

# I 音

## 目 次

寄語	量とともに質を	京大理教授 加藤重樹	1
1.	分子研計算機センターでの3年9か月		
		分子研電算機センター 北浦和夫	3
2.	計算機システムの運用および使い方		4
2. 1	システムの構成と特徴		4
2. 2	ジョブクラスの構成		5
2. 3	利用課金点数		6
2. 4	通信・ネットワーク		7
2. 5	日曜日の運用等について		13
2. 6	短期データセット (SHORT) の保存期間延長について		13
2. 7	新ライブラリープログラム検索システム (SLIM) について		13
2. 8	端末の変更について		14
2. 9	保守・センター業務日について		14
2. 10	インターネットからの利用について		14
2. 11	分子研電算機センターへの電子メールについて		15
2. 12	TSSセッションのキャンセル方法について		15
2. 13	平成5年度利用申請審査結果について		15
3.	一般報告		17
3. 1	分子研ライブラリープログラムの収集と開発		17
3. 2	データベース開発状況		28
3. 3	電子計算機センター運営委員会		29
3. 4	大型計算成果発表会		37
4.	平成4年度稼働状況および利用者数		38
4. 1	利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数		38

4. 2	システム稼働状況	38
4. 3	C P U、V P U使用時間	39
4. 4	ジョブ処理件数	41
4. 5	所外ネットワーク・通信回線の利用状況	42
4. 6	所内ネットワーク・通信回線の利用状況	42
4. 7	T I S N経由の利用状況	43
5.	資料	44
5. 1	センター関連組織	44
5. 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	45
5. 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	46
5. 4	電子計算機センター運営委員会委員	47
5. 5	電子計算機センター職員	48
5. 6	応用プログラム相談員	48
5. 7	建物図	49
5. 8	マニュアルの紹介と購入方法	50
5. 9	利用者数とC P U時間の推移	52

## 寄語

## 量とともに質を

京大理学部 加藤重樹

分子研計算機センターは、1977年に設立されて以来、今年で16年目を向かえました。この間、センターは日本の理論化学の発展に大きな役割を果たしてきました。センターが設立される迄、全国の研究者は、大学の共同利用センターを主に利用し、高い使用料と分子計算に向かない運用の中、困難な条件の下で研究を続けてきました。しかし、分子研に分子科学計算専用の計算機が導入され、プログラムライブラリーが整備されたことにより事情が一変しました。私は、当時、分子研理論研究系の助手をしていましたが、その時までは考えることができなかった規模の計算をすることができるようになった喜びを今も覚えています。

センターの計算機は、設立当初のHITAC M180Hから幾度かの機種への更新が行われ、現在ではスーパーコンピューター S820/80 となり分子計算の規模や精度が大きく向上しました。また、当初は電子状態計算が大部分でしたが、分子動力学などの統計計算も多く行われるようになってきました。この間、センターを利用した画期的な研究もいくつか行われましたが、センターの果たした役割の最大のものは、日本の分子計算の規模と精度を上げ、理論化学の全体的なレベルを高めたことだと思います。このことにより、理論化学が分子科学、化学研究の中での市民権を得ることができ、その成果が昨年度より始まった重点領域研究「化学反応理論」として結実したと言っても過言ではないでしょう。

私は、昨年度まで4年間センターの運営委員をしていましたが、その間、センターも転換期を向かえていることを痛切に感じてきました。象徴的には、この春、長年にわたりセンター長を務められてきた諸熊さんがアメリカに発たれ、柏木さんの後を継いでセンターの切り盛りをされてきた北浦さんも去られました。また、今年度より新しいスーパーコンピューターが導入されることになっています。これまでセンターは、計算機を24時間稼働させ、全国の研究者にCPU時間を提供することにより理論化学の研究を支えてきました。しかし、最近のワークステーションの出現は分子研計算機の役割に変化を与えようとしています。

今年5月、北浦さんの後任に青柳さんが着任されました。今年度、新しいスーパーコンピューターが導入されることも考えますと、分子研センターの第2期が始まったように思えます。この転換期を向かえ、センターも新しい運用方針を打ち出す必要があるように思います。従来のようにCPU時間を提供し理論化学全体の研究を支えるだけではなく、新しいピークを出すような研究をもっと支援する方策を考えてもいいのではないのでしょうか。これまでの計算機施設利用の形態ですと大型ユーザーでも個々の研究プロジェクトに費やすことができるCPU時間はしれています。この際、特別のプロジェクトを募集し、厳重な審査を経て、論文1報に対して数百時間使えるようにするのも一つの方法だと思います。

とは言いましても、センターのこれまでの役割は少しも小さくなっていないと思います。現在の分子計算のレベルは、理論化学が本来目標としている所から見ますとまだまだ初歩的な段階にあり、その峰に到達するには更に高速で大容量を持つ計算機が必要とされます。日本の理論化学研究が世界的なレベルに達し、それを維持するには理論計算の発展に見合った計算機の発展が必要であり、それを全ての研究者が利用することができる必要があると思います。

計算機センターも新しい陣容をそろえ、今後、理論化学の新たな発展のため野心的な運用方針を打ち出していかれると思います。その際、全国の理論化学研究者を支えるという量的な側面と共に、研究に新しいピークを出すような質的な側面も大切にして欲しいと思います。その為にも、センターの方針を決めるうえで理論化学の今後を担っていく若い研究者の声を集約し、反映させていって下さい。

## 1. 分子研計算機センターでの3年9カ月

分子研電算機センター 北 浦 和 夫  
(現職：大阪府立大学 教授)

一昨年来より準備を進めてきたスーパーコンピューターの更新が平成5年度予算で認められ、いよいよ調達の最終段階として、来る7月7日に開札の予定です。総合評価方式(性能点/価格が最高点のものが落札する)による調達であるため、必ずしも最も性能が高い機種が落札するわけではないので、計算分子科学の研究の発展を考えると、最高性能機が落札することを祈らずにはられません。

一方、スーパーコンピューターの更新と同時に進めてきました、電子計算機センター棟の増築計画も平成5年度予算で認められ、現センターの床面積とはほぼ同じ広さの新棟が、平成6年のはじめに完成の予定です。

両者ともに、井口前分子研所長(現岡崎国立共同研究機構機構長)をはじめとして、諸熊前電子計算機センター長(現エモリ大学教授)と管理局関係部署の方々の多大な努力の結晶です。ここに改めて感謝したいと思います。

これで今後に向けてのスタートとして、当面の基礎ができたと思っています。長期的には、従来から継続して検討されている電子計算機センター将来計画の策定とその実現を目指す必要があります。所内外の皆様のご協力をお願いします。

前後しましたが、本センターの設立時よりセンター長を勤めてこられた諸熊奎治先生が、本年3月に米国エモリ大学に転出されました。改めて言うまでもなく、諸熊先生は本センターの生みの親であり育ての親です。先生の御功績は筆舌に尽きません。4月より中村宏樹教授がセンター長に就任されました。また、筆者が4月より大阪府立大学総合科学部へ転出しました。5月から青柳睦さんが電子計算機センター助教授に就任されています。

折しも、巷では次の衆議院選挙の結果如何で自民党の一党支配が終わり、新しい日本の時代が始まると期待されています。本センターは、一足先に、新センター長と新助教授による新時代がスタートしました。

最後に、本紙面を拝借して、3年と9か月の在職期間中、電子計算機センターのスタッフをはじめユーザーの皆様に御支援頂きましたことに感謝します。

(平成5年6月記)

## 2 計算機システムの運用および使い方

### 2. 1 システムの構成と特徴

当センターのシステムは図2. 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。

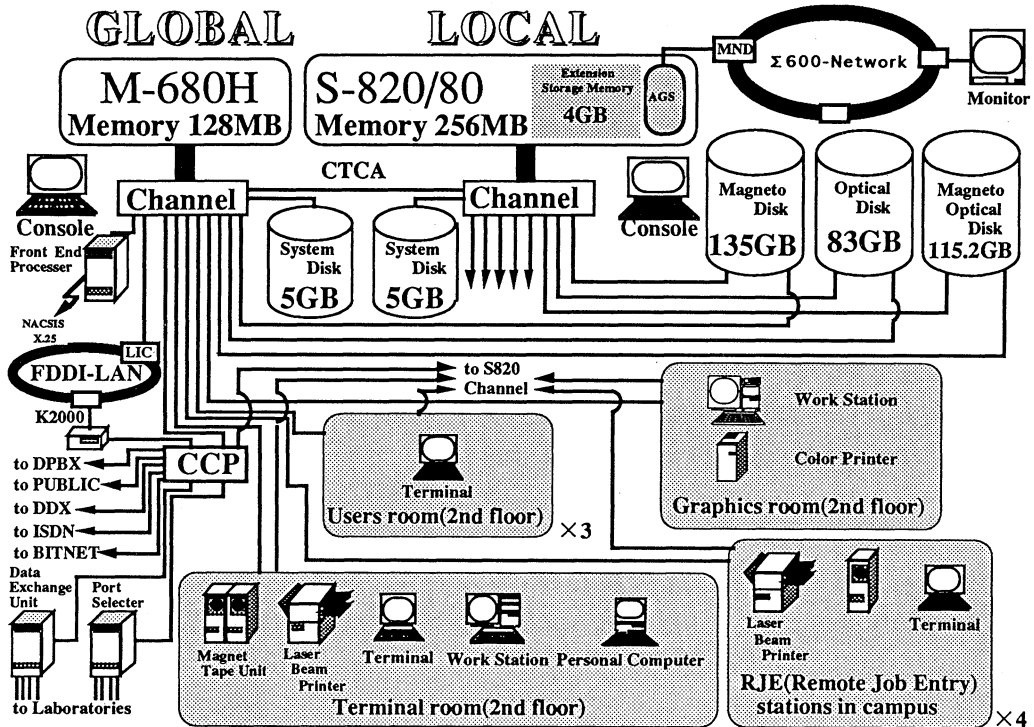


図2. 1. 1 システム構成概念図

- ・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きのバッチ処理を行っている。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り当て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145GB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を張り巡らせており、所内はもちろんのこと三研究所（分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所）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共にしている。
- ・TISN（東大理学部国際理学ネットワーク）を經由シ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ISDN経由のホスト接続を可能としている。
- ・M-680HではBITNETのサービスを行っている。
- ・総計約115GBの光磁気ディスク（書換可能）を用意し、磁気ディスクの有効利用を計っている。
- ・動画出力システム（AGS）によって、スーパーコンピュータの計算結果の視覚化を可能としている。

## 2.2 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	1920	0
TSS	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	-	-
TSS	3	3	7	4	32	4	-	-

ただし、Sジョブは許可制である。

## 2. 3 利用課金点数

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

CPUm : 全CPU時間 (M-680H)  
CPU<sub>s</sub> : 全CPU時間 (S-820/80)  
VPU<sub>s</sub> : ベクトル演算器の全CPU時間 (S-820/80)  
LP : 出力枚数  
DISK : DISK使用量 (MB×hour)

係数の値は以下の通り。

a : 0.08/sec (改訂前 : 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時間当たりの利用点数は、以下のようになる。

M-680H : 288点  
S-820/80 : 630点

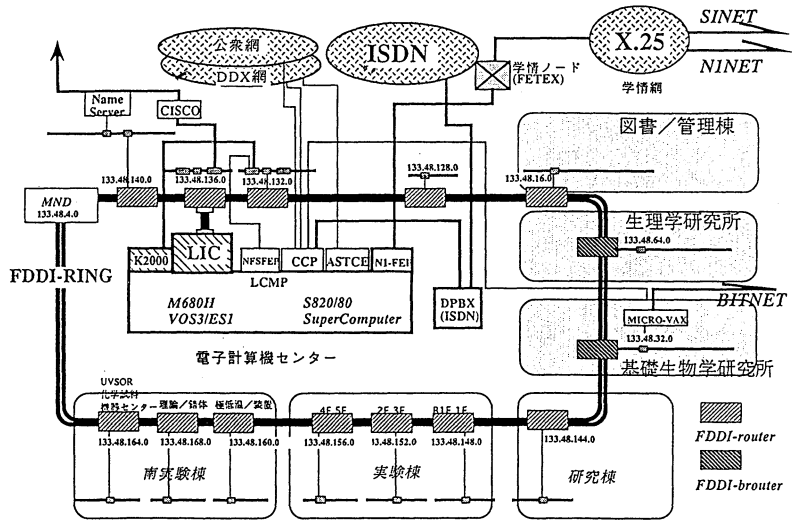
ただし、許可時間はCPU時間に対し400点が割り当てられる。

なお、S-820/80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。



2. 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 2.4.1 に示す。



2.4.1 ネットワークの構成概念図

## 2. 4. 1 所外通信回線・ネットワーク

### (1) N-1 ネットワーク

当センターでは平成元年7月3日より、N-1 TSSのサーバ/ユーザ機能を公開している。N-1 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5年5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称 : 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 称	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
〃	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
学術情報センター	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	IBM 4381-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	ISSP	ユーザ/サーバ	FACOM M-380R

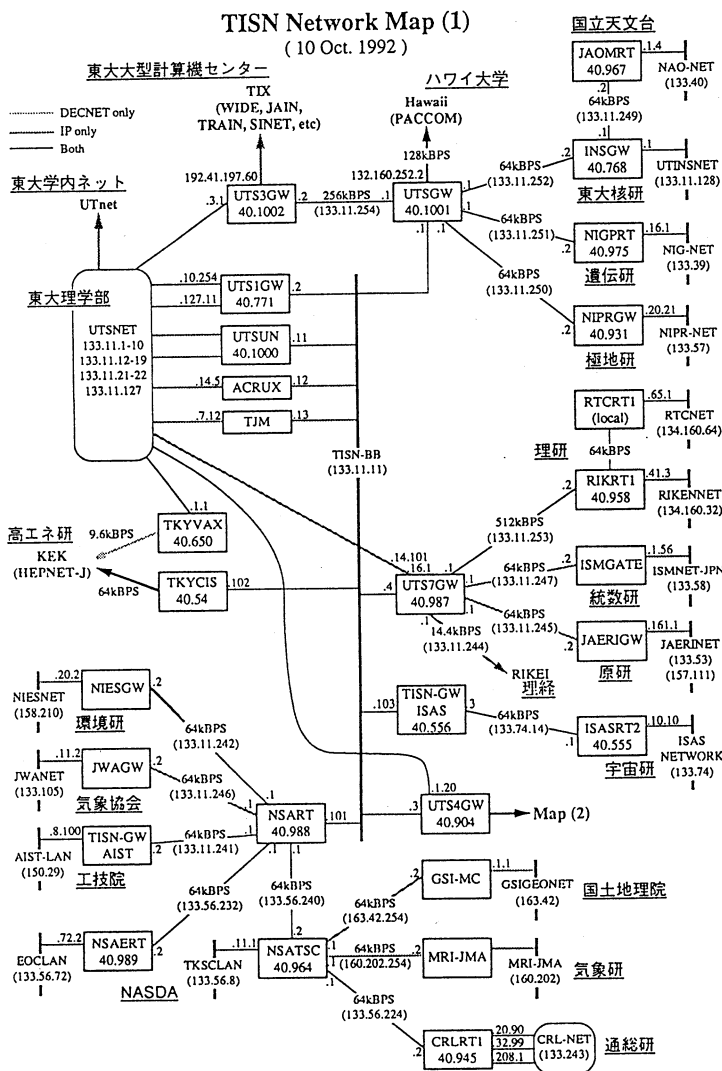
熊本大学	KUMAMOTO	ユ-サ'	FACOM M-780/10Q
愛媛大学	EHIME	ユ-サ' /サ-ハ'	FACOM M-360AP
静岡大学	SUIPC	ユ-サ'	ECLIPSE MV-15000/20
豊橋技術科学大学	TOYOGI	ユ-サ' /サ-ハ'	ECLIPSE MV/20000 MODEL1
金城学院大学	KINJO	ユ-サ' /サ-ハ'	FACOM M760/4
信州大学	SHINI	ユ-サ'	HITAC M260D
横浜国立大学	YOKOI	ユ-サ' /サ-ハ'	HITAC M280D
電気通信大学	UEC	ユ-サ'	IBM 3090/180S
東洋大学 (川越校舎)	TOYOK	ユ-サ'	ECLIPSE MV2500D
岡山理科大学	OKARIDAI	ユ-サ' /サ-ハ'	FACOM M380
東京工業大学	KODAI	ユ-サ' /サ-ハ'	HITAC M-640/20E
奈良教育大学	NARAKYO	ユ-サ'	ECLIPSE MV/9500
金沢大学	KANAZAWA	ユ-サ' /サ-ハ'	FACOM M-760/20
岐阜大学	GIFUDAI	ユ-サ' /サ-ハ'	FACOM M-760/6
岡山大学	OKAYAMA	ユ-サ' /サ-ハ'	ACOS 2010
宮崎大学	MIYAZAKI	ユ-サ' /サ-ハ'	FACOM M-760/6
大阪工業大学	DAIKODAI	ユ-サ' /サ-ハ'	FACOM VP-50E
東京都立大学	TORITU	ユ-サ'	IBM 3090-30J
富山大学	TOYAMA	ユ-サ'	IBM 3081-KX4
関西学院大学	KWANSEI	ユ-サ'	HITAC M-680H

(2) 東京大学理学部国際理学ネットワーク (T I S N)

平成3年度よりT I S N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。分子研電算機センターに於いても東大理学部と64Kbpsで接続され、そこを経由しアメリカ、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 (M-680H) にもK2000 / KNET、LICを経由で接続できるようになった。TSSのフルスクリーン利用も容易である。

T I S Nのネットワークトポロジは以下のとおりである。



## TISN Network Map (2) ( 10 Oct. 1992 )

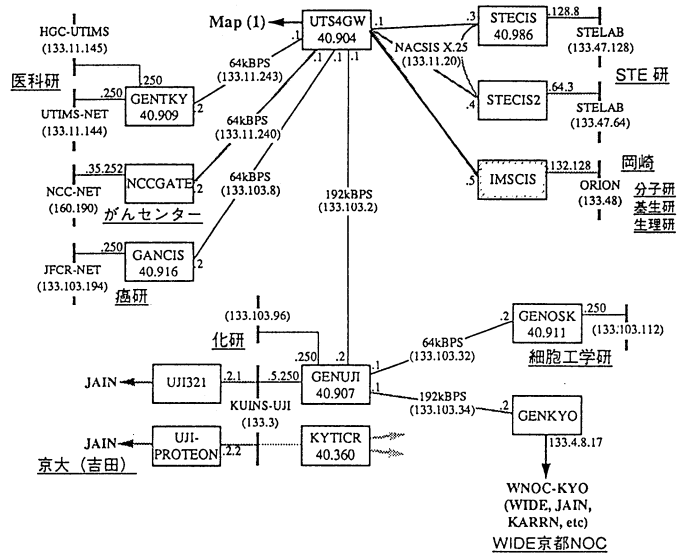


図2.4.2 TISNトポロジ  
 なお、分子研のドメイン名は `ims.ac.jp` である。

(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のサービスを行っている。  
利用はTSS上でUMAIL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）

UMNICK

② U M A I L の 実 行

UMAIL

詳細はASPENのTUTORコマンドで参照できる。なお、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B I T N E T専用の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。

2. 4. 2 構内通信回線、ローカルエリアネットワーク

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おいてもデジタル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	7回線	TTY	内線 7270(代)

## 2. 5 日曜日の運用等について

### (1) 日曜日の運用の変更

いままで計算機が土曜日から連続して動いていれば日曜日も使え、そうでない時には使えませんでした。平成4年6月から日曜日の朝に計算機の自動電源投入を行い9:00から使用できるようになっています。土曜日から連続して動いていれば9:00以前でも使用できます。また12:00以降はジョブの混みぐあいによって停止することがあります。なお、日曜日は試験運転のため、あまり利用されないようであれば取りやめることもあります。

### (2) 土曜閉館

平成4年5月から国の行政機関は一部を除いて、すべての土曜日が休みになっています。電算機センターも閉館していますが、電算機は運転していますので利用者の研究室や自宅からはネットワークを通じて利用することができます。

## 2. 6 短期データセット (S H R T) の保存期間延長について

短期データセットの保存期間を作成後14日間に変更しました。大型ジョブおよび1ヵ月の連続運転に対応した変更です。(6月1日(月)より実施)

6 月							
日	月	火	水	木	金	土	
31	1	2	3	4	5	6	
	7	8	9	10	11	12	13
	14	15	16	17	18	19	20

例えば、1日(月)に作成した短期データセットが保存されているのは、いままでは8日(月)まででしたが、6月以降は15日(月)までになりました。

保存期間の延長により短期データセットのディスクがいっぱいになるおそれがありますので、不要になった短期データセットは保存期間の終了を待たずに各自、消去して他のユーザーにディスクの資源を譲ってください。

## 2. 7 新ライブラリープログラム検索システム (S L I M) について

10年来使われていたF L I Bシステムを、平成4年6月1日付で新シス

テムへ移行しました。新しいシステムであるSLIM (System of Library program Management) は従来のシステムと異なりキーワードによる検索が可能となり、多数のワイルドカードが使用できるようになりました。詳しい使用方法はマニュアルをご参照下さい。マニュアルの取り方は以下の通りです。

コマンド -----> SLIM MAN <Return>

なお半年間は、旧FLIBシステムも継続して運用していますが、新しいプログラムは追加されないことと、プログラムの実体も全面的に新しいファイルに移行されてしまう (FLIB継続中は保存されている) ため、なるべく新システムをご使用なさることをおすすめします。

## 2. 8 端末の変更について

平成4年9月7日(月)に端末室等に設置している2020をIBMPC互換であるFLORA3020に変更しました。3020は従来の直結型端末の機能のほかLAN接続、海外ソフトウェアが動作可能であるなど使い勝手が向上しています。なお、8インチFDは使用できません。

## 2. 9 保守・センター業務日について (平成4年9月—平成5年3月)

下記の保守・センター業務日は午後7時からのサービス開始です。

9月7日(月)、10月5日(月)、11月2日(月)、  
12月7日(月)、2月1日(月)、3月1日(月)

## 2. 10 インターネットからの利用について

インターネットからM680HとS820/80を利用する場合の、IPアドレスは次の通りです。なお、平成5年1月からTISNとは64Kの専用線で接続されていますので、会話処理のレスポンスやファイル転送速度が大幅に向上しています。

133.48.4.16 lynx.ims.ac.jp または、  
133.48.132.1 leo.ims.ac.jp



## 2. 11 分子研電算機センターへの電子メールについて

プログラム相談などセンターへの連絡に電子メールをご利用ください。  
ただし、当面は試験運用とし、電子メールによる回答の事務的負担が大きい  
ようであれば、正式運用を見送る可能性がありますのでご了承ください。

あて先

i m s c c @ d r a c o . i m s . a c . j p

ドメインネーム・IPアドレス

d r a c o . i m s . a c . j p            1 3 3 . 4 8 . 1 4 0 . 6

## 2. 12 T S Sセッションのキャンセル方法について

T S Sセッションが何らかの原因で中断、ロックされた場合、次の方法で  
自分のセッションを正常に終了（キャンセル）させることができます。

S S 0 S S 0のIDでLOGON（パスワードはSOS）した後、プロ  
ンプトに応じてキャンセルしたい自分のIDとそのパスワードを入力する。

S S 0 S S 0が使用できない状態の時は、S S 1 S S 0、S S 2 S S 0を  
使用してください。

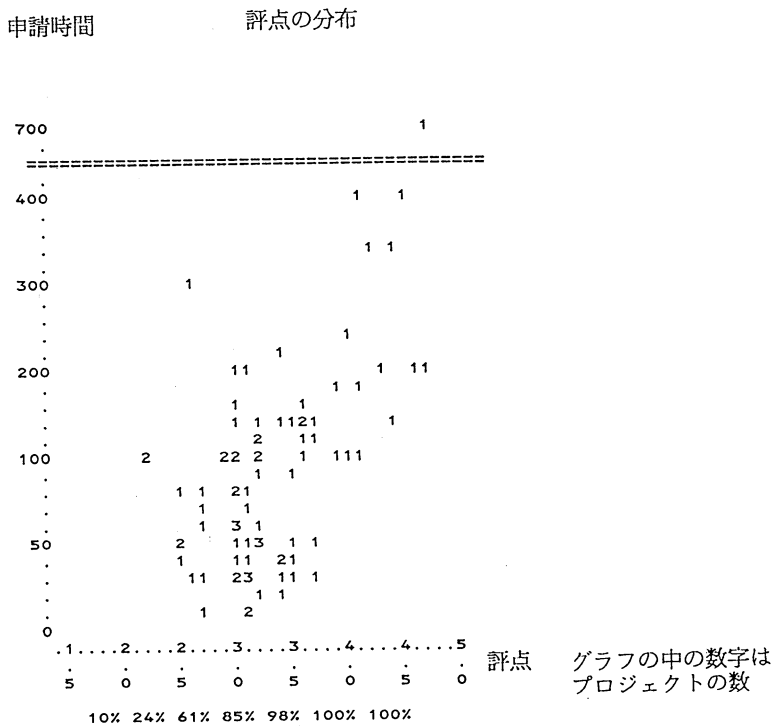
## 2. 13 平成5年度利用申請審査結果について

第25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りました。評点は運営委員の個別の採点（  
0～5）の平均値に基づいています。許可率は所外利用者に分配可能な全C  
P U時間に依存する簡単な関係式を用いて評点および前年度使用率から算出  
されます。許可時間は申請時間に許可率を掛けたものです。今年度の平均許  
可率は85％になりました。

各申請の評価は申請書に記述された研究内容と研究計画、継続の場合には  
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には  
分子科学への波及効果の期待などが考慮され、委員の採点と委員会における

討議によって決められます。また、評価には申請時間が研究内容や共同研究者数に対して適当かどうかの判断ももちろん含まれます。

研究内容が高く、計画のしっかりした申請時間の妥当な提案をするように努めてください。次図に見られるように評点は2.25から4.71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29%から100%にわたっています。



許可率の目安

### 3. 一般報告

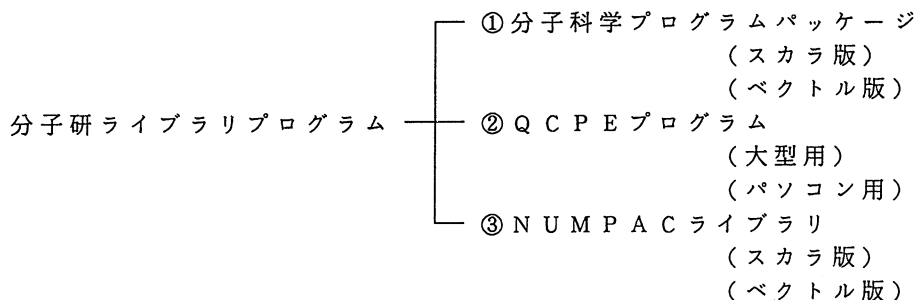
#### 3. 1 分子研ライブラリプログラムの収集と開発

平成4年度のライブラリ開発計画を表3. 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3. 1. 1 平成4年度 分子研ライブラリプログラム開発作業一覧

名前	所属	職名	内容
二宮 市三 秦野 雷世 山本 茂義	中部大 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
藪下 聡 高橋 修	広大 広大	助手 大学院生	分子軌道計算のプログラム COLMBS の開発整備
八尋 修一	九工大	研究生	ab initio 分子軌道計算における電子間反発積分計算プログラム
南野 智 富樫 雅文 長嶋 雲兵 本多 一彦	分子研 北大 お茶大 豊技大	技官 研究生 助教授 助手	プログラムライブラリ管理システムの開発
後藤 仁志	北大	大学院生	配座発生プログラム"CONPLEX3"の移植
酒井 章吾	大阪産業大	助教授	GAMMESS-NDSUバージョンのコンバート
岡崎 進 高岡 健二 石井 亮	東工大 東工大 東工大	助手 大学院生 大学院生	生体膜の動画システム
別府 良孝 上田 誠	聖徳女短 東海産業短	助教授 教授	高速固有値ルーチン
小澤 芳樹	姫工大	助手	結晶構造解析システム UNICSIII
小澤 芳樹	姫工大	助手	結晶構造解析プログラム SHELX
南野 智 富樫 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
小杉 信博	京大	助教授	ab initio SCF-CI プログラム「GSCF3」の開発整備
酒井 嘉子 三好 永作 富樫 雅文	九大 九大 北大	教授 教授 研究生	モデルポテンシャルの関数データの整備
小松崎民樹	分子研	大学院生	SALS プログラムパッケージのワークステーションへの移植
田中 秀樹 林 治尚 山本 量一 沈 君偉 甲賀 研一朗 木戸 督	京大 京大 京大 京大 京大 京大	助手 大学院生 大学院生 大学院生 大学院生 大学院生	計算機シミュレーションによる水の動的性質の解析プログラムの開発

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226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4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。

IMPACT : INTEGRATED MODELING PROGRAM USING APPLIED CHEMICAL THEORY.  
SHELX : PROGRAM FOR CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION.

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576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、今までのQ C P E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用、及びマッキントッシュ用)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116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Q C P Eプログラム(主に汎用大型機用)は磁気テープ、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4年度に新規登録したQCPEプログラムは以下の15件である。

QC0611 VIBRATE:A NORMAL MODE VISUALIZATION PROGRAM  
QC0612 CPKPDB:SPACE-FILLING IMAGE GENERATOR FOR BROOKHAVEN PROTEIN DATA  
BANK FILES  
QC0613 MLDC8:AUTOMATED ANALYSIS OF NMR SPECTRA  
QC0614 SIBFA:SUM OF INTERACTIONS BETWEEN FRAGMENTS AB INITIO COMPUTED  
QC0615 PSDD:PERCEPTON-TYPE NEURAL NETWORK SIMULATOR  
QC0616 ORTLOC:ORTHOGONALISED LOCALISED MOLECULAR ORBITALS  
QC0617 VOID:VOLUME OVERLAP, ISOTOPIY AND DOCKING  
QC0618 COMPARE-CONFORMER  
QC0619 MOLDEN:A PORTABLE ELECTRON DENSITY PROGRAM  
QC0620 SIMUL:A GENERAL PROGRAM FOR THE SIMULATION OF CHROMATOGRAMS USING  
THE THEORETICAL PLATE MODEL  
QC0621 ESTAR-ELECTROSTATIC PROPERTIES RESEARCH PACKAGE  
QC0622 SCRFPAC:A SELF CONSISTENT REACTION FIELD PACKAGE  
QC0623 MD DISPLAY  
QC0624 ELLIPSOID:CALCULATION OF ELLIPSOIDAL AND SPHERICAL CAVITIES OF  
MOLECULES  
QC0625 EHGO

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869本である。

以下、表3. 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3. 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 : B110  
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  
 009 IMPACT INTEGRATED MODELING PROGRAM USING APPLIED CHEMICAL THEORY

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	MMIP11	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 100-ATOM MOLECULES
003	MMIP13	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	VREPR	FORTRAN PROGRAM ANALYZER FOR A VECTOR PROCESSOR.
020	ASPPRT	TERMINAL EMULATOR FOR MAC
021	FPOPOP	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
008	IMPACT	INTEGRATED MODELING PROGRAM USING APPLIED CHEMICAL THEORY

FIELD CODE : MI10  
FIELD TITLE : MOLECULAR INTEGRALS.



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

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

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

FIELD CODE : NM40  
 FIELD TITLE : SYMMETRY ANALYSIS.

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

FIELD CODE : SC10  
 FIELD TITLE : SCATTERING AND TRAJECTORY.

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

FIELD CODE : SC20  
 FIELD TITLE : CRYSTALLOGRAPHY.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	NASH	SEARCH FOR NEAR ATOMS IN A PROTEIN
002	STEREO	STEREO DRAWING OF SKELETAL MODEL OF PROTEINS.
003	CONVRT	CONVERSION OF BNL DATA FORMATS TO PSPCS FORMAT
004	DISMAP	TRIANGULAR DISTANCE MAP OF A PROTEIN
005	ASA	ACCESSIBLE SURFACE AREA OF A PROTEIN
006	BENDER	PARAMETER CALCULATION FOR BYRON'S BENDER MODEL

007 SUPPOS SUPERPOSITION OF TWO SIMILAR CONFORMATION OF PROTEIN(S)  
 008 PGCCMB CONFORMATIONAL ANALYSIS BY BOYD'S METHOD.  
 009 UNICS3 UNIVERSAL CRYSTALLOGRAPHIC COMPUTATION PROGRAM SYSTEM  
 010 ORTEP ORTEP DRAWING OF MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURE  
 011 BSIP BASIC STRUCTURAL INFORMATION ON PROTEIN FROM PDB DATA  
 012 TASP ANALYSIS OF PRIMARY AND SECONDARY STRUCTURES OF PROTEIN  
 013 MULTAN AUTOMATIC SOLUTION OF CRYSTAL STRUCTURES BY DIRECT METHOD  
 014 PDB THE PROTEIN DATA BANK  
 015 PRTXYZ XYZ COORDINATES OF MODEL STRUCTURE OF PROTEIN  
 016 NLPLSQ LEAST-SQUARES PROGRAM FOR REFINING LIQUID STRUCTURE MODELS  
 017 KURVLR PROGRAM FOR ANALYSING X-RAY DIFFRACTION DATA OF LIQUID  
 018 CRYSTA PROGRAM SYSTEM FOR CRYSTAL STRUCTURE ANALYSIS  
 019 EXAFS GRAPHIC PROGRAM SYSTEM FOR EXAFS ANALYSIS  
 020 SHELX PROGRAM FOR CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION

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	DIIVIB	CALC. OF NUMERICAL VIBRATIONAL WAVEFUNCTION FOR DIATOMICS
002	DIaint	CALC. OF FCF AND ELECTRONIC SPECTRA OF DIATOMIC MOLECULES
003	MMIP11	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 100-ATOM MOLECULES
004	MMIP13	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 EXCHANGE BROADENED NMR SPECTRA
002	LAOCN3	ANALYSIS OF HIGH RESOLUTION NMR SPECTRA
003	CHEMIC	CHEMICS :AUTOMATED ORGANIC CHEMICAL STRUCTURE ELUCIDATION
004	JHH	3JHH: NMR VICINAL COUPLING CONSTANTS
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	DIATIVB	CALC. OF NUMERICAL VIBRATIONAL WAVEFUNCTION FOR DIATOMICS
015	DIASNT	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	GUGAC1	GRAPHICAL UNITARY GROUP APPROACH CI BY ISAAH 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 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  
 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	MND0M	MNDIFIED 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 MEHOD

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

154

\*\*\*\* 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
FPOPOP	FPTNMR	FPTSPN	GAMESS	GAUS76	GAUS80	GAUS82
GAUS86	GAUS88	GHFID	GORDON	GPQDD	GRAMOL	GSCF2
GSCF3	GUGACI	HLISP	HMO	HONDOG	HONDO7	HUCKEL
ICON	IMPACT	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	MOLSCT
MOPAC	MPBDB	MPXALP	MULTAN	NASH	NBO	NCTB
NICER	NLPLSQ	ORTEP	OTHELO	OUTFIT	PA200	PA300
PA409	PA600	PDB	PFOPTV	PGCCMB	PKIT	POTOPS
PPP	PROFIL	PRTXYZ	PSHOND	PSI	PSPART	PSTOPO
QCBDB	QCHECK	QCLDB	REDUCE	REPORT	SAC85	SALS

SCEP	SCMOLX	SERIES	SFORT	SHELX	STEREO	STERIC
STINGY	SUPPOS	TASP	TSS517	UNICS3	VREPT	WIGNER

### 3. 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8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)

### 3. 3 電子計算機センター運営委員会

#### 3. 3. 1 第24回電子計算機センター運営委員会議事報告

第24回電子計算機センター運営委員会が平成4年9月9日（金）に開かれました。以下に議事の要約を掲載します。

##### 1. 前回議事録朗読

##### 2. センターからの報告

##### (1) 平成4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4年度は電力使用量は15%増、ジョブ件数は減っているが、稼働時間は20%増、M680HとS820/80のCPU時間は共に20%増、S820のVPU時間は44%も増加してい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。TSSは公衆、DDXからの利用が減っていること、N1とTISNの利用がほぼ半々であることが説明された。

##### (2) 平成4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4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23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、8件に対する評価状況が示され評点通りで承認された。

(4) 平成4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。前期は6プロジェクトに対して222,720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、QCP E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4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12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。

3. 平成4年度後期および平成5年度計算機運用方針案

運用方針案として以下の4件が提出され、いずれも了承された。

(1) 高性能計算サーバーワークステーション

高性能計算サーバーワークステーションの導入と運用についての説明がなされた。

(2) SLIM(ライブラリ検索システム)

QCP Eプログラムをネットワークを利用して配布できるように整備するとの説明がなされた。



(3) 光ファイリングシステム

Q C P E マニュアルをイメージ情報化し、利用者の端末で表示、印刷できるように整備すること、報告書・論文別刷・申請書などもイメージ情報化し事務処理の効率化を行うとの説明がなされた。

(4) T I S N への専用線接続

93年春、新たに64Kbpsの専用線で東大理学部と接続し、高速化をはかる予定であるとの説明がなされた。

4. 平成4年度後期計算機時間配分案

平成4年度後期のCPU時間配分案が資料に基づいて説明・検討がなされた。

5. 平成4年度後期利用申請審査

協力研究後期10件、施設利用(B)2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ため、施設利用から8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、施設利用から8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。
- C 施設利用の申請が既に許可になっている利用者であり、また、申請時間が10時間以下と少ないことから、今回の協力研究は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。

#### 6. 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計画について説明がなされ、議論が行われた。また、諸熊センター長よりセンター職員に対するスーパーコンピュータの更新手続き期間中の注意事項について説明がなされた。

#### 4. 3. 1 第25回電子計算機センター運営委員会議事報告

第25回電子計算機センター運営委員会が平成5年2月17日(水)に開かれました。以下に議事の要約を掲載します。

##### 1. 前回議事録朗読

##### 2. センターからの報告

###### (1) 平成4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4年度は稼働時間は8%増であること、M680HはCPU時間が4%増、S820はCPU時間が9%増であること。件数は共に減っていることが説明された。次に分野区別の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40%であること、CPU使用時間の所内と所外の比率が32対68であることが示された。TSSの利用ではTCP/IP(主にTISN)経由の利用が増えており、1月からの専用線化により転送速度は3倍から5倍向上しているとの説明がなされた。

###### (2) 平成4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。

###### (3) 平成4年度計算機時間配当状況、追加状況

利用区別の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24回)委員会で書簡を発することになっていた3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、15件に対する評価状況が示され評点通りで承認された。

(4) 平成4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6プロジェクトに対して253,410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4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16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。

3. 平成5年度計算機運用方針案

運用方針案として以下の4件が提出され、いずれも了承された。

(1) 高性能計算サーバーワークステーションの導入と運用

高性能計算サーバーワークステーションの導入について、現状と今後の予定の説明がなされた。課金については当面は行わず次回委員会で決めることになった。

(2) 次期スーパーコンピュータの導入

次期スーパーコンピューターの導入の予定についての説明がなされ、超大型ジョブの長時間実行（単独実行の場合を含む）や利用申請の方法についての議論がなされた。

### （３）UNIX環境の整備

UNIXをベースにした利用環境の整備をすすめ、ワークステーション端末を充実させるとの説明がなされた。

### （４）BITNETメールからインターネットメールへの移行

平成5年前半にインターネットメールのサービスを始める予定であり、現状のBITNETメールはインターネットのメールへの移行が完了次第、廃止すると説明がなされた。

## 4. 平成5年度前期計算機時間配分案

平成5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。所外の許可率は85%とすることになった。

## 5. 平成5年度前期利用申請審査

課題研究1件、協力研究前期1件、施設利用（B）82件、生理学施設利用（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うこととした。

### （施設利用B）

A                    B氏の協力研究と重複が認められるため、25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。

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を手紙で通知することとした。

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。

#### 6. 次期システムについて

次期スーパーコンピューターシステムの導入手続きの経過について報告がなされた。次に仕様書原案について説明がなされ、検討の結果、承認された。

#### 7. 次期汎用機の更新について

汎用機の現状について説明がなされ、汎用機の更新を行う為の準備をはじめるとの決定がなされた。

#### 8. 電算機センター増築について

電算機センターの増築について現状報告がなされた。

### 3. 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12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4年9月9日(水) 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 土井正男、金田行雄、関本 謙、福本康秀、松本充弘、  
白田茂男、シー ハワード(名大 工)、榎本美久(名大 理)  
複合液体の非線型ダイナミックス
- 10:05 石井 晃、逢坂 豪(鳥取大 教養)、新藤 茂、  
新田英雄(東学大 教育)  
表面吸着系によるポジトロニウム分光の計算プログラム開発
- 10:35 山邊時雄、田中一義、立花明知、御崎洋二、石川 滋、  
山口耕一郎、佐原 渉、佐藤 徹(京大 工)  
化学反応の動的過程に関する理論的研究
- 11:05 小林久芳(京府大 生活科学)、田中庸裕(京大 工)  
金属および金属酸化物クラスターの電子状態と反応性に関する  
量子化学的研究
- 11:35 酒井章吾、中村方哉(大産大 工)  
化学反応の分類および分子設計に関する理論的研究
- 12:05 山辺信一(奈良教育大 教育)  
基準振動に沿う構造変形とフロンティア軌道の相関

#### 4. 平成4年度稼働状況および利用者数

##### 4.1 利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数

利用分野	利用区分	プロジェクト数	ユーザ数	時間			点数	
				申請	許可	実績	許可	実績
分子科学	施設利用	182	615	11,574	10,076	8,194	4,030,400	2,949,874
	協力研究	27	31	1,380	1,301	1,076	520,400	387,384
	課題研究	1	3	30	30	0	12,000	0
	所内	54	138	8,454	7,610	6,085	3,044,000	2,190,723
生理学	施設利用	3	5	35	31	16	12,400	5,607
基礎生物学	施設利用	2	7	60	44	0	17,600	0
	所内	2	5	20	18	0	7,200	4
合計		271	804	21,553	19,110	15,371	7,644,000	5,533,592

(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。

##### 4.2 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4年4月	670:30	670:30	5:30	30
5月	597:00	595:00	9:00	30
6月	622:00	619:00	6:00	30
7月	700:00	700:00	6:00	31
8月	503:00	498:00	6:00	31
9月	553:00	549:00	6:00	28
10月	689:00	688:00	5:00	31
11月	596:00	593:00	6:00	30
12月	530:00	529:00	12:00	30
平成5年1月	562:30	561:30	4:30	28
2月	539:30	537:30	6:30	28
3月	593:30	590:30	5:30	31
合計	7156:00	7131:00	78:00	358



4. 3 CPU, V P U使用時間  
(M-680H CPU使用時間)

(月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(G)	(O)	(P)	(Q)	(R)	(S)	(X)	(Y)	(Z)	(T S S)	(合計)
4	3:54:22	35:30:52	142:28:37	361:58:42	91:51:57	7:13:12	0:07:53	0:00:20	0:00:00	0:01:27	0:00:00	0:49:22	0:27:14	0:26:26	24:21:40	669:12:04
5	8:40:27	47:15:45	124:41:00	432:59:48	56:36:19	2:30:00	0:02:58	0:00:27	0:00:00	0:01:59	0:00:00	2:03:27	0:15:56	0:53:35	23:59:33	700:01:14
6	11:05:35	45:03:03	140:00:28	412:44:55	18:32:38	0:00:00	0:00:04	0:00:20	0:00:00	0:02:07	0:00:00	4:17:12	1:42:44	0:25:01	19:34:55	653:29:02
7	7:45:20	40:33:02	100:36:17	308:54:01	57:11:28	0:00:00	0:02:08	0:00:03	0:00:00	0:05:37	0:00:00	1:24:54	3:40:42	2:45:44	24:01:38	546:56:12
8	9:15:21	19:57:58	103:37:45	214:19:41	59:39:41	0:00:00	0:00:05	0:00:02	0:00:00	0:00:39	0:00:00	1:04:51	0:22:33	4:55:00	15:45:29	491:47:41
9	9:53:11	31:03:02	129:55:27	208:09:33	90:37:54	0:00:00	0:00:00	0:00:02	0:00:00	0:03:12	0:00:00	20:04:50	3:25:55	16:33:02	26:22:35	486:28:06
10	13:11:01	33:40:31	85:26:34	244:23:19	43:16:56	0:00:00	0:00:10	0:00:01	0:00:00	0:08:51	0:00:00	1:56:22	3:25:40	2:36:48	19:42:18	476:03:06
11	4:02:29	33:27:37	124:02:53	232:30:33	54:09:33	0:00:00	0:00:00	0:00:02	0:00:00	0:02:03	0:00:00	1:09:53	0:52:27	1:39:52	21:29:25	373:37:51
12	11:09:03	23:12:07	78:29:59	189:34:06	45:54:22	0:00:00	0:04:33	0:00:01	0:00:00	0:04:17	0:00:00	2:39:35	1:13:23	25:29:17	16:33:20	367:51:51
1	7:07:45	17:05:09	75:44:01	160:08:19	61:46:31	0:00:00	0:00:13	0:00:01	0:00:00	0:02:45	0:00:00	1:38:59	0:59:57	20:23:00	15:35:51	392:08:25
2	6:47:19	18:43:24	96:35:04	195:08:18	36:08:20	0:00:00	0:05:28	0:00:00	0:00:00	0:00:41	0:00:00	0:25:21	0:41:54	0:48:19	19:41:41	438:10:25
3	3:28:57	23:31:32	80:46:15	185:23:34	123:22:00	0:00:00	0:00:11	0:00:00	0:00:00	0:34:33	0:00:00	38:56:11	19:17:29	79:07:04	246:43:19	6027:58:40
合計	96:20:50	369:04:02	1282:24:10	3146:14:49	739:07:39	9:43:12	0:23:43	0:01:39	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	6027:58:40

(S-820/80 CPU使用時間)

(月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(G)	(O)	(P)	(Q)	(R)	(S)	(X)	(Y)	(Z)	(T S S)	(合計)
4	2:51:38	29:57:04	166:09:18	313:36:32	38:40:35	0:16:54	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:09:48	0:00:00	0:08:49	551:50:38
5	3:16:30	25:30:30	132:46:36	297:44:03	44:30:52	0:12:22	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:10:00	0:39:33	0:00:00	0:09:11	504:59:37
6	3:11:49	30:29:50	128:03:53	291:23:03	37:56:33	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:14:28	0:00:00	0:04:49	491:24:25
7	6:19:17	31:57:37	145:12:23	394:34:30	37:53:59	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:24:03	0:00:00	0:10:52	616:32:41
8	7:46:18	31:23:54	180:07:05	191:52:29	23:25:26	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	5:45:30	0:00:00	0:26:10	440:46:52
9	3:46:41	26:59:45	93:11:07	213:14:09	7:51:38	0:50:02	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	23:31:31	0:00:00	0:23:02	369:47:55
10	4:10:21	28:57:57	124:07:41	332:45:26	34:30:28	0:22:42	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	48:47:27	0:00:00	0:18:32	574:00:34
11	2:36:25	32:54:39	116:25:08	266:09:33	51:59:16	0:46:04	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	5:13:09	0:00:00	1:32:36	482:46:22
12	5:05:35	36:51:18	90:41:32	266:26:22	64:19:52	0:16:29	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	2:30:28	0:00:00	0:32:27	476:19:45
1	10:57:07	28:51:03	77:10:39	268:52:47	27:46:12	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	4:18:49	0:00:00	1:14:59	459:43:19
2	5:34:15	24:03:02	81:42:34	299:59:20	60:46:49	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	4:19:20	0:00:00	0:24:45	477:00:15
3	1:27:23	15:46:42	81:04:34	284:47:37	22:52:01	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:03:04	0:00:00	0:04:34	449:55:00
合計	57:03:19	343:43:21	1416:42:30	3421:26:11	452:33:41	2:44:33	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	95:53:10	0:00:00	5:30:46	3875:07:23

(S-820/80 VPU使用時間)

(月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(G)	(O)	(P)	(Q)	(R)	(S)	(X)	(Y)	(Z)	(TSS)	(合計)
4	0:48:05	10:09:41	57:12:27	131:56:56	24:31:22	0:00:06	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:27	224:59:04
5	0:45:49	7:43:02	59:51:28	121:39:17	11:41:45	0:03:12	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:04:31	0:00:00	0:01:03	201:50:07
6	0:42:32	7:59:44	53:42:07	110:58:27	20:58:40	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:03	0:00:00	0:00:00	194:01:33
7	0:57:54	12:12:42	60:56:41	124:38:03	26:24:30	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:01:10	0:00:00	0:01:34	225:12:34
8	1:36:10	13:36:07	63:18:24	84:04:43	12:48:11	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:30:37	0:00:00	0:12:02	176:06:14
9	1:02:56	11:25:02	33:46:31	107:44:14	2:08:27	0:03:10	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:23:32	0:00:00	0:03:40	156:37:12
10	1:03:21	11:05:59	41:36:56	137:51:06	11:27:14	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	3:37:10	0:00:00	0:01:34	206:43:20
11	0:25:59	10:16:13	41:31:55	135:23:48	29:13:46	0:10:49	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1:07:05	0:00:00	0:44:49	221:47:52
12	1:08:04	10:53:38	33:30:35	101:37:23	19:10:20	0:00:44	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:27:33	0:00:00	0:05:44	172:57:53
1	2:58:25	9:06:23	27:35:26	100:28:20	10:58:43	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	11:23:12	0:00:00	1:16:44	0:00:00	0:59:09	164:46:22
2	1:01:39	7:00:30	24:55:47	116:00:35	13:42:56	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:06:07	0:00:00	1:43:09	0:00:00	0:01:47	164:32:08
3	0:16:14	5:48:11	34:12:46	146:49:17	7:55:45	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	26:37:32	0:00:00	0:01:13	0:00:00	0:00:20	221:41:18
合計	12:46:48	117:17:12	532:11:03	1419:12:07	190:41:19	0:18:01	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	47:04:11	0:00:00	9:12:47	0:00:00	2:12:09	2390:55:37

4.4 ジョブ処理件数

(M-680H ジョブ処理件数)

(月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(G)	(O)	(P)	(Q)	(R)	(S)	(X)	(Y)	(Z)	(TSS)	(合計)
4	3038	2074	1208	613	58	6	22	21	1	89	0	443	234	294	13353	21454
5	3664	2032	1189	858	52	2	20	21	1	109	0	500	149	231	14177	23005
6	3202	1721	1252	706	24	0	4	17	0	103	0	1348	1053	187	14010	23627
7	3265	1925	1019	693	38	0	7	3	0	30	0	473	989	604	14367	23413
8	4024	1744	1291	372	32	0	16	23	0	243	0	374	250	460	10858	19687
9	3227	1602	1385	373	42	2	21	22	18	59	0	218	290	196	11718	19173
10	3580	1597	1082	493	40	0	8	10	5	76	0	605	280	483	15037	23296
11	3094	1758	1352	375	41	1	0	6	0	98	0	158	250	103	13253	20489
12	4075	1226	1133	438	27	1	13	8	0	45	0	242	279	335	12583	20405
1	4502	1230	848	375	51	1	4	5	0	92	0	206	143	194	10409	18060
2	2872	1273	1222	576	27	0	12	8	7	128	0	132	290	89	10379	17015
3	1970	1383	1214	468	101	0	3	7	0	40	0	26	160	39	9654	15065
合計	40513	19565	14195	6340	533	13	130	151	32	1112	0	4725	4367	3215	149798	244689

(S-820/80 ジョブ処理件数)

(月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(G)	(O)	(P)	(Q)	(R)	(S)	(X)	(Y)	(Z)	(TSS)	(合計)
4	961	1005	968	404	29	11	0	0	0	0	0	0	84	0	164	3626
5	1209	1251	876	489	30	2	0	0	0	0	0	5	84	0	95	4041
6	1331	1323	913	405	14	0	0	0	0	0	0	0	92	0	69	4147
7	2254	1359	887	529	36	0	0	0	0	0	0	0	196	0	85	5346
8	1439	1518	1011	367	19	0	0	0	0	0	0	0	137	0	46	4537
9	1313	1551	875	423	11	46	0	0	0	0	0	0	262	0	197	4678
10	1539	1272	829	517	37	9	0	0	0	0	0	0	403	0	178	4784
11	906	1250	719	431	22	5	0	0	0	0	78	0	290	0	157	3858
12	1788	1545	736	395	38	8	0	0	0	0	107	0	203	0	277	5097
1	3335	1203	704	367	12	1	0	0	0	0	151	0	143	0	123	6039
2	1371	1113	641	414	33	0	0	0	0	0	2	0	291	0	84	3949
3	518	783	704	419	14	0	0	0	0	0	262	1	77	0	69	2847
合計	17964	15173	9863	5160	295	82	0	0	0	0	600	6	2262	0	1544	52949

4. 5 所外ネットワーク・通信回線の利用状況 (セッション数)

4. 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	合計
回線 1	100	110	22	29	83	13	511	164	138	101	56	33	1360
回線 2	7	6	0	0	0	0	14	0	0	0	0	0	27
合計	107	116	22	29	83	13	525	164	138	101	56	33	1387

4. 5. 2 120bps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	420	332	127	180	77	152	205	145	103	94	207	150	2192
回線 2	61	44	12	10	0	7	11	4	1	1	35	24	210
合計	481	376	139	190	77	159	216	149	104	95	242	174	2402

4. 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	123	255	167	367	293	217	405	472	317	329	123	104	3172
東北大学	178	365	341	273	37	61	49	130	60	58	13	47	1612
東京大学	1077	709	664	794	776	306	151	275	318	318	281	366	6035
東京大学1	89	17	29	60	70	12	3	15	9	1	0	0	305
名古屋大学	318	176	144	134	81	128	98	435	279	137	102	177	2209
京都大学	940	942	715	558	234	512	366	376	381	224	246	341	5835
大阪大学	246	340	107	72	125	261	203	151	468	299	220	78	2570
九州大学	124	121	70	2	9	54	236	67	101	11	24	187	1006
学術情報センター(NACISIS)	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
学術情報センター(SIMAIL)	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
奈良女子大学	19	28	29	0	2	37	1	0	12	4	2	0	134
広島大学	105	71	246	138	67	89	62	79	133	106	37	23	1156
大阪府立大学	192	107	59	148	92	54	72	91	9	34	29	30	917
千葉大学	81	458	403	208	36	62	76	107	5	40	252	15	1743
京大化学研究所	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
弘前大学	8	0	0	32	6	6	27	54	38	24	1	19	215
お茶の水女子大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1
東大物性研究所	180	154	104	226	164	142	118	38	9	38	6	1321	
熊本大学	421	721	441	282	168	304	548	487	438	382	138	199	4529
愛媛大学	35	42	22	70	46	12	37	47	26	0	73	0	410
静岡大学	251	305	279	209	262	148	252	462	216	225	444	294	3347
金城学院大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
豊橋技術科学大学	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
信州大学	0	0	3	90	6	1	4	1	0	0	23	112	240
横浜国立大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
電気通信大学	94	68	27	8	33	29	7	2	4	1	7	4	284
東洋大学 (川越校舎)	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
岡山理科大学	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4
東京工業大学	232	122	243	202	74	128	392	508	158	233	84	27	2403
奈良教育大学	2	0	0	1	0	0	1	0	0	1	0	0	5
金沢大学	4	28	14	0	0	0	0	0	0	0	3	3	52
岐阜大学	22	313	218	10	27	170	92	60	10	15	1	48	986
岡山大学	31	2	5	8	0	2	68	29	13	16	30	12	216
宮崎大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
大阪工業大学	186	261	140	47	59	7	24	19	2	1	50	11	807
東京都立大学	0	0	13	2	0	1	0	0	0	0	0	0	16
富山大学	0	0	0	10	16	0	0	0	0	0	7	4	37
関西学院大学	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	0	4
合計	4963	5605	4483	3951	2683	2743	3316	3985	3035	2468	2232	2108	41572

4. 6 所内ネットワーク・通信回線の利用状況 (セッション数)

4. 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	211	203	250	420	407	223	288	390	449	359	488	351	4039
回線 2	21	27	50	183	88	32	60	67	96	57	66	15	762
回線 3	1	1	1	55	23	2	0	6	4	1	10	1	105
回線 4	10	0	0	0	3	0	0	0	0	0	1	0	14
回線 5	0	0	5	3	0	0	0	0	0	0	0	0	8
回線 6	0	0	0	58	44	46	16	5	7	6	37	29	248
回線 7	118	45	110	117	104	103	124	54	78	87	83	27	1050
回線 8	109	83	114	130	83	102	16	106	55	3	6	0	807
合計	470	359	530	966	752	508	504	628	689	513	691	423	7033

4. 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	284	257	240	385	242	224	286	198	159	65	109	140	2589
回線 2	153	171	123	232	76	45	102	44	19	7	15	37	1024
回線 3	80	66	36	98	24	1	14	7	1	0	0	1	328
回線 4	22	17	5	23	5	1	9	2	0	0	0	0	84
回線 5	4	1	0	4	0	0	1	0	0	0	0	0	10
回線 6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
合計	544	512	404	742	347	271	412	251	179	72	124	178	4036

4. 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	1	5	2	2	1	3	20	13	2	1	7	24	81
回線 2	0	2	2	0	3	5	0	1	0	0	1	0	14
合計	1	7	4	2	4	8	20	14	2	1	8	24	95

4. 7 T I S N経由の利用状況 ( t e l n e t , f t p )

	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
フルスクリーン・モード	2123	2558	3006	2396	2385	2834	3651	2804	2579	2270	2244	2275	31125
ライン・モード	1807	1764	2501	2781	1460	2078	4116	3037	3790	3259	3500	2919	33012
合計	3930	4322	5507	5177	3845	4912	7767	5841	6369	5529	5744	5194	64137

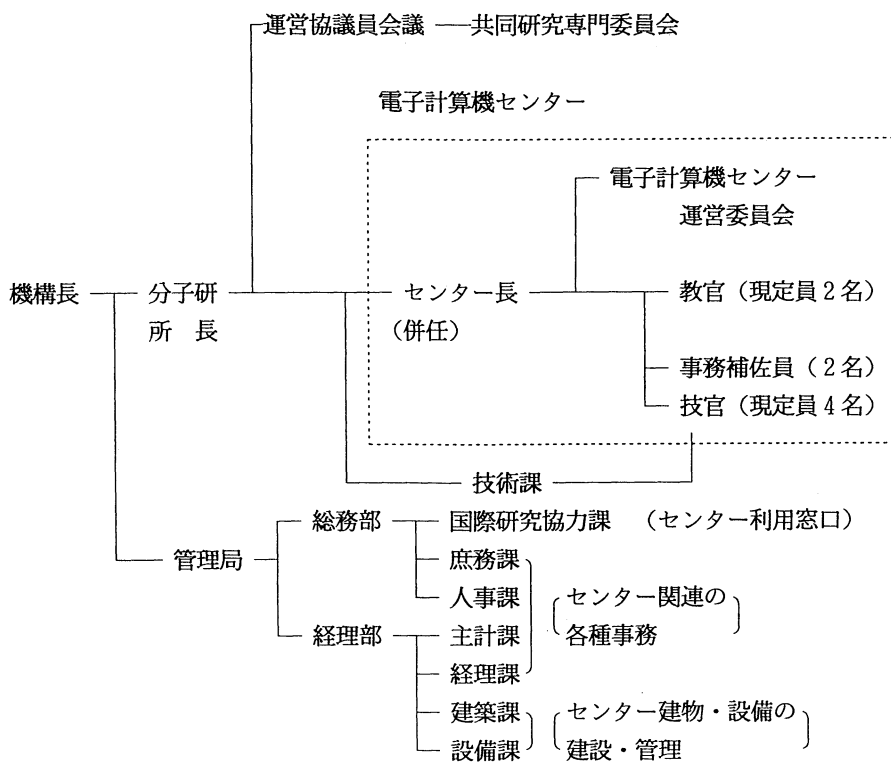
## 5. 資料

### 5. 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5. 2、5. 3、5. 4を参照されたい。



5. 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。

5. 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。

#### 5. 4 電子計算機センター運営委員会委員

(平成4年度)

諸熊 奎 治	分子研理論研究系教授、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	分子研理論研究系教授	分子研所内委員
薬師 久 彌	分子研分子集団研究系教授	〃
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	〃
上野 孝 治	基生研助教授	基生研委員
彦坂 興 秀	生理研教授	生理研委員

(平成5年度)

中村宏樹	分子研理論研究系教授、センター長	センター委員
青柳睦	分子研電子計算機センター助教授	〃
大峰巖	分子研理論研究系助教授	分子研所内委員
小杉信博	分子研極端紫外光科学研究系教授	〃
岡田勲	東工大教授	分子研所外委員
中辻博	京大工教授	〃
山口兆	阪大理教授	〃
里子允敏	日大文理助教授	〃
上野孝治	基生研発生生物学研究系助教授	基生研委員
亘弘	生理研分子生理研究系	生理研委員

#### 5.5 電子計算機センター職員 (平成5年7月現在)

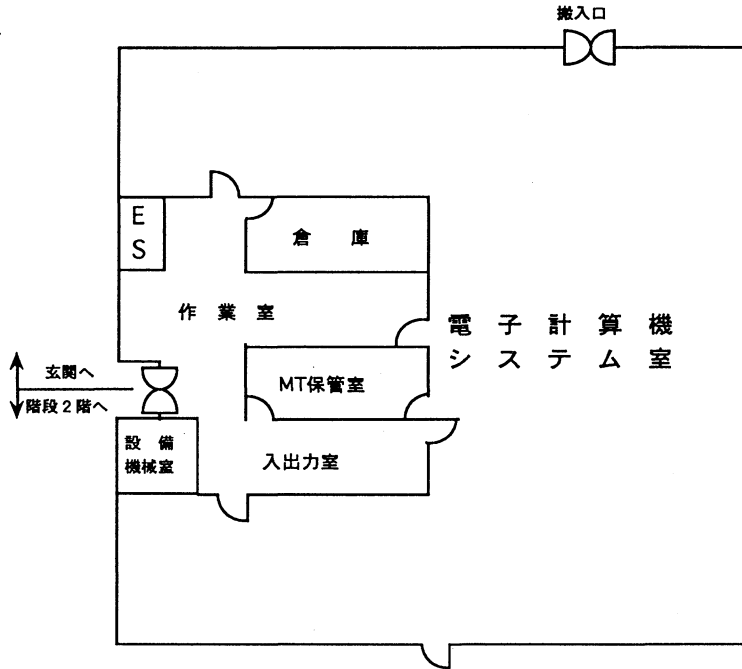
中村宏樹	センター長 (併任、平成5年4月1日より)
青柳睦	助教授 (平成5年5月16日より)
南部伸孝	助手
南野智	技官
西本史雄	技官 (係長)
田中邦彦	技官
手島史綱	技官
加納聖子	事務補佐員
齊藤敦子	事務補佐員 (結婚により改姓)

#### 5.6 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4年	5月～平成5年3月
小松崎民樹	総研大大学院生	平成4年	5月～平成5年3月

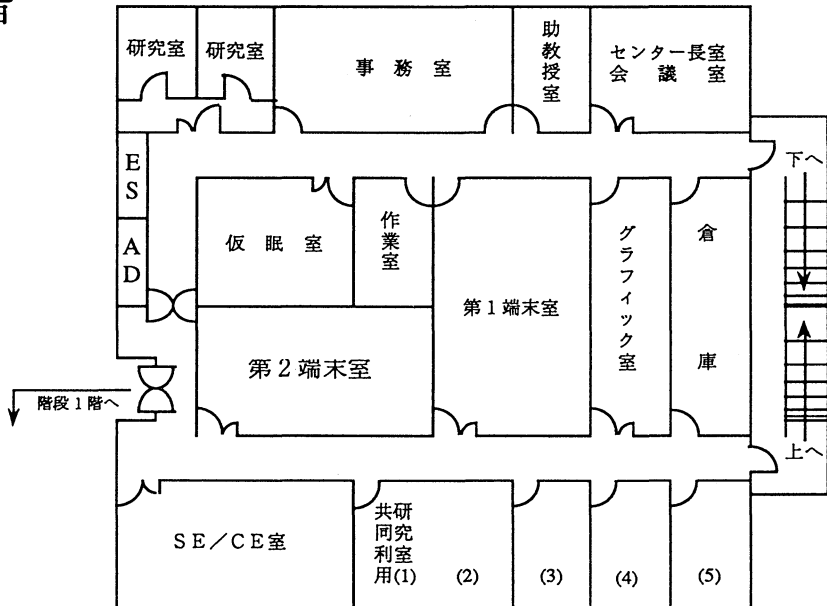
5.7 建物図

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



## 5. 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込み先は次のとおりです。

〒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 使用の手引き	6180-3-732
FORTRAN 開発支援システム	6180-3-733
TSS関係	
TSS入門 (ASPEN E2編)	6180-3-482
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	6180-3-370
TMP4 E3	6180-3-370
TSDUT E2	8091-3-069
TSDUT E2 入門書	8090-3-016
TSS端末入出力ロギング TSLOG	6180-3-374
ファイル伝送プログラム IFIT-TSS E2	6180-3-375
プログラミング支援エディタ関係	
ASPEN E2 使用の手引き	6180-3-480
ASPENメール機能 ASPEN/MF	6180-3-481
ASPENシンセサイザ機能 ASPEN/SF	6180-3-477
データベース関係	
ORION使用の手引き	8090-6-502
ORION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
TSSメッセージ	6180-3-164
行列計算副プログラムライブラリ関係	
MATRIX/HAP MATRIX/M	8090-7-035
数値計算副プログラムライブラリ関係	
MSL2機能編 第1分冊 行列計算	8080-7-120
MSL2機能編 第2分冊 関数計算	8080-7-121
MSL2機能編 第3分冊 統計計算	8080-7-141
MSL2操作編	8080-7-122
ジョブ管理関係	
ジョブ制御文 使用の手引き	6180-3-143
ジョブ制御言語	6180-3-144

ジョブ管理概説	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
ユーティリティ関係	
データセットユーティリティ	6180-3-225
数学関係	
数学関数	8080-3-218
ユーザ管理関係	
TRUST E2 コマンド	8090-3-412
グラフ作成関係	
KGRAF E2 GKS編	6180-7-119
KGRAF E2 KGRAF編	6180-7-120
図形出力関係	
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
データセットバックアップ関係	
DMF/BKUP使用の手引き	6180-3-400

5. 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	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 <sup>a</sup> 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 時 間 C P U		(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CPU時間 <sup>c</sup>		509	2,405	5,405	6,320	8,205
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>		41,521	155,980	183,840	214,847	239,771
ライブラリプログラム新規登録数		0	20	43	20	699
データベース新規登録数		0	2	0	0	3
センター使用論文数 <sup>d</sup>		0	24	93	118	190

		58年度	59年度	60年度	61年度	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 <sup>a</sup> 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 時 間 C P U		(200H基準)				(M680-H基準) <sup>b</sup>
	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CPU時間 <sup>c</sup>		8,489	8,508	12,770	20,092/5,023**	6,624*
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>		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 <sup>d</sup>		185	202	206	237	223

		63年度	平成元年度	平成2年度	平成3年度	平成4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	同63年度
プロジェクト数		231	239	256	272	271
利 用 者 数	機 構 内 <sup>a</sup>	137	146	140	158	143
機 構 外	機 構	515	544	593	623	661
合 計		652	690	733	781	804
稼 働 時 間		6,091	5,694	6,768	6,749	7,156
利 用 申 請 C P U 時 間		(M680-H 基準) <sup>b</sup>				
	申 請	12,439	14,694	16,622	20,606	21,153
	許 可	10,418	12,347	14,626	17,846	19,110
総使用 C P U 時間 <sup>c</sup>		7,872	8,300	11,975	11,874	12,491
ジョブ処理件数 <sup>c</sup>		278,104	253,418	295,503	346,987	297,638
ライブラリプログラム新規登録数		7	3	0	0	0
データベース新規登録数		0	0	0	0	0
センター使用論文数 <sup>d</sup>		211	218	248	229	282

a: 機構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。