TSS

TSS 入門 (ASPEN 編) .....	8090 - 3 - 015
TSS コマンド .....	6180 - 3 - 162
TSS 操作 .....	6180 - 3 - 163
TSS メッセージ .....	6180 - 3 - 164
TSS 解説 .....	6180 - 3 - 160
TMP 4 E 3 .....	6180 - 3 - 370
TSDUT E 2 .....	8091 - 3 - 069
TSLOG .....	6180 - 3 - 374
ファイル伝送プログラム IFIT-TSS E 2 .....	6180 - 3 - 375

### ASPEN、KGRAF

ASPEN E 2 使用の手引 .....	6180 - 3 - 480
KGRAF E 2 GKS 編 .....	6180 - 7 - 119

### データベース

ORION 使用の手引 .....	8090 - 6 - 502
-------------------	----------------

メッセージ	
システムメッセージ/コード .....	6180 - 3 - 103
サービスプログラムメッセージ .....	6180 - 3 - 222
MSL 2, MATRIX/HAP	
MSL 2 機能編第 1 分冊 .....	8080 - 7 - 120
MSL 2 機能編第 2 分冊 .....	8080 - 7 - 121
MSL 2 機能編第 3 分冊 .....	8080 - 7 - 141
MSL 2 操作編 .....	8080 - 7 - 122
MATRIX/HAP .....	8090 - 7 - 035
ジョブ管理	
ジョブ制御文 使用の手引 .....	6180 - 3 - 143
ジョブ制御言語 .....	6180 - 3 - 144
ジョブ管理解説 .....	6180 - 3 - 140
リンケージエディタ/ローダ .....	6180 - 3 - 220
データ管理	
データ管理解説 .....	6180 - 3 - 183
ユティリティ	
データセットユティリティ .....	6180 - 3 - 225
数学関係	
数学関数 .....	8080 - 3 - 218
TRUST	
TRUST エンドユーザ向け使用の手引 .....	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
BKUP	
データ管理機能/データセットバックアップ	
DMF/BKUP 使用の手引 .....	6180 - 3 - 400



6. 10 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	M-180 2台	M-200H M-180 200H無人	M-200H M-180 疎結合	M-200H 2台 疎結合
		3ヶ月 有人	9月から無人	180 有人	無 人	無 人
プロジェクト数 利用者数 機 構 内 機 構 外 合 計		63	176	192	183	198
		48	70	69	91	94
		107	254	325	330	375
		155	334	394	421	469
稼 働 時 間		1,087	6,071	6,553	6,721	6,305
利用 申請 C P U 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 c		509	2,405	5,405	6,320	8,205
ジョブ処理件数 c		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 d		0	24	93	118	190

		58年度	59年度	60年度	61年度	62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	M-680H (~1月) S-810/10 (2月~) S-820/80 疎結合
プロジェクト数 利用者数 機 構 内 機 構 外 合 計		199	207	226	234	213
		102	110	130	141	143
		426	446	464	496	520
		528	556	594	637	663
稼 働 時 間		6,170	6,316	6,016	6,368	6,444
利用 申請 C P U 時 間		(200H基準)				(M680H基準) b
	申 請	13,053	14,799	15,536	33,832/8,458*	9,880
	許 可	10,091	10,768	12,080	28,184/7,046*	7,978
総使用C P U時間 c		8,489	8,508	12,770	20,092/5,023**	6,624*
ジョブ処理件数 c		236,519	226,727	274,431	289,915	278,956
ライブラリプログラム新規登録数		10	118	160	39	4
データベース新規登録数		3	0	1	0	1
センター使用論文数 d		185	202	206	237	223

		63年度	平成元年度	平成2年度
計算機システム 運 転 方 式		M-680H S-820/80 疎結合	同63年度	同63年度
プロジェクト数 利 用 者 数 機 構 内 <sup>a</sup> 機 構 外 合 計		231	239	256
		137	146	140
		515	544	593
		652	690	733
稼 働 時 間		6,091	5,694	6,768
利 用 申 請 C P U 時 間		(M680-H 基準) <sup>b</sup>		
	申 請 許 可	12,439 10,418	14,694 12,347	16,635 14,756
総使用 C P U 時間 <sup>c</sup>		7,872	8,300	10,619
ジョブ 処 理 件 数 <sup>c</sup>		278,104	253,418	295,503
ライブラリプログラム新規登録数		7	3	4
データベース新規登録数		0	0	0
センター使用論文数 <sup>d</sup>		211	218	248

- a: 機体内利用者にはアイドル課題のための重複をふくまない。  
b: 申請および使用の詳細については4.1項を参照。  
c: ここでの値はCPU時間 件数ともにライブラリ開発 センター業務使用分などのすべてを含む。  
d: センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたもの。  
e: S-810, S-820 についてはSPUとVPUのCPU時間の単純な和である。  
\*: 下段はM-680H基準。