

I 部

目 次

寄 語	お茶大理教授 細 矢 治 夫	1
1. 分子研計算機センターでのこの一年	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ティング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 月間運用について		13
3. 6 電話番号の変更とダイヤルインについて		13
3. 7 旧FORTRANプログラムからの移行について		13
3. 8 I/Oバウンドのジョブについて		14
3. 9 平成4年度利用申請審査結果について		15
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		27
4. 3 電子計算機センター運営委員会		28
4. 4 大型計算成果発表会		38
5. 平成3年度稼働状況および利用者数		39
5. 1 利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数		39
5. 2 システム稼働状況		40
5. 3 CPU時間		41
5. 4 ジョブ処理件数		42

5. 5	所外ネットワーク・通信回線の利用状況	43
5. 6	所内ネットワーク・通信回線の利用状況	44
5. 7	T I S N経由の利用状況	44
6.	資料	45
6. 1	センター関連組織	45
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	46
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	47
6. 4	電子計算機センター運営委員会委員	48
6. 5	電子計算機センター職員	49
6. 6	応用プログラム相談員	49
6. 7	建物図	50
6. 8	マニュアルの紹介と購入方法	51
6. 9	利用者数とCPU時間の推移	53
7.	研究開発レポート	55
7. 1	新ライブラリープログラム管理システム (S L I M) について	55
7. 2	スーパーコンピュータ S - 8 2 0 / 8 0 における 動画像作成支援システム (M O L / M O V I E) の開発	64

寄 語

センターの生き残りのために

お茶大理教授 細 矢 治 夫

分子研の電子計算機センターレポートへの寄稿ではあるが、いろいろな計算機センターの最近の動きについて感じたことを書こうと思う。国立大学の計算機センターの格付けは上から順に、旧7帝大の大型計算機センター、東工大・筑波等の15大学の総合情報処理センター、それから最も一般的なのがお茶大にあるような情報処理センターとなっており、今年度設置予定を含めて現在全国に49ある。この他に、電子計算機センターとか、ただの電子計算機室止まりのところも10ほどあるようである。情報処理センターは全て省令には基づかないが、各大学が学内措置でそう名乗っているものである。しかしこれは、専任の教官を一人も配れない文部省の苦肉の策の指導でできている。その埋め合わせに文部省は毎年2大学くらいずつ、定員付きで予算も一回り上の総合情報処理センターへの格上げを認めているが、各大学の要求が満たされるのはまだまだ先の長い話である。旧帝大等の大学には教育用計算機センターをもっているところもある。国立の研究所の中にはセンターのないところもあるが、最も代表的なものが分子研の電子計算機センターである。また学術情報センターの他に、86大学の図書館に電算機が導入されている。

お茶大の情報処理センターはそろそろ機種更新の時期なので、センターの性格は何かという議論があった。研究と教育のどちらにウエイトがあるかによって新システムの仕様や計画が変わるのである。また、センターがどこまでユーザーにサービスすべきかの議論も戦わされた。本来は研究環境の整備のために置かれた情報処理センターではあるが、わが大学は学生の7割が文系ということから、学生の教育の他に文系の非専門家への啓蒙から援助までも受持つという超過保護政策を取らざるを得ない特殊事情がある。従って計算機を使う専門家は、自分の大学のメインフレームでは研究は行わず、専らEメール等の通信に使うということになってしまう。同様の事情にある中小大学(?)もいくつかあるであろう。

先日開かれた国立大学情報処理センター協議会では、メインフレームに力を入れるか、ワークステーションを多数入れて充実を計るかで悩んでいる大学の報告がいくつか聞かれた。センター側からはメインフレームのほうがユーザー管理は楽である。ユーザーの身になれば、自分専用のワークステーションが欲しいに決まっている。しかし現在の機械の性能では、百台のオーダーでも毎日平均1台はトラブルが発生するので、センターの技官1人がその対応や修理で完全にかかりきりになることは目に見えている。だから人の手当てなしにこの案には簡単に乗れないという発言が出てくるのは当然である。私大の人達の別の集まりでも同じことが話題になっていた。折角優秀な人材をセンターに引き

抜いて来ても、こんな現状ではその人達が雑事に追われればなしで、業績を積み上げられずに昇進の可能性も閉ざされてしまうということも問題になっている。

東大の大型計算機を利用する首都圏の大学の協議会がやはり最近開かれたが、そこでは数十年続いていたユーザー代表の評議会の廃止をあっさり可決してしまった。計算機環境の改善によって大型ジョブのほうに利用分布が変化しており、センター利用の細かな問題をいちいち理事会で議論する必要がなくなってきたという説明であった。

分子研のセンター利用の形態も同じように変わってきているから、ユーザーのほうにも以前ほどの悲壮感はなくなっている。幸い理論グループ念願の重点領域の「化学反応理論」も今年から動きだした。ワークステーションもどんどん普及しつつある。超大型計算やデータベースに重点を置くように分子研の計算機センターの性格付けをはっきりと確認する時期にきている。十数年前分子研に大型計算機が入るときに、データベースをしっかりとやるのが条件になっていたはずである。あのIBMもオープンとグローバルというスローガンをかけているという。生き残りをかけてのことである。分子研を初め、どこの計算機センターも生き残りのための性格付けの議論をきっちりとやるべき時である。

1. 分子研計算機センターでのこの一年

分子研電算機センター 北 浦 和 夫

(1) 計算処理能力の増強計画について

昨年来、スーパーコンピュータの更新をめざして準備を行っている。平成4年度は残念ながら予算がつかなかったが、平成5年度にはぜひ実現したいと思っている。一方、多数の高性能ワークステーションを導入し、計算サーバーとして用いる計画を進めている。いわゆるワークステーション・クラスターシステムである。本年ははじめころより数台のワークステーションを導入し、クラスターシステムの運用に関する開発研究を行う予定であったが、計画が少し遅れて9月頃よりスタートすることになる。来年4月頃に小規模なクラスターシステムによる計算処理サービスを開始することを目標にしている。大規模ワークステーション・クラスターシステムは次期汎用機システムとからめて検討しており、その実現は早くて数年先になりそうである。

当センターの利用者のジョブはかなりの部分が分子の電子状態の計算であり、これらの計算ではベクトル化による加速率は低くスーパーコンを用いるメリットは少ない。実際、利用者のジョブのベクトル化率は分子動力学計算など100%に近いものと電子状態計算などの10%以下のものとの2極に分かれている。スーパーコンの有効利用のためにもスカラー演算処理能力を増強する必要があり、ある面ではスカラー処理能力に対する需要度の方が高い。

ワークステーションは現在数十Mflopsの性能のものが一般的であるが、これはほぼM680Hの演算能力に匹敵する。さらに来年には性能が数百Mflops程度のワークステーションが出現することが予想されている。このように高速な演算性能に加えて大容量メモリ、大容量ディスクを実装しさらに超高速ネットワークによるファイル共有ができるワークステーションであれば、電子状態計算などにおいてはスーパーコンより強力である。これらのクラスターシステムを導入することと、スーパーコンの更新によって当センターの総合的な計算処理能力を飛躍的に向上させることをねらっている。

(2) センターの危機的状況

数年前からセンター職員の交替が続いている。本年3月には本多一彦技官が豊橋技術科学大学に助手として転出した。また、4月には長嶋雲兵助手がお茶の水女子大の助教授として転出した。後任として、4月から南野智技官、7月から南部伸孝助手が就任している。センターの専任職員は、助教授1、助手1、技官4と、事務補佐員2である。平成元年7月に柏木前助教授の後任としてセンターに来て以来、平成2年4月に山本茂義さんが転出し、5月に事務補佐員2名の交替があり、平成3年4月には伊奈諭さんが転出し、そして本年上記2名が転出した。このように職員の交替が目まぐるしくこの3年間後任の人さがしばかりしていた感じがする。

センター業務はそれぞれ専門知識と経験が必要であり、新しく来た人が業務に精通するには最低1年以上、数年間が必要である。この間は他の職員が新人の業務をカバーせざるを得ない。この3年間に大部分の職員が交替したということが、残されたスタッフにどれほどの負担がかかっているか想像してもらえただろうか。さらに、この時期は6～7年に一度まわってくるシステムの更新期にあっている。追い打ちをかけるように、スーパーコンの調達手続きが変更されたため従来より負担が増えている。このような状況が一時的なものであれば、この時期にいるスタッフは運が悪かったと言うことで済ませられるかもしれない。本当にそうであらうか。当研究所は長くいても内部での処遇はされないため、制度として、できるだけ早く転出することが奨励されている。一方先に述べたように、短期間で職員が代わることに耐えられるような人員の手当はなされていない。この矛盾が一気に吹き出したのが現状ではないだろうか。

センター職員の人員増については、柏木前助教授の時代にすでに所内で議論されており、平成3年1月にもセンターの将来構想として提案は行っているが実現のめどはたっていない。職員一同悲鳴を上げている。将来構想の早期実現に向けて皆様の御支援をお願いしたい。

2. スーパーコンピューティングワークショップの活動

北 浦 和 夫

主題

「スーパーコンピューターとワークステーションによる分子計算環境」

最近、計算化学分野で高性能ワークステーションが急速に普及しつつある。この状況に歩調をあわせて、当センターでは「化学計算機ネットワーク」をイメージしたネットワーク環境の整備を進めている。ネットワークを利用して、スーパーコンピューターと各研究グループのワークステーションのそれぞれの特徴を活かした、分子計算のための総合的な高度な計算環境を構築するための条件が整いつつある。本ワークショップでは、(1)ワークステーションと分子計算、(2)大規模計算と高速計算アルゴリズム、(3)パラレル計算機、(4)分子グラフィックス、(5)ネットワーク、をテーマとして計算化学の研究環境の現状と今後の方向について討論した。

第11回公開講演会

(平成4年3月26日午後)

☆ はじめに

分子研センター 諸熊奎治

☆ UNIX版S a c - C Iプログラムの作成

京大 波田雅彦

☆ 分子計算におけるワークステーションの使用環境

北大 奥村光隆

☆ 計算機化学における大規模主記憶容量の意義

奈良教育大 山辺信一

☆ 第一原理分子動力学法の現状

金材研 小口多美夫

☆ 水のMDプログラムの高速化

分子研センター 長嶋雲兵

(平成4年3月27日午前)

☆ 並列計算機QCDCPAXの概要

筑波大 白川友紀

☆ 超並列計算機CM2による天体シミュレーションの実際

流体研 長澤幹夫

☆ KORINによる分子グラフィックス

筑波情報短大 伊奈諭

☆ 蛋白質MDの動画作成の試み

蛋白工学研 川北栄継

☆ 溶液MDのビジュアライゼーション

京大 松本正和

(平成4年3月27日午後)

☆ 分子計算とネットワーク環境

NTT基礎研 寺前裕之

☆ 学術情報ネットワークの利用と運用

学術情報センター 郡司久

☆ インターネットと大型計算機利用

分子研センター 田中邦彦

☆ 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。

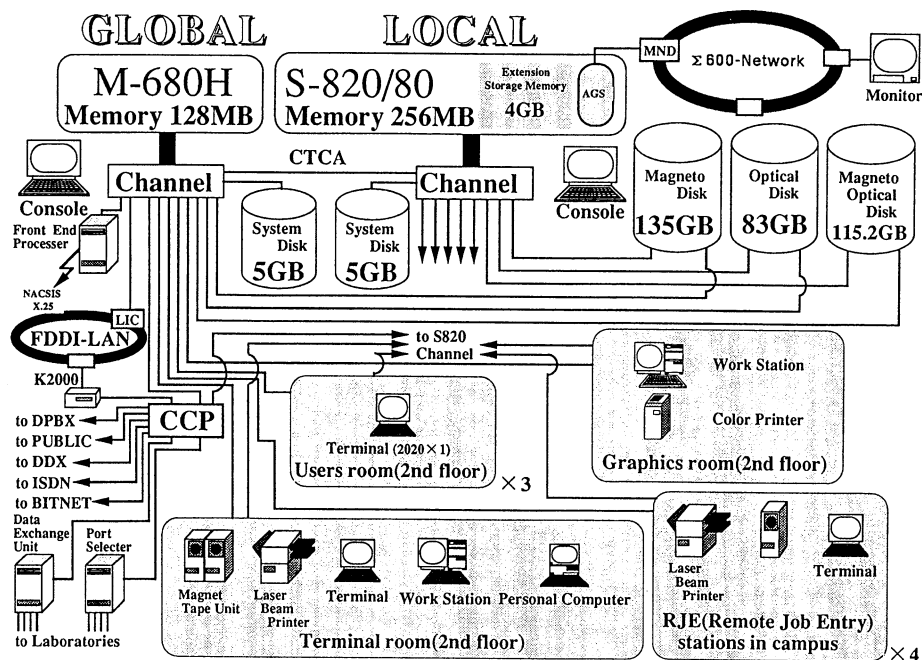


図 3.1.1 システム構成概念図

- 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。またS-820/80でもTSS処理のサービスを行っている。
- 自動ジョブスケジュール機能（日立製作所と共同開発）により各ジョブの要求する各種資源を柔軟かつ最適に割当てスケジュールする。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（83GB）を用意し，所外の遠隔地ユーザの便に供している。
- TISN（東大理学部国際理学ネットワーク）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 1 1 5 G B 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を計っている。
- 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。

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
E	300	30	4	1	128	8	1920	0
G	30	30	4	1	128	8	1920	0
S	600	30	7	1	224	8	3328	0
T S S	3	3	7	4	32	8	192	0

< M - 680 H >

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

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

CPU_m : 全CPU時間 (M-680 H)
 CPU_s : 全CPU時間 (S-820)
 VPU_s : 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。

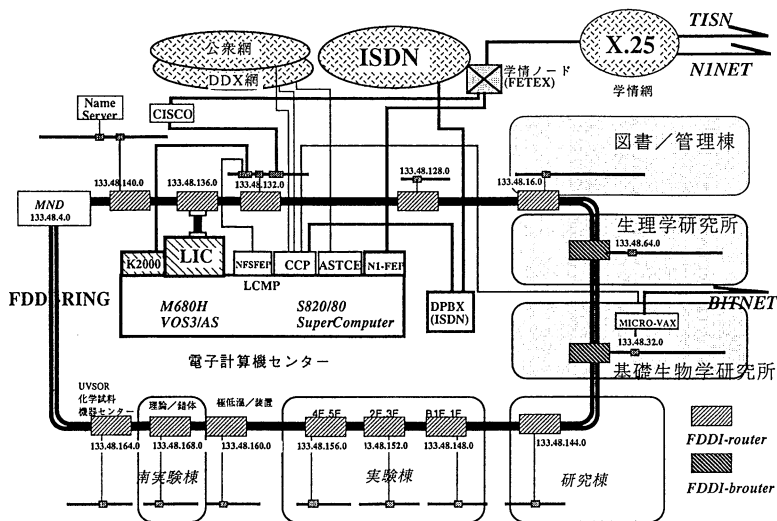
M-680H 288点 S-820 630点

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。



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

分子研電子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/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4年6月末現在)
 当センターは、サーバ/ユーザとして登録している。
 当センターのサーバホスト名: IMS
 現在、当センターと接続可能な機関は以下の通りである。

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	NAC SIS	サーバ	HITAC M-680H
〃	S I M A I L	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	NARAJ O	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	OFUDAI	ユーザ/サーバ	ACOS 930/10
千葉大学	CHIBA	ユーザ/サーバ	HITAC M-680D
東大物性研究所	I SSP	ユーザ/サーバ	FACOM M-380R
熊本大学	KUMAMOTO	ユーザ	FACOM M-780/10Q
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	TOYO GI	ユーザ/サーバ	ECLIPSE MV/20000 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	MV2500D
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
大阪工業大学	DAIKODAI	ユーザ/サーバ	FACOM VP-50E
東京都立大学	TORITU	ユーザ	IBM 3090-30J

接続機関一覧

(2) 東京大学理学部国際理学ネットワーク (TISN)

平成3年度よりTISNに加入し、国内外のインターネットへの接続を可能にしている。サービス内容はIPプロトコルによる通信で、リモートログイン(TELNET)、ファイル転送(FTP)、電子メール(SMTP)などである。分子研計算機センターに於いても東大理学部と48KBPSで接続され、そこを經由しアメリカ、ヨーロッパ、オーストラリアなどに接続されている。

これにより計算機センター内の大型機(M680H)にもK2000-KNETを經由で接続できるようになったため、TSSのフルスクリーン利用も容易である。

TISNのネットワークトポロジは以下のとおりである。

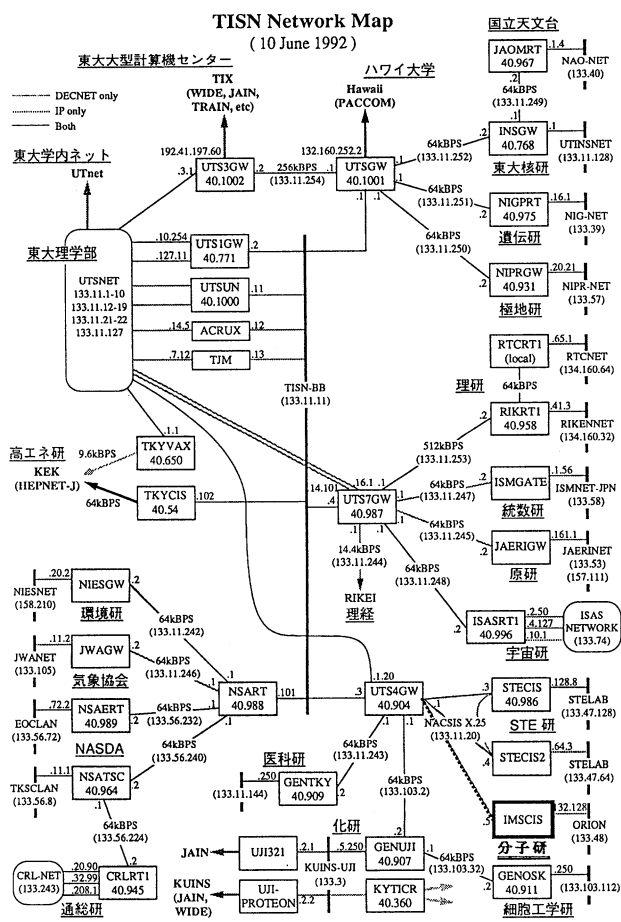


図3.4.2 TISNトポロジ

なお、分子研のドメイン名は `ims.ac.jp` である。

(3) B I T N E T

平成3年6月よりM680HによるB I T N E Tのサービスを開始している。利用はT S S上で U M A I Lコマンドでおこなう。利用方法は以下のとおりである。

① 作業環境の作成（初めて利用する場合のみ）

U M N I C K

② U M A I Lの実行

U M A I L

詳細はASPEN のTUTOR コマンドで参照できる。なお、U M A I L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B I T N E T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、D D X、I S D N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

ポートセレ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P B X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)

3. 5 月間運用について

いままでの1週間単位の運用を平成3年4月から1ヵ月単位の月間運用に変更した。
保守とセンター業務の日は月1度だけになっている。

ハードウェアの保守、センター業務の日にちと時間（通常）

毎月第1月曜 8：00 から 19：00頃まで（月曜が祝日のときは火曜）

保守およびセンター業務日の直前の週末は計画停止を行うため、Eジョブの処理はしない。

3. 6 電話番号の変更とダイヤルインについて

岡崎国立共同研究機構の電話はダイヤルイン方式になっている。当センター関連部署の電話番号は以下のとおりである。

国際研究協力課 第一係 0564-55-7135

（利用申請窓口）

国際研究協力課 総務係 0564-55-7133

（ロジック予約）

電子計算機センター事務室 0564-55-7462

共同利用研究室 0564-55-7463

（ユーザー呼び出し）

3. 7 旧FORTRANプログラムからの移行について

旧FORTRANコンパイラ（02-04）は既に廃止しているが、このコンパイ

ラで作成されたロードモジュールのプログラムは現在のところ実行可能である。しかし、将来にわたって新しいハードウェアやOSのもとでの実行を保証することはできないためできるだけ早いうちに現在のコンパイラでコンパイルし、新しいロードモジュールにしてください。平成4年度末に旧FORTRANの実行時ライブラリを廃止するため、その時点で古いロードモジュールは実行できなくなる見込み。

3. 8 I/Oバウンドのジョブについて

最近、I/Oバウンドのジョブが増加し、CPU稼働率が少し低下している。

分子研電算機センターのシステムにはパラレルI/O（M680H およびS820で使用可）、HAP拡張記憶[ES]（S820のみ使用可）があり、有効に活用すればジョブの経過時間もずっと早くなる。これらの機能を活用し、I/Oバウンドにならないよう配慮をお願いする。

① パラレルI/OはFORTRANの書式なし順番探索I/Oのみサポート

```
//*MAIN SYSTEM=S820, PRL=YES
:
//FT02F001 DD DSN=@SHFILE1, DISP=(NEW, CATLG), UNIT=SHRT, PRL=*,
// SPACE=(CYL, (50, 10))
```

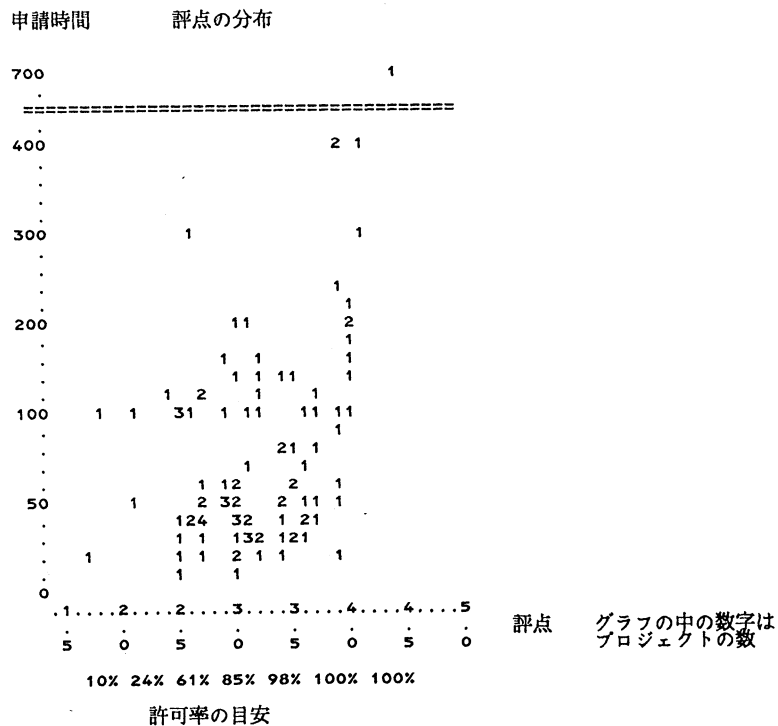
② HAP拡張記憶はFORTRANの書式なし順番探索I/Oおよび直接探索I/Oのみサポート

```
//*MAIN SYSTEM=S820, ESTORAGE=100M
:
//FT04F001 DD DSN=&&ESFILE1, DISP=(NEW, DELETE), UNIT=ES,
// SPACE=(MB, (50, 10))
```


3. 9 平成4年度利用申請審査結果について

第23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、評価には申請時間と研究内容や共同研究者数に対して適当かどうかの判断が含まれる。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1.75から4.43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

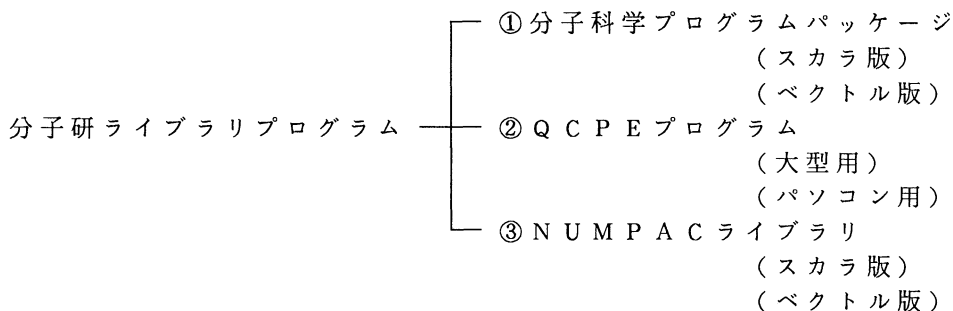
平成3年度のライブラリ開発計画を表4. 1. 1に示す。開発されたライブラリは新規プログラムの登録あるいは既存プログラムの改良・発展というかたちでライブラリ管理システムを介してユーザに公開している。

表4. 1. 1 平成3年度 分子研ライブラリプログラム開発作業一覧

1	酒井 章吾	大阪産業大	助教授	GAMESSノースダクタ版のコンバート
	中村 方哉		研究生	
	松永 仁城太	分子研	特研員	
2	後藤 仁志	北大	D 1	配座発生プログラム CONPLEX3
3	藪下 聡	広大	助手	COLMBSの開発整備
	高橋 修		M 2	
4	二宮 市三	中部大	教授	数学ライブラリ NUMPAC
	秦野 甯世	中京大	教授	の開発、移植
	山本 茂義	中京大	助教授	
5	山本 茂義	中部大	助教授	fpopupの開発・整備
6	別府 良孝	聖徳女子短	助教授	高速固有値ルーチン
7	古賀 伸明	分子研	助手	GAUSSIANの整備・保守
8	酒井 嘉子	九大	教授	モデルポテンシャル関数データの
	三好 永作	九大	助教授	整備
	富樫 雅文	北大	研究生	
9	長嶋 雲兵	分子研	助手	プログラムライブラリ管理
	富樫 雅文	北大	研究生	システムの開発
	本多 一彦	分子研	技官	
	南野 智	愛教大	M 2	
1 0	本多 一彦	分子研	技官	QCLDB検索プログラムの
	富樫 雅文	北大	研究生	バージョンアップ版の移植
1 1	小杉 信博	京大	助教授	ab initio SCF-CI プログラム GSCF
	足立 純一		M 1	の開発・整備
	斉藤 文雄		M 1	
	平井 和郎		M 2	
1 2	小杉 信博	京大	助教授	ab initio SCF-CI プログラム GSCF
	平井 和郎		M 2	ワークステーション版の開発・整備
1 3	北尾 修	京大	助手	プログラム開発のための第11回大
	岩田 末廣	慶大	教授	大型計算機成果発表会
	北原 和夫	東工大	教授	
	上原 健太郎	金沢大	D 1	
	下島 淳彦	早大	M 1	
	今村 詮	広大	教授	

1 4	岩田 末廣 南部 伸孝 樋山 みやび 花輪 智之 鈴木 一規	慶大	教授 D 2 M 1 M 1 M 2	MOLYX-SCF-CI システム
1 5	北尾 彰朗 三浦 伸一	京大	D 1 M 2	IMPACT の開発・整備
1 6	林 治尚 松本 正和 甲賀 研一郎	京大	D 1 M 2 M 1	凝縮系の分子動力学シミュレーション
1 7	岡崎 進 高岡 健二 石井 亮	東工大	助手 M 1 M 1	生体膜の動画システム
1 8	小澤 芳樹	分子研	助手	結晶構造解析のプログラム UNICS III の改訂
1 9	豊田 二郎	分子研	技官	MOPAC VER-6 の HITAC-V0S3 への移植

分子研ライブラリプログラムの構成は以下の様に 3 部構成になっている。



① の分子科学プログラムパッケージには、国内および国外の研究者から提供されたプログラム、② の 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 224 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 3 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 2 本である。

FPOPOP DIVIDING A FORTRAN PROGRAM INTO SUBPROGRAMS
GAUS88 GAUSSIAN 88 : AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS

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

PE (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561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、非常に有用なものである。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月より今までのQCPEプログラム(主に汎用大型機用)に加えパーソナルコンピュータ版(IBM-PC、マッキントッシュ)のQCPEプログラムを公開している。インタラクティブな操作に優れた分子グラフィックスなどのプログラムを含む。IBM-PC用が97件、マッキントッシュ用が16件である。一覧は、'SYS7.NEWS.DATA(IBMPC)'と'SYS7.NEWS.DATA(MAC)'にある。

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

平成3年度に新規登録したQCPEプログラムは以下の17件である。

QC0593 QCFF/PI-CFFTH:EXTENSION OF QCPE 534
QC0594 PAR:A PROTEIN ANALYSIS PACKAGE
QC0595 MDSP1B:A MOLECULAR DYNAMICS ALGORITHM OF ORDER N
QC0596 PROTEAN/I AND PROTEAN/II
QC0597 LOCATION OF TRANSITION STATES IN AMPAC AND MOPAC
QC0598 INTERCON:INTERCONVERTING MOLECULAR COORDINATES
QC0599 ANNEAL:SIMULATED ANNEALING PROG(POLYPEPTIDE CONFORMATION)
QC0600 PRODEN:AN ELECTRON DENSITY ANALYSIS PROGRAM
QC0602 OVGFM:MO PACKAGE FOR OUTER VALENCE GREENS FUNCTION
QC0603 NOEL:NUMBER OF OVERLAPPING ELECTRONS
QC0604 MOLVIB:CALC. OF HARMONIC FORCE FIELD AND VIB. MODES
QC0605 OPKINE:OPTIMIZATION METHOD FOR KINETIC MODEL
QC0606 AMSOL:SCFPROGRAM FOR CALC. FREE ENERGIES IN AQ. SOLUTION
QC0607 THERPOLY:RESEARCH GRADE THERMO. FUNC. FOR POLYATOMIC MOL.
QC0608 CHEMICCALC-2:COMPLETELY AUTHOMATED LOG P CALCULATION
QC0609 ANHTRAX:CUBIC FORCE CONST. IN NON-DEGENERATE INT. COORDINATE
QC0610 MSEED:CALC. SOLVENT-ACCESSIBLEAREAS OF MOLECULES

③のNUMPACプログラムは二宮市三教授(中部大)、秦野世教授(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869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 ライブラリプログラム一覧

==== IMS PROGRAM LIBRARY ====

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

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	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
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	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
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	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
008	CCP5	CCP5 SIMULATION PROGRAMS

FIELD CODE : DB10

FIELD TITLE : DATA BASES.

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

FIELD CODE : EG10
FIELD TITLE : EDUCATIONAL TOOLS.

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

FIELD CODE : EG20
FIELD TITLE : GENERAL UTILITIES.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	LIBE	SOURCE PROGRAM MAINTENANCE UTILITY
002	FCBSD	FILE ACCESS ROUTINES WHICH CAN BE USED IN FORTRAN PROGRAM
003	PSTOPO	CONVERT FORTRAN SOURCE DATA FROM PS-DSN. TO PO-DSN(MEM).
004	POTOPS	CONVERT FORTRAN SOURCE DATA FROM PO-DSN(MEM). TO PO-DSN.
005	REPORT	DISPLAY MODULE-REFERENCE RELATION IN TABLES AND CHARTS.
006	PFORTV	PFORT VERIFIER:CHECK OF FORTRAN PROGRAM FOR PORTABILITY
007	FCMP	FILE COMPARE
008	FLOW	FORTFLOW
009	FORDAP	FORDAP (FORTRAN PROGRAM DYNAMIC ANALYSIS PACKAGE)
010	STINGY	STINGY PRINTER
011	PROFIL	PROFILE
012	SFORT	FORMAT TRANSFORMER FOR FORTRAN COMPILE LIST
013	PSPART	EXTRACT SPECIFIED ROUTINES FROM A FORTRAN PROGRAM PACKAGE
014	DRAWDG	DIAGRAM:GENERATION OF GOLDSTONE AND 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	FORTRAN PROGRAM ANALYZER FOR A VECTOR PROCESSOR.
020	ASPPRT	TERMINAL EMULATOR FOR MAC
021	FPOPUP	DIVIDING A FORTRAN PROGRAM INTO SUBPROGRAMS

FIELD CODE : GP10
FIELD TITLE : GRAPHIC PROCESSING.

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

006 CRYSTA PROGRAM SYSTEM FOR CRYSTAL STRUCTURE ANALYSIS
007 EXAFS GRAPHIC PROGRAM SYSTEM FOR EXAFS ANALYSIS

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	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	DIAMT	CALC. OF FCF AND ELECTRONIC SPECTRA OF DIATOMIC MOLECULES
003	MMIPI1	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 100-ATOM MOLECULES
004	MMIPI3	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 300-ATOM MOLECULES

FIELD CODE : SS30
FIELD TITLE : NMR SPECTROSCOPY.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	DNMR3	SIMULATION OF 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 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 MNDOC CORRELATED SEMIEMPIRICAL CALCULATIONS WITH GEOM.OPT.
 048 GAUS86 GAUSSIAN 86:AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS
 049 CRY88 CRYSTAL 88: AB INITIO LCAO-HF PROGRAM FOR CRYSTAL SYSTEMS
 050 CHELP NET ATOMIC CHARGES FROM AB INITIO ELECTROSTATIC POTENTIALS
 051 NBO NBO:NATURAL BOND-ORBITAL WAVEFUNCTION ANALYSIS PROGRAM
 052 GAUS88 GAUSSIAN 88:AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS

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	GHFID	GENERAL HARTREE-FOCK CALCULATION
009	BAND1	EXTENDED HUCKEL CALCULATIONS OF ONE-DIMENSIONAL POLYMERS
010	MOPAC	A GENERAL MOLECULAR ORBITAL PACKAGE

FIELD CODE : WF30

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

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

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

152

**** 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	CRYS88	CSACST	CVOA	DIAINT	DIABIB	DISMAP
DISPL3	DNMR3	DRAWDG	DVSCAT	EHTB	EMOR1	ENVLOP
EXAFS	FCBSD	FCMP	FEMSE2	FLAPW	FLOW	FORDAP
FPOPUP	FPTNMR	FPTSPN	GAMESS	GAUS76	GAUS80	GAUS82
GAUS86	GAUS88	GHFID	GORDON	GPQDD	GRAMOL	GSCF2
GSCF3	GUGACI	HLISP	HMO	HONDOG	HONDO7	HUCKEL
ICON	IMSPAC	IMSPAK	INTCPY	IR2	ISLINE	JAMOL3
JAMOL4	JANIE1	JAPIC1	JAPIC2	JASON2	JHH	KAMUY
KOTO	KURVLR	LAOCN3	LIBE	LSRES3	LSVR3	MDANO3

MDH208	MDP	MDSALT	MELD	MICA3	MINDO3	MMIPI1
MMIPI3	MMIY3	MM2	MNDOC	MNDOM	MOLSCCT	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	QCLDB	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) Q C L D B (量子化学文献データベース)
- (2) C M Q C A (Carnegie-Mellon量子化学アーカイブ)
- (3) C H E M I C S (有機化合物自動構造解析システム)
- (4) I R 2 (赤外線スペクトルデータベース)
- (5) S T E R I C (立体化学計算プログラム基礎団データベース)
- (6) Q C B D B (量子化学基底関数データベース)
- (7) M P B D B (モデルポテンシャル関数データ)

4. 3 電子計算機センター運営委員会

4. 3. 1 第22回電子計算機センター運営委員会議事報告

第22回電子計算機センター運営委員会が平成3年9月13日（金）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

最初に、前回委員会で宿題となった4件について経過説明がなされた。基生研、生理研の委員をオブザーバーとすることについては所長レベルで検討されているが、今年度中は従来どおりとすることになった。また、計算機時間の割り当てについて、所外・所内の比率が6：4から大きく超えないように所内利用者相談会を開き協議した。A氏の協力研究のプロジェクトについて研究分野の妥当性を共同専門委員会への問い合わせる件については、現在協力研究に関して特に特に分野の審査はしていないが、今後は考慮するとの回答をもらった。B氏の施設利用のプロジェクトの所属の問題についてはその財団法人が学術研究機関として認められているため問題なしとの結論となった。

(1) 平成3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年度はほぼ昨年度並みであること、S820は少し増えているがM680Hが意外に伸びていないとの説明がなされた。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。M680HとS820の使用比率が所内は1：2、所外は2：1になっていること、所内のVPUの使用率が少し低いことが示された。8月から正式サービスを開始したTISNが一ヶ月で約千件使われていることが示された。

(2) 平成3年度予算と使途

電算経費、附属施設経費の予算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。

(3) 平成3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21回)委員会で書簡を発することになっていた12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対する審査の結果12件に対する評価状況が示され、評点通りで承認された。またひとつのプロジェクトは評価点数が非常に低かったため、委員からのコメントを手紙で通知することとした。(評価点数2.30)

(4) 平成3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5プロジェクトに対して232,190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。

(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、サービス状況が資料によって報告された。

(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。

(7) 平成3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13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. 平成3年度後期および平成4年度計算機運用方針

運用方針案として以下の5件が提出され、いずれも了承された。

(1) 月間運用について

S820でのEジョブの新設とM680HでのEジョブの平日昼間実行を検討していること。また、ハード保守・センター業務の作業が多いので、月一回の保守日のサービス開始時刻を19:00に変更することを検討中であるとの説明がなされた。

(2) OSの変更とシステムの部分的増強

OSの変更とメモリーなどハードウェアの増強の予定について説明があった。また、平成3年12月末に10日程度のシステム停止する予定であるとの説明がなされた。

(3) 超高速ワークステーションの運用

平成4年初めに高性能ワークステーションをできるだけ多数導入する予定であるとの説明があった。汎用機からワークステーション上のジョブの実行・入出力を制御する運用を検討していること、将来的には大規模なワークステーションをひとつのシステムに統合する計画であるとの説明がなされた。

(4) ネットワークの充実

T I S N への接続の状況報告と、今後の計画について説明がなされた。

(5) その他

電算機センター棟の増築、新築（移転）について検討しているとの説明がなされた。

5. 平成3年度後期計算機時間配分案

平成3年度後期のCPU時間配分案が資料に基づいて説明・検討され承認された。

6. 平成3年度後期利用申請審査

協力研究後期8件、施設利用（B）3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、各委員間の評点の巾の大きなもの、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）

- A 施設利用と重複が認められるため、施設利用から6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。
- B 施設利用と重複が認められるため、協力研究は0時間（必要なら施設利用で追加申請してもらう）とし、この旨を手紙で通知することになった。
- C 施設利用と重複が認められるため、協力研究は0時間（必要なら施設利用で追加申請してもらう）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。

7. スーパーコンピューター更新計画

スーパーコンピューターの更新計画と経過の説明がなされた。次に、次期システムの概要と特徴について説明がなされた。

今期の運営委員の中から改めて「次期システム検討小委員会」の委員として6名が選出された。

4. 3. 2 第23回電子計算機センター運営委員会議事報告

第23回電子計算機センター運営委員会が平成4年3月2日(月)に開かれた。以下に議事の要約を掲載する。

1. 前回議事録朗読

2. センターからの報告

(1) 平成3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3年度は電力使用量は3%増、ジョブ件数は増えておりかなり飽和度が上がっていること、稼働時間は昨年度並であること、M680HはCPU時間が15%増で今後増えていく見通しであること、S820はCPU、VPU時間が昨年度並であることが説明された。次に分野区分別のCPU時間使用状況、TSSの利用状況が示された。VPUの使用比率が30%弱と少し低いことが示された。TSSについては所内も含めTCP/IPベースの利用がますますのびていることが示された。

(2) 平成3年度予算と使途

電算経費、付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。

(3) 平成3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22回）委員会で書簡を発することになっていた4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対する審査の結果、20件に対する評価状況が示され評点通りで承認された。この内、書簡を発した3つのプロジェクトに対して送付された手紙の文面と返答が示された。

(4) 平成3年度施設利用旅費割り当て状況

割り当て一覧が示され説明があった。後期は5プロジェクトに対して205,100円が割り当てられた。旅費の割り当て方針は従来通りで遠方、小規模な研究室最近割り当てをもらっていない研究室を中心に行った旨が報告された。

(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、サービス状況が資料によって報告された。

(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。

(7) 平成3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示された。

4. 次期システムについて

次期スーパーコンピュータシステムおよび汎用機のシステムの導入について議論が行われた。

5. 建物増築について

電算機センターの増築計画について状況報告がなされた。

6. 化学コンピュータネットワークについて

化学コンピュータネットワークについて議論が行われた。

7. 平成4年度計算機運用方針

運用方針案として以下の9件が提出され、いずれも了承された。

(1) 大型・長時間ジョブへの対応強化

S820でのEジョブ実行を含めた大型・長時間ジョブの処理を充実すること。また、SHRTファイルの期限を2週間に変更することを検討中であるとの説明がなされた。

(2) 高性能計算サーバーワークステーションの導入

当初の予定より遅れているが、平成4年度初めに高性能ワークステーションをできるだけ大量に導入する予定であるとの説明がなされた。

(3) 動画像システムの整備

スーパーコンピュータでの動画像作成に先立って行うワークステーションでの編集処理のプログラムを強化し、3050Rおよび一般のワークステーションに移植するなど動画像システムの整備をすすめていく予定であるとの説明がなされた。また、Σ600経由の動画像ビデオ出力の実験と整備を行うとの説明がなされた。

(4) Σ600およびFDDIネットワークの整備

高性能ワークステーションとホストコンピュータを高速なネットワークで接続する必要があり、Σ600およびFDDIネットワークの導入整備を行う予定であるとの説明がなされた。

(5) FLIB（ライブラリ検索システム）

平成4年6月をメドに新FLIBの検索システムに移行する予定であるとの説明がなされた。

(6) 端末システムの更新

昨年末から今年にかけて行う予定であった端末システムの更新は、平成4年5月頃になるとの説明がなされた。

(7) ターミナルゲートウェイの導入、整備

従来CCPからホストコンピュータに接続していた公衆網、DDX、ISDN網の端末を3050ワークステーションで受け、ここからTCP/IPでホストコンピュータおよび高性能計算サーバーワークステーションに接続することができるようにターミナルゲートウェイの導入、整備をするとの説明がなされた。

(8) 光ファイリングシステムの導入

光ファイリングシステムを導入し計算機利用申請書・論文・センターレポート・Q C P E などのマニュアルの電子化、オンライン化を行う予定であるとの説明がなされた。

(9) VM化とメインフレームUNIXの試験運用

V O S 3 にVMを導入しシステムの保守性を高めるとともに、UNIXの試験運用をする計画があるとの説明がなされた。

8. 平成4年度前期計算機時間配分案

平成4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。

所外の平均許可率は85%とすることになった。

9. 平成4年度前期利用申請審査

課題研究1件、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うこととした。

(施設利用B)

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

M N氏の課題研究と重複が認められるが、重複申請の申告がなされていない

いなど不明な点があるので調査の上対処することになった。

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

電子計算機センター第11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3年9月13日（金） 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 中西浩一郎、田中秀樹、北尾修、稲垣文拓、林 治尚、松本正和、
広瀬美加、甲賀研一郎、寺本康博（京大 工）
足達義則（中部大 経営情報）
非電解水溶液の計算機シミュレーション
- 10：05 岩田末廣、長村吉洋、松沢秀則、南部伸孝、鈴木一規、園田陽子、
花輪智之、樋山みやび、范 康年（慶大 理工）
分子の励起状態に関する理論的研究
- 10：35 北原和夫、中村正人、関 和彦（東工大 理）
液体における電子・イオン再結合過程の非平衡統計力学
—固体中のミュオンの運動に関する理論と計算機実験—
- 11：05 樋渡保秋、石飛昌光、上原健太郎、村中 正、長谷川忠、高島 淳、
古畑 謙、宮武 慎、松井 淳（金沢大 理）
分子クラスターの分子動力学シミュレーション
—PdHxの分子動力学シミュレーション—
- 11：35 高橋博彰、下島淳彦（早大 理工）
分子軌道計算及び時間分解共鳴ラマン分光法による光励起種の
構造と振動解析
- 12：05 今村 詮、落合 洋、上田一義、青木百合子、前川浩二、三谷昌輝
（広大 理）
固相液相における巨大分子の電子状態の研究
—Elongation法による高分子の電子状態の計算—

5. 平成3年度稼働状況および利用者数

5. 1 利用者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	188	590	11161	9291	8383	3716400	3017835
	協力研究	21	21	975	919	695	367600	250143
生理学	所内	56	152	8360	7526	5690	3010400	2048493
	施設利用	3	6	30	27	11	10800	3946
基礎生物学	施設利用	1	6	50	56	53	18800	19155
	所内	3	6	30	27	6	10800	2192
合計		272	781	20606	17846	14838	7134800	5341764

(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	稼働日数
	M-680H	S-820/80		
平成3年/4	588:00	586:00	9:00	27
5	540:00	537:00	9:30	26
6	538:00	536:00	8:00	25
7	550:00	546:00	8:00	28
8	553:00	547:00	8:00	28
9	529:00	516:00	8:30	25
10	574:00	571:00	8:00	27
11	502:00	501:00	7:00	25
12	575:00	573:00	6:00	21
平成4年/1	602:00	599:00	10:00	26
2	519:00	517:00	6:00	28
3	585:00	582:00	6:00	29
合 計	6655:00	6611:00	94:00	315

5.3 CPU使用時間

(M-680H CPU使用時間)

(月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(合計)
04	10:27:02	39:11:02	118:28:46	281:07:30	32:25:23	0:00:00	0:00:00	18:20:13	2:56:20	1:25:45	2:40:38	507:02:39
05	8:48:53	45:02:07	171:08:57	370:43:14	8:21:43	0:00:00	0:00:00	22:38:59	2:00:51	2:50:07	1:23:52	632:58:43
06	9:06:17	39:42:44	137:46:35	337:43:20	33:03:12	0:00:00	0:00:00	25:16:17	4:24:05	0:29:12	0:10:55	587:42:37
07	10:30:06	43:52:25	78:53:58	205:13:54	34:32:11	0:00:00	0:00:00	22:31:10	19:13:01	2:24:10	7:47:57	424:58:52
08	7:18:54	57:55:01	123:32:45	167:40:17	14:31:08	0:00:00	0:00:00	19:11:55	2:21:00	0:23:20	2:12:43	395:07:03
09	12:00:39	52:06:10	114:10:09	240:03:14	0:00:00	0:00:00	0:00:00	15:34:25	4:02:04	8:35:31	1:19:28	447:51:40
10	9:59:17	60:27:41	137:19:55	289:22:10	0:00:05	0:00:00	0:00:00	19:53:17	5:17:49	14:05:42	3:19:14	539:45:10
11	16:40:34	53:22:50	188:12:03	176:12:31	10:01:05	0:00:00	0:00:00	17:38:02	1:21:40	0:16:45	3:16:09	467:01:39
12	12:53:25	35:17:13	116:51:56	254:32:02	36:13:33	0:00:00	0:00:00	12:15:38	1:22:58	0:11:20	0:15:12	469:53:17
01	11:09:17	48:36:03	120:06:58	228:12:34	53:59:49	0:00:00	0:00:00	19:48:23	0:27:12	0:15:25	0:23:42	482:59:23
02	8:25:11	46:54:40	130:35:54	192:01:49	45:42:00	0:00:00	0:00:00	19:15:36	1:58:04	0:28:02	0:42:02	446:03:18
03	9:36:32	33:39:44	150:29:35	278:58:47	53:55:11	0:00:00	0:00:00	19:08:03	0:57:58	0:24:57	2:51:20	550:02:07
(合計)	126:56:07	556:07:40	1587:37:31	3021:51:22	322:45:20	0:00:00	0:00:00	231:31:58	46:23:02	31:50:16	26:23:12	5951:26:28

(S-820/80 CPU使用時間)

(月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(合計)
04	15:56:35	39:55:18	126:01:16	347:55:24	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:50:09	0:00:00	4:34:52	0:00:00	535:13:34
05	4:25:03	38:06:43	106:48:08	187:43:38	0:00:00	0:00:00	17:12:34	0:27:36	0:00:00	2:46:50	0:00:00	357:30:32
06	16:35:59	33:40:58	133:43:59	245:07:35	0:00:00	0:00:00	9:56:32	0:04:06	0:00:00	1:26:07	0:00:00	440:35:16
07	13:47:54	44:14:17	113:05:56	299:00:54	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:16:57	0:00:00	2:09:40	0:00:00	472:35:38
08	4:17:30	47:06:29	142:46:23	240:06:56	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:12:49	0:00:00	2:59:39	0:00:00	437:29:46
09	7:44:36	45:57:31	124:55:59	259:31:24	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:07:14	0:00:00	5:32:23	0:00:00	443:49:07
10	18:16:58	39:15:28	147:17:33	273:40:26	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:09:48	0:00:00	4:50:13	0:00:00	483:30:26
11	12:57:08	61:14:05	126:31:22	188:38:17	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:11:54	0:00:00	2:41:12	0:00:00	392:13:58
12	5:05:04	38:52:11	121:21:09	212:13:30	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:18:05	0:00:00	6:34:17	0:00:00	384:24:16
01	4:44:33	36:00:21	147:11:28	301:48:56	0:00:00	1:20:44	0:00:00	0:19:19	0:00:00	6:50:25	0:00:00	498:15:46
02	2:46:14	33:51:24	87:44:56	368:37:10	1:18:26	1:00:33	0:00:00	0:11:25	0:00:00	0:08:54	0:00:00	495:39:02
03	2:34:29	28:35:47	121:47:10	262:40:57	21:00:06	3:28:28	0:00:00	0:41:43	0:00:00	2:30:31	0:00:00	443:19:11
(合計)	109:12:03	486:50:32	1499:15:19	3187:05:07	22:18:32	5:49:45	27:09:06	3:51:05	0:00:00	43:05:03	0:00:00	5384:36:32

(S-820/80 VPU使用時間)

(月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(合計)
04	4:45:52	11:28:11	35:50:13	148:15:58	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:20:35	0:00:00	0:06:03	0:00:00	200:46:52
05	0:55:43	11:26:25	28:40:33	58:04:29	0:00:00	0:00:00	13:50:52	0:02:26	0:00:00	0:00:00	0:00:00	113:00:28
06	3:52:04	9:01:20	39:53:40	88:21:34	0:00:00	0:00:00	7:15:45	0:00:00	0:00:00	0:00:08	0:00:00	148:24:31
07	4:04:11	9:30:57	24:53:15	84:06:52	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:01:21	0:00:00	0:10:12	0:00:00	122:46:48
08	1:15:50	19:23:00	37:30:40	127:15:08	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:01:21	0:00:00	0:01:39	0:00:00	185:27:38
09	2:13:14	14:02:31	43:18:34	110:41:42	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:35	0:00:00	0:07:46	0:00:00	170:24:22
10	6:22:11	11:49:35	49:25:17	110:04:56	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:07	0:00:00	0:56:55	0:00:00	178:39:01
11	4:06:27	17:40:46	42:53:11	67:32:26	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:37	0:00:00	0:36:44	0:00:00	132:50:11
12	1:14:28	12:15:15	49:54:09	91:40:54	0:00:00	0:00:00	0:00:00	32:49:19	0:00:00	1:26:10	0:00:00	189:20:15
01	0:45:53	10:32:01	49:06:52	164:57:52	0:00:00	0:21:48	0:00:00	0:04:39	0:00:00	5:40:00	0:00:00	231:29:05
02	0:31:26	10:11:51	32:33:29	167:42:37	0:17:34	0:15:26	0:00:00	0:00:03	0:00:00	0:00:17	0:00:00	211:32:43
03	0:28:21	10:20:57	35:36:30	72:13:58	4:41:38	0:34:35	0:00:00	0:06:57	0:00:00	0:01:07	0:00:00	124:04:03
(合計)	30:35:40	147:42:49	469:36:23	1290:58:26	4:59:12	1:11:49	21:06:37	33:28:00	0:00:00	9:07:01	0:00:00	2008:45:57

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	5,359	2,053	986	538	11	0	0	12,494	364	305	276	22,386
05	4,071	1,935	1,470	586	5	0	0	13,258	397	238	137	22,097
06	6,999	2,190	1,208	476	14	0	0	13,320	209	408	187	25,011
07	7,228	2,511	810	304	16	0	0	12,376	226	281	100	23,852
08	3,891	2,465	915	352	6	0	0	11,125	173	244	352	19,523
09	5,546	3,769	1,336	431	1	0	0	12,203	302	291	284	24,163
10	9,462	3,815	1,461	580	1	0	0	14,462	302	236	286	30,605
11	9,600	3,097	1,584	315	5	2	0	13,243	455	499	438	29,238
12	4,805	2,053	1,086	380	19	0	0	11,248	450	239	200	20,480
01	4,933	2,285	1,430	329	26	2	0	13,526	179	621	153	23,484
02	3,926	2,279	1,322	324	29	6	0	10,980	469	283	119	19,737
03	3,389	1,771	1,151	507	27	0	0	12,341	335	231	334	20,086
(合計)	69,209	30,223	14,759	5,122	160	10	0	150,576	3,861	3,876	2,866	280,662

(S-820/80 ジョブ処理件数)

(月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(合計)
04	4,208	1,617	877	545	0	4	0	97	0	170	0	7,518
05	1,457	1,771	1,003	421	0	0	6	90	0	87	0	4,835
06	2,959	1,938	1,110	537	0	0	4	53	0	133	0	6,734
07	2,733	1,930	892	449	0	0	0	101	0	166	0	6,271
08	1,293	2,073	1,101	394	0	0	0	102	0	129	0	5,092
09	1,583	2,023	976	382	0	0	0	79	0	80	0	5,123
10	2,927	1,899	1,212	415	0	0	0	105	0	138	0	6,696
11	2,664	2,692	1,440	436	0	0	0	83	0	111	0	7,426
12	1,255	1,498	880	372	0	0	0	51	0	51	0	4,107
01	1,131	1,400	943	361	4	20	0	255	0	121	0	4,235
02	1,136	1,549	611	471	3	20	0	112	0	67	0	3,969
03	1,012	1,247	1,045	529	41	64	0	214	0	167	0	4,319
(合計)	24,358	21,637	12,090	5,312	48	108	10	1,349	0	1,423	0	66,325

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バ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	合 計
回線1	572	289	298	187	147	218	311	254	208	256	200	152	3092
回線2	232	46	63	28	29	32	72	39	13	16	39	14	623
回線3	52	10	2	1	9	4	3	1	0	1	0	0	83
回線4	9	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	12
回線5	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
合 計	866	348	363	216	185	254	386	294	221	273	239	166	3811

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	合 計
回線1	265	385	239	241	394	262	172	246	247	291	264	269	3275
回線2	22	62	14	30	52	31	13	35	30	24	21	24	358
合 計	287	447	253	271	446	293	185	281	277	315	285	293	3633

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	合 計
北海道大学	401	438	764	644	429	459	287	238	357	399	168	95	4679
東北大学	115	113	325	268	40	141	7	49	57	5	6	30	1156
東京大学	1089	892	748	577	445	513	483	320	500	626	316	720	7229
東京大学1	54	72	181	144	21	73	62	49	33	20	24	8	741
名古屋大学	759	571	517	428	273	251	270	155	107	209	164	319	4023
京都大学	1113	1162	994	762	571	958	1079	933	750	542	780	804	10448
大阪大学	259	324	233	209	172	382	215	145	219	212	279	191	2840
九州大学	464	215	51	113	49	92	27	89	67	150	158	146	1621
学情センター（SIMAIL）	0	0	0	0	0	0	8	5	0	1	0	0	14
奈良女子大学	7	101	95	151	132	83	81	72	96	49	70	13	950
広島大学	1019	631	620	421	151	373	1109	1265	981	850	205	40	7665
大阪府立大学	154	81	45	15	41	3	166	151	140	107	149	157	1209
千葉大学	60	570	358	100	9	10	99	174	67	0	0	0	1447
京大化学研究所	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0	6
弘前大学	6	0	11	2	1	0	6	0	0	12	3	0	41
お茶の水女子大学	0	0	7	0	0	1	0	0	0	0	0	0	8
東大物性研究所	221	130	57	20	109	133	50	47	19	13	1	3	803
熊本大学	161	438	331	396	237	419	596	394	313	212	399	255	4151
愛媛大学	109	70	24	76	63	81	83	36	9	91	102	97	841
静岡大学	295	364	324	495	190	345	470	419	185	229	385	462	4163
金城学院大学	10	5	0	0	0	8	0	0	0	9	0	0	32
豊橋技術科学大学	1	6	2	0	0	0	16	5	12	0	0	0	42
信州大学	22	15	29	0	0	0	4	2	95	0	0	28	195
横浜国立大学	2	4	1	0	8	3	5	1	0	0	0	0	24
電気通信大学	32	43	48	149	70	234	213	190	216	118	83	120	1516
東洋大学（川越校舎）	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	3
岡山理科大学	0	5	0	0	0	1	0	0	3	0	0	0	9
東京工業大学	0	132	74	113	0	111	84	188	290	249	36	175	1452
奈良教育大学	0	2	0	2	0	2	1	0	0	0	0	1	8
金沢大学	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	3
岐阜大学	0	34	181	209	31	49	178	165	43	52	85	15	1042
岡山大学	0	25	117	137	98	67	46	116	62	50	33	20	771
宮崎大学	0	0	2	0	3	1	0	0	0	0	0	0	6
大阪工業大学	0	0	0	0	0	0	179	118	70	181	86	23	657
合 計	6353	6444	6139	5431	3149	4793	5824	5326	4691	4389	3533	3723	59795

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	合計
回線1	249	262	310	247	246	224	198	163	144	244	144	70	2501
回線2	69	166	202	109	107	130	68	38	23	36	9	4	961
回線3	52	87	145	38	36	38	66	13	3	19	4	7	508
回線4	26	32	65	3	3	6	3	0	0	23	0	4	165
合計	396	547	722	397	392	398	335	214	170	322	157	85	4135

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	合計
回線1	265	290	417	475	353	403	406	390	235	305	235	215	3989
回線2	169	194	250	324	264	217	275	238	144	195	91	103	2464
回線3	109	82	139	202	145	116	135	125	80	79	21	19	1252
回線4	47	29	88	112	62	61	69	35	16	25	5	1	550
回線5	19	6	25	50	30	34	24	7	0	7	1	0	203
回線6	4	1	7	11	10	8	5	1	0	1	0	0	48
回線7	1	0	2	1	2	3	2	0	0	0	0	0	11
回線8	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0	0	0	2
合計	614	602	928	1175	867	842	917	796	475	612	353	338	8519

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	合計
回線1	4	2	0	16	57	1	6	2	4	3	0	5	100
回線2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	11	11
回線3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	2
合計	4	2	0	16	57	1	6	2	4	3	0	18	113

5. 7 TISN経由の利用状況（telnet, ftp）

	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月	合計
FSモード	452	657	862	844	1420	1403	1848	1791	1486	2033	1762	1829	16387
Lモード	254	465	455	385	713	1262	1585	1324	1234	1750	1365	1884	12676
合計	706	1122	1317	1229	2133	2665	3433	3115	2720	3783	3127	3713	29063

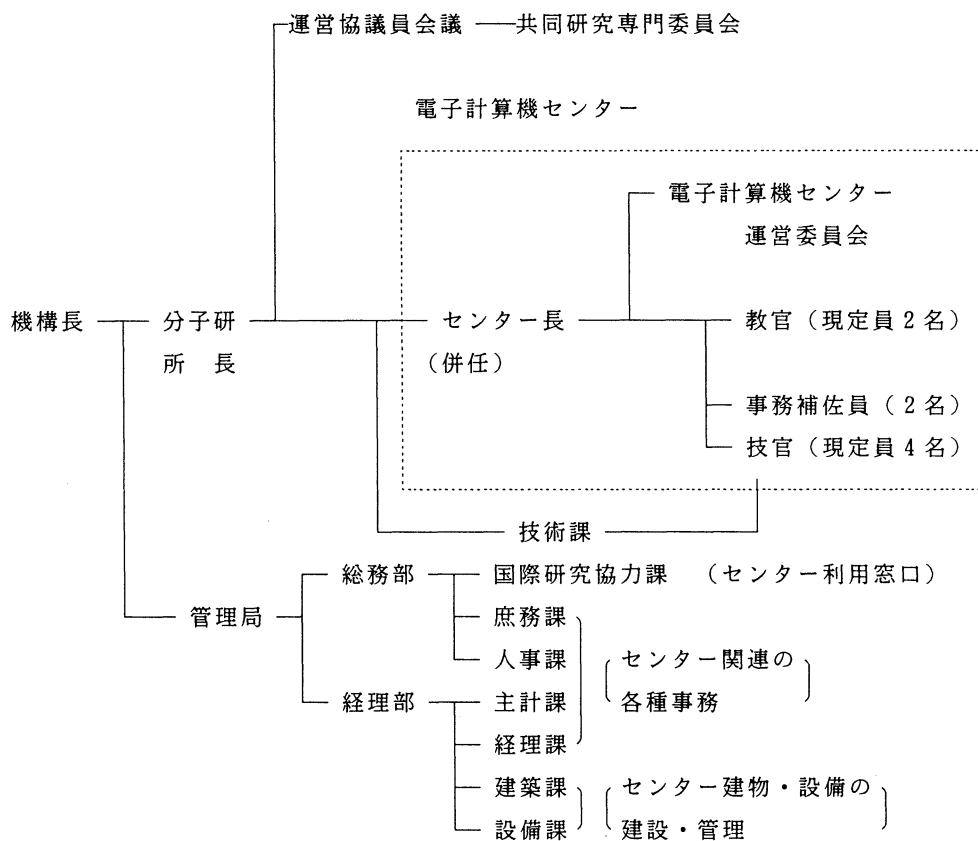
※FSモード：フルスクリーンモード
Lモード：ラインモード

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	京大工教授	〃
岡田勲	東工大教授	〃
中辻博	京大工教授	〃

(平成3年度)

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

(平成4年度)

彦坂興秀	生理研教授	生理研委員
上野孝治	基生研助教授	基生研委員

6. 5 電子計算機センター職員（平成4年7月現在）

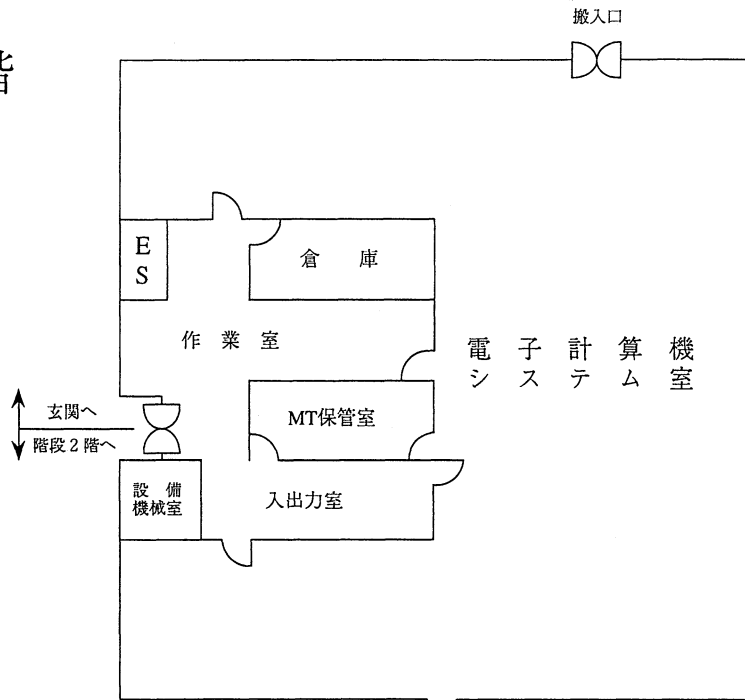
諸熊奎治	センター長（併任）
北浦和夫	助教授
南部伸孝	助手（平成4年7月1日より）
南野智	技官（平成4年4月1日より）
西本史雄	技官（係長）
田中邦彦	技官
手島史綱	技官
加納聖子	事務補佐員
石井敦子	事務補佐員

6. 6 応用プログラム相談員一覧

藤井俊明	総研大大学院生	平成3年4月～平成4年3月
小松崎民樹	総研大大学院生	平成3年12月～平成4年3月

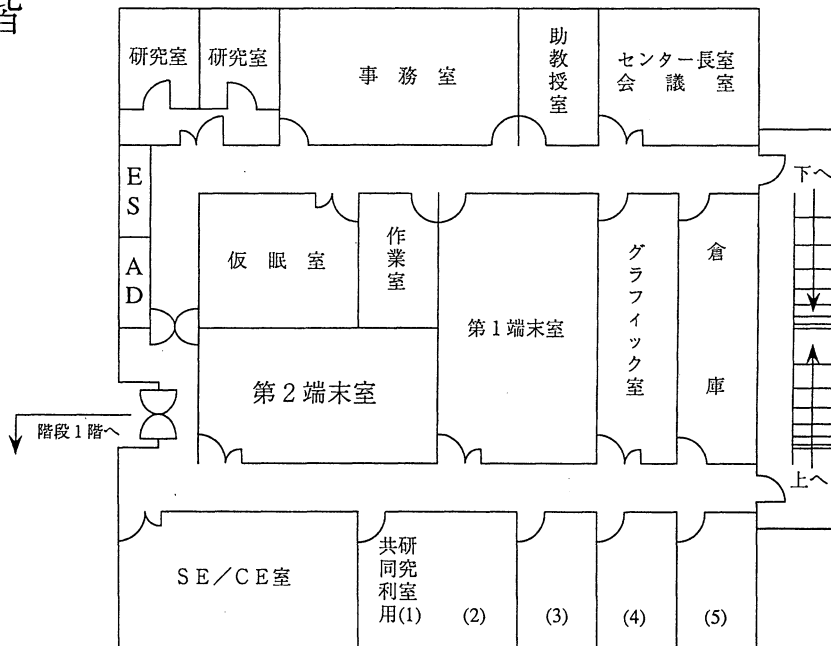
6. 7 建物図

1 階



1階はセンターの業務に関わる作業室と計算機システムの主機室のみ

2 階



6. 8 マニュアルの紹介と購入方法

よく利用されているマニュアルには以下のようなものがあります。
センターでは端末室などに置いてありますが、個人での購入を希望される時の
申し込み先はつぎの通りです。

〒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

F O R T R A N 関係 (H A P を含む)

最適化 F O R T R A N 7 7 言語	6080-3-731
最適化 F O R T R A N 7 7 使用の手引	6180-3-732
F O R T R A N 開発支援システム	6180-3-733

T S S 関係

T S S 入門 (A S P E N 編)	8090-3-015
T S S コマンド	6180-3-162
T S S 操作	6180-3-163
T S S メッセージ	6180-3-164
T S S 解説	6180-3-160
T M P 4 E 3	6180-3-370
T S D U T E 2 解説 文法書	8091-3-069
T S D U T E 2 入門 入門書	8090-3-016
T S L O G	6180-3-374
ファイル伝送プログラム I F I T - T S S E 2	6180-3-375

プログラミング支援エディタ関係

A S P E N E 2 使用の手引	6180-3-480
A S P E N メール機能 A S P E N / M F	6180-3-481
A S P E N シンセサイザ機能 A S P E N / S F	6180-3-477

データベース関係

O R I O N 使用の手引	8090-6-502
O R I O N 概説	8090-6-501

メッセージ関係

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

数値計算副プログラムライブラリ関係

M S L 2 機能編第1分冊 行列計算	8080-7-120
M S L 2 機能編第2分冊 関数計算	8080-7-121
M S L 3 機能編第3分冊 統計計算	8080-7-141
M S L 2 操作編	8080-7-122

行列計算副プログラムライブラリ関係

M A T R I X / H A P M A T R I X / M	8090-7-035
---	------------

ジョブ管理関係	
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
データ管理関係	
データ管理解説	6180-3-183
ユティリティ関係	
データセットユティリティ	6180-3-225
数学関係	
数学関数	8080-3-218
ユーザ管理関係	
T R U S T E 2 コマンダ	8090-3-412
グラフ作成関係	
K G R A F E 2 G K S 編	6180-7-119
K G R A F E 2 K G R A F 編	6180-7-120
図形出力集関係	
G P S L 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 P R E V I E W	8080-7-130
データセットバックアップ関係	
D M F / B K U P 使用の手引	6180-3-400

6. 9 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無人 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 利 用 者 数 機 構 内 外 計 合	プロジェクト数	63	176	192	183	198
	利用者数	48	70	69	91	94
	機構内	107	254	325	330	375
	機構外	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	申請	(200H基準) 929	4,666	11,033	10,230	11,938
	許可	816	3,171	7,427	8,306	10,141
総使用CPU時間 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 外 計 合	プロジェクト数	199	207	226	234	213
	利用者数	102	110	130	141	143
	機構内	426	446	464	496	520
	機構外	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	申請	(200H基準) 13,053	14,799	15,536	33,832/8,458*	(M680H基準)b 9,880
	許可	10,091	10,768	12,080	28,184/7,046*	7,978
総使用CPU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	平成3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	同63年度
プロジェクト数 利用者数 機 構 内 機 構 外 合 計	数	231	239	256	272
	数	137	146	140	158
	数	515	544	593	623
	計	652	690	733	781
稼 働 時 間		6,091	5,694	6,768	6,749
利用申請 CPU時間		(M680H 基準) ^b			
	申 請 許 可	12,439 10,418	14,694 12,347	16,635 14,756	20,606 17,846
総使用CPU時間 ^c		7,872	8,300	10,619	11,874
ジョブ処理件数 ^c		278,104	253,418	295,503	346,987
ライブラリプログラム新規登録数		7	3	4	0
データベース新規登録数		0	0	0	0
センター使用論文数 ^d		211	218	248	229

- 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も
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, 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。

7. 研究開発レポート

7. 1 新ライブラリープログラム管理システム（SLIM）について

分子研・電算機センター	南野 智
豊技大・知識情報	本多一彦
お茶大・理学部	長嶋雲兵
北大・理学部	富樫雅文
(株)日立製作所	後藤 稔
(株)日立情報システムズ	川出 芳義
〃	毛利幸浩

1 はじめに

FLIBは当計算機センターが所有する3つのプログラムライブラリー（IMSライブラリー、QCPE、NUMPACK）におけるライブラリー情報の検索と実体管理のシステムである。しかし構築後10年を経ており、特に運用保守の面で多くの障害が発生してきた。これにともない当センターでは、平成2年度より新しいシステムとしてSLIM（System of Library program Management）の開発を行ってきたが、平成4年度6月1日付で公開に至った。

SLIMシステムは従来のFLIBと異なり、ライブラリープログラムの検索において画期的な改良が成されており、実に扱いやすいシステムとなっているのが特徴である。またプログラムの登録・変更などのライブラリー管理についても改良が加えられた。

今回の改訂の目的

- ① 検索操作の簡易化
- ② 登録・管理操作の簡易化
- ③ 実体ファイル名称の統一
- ④ 統計管理機能の付加
- ⑤ 次世代システムへ向けての準備

使用法

Ready モード

コマンド ==> SLIM (SLIMの実行)
SLIM MAN (マニュアルを取る)

※ 使用法の詳細はマニュアルを参照して下さい。

1 検索システムについて

SLIMはFLIBに比べてずっと扱いやすくなっただけではなく、種々のワイルドカードの使用が可能となり、検索の最終目標である目的プログラムを見つけ出すことが容易に行えるようになった。以下にSLIMで使えるコマンドの一覧を示す。

SLIMコマンド一覧

WHAT/WHA/?	LIST/LIS
HOW/??	LOOK/LOO
SEARCH/SEA/FIND/FIN/no-name	REMIND/REM
DISPLAY/DIS/D	END/QUIT/QUI
SET	

コマンドは以上の9種類23個が用意されている。これらのコマンドの内にはQCldbのコマンドと同様のものが用いられている。と詳しい使用法が知りたければマニュアルを取るかもしくはWHATまたはHOWコマンドを用いるとよい。

WHAT / HOW コマンドの使用法

WHAT	~ topic !
WHA	
?	
HOW	~ topic !
??	

※ 'topic!' はコマンド名もしくはその他(例えば SLIM, COMMAND, FIELD, WILD など)である。

SLIMでは種々のワイルドカードが使用できるようになったが、用途別

に16種類が用意された。表2.1にSLIMで使用できるワイルドカードの一覧を示す。

さらに、ライブラリー情報も大きく変わっているので、表2.2にライブラリー情報の一覧を示す。

表2.1 ワイルドカード一覧

	any char.	letter&dig	letter	digit
zero or more	*	%	@	#
one or more	-	>	<	l
just one	;	:	?	¥
zero or more spaces		l	-	
function suppressor		l	"	

表2.2 SLIMのITEM一覧

ITEM	CONTENTS	
F I E	Field name and code	分野名称と分野コード
A U	Author	著作者
A D D	Author's address	著作者の住所
P R G	Program name	プログラムの名称
L I B	Library name	ライブラリーの名称
T I T	Program title	プログラムタイトル
P U	Purpose	目的
U S E	Site of manual	マニュアルの存在場所
C M P	Computer	コンピュータのタイプ
D E P	Depositer	登録者
D A D	Depositer's address	登録者の住所
S U P	Supplier	提供者
C I T	Citation form	引用義務
C P Y	Copy level (source)	複写等のレベル
L A N	Program language	プログラムの言語
D S N	Dataset name	データセットの名称
C O M	Comment	コメント

また S L I M では、F L I B の分野コードを継承している。ライブラリー別の分野コードと分野名称、及びその分野におけるプログラム登録数を表 2. 3 ~ 2. 7 に示す。

表 2. 3 分野コード及び分野名称 I

No	コード	分野名	数
		*** MOLECULAR SCIENCE PROGRAM PACKAGE (SCALAR) ***	247
1	NM10	MATRIX, ALGEBRAIC AND ARITHMETIC UTILITY.	6
2	NM40	SYMMETRY ANALYSIS.	1
3	MI10	MOLECULAR INTEGRALS.	4
4	WF10	WAVEFUNCTIONS BY AB INITIO METHODS.	52
5	WF20	WAVEFUNCTIONS BY CNDO, INDO, AND MNDO METHOD.	47
6	WF30	WAVEFUNCTIONS BY HUECKEL, EXTENDED HUECKEL, PPP METHOD.	9
7	SC10	SCATTERING AND TRAJECTORY.	3
8	SC20	CRYSTALLOGRAPHY.	19
9	SS10	SPECTROSCOPY AND INSTRUMENTAL ANALYSIS.	4
10	SS30	NMR SPECTROSCOPY.	6
11	SS50	VIBRATIONAL AND ROTATIONAL SPECTROSCOPY.	16
12	CR20	CARTESIAN COODINATES OF ATOMS IN MOLECULES.	8
13	CR30	MOLECULAR MECHANICS AND FORCE FIELD CALCULATIONS.	8
14	AS10	SOLID STATE AND SURFACE.	4
15	AS20	POLYMER AND LIQUID CRISTAL.	1
16	AS30	LIQUID AND SOLUTION.	7
17	BI10	BIOMOLECULES.	12
18	EG10	EDUCATIONAL TOOLS.	1
19	EG20	GENERAL UTILITIES.	21
20	GP10	GRAPHIC PROCESSING.	7
21	DB10	DATA BASES.	9
22	SL10	SPECIAL LANGUAGES.	2

表 2. 4 分野コード及び分野名称 II

No	コード	分野名	数
		*** MOLECULAR SCIENCE PROGRAM PACKAGE (VECTOR) ***	36
1	WF1V	WAVEFUNCTIONS BY AB INITIO METHODS.	18
2	WF2V	WAVEFUNCTIONS BY CNDO, INDO, AND MNDO METHOD.	5
3	CR3V	MOLECULAR MECHANICS AND FORCE FIELD CALCULATIONS.	3
4	SS3V	NMR SPECTROSCOPY.	2
5	SS5V	VIBRATIONAL AND ROTATIONAL SPECTROSCOPY.	1
6	AS2V	POLYMER AND LIQUID CRISTAL.	1
7	AS3V	LIQUID AND SOLUTION.	3
8	WF3V	WAVEFUNCTIONS BY HUECKEL, EXTENDED HUECKEL, PPP METHOD.	2
9	AS1V	SOLID STATE AND SURFACE.	1

表 2. 5 分野コード及び分野名称 III

No	コード	分野名	数
		*** QCPE PROGRAM ***	640
1	NM1Q	MATRIX, ALGEBRAIC AND ARITHMETIC UTILITY.	33
2	NM2Q	EXPANSION AND SPECIAL FUNCTIONS.	4
3	NM3Q	EIGENVALUES AND EIGENVECTORS.	14
4	NM4Q	SYMMETRY ANALYSIS.	13
5	MI1Q	MOLECULAR INTEGRALS.	31
6	WF1Q	WAVEFUNCTIONS BY AB INITIO METHODS.	67
7	WF2Q	WAVEFUNCTIONS BY CNDO, INDO, AND MNDO METHOD.	91
8	WF3Q	WAVEFUNCTIONS BY HUECKEL, EXTENDED HUECKEL, PPP METHOD.	39
9	WF4Q	WAVEFUNCTIONS BY APPROXIMATE METHODS.	15
10	SC1Q	SCATTERING AND TRAJECTORY.	14
11	SC2Q	CRYSTALLOGRAPHY.	19
12	SC3Q	ELECTRON DIFFRACTION.	2
13	SS1Q	SPECTROSCOPY AND INSTRUMENTAL ANALYSIS.	28
14	SS2Q	MASS SPECTROSCOPY.	13

15	SS3Q	NMR SPECTROSCOPY.	42
16	SS4Q	ESR(EPR) SPECTROSCOPY.	15
17	SS5Q	VIBRATIONAL AND ROTATIONAL SPECTROSCOPY.	28
18	CR1Q	RATE CONSTANTS AND KINETICS.	23
19	CR2Q	CARTESIAN COODINATES OF ATOMS IN MOLECULES.	34
20	CR3Q	MOLECULAR MECHANICS AND FORCE FIELD CALCULATIONS.	33
21	EG1Q	EDUCATIONAL TOOLS.	4
22	EG2Q	GENERAL UTILITIES.	41
23	GP1Q	GRAPHIC PROCESSING.	18
24	DB1Q	DATA BASES.	0
25	SL1Q	SPECIAL LANGUAGES.	0
26	PP1Q	PROTEIN AND POLYMER	9
27	AS1Q	SOLID STATE AND SURFACE	3
28	AS3Q	LIQUID AND SOLUTION	7

表 2. 6 分野コード及び分野名称 IV

No	コード	分野名	数
		*** NUMPAC LIBRARY (SCALAR) ***	857
1	F01N	MATRIX CALCULATION(NORMALIZATION AND INVERSION)	48
2	F03N	DETERMINANTS	5
3	F04N	LINEAR EQUATION	85
4	F02N	EIGENVALUE PROBLEM	74
5	C02N	POLYNOMIAL EQUATION	24
6	C04N	NON-LINEAR EQUATION	9
7	C07N	MINIMIZATION OF FUNCTION	5
8	E05N	INTERPOLATION	28
9	E02N	DATA FITTING	20
10	D06N	FOURIER ANALYSIS	70
11	D01N	NUMERICAL QUADRATURE	108
12	D02N	ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATION	11
13	B01N	TRIGONOMETRIC FUNCTION	12
14	C03N	SPECIAL FUNCTION	132
15	C06N	BESSEL FUNCTION	136

16	H01N	LINEAR PROGRAMMING	4
17	A01N	ARITHMETIC OPERATION	2
18	G05N	RANDOM NUMBER	2
19	M02N	SORTING	82

表 2. 7 分野コード及び分野名称 V

No	コード	分野名	数
		*** NUMPAC LIBRARY (VECTOR) ***	41
1	F01W	MATRIX CALCULATION(NORMALIZATION AND INVERSION)	19
2	F03W	DETERMINANTS	0
3	F04W	LINEAR EQUATION	12
4	F02W	EIGENVALUE PROBLEM	8
5	C02W	POLYNOMIAL EQUATION	0
6	C04W	NON-LINEAR EQUATION	2
7	C07W	MINIMIZATION OF FUNCTION	0
8	E05W	INTERPOLATION	0
9	E02W	DATA FITTING	0
10	D06W	FOURIER ANALYSIS	0
11	D01W	NUMERICAL QUADRATURE	0
12	D02W	ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATION	0
13	B01W	TRIGONOMETRIC FUNCTION	0
14	C03W	SPECIAL FUNCTION	0
15	C06W	BESSEL FUNCTION	0
16	H01W	LINEAR PROGRAMMING	0
17	A01W	ARITHMETIC OPERATION	0
18	G05W	RANDOM NUMBER	0
19	M02W	SORTING	0

3 登録・管理システムについて

FLIBでは登録の手続きが煩雑で変更等が極めて困難であったが、今回改訂されたSLIMではメニュー形式での変更が可能となった。さらに今までは実体プログラムがSYS2、SYS3の両方に別れて登録されており、

名称もユーザーにとって決して分かりやすいものとはなっていなかったが、全面的にSYS4へ移行しプログラム名称も統一して分かりやすいものとした。

S Y S 4 . (PROGRAM ID) . S 及び V . %

PROGRAM ID : プログラムの名称 (6文字以内)
 S 及び V : S (スカラー版) 及び V (ベクトル版)
 % : CNTL J C L (サンプルJ C L及びJ C Lのインデックス)
 MAN マニュアル及び更新履歴ガイド
 xxxx ソースプログラム (FORT, PLI, ASM等)
 PROG ロードモジュール
 AUTO オートC A L Lモジュール
 DATA サンプルD A T A
 SUPL. xxxx その他のファイル (xxxx:FORT, PLI, ASM)

4 プログラムの公開・非公開について

今回の改訂で公開レベルが以前の5段階から2段階に変更された。ただし、以前のFLIBにはなかった統計情報が付加されたため、誰がどの様に使用したか、いつ誰が複写したかなどの情報が取れるようになった。

表4.1 FLIBにおける公開のレベル

レベル	閲 覧	複 写
1	可能	可能
2	LOOKコマンドのみ可	認可時のみ可
3	LOOKコマンドのみ可	不可
4	不可	認可時のみ可
5	不可	不可

表4.2 SLIMにおける公開のレベル

レベル	閲 覧	複 写
1	可能	可能
2	不可	不可

※ 公開レベル1では誰がいつ複写したかの記録を取る

5 今後の方針

現在当センターが所有する3種のプログラムライブラリーのうち、Q C P E、N U M P A C K に関してはプログラムの性格や種々の制約からユーザーサービスが不十分であったため、S L I M で検索しても必ずしも求めるプログラムを探せなかったりしたが、今後は特にQ C P E を中心にサービス体制の強化を進めて行く予定である。また、S L I M の管理用機能の強化等も引き続き行っていく。

7. 2 スーパーコンピュータS-820/80における
 動画像作成支援システム(MOL/MOVIE)の開発

分子科学研究所電子計算機センター 北浦 和夫
 (株)日立製作所 公共情報本部 後藤 稔
 (株)日立製作所 公共情報本部 小川 寛徳
 (株)日立情報システムズ 川出 芳義
 (株)東和コンピュータシステム 吉田 徹

1 計算結果の動画像化の必要性

スーパーコンピュータの高速化/高性能化に伴って、数値計算、中でもシミュレーション計算の大規模化/多様化には著しいものがある。その結果として、出力される情報量も人間の理解できる限界を超えた膨大なものとなり、何らかの加工を行わないかぎり解析は不可能な状況となっている。今回、開発を行ったMOL/MOVIEシステムは、分子動力学等の大規模シミュレーション結果を、スーパーコンピュータ上でリアルタイムにかつ容易にアニメーション化を可能とすることを目的としたシステムである。

このMOL/MOVIEシステムの利用により、他機器へのデータ転送などに煩わされることなく、スーパーコンピュータ上での一貫した環境下でアニメーション作成が可能となり又、作成に要する時間も従来の1週間程度から数十分へと大幅な短縮を実現することができる。これらの成果から見ても今回開発したシステムは、益々増大する大規模シミュレーション解析に今後必要不可欠なものであるといえる。

2 MOL/MOVIEシステムの概要

MOL/MOVIE(MOLecular/MOVIE)システムは、

①スーパーコンピュータ上の主(アニメーション作成)システム

②GWS(Graphic Work Station :2050G/ET)上のサブシステム

の2つから構成される。

(1) MOL/MOVIE主システム

図2-1はMOL/MOVIEの主システムの処理概念を示したものであるが、利用者はシミュレーション結果の3次元座標データを、ただ単に(と言っても多少の加工は必要だが)MOL/MOVIEシステムに入力させるだけで、後は自動的にアニメーション化しVTR/モニタに出力することが可能である。

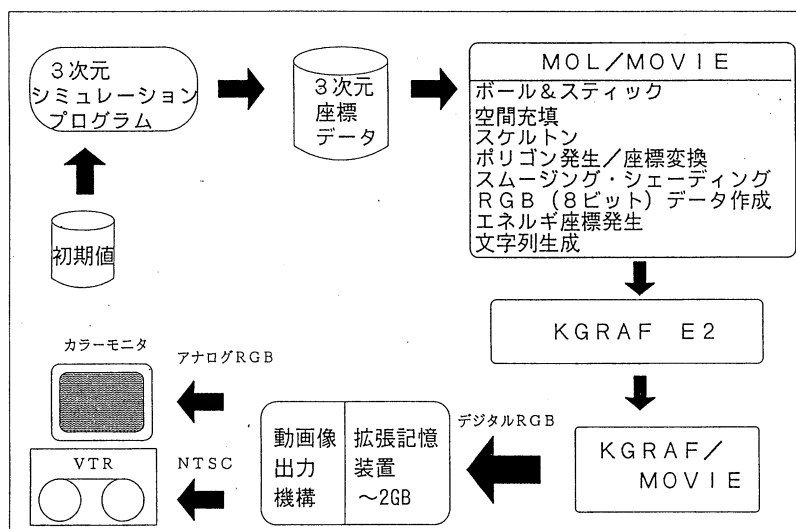


図 2-1 MOL/MOVIE主システム構成概要

3 基本ハードウェア／ソフトウェア構成

数値シミュレーションの視覚化にとって非常に有効な武器となる本システムを構築する上での基本構成要素となる、ハードウェア、及び、ソフトウェアについてここでは述べることにする。

(1) サポートハードウェア

超高速動画作成を可能とする為、図3-1に示す様にスーパーコンピュータ（S-820/80）で作成された画像データ（RGBラスタデータ）は、主記憶装置から2GB/秒の転送レートで拡張記憶装置に送られ、動画像処理システム機構（AGS=Animation Graphic System）でD/A変換され、30フレーム/秒の速度でVTR/モニタへ出力される。

表 3-1 基本ハードウェアの特長

データ形式	RGBラスタデータ	
データ量	1. 7MB/1フレーム（ES 8ビット）	
映像信号形式	画素数	最大650×484ドット
	表現色	1670万色（RGB各8ビット）
	転送レート	30フレーム/秒
	出力信号	NTSC, アナログRGB, コンポーネント(Y, R-Y, B-Y)
録画方式	一括撮り	使用可能な拡張記憶容量分の動画を一括出力
	つなぎ撮り	VTR(観望)での録画/編集を繰り返し長時間動画を作成

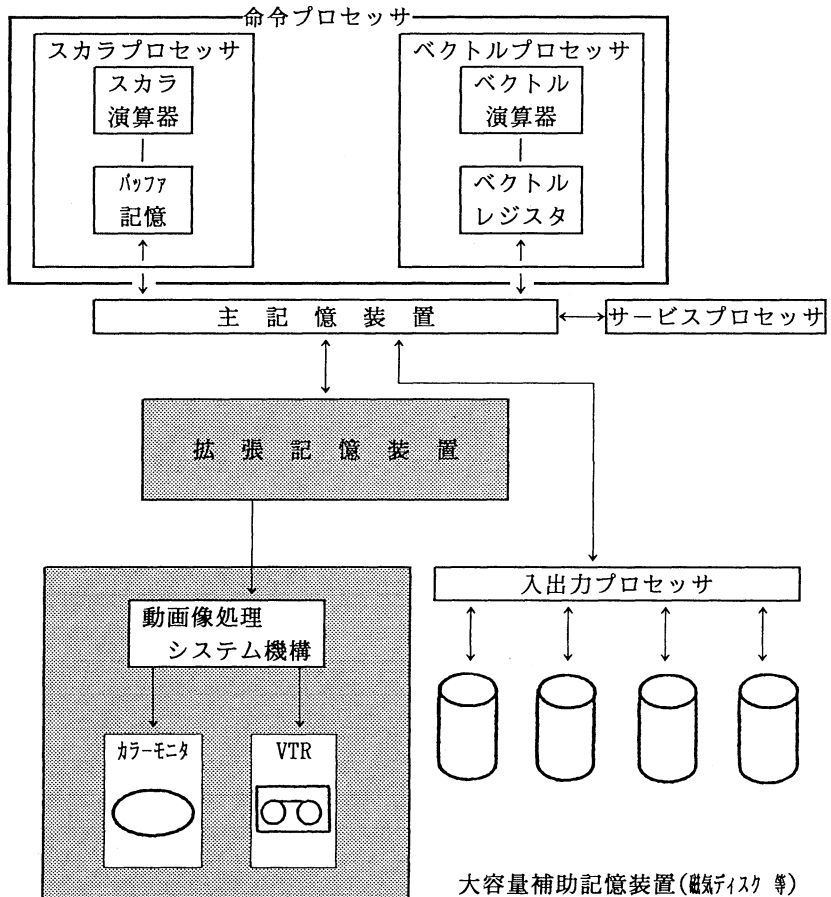


図 3-1 サポートハードウェア構成

(2) MOL/MOVIEサブシステム

本サブシステムは、スーパーコンピュータ上でアニメーションを作成する前に、視点位置、光源位置/強度、原子半径/色合い、スティック半径/色合い等をマンマシンインタフェースに優れたGWS (=2050G)上で、試行錯誤を繰り返しながら確定させることを目的としたものである。

図2-2にGWS上の支援サブシステムの処理画面を示すが、このシステムの主な機能は以下の通りである。

項番	メニュー項目 (図2-2)	機能概要
1	Files	3次元座標/各種パラメータデータファイル選択機能
2	Light	光源位置/強度設定、変更機能
3	Init	表示画面の初期化機能
4	Mode	表示構造形態変更機能 (スケルトン/ボール&スティック)
5	Scale Up/Down	表示モデルの拡大/縮小機能
6	ダイヤル操作	表示モデルのX/Y/Z軸回転, 水平/垂直方向並行移動機能
7	End	確定パラメータデータ格納/スーパーコンピュータへの転送機能

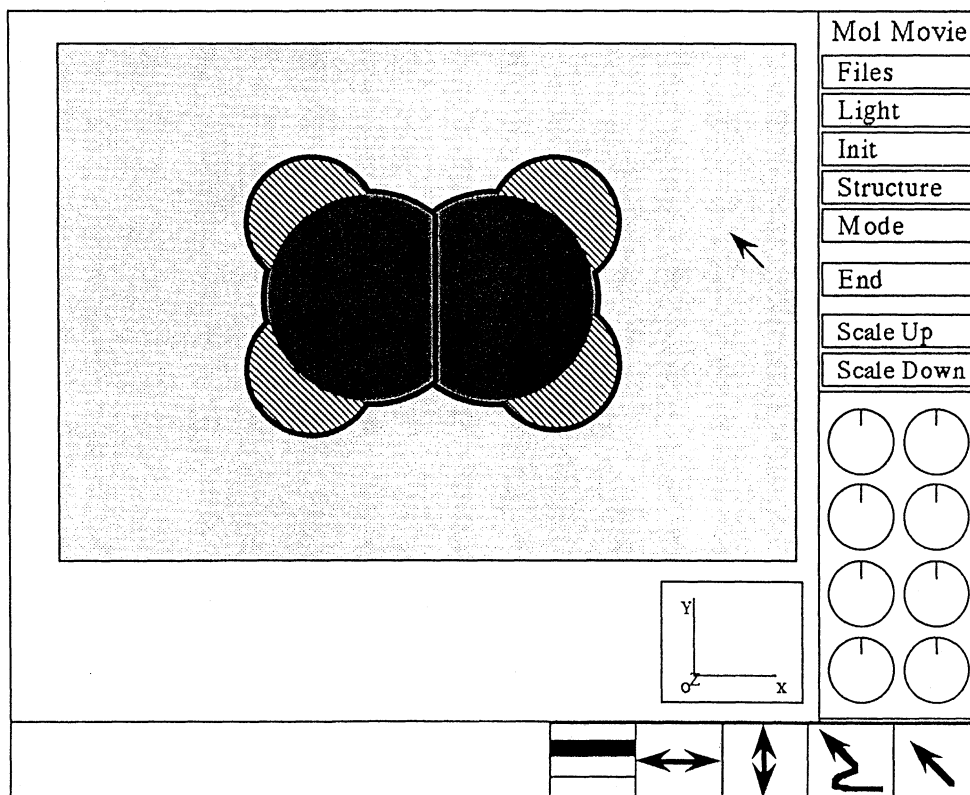


図 2- 2 MOL/MOVIEサブシステム構成概要

本支援サブシステムを利用することにより、ユーザ (=研究者) は求める画像を視覚的な操作環境の下で作成することが可能となる。

又、このシステムはスーパーコンピュータ上の主システムと独立したシステムである為、例えばアニメーションまでは要らないが1ショットの静止画像が必要な場合、或いは、論文等の発表資料/OHP資料を作成する場合、GWSの特長を活かした高精細フルカラー画像を手軽に作成する為に利用するという事も可能である。

(2) サポートソフトウェア

MOL/MOVIEシステムをサポートするソフトウェア構成を図3-2に示す。

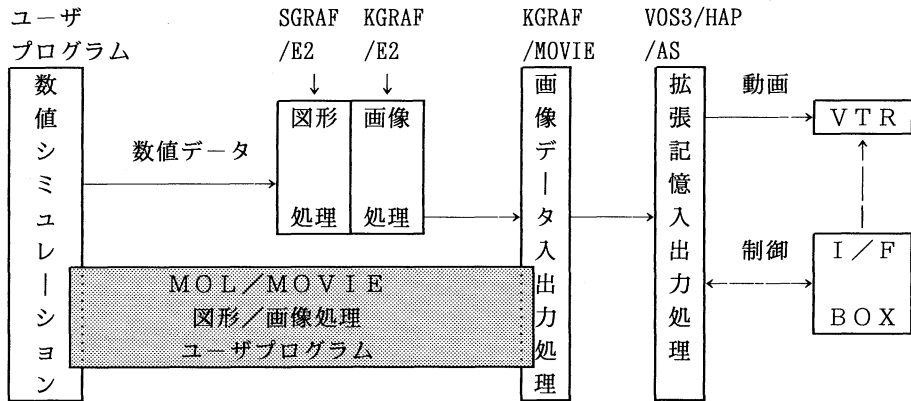


図 3- 2 サポートソフトウェア構成

ユーザの数値シミュレーション等の計算プログラムにより出力される数値データ（3次元座標値データ）は、図形処理（図3-2 SGRAF/E2）及び画像処理（図3-2 KGRAF/E2）専用ユーティリティを介するか、或いは、MOL/MOVIEを経由して、拡張記憶装置へのRGBデータ入出力を制御する動画専用ドライバーのKGRAF/MOVIEへと引き渡される。

このKGRAF/MOVIEでは、画像（＝フレーム）出力時間間隔、同一フレームの繰返し出力回数、画面上での画像表示位置／文字情報表示位置等の指示操作が可能である。尚、図3-2中の各ユーティリティの機能を表3-1に示す。

表3-2 サポートユーティリティ概略機能

項番	ユーティリティ名称	概略サポート機能
1	SGRAF E2	数値データをメッシュ図、等高線図、ベクトル図等のカラーグラフに加工
2	KGRAF E2	GKSグラフィックサブルーチンパッケージ
3	KGRAF/MOVIE	KGRAF E2から呼ばれる動画画像作成専用ドライバー
4	VOS3/HAP/AS	拡張記憶装置の入出力管理、及び、動画画像用画像コンバータの入出力管理

4 MOL/MOVIEシステムの利用方法

動画作成支援システム (MOL/MOVIE) のメイン/サブシステム構成、及び、サポートハードウェア/ソフトウェアの概要を以上述べてきたが、ここでは、実際に動画を作成するまでの手順をメインシステムの場合を例として述べる。

尚、サブシステムの利用方法については、この紙面上では説明しきれない点多々あり、実際に利用して頂きたい。

(1) MOL/MOVIEの利用手順

MOL/MOVIEのメインシステムは、FORTRAN (V0S3/AS FORT77/HAP)プログラムからCALL可能な各種サブルーチンから構成されている。利用者は、このサブルーチンを組み合わせてユーザ独自の動画プログラムを作成するか、或いは、提供しているサンプルプログラムを修正して動画を作成する事もできる。

サンプルプログラムを使用した場合の利用例を以下に示す。

<<提供サブルーチン名>>

<<サブルーチンの概略機能>>

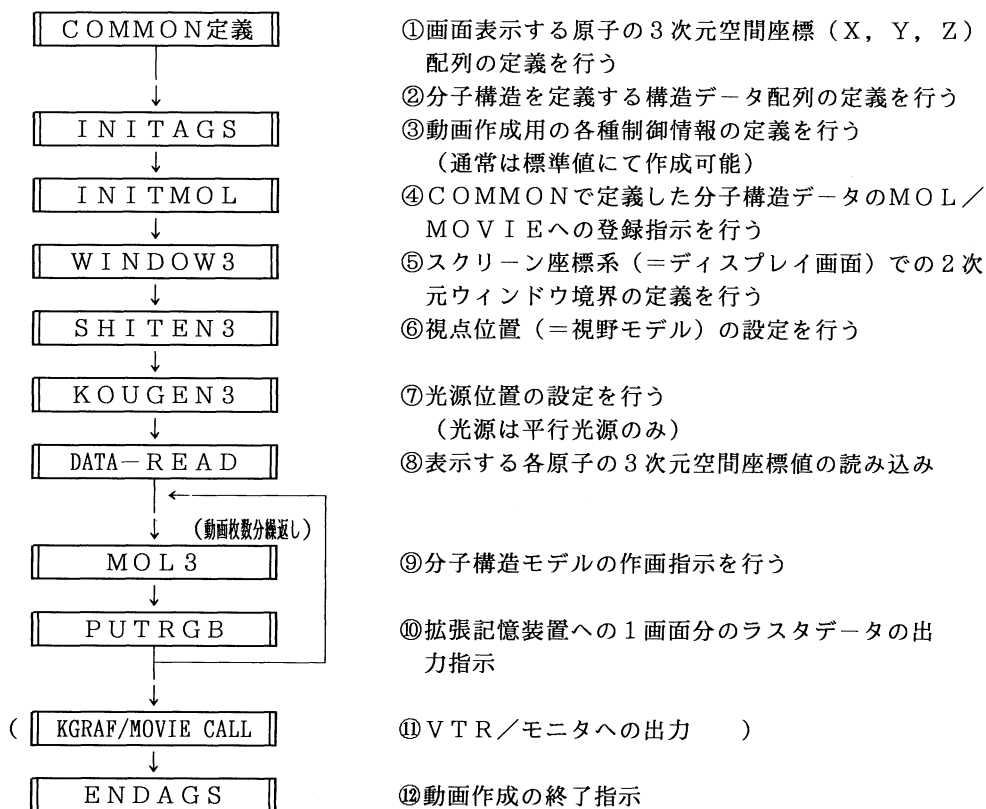


図 4-1 MOL/MOVIE主システムの利用例

尚、図4-1中の”①3次元空間座標データ”、及び、”②分子構造データ”の各配列定義等の詳細については、本電子計算機センターに常備されている、”MOL/MOVIE利用の手引”に記載しているので参照されたい。

(2) 主システムで利用できる補助機能

現在、MOL/MOVIE主システムにて提供しているその他の補助機能には以下のものがある。

表4- 1MOL/MOVIE主システムの補助機能

順番	機能名	概要
1	分子間結合エネルギー線作画	任意の分子（原子）間の結合強度を不透明(値:100%)～透明(値:0%)のパイプで表示
2	文字情報表示	画面上の任意の位置に、各種文字情報を表示 情報表示は各画面一意/画面連動の両者が可能
3	高速ファイル入出力	作成画像データを(デジタル)RGBデータとして パラレルI/Oファイルへ入出力可能
4	画像データ圧縮/解凍(ファイル出力時)	ファイル入出力時に画像データ圧縮/解凍を行う ユーティリティ

5 まとめ

今回開発したMOL/MOVIEシステムは、スーパーコンピュータ上の一貫した環境の下で、大規模シミュレーション結果を容易にかつ短時間でアニメーション化することを目指した点に特長があると言える。

現時点までに、数組の研究グループにより利用され、この特長を踏まえた本システムの有用性はかなりの面で評価されたものと考えているが、有用性の高いシステムの宿命でもある新たな要望(”高精細画像表示=ハイビジョン”, ”処理時間の短縮化”, ”表現形式の多様化” 等々)も数多くあり、今後どの様に実現していくかの検討が必要であると考えている。

最後に、本システム開発にあたり色々ご助言頂いた、分子研理論研究系の大峰巖助教授並びに、現御茶ノ水女子大助教授の長嶋雲兵氏に深く感謝致します。

