



5.2	システム稼動状況	42
5.3	ジョブ件数	42
5.4	CPU時間	42
5.5	無人運転状況	48
5.6	ジョブ処理状況の推移	49
<b>6.</b>	<b>センターより — 速報(No.7~13)から再録 —</b>	<b>50</b>
<b>7.</b>	<b>資料</b>	<b>69</b>
7.1	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	69
7.2	電子計算機センター運営委員会	70
7.3	計算機関係申請書の審査方法と記入要領	71
7.4	電子計算機センター職員(昭和56年5月現在)	73
7.5	建物図	73
7.6	端末設置状況(昭和56年5月現在)	74
7.7	応用プログラム相談員一覧	75
7.8	マニュアルの紹介と購入方法	75
7.9	ユーザ論文一覧	76
<b>8.</b>	<b>昭和55年度研究課題および利用報告書</b>	<b>89</b>
8.1	昭和55年度研究課題一覧と利用報告書提出状況 (利用点数実績3,800点未満)	90
8.2	昭和55年度利用報告書(利用点数実績3,800点以上)	99

## 寄 語

### A m i c i , Q u o V a d i t i s ?

電通大教授 土 方 克 法

本センターの電算機が稼動を始めて以来、機器のレベルアップを行なっても、常に全力運転を続けていることは御同慶に堪えない。この盛況は将来Supercomputerの導入等により処理能力が10倍以上になっても継続するであろう。分子の計算は、より高い精度へ、より大きい分子へ、より様々な原子配置へと限りなく発展し、その停まる処を知らない。

しかし、このままで一本どうなるのだろうか。現在のところ数十時間のマシンタイムを消費するグループが数多くあり、これらがエスカレートし続けるならば、二台の計算機で間に合わなくなることは明らかである。これは十台置いても百台置いても同じことではないだろうか。現在ひたすら己が仕事を追いつける研究者にこのようなことを言っても、おそらくは耳を籍さないであろう。だが現実には既にそこに迫っている。

少し大きめの分子でMCSCF法の計算をすれば、その途中にあらわれる分子積分の数は $10^9$ 個程もあり、数万次元の行列を扱わねばならないだろう。人間の脳は $10^{10}$ ビットの容量があると聞く。これを上回る情報量を駆使して、やっと一つの分子について極めて限られた情報を得ることを思うと、もうこの辺で何か抜本的に発想の異なる方法が考えられてもよさそうである。

わが国の化学界の傾向として、新しい機器を導入してデータを量産するけれども、機器そのものの開発は化学の領域外と見る風潮があった。最先端の研究ではこれが通用しないことは漸く認識されているようであるが、おなじことが電算機の周囲でもある。「われわれは何か非常にバカなことをしているのではないか」乃至は「もっと能率的な方法はないのか」との疑念は常に私の脳裡を去らず、電算機の発達と共に益々大きく浮び上りつつある。物質の構造・性質を既成の方法で追究することは、現在そうであるように、分子研の主流であってもよいのだが、この電算機を利用する研究者の中の何人かが、方法そのものを追究することに関心を持ってよいのではなかろうか。

競馬の実況放送を見ながら考える。この馬の中に「なぜ俺はこんなに走らなければならぬのか」という疑いをもつ奴はいないのだろうか。多分いないのだろう。だからこそ有史以前から馬は人類のために走りつづけているのだ。まことに悲しいことである。

猿が銅鑼を叩きつづける玩具がある。昔はぜんまい仕掛だったのが、最近は電池が動力になっていて、電池の切れるまで叩きつづける。この猿の顔がよく出来ていて、見る者にもものあわれを感じさせる。

・・・と、ここまで書いたら胸のつかえが下りたような気がするので筆を擱くことにする。

# 1. 電子計算機センターの経過と成果発表会

## 1.1 センターの経過

分子研電子計算機センターは昭和52年5月に設立され、昭和54年1月よりHITAC M-180マルチプロセッサシステムの運転を開始した。センターの主な利用目的は分子科学、生物科学の大規模科学計算におかれ、全国の関連分野の研究者が利用者の対象に設定された。このような大きな目標に答えるため、昭和54年9月から全国初の夜間、休祭日の完全無人運転の実施、55年4月からM-200Hへのレベルアップと急速に処理能力を増加させてきた。ソフトウェアについては、ライブラリ管理システムの開発、多数のライブラリ・プログラムの開発と収集、量子化学文献データベースの共同製作と公開、出力編集システムSOM、磁気テープ管理システムMTM、カラーグラフィックシステムCANVASなど多数の開発を行ってきた。実行形式の完全ライブラリ・プログラムは58本あり55年4月から56年4月までの間に236名のユーザにより5535回利用された。

表1.1.1に示すように利用者数は昭和55年度に400名を越え、申請CPU時間は急激に増大している。1日24時間運転を前提とした最大限使用可能CPU時間も急速に増加させてきたが、申請の増加率は処理能力の上昇をはるかに上回まっている。昭和55年度における許可時間は申請の55%にすぎない。無人運転システムではジョブ数が一定数以下になるとシステムは自動的にジョブを凍結し、電源を止めて停止することによって効率のよい運転を実現しているが、実際に使用したCPU時間と最大限使用可能CPU時間(表1.1.1注参照)の比は限度に近づきつつある。このためジョブ処理待ち時間(ターンアラウンドタイム)がしばしば長時間になり、遠隔地からわざわざ来所した利用者が十分な結果を得ることなしに帰ることも起きている。大容量ディスクの競合も頻発し本来の目的である大規模計算ができないこともある。昭和56年度ではM-200HとM-180の疎結合によって処理能力が20%増加し、両プロセッサから共通に使用できるディスク容量が若干増加するが、なるべく早期に計算機システムの根本的なレベルアップが必要である。

センター職員は現在、センター長、助教授、技官3、事務補佐員2である(資料7.3)。これまでの二年半におけるセンターの好調な立ち上りの結果日常業務が増加し、ハードウェア、ソフトウェア両面における企画・研究開発への労力の割振りが減少している。定員の早急な充足が切望される。なお、センター技官伊奈諭は56年4月から係長(技術課電子計算機センター技術係)に昇任した。また、事務補佐員牧野恵子の理論研究系への配置換えに伴い、新たに中根三恵が55年10月から事務補佐員として採用された。

表 1.1.1 利用者数と CPU 時間の推移

	53年度	54年度	55年度
計算機システム	M-180	M-180	M-200H
運 転 方 式	×2 1～3月有人	×2 9月から無人	M-180 200H無人 180有人
利 用 者 数			
所 内	48	84	101
所 外	107	254	325
合 計	155	338	426
CPU時間(200H規準)			
申 請	929	4666	13600
許 可	816	3171	7427
使 用	509	2405	5405
最大限使用可能	822	3373	7045
使用/最大限 %	62	71	77

最大限使用可能 CPU 時間 { 有人：68.5時間×50週×75%  
無人：162.5時間×50週×75%

## 1.2 大型計算成果発表会

昭和56年末、センターのサービス開始後2年を経過し、各プロジェクトの研究も相当の成果を挙げて来ている時点で「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—」をセンター主催で開催した。当センターは大学の計算機センターではできないような分子科学の大規模計算を一つの旗印にしているのので、長時間の利用が認められているいくつかのプロジェクトの代表者に研究成果の公表を依頼した。これは今後のセンター運営、利用申請審査、プログラム開発の参考とするためのものであり、公開の研究発表会の形式をとった。発表会は下記のプログラムの内容で電子計算機センター運営委員をはじめ多数の聴講者が出席し熱心な討論が行われた。この発表会は昭和56年度以降も継続して開催する予定である。

「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：1981年2月19日(木) 9:00—12:35

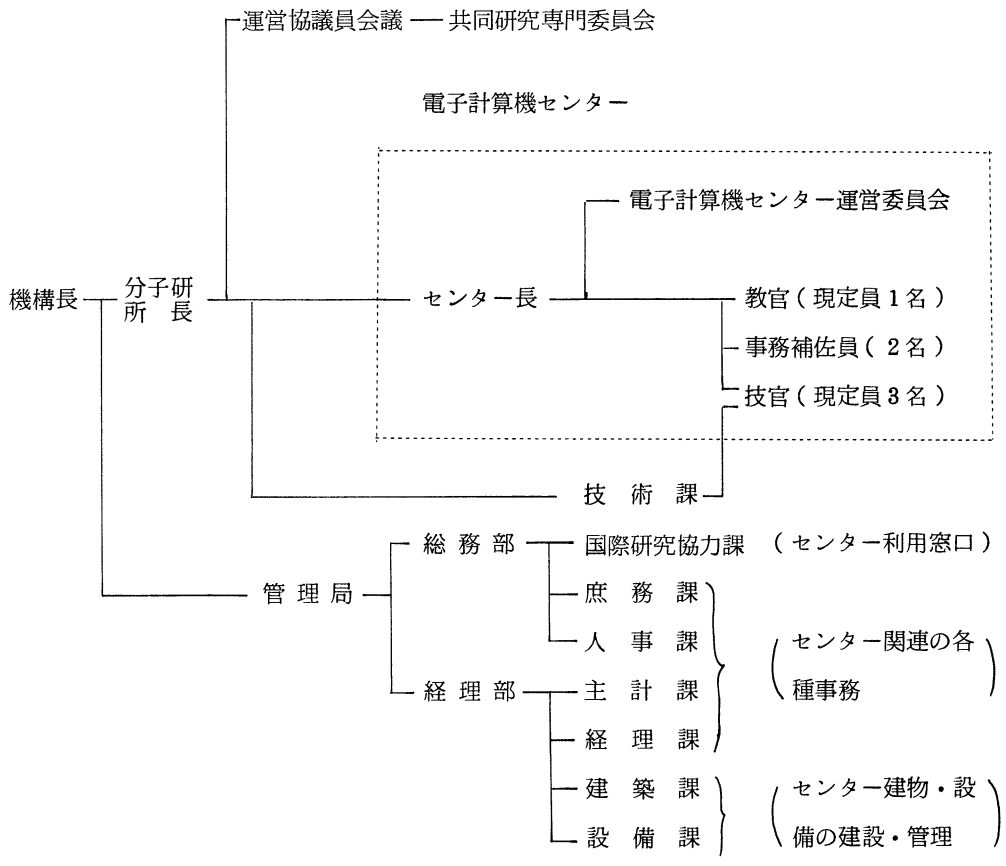
場所：分子研・研究棟 301号室

## プログラム

- 9 : 0 0 挨拶 諸熊奎治センター長
- 9 : 0 5 大沢映二(北大・理)  
分子力場の設定およびその応用研究
- 9 : 3 5 西本吉助(阪市大・理)  
分子の電子状態に関する理論的研究
- 10 : 0 5 坂部知平、佐々木教祐(名大・理、名大・医技短大)  
蛋白質のX線結晶構造解析と精密化
- 10 : 3 5 坪井正道(東大・薬)  
分子軌道法による分子内力場の研究
- 11 : 0 5 山本常信(京大・理)  
固体メタンおよび水の物性
- 11 : 3 5 大野公男、田中皓(北大・理)  
分子のSCF-CI計算
- 12 : 0 5 中村宏樹(東京農工大・工)  
 $H_2$  および  $H_2^+ + e$  系における動的諸過程の理論的研究
- 12 : 3 5 閉 会

### 1.3 昭和56年度からのセンター関連組織

昭和56年度から分子科学研究所は独立した機関から新たに発足した岡崎国立共同研究機構の中の一研究所に組織替になった。これにともない当センターの正式名称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となった。センター関連組織は図のように変更されたが実質的な変化は少ない。共同・協力研究の運営は運営協議員会議及びその共同研究専門委員会で行われるようになった。電子計算機センター運営委員会の規則と委員については資料7.1と7.2を参照されたい。



## 2. 計算機システムと運用について

### 2.1 計算機システムの特徴

当システム（昭和55年4月～56年3月）は図2.1.1に示すようにHITAC M-200H1台とM-1801台からなる。M-200Hは主記憶12MB、ディスク7150MB、M-180は主記憶4MB、ディスク3340MBの記憶容量を持つ。両システムともにベクトル演算高速化のための内蔵アレイプロセッサ（IAP）が付属している。速度はプログラムに依存するがM-200Hの速度はM-180の約2.7倍の速さである。周辺機器としては、カードリーダー（1台）、ラインプリンタ（3台）、グラフィックディスプレイ（1台）、カラーグラフィックディスプレイ（1台）、XYプロッタ（1台）、TSS端末（館内用33台）、フロッピー入出力装置（1台）などがある。昭和56年4月からはM-200HとM-180の両システムが疎結合され、ディスクが共通化された。さらに昭和56年7月からは132カラム表示可能なLPイナージビデオデータターミナルが10台導入された。昭和56年7月以降のシステム概要を図2.1.2に示す。

### 2.2 ジョブクラスの構成

長時間ジョブを主体としたジョブクラスから構成されている。CPU時間はM-200HとM-180の処理速度を考慮してM-180側ではM-200Hの3倍に設定してある。表2.2.1にジョブクラス（昭和55年4月～昭和56年3月）を示す。

表2.2.1 ジョブクラス表（昭和55年4月～昭和56年3月）

M-200H ジョブクラス表

M-180 ジョブクラス表

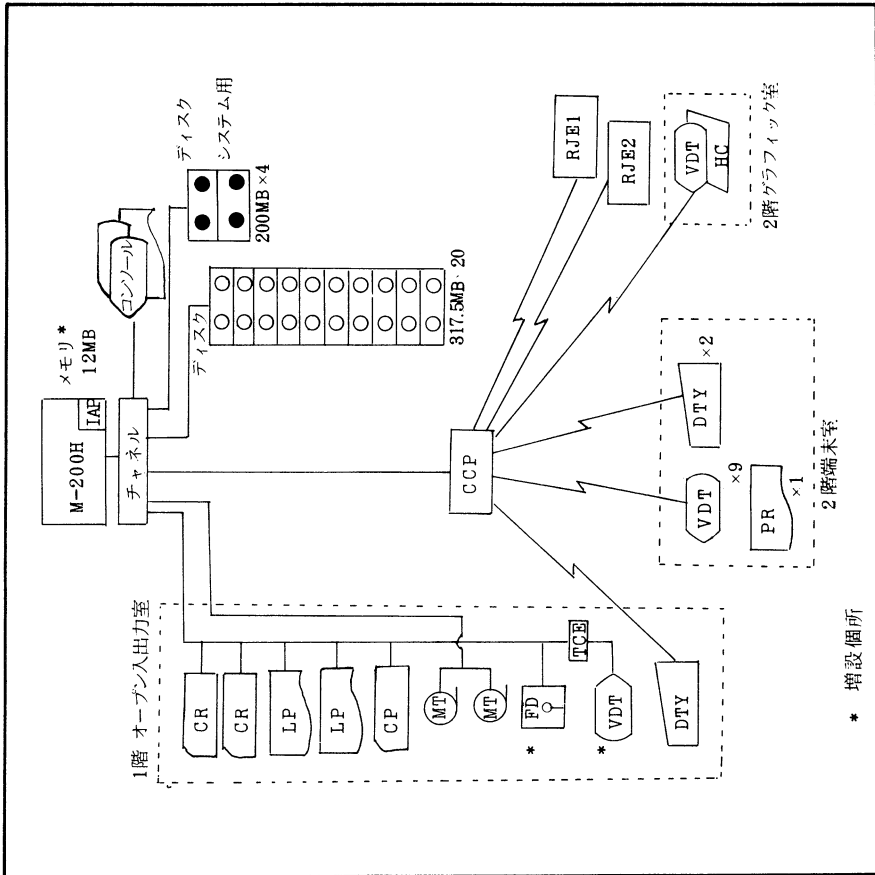
ジョブクラス	出力ページ数	出力カード枚数	CPU時間(分)		REGION値(MB)	
			上限値	標準値	上限値	標準値
A	100	0	1	1	2	0.5
B	200	500	5	5	2	1
C	400	1000	30	30	4	1
D	1000	1000	60	30	4	2
E	1000	1000	90	30	4	2
TSS	400	0	2	2	2	0.5
I	1000	1000	60	30	4	2
S	1000	1000	1430	30	8	2

ジョブクラス	出力ページ数	出力カード枚数	CPU時間(分)		REGION値(MB)	
			上限値	標準値	上限値	標準値
A	100	-	3	3	2	0.5
B	200	-	15	15	2	1
C	400	-	90	90	4	1
D	1000	-	180	90	4	2
E	1000	-	270	90	4	2
TSS	400	-	6	6	2	0.5
I	1000	-	180	90	4	2
S	1000	-	1430	90	8	2



図 2.1.1 システム構成

M-200H



M-180

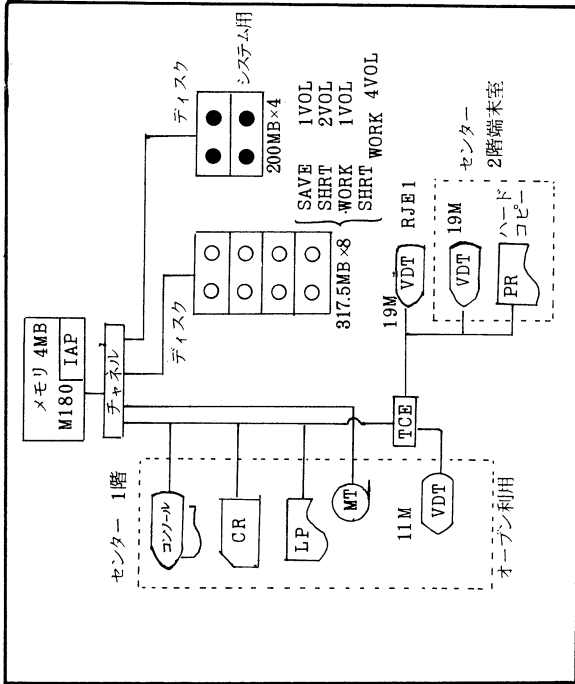
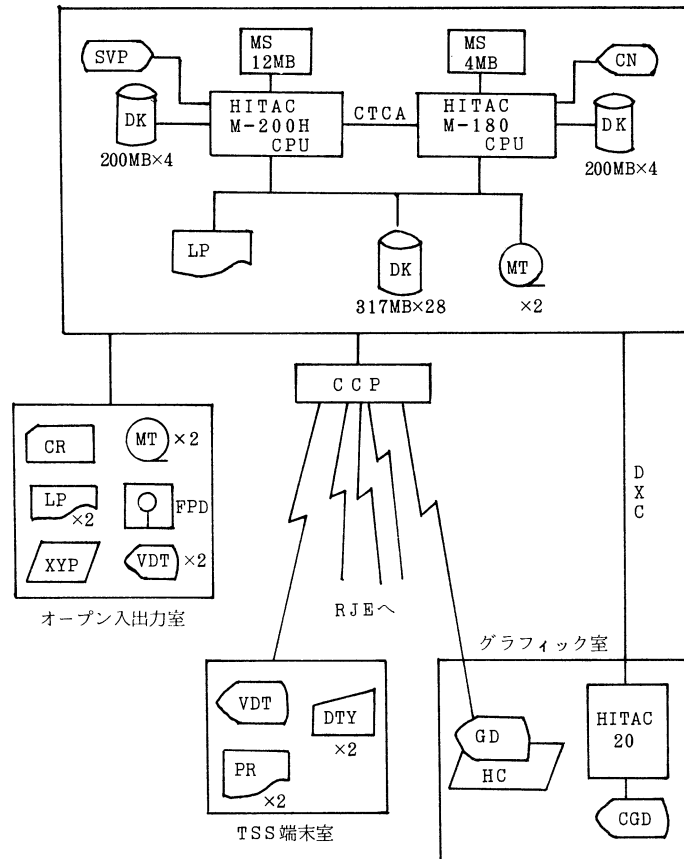


図 2.1.2 現有システムの概要（昭和56年7月1日以後）

プロセッサ	M-200H+M-180 LCMP（疎結合システム）
IAP	2台
主記憶	計16メガバイト
ディスク	317.5メガバイト×28 } 計10.49ギガバイト 200メガバイト×8
磁気テープ装置	4台
通信制御プロセッサ	1台
周辺機器	カードリーダー（1台）、ラインプリンタ（3台） グラフィックディスプレイ（1台）、カラーグラフィックディスプレイ（1台）、XYプロッタ（1台）、TSS端末（館内用33台）、 プロッピー入出力装置（1台）他
OS（オペレーティングシステム）	VOS 3

○システム概略図



昭和56年4月以降は疎結合システムとなったためジョブクラス表はひとつに統合され表2.2.2に示すようになった。この表でCPUタイムはM-200Hの処理スピードを基準としているためM-180側でのCPU時間は自動的に1/3のファクタがかけられ、M-200H相当のCPUタイムに変換されるようになっている。

表2.2.2 ジョブクラス表(昭和56年4月以降)

ジョブクラス	処 理 プ ロ セ サ	プリントページ	CPUタイム(分)		REGION (MB)	
			上 限	標 準	上 限	標 準
A	M-180	100	1	1	2	0.5
B	M-180	200	5	5	2	1
C	M-200H	400	30	30	4	1
D	M-200H	1000	60	30	4	2
E	M-200H	1000	90	30	4	2
I	M-200H/180	1000	60	30	4	2
S	M-200H	1000	1430	30	7.5	2
TSS	M-200H	1000	2	2	2	0.5

## 2.3 運用時間

運用時間は昭和54年9月以来次のようになっている。

- ・オープン利用時間帯
 

{	月曜日	13:30 ~ 22:00 (午前中は保守・センター業務)
	平日	9:00 ~ 22:00
	土曜日	9:00 ~ 17:00
- ・深夜・休祭日 無人運転

但し、昭和55年4月～昭和56年3月に限ってはM-200HとM-180が独立システムであったため、無人運転はM-200Hのみで行った。

## 2.4 利用点数

利用点数Pは次の式に従ってジョブごとに算出される。

$$P = a \times (\text{CPU時間}) + b \times (\text{LP用紙枚数}) + c \times (\text{出力カード枚数}) \\ + d \times (\text{恒久的データセット使用量})$$

昭和55年4月～昭和56年3月の間はM-200HとM-180が独立システムであったため、CPU時間の利用点数は別々に設定した。この場合、M-180の利用を促進するためにM-180側のCPU利用点数はM-200Hのその1/10とした。

昭和56年4月以降は疎結合システムとなったため、CPU時間はM-200Hを基準にして利用点数表を統合した。

昭和55年4月～昭和56年3月			昭和56年4月以降	
	M-200H	M-180		
a	0.1点/秒	0.01点/秒	a	0.1点/秒
b	0.03点/頁	0.03点/頁	b	0.1点/頁
c	0.03点/枚	—	c	0.03点/枚
d	0.000006/KB・時	0.000006/KB・時	d	0.000006/KB・時

## 2.5 センターの主なサービス

### • オープンバッチサービス

ジョブの入出力はユーザ自身で行なうオープン方式です。カードリーダ、各種TSS端末、ラインプリンタ、オンラインカードパンチ、オープン磁気テープ装置、オープンフロッピー入出力装置などが自由に利用できる。ジョブの入力、実行、出力状況は専用のディスプレイによって逐次表示される。

### • TSS, RJEサービス

センター2階のTSS端末室および分子研所内の研究室にある各種TSS端末からの専用回線によるTSS利用、および公衆回線(300ボー/1,200ボー)による所外のTSS端末からの利用が行なわれる。さらに所内および生理研、基生研のリモートステーションに対するRJE(Remote Job Entry)サービスも行なっている。

### • 量子化学文献データベース(QCLDB)

QCLDBは非経験的分子軌道法に関する文献データベースです。データの収集作業は全国10ヶ所の理論化学研究室の大学院生、教官によって行なわれ、データの再チェック、データベースへの登録を当センターが担当している。一般利用者へのサービスは昭和54年6月から開始しており、既に1977年～1980年の文献約2,400件を収容している。

### • プログラムライブラリ

分子科学および生物科学のための高度のプログラムライブラリの開発・整備・提供を行なっている。プログラムの検索はライブラリ管理システムを利用することによりTSS端末から容易に行なうことができ、ただちに実行することもできる。

登録されたプログラムは大きく分けて次の2種類である。

- (1) 国内の研究者、他計算センターなどにより提供または開発されたもの。
- (2) アメリカのQCPE(Quantum Chemistry Program Exchange) から購入したもの。

## 2.6 新年度（昭和56年度）からの運用について

昭和56年4月から次のようにシステムのレベルアップを行った。

- ① M-200HとM-180の疎結合（Loosely Coupled Multi-processor, LCMP）システム
- ② 計算結果の出力方式の変更

### 2.6.1 M-200HとM-180の疎結合（LCMP）システム

いままでM-200HとM-180は別個のシステムとして運用サービスを行いM-180の利用は一部のユーザに限られていたが昭和56年度からは両者を疎結合して一本化した。磁気ディスクは合体されて余裕ができ、また2台のプロセサで同時に処理するためジョブの混雑は緩和されて、より使い易くなった。

利用者はM-200Hのみを意識してジョブを実行すればよく、ジョブの振り分けは内部で自動的に行う。

ジョブクラスは通常はA、B、IクラスがM-180、C、D、E、I、SクラスとTSSはM-200Hに振り分けられる。M-180が停止している場合にはA、BクラスもM-200Hで実行される。表2.2.2にジョブクラスの構成を示す。

またCLOCKルーチンやJOB文、EXEC文のTIME指定はM-200H処理速度を基準にしている。M-180では自動的に1:3の速度比で調整される。

この1:3の速度比はM-180のスピードをやや過小評価しているのでM-180で処理したジョブが、ある特定の時間内に処理できたからといって、M-200Hで同じ時間内に処理できるとは限らない（表2.6.1の×印）。CLOCKルーチンで終了時間を判断するジョブの場合は、必ず、M-200Hで処理された時間を基準にするようにしなければならない。

表で、M-200Hの処理時間を基準にすると速度比が2~3のいずれであっても、M-180で同じTIME指定の範囲内で処理できる。しかし、M-180を基準にすると、M-180で、TIME指定の上限付近のジョブは、同じTIME指定ではM-200Hで処理できないことがある。

表2.6.1 速度比と処理時間

ジョブ	基準	M200HとM-180 のジョブ毎の速度化	M-200Hの CLOCK	M-180の CLOCK	可 否
P	M-200H	3	60	$180/3=60$	○
Q		2.5	60	$150/3=50$	○
R		2	60	$120/3=40$	○
P	M-180	2	60	$180/3=60$	○
Q		2.5	75	$180/3=60$	×
R		2	90	$180/3=60$	×

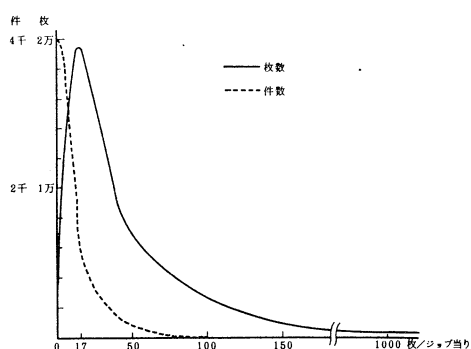
注) CLOCKルーチンは分子研専用の特殊仕様ですので、他のセンターから持ってきたロードモジュール及び他のセンターへ持っていったロードモジュールはCLOCKに関して正しい値は求められないので、改めてプログラムを実行するセンターでロードモジュールを作成すること。

## 2.6.2 計算結果の出力方式の変更

研究能率の向上のためとLP用紙の節約のために昭和56年度4月から計算結果の出力方式を変更した。図2.6.1の点線を見て分かるようにジョブ当たり5ページ以下の出力が全体の80%強を占める。この大部分は明らかにエラージョブとみなされる。全てのエラージョブの割合は相当なものと考えられる。

また図2.6.1の実線を見るとジョブ当たり40ページ以上の出力総枚数が60%になる。この大部分は実際には目を通すことのないページと推定される。以上のようなことは5~40ページ間の出力についてもかなりあてはまると考えられる。これらのことは研究能率とLP用紙代(センター運営を圧迫している)の両方において大きな無駄となっている。このような無駄

図 2.6.1 LP出力枚数統計概略図



をなくすため、計算結果の取り出し方式をより合理的で便利なものに変更する。新方式では結果のプレビューや編集、データセットへの保存が容易にできる。

## 2.6.3 機器の入れ替え

昭和56年6~7月頃、利用率の低くなった機器を撤去し、出力編集を強化する機器を導入する。

### ○ 新規導入機器

#### (1) LPイメージビデオディスプレイ(VDT)

ラインプリンタの1ページ分がすべて一画面に表示できる大画面のVDTを多数設置する。これにより出力結果のチェックや編集が一段と便利になる。

### ○ 撤去機器

#### (1) カードリーダー 1台(1台が残る)

#### (2) オンラインカードパンチ機およびインタプリター

(3) オフラインカードパンチ機 4台(2台が残る)

これらの機器はTSS化により利用率が非常に低くなったため撤去するものである。

2.6.4 カラーグラフィックシステムのサービス

カラーグラフィックディスプレイの運用サービスを昭和56年4月から開始した。ハードウェアの仕様は次の通り。約260,000色のカラーを表現できる点に特長がある。

口 径	20インチ
表 示	28cm×28cm
分 解 能	512×512
濃淡レベル	64階調(各RGB)
全表示色	$2^{6 \times 3} - 1 = 262,143$ 色(自然色可能)

ソフトウェアはセンター開発のサブルーチンライブラリCANVASと電総研開発のSPIDERを利用できる。ハードウェア、ソフトウェアおよび利用方法などの詳細は「利用の手引き — CANVAS —」(暫定版)を参照のこと。

2.6.5 1200ボー電話回線の増設

従来電話回線によるTSSサービスは300ボー3回線、1200ボー2回線で行っていたが、1200ボーの需要増に対処するためこのたびさらに2回線を新設した。したがって1200ボーは合計4回線になった。

電話回線の呼び出し番号は次の通り

1200ボー 0564-53-6114(代表-4回線)

300ボー 0564-53-6111(代表-3回線)

なお電話回線によりTSSを利用される方は必ず端末設置申請書を提出のこと。

2.6.6 高精度グラフィックハードコピーの設置

H-8844-14(T4014)蓄積型グラフィックディスプレイにレーザビームプリンタ方式のハードコピーが付いた。従来のものに比べて高速により鮮明なコピーを得ることができる。なお従来のハードコピーは撤去した。

2.6.7 蓄積型グラフィックディスプレイ(T-4014型)の増設

グラフィックディスプレイの需要増に対処するため、従来からある蓄積型グラフィックディスプレイ(H-8844-14)と同機種(T-4014)を一台増設しグラフィック室へ併設し

た。これに伴いハードコピー装置も両グラフィックディスプレイのどちらからでも取れるようになった。

#### 2.6.8 パーソナルコンピュータをインテリジェントTSS端末にする端末制御プログラム(tss29a)の公開・提供

tss29a はパーソナルコンピュータをインテリジェントTSS端末にする端末制御プログラムで、Basic 言語のみで書かれており、プログラムのステップ数はわずかなものである。基本部分は30ステップ以下で、むつかしい回線制御も不要である。

tss29a によるインテリジェントTSS端末の操作は、端末室の9415-29S端末(スクロール、カーソル・挿入・削除キーによる編集・行入力)とほぼ同じで、EDITコマンド実行中は、それ以上の効果(スクリーンエディタによる)が期待できる。このプログラムは日本電気のパーソナルコンピュータPC-8001(拡張インターフェイス付)で開発したもので、わずかな変更により次のパーソナルコンピュータで使用可能。

日 立	ベーシックマスタ	レベル3
東京三洋	MBC-2000/3000	
沖 電 気	if800モデル10+ビデオモニター	

対象となる大型計算機システムのTSSはHITAC M-200H VOS3TSSである。

詳細は、利用の手引き — パーソナルコンピュータをインテリジェントTSS端末にする端末制御プログラムtss29a — を参照



### 3. 研究開発レポート

#### 3.1 MTMとSOMコマンドシステムの開発

技 官	西 本 史 雄
助 教 授	柏 木 浩
ファコム・ハイタック株式会社	相 浦 勝 市

はじめに

分子科学研究所電子計算機センターは、利用者が自分のデータセット（ディスク及び磁気テープ）を管理するためのコマンドシステムMTM(MT Manager)と出力編集のためのコマンドシステムSOM(SYSOUT Manager)を開発し、昭和56年4月から一般に公開した。

##### (1) MTMの概要

MTMはディスク上のデータセットを磁気テープにコピーし、かつ、データセットの情報を管理することを主目的としている。利用者は任意にデータセットのグループを選択でき、連続的に磁気テープに保存すると同時に、ディスク上でのデータセット情報（データセット名、種類、形式、レコード長、ブロック長、スペース量、メンバー数、メンバー名など）と、磁気テープ上でのデータセット情報（データセット名、ポジション、使用ユーティリティなど）をボリューム情報とともに、指定されたデータセットに記録蓄積する（これはMTM情報と呼ばれる—MTM情報は図3.1.1のような形式をしており、検索が容易である）。MTMにより、利用者の全データセットが管理でき、既存のエディタの検索機能を用いてのデータベース化も容易に実現される。

又、次で説明するSOMを組み合わせ、計算結果のLP出力原データの保存を全面的にかつ、効率よく行なうことができる。

図3.1.1 MTM情報と検索例

```
HQED MTM.DATA
JEQ10010I WELCOME TO HQED (01-00)
JEQ31000I INPUT PROCESS ENDED: INPUT RECORDS 16
```

```

^@1,$
VOL=CD2001 DEN=6250 LABEL=SL TIME=81-01-13.09:53:23 UID=AB1CD2
VGR=CD2001 VNO=001
  DST=A.FORT          POS=001 UTILITY=JSDPCPY
  DSN=AB1CD2.A.FORT
    DSORG=PO RECFM=FB  LRECL=00080 BLKSIZE=03120 DATE=80-12-08
    ALLOC=000008TR UNUSE=000000TR DIR=001 MEMBER=00006 VOLUME=IMS012
    MEM=SEF2M      SETAM      SETBM      SLF1M      SLK1M      SUERM
  DST=B.OUTLIST      POS=002 UTILITY=JSDPCPY
  DSN=AB1CD2.B.OUTLIST
    DSORG=PO RECFM=FB  LRECL=00137 BLKSIZE=03014 DATE=80-09-09
    ALLOC=000020TR UNUSE=000006TR DIR=001 MEMBER=00004 VOLUME=IMS011
    MEM=SEP0180  SEPO280  SEPO380  SEPO480
  DST=ZZZ.DATA      POS=003 UTILITY=JSDSCPY
  DSN=AB1CD2.ZZZ.DATA
    DSORG=PS RECFM=FB  LRECL=00080 BLKSIZE=00080 DATE=80-10-01
    ALLOC=000004TR UNUSE=000003TR DIR=      MEMBER=      VOLUME=IMS010
@G/DS?=/P
  DST=A.FORT          POS=001 UTILITY=JSDPCPY
  DSN=AB1CD2.A.FORT
    DSORG=PO RECFM=FB  LRECL=00080 BLKSIZE=03120 DATE=80-12-08
  DST=B.OUTLIST      POS=002 UTILITY=JSDPCPY
  DSN=AB1CD2.B.OUTLIST
    DSORG=PO RECFM=FB  LRECL=00137 BLKSIZE=03014 DATE=80-09-09
  DST=ZZZ.DATA      POS=003 UTILITY=JSDSCPY
  DSN=AB1CD2.ZZZ.DATA
    DSORG=PS RECFM=FB  LRECL=00080 BLKSIZE=00080 DATE=80-10-01
@G/DSN=/. ,+2P
  DSN=AB1CD2.A.FORT
    DSORG=PO RECFM=FB  LRECL=00080 BLKSIZE=03120 DATE=80-12-08
    ALLOC=000008TR UNUSE=000000TR DIR=001 MEMBER=00006 VOLUME=IMS012
  DSN=AB1CD2.B.OUTLIST
    DSORG=PO RECFM=FB  LRECL=00137 BLKSIZE=03014 DATE=80-09-09
    ALLOC=000020TR UNUSE=000006TR DIR=001 MEMBER=00004 VOLUME=IMS011
  DSN=AB1CD2.ZZZ.DATA
    DSORG=PS RECFM=FB  LRECL=00080 BLKSIZE=00080 DATE=80-10-01
    ALLOC=000004TR UNUSE=000003TR DIR=      MEMBER=      VOLUME=IMS010
@QN
JEQ10090I HQED SESSION ENDS
READY

```

( M T M 情報には各項目についてキーが埋め込まれており、コメント中の任意の文字列に合わせて検索の際のキーワードにすることができる )

### 図 3.1.2 M T M の実行例

```

READY
MTM
M/VOL CD2001
M/POS 1
M/RUN
+ENTER VOLUME COMMENT OR NULL (CD2001)
BACKUP(MAY:31)
***** DSN=AB1CD2.MAIL.DATA
+ENTER NULL(COPY), 'N'(SKIP) OR 'E'(STOP)

```

```

MOUNT VOLUME          1=CD1001  2=          3=          4=          5=
+ENTER 'Y'(MOUNT OK)  OR 'E'(STOP)
Y
JET134001 WAIT UNTIL VOLUME(CD2001) IS MOUNTED ON T00
JBBO08I OPERATOR INTERVENTION IS NECESSARY FOR YOUR DATA SET

DATASET IS COPIED. RTN-CODE=00 POS=001 ***** DSN=AB1CD2.MAIL.DATA
+ENTER DATASET COMMENT OR NULL (MAIL.DATA          )
MAIL JOB LIST
***** DSN=AB1CD2.PROC2.CLIST
+ENTER NULL(COPY), 'N'(SKIP) OR 'E'(STOP)

DATASET IS COPIED. RTN-CODE=00 POS=002 ***** DSN=AB1CD2.PROC2.CLIST
+ENTER DATASET COMMENT OR NULL (PROC2.CLIST          )
COMMAND PROCEDURE (MASTER)
+ENTER MEMBER COMMENT OR NULL

***** DSN=YAOAM3.WORK.DATA
+ENTER NULL(COPY), 'N'(SKIP) OR 'E'(STOP)
N

TOTAL NUMBER OF COPIED DATASETS=002
M/END
END
READY

```

ディスク上のデータセットグループを磁気テープへ一括コピーする場合、次のようにグループを選択することができる。

- A L L : 全てのデータセット。
  - S A V E : 全ての保存 ( S A V E ) データセット。
  - S H R T : 全ての短期 ( S H R T ) データセット。
  - ? G 8 0 : データセット名の先頭が特定の文字列 ( この場合 ▼ G 8 0 ▼ ) で始まっているデータセット全て。
  - ? . F O R T : データセット名の最後が特定の文字列 ( この場合 ▼ . F O R T ▼ ) で終わっているデータセット全て。
- \* データセット名: 指定したデータセットの中に書かれているデータセット全て。

## (2) S O M

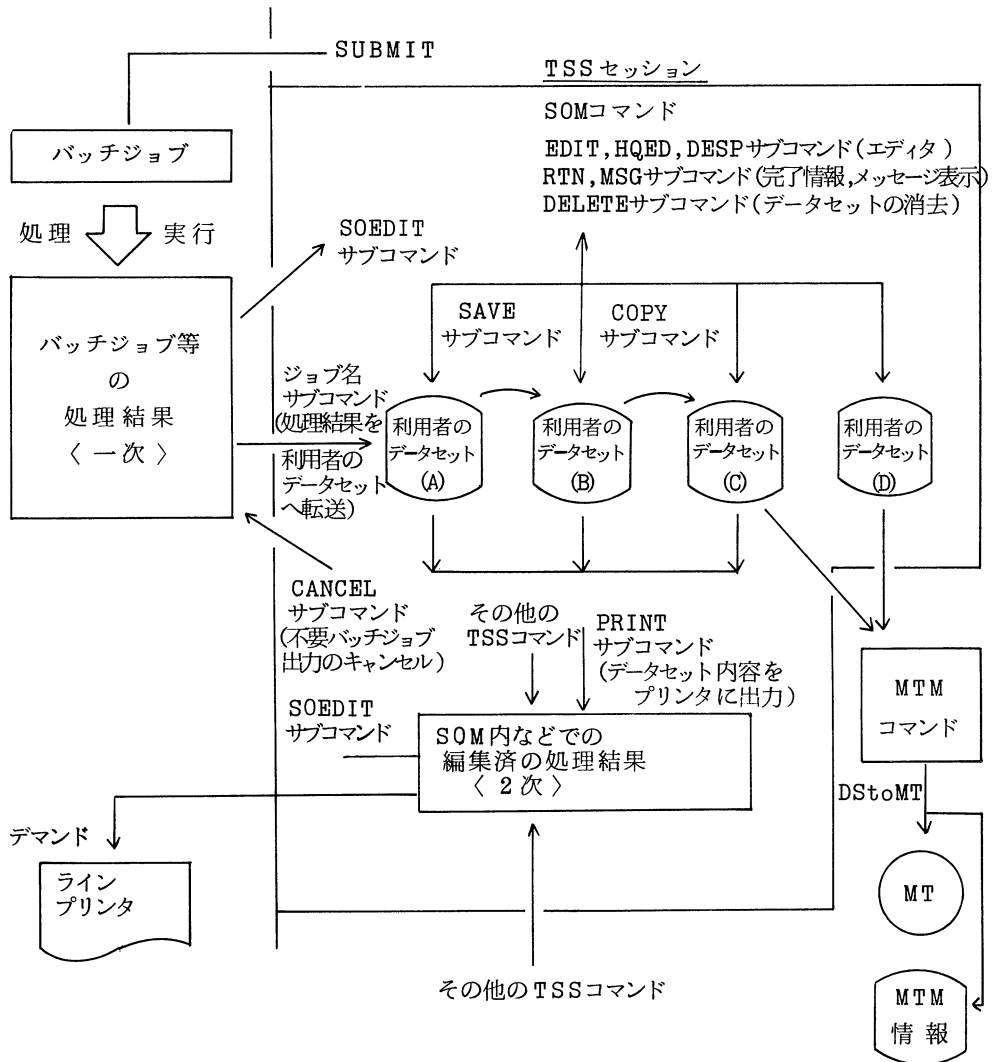
S O M は研究能率の向上と L P 用紙の節約を目的とした T S S コマンドシステムで、一連のサブコマンドにより計算結果の表示、編集、保存、出力などができる。サブコマンドには、一般 T S S コマンドの E D I T、H Q E D や、利用者のコマンドプロシジャなども使用可能で操作性を上げている。

S O M の使用により、L P 出力以前にジョブの処理状況、及び結果がつかめ、エラージョブであれば、多くの場合出力が不要となる。又、前述の M T M により、結果全体 ( オリジナル ) は保

存させておくことができるので、エディタでの編集で、必要最少限の結果のみ、LP出力ができる。研究能率が、ずっと向上する。

特に遠隔地からの電話回線からの利用者は、ジョブの結果の取り出しが、エディタでの検索により、効率よく行なえる様になっている。SOMの処理の流れと使用例を図3.1.3に示す。

図3.1.3 データの流れとサブコマンドの役割



## 使 用 例

```

READY
SOM
JOB AB1CD2(T I02345) IN EXECUTING
JOB AB1CD2(T F01955) IN OUTPUT QUEUE
JOB AB1CD2X3(J G20126) IN OUTPUT QUEUE
JOB AB1CD2X3(J G21150) IN OUTPUT QUEUE
S/*X3(JG21150)
OUTPUT *X3(JG21150) PRINT(@@SYSOUT.OUTLIST) HOLD KEEP
*-----*
NO.  STEP    PROC RTN-CODE    INFOMATION                CPU-TIME    REGION
  1  FORT          0004                      OMIN,00.19SEC 2112KB
  2  GO            0000                      OMIN,00.65SEC 1060KB
*-----*
S/?
COMMAND! JOBNAME(JOB....), STATUS, EDIT, HQED, DESP, SOEDIT, PRINT,
        SAVE, COPY, CANCEL, DELETE, ?, END, QUIT, ALLOCATE, RTN, MSG
S/SAVE @STORAGE(ORIGINAL)
S/HQED
HQED @@SYSOUT.OUTLIST
:
:
@QS
S/SAVE @STORAGE(EDITED)
S/PRINT
S/QUIT
READY

```

S O Mの主なコマンドの機能を次に示す。各利用者ごとにオプションが設定でき、又、保存できるので、S O Mのセッションをまたがっての使用でも、オペランドの指定が不要のように操作性を上げている。

- |   |                           |   |
|---|---------------------------|---|
| ① | ジョブ名                      | 出力結果の取り出しを行ないたいジョブを選択する。<br>あらかじめ決められているデータセットに出力結果が入る。     |
| ② | PRINT                     | 出力結果の入っているデータセットの内容をLP出力する。<br>LPの出力先が選択できる。(デマンド、MAIL、RJE) |
| ③ | SAVE                      | 出力結果の入っているデータセット(標準では、短期の作業用)の内容を別の保存データセットにセーブする。          |
| ④ | EDIT/HQED/<br>DESP/SOEDIT | 各種エディタを使用して、出力結果を編集する。                                      |
| ⑤ | STATUS                    | ジョブの処理状況を表示する。  |
| ⑥ | RTN/MSG                   | ジョブの完了情報及びメッセージを抽出して表示する。                                   |
| ⑦ | O/OS/OL                   | 各種オプション値を設定し表示する。   |

オプション

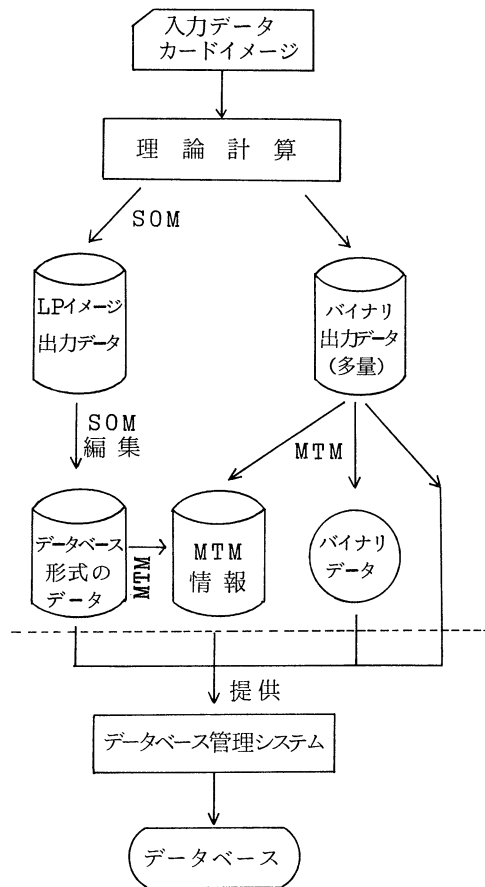
- a. 出力結果を一時入れる作業データセット名
- b. PRINTコマンドによるLP出力の出力先
- c. SOM内で、展開されるTSSコマンドの表示
- d. SOMセッション開始時のSTATUS表示

⑧ TSSコマンド/コマンドプロシジャ 一般のTSSコマンドやコマンドプロシジャを実行する。

(4) 日常的な計算結果をデータベースへ

データベースを作成する際の困難の一つはデータの収集である。ここでは理論計算から得られる数値データを収集する手続きを考えてみよう。図3.1.4がMTMとSOMを利用した試案である。ここで重要な点はデータを計算機システム（磁気テープも含めて）の外に出さないことである。この条件が満足されれば実験データの場合でも同じである。データをバイナリ形式の多量データとラインプリンタに出力していた目で読み易いデータの二種類に分類する。バイナリ形式のデータはディスク上または磁気テープ上のデータセットの形でMTM情報と共にデータベース管理システムに提供する。ラインプリンタイメージのデータはSOMでディスク上に出し、データベースの要求する形式のデータに特別のコマンドプロシジャを用いて編集し、MTM情報と共に管理システムに提供する。点線から上の手続きは研究者のデータベースをほとんど意識しない日常の手順になるだろう。提供するかどうかはもちろん提供者の判断で

図3.1.4 データ収集の手続き



ある。提供の作業は磁気テープを経由しなければMTM情報の入っているデータセット名を管理システムに通知することのみである。

-- SOM --

```
[1] jobname /dsname/
[2] PRINT /dsname/,/msgclass/,/cnt1/
[3] SAVE dsname
[4] COPY dsname1,dsname2
[5] END
[6] CANCEL /jobname/,/Q/
[7] DELETE /dsname/,/Q/
[8] QUIT /Q/
[9] EDIT /dsname/,/option/
[10] HQED /dsname/,/option/
[11] DESP
[12] SOEDIT
[13] STATUS /jobname/
[14] RTN /dsname/
[15] MSG /dsname/
[16] O /dsname/,/msgclass/,/echo/,/status/
[17] OS /dsname/,/msgclass/,/echo/,/status/
[18] OL
[19] ALLOCATE dsname,space1,/space2/,/directry/
[20] LISTDI /dsname/
[21] LISTDM /dsname/
[22] LISTDS /dsname/,/option/
[23] "tss-comnd /operands/
[24] ?
[25] HELP /comnd/
[26] EXAMPLE /no./
```

-- MTM --

```
[1] VOLUME volume
[2] POS pos
[3] PARM /parm/
[4] CHECK
[5] RUN /volume/,/pos/
[6] END
[7] LABEL /type/
[8] DEN /den/
[9] MTMDSN /dsname/
[10] INFORM
[11] "tss-comnd /operands/
[12] ?
```

このMTMとSOMは、コマンド/コマンドプロシジャ及びプログラムの複合体で、拡張が容易な反面、きめこまかな処理については弱い面がある。このようなTSS端末からの総合的な出力検索・編集、データセット管理は始まったばかりであり、メーカーサポートも含めて、強力なシステム作りが必要であるが、この方向は、研究成果のデータベース化、計算結果の再利用（図形表示、論文作成）などオートメーション化と研究能率の向上に結びつくものである。

### 3.2 QCLDB (量子化学文献データベース)

技 官 山 本 茂 義  
北海道大理 富 樫 雅 文  
助 教 授 柏 木 浩  
センター長 諸 熊 奎 治

QCLDB(Quantum Chemistry Literature Database、量子化学文献データベース)は、分子に対する非経験的理論計算を扱った文献データベースである。

分子科学の分野での文献データベースとして著名なものとしては、東大で公開されているCAS (chemical Abstract Search)を挙げることができるが、量が膨大すぎることに、内容が必ずしも量子化学関係の研究者に合致したものではないことなどのため、量子化学研究者自ら、新しいデータベースを建設しようという提案がなされ、1976年8月より活動が続けられている。QCLDBの特徴は、分子化学の専門家が実際に原文献に接触してデータを収録し、自身の判断に基づく分類及びコメントの筆が施されており、そのために質の高いデータベースであるという点である。

現在QCLDBは、北大理学部大野公男教授を中心とする、全国十数ヶ所の量子化学関連の研究機関の研究者から成るQCLDBグループによって運営されている。現在1977年～1980年前半までの2146件のデータが登録されている。収録雑誌数は20誌に及ぶ。(表3.2.1)

表3.2.1 収録文献

#### JOURNAL CODEN

BCSJA8	BCSJ	BULL.CHEM.SOC.JPN.
CJCHAG	CJC	CAN.J.CHEM.
CHPLBC	CPL	CHEM.PHYS.LETTERS
CMPHC2	CP	CHEM.PHYS.
IJQCB2	IJQC	INT.J.QUANTUM CHEM.
IJQSAF	IJQS	INT.J.QUANTUM CHEM., SYMP.
INOCAJ	IC	INORG.CHEM.
JACSAT	JACS	J.AM.CHEM.SOC.
JCFTBS	JCSF2	J.CHEM.SOC., FARADAY TRANS. II
JCPSA6	JCP	J.CHEM.PHYS.
JMOSA3	JMSP	J.MOL.SPECTROSC.
JMOSB4	JMST	J.MOL.STRUCTURE
JPCMAX	JPC	J.PHYS.CHEM. ('79-)
MOPHAM	MP	MOL.PHYS.
NJCHD4	NJC	NUOV.J.CHIM. ('79-)
PLRAAN	PRA	PHYS.REV.A
TCHAAM	TCA	THEORET.CHIM.ACTA
TELEAY	THL	TETRAHEDRON LETTERS
TETRAB	TETH	TETRAHEDRON



QCLDBの各メンバーが収録したデータは、分子研電子計算機センターに集められ、査読・編集された上で一般公開される。データの管理・維持は分子研センターが行っており、その意味で分子研センターはQCLDBの中核的機能を担っていると言える。

バッチジョブによる、データのラインプリンターへの一括出力という従来のoff-lineサービスに加え、1980年7月よりon-lineサービス、即ちTSSによる検索サービスを開始した。これはメーカー提供の情報検索システムORIONに北海道大学理学部富樫雅文氏がさらに機能を強化したシステムを用いている。これによって、ユーザーは今までよりさらに能率的に、望むデータを入手することが可能となった。

検索の実際を図3.2.1に示す。ユーザーは端末の前に腰をおろし、“QCLDB”というコマンドを投入しさえすれば、ただちに検索モードに入ることができる。ORIONシステムのサブコマンド等についての解説は、富樫氏作製のHOWコマンド、WHATコマンドによる得ることができる。(図3.2.2、図3.2.3)

ORIONは豊富な検索機能を有している。ページ、ボリューム、年号といった数値的データに対しては、数値の範囲による検索(レンジサーチ)が可能である。また、後方一致検索、論理演算、定型的質問群を保存するプロファイル機能、検索結果を加工、編集するためのレポート機能等が含まれている。

### 図3.2.1 検索の実際

```
READY
QCLDB
THE EXPLANATION ON SUBCOMMAND OF ORION-QCLDB CAN BE OBTAINED BY INPUT
'HOW HOW', 'HOW WHAT', 'WHAT HOW' OR 'WHAT WHAT'.

ORION 02-00
WELCOME TO QUANTUM CHEMISTRY LITERATURE DATA BASE
LAST UPDATE OF QCLDB IS ON 801218 (DATE) , 152854 (TIME)
 2146 PAPERS HAVE BEEN COMPILED IN THE QCLDB

ENTER YOUR REQUEST
 1/ H2O
    168 ITEMS SAVED AS SET 1
 2/ JACSAT
    391 ITEMS SAVED AS SET 2
 3/ YE EQ 80
    386 ITEMS SAVED AS SET 3
 4/ FIND (1 AND 2 AND 3)
*   6   4/ (1 AND 2 AND 3)
 5/ DISPLAY ALL

ITEM 1

AUTHOR(S)      NGUYEN, SANA, LEROY, DIGNAM, HEGARTY
JOURNAL        JACSAT
VOLUME         102
PAGE           573
YEAR           80
COMPOUND(S)    CHNO, C2H3NO, H2O, CH3NO2, C2H5NO2
METHOD(S)      RHF
BASIS SET(S)   GMIN
PROPERTY(IES) REAC
COMMENT        REACTION OF WATER WITH R-CNO
```

### 図3.2.2 HOWサブコマンド

```
ENTER YOUR REQUEST
1/ HOW
```

```
ABOUT WHAT ?
ENTER NAME OF THE TOPIC TO BE EXPLAINED
: FIND
```

-- HOW TO USE FIND --

CASE 1 : SEARCH DOCUMENTS THAT CONTAIN A KEYWORD "H2O".

```
+-----+
| ENTER YOUR REQUEST          -----> FROM ORION      |
|   1/ FIND H2O              -----> FROM USER      |
| *   111   1/ H2O           -----> FROM ORION      |
+-----+
```

"\*" SYMBOL IN THE LAST LINE MEANS THAT THE LINE IS ISSUED BY ORION.  
"111" IS THE NUMBER OF RECORDS FOUND BASED ON THE SEARCH TERM. IS ALSO CALLED "HIT COUNT".  
"1/ H2O" IS AN ECHO BACK FROM THE SYSTEM.

CASE 2 : SEARCH DOCUMENTS THAT CONTAIN A KEYWORD "H2O".

```
+-----+
| ENTER YOUR REQUEST          |
|   1/ H2O                    |
| *   111   1/ H2O           |
+-----+
```

THE COMMAND NAME FIND CAN BE OMITTED IF THERE IS ONLY ONE SEARCH TERM. ~~~~

### 図3.2.3 WHATサブコマンド

```
1/ WHAT
```

```
ABOUT WHAT ?
ENTER NAME OF THE TOPIC TO BE EXPLAINED
: FIND
```

```
+-----+
| FIND |
+-----+
```

-- FUNCTION --

'FIND' COMMAND SEARCHES THE DATA BASE AND PICKS UP RECORDS THAT SATISFY SEARCH CONDITION SPECIFIED BY USER AS OPERANDS OF THE COMMAND.  
SEARCH CONDITION IS EXPRESSED AS A LOGICAL EXPRESSION IN WHICH KEYWORDS, NUMERICAL CONDITIONS AND RECORD SET NUMBERS ARE CONNECTED WITH EACH OTHER BY LOGICAL OPERATER.

```

-- SYNTAX --
+-----+
| FIND ^| INDEX_SEARCH_TERM |
|      | RANGE_SEARCH_TERM |
|      | STEM*[ALL]          |
|      | RECORD_SET_NUMBER |
|      | PREFIX_LIST       |
|
| [|^AND^NOT^| | INDEX_SEARCH_TERM |      ]
| ^AND^      | | RANGE_SEARCH_TERM |
| ^OR^       | | STEM*[ALL]          |
|            | | RECORD_SET_NUMBER | ...
|
| [^END
|   [^LIST/^NOLIST]
|   [^SAVE/^NOSAVE] ]
|
|                                     <<^END >>
|                                     <<^LIST>>
|                                     <<^SAVE>>
+-----+

```

-- OPERANDS --

```

INDEX_SEARCH_TERM
      : IS SYMPLY A KEYWORD OR A PAIR OF FIELD NAME AND KEYWORD.
FORMAT :
+-----+
| [INDEX_PREFIX DELIMMITER] CHRACTER_STRING |
+-----+
RANGE_SEARCH_TERM

```

1980年より、一部のライブラリプログラムの使用統計をとっているが、QCLDBは着実にその利用者数を増進させている。コンピュータ利用のTSS志向に伴い、今後on-line利用が主流になることは必至であろう。一般にデータベースの建設には、多くの労力、人材と時間を要するが、このQCLDBも例外ではない。実際のデータ収録は大学院生等のボランティアに頼っている。広報活動等を通じて、ユーザーの発掘に務めることは、データ収録者に対する責務でもあると考える。現在収録雑誌数は20程であるが、ユーザー・QCLDBグループの協力があれば、さらにこの数を増やしていくことも夢ではない。今後とも皆様のご協力を期待します。

### 3.3 カラーグラフィックシステムCANVASの開発と応用

係 長 伊 奈 諭

#### 3.3.1 はじめに

日常生活の中でのカラー化は非常に進んでいて見るものはほとんど豊富な色彩を伴っている。ところが計算機の入出力部分に目を移すと依然として数字・文字の羅列かペン書きのあまり見映えのしない、面白みのない図形であふれている。人間はもっとカラフルな分り易い絵を描き他人に伝える能力をもっているのだから計算機側もその域に少しでも近づけるよう努力すべきだろう。こうした観点から従来の大型計算機に欠けている部分を補い、情報量の多い、人間に分り易い図形や画像を扱うためには現在の技術からいって高性能カラーグラフィックディスプレイ（以下CGDと呼ぶ）が適当であろう。とはいっても残念ながらほぼ自然色の出せるCGDは大型計算機メーカーの標準サポートには入っておらず大学の大型計算機センターでも導入し一般サービスを行ったということは聞いていない。したがって当センターでは独自のシステムおよびソフトウェアCANVAS（Computer Assisted Natural color View creAting System）を開発し、一部応用を行ったので以下に紹介する。

#### 3.3.2 高性能カラーグラフィックディスプレイ（CGD）の位置付け

このタイプのCGDは従来でもリモートセンシングや医用画像、CT（Computer Tomography）などの分野で純粋の画像処理用として主としてミニコン制御で使用されてきているものである。しかしこれをいわゆる一般図形処理用の出力装置として使いこなしている例は日本ではあまりないようである。本CGDはTVスキャンタイプでありカラーテレビのように線情報のみでなく面情報を色調、階調を変えることによって扱える点に特長がある。CGDを使用することによって今までできなかったような図形処理を実現できる可能性が開ける。特に豊富な色数により人間の視覚に訴えるような教育用、研究発表用資料の作成には最適である。CGDのハードウェア上の特徴は次の三点にある。

- ① 約262,000色のカラー表示ができる。
- ② 面情報（ぬりつぶし）を表現できる。
- ③ 精度が粗い（512×512ピクセル）

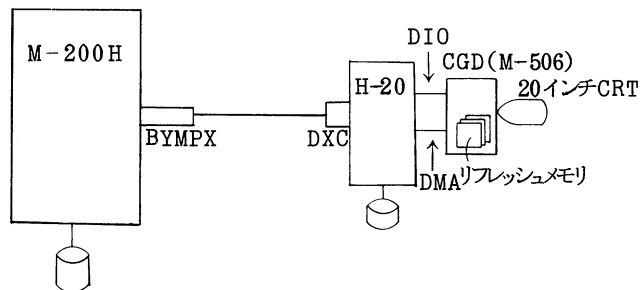
以上の点からベクトル画では③の特徴のために、従来からあるランダムスキャンリフレッシュタイプやラスタースキャンストレージタイプのグラフィックディスプレイと比べてやはり見劣りするのには止むを得ない。しかし色をつけてぬりつぶした面画を描くのは得意であり、粗さも気にならず前記のタイプに比べてはるかにすぐれている。

### 3.3.3 システム構成

#### 1. ハードウェア構成

図3.3.1に示すようにCGDがミニコン(H-20)とDIO(デジタル入出力機構)バスとDMA(ダイレクトメモリアクセス機構)バスを介して接続されており、かつH-20はDXC(データ交換制御装置)を介して大型コンピュータ(M-200H)と接続されている。ここでH-20はトンネルコンピュータであって単にM-200HとCGDとの仲介役となっている。したがってCGDへの出力、CGDからの入力はすべてM-200Hによって制御される。

図3.3.1 ハードウェア構成

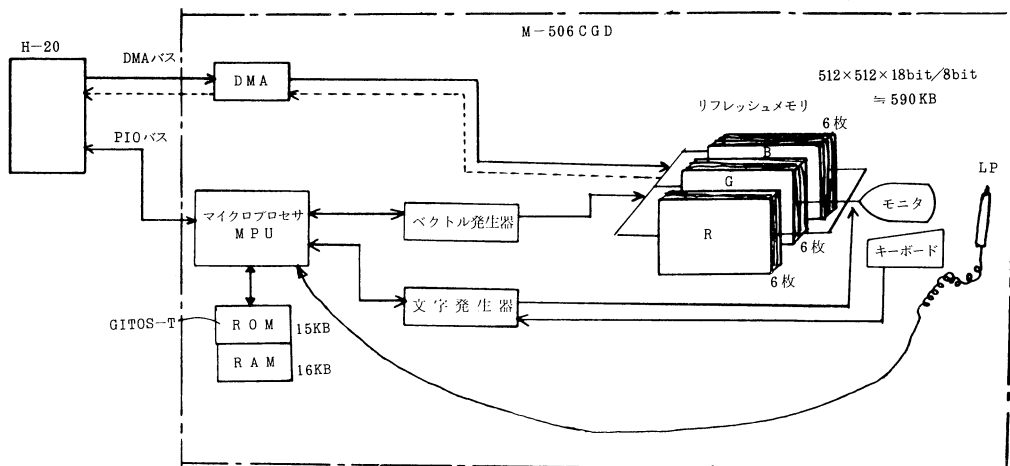


#### 2. CGDのハードウェア

CGDのハードウェア構成と仕様を図3.3.2に示す。

図3.3.2 CGDのハードウェア

仕様	口径	20インチ
	表示	28cm × 28cm
	分解能	512 × 512
	濃淡レベル(各RGB)	64階調(6BITS)
	全表示色	$2^{6 \times 3} - 1 = 262,143$ 色 → 自然色
	オプション	ライトペン クロスヘアカーソル



C G Dには作画モードとして次の二つを可能とした。

- ① ベクトル作画モード ( P I Oモード)
- ② 一括転送作画モード ( D M Aモード)

(1) ベクトル作画モード ( P I Oモード)

P I Oバスを経由してH-20 ( ミニコン ) から送られる作画命令をM P Uがひとつずつ解釈してベクトル ⇔ ドット変換を行いながらリフレッシュメモリ ( R M ) に書き込むモードである。したがってベクトル数が大きい場合にはオーバーヘッドタイムが大きくなり作画時間が長くなる。通常の図形処理はこのモードで行われることが多い。

(2) 一括転送作画モード ( D M Aモード)

作画データがあらかじめ $m \times n$ のマトリクス上の値として分っているような場合に利用できる。C G DのM P Uを介することなくM-200Hのメモリ上のマトリクスデータをH-20のD M Aバスを経由して直接C G Dのリフレッシュメモリに書き込むことができるので全画面を高速に作画できる。

### 3.3.4 CANVASソフトウェアの概要

#### 1. 目的

カラーグラフィック分野のメーカサポートソフトウェアは従来のリフレッシュタイプやストレージタイプのソフトウェアと比較して機能がまだ未熟であり体系化されていない部分が多い。したがって機能が少なくハード寄りのため一般ユーザにとっては非常に使いづらい。そこで重要なのは従来のタイプのグラフィックディスプレイの使い勝手とあまり変わらないように一般ユーザにとってハードウェアをあまり意識させないで容易に使用できるような機能を提供することである。

#### 2. 方針

- ① 座標系は実数型とする。
- ② 仮想画面を導入する。
- ③ サブルーチン名、コーリングシーケンスなどは従来のソフトウェア ( X Y Pルーチンなど ) になるべく合わせる。
- ④ 機能を体系的に分類し幅広くサポートする。

#### 3. 体系

予定も含めて分類すると図3.3.3のようになる。現在、ユーザコーラブルサブルーチンの数は50数本になる。

### 3.3.4 応用分野

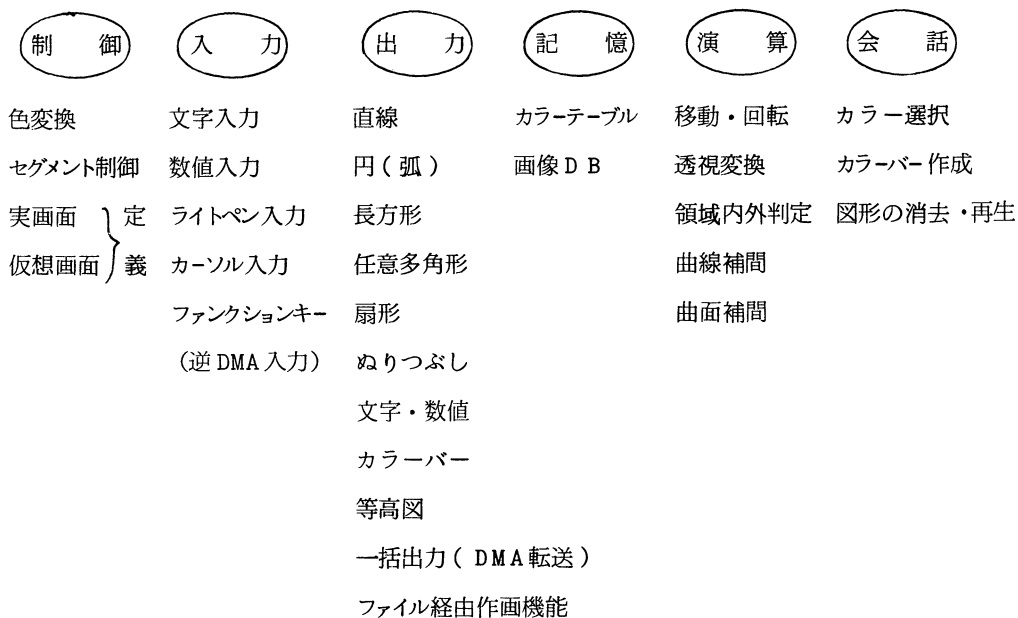
一般的な応用分野としては次のものが考えられる。

- ・画像処理（リモートセンシング、医用画像、CT、パターン認識）
- ・CAD（Computer Aided Design）
- ・アニメーション製作
- ・コンピュータアート（芸術）
- ・デザイン（柄など）

分子研での利用目的としては当面次のものがある。

- ・分子の電子密度分布図
  - 等高図表示
  - 立体表示
- ・分子構造模型表示
- ・その他グラフなど一般図形のカラー表示

図 3.3.3 CANVAS の体系

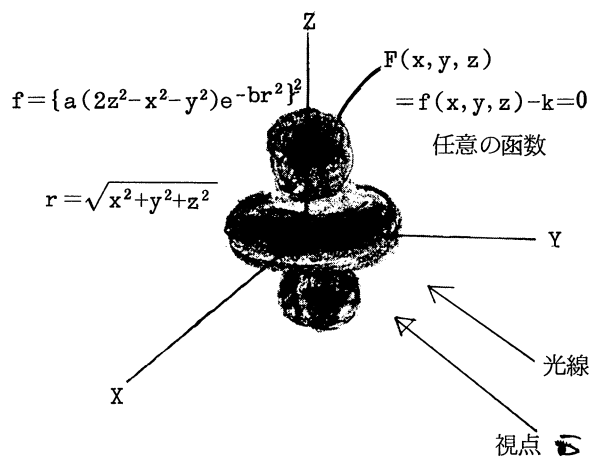


### 3.3.5 応用例

応用例として、分子・原子の電子密度分布を等高図表示したものと、立体表示したものを示す。

#### 1. 電子密度分布の立体表示

例として鉄金属の  $3d_{z^2}$  軌道の電子密度分布を示す。（図 3.3.4 参照）



これは3次元函数  $F(x, y, z) = 0$  に対して視点の方向から平行光線を照射したと仮定して、函数面での光の反射強度を計算し、それを色彩の濃淡に変換して表示したものである。

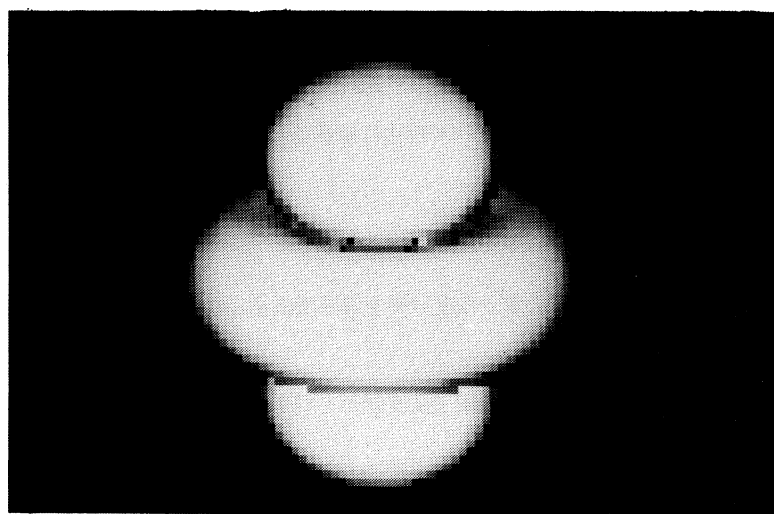
反射強度は次のように計算した。

$$I = R \times \text{RANGE} \times \cos \theta + \text{BACK}$$

$R$  …… 光線の強度  
 $\text{RANGE}$  …… 階調幅 (  $\text{BACK} \sim 63$  )  
 $\theta$  …… 光線の方向と函数面上の法線のなす角度  
 $\text{BACK}$  …… 背景の明るさ

なおこの立体表示プログラムの原型は佐々木不可止(北大理)助教授がFACOM230-75上でストレージ型ディスプレイ用に作成されたものであり、本応用はそれに手を加えて、面情報を扱えるようにし、反射強度の算出法を変えてCANVASの特長が出せるように改良した。

図 3.3.4  $3dz^2$  軌道の電子密度分布



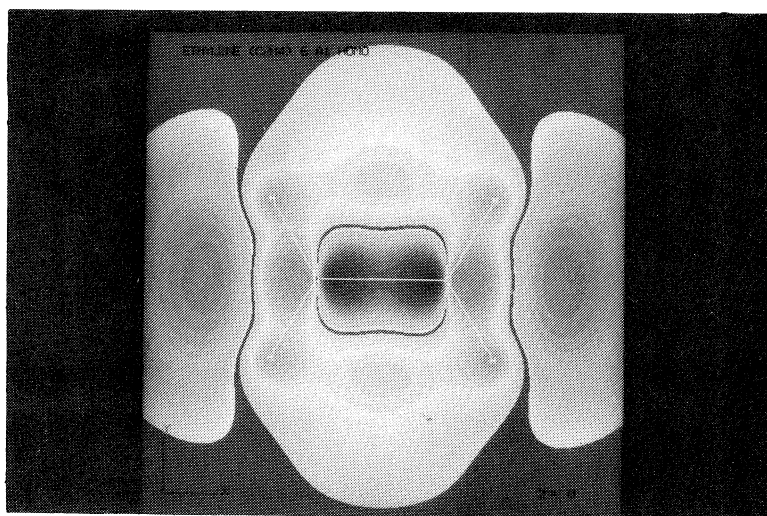


## 2. 電子密度分布の等高図表示

例としてエチレン ( $C_2H_4$ ) の  $\pi$  軌道の電子密度分布を示す。(図 3.3.5 参照)

これは非経験的分子軌道法を用いて得られたマトリクス状 ( $512 \times 512$ ) の等高図データを CGD のピクセル ( $512 \times 512$ ) 対応に疑似カラー変換したものである。カラーレベル変換に際しては線形、指数、対数変換の別を選択できる。また割り当てる色合いは簡単な関数式で自動的に与えるやり方とあらかじめ用意したカラーテーブルの内容に従って与えるやり方が利用できる。図の例は自動で与えた場合で 高  $\rightarrow$  低に従って 赤  $\rightarrow$  橙  $\rightarrow$  黄  $\rightarrow$  緑  $\rightarrow$  青  $\rightarrow$  藍  $\rightarrow$  紫 と変化させている。なお、本図の作成にあたって原データの提供は柏木浩助教授 (分子研) より受けたものであることをおことわりしておく。

図 3.3.5 エチレン  $\pi$  軌道の電子密度分布



### 3.3.6 おわりに

以上のことから分るように CGD は使い方によっては 3 次元ディスプレイの役目を十分に果たすこともでき、適用分野はまだまだこれから拡大されることと思われる。現在世にある CGD の性能は当センターのものと大同小異である。またこうした CGD のメーカー数はまだ少なくハード / ソフト両面においてサポートが不十分である。まだまだこれからの装置であり、今後はフルカラーでかつ精度がよい ( $2048 \times 2048$  程度) ものが出てくることが期待される。現状ではセンター負担が大きい。ソフトウェアの充実、大型計算機との標準インターフェースのサポートが切望される。

### 3.4 パーソナルコンピュータをインテリジェントTSS端末にする

#### 端末制御プログラムの開発

技 官 西 本 史 雄

最近、TSS端末としてパーソナルコンピュータを使用する例が増えているが、当センターでは、利用者からの接続等についての技術的な問い合わせに十分対応できるようにと、1年程前より準備してきた。HITAC VOS3 TSSの通信手順、及びパーソナルコンピュータの機能についての検討の結果、BASICのごく簡単なプログラムで、スクリーンエディタ機能を含みきわめて強力なインテリジェントTSS端末プログラムが作成可能であることがわかったので、日立のベーシックマスターレベル3及び日本電気のPC8001のパーソナルコンピュータについてそれぞれ開発し、利用者に公開した。

#### 1. プログラムの特徴

##### a. スクリーンエディタ行入力

スクリーンエディタ行入力機能を使っており、画面上の任意の情報を変更して、コマンドプログラム、データとして再びホストへ行単位で送ることができる。このことは、端末のキー入力、及び操作性を極めて良いものにし、インテリジェントなTSS端末の最大の条件となっている。

##### b. Basicによるプログラム

プログラムがBasicのみで、かつわずかのステップ数で書かれている。Basicの基本的な、いくつかの命令を理解しているだけで、プログラムの機能拡張は容易で、端末利用者のパーソナルな書きかえができる。

##### c. 割込み受信による1200ボー使用

割込み処理により、プログラムと並行して受信されるデータは、バッファに蓄えられるので、1200ボーの使用もらくらくで、特にPC-8001の場合は、フロッピーへの受信も同時にできる。

#### 2. 技術的なポイント

a. 優秀なHITAC VOS3 TSS手順と、マイコンのスクリーンエディタ機能の結合  
従来のマイコン端末や、市販のTSS端末のデータ送受信は左下の図3.4.1のループで行われている。

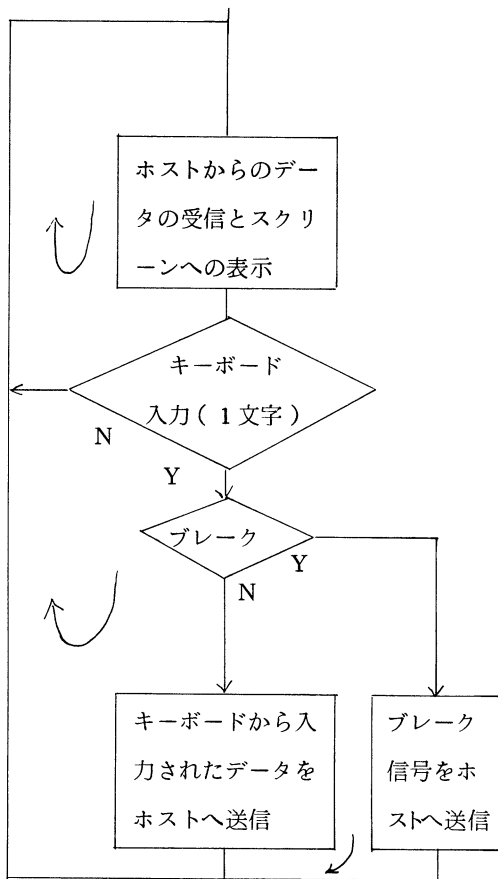
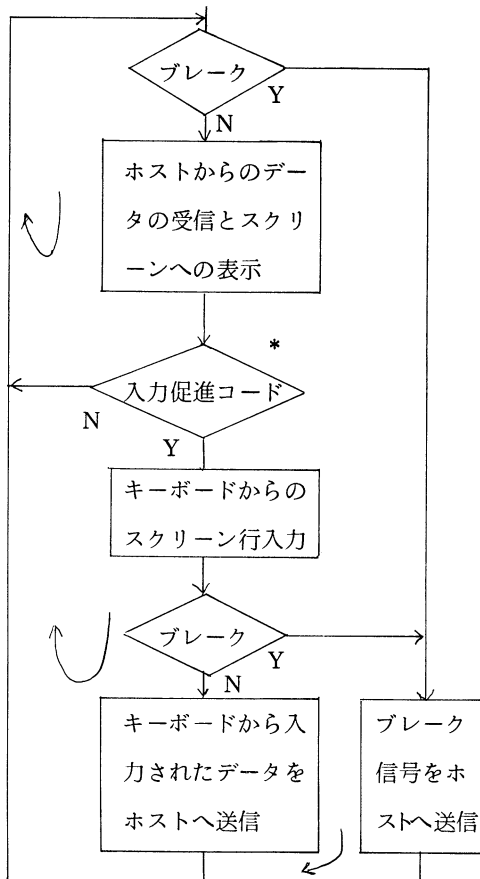


図 3.4.1



\*) ホストからベルコードが送られてくると入力モードに切りかわり、スクリーンエディタによる行入力を行なう。

図 3.4.2

この端末制御プログラムでは、発想を切りかえて、右上の図 3.4.2 のループを採用した。

2つのループの違いは、端末よりの入力時に1文字読み(入力)をするか、スクリーンエディタによる行入力を行なうかどうかである。HITACのVOS3 TSSでは、次に端末からの入力が必要とする場合には、入力促進コード(標準ではベル(7)<sub>16</sub>)が送られてくるので、入力モードに切りかえて端末を入力に専念させることができる。このベルコードは、「ピッ」という音を発し、人からみれば「入力しなさいよ」という意味を持っているので、マイコンにもそのことを教えてやれば、「がむしゃらに、大型機やキーボードからの入力があるかどうか1文字ずついつも監視して、スクリーンエディタ入力という便利なサービスにまで手がまわらない」ということをなくすることができる。

#### b. 機能の豊富なマイコン Basic (インタプリタ) の最大利用

現在、ほとんどのパーソナルコンピュータで採用されているのが、マイクロソフト社の拡張 Basic で、その機能は強力かつ豊富である。機械語やアセンブラで端末制御プログラムを作る必要が全くない。

##### (1) LINE INPUT K \$

この命令 1 つで、スクリーンエディタ機能が使える。カーソルを自由にし時には語単位に飛びながら) 動かしたり、文字の挿入、削除が簡単、キーのリピート機能まで持っている。

##### (2) INPUT \$(n, p)

指定した回線 (大型機からの) バッファからデータを受けとる。まとめて数十文字を受けとるので、処理効率がよく、1200 ボーのスピードでもプログラムには負担がかからない。

### 3. 今後のマイコン端末と端末制御プログラム

現在のパーソナルコンピュータは、端末としても使えるようにはなっているけれども、画面の見やすさ、キーボードの操作性をみると、いまひとつであり、一方、市販の T S S 端末は、相対的に機能の低さが目立つようになってきた。周辺機器も合わせて、パーソナルコンピュータの低価格が今後も進み、高速プリンタ、フロッピー、バブルカセットと組み合わせたシステムパーソナルコンピュータによる T S S 端末化が一般的になるものと見られる。利用者が、自分に使い勝手のよい端末プログラムを作成する際にこのプログラムの発想を参考にいただければ幸いである。

## 4. 一 般 報 告

### 4.1 ライブラリ・プログラムの収集と開発

分子科学・生物科学のためのライブラリ・プログラムの充実、学術研究に大いなる便宜を供するものである。当センターは、設立以来ライブラリの開発・整備に努めているが、皆様のご協力を得て、現在56年度の開発計画を推進中である。昭和55年度の開発計画は表4.1.1の通りであった。また登録済みのライブラリ・プログラムの一覧を表4.1.2に示す。

表4.1.1 昭和55年度ライブラリ・プログラム開発

	氏 名	所 属 ・ 職 名	内 容
1	小 杉 信 博	東京大理学研究科 大学院学生	GSCF 2の開発整備
2	江 崎 俊 之	名古屋大工 研究生	ドラッグデザインのためのプログラム QSARの開発
3	佐々木 不可止	北海道大理化学第二 助教授	新C Iプログラムの開発
	野 呂 武 司	” 助手	
	富 樫 雅 文	北海道大理物理 研究生	
4	野 村 力	北海道大理化学第二 研究生	COMICAL2・ATOMCIの改良整備
5	田 中 皓	北海道大理化学第二 講師	ALCHEMYの整備
6	別 府 良 孝	名大理 研究生	高速固有値ルーチンNICER開発
7	渡 辺 義 孝	大阪市大理 大学院学生	図形出力プログラムJAPICの開発 整備
8	足 立 裕 彦	大阪大工 助手	D V - X $\alpha$ 法による分子軌道計算の プログラムの開発整備
	福 谷 和 秀	大学院学生	
9	藤 村 直 美	九大工情報工学 助手	プログラム解析ルーチンFORDAP、 FORTFLOW、FCMPの整備
10	田 中 皓	北海道大理化学第二 講師	量子化学データベースのレベルアップ
	細 矢 治 夫	お茶の水大理 助教授	
	広 田 文 彦	静岡大教育 助教授	
	西 本 吉 助	大阪市大理 教授	
	山 辺 信 一	奈良教育大教育 助教授	

11	山田景子	お茶の水大理	大学院学生	量子化学文献データベースのデータ 作成
	菖蒲真紀	お茶の水大理	大学院学生	
	山下晃一	京大工石油化学	大学院学生	
	松下淑夫	大阪市大理	大学院学生	
12	大沢映二	北海道大理	助教授	MMI/PI、MCA/QCFF 整備 Rasmussen CFF、MM2 整備
	伊藤晴子	愛知教育大	非常勤講師	ORTEP、UNICS-3、EXAFSの 改良整備
佐々木教祐	名大理	助手		

表 4.1.2 当センター登録済みライブラリプログラム一覧

==== IMS PROGRAM LIBRARY ====

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

FIELD CODE : M110  
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 : 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 HOND0G AB INITIO LCAO-SCF-MO METHOD AND GRADIENT METHOD  
005 HONDO AB INITIO LCAO-SCF-MO METHOD  
006 SCEP SELF-CONSISTENT ELECTRON PAIRS METHOD  
007 IMSPAC AB INITIO SCF MO CALCULATIONS  
008 RKNGAU RIKEN GAUSSIAN70  
009 IMSPAK GEOMETRY OPTIMIZATION BY AB INITIO SCF-MO CALCULATIONS  
010 COMICA A PROGRAM SYSTEM FOR CONFIGURATION MIXING CALCULATION(CI)  
011 IPCREF EFFECTIVE HAMILTONIAN MATRIX CONFIGURATION INTERACTION(EFCI)  
012 PA200 LIST OF ONE- AND TWO-ELECTRON INTEGRAL LABELLS  
013 PA300 EVALUATE ONE- AND TWO-ELECTRON INTEGRALS  
014 PA409 CLOSED-SHELL SCF AND POPULATION ANALYSIS PACKAGE  
015 PA600 ONE-ELECTRON PROPERTIES PACKAGE  
016 INTCPY INTEGRAL COPY ROUTINE OF POLYATOM SYSTEM  
017 GAUS76 AB INITIO MO CALCULATION. GAUSSIAN 76 M-VERSION.  
018 ALIS AB INITIO MCSCF PROGRAM FOR ATOMS AND MOLECULES  
019 JAPIC1 PLOTTER WRITING OF MO AND DENSITY BY AB INITIO METHODS  
020 JAPIC2 PLOTTER AND GRAPHIC DISPLAY WRITING OF MO AND DENSITY

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MNDO	MNDO SCF CALCULATIONS
002	MINDO3	MO CALCULATIONS BY MINDO/3 METHOD
003	CNINDO	MO CALCULATION BY CNDO AND INDO METHODS

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	HMO	HUECKEL MOLECULAR ORBITAL CALCULATION

FIELD CODE : SC20  
FIELD TITLE : CRYSTALLOGRAPHY.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	NASH	SEARCH FOR NEAR ATOMS IN A PROTEIN
002	STERED	STERED DRAWING OF SKELETAL MODEL OF PROTEINS.
003	CONVRT	CONVERSION OF PNL 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

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

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

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	MDAN03	MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MDAN03	MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE

FIELD CODE : AS30  
FIELD TITLE : LIQUID AND SOLUTION.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MDAN03	MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE
002	MDSALT	MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION FOR MOLTEN SALT

FIELD CODE : B110  
FIELD TITLE : BIOMOLECULES.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	NASH	SEARCH FOR NEAR ATOMS IN A PROTEIN
002	STERED	STEREO DRAWING OF SKELETAL MODEL OF PROTEINS.
003	CONVRT	CONVERSION OF RNL DATA FORMATS TO PSCPS FORMAT
004	DISMAP	TRIANGULAR DISTANCE MAP OF A PROTEIN
005	ASA	ACCESSIBLE SURFACE AREA OF A PROTEIN
006	BENDER	PARAMETER CALCULATION FOR HYRON'S BENDER MODEL
007	SUPPOS	SUPERPOSITION OF TWO SIMILAR CONFORMATION OF PROTEIN(S)
008	QDD	GRAPHIC PROGRAM FOR QUANTITATIVE DRUG DESIGN

FIELD CODE : EG10  
FIELD TITLE : EDUCATIONAL TOOLS.

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

FIELD CODE : EG20  
FIELD TITLE : GENERAL UTILITIES.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	LIBE	SOURCE PROGRAM MAINTENANCE UTILITY
002	FCBSD	FILE ACCESS ROUTINES WHICH CAN BE USED IN FORTRAN PROGRAM
003	PSTOPO	CONVERT FORTRAN SOURCE DATA FROM PS-DSN. TO PO-DSN(MEM).
004	POTOPS	CONVERT FORTRAN SOURCE DATA FROM PO-DSN(MEM). TO PO-DSN.
005	REPORT	PRINT-OUT TABLES & GRAPHS OF MODULE-REFERENCE FROM LKED.MAP
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 MAKER FOR FORTRAN PROGRAM PACKAGE
012	SFORT	FORMAT TRANSFORMER FOR FORTRAN COMPILE LIST
013	PSPART	EXTRACT SPECIFIED ROUTINES FROM A FORTRAN PROGRAM PACKAGE

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	QDD	GRAPHIC PROGRAM FOR QUANTITATIVE DRUG DESIGN
004	ORTEP	ORTEP DRAWING OF MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURE

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

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



\*\*\*\* TOTAL NUMBER OF UNIQUE PROGRAMS \*\*\*\*  
73

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

ALIS	ASA	ASSIGN	ATOMHF	BCRES3	BC3	BENDER
CGTOFD	CGTORL	CNINDO	COMICA	CONVRT	CV0A	DISMAP
DISPL?	DNMR3	ENVLOP	FCBSD	FCMP	FLOW	FORDAP
GAUS76	HLISP	HMO	HONDO	HONDOG	IMSPAC	IMSPAK
INTOPY	IPCREF	JAMOL3	JAPIC1	JAPIC2	LAOCN3	LIBE
LSRES3	LSVR3	MDAN03	MDSALT	MIND03	MMIPI1	MMIPI3
MMIY3	MM2	MNDQ	NASH	NCTB	NICER	ORTEP
OTHELO	PA200	PA300	PA409	PA600	PFORTV	PGCCMB
POTOPS	PROFIL	PSPART	PSTOPO	QCHECK	QCLDB	QDD
REDUCE	REPORT	RKNGAU	SALS	SCEP	SFORT	STEREO
STINGY	SUPPOS	UNICS3				

IMS COMPUTER CENTER: UPDATE DATE = 81-04-18

## ○ Q C P E プログラムサービス

QCPE(Quantum Chemistry Program Exchange)より購入したプログラムのうち、#33～#407(うち88、92、104、161、189、241、245、375、377、406を除く)計365本のプログラムがライブラリとして登録され、磁気テープに収められている。毎年プログラムが新規追加されており、昭和55年6月に#274～#382の40件、昭和56年2月に#394～#407の12件のプログラムが更新あるいは新規登録された。このQCPEには、分子科学に関連の深い、汎用性の高いプログラムが収められており、GAUSSIAN 80、HONDOといった著名なプログラムも含まれている。このうち特に重要と判断されるプログラムについては、コンバージョンの後、IMSプログラムライブラリの1メンバーとして登録されることも少ない。

## 4.2 講習会・プログラム相談

### 4.2.1 講習会等開催

- (1) 新システム(M-200H/M-180 LCMP)の運用説明と、MTM・SOM コマンドシステムについての講習会

昭和56年2月17日と3月4日に新システムの運用説明とMTM・SOMについての講習会を開催した。

### 4.2.2 プログラム相談報告

プログラム相談は、一般プログラム相談と応用プログラム相談の2本立てで行なっている。

- (1) 一般プログラム相談

時間帯は、昼休みを除いた計算機オープンサービス時間内にプログラム相談室で行なっている。相談内容はFORTRAN言語(コンパイラ)、オープンバッチの利用方法、データセットについて、TSS、シスアウト編集、カタログドプロシジャ、ユーティリティの使い方などの一般利用を行なう上での相談である。

## (2) 応用プログラム相談

相談時間は月曜日～金曜日の13:30～17:00、相談員は所内外の研究者（主に理論系受託大学院学生）に委嘱している。相談内容は、ライブラリ・プログラム、中でも特にIMSPACK、JAMOL3といった大型ab initio 計算プログラムの使い方等である。所外からの共同研究者・施設利用者等が多く利用している。一般プログラム相談に比べ、個々のプログラムの内容にまで立ち入った、より高度の問題を扱うことを主眼としており、研究者の便宜を供している。この意味で、応用プログラム相談員は所外からの共同利用者も施設利用者にとって、貴重な人的資源であるということができ、またセンターの円滑的、効率的運営においても欠くことのできない存在である。

## 4.3 研究会・学会報告

### 4.3.1 分子研研究会

○「生物における電子の挙動－クロロフィルを中心として」 昭和55年7月9～10日

提案者 広田文彦（静大教育）、柏木 浩、坂田忠良

（内容） 光合成の基礎過程、特に電子移動のメカニズムについて、理論化学、生物物理学、生物学など各分野から現在の問題点と将来への展望が発表され、討論された。

### 4.3.2 技術研究会

第10回 技術研究会 昭和56年1月30日（金） 9:30～17:00

（場所） 分子科学研究所

（内容） 電子計算機部門としては第2回目となり、全国から日頃コンピュータ関係の業務にたずさわる技官14名が参加し、マイコンからデータベースまで幅広い分野の発表が行われ交流を深めた。

### 4.3.3 情報化学討論会

昭和55年11月28～29日 東京

○量子化学文献データベース（QCLDB）－その企画、収集とサービス

発表者 長村吉洋（阪市大）、山辺信一（奈良教育大）、広田文彦（静大）、細矢治夫（お茶大）、岩田末広（理研）、柏木 浩、小原 繁、諸熊奎治、富樫雅文（北大）、田中 皓（北大）、大野公男（北大）

（内容） 量子化学データベースグループと分子研電子計算機センターが共同開発した量子化学文献データベースについて、内容、機能、現状の報告。

○データベースとしての分子研プログラム・ライブラリ

発表者 柏木 浩、西本史雄

(内容) 分子研センターのライブラリ管理システムとライブラリはプログラムを対象としたデータベースとしての一面を持っている。この観点からのシステムの紹介。

4.3.4 全国主要研究機関ネットワーク協議会

昭和55年12月15日 14:00~17:00 (場所) 東大大型計算機センター

(内容) 電々公社パケット交換網の地域拡大計画と網間接続計画、KDDのICAS/VENUS 紹介、各機関のネットワーク加入計画、ネットワーク協議会のあり方についての討論

## 5. 昭和55年度稼働状況およびジョブ統計

### 5.1 利用申請プロジェクトおよび利用者数

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	109	255	4,673	2,631	1,767	999,780	671,406
	共同研究	1	7	30	20	3	7,600	1,159
	協力研究	50	50	2,172	1,478	961	561,640	365,116
	所内		24	61	2,045	1,105	584	419,900
アイドル (注)		11	32	1,920	2,110	1,262	801,800	479,741
生理学	施設利用	3	8	31	11	4	4,180	1,704
	所内	2	7	20	20	0	7,600	91
基礎生物学	施設利用	2	5	20	10	0	3,800	0
	所内	1	1	19	19	2	7,220	691
合計		203	426	10,930	7,404	4,583	2,813,520	1,741,916

(注) アイドルとはコンピュータの空き時間を利用して実行されるバックグラウンドジョブ専用の利用区分であり、コンピュータの有効利用のために所内でのみ利用可能とした。

### 5.2 システム稼働状況

M-200Hシステム 表 5.2.1

M-180システム 表 5.2.2

### 5.3 ジョブ件数

M-200Hシステム 表 5.3.1 ☒ 5.3.1

M-180システム 表 5.3.2 ☒ 5.3.2

### 5.4 CPU時間

M-200Hシステム 表 5.4.1 ☒ 5.4.1

M-180システム 表 5.4.2 ☒ 5.4.2

表 5.2.1 M-200Hシステム稼動状況

メ ン タ *	ユ ー ザ ー *	シ ス テ ム *	メ ン テ	セ ン タ *	コ ー デ *
80-04	486:11	00:00	06:00	16:30	508:41
80-05	463:51	00:00	09:00	12:00	484:51
80-06	479:27	05:50	27:30	17:00	529:47
80-07	573:38	00:00	13:00	12:00	598:38
80-08	544:40	00:00	06:00	42:30	593:10
80-09	633:11	00:00	06:30	14:00	655:41
80-10	573:27	00:00	06:00	12:00	591:27
80-11	504:26	00:00	17:30	11:30	533:26
80-12	502:24	01:20	06:00	12:00	521:44
81-01	466:30	00:00	06:00	12:10	484:40
81-02	473:39	00:00	06:00	12:00	491:39
81-03	439:44	01:00	06:00	112:30	559:14
コ ー デ *	6141:08	08:10	115:30	288:10	6552:58

表 5.2.2 M-180システム稼動状況

年 月	ユ ー ザ ー *	シ ス テ ム *	メ ン テ ナ ン ス	セ ン タ *	合 計
80- 4	255 : 24	—	12 : 00	—	267 : 24
80- 5	269 : 00	—	9 : 00	—	278 : 00
80- 6	254 : 48	—	12 : 00	—	266 : 48
80- 7	342 : 00	—	8 : 00	—	350 : 00
80- 8	330 : 00	—	10 : 00	—	340 : 00
80- 9	308 : 00	—	10 : 00	—	318 : 00
80-10	318 : 00	—	14 : 00	—	332 : 00
80-11	282 : 18	—	19 : 42	—	302 : 00
80-12	204 : 00	—	19 : 00	—	303 : 00
81- 1	294 : 00	—	16 : 00	—	310 : 00
82- 2	287 : 00	—	16 : 00	—	303 : 00
83- 3	349 : 00	—	9 : 00	—	358 : 00
合 計	3493 : 30	—	154 : 42	—	3728 : 12

表 5.8.1 M-200H システムジョブ件数

( 80 )	ジョブ名	ジョブ開始日時	ジョブ終了日時	ジョブ実行時間	ジョブ実行回数	ジョブ実行総時間	ジョブ実行回数	ジョブ実行総時間	ジョブ実行回数	ジョブ実行総時間	ジョブ実行回数	ジョブ実行総時間
( 80 )	ジョブ名	( A )	( B )	( C )	( D )	( E )	( F )	( G )	( H )	( I )	( J )	( K )
04	4,282	2,020	197	1,332	90	629	0	5,921	0	711	0	15,185
05	3,145	1,907	61	694	31	1,539	0	6,452	1	1,237	6	15,073
06	3,195	2,034	52	772	49	1,173	0	6,034	0	1,362	1	14,672
07	3,273	2,144	157	898	71	803	0	6,141	0	1,375	0	14,862
08	4,407	2,279	121	953	32	581	0	6,733	0	942	35	16,083
09	3,280	1,925	81	1,040	91	429	0	5,418	0	678	0	12,942
10	2,386	1,484	137	1,183	36	509	1	5,157	1	622	15	11,530
11	2,692	1,653	105	1,080	35	462	0	6,097	0	545	2	12,671
12	3,392	2,260	114	1,192	9	284	8	6,052	0	560	0	13,871
01	3,725	2,071	82	873	4	250	0	5,373	0	255	4	12,637
02	4,536	1,791	86	1,128	54	189	0	7,890	0	280	5	15,977
03	4,312	1,762	141	803	71	54	0	8,594	0	301	18	16,054
(TOTAL)	42,625	23,330	1,334	11,048	573	6,902	11	75,871	11	8,868	86	171,550

表 5.8.2 M-180 システムジョブ件数

( 80 )	ジョブ名	ジョブ開始日時	ジョブ終了日時	ジョブ実行時間	ジョブ実行回数	ジョブ実行総時間	ジョブ実行回数	ジョブ実行総時間	ジョブ実行回数	ジョブ実行総時間	ジョブ実行回数	ジョブ実行総時間
( 80 )	ジョブ名	( A )	( B )	( C )	( D )	( E )	( F )	( G )	( H )	( I )	( J )	( K )
04	30	67	3	109	7	4	0	443	0	13	0	676
05	109	72	6	105	14	178	0	762	0	18	0	1,264
06	52	10	0	4	203	0	0	338	0	22	0	639
07	69	37	27	110	4	357	0	810	0	25	0	1,437
08	132	87	23	50	4	151	0	573	0	45	1	1,066
09	169	32	109	77	11	77	0	458	0	4	0	802
10	153	203	0	194	32	104	0	453	0	7	0	972
11	99	187	22	194	3	63	0	879	0	3	0	1,450
12	65	88	24	127	4	81	0	445	0	10	0	844
01	84	166	13	109	2	54	1	466	1	10	6	911
02	118	245	42	112	8	19	0	704	0	9	1	1,258
03	166	134	21	73	0	0	0	485	0	3	0	882
(TOTAL)	1,246	1,328	192	1,150	82	1,291	0	6,816	1	167	8	12,281

表 5.4.1 M-200H システム CPU 時間

( 80 )	タイトル名	***	タイトル名	CPU 時間	トータル	***	DATE	81-04-03	PAGE	2		
( ヅ )	( A )	( B )	( C )	( D )	( E )	( I )	( S )	( T )	( X )	( Y )	( Z )	( TOTAL )
04	09:29:16	39:54:46	124:20:37	49:58:38	57:11:47	56:01:29	00:07:36	04:23:52	00:00:00	01:46:19	00:00:00	343:14:20
05	06:06:57	36:54:08	87:11:37	26:15:50	11:52:54	62:50:40	00:00:00	05:53:02	00:00:07	01:12:02	00:00:09	238:17:24
06	07:52:08	42:08:02	110:30:47	24:28:03	19:18:20	77:20:48	00:00:00	06:05:26	00:00:00	02:37:52	03:37:57	293:59:23
07	09:56:25	46:24:17	128:00:12	68:18:38	52:10:29	151:44:35	00:00:00	05:55:16	00:00:00	03:34:04	00:00:00	466:03:54
08	11:09:53	45:38:42	176:19:51	47:39:09	18:22:19	169:36:39	00:00:00	06:19:04	00:00:00	01:42:42	00:18:37	477:06:54
09	08:11:38	38:07:44	161:26:42	28:16:50	61:44:52	130:22:52	00:00:00	05:15:13	00:00:00	00:59:42	00:00:00	434:25:33
10	06:59:08	35:09:45	159:21:03	46:06:49	16:08:54	158:03:01	00:00:00	08:33:18	00:00:04	04:58:45	00:49:23	436:00:10
11	04:47:26	41:20:40	193:17:11	42:46:25	20:31:11	108:49:17	00:00:00	07:20:36	00:00:00	10:03:15	00:02:21	425:58:22
12	09:45:29	58:50:42	226:52:38	38:13:00	03:17:01	69:55:31	00:00:00	06:37:40	00:00:00	01:11:25	00:00:00	415:47:08
01	08:04:27	48:11:07	159:54:09	40:08:25	02:24:32	68:37:14	00:00:00	06:10:16	00:00:00	00:20:34	00:00:04	333:50:48
02	11:01:49	47:06:24	173:22:50	34:23:01	22:52:20	71:44:00	00:00:00	11:40:24	02:37:54	00:44:10	01:59:25	377:32:17
03	14:03:00	60:39:52	154:58:16	65:16:43	43:37:06	14:47:07	00:00:00	11:23:11	00:00:00	00:16:11	00:04:17	365:05:43
(TOTAL)	107:27:36	540:06:09	1855:35:53	511:51:31	329:31:45	1136:53:13	01:31:18	85:37:18	02:38:05	29:17:01	06:52:13	4407:22:02

表 5.4.2 M-180 システム CPU 時間

( 80 )	タイトル名	***	タイトル名	CPU 時間	トータル	***	DATE	81-04-30	PAGE	2		
( ヅ )	( A )	( B )	( C )	( D )	( E )	( I )	( S )	( T )	( X )	( Y )	( Z )	( TOTAL )
04	00:01:16	04:55:23	70:09:07	02:07:00	16:10:38	00:00:10	00:00:00	00:23:36	00:00:00	00:00:21	00:00:00	93:44:31
05	00:13:45	03:15:47	42:08:15	06:09:24	43:34:21	58:29:27	00:00:00	00:45:47	00:00:00	00:00:11	00:00:00	154:36:57
06	00:15:43	01:49:15	00:32:09	00:00:00	00:00:00	100:40:05	00:00:00	00:29:45	00:00:00	00:00:11	00:00:00	109:47:08
07	00:07:34	01:53:50	63:32:57	30:03:29	07:06:54	118:34:31	00:00:00	01:26:11	00:00:00	00:17:02	00:00:00	225:02:28
08	03:02:30	08:28:52	22:25:13	19:15:03	04:18:26	159:18:51	00:00:00	00:45:29	00:00:00	00:06:45	00:00:03	217:41:12
09	05:39:19	02:16:35	70:29:28	02:37:55	46:58:57	115:03:16	00:00:00	00:42:22	00:00:00	00:00:00	00:00:00	243:47:52
10	00:38:33	17:15:17	89:29:55	38:29:06	10:24:56	122:54:40	00:00:00	00:47:45	00:00:00	00:00:24	00:00:00	180:32:33
11	00:16:04	07:41:25	80:47:05	38:27:57	09:25:02	62:38:31	00:00:00	01:00:46	00:00:00	00:00:02	00:00:00	223:56:19
12	00:53:32	16:55:02	63:33:50	25:01:53	07:57:16	71:15:44	00:00:00	00:36:56	00:00:00	00:00:06	00:00:00	199:53:04
01	00:35:51	21:30:07	62:54:52	76:48:56	15:11:50	30:45:52	00:00:00	00:56:11	00:00:03	00:00:45	00:00:14	186:34:30
02	01:53:23	19:00:32	48:11:30	37:55:48	00:00:00	00:00:00	00:00:00	01:20:40	00:00:00	00:00:20	00:00:09	209:08:37
03	01:53:23	19:00:32	48:11:30	37:55:48	00:00:00	00:00:00	00:00:00	00:56:33	00:00:00	00:00:06	00:00:00	107:57:52
(TOTAL)	14:37:02	125:40:24	646:05:55	276:56:31	166:26:59	912:18:31	00:00:00	10:11:01	00:00:03	00:26:13	00:00:26	2152:43:05

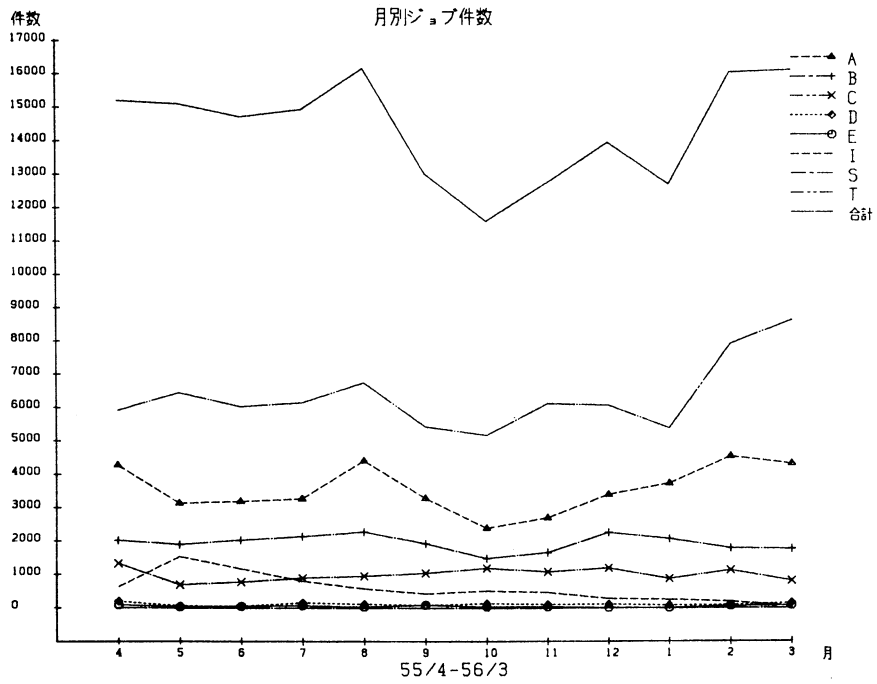


図 5.3.1 M-200H システムジョブ件数

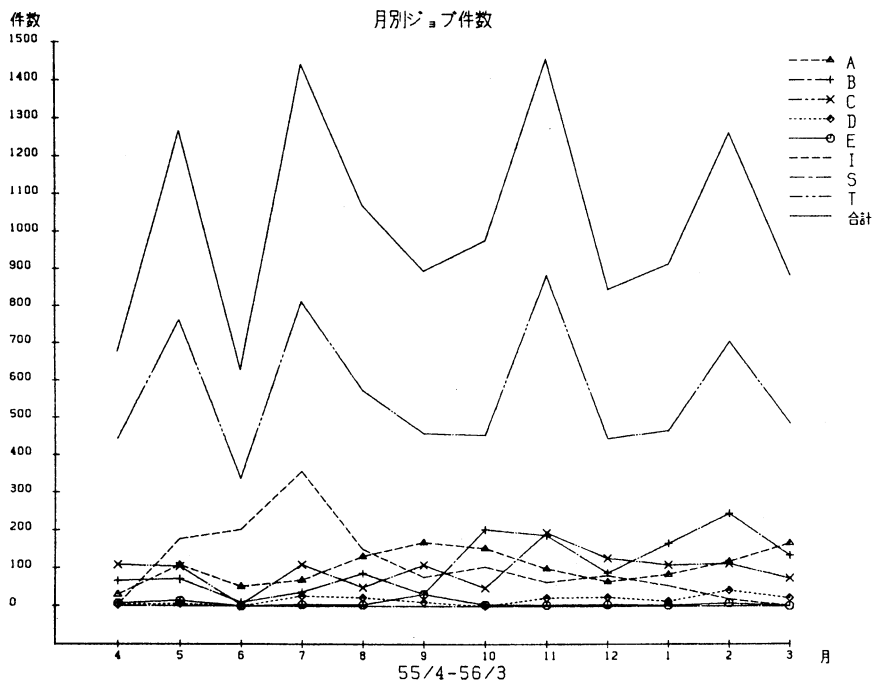


図 5.3.2 M-180 システムジョブ件数



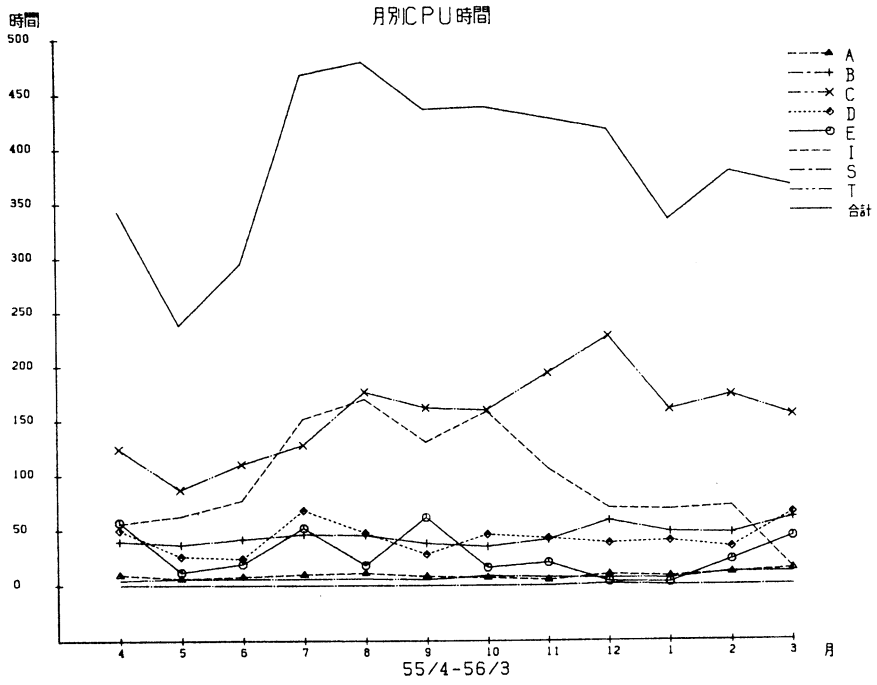


図5.4.1 M-200HシステムCPU時間

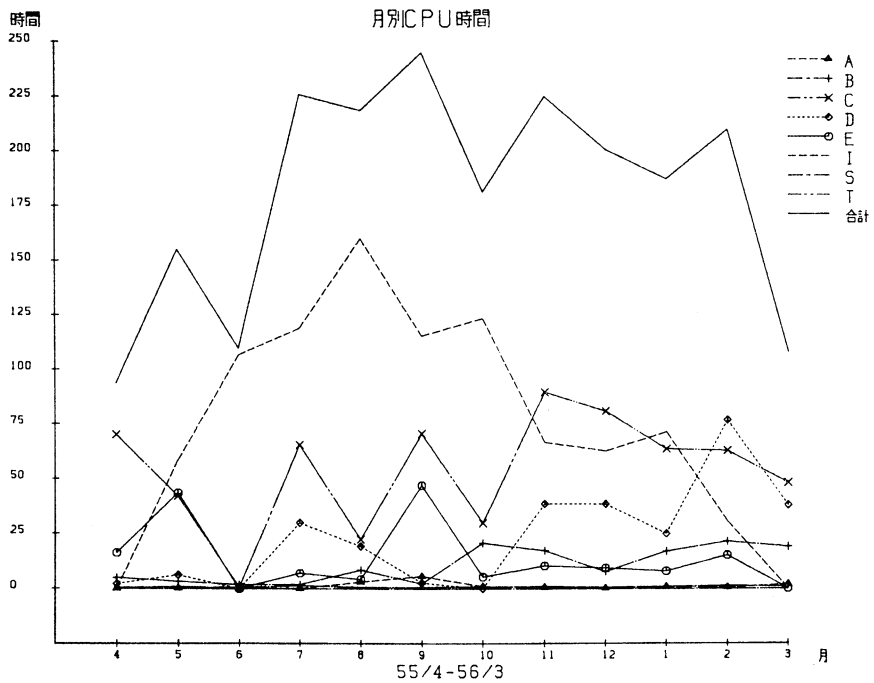


図5.4.2 M-180システムCPU時間

## 5.5 無人運転状況

M-200Hシステム 表 5.5.1

無人運転システムの運転を昭和54年9月に開始して以来、防災設備により異常が検知されたことは表5.5.2に示すように11回あった。これから分るように防災設備は当初計画通り順調に作動し迅速な対応がなされた。

表 5.5.1 無人運転状況

エントラツ	フロッピーディスク		ライオンディスク		コンソール	
	ハイスタ	システム	ハイスタ	システム	ハイスタ	システム
80-04	14	94:132	4	116:47	16	211:119
80-05	15	88:52	5	170:117	20	259:109
80-06	12	58:52	4	131:21	16	190:13
80-07	6	48:47	5	96:35	11	145:22
80-08	7	31:47	6	119:03	36	150:56
80-09	4	14:50	4	46:20	8	44:13
80-10	13	67:24	5	45:00	14	152:33
80-11	8	43:33	6	145:01	14	186:34
80-12	6	34:35	3	51:41	0	126:16
81-01	13	95:13	4	67:56	17	168:27
81-02	11	74:17	4	106:04	15	180:21
81-03	-----	-----	0	184:46	0	184:46
トータル	109	657:08	61	1357:54	170	2915:02

表 5.5.2 防災設備の警報発生状況

	日付	警報	原因
1	54. 10. 23	湿度異常	湿度30%以下(空調機の能力低下)
2	54. 10. 27	温度異常	温度15℃以下
3	54. 11. 23	温度異常	温度30℃以上(クーリングタワーベルト切れ)
4	55. 3. 15	CVCF重故障	CVCFの過熱(室の通風不良)
5	55. 7. 12	停電	近隣火災による強制停電
6	55. 9. 5	システム停止警報	磁気テープ装置のヒューズ切れ
7	55. 10. 4	システム停止警報	バッファメモリの異常
8	55. 11. 6	自火報	誤報
9	56. 2. 18	自火報	〃
10	56. 3. 19	電算機異常	ディスクの温度センサー検知
11	56. 4. 12	システム停止警報	LCMP応答ライブラリ異常

## 5.6 ジョブ処理状況の推移

当センターではサービス開始以来第4年度を迎えている。この間に無人運転システムによる利用者のニーズに応じた運転時間の延長、M-180からM-200Hへのレベルアップなどにより表5.6.1のように急速な拡大を実現している。

表 5.6.1 ジョブ処理状況の推移

	ジョブ処理件数	CPU時間
53年度(3ヶ月)	41,521件	509H
54年度	155,980	2405
55年度	183,840	5405

但し、CPU時間はM-200Hの処理速度を基準としている。  
(M200H:M180 = 2.7:1として換算)

## 6. センターより —— 速報 (No.7～13) から再録 ——

### 6.1 事務関連

#### 6.1.1 開発公募とプログラム情報の募集 (No.7, No.13)

今年度も昨年度に続き、分子科学・基礎生物学及び生理学研究のために重要で汎用性の高いライブラリプログラムの公募を行っています。センターが採択したプログラムの整備または開発をされる方に対してある程度の謝金、旅費、CPU時間を配分します。単独では開発できないが協力者がいれば共同開発する意志のある方、ご自分で開発する意志はないが有用なプログラムについて情報もしくは希望を持っている方もご遠慮なくお知らせください。センターが適任者に依頼して開発することができます。応募または情報提供される方は、下記の事項を記入して郵送してください。

- ① 所属、身分、氏名、連絡先、電話番号
- ② 整備、開発、情報提供の別
- ③ プログラム、機能、規模、使用言語、機種など
- ④ プログラムの作成者、管理者など
- ⑤ 謝金、旅費、CPU時間の希望
- ⑥ その他ご希望

あて先 〒444 愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38番地  
分子科学研究所電子計算機センター

#### 6.1.2 ライブラリプログラム、TSSコマンドプロシジャの公募について (No.9)

- ① 分子科学・基礎生物学および生理学研究のためのライブラリプログラムを公募中です。詳しくは速報No.7をご覧ください。
- ② TSSコマンドプロシジャを募集します。ユーザが作成されたもので、便利なものがあれば提供してください。センターのコマンドプロシジャライブラリに登録公開し、TSS利用をより能率のよいものにしたいと思います。必要と思われるコマンドプロシジャの情報または希望でも結構です。旅費、謝金、CPU時間についてはライブラリプログラムの場合と同様の準備がありますので、速報No.7のライブラリプログラムの応募と同じ要領で応募してください。詳細は当センターへおたずねください。

#### 6.1.3 オンラインQCLDB検索サービスについて (No.9)

オンライン検索システムORIONを用い、QCLDB(77～79年)のオンライン検索サービスを

開始しました。コマンド“ QCLDB ”を投入することにより検索をすることができます。使用方法については“ HOW ”，“ WHAT ”コマンドをご利用ください。

① QCLDBコマンド

オンライン検索システム ORION を用い QCLDB の検索を開始する。

② WHAT コマンド

オンライン検索システム ORION のコマンドの文法・機能の解説を端末に表示する。QCLDB 検索中でも ready mode でも使用できる。

③ HOW コマンド

オンライン検索システム ORION のコマンド使用方法を例とともに表示する。QCLDB 検索中でも ready mode でも使用できる。

#### 6.1.4 SALS 利用者へお願い (No.9)

当センターは昭和 55 年 2 月 16 日東京大学大型計算機センターを通じて SALS 研究会と、「最小二乗法標準プログラムシステム SALS の譲渡・公開に伴う覚書」をとりかわし、5 月 15 日をもって IMS プログラムライブラリとして登録され、公開されています。

SALS 利用者は以下の事項の遵守して下さい。

- SALS システム中に誤りを発見したときには、所属計算センターを通じて、東大センターおよび著作者に通知しなければならない(東大センター・ライブラリー内規第 9 条)。
- SALS システムを修正して使用するときには、その修正箇所のリスティングを、所属計算センターを通じて、東大センターおよび著作者に通知するものとする。
- SALS システム又はそれを修正したものを、第三者に渡してはならない(東大センター・ライブラリー交換内規第 5 条)。
- SALS システムを利用した研究成果を公表するときには、SALS システムのプログラム名および著作者名を明記しなければならない(東大センター・ライブラリー内規第 9 条)

#### 6.1.5 ユーザの電話呼び出しについて (No.9)

スポット欄でお知らせしましたようにセンター 2 階廊下にユーザ専用電話が設置されましたので、標記の件につきまして次のようにご協力くださるようお願いいたします。

- ① 所外所内・センター利用者呼び出す場合は必ずセンター 2 階廊下のユーザ専用内線電話へおかけ下さい。

TEL 0564 - 52 - 9770 (代) 内線 463

- ② ユーザ専用電話が鳴った場合は、ユーザ自身でお取りください。他ユーザの取り次ぎはご面倒でもユーザ同士のセルフサービスで対応してください。


#### 6.1.6 センターレポートNo.1発行のお知らせ (No.9)

昭和54年度利用プロジェクトから提出していただいた利用報告書を中心にセンターの活動報告をまとめたセンターレポートNo.1が8月末に発行されました。各プロジェクトの代表利用者宛に1部送付致しましたのでどうぞ高覧ください。

#### 6.1.7 宅急便発送の取り次ぎについて (No.7)

当センターでは多量の出力LP用紙を運搬するユーザの不便を考え、実費で宅急便扱いによる発送を取り次ぎます。荷作りはセルフサービスで、料金前払いとなります。どうぞ有効にご利用ください。詳細はセンター掲示板をご覧ください。

#### 6.1.8 テレホンサービス (No.8)

 0564-52-4625

サービス時間、新機能の紹介、ジョブの混み具合、システム停止の予報など常に最新の情報をお届けしております。

当センターへお出かけの際には、当サービスによる確認を是非行ってください。

#### 6.1.9 公衆電話の設置 (No.12)

長い間御迷惑をおかけしましたがセンター1階玄関ロビーに公衆電話(黄電話)が設置されました。所外への連絡用としてどうぞ御利用ください。なお硬貨への両替は当センターでは扱いませんのでご了承ください。

#### 6.1.10 今年度利用点数の有効期限について (No.10, No.12)

昨年度(54年度)と同じく計算機施設利用(プロジェクトID第1字目がC~G, K~N, Q~T)点数有効期限を次のように延長します。

施設利用(プロジェクトID第1字目がC~G, K~N, Q~T)の有効期限:昭和56年4月30日  
ただし、共同・協力研究および所内の計算機利用は昭和56年3月31日で有効期限が切れますのでご注意ください。

#### 6.1.11 データセットの消去について (No.11)

① M-180 データセットは3月14日(土)で消去

L CMPへの一体化のためM-180のデータセットは、3月14日(M-200Hのサービス終了一週間前)で消去されます。必要なデータセットは早めに磁気テープにコピーされるようお願いします。データセットのコピーには便利なMTMコマンド(N.2節参照)をご利用ください。

- ② M-200Hの本年度(55年度)プロジェクトのデータセットは6月1日(月)で消去  
昭和56年度に継続されないプロジェクトの利用者のデータセットは6月1日に消去されま  
す。別のプロジェクトで利用される場合は、それまでにコピーしてください。

## 6.2 システム新機能

### 6.2.1 DESPエディタの使用のすすめ(No.7)

速報No.2に紹介しましたが、計算機センターのH-9415/11M, 19Mディスプレイ端末では、ディスプレイの画面を十分に生かしたDESP(Display Editor for Structured Programming)エディタが使用できます。DESPのおもな特徴に次のようなものがあります。

- ① カーソルを上下左右に動かしてキーインすることにより画面全体のテキストを修正できる。
- ② 入力モード/編集モードといったモードの切替えの必要がなく、画面上にコーディングするイメージでプログラムを作成できる。
- ③ メニュー方式のための表示内容を見ながら目的とする機能の選択/パラメータの投入を行うことができる。
- ④ 画面を分割し、それぞれの画面で独立した機能を実行できる(例えば平行してデータセットの編集とTSSコマンドの実行(SUBMIT SOEDITなど)ができ、デバック手順が簡単になる)。

### 6.2.2 HQEDエディタについて(No.12)

HQEDは、ソースプログラムや、英文テキスト(たとえば論文、手紙、文書など)を編集する行エディタで、使い勝手はかなりよく、主に次の特徴をもっています。

- ① 一般文字列の編集に適しており、指定した文字列により、テキスト中のレコードの位置や、レコードの編集を行なうことができる。この文字列の表現に、正規表現を採用しており、たとえば「Aで始まり、Bで終わる文字列」などの表現ができ、その種類も豊富である。
- ② 行編集型のエディタであるため、タイプライタ型の端末でも同等に使用できる。
- ③ コマンドの表現が簡明である。
- ④ 基本モードと拡張モードの2種類があり、利用者の習熟度に応じて機能付けおよび操作レベルの選択ができる。
- ⑤ 専用の制御方式を採用しているため、編集処理が高速に行なえる。
- ⑥ 検索にも使えるので、データセットに出力されたジョブ処理の結果を編集することが自由にできる。

HQEDエディタを用いると出力結果の編集が、簡単かつ自由に行なうことができます。SOMのサブコマンドとして呼び出すこともできます。主な機能は次のとおり

1. 文字列の検索（文字列の正規表現や、検索・編集範囲の指定ができる）
2. 行の表示
3. 文字列の削除
4. 行の追加
5. 文字列の変更
6. 行の削除
7. データセットからの読み込み
8. データセットへの書き出し

◦ 主なコマンドの使用例

H Q E D    @ @ S Y S O U T . O U T L I S T

    @ @ S Y S O U T . O U T L I S T の編集を開始する。

5 , 2 0 P

    5 行目から 2 0 行目までを表示する。

/ S U B R / P

    文字列 SUBR を含む行を見つけて、表示する。

5 1 , Y D

    5 1 行目から最後までを消去する。

S / S A B R / S U B R /

    文字列 SABR を SUBR に変更する。

1 5 R 2 1 , 3 0    @ X S Y S O U T . O U T L I S T

    1 5 行目に、@ X S Y S O U T . O U T L I S T の 2 1 行目から 3 0 行目までの内容を読み込む

1 1 , 9 0 W        @ Y S Y S O U T . O U T L I S T

    1 1 行目から 9 0 行目を @ Y S Y S O U T . O U T L I S T に書き出す。

Z 2 1 , 7 0

    検索・編集の範囲を 2 1 カラムから 7 0 カラムとする。

Z L

    現在の検索・編集の範囲を表示する。

1 1 , 5 0 G / E N E R G Y / P

    1 1 行目から 5 0 行目の間で文字列 ENERGY を含む行をさがし、表示することをくり返す。

X / E N E R G Y / D

    すべての行に対して文字列 ENERGY を含まない行をさがして消去する。

◦ 主な正規表現

/ P O ? S A V E /



P0で始まりSAVEでおわる文字列（?は0文字以上の任意の文字列）

/SUBR ! FUNC /

SUBR 又はFUNCの文字列

/" ABC /

行の先頭がABCの文字列（行の先頭はZコマンドで変えられる）

/XYZ Y /

行の最後がXYZで終わる文字列（行の最後はZコマンドで変えられる）

[Ww] hite

### 6.2.3 コマンドプロシジャの変更と追加について（No.7）

(1) データセットユーティリティ関係のコマンドプロシジャ（POTOLPなど） — 変更

① キーパラメータのキーワードの省略形が指定可能。

INDSN → I, OUTDSN → O, UNIT → U

② PARMパラメータにより、ユーザ独自のパラメータが指定できる。

PARM(\*) ..... 端末よりパラメータの入力

PARM(P. DATA(A)) ..... データセットP. DATAのメンバーA内のパラメータを入力

③ 異常終了時に完了コードを表示

④ 異常終了し、再度そのプロシジャを実行する前にSYSFREE コマンドを投入することにより初期状態（リセット）にすることができる。

(2) データセットの形式、スペース容量の大きさ、メンバ名などの情報を一括して表示するコマンドプロシジャ（LISTDM） — 追加

① LISTDM△データセット名 ..... 指定したデータセットの情報を表示

② LISTDM△\* ..... すべてのデータセットの情報を表示

### 6.2.4 新しく追加されたTSSコマンド（No.8）

コマンド名（サブコマンド名）

機 能 概 要

CREATE 原始プログラム/データをデータセットに格納する。

DELETEN データセットの削除，メンバの削除を行なう（従来のDELETEより高速）

EDIT(CALL) 実行可能プログラムを起動する。

(CANCEL) サブミットジョブの取り消しを行なう。

(LISTALC) ALLOCATEコマンド割り当てたデータセット名等を表示する。

(LISTDS)	データセットの属性を表示する。
(STATUS)	サブミットジョブの状態を表示する。
(TIME)	CPU使用時間, TSS利用時間, 現在の日時を知らせる。
(ENDのCONVERT オペランド)	編集データセットと異なるレコード形式に変換(固定長レ コード形式↔可変長レコード形式)して保存する。
(SAVEのCONVERT オペランド)	同 上
<b>KNOCKDS</b>	データセットの割り当てをしているジョブ名/TSSコーザ 一名を表示する。

上記コマンドにより, EDIT中にSUBMITしたジョブのSTATUS表示や, CANCEL が可能になります。

マニュアル (TSS操作, TSSコマンド)

#### 6.2.5 新しいコマンドプロシジャについて (No.8)

以下のTSSコマンドプロシジャが利用できるようになりました。どうぞご利用ください。

##### (1) CHELP

機能：分子科学研究所電子計算機センターで開発されたTSSコマンドプロシジャの解説を表示する。当コマンドの後に△<sub>1</sub>C(コマンド名)を入力すると, 当該コマンドについてさらに詳しい解説が得られる。

使用例：(i) CHELP

(ii) CHELP△<sub>1</sub>C(FLIB)

##### (2) DSCOPY

機能：データセットの複写。データセット形式(順編成及び区分編成)の区別を意識せずともよい。

スペースをユーザー側で指定しない場合, システムが自動的に割り当てる。

位置パラメータ(必須)：

INDSN(入力データセット名)

OUTDSN(出力データセット名)

UNIT(出力データセット装置名)

#### 6.2.6 新規登録TSSコマンドプロシジャ (No.10)

##### (1) LISTC1

① 機能：ユーザーID, またはプロジェクトIDで始まる全データセット名を横3列づつ

表示する。

② 付加的キーパラメータ

UID : ユーザID, またはプロジェクト名省略時は使用者のユーザーID

③ 使用例

(i) LISTC1

(ii) LISTC1△<sub>1</sub> UID(AB1)

(iii) LISTC1△<sub>1</sub> UID(AB1CD2)

(2) LISTC2

① 機能 : ユーザーID, またはプロジェクトIDで始まる全データセットについてのその編成, レコード形式, レコード長, ブロックサイズ, ボリューム名, 使用領域, 未使用領域の大きさ(トラックあるいはKB単位)で表示する。

② 付加的パラメータ

③ 使用例 } LISTC1と同様

以上のコマンドの解説はCHELPコマンドでも得ることができます。

例 CHELP △<sub>1</sub> C(LISTC1)

付加的キーパラメータ :

DISP : 出力データセット状態。省略値<NEW>

注 釈 : 以下のようなパラメータの省略形が使える。

SAVE → SA

SHRT → SH

NEW → N

OLD → O

MOD → M

SHR → S

使用例 : DSCOPY △<sub>1</sub> IN.FORT△<sub>1</sub> OUT.FORT△<sub>1</sub> SA

(3) RLSE

機能 : データセットの未使用領域の解放。スミンドレコードに対しては使用しないで下さい。

使用例 : RLSE △<sub>1</sub> ABC.DATA

## 6.2.7 コマンドプロファイルのデータセットの作成について (No.11)

各利用者ごとにSYSPROFデータセットを作成することにより主としてTSSコマンドの標準的な処理方法を変更できるようになりました。センターでは次の2つのコマンドを用意しましたので御利用ください。

SYSPROF1 ..... ユーザー登録名. SYSPROFのデータセットを作成。

SYSPROF2 ..... SYSPROFデータセットに予約コマンド記号を設定する。

SYSPROF1のコマンドを投入した場合は次のセッション以降でなければ、SYSPROF2のコマンドは使用できない。

設定されるコマンド記号及び値は次のとおり。

Y EDITSAVE @@ EDIT : EDIT中にセッションが打ち切られた時に自動SAVE  
するデータセットの標準値。@@ EDIT. FORT, @  
@ EDIT. DATAなどが作成される。

Y TEMPNUM Y : EDITコマンドで行番号なしのデータセットを編集する場合に仮  
行番号を付加する。

(編集中は行番号付データと同じに扱うことができる。29S端末で、カーソルを動かして、  
行番号を含めて行全体を再入力する場合、仮行番号の直後の:(コロン)を削除して送信する。)

Y TABCODE :: EDITコマンドでTABの印となる記号を定義する。

TAB △ ON サブコマンドと合わせて意味を持つ。

EDIT @ X FORT NEW

⋮  
⋮

TAB ON ← TABは7カラム, 72カラムに設定(標準)

INPUT

00010 ⌋ : INTEGER \* 4 X

00020 ⌋ : X = 10

00030 ⌋ : WRITE (6,600) X

00040 ⌋ : 600FORMAT (IH⌋, 'X=', I5)

00050 ⌋ : STOP

00060 ⌋ : END

00070

EDIT

END⌋S

READY

### 6.2.8 新規登録コマンドプロシジャ (No.13)

以下のコマンドについては、CHELPのFLIBコマンドによっても解説を得ることができます。

又 FCMP, FLOW, FORDAP, STINGY については東京大学大型計算機センターニュースVOL. 12 No. 10(1980)137~155を参照してください。

(1) FCMP (File Compare)

① 機能

2つの類似のテキストファイルを比較して、挿入、削除、修正といった関係を行単位で表示するソフトウェアツール。

② 書き方

FCMP	(データセット名1) (データセット名2) [, DEST(出力先識別名)] [, PARM(出力形式の選択)]
------	--

③ オペランド

(i) データセット名1, データセット名2

比較の対象となるデータセット名。レコード長80に限る。

(ii) DEST(出力先識別名)

出力先の指定。D, T, 1, 2, \*より選択。省略値\*(端末)。

(iii) PARM(出力形式の選択)

出力形式の指定。DW, DN, SW, SNより選択。省略値SN。

④ 使用例

(i) FCMP X. DATA Y. DATA

(ii) FCMP X. DATA Y. DATA(B) DEST(D) PARM(DW)

(2) FLOW (Fort Flow)

① 機能

ラインプリンタ上に印刷されるFORTRANソースプログラムの左側の余白を利用して流れ線を印刷する。

② 書き方

FLOW	(データセット名) [, DEST(出力先識別名)]
------	----------------------------

③ オペランド

(i) データセット名

流れ図を作表したいFORTRANソースプログラムのデータセット名

(ii) DEST(出力先識別名)

(3) FORDAP (FORTRANプログラム動的解析システム)

① 機能

FORTRANの実行文の実行回数の計測, 論理IF文で真と評価された回数の計測, 各プログラ

ム単位の実行所要時間の計測等により，プログラムの能率改善，検査，デバッグを助けるソフトウェアツール。

## ② 書き方

<b>FORDAP</b>	(データセット名) [, PARM (パラメータ)] [, DEST (出力先識別名)] [, TYPE (出力形式の選択)] [, OBJ (オブジェクトモジュールデータセット名)] [, LIB (ロードモジュールデータセット名)]
---------------	--

## ③ オペランド

### (i) データセット名

FORDAPの対象となるFORTRANソースプログラムデータセット名

### (ii) PARM (パラメータ)

最適化FORTRANのコンパイルオプションを指定。

省略値 OPT(3), LEVEL(1), NOSOURCE, NOMAP, LINECOUNT(0)

### (iii) DEST (出力先識別名)

出力先の指定。D, T, 1, 2, \*より選択。省略値\*。

### (iv) TYPE (出力形式の選択)

出力幅の指定。W, Nより選択。省略値N。

### (v) OBJ (オブジェクトモジュールデータセット名)

リンクすべきオブジェクトモジュールデータセット名

### (vi) LIB (ロードモジュールデータセット名)

リンクすべきロードモジュールデータセット名

## ④ 使用例

(i) **FORDAP X. FORT**

(ii) **FORDAP X. FORT DEST (D) TYPE (W)**

## (4) STINGY

### ① 機能

カードイメージ(レコード長80バイト)のテキストを左右2欄(各欄56字づつ)ブックフォームに圧縮印刷する。FORTRANソースの印刷等に利用すればLP用紙を半減できる。

### ② 書き方

<b>STINGY</b>	(データセット名) [, DEST (出力先識別名)]
---------------	-----------------------------

### ③ オペランド

#### (i) データセット名

圧縮印刷するデータセット名。テキストの有効情報が55カラムを越える場合は2行にわける。

(ii) DEST (出力先識別名)

出力先を指定。D, T, 1, 2, \*より選択。省略値D。

(5) PSPART

① 機能

順編成のFORTRANプログラムパッケージの中のサブルーチン、ファンクションを選択的にコピーし、新しい順編成データセットを作成する。

② 書き方

PSPART	(入力データセット名)(出力データセット名)(ユニット) [, SPACE(' (初期値, 増分値), 単位 ) ')]
--------	---

③ オペランド

(i) 入力データセット名

入力の順編成FORTRANプログラムパッケージのデータセット名

(ii) 出力データセット名

コピー先の新しい順編成データセット名

(iii) ユニット

ユニットを指定。SAVE, 又はSHRT。

(iv) SPACE (▼ (初期値, 増分値), 単位) ▼)

④ 使用例

(i) PSPART X.FORT Y.FORT SAVE

(ii) PSPART X.FORT Q.FORT SHRT SP(▼(50, 10), TR▼)

6.2.9 システムの機能紹介と使い方 (No.8)

(1) オペレーティングシステム(OS)のレベルアップについて

8月11日(月)からレベルアップされ、VOS 3-07-00で運用されます。

レベルアップに伴ない、若干の運用の変更、言語プロセッサ、エディタ、ライブラリ、コマンドの追加があります。

① オープンMTはTSSコマンドOPENMTにより呼び出されることとなります。したがって他のデータセット関係のコマンド(LISTCAT, LISTDS)がオープンMT専用端末でも使用できます。

② 新しい言語プロセッサ

FORTRAN77

- ③ エディタ  
HQED (データセットに出力されたSYSOUTの編集等に強力)
- ④ ライブラリ  
MSLII (IAP向きのMSL (数値計算サブルーチンライブラリ))
- ⑤ TSSコマンドの強化など

新コマンド

新EDITサブコマンド

データセット競合状態のTSS端末への通知

詳しくは、掲示板又はセンタに備えてあるマニュアルを参照してください。

主なものを次に紹介します。

## (2) 最適化FORTRAN 77について

最適化FORTRAN 77は新しいFORTRAN規格ANSFORTRAN 77にしたがって作られたコンパイラです。次のような特徴があります。

- 追加された言語仕様
  - (a) CHARACTER型宣言で変数配列、関数名を文字型と宣言できる。  
文字型データは、代入、比較、連結演算が可能である。部分列として文字型データの一部を取り出すことができる。
  - (b) PARAMETER文で、定数に名前をつけることができる。
  - (c) 配列の上限指定ができる。
  - (d) ブロックIF文、ELSE文など構造的ブロックのための文がある。
  - (e) DO文のパラメータに整数型、実数型の演算式を書くことができる。
  - (f) 配列宣言に定数式を書くことができる。
- 最適化FORTRAN, 拡張FORTRANで作成したプログラムの大部分は殆んど無修正で最適化FORTRAN 77にかかる。
- 最適化の強化による実行時間の短縮やコンパイル速度が向上している。
- 実行時の動作特性を解析できるCOUNT機能を持っている。
- デバッグ機能が強力である。
  - バッチジョブでの使い方 (カタログドプロシジャ)
 

```

          //△ EXEC△ FORT 7 CG
          「ソースカード」
          他のカatalogドプロシジャは、最適化FORTRANと同じ形式のものが用意されています。
          (例 FORTQC → FORT7C)
          
```
  - TSSでの使い方



EDIT △ S 1 △ FORT 77 (S1. FORTのデータセットにソースプログラムが入  
ののちに っている。)

RUN

又は、

RUN △ S 1 △ FORT 77

又は、

FORT 77 S 1 (コンパイルのみ)

マニュアル(最適化 FORTRAN 77 言語, 最適化 FORTRAN 77 使用の手引)

### (3) M S L II について

M S L II は、従来の M S L の改良に加えて、I A P (内蔵アレイプロセサ) 向きにプログラムが書かれており、演算速度が向上している。カタプロで、M S L より先に組み込むようにすれば M S L II が利用できる。又、移行用インターフェイスルーチンも同一データセットに登録されているので、従来の呼び出し形式(名称, 引数)を変える必要がない。(速度面からは、新しい呼び出し形式に変更される方がよい)

現時点では、次の関係のライブラリが M S L II でサポートされている。

- 基本配列演算
- 連立 1 次方程式
- 逆 行 列
- 固有値, 固有ベクトル
- 非線形方程式
- 常微分方程式
- 数値微分・補間
- 最適化問題
- フーリエ変換
- 特殊関数

詳細についてはマニュアル(M S L II 解説編第一分冊および第二分冊)を参照してください。

バッチジョブでの使用方法

///△ EXEC △ FORT OCG, SPECLIB='SYS1.MSL2'

#### 6.2.1 0 システム新機能紹介(No.1 3)

分子研システムは HITAC M-200H/180 LCMP で稼動しています。4月1日よりオペレーティングシステム VOS3 が 08-00 にバージョンアップされ、ジョブ入出力サブシステムも JSS4 となりました。従来との違い及び新機能は揭示、その他でお知らせしてありますが、詳細

を次に紹介します。

(1) JSS4システムでの新機能

ジョブ通し番号に日付コードが加わりました。

- ① ジョブ通し番号はジョブの種類コード(1バイト)、日付コード(1バイト)および通し番号(nnnnn)の7バイトで示される。

$$\begin{Bmatrix} J \\ T \end{Bmatrix} \triangle dnnnnn$$

J: バッチジョブを示す。

T: TSSジョブを示す。

d: 日付コードを示し、1~9(1日~9日に対応)、A~V(10日~31日に対応)の1文字がセットされる。

nnnnn: 1日ごとの通し番号を示し、1~99999の値がセットされる。

例

J △ C 0 0 0 0 1

なお、TSSコマンドのオペランドでジョブ通し番号を指定する場合はJC00001というように、空白をつめる。また、通し番号の始めの0は省略できる。(JC0001 → JC1)

- ② JOB文でのTIME指定について

TIMEの指定の仕方は従来通りですが、JCLリスト上では00に置きかわって出力されます。(指定そのものはもちろん有効です)

```
///AB1CD2X3 JOB PSWD, CLASS=C, TIME=(10)
```

```
///AB1CD2X3 JOB PSWD, CLASS=C, TIME=(00) (リスト上)
```

JCLのリスト上にTIME指定の数値を残しておきたい場合は、次のようにコメント行をご利用ください。

```
/// *TIME=(10) (ジョブ文と同じTIME指定を記録しておく)
```

- ③ コマンドプロシジャで位置オペランドに標準値が設定できる。

```
PROC 2, DSN(JCL1), MEMBER( )
```

```
SUBMIT &DSN(&MEMBER)
```

コマンドプロシジャー名をSUBXとすれば、SUBX△、SCFIとすれば

```
SUBMIT JCL1(SCF1)と展開され、
```

SUBX△ JCL2, SCF2とすれば

```
SUBMIT JCL2(SCF2)と展開される。
```

- ④ FREEコマンドにALLオペランドが追加され、セッション中に利用者が割り当てたファイル全てをFREEできる。

セッション内で現在割り当てられているデータセット及びDD名をリストする場合、

LISTALCコマンドを用いるとよい。

例

FREE △ ALL

LISTALC△ST (オペランドSTはDD名も合わせて表示させるため)

⑤ データユーティリティコマンドの追加

データセットの内容の表示、プリンタ出力や、スペース量などの管理情報を表示するコマンドがある。

(i) LISTコマンド

順データセットおよび区分データセットのメンバーの内容を表示するコマンドで表示内容は、端末だけでなくプリンタやデータセットへ出力することができる。又次の機能もある。

- 表示する行範囲を行番号又は行位置で指定できる。
- 行番号を表示する／しないを選択できる。
- 表示するカラム(複数)を指定できる。

**L I S T**

入力データセット名 [(メンバー名)]

〔, 開始行番号 (, 終了行番号)〕

〔, **N U M**  
〔, **S N U M**  
〔, **N O N U M**〕

〔, **C O L U M N** (開始位置: 終了位置, ……………)〕

〔, **P R I N T** ( { データセット名 [(メンバー名)] } )  
〔, **S Y S P R I N T** (出力クラス) 〕

オペランド等は詳細は、HELP△LISTによって調べて下さい。

(ii) LISTPDS

区分データセットに関する次の情報を表示する。

- データセット名      • メンバー数      • 未使用スペース量
- メンバー一覧
- 各メンバーのディレクトリ上のユーザ情報(管理情報)
- 各メンバー(ロードモジュール)の属性(オプション指定)
- 各メンバーの大きさ      • 総無効スペース量

オペランド等についてはHELP△LISTPDSの投入により詳細情報を得てください。

(iii) LISTSP

データセットに関する次の情報を表示する。

- データセット名
- データセットが存在するボリューム通し番号
- データセットの編成
- データセットの割り当てスペース量
- データセットの未使用スペース量
- データセットの未使用エクステント数
- データセットの増分情報
- データセットが割り当てられているエクステントの詳細情報

オペランド等についてはHELP△LISTSPの投入により詳細情報を得てください。データユーティリティコマンドの詳しい説明はマニュアルVOS3 TSDUT(8090-3-313)を参照してください。

⑥ T S L O G が公開されました。

TSLOGは利用者がTSS端末で行なった会話の過程(ログ)をデータセットに保存したりプリンターに出力する機能です。

計算結果をエディタにより検索・編集した情報が画面のみでなくデータセットに出力されるので、計算結果の必要部分の抽出が簡単にできます。

T S L O G

T S L O G S T A R T .....

E D I T

F A △ E N E R G Y =

'ENERGY='を含む行の検索結果

E N D △ N

T S L O G E N D

} この部分がTSLOGによりデータセット/プリンターに出力される。

TSLOGのオペランドを省略すると、スプール(SYSPRINT(T))に出力されるので、SOMにより利用者のデータセットに移すことができる。

S O M

S / \* ( T 1 0 0 0 0 1 ) ..... STATUSサブコマンドにより表示されたセッション中のジョブを指定する。

S / S A V E @ T S L O G ( A )

S / P R I N T

} データセットに保存する。又はプリンターに出力する。

```

T S L O G   { S Y S P R I N T [( T )]
              P R I N T ( データセット名 [(メンバー名)] ) } 開 始
              E N D ..... 終 了
              A C T I V A T E ..... 再 開
              D E A C T I V A T E ..... 中 断

```

データセット名には識別子 L I S T が自動的に付加される。

E D I T コマンドの機能強化について

- ⑦ T S S の標準エディタ E D I T の行番号なしデータセットの編集がらくになりました。
- (i) 行番号のついていないデータセットを編集する場合、仮行番号が自動的に付加されるので、この番号を行番号とみなして編集することができます。なお、仮行番号の場合は番号の右に：(コロン)が表示されます。

編 集 例

```

L I S T
1 0 0 : I N T A G E R * 4   X , Y , A , S , M , D
2 0 0 : A = X + Y
3 0 0 : S = X - Y
4 0 0 : D = X / Y
5 0 0 : R E T U R N
6 0 0 : E N D
C ^ 1 0 0 ^ / I N T A / I N T E /
3 5 0 ^   M = X * Y
5 0 0 ^   S T O P   (又は500 : S T S P でもよい。したがって、29S
                    などのスクリーンエディタのできる端末で行の再入力を行な
                    うとき、:を削る必要がない)

```

- (ii) 回線異常や時間切れなどで、E D I T 中のセッションが打ち切られたとき、編集のテキストは @@ E D I T . 識別子に自動的に保存されます。次のセッションで、E D I T @@ E D I T . 識別子とすれば中断点から再 E D I T できます。

- ⑧ S O M の機能追加及び修正

新らしく追加されたサブコマンド及び機能修正について次に示します。

- (i) P R I N T サブコマンド

出力行数が表示されます。

S / P R I N T

640 LINES PRINTED MSGCLASS(D)

S/

(i) ACC Tサブコマンド(新コマンド)

バッチジョブの課金情報を表示する。

(ii) L I S Tサブコマンド

出力結果の入っているデータセットの1行目から10行目(標準値)までをリストする。JCL(ジョブ制御文)エラーを見る場合に使用するとよい。

指定方法

L I S T [データセット名], [ { リスト開始行 } ], [ { リスト終了行 } ]

(iv) ジョブ名コマンドのジョブ通し番号

JSS3からJSS4に変更になったことにもなって、ジョブ名形式が変わりました。

指定方法(サブコマンド名の部分のみ)

\* X3 ( J A 1 0 0 0 1 )      バッチジョブ

\* ( T B 1 0 0 1 0 )      TSSジョブ

(注) JやTのあとにはスペースを入れないで下さい。

## 7. 資 料

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

分子研規則第6号

昭和56年4月14日制定

(目的)

第1条 この規則は、岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則(昭和56年分子研規則第4号)第4条第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。

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

(任期)

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

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。

(委員長)

第4条 運営委員会に委員長を置き、委員の互選による。

(議事)

第5条 運営委員会は、委員の三分の二以上の出席がなければ、議事を開き、議決することができない。

(委員以外の者の出席)

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

(庶務)

第7条 運営委員会の庶務は、総務部国際研究協力課において処理する。

附 則

この規則は、昭和56年4月14日から施行する。

## 7.2 電子計算機センター運営委員会

(昭和55年度)

○諸 熊 奎 治	分子研教授，センター長	センター委員
柏 木 浩	分子研電子計算機センター助教授	〃
広 田 栄 治	分子研教授	分子研所内委員
米 沢 貞次郎	京大工教授，分子研客員教授	〃
土 方 克 法	電通大教授	分子研所外委員
大 野 公 男	北大理教授	〃
朽 津 耕 三	東大理教授	〃
西 本 吉 助	阪市大理教授	〃
亘 弘	生理研教授	生理研委員
中 研 一	基生研教授	基生研委員

昭和55年度委員は岡崎国立共同研究機構発足のため任期は一年でした。開催日は昭和55年8月29日と昭和56年2月19日の2回でセンターの運営方針の討議及び利用申請の審査が行われた。

(昭和56～57年度)

諸 熊 奎 治	分子研教授，センター長	センター委員
柏 木 浩	分子研電子計算機センター助教授	〃
藤 山 常 毅	分子研教授	分子研所内委員
笛 野 高 之	阪大基礎工教授，分子研客員教授	〃
土 方 克 法	電通大教授	分子研所外委員
大 野 公 男	北大理教授	〃
佐々木 慎 一	豊橋技科大教授	〃
岩 田 末 広	慶大理工助教授	〃
亘 弘	生理研教授	生理研委員



### 7.3 計算機関係申請書の審査方法と記入要領

分子科学研究所電子計算機センター

#### 1. 申請と審査方法

所外利用者（分子研・基生研・生理研所内を除く）からの申請に対するCPU時間の割当は、施設利用、共同・協力研究のいかんによらず、電子計算機センター運営委員会（委員は、センター2分子研所内2，分子研所外4，基生研1，生理研1名，センターレポートNo.1 7.1および7.2節参照）の下記の手続きによる審査に基づきセンター長が許可する。

1.1 共同・協力および施設利用B（CPU時間が10時間を超えるもの。申請受付は2月と8月の年2回）

申請書，過去の利用報告書，発表論文，学会発表などに基づく，運営委員の評価の平均点から割当時間を算出する。現状では，割当時間には申請時間の20%から100%までの大きな差異が生じている。

1.2 施設利用A（CPU時間10時間以内。申請は毎月末）

あらかじめ運営委員会で定められた半年度毎の割当規則に基づき，センターが割当を行う。

1.3 大口のCPU時間追加申請（申請受付は随時）

既許可時間と追加申請時間の和が10時間を超えるものの中，追加申請時間が10時間または既許可時間の50%を超えるものは，変更願，様式1と2を（リプリント，プレプリントを添えて）提出する。これらの書類の他，提出済みの計算機利用申請書，利用報告書，発表論文学会発表などに基づく運営委員の評価が行われる。この場合，郵送による審査を行うので1ヶ月程度の時間を要する。

1.4 小口のCPU時間追加申請（申請受付は随時）

1.3に満たないCPU時間の追加についても変更願，様式1と2を提出する。あらかじめ運営委員会で定められた半年度毎の割当規則に基づきセンターが割当を行う。

1.5 CPU時間の追加以外の変更願（申請受付は随時）

変更願 様式1のみを提出する。センターの運用状況に基づきセンターが処理する。

#### 2. 研究課題（プロジェクト）について

利用点数割当の公正のため，およびセンター事務作業の省力のため，以下のことに御協力ください。

2.1 同一研究室はなるべく一つのプロジェクトにまとめる。

2.2 ユーザーが複数のプロジェクトにまたがることはなるべく避ける。

- 2.3 共同・協力研究の場合は、施設利用との重複は認められるが、時間申請は主として共同・協力研究に対して行い、施設利用に対してはプロジェクトやデータセットの継続性を維持するために最小限なものにおさえる。

### 3. 申請書記入要領

#### 3.1 計算機利用申請書

- a 研究課題は、期間途中で変更できないので具体的であると共に包括的なものにする。
- b 所属長（施設利用の場合）、指導教官（大学院生、研究生の場合）の印が押印されていないため、さしもどしになるケースが多い。
- c プロジェクトの目的、研究内容、実施計画、プロジェクトの特色の用紙（様式3）は、共同・協力研究の場合でも提出する。これらの欄は、審査の際の重要な判断材料になるので適当な大きさの文字で余白が残らないように十分に内容を記入する。
- d 過去に利用経験のある場合、プロジェクトの目的・研究内容の欄には、それまでの経過と成果を必ず記入する。
- e 実施計画の欄には、研究全体の実施計画、申請CPU時間が必要な理由などの他、具体的な計算機の利用方法、使用するプログラム（名称、開発者、既存のものか新規作成のものか）のような内容、特徴をもつものか、などを記入する。
- f プロジェクトの特色の欄には、研究の独創性、内容・方法の特色、国内外の類似の研究との関連などを記入する。

#### 3.2 計算機利用変更願

- a 様式1は、プロジェクトの計算機利用について変更がある場合には必ず提出する。変更内容の欄については、必要項目を記入する。変更理由の欄については、CPU時間追加以外の変更について余白が残らないよう十分に理由を記入する。
- b 様式2は、CPU時間追加審査の際の重要な判断資料になるので適当な大きさの文字で余白が残らないように十分に内容を記入する。進行状況の欄については、利用申請書で提出済みの研究内容、計画のあらましとこれまでの経過と成果を、CPU時間追加の欄には追加理由を具体的に記入する。今後の実施計画と達成目標の欄には、追加CPU時間が認められた場合の実施計画、達成目標と、その見通しを記入する。

#### 3.3 端局設置申請書

特定回線、公衆回線を通じて、リモートバッチステーション、TSS端末により計算機を利用する場合、端局の構成が変更される場合には、必ず提出する。この申請書を提出せずに上記利用を行った場合には、全ての利用を停止することがある。（55年秋から上記利用をモニタできるようになる。）

#### 7.4 電子計算機センター職員（昭和56年5月現在）

諸熊 奎治	センター長（併任）
柏木 浩	助 教 授
伊奈 諭	係 長
西本 史雄	技 官
山本 茂義	〃
堀江 千枝子	事務補佐員
中根 三恵	〃

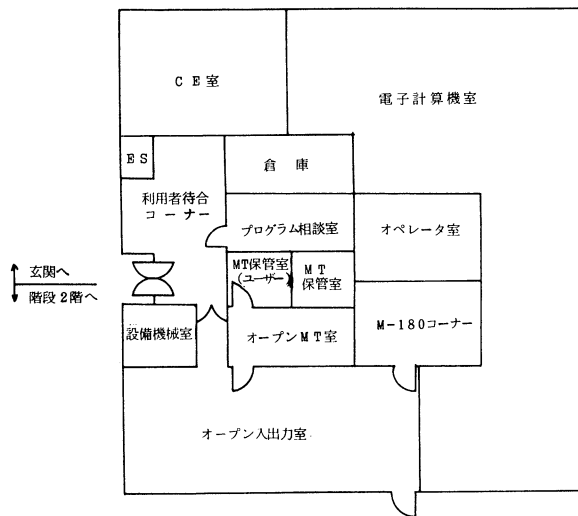
#### 7.5 建 物 図

《センター棟平面図》

センター棟は管理棟、図書館棟と棟続きで管理棟の玄関から入る。センター棟は下図のように1階、2階約1000㎡からなっています。

ユーザーが利用できる室は以下のとおり。昭和56年4月以降はM-180コーナーが廃止された。

1階



##### 1) 利用者待合コーナー

計算結果の出力待ちなどのためのコーナー

##### 2) プログラム相談室（兼受付）

プログラムとシステムに関する相談指導および受付事務を行なう。

##### 3) オープン入出力室

カードの入出力，ラインプリンタ出力，XYプロッタ出力，ジョブ状態表示のためのオープン利用室。

4) オープン M T 室

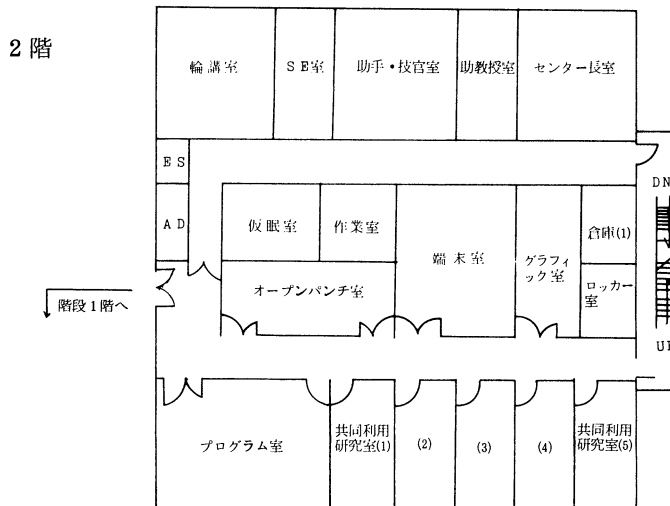
オープン M T システムの利用を行なう。

5) ユーザ用 M T 保管室

ユーザ用 M T を置きますが、センターは保管の責任を負わない。

6) M - 180 利用コーナー (オペレータ室の一部)

昭和 5 5 年 4 月～昭和 5 6 年 3 月のみ



1) プログラム室

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

2) 共同利用研究室

遠隔地ユーザの居室。センターの許可を受けて利用する。

3) オープンパンチ室

キヤードパンチ機とインタープリタの利用室。

7.6 端末設置状況 (昭和 5 6 年 5 月現在)

(1) R J E ステーション

(分子研) 所内	実験棟	H T 5 4 0 / 3 0
	研究棟	〃
生理学研究所		H I T A C M - 1 5 0
		H I T A C 2 0
機構総合図書館		H I T A C L - 3 3 0

(2) 電話回線

300ボー	3回線	設置端末数	34回線
1200ボー	4回線	〃	9回線

(3) 構内回線(専用線)

1200ボー	8回線
--------	-----

### 7.7 応用プログラム相談員一覧

酒井章吾	関西大工研究生	昭和55年4月～昭和55年7月
花村光泰	東北大理, 分子研受託大学院生	昭和55年1月～昭和57年3月
長嶋雲兵	北海道大理, 分子研受託大学院生	昭和55年4月～昭和57年3月
渡辺義孝	大阪市大理, 分子研受託大学院生	昭和56年4月～昭和57年3月

### 7.8 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る。センターではプログラム室に常設しているが、個人で購入を希望するときの申し込み先は次の通り。

〒113 東京都文京区本郷7-3-1  
東大構内財団法人 好仁会内  
アカデミービジネスサービス株式会社  
TEL 03-811-7786, 2090

FORTRAN77関係	最適化FORTRAN77言語 .....	8080-3-257
	〃 〃 使用の手引 .....	8080-3-258
	〃 〃 端末使用の手引 .....	8090-3-222
HQED	HQED文法 .....	8090-3-309
	〃 使用の手引(基礎編) .....	8090-3-008
	〃 〃 (応用編) .....	8090-3-009
	TSS入門(HQED編) .....	8090-3-011
TSS	TSSコマンド .....	8090-3-120
	TSS操作 .....	8090-9-105
	TSSメッセージ .....	8090-9-106
	TSS解説 .....	8090-3-136
	TSDUT .....	8090-3-313

メッセージ	システムメッセージコード .....	8090-9-103
	サービスプログラムメッセージ .....	8080-9-301
MSL II	MSL II 機能編第 1 分冊 .....	8080-7-120
	"    "    第 2 分冊 .....	8080-7-121
ジョブ管理	ジョブ制御言語 .....	8090-3-102
	ジョブ管理解説 .....	8090-3-101
	リンケージエディタ/ローダ .....	8080-3-301
データ管理	データ管理解説 .....	8080-3-105
ユーティリティ	ユーティリティ第 2 分冊 (データセットユーティリティ)	
	.....	8080-3-303
DESP	構造化プログラミング用画面エディタ DESP 操作...	8090-3-308
	"    DESP .....	8090-3-307
GPSL	汎用図形出力ルーチン集 GPSL 機能編	
	第 1 分冊 基本・機能ルーチン .....	8080-7-096
	第 2 分冊 幾何形状・製図ルーチン .....	8080-7-097
FORTRAN 関係	FORTRAN 言語 .....	8080-3-205
	最適化 FORTRAN 使用の手引 .....	8080-3-208
	"    端末使用の手引 .....	8090-3-215
数学関数	数学関数 .....	8080-3-218
SAFE	SAFE 使用の手引 .....	8090-3-127

## 7.9 ユーザ論文一覧

題                  名	著          者          名	発          表          誌
The Position Dependence of the SCF Screened Potential in Several Nonbenzenoid Hydrocar- bons Containing a Four-Membe- red Ring	Hiroyuki YAMAGUCHI Kunihiko NINOMIYA Masateru OGATA	CCACAA <b>53</b> (1980)675
A Molecular Dynamics Simulati- on of Molten(Li-Rb)Cl Impliyi- ng the Chemla Effect of Mobi- lities	Isao OKADA Ryuzo TAKAGI Kazutaka KAWAMURA	Z. Naturforsch <b>35a</b> (1980)493

題 名	著 者 名	発 表 誌
Synthesis and Molecular Structure of TPPSn-Mn(Co) <sub>4</sub> -Hg-Mn(CO) <sub>5</sub> . 1/2CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> :a Bent Sn-Mn-Hg-Mn Array Extended Over a Porphyrin Ring	Satoru ONAKA Yoshinori KONDO Koshiro TORIUMI Tasuku ITO	Chem. Lett. (1980)1605
Isolation and X-Ray Molecular Structure Analysis of (C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O) <sub>2</sub> P(OC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> )Mn·(CO) <sub>2</sub> {P(OC <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>3</sub> } <sub>2</sub> From R <sub>3</sub> Sn-Mn(CO) <sub>3</sub> {P(OC <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>3</sub> } <sub>2</sub> (R=CH <sub>3</sub> and C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> ) by Photochemically Induced Orthometalation Reaction	Satoru ONAKA Yoshinori KONDO Nobuhiro FURUICHI Koshiro TORIUMI	Chem. Lett. (1980)1343
Vertical Ionization Potential in Hydrogen Molecule with Many-Body Green's Function Method	Hiroshi UEHARA Takuma ITAGAKI	Int. J. Quantum Chem. <b>18</b> (1980)73
Relativistic Self-Consistent-Field Methods for Molecules. I. Dirac-Fock Multiconfiguration Self-Consistent-Field Theory for Molecules and a Single-Determinant Dirac-Fock Self-Consistent-Field Method for Closed-Shell Linear Molecules	O. MATSUOKA N. SUZUKI T. AOYAMA	J. Chem. Phys. <b>73</b> (1980)1320
Relativistic Self-Consistent-Field Methods for Molecules. II. A Single-Determinant Dirac-Fock Self-Consistent-Field Method for Closed-Shell Polyatomic Molecules	T. AOYAMA H. YAMAKAWA O. MATSUOKA	J. Chem. Phys. <b>73</b> (1980)1329
Ab initio LCAO MO SCF Calculation of Potential Surface of the NO <sub>2</sub> Molecule	Keiko MORITA Hiroshi SATO Eiichi ISHIGURO	Int. J. Quantum Chem. <b>18</b> (1980)151
Active Reaction Subsystem CI studies of Peroxy Free Radicals Aminoperoxy Radical(H <sub>2</sub> NO <sub>2</sub> )	Kizashi YAMAGUCHI Suehiro IWATA	Chem. Phys. Lett. <b>76</b> (1980)375
Ab initio Unrestricted Hartree-Fock(UHF)and UHF-Natural CI Studies of Ozone	Kizashi YAMAGUCHI	Int. J. Quantum Chem., <b>18</b> (1980)101

題 名	著 者 名	発 表 誌
Ab initio UHF and UHF NO CI Approaches for Quasi-Degenerate Systems: Methylene Peroxide (CH <sub>2</sub> OO)	K. YAMAGUCHI S. YABUSHITA T. FUENO S. KATO K. MOROKUMA S. IWATA	Chem. Phys. Lett. <b>71</b> (1980)563
Geometry Optimization of the Ring-Opened Oxirane Diradical : Mechanism of the Addition Reaction of the Triplet Oxygen Atom to Olefins	Kizashi YAMAGUCHI Satoshi YABUSHITA Takayuki FUENO Shigeki KATO Keiji MOROKUMA	Chem. Phys. Lett. <b>70</b> (1980)27
On the Mechanism of Ene Reaction of Electron-Rich Olefins with Singlet Oxygen. Ab-initio MO Calculations	Kizashi YAMAGUCHI Takayuki FUENO Isao SAITO Teruo MATSUURA	Tetrahedron Lett. <b>21</b> (1980)4087
Unrestricted Hartree-Fock(UHF) calculations of singlet and triplet diradicals: Nitrene peroxide(HNOO)	Kizashi YAMAGUCHI Satoshi YABUSHITA Takayuki FUENO	S. Chem. Phys. <b>71</b> (1979)2321
Physicochemical Properties of SF <sub>6</sub> 6847, a Potent Uncoupler of Oxidative Phosphorylation in Mitochondria in Relation to its Activity	Kenichi YOSHIKAWA Noriyuki KUMAZAWA Hiroshi TERADA Kazuo AKAGI	Int. J. Quantum Chem. <b>18</b> (1980)539
MO Calculation of Some Aromatic Radicals. Geometry and Spin Density of Benzyl Radical	Toshihiro AMANO Yoshihiro OSAMURA Eiko KAI Kichisuke NISHIMOTO	Bull. Chem. Soc. Japan. <b>53</b> (1980)2163
Theory of Ion Neutralization near the Surface	Yoshiaki MUDA Teruo HANAWA	Surface Science <b>97</b> (1980)283
MO Study on the Photochemical Isomerization of Isoxazole	H. TANAKA T. MATSUSHITA Y. OSAMURA K. NISHIMOTO	Int. J. Quantum Chem. <b>18</b> (1980)463
Force in SCF Theories	Hiroshi NAKATSUJI Katsuya KANDA Teijiro YONEZAWA	Chem. Phys. Lett. <b>75</b> (1980)340



題 名	著 者 名	発 表 誌
A Molecular Orbital of the Rotational Inhibition of $\text{NH}_4^+$ in Tetranactin	Hideaki UMEYAMA Setsuko NAKAGAWA Tomoko NOMOTO Ikuo MORIGUCHI	Water and Metal Cations in Biological Systems edited by B. Pullman and K. YAGI(1980) Japan Scientific Soc. Press.
Proton Migration in Proton Cryptate: A Molecular Orbital Study on a Proton Cryptate Model	Hideaki UMEYAMA	Chem. Pharm. Bull. <b>28</b> (1980)1740
A Molecular Orbital Study on Tetranactin- $\text{NH}_4^+$ Complex	Hideaki UMEYAMA Setsuko NAKAGAWA Tomoko NOMOTO Ikuo MORIGUCHI	Chem. Pharm. Bull. <b>28</b> (1980)745
A Molecular Orbital Study on the Approach of Hydride Ion to $\text{NAD}^+$ as a Coenzyme	Hideaki UMEYAMA	Chem. Pharm. Bull. <b>28</b> (1980)1317
A Molecular Orbital Study on the $(\text{CH}_3)_2\text{O}-\text{BH}_3$ Donor-Acceptor Complex	Hideaki UMEYAMA	Chem. Pharm. Bull. <b>28</b> (1980)1633
Simulation of the Enzymatic Reaction of Dogfish $\text{M}_4$ Lactate Dehydrogenase: A Molecular Orbital Study on the Reactivity of pyruvate	Hideaki UMEYAMA Setsuko NAKAGAWA Tomoko NOMOTO	Chem. Pharm. Bull. <b>28</b> (1980)2874
Molecular Orbital Studies on the $\text{CH}_3\text{CN}-\text{BH}_3$ , $\text{HCN}-\text{BH}_3$ , $\text{CH}_3\text{NC}-\text{BH}_3$ and $\text{HNC}-\text{BH}_3$ Complexes	Hideaki UMEYAMA Tomoko NOMOTO	Chem. Pharm. Bull. <b>28</b> (1980)2279
Effects of the Hydrogen Bond between His 57 and Asp 102 on the Lone Pair Molecular Orbital of Nitrogen of His 57 in Serine Proteases	Hideaki UMEYAMA Setsuko NAKAGAWA	Chem. Pharm. Bull. <b>28</b> (1980)2292

題 名	著 者 名	発 表 誌
The Molecular Orbital Study on the Role of Hydrogen Bonding System in the Active Site of Serine Proteases	Setsuko NAKAGAWA Hideaki UMEYAMA Takako KUDO	Chem. Pharm. Bull. <b>28</b> (1980)13
Theoretical Considerations on the Preference of Alkyl/Phenyl Approached Conformations in 1-Alkyl-2-Phenyl Compounds Ar-CH(CH <sub>3</sub> )-X-R	Minoru HIROTA Kazuhisa ABE Toshiyuki SEKIYA Hiroshi TASHIRO	Chem. Lett. (1980)685
シンジオタクティック1,2ポリブタジエンフィルムの一軸延伸にともなう配向挙動と非結晶側鎖コンフォメーション変化	加藤 美治, 日比 貞雄 藤田 健一, 前田 松夫 宮脇 正,	繊維学会誌 <b>36</b> (1980) T-417
高密度ポリエチレンフィルムのロール延伸にともなう配向挙動と結晶転移	日比 貞雄, 藤田 健一 前田 松夫, 今田 一男 柿沢 伴紀, 滝野 孔延	繊維学会誌 <b>36</b> (1980) T-371
Zwitterionic Mechanisms for Photooxygenation Reactions of N-Activated C=C double Bonds: Full Geometry Optimizations of the Diradical and Zwitterionic Intermediates by Ab Initio SCF Method	Kizashi YAMAGUCHI Satoshi YABUSHITA Takayuki FUENO	Chem. Phys. Lett. <b>78</b> (1981)566
Geometry Optimizations of the Dioxetane, Peroxide and 1,4-Diradicals for the Ethylene Plus Molecular Oxygen System: Mechanism of Photooxygenation of Olefins	Kizashi YAMAGUCHI Satoshi YABUSHITA Takayuki FUENO	Chem. Phys. Lett. <b>78</b> (1981)572
Self-consistent Electronic Structures of Magnetic Semiconductors by a Discrete Variational X $\alpha$ Calculation. I. Ferromagnetic Spinels, CdCr <sub>2</sub> S <sub>4</sub> and CdCr <sub>2</sub> Se <sub>4</sub>	Tamio OGUCHI Takeshi KANBARA Kenichiro GONDAIRA	Phys. Rev. <b>B22</b> (1980)872
Microwave Optical Double Resonance of HNO: Rotational Spectrum in A <sup>1</sup> A''(100)	Kojiro TAKAGI Shuji SAITO Masao KAKIMOTO Eizi HIROTA	J. Chem. Phys. <b>73</b> (1980)2570

題 名	著 者 名	発 表 誌
Microwave Spectrum of Acetylene-d in Excited Vibrational States	Keiji MATSUMURA Takehiko TANAKA Yasuki ENDO Shuji SAITO Eizi HIROTA	J. Chem. Phys. <b>84</b> (1980)1793
The microwave spectrum of carbon dioxide- <sup>18</sup> O	Yasuki ENDO Kazuhiko YOSHIDA Shuji SAITO Eizi HIROTA	J. Chem. Phys. <b>73</b> (1980)3511
A High-Precision Wavelength Meter for Tunable Diode Laser Measurements of CO <sub>2</sub> and N <sub>2</sub> O Bands at 10 μm	Keiichi NAGAI Kentarou KAWAGUCHI Chikashi YAMADA Kazuo HAYAKAWA Yoshihiro TAKAGI Eizi HIROTA	J. Mol. Spectrosc. <b>84</b> (1980)197
Infrared Diode Laser Spectroscopy of the NS Radical	Keiji MATSUMURA Kentarou KAWAGUCHI Keiichi NAGAI Chikashi YAMADA Eizi HIROTA	J. Mol. Spectrosc. <b>84</b> (1980)68
Doppler-Limited Dye Laser Excitation Spectroscopy of the DSO Radical	Nobukimi OHASHI Masao KAKIMOTO Shuji SAITO Eizi HIROTA	J. Mol. Spectrosc. <b>84</b> (1980)204
The Laser Magnetic Resonance Spectrum of the ν <sub>2</sub> Band of NH <sub>2</sub>	Kentarou KAWAGUCHI Chikashi YAMADA Eizi HIROTA Juliet BUTTENSHAW John M. BROWN C. Robert PARENT Trevor J. SEARS	J. Mol. Spectrosc. <b>81</b> (1980)60
Doppler-Limited Dye Laser Excitation Spectroscopy of the HSO Radical	Masao KAKIMOTO Shuji SAITO Eizi HIROTA	J. Mol. Spectrosc. <b>80</b> (1980)334

題 名	著 者 名	発 表 誌
A Study of the Absorption, Circular Dichroism and Magnetic Circular Dichroism Spectra of a Flavin Derivative	Kiyoshi SHIGA Yasuzo NISHINA Iwao OHMINE Kihachiro HORIIKE Sabu KASAI Kunio MATSUI Hiroshi WATARI Toshio YAMANO	J. Biochem. <b>87</b> (1980)281
Theory of the Rydberg Spect- rum of triatomic hydrogen	Harry F. KING Keiji MOROKUMA	J. Chem. Phys. <b>71</b> (1979)3213
Reaction Mechanism of Hydro- boration. Ab Initio MO Study on the C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> + BH <sub>3</sub> Reaction	Shigeru NAGASE N. K. RAY Keiji MOROKUMA	J. Ame. Chem. Soc. <b>102</b> (1980)4536
Substitution Effect on Forma- ldehyde Photochemistry. Pote- ntial Surface Characteristics of HFCO	Keiji MOROKUMA Shigeki KATO Kimihiro HIRAO	J. Chem. Phys. <b>72</b> (1980)6800
Ab Initio Calculation of the a <sup>3</sup> Π - b <sup>3</sup> Σ <sup>-</sup> transition of CH <sup>+</sup>	Isao KUSUNOKI Shogo SAKAI Shigeki KATO Keiji MOROKUMA	J. Chem. Phys. <b>72</b> (1980)6813
Ab Initio MO Calculation of Force Constants and Dipole Derivatives for Formamide	Yoko SUGAWARA Yoshiaki HAMADA Akiko Y. HIRAKAWA Masamichi TSUBOI Shigeki KATO Keiji MOROKUMA	Chem. Phys. <b>50</b> (1980)105
Molecular Orbital Study of Photosynthetic Water Decomp- osition. Roles of Manganese and Proton-Accepting Site	Masami KUSUNOKI Kazuo KITaura Keiji MOROKUMA Chikayoshi NAGATA	FEBS Lett. <b>117</b> (1980)179
Variational Approach (SCF Ab Initio Calculations) to the Study of Molecular Interactio- ns: the Origin of Molecular Interactions	K. MOROKUMA K. KITaura	"Molecular Interaction" (1980)21

題 名	著 者 名	発 表 誌
Photoisomerization of polyenes : Potential Energy Surfaces and Normal Mode Analysis	Iwao OHMINE Keiji MOROKUMA	J. Chem. Phys. <b>73</b> (1980)1907
Theoretical Evidence for Intramolecular Hydrogen Bonding in 7-Norbornenol	Keiji MOROKUMA G. WIPFF	Chem. Phys. Lett. <b>74</b> (1980)400
Nonplanarity of $\pi$ Systems. An Ab Initio Study of Norbornene and Norbornadiene	G. WIPFF K. MOROKUMA	Tetrahedron Lett. <b>21</b> (1980)4445
Potential Energy Characteristics and Energy Partitioning in Chemical Reactions: Ab Initio MO Study of Four-centered Elimination Reaction $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{F} \rightarrow \text{CH}_2=\text{CH}_2 + \text{HF}$	Shigeki KATO Keiji MOROKUMA	J. Chem. Phys. <b>73</b> (1980)3900
Ab Initio Studies on the Electronic Structure of the FSO Radical	Shogo SAKAI Keiji MOROKUMA	Chem. Phys. <b>52</b> (1980)33
Photoisomerization of Polyenes; Reaction Coordinate and Trajectory in Triplet Mechanism	Iwao OHMINE Keiji MOROKUMA	J. Chem. Phys. <b>74</b> (1981)564
Energy Gradient with the Effective Core Potential Approximation in the Ab Initio MO Method and its Application to the Structure of $\text{Pt}(\text{H})_2(\text{PH}_3)_2$	Kazuo KITAURA Shigeru OBARA Keiji MOROKUMA	Chem. Phys. Lett. <b>77</b> (1981)452
A Molecular Orbital Study on the Zinc-Water-Glu 270 System in Carboxypeptidase A	Setsuko NAKAGAWA Hideaki UMEYAMA Kazuo KITAURA Keiji MOROKUMA	Chem. Pharm. Bull. <b>29</b> (1981)1
The Stability and Nature of An Si-C Double Bond. An Ab Initio MO Study for 1,1-Dimethylsilaethylene	M. HANAMURA S. NAGASE K. MOROKUMA	Tetrahedron Lett. <b>22</b> (1981)1813

題 名	著 者 名	発 表 誌
QCLDB-Quantum Chemistry Literature Data Base-A Trial	Y. OSAMURA S. YAMABE F. HIROTA H. HOSOYA S. IWATA H. KASHIWAGI M. TOGASHI S. OBARA K. TANAKA K. OHNO	Int. J. Quantum Chem. <b>18</b> (1980)393
Theoretical Study of Excitation Energies of Some $\text{CoF}_6^{n-}$ Complexes	Eisaku MIYOSHI Toshikazu TAKADA Shigeru OBARA Hiroshi KASHIWAGI Kimio OHNO	Int. J. Quantum Chem. <b>19</b> (1981)451
Photoionization Cross Sections of $\text{N}_2$ and $\text{O}_2$ in the Static Approximation	Fumihiko HIROTA	Chem. Phys. Lett. <b>74</b> (1980)67
New Scale of the Ionic Character of the Chemical Bond Using Multiconfiguration SCF Wave Functions	Kazuhiro ISHIDA Shuichi KADOWAKI Teiji YONEZAWA	Bull. Chem. Soc. Japan <b>54</b> (1981)967
How Strained is the "Flat" Benzene Ring in Superphane?	Hiizu IWAMURA Morimatsu KATO Hiroshi KIHARA	Tetrahedron Lett. <b>21</b> (1980)1757
Rotational Barriers in Bisadducts of 1-Cyano-1-methylethyl Radicals with Nitrones and Nitroso Compounds	Michiko IWAMURA Morimatsu KATO Hiizu IWAMURA	Organic Magnetic Resonance <b>14</b> (1980)392
Optical Response of Exciton-Phonon System I -Absorption Spectrum and Urbach-Martienssen Rule -	Hiroshi MIYAZAKI Eiichi HANAMURA	J. Phys. Soc. Japan <b>50</b> (1981)1310
星間雲における直鎖炭素分子の生成	鈴木博子	日本物理学会誌 <b>35</b> (1980)836

題 名	著 者 名	発 表 誌
An X-Ray Diffraction Study on the Structures of Bis- and Tris(ethylenediamine)cadmium (II) Complexes in Solution	Tadao FUJITA Hitoshi OHTAKI	Bull. Chem. Soc. Japan <b>53</b> (1980)930
Laser-Induced Fluorescence of Cs <sub>2</sub> and Role of Kinetic Energy in the Franck-Condon Principle	Hajime KATO	Int. J. Quantum. Chem. <b>18</b> (1980)287
Laser-Induced Fluorescence of NaK and the Dissociated Atoms	Hajime KATO Chifuru NODA	J. Chem. Phys. <b>73</b> (1980)4940
[Co(III)X(NH <sub>3</sub> ) <sub>5</sub> ] (X = Cl <sup>-</sup> , Br <sup>-</sup> , H <sub>2</sub> O, NH <sub>3</sub> ) の電子状態の ab initio 計算	原 敏 晴	和歌山工業高等専門学校研究紀要第15号 (1980)62
[CoX(NH <sub>3</sub> ) <sub>5</sub> ] の電子状態の半経験 SCF 法による計算	原 敏 晴	和歌山工業高等専門学校研究紀要第15号 (1980)57
Dynamic Structure of the Potent Uncoupler SF 6847 (3,5-Di- <i>t</i> -butyl-4-hydroxybenzylidene-malononitrile) and Its Derivatives	Kenichi YOSHIKAWA Noriyuki KUMAZAWA Hiroshi TERADA Motoharu JU-ICHI	Bull. Chem. Soc. Japan <b>54</b> (1981)1108
On the Concerted Mechanism of the Ene Reaction of Singlet Molecular Oxygen with Olefins. An Ab-Initio MO Study	K. YAMAGUCHI T. FUENO I. SAITO T. MATSUURA K. N. HOUK	Tetrahedron Lett. <b>22</b> (1980)749
Electronic Structure of Dirhodium Tetracarboxylate Complexes by the Ab Initio SCF MO Method	H. NAKATSUJI J. USHIO K. KANDA Y. ONISHI T. KAWAMURA T. YONEZAWA	Chem. Phys. Lett. <b>79</b> (1981)299
Clustur Expansion of the Wavefunction. Symmetry-Adapted-Cluster(SAC) Theory for Excited States	K. HIRAO H. NAKATSUJI	Chem. Phys. Lett. <b>79</b> (1981)292

題 名	著 者 名	発 表 誌
Ab Initio Calculations on the Geometry of the Dimethyl Ether-Boron Trifluoride Complex	F. HIROTA Y. KOYAMA S. SHIBATA	J. Mol. Struct. <b>70</b> (1981)305
水素結合と電荷移動錯体	梅 山 秀 明	化学と教育 <b>28</b> (1980)319
Potential Energy Surface of $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ and $[\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ Derived From Ab Initio MO Calculations	Mitsuru SANŌ Hideo YAMATERA	Chem. Lett. (1980)1495
On the Disappearance of Ferromagnetism in Disordered Fe-Al Alloys	Takeo JO Hisazumi AKAI	J. Phys. Soc. Japan <b>50</b> (1981)70
Band Structure and Compton Profile of Nb-Mo Alloy	Yuri NAKAO Shinya WAKOH	J. Phys. Soc. Japan <b>49</b> (1980)2423
Theory of the Electronic Structure of $\text{ReO}_3$ (001) Surface and the Surface Oxygen Vacancy	Masaru TSUKADA Nobuo TSUDA Fujio MINAMI	J. Phys. Soc. Japan <b>49</b> (1980)1115
Self-Consistent Madelung Potential for the Cluster Calculation of Partially Ionic Solids — Application to $\text{ReO}_3$ —	Masaru TSUKADA	J. Phys. Soc. Japan <b>49</b> (1980)1183
Self-Consistent DV-X $\alpha$ Cluster Calculation of Electronic Structure of the Si (111)-7 $\times$ 7 Model Surface	Katsuhiko NAKAMURA Toshiharu HOSHINO Masaru TSUKADA Shuhei OHNISHI Satoru SUGANO	J. Phys. Soc. Japan <b>49</b> (1980)1051
Chemisorption of Oxygen Atoms on Zinc(0001) Surface by DV-X $\alpha$ Cluster Calculations	E. MIYAZAKI H. ADACHI M. TSUKADA	Suppl. A La Revue Le Vide, Les Couches Minces, <b>201</b> (1980)176



題 名	著 者 名	発 表 誌
The Absolute Configuration of the(-) <sub>389</sub> -Tris(acetylacetonato)germanium(IV) Ion	Tasuku ITO Koshiro TORIUMI	Acta Cryst, B36(1980)2998
Oxidation of Alcohols with Oxoperoxobis(N-Phenylbenzohydroxamato) Molybdenum(VI)	Hiroki TOMIOKA Kazuhiko TAKAI Koichiro OSHIMA Hitosi NOZAKI	Tetrahedron Lett. 21(1980)4843
Structure of trans-Difluoro {[7R(S), 14S(R)-5,5,7,12,12,14-hexamethyl-1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane}nickel(II) Pentahydrate	Koshiro TORIUMI Tasuku ITO	Acta Cryst. B37(1981)240
The Structures of High- and Low-Spin Nickel Chloride Complexes Containing the Macrocyclic Ligand [7R(S), 14S(R)-5,5,7,12,12,14-Hexamethyl-1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane	Tasuku ITO Koshiro TORIUMI	Acta Cryst. B37(1981)88
Synthesis of 2,2'-Bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphthyl(BINA-P), an Atropisomeric Chiral Bis(triaryl)phosphine, and Its Use in the Rhodium(I)-Catalyzed Asymmetric Hydrogenation of $\alpha$ -(Acylamino)acrylic Acids	A. MIYASHITA A. YASUDA H. TAKAYA K. TORIUMI T. ITO T. SOUCHI R. NOYORI	J. Ame. Chem. Soc. 102(1980)7932
Spin-state Equilibria of the Nickel(II) Complexes of 2,12-Dimethyl-3,7,11,17-tetraazabicyclo[11.3.1]heptadeca-1(17), 2,11, 13,15-pentaene Analogs in Water	Katsura MOCHIZUKI Masatoshi FUJIMOTO Haruko ITO Tasuku ITO	Bull. Chem. Soc. Japan 53(1980)2535
The Role Played by Water in Spin State Variations among Nickel(II) Halide Complexes Containing (7R, 14S)-5,5,7,12,12,14-Hexamethyl-1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane	Tasuku ITO Koshiro TORIUMI Haruko ITO	Bull. Chem. Soc. Japan 54(1981)1095

題 名	著 者 名	発 表 誌
Application of Multiconfigura- -tional Many-Body Perturbation Theory to the Calculation of Ionization Potentials, Electron Affinities and Excitation Ener- -gies	Shigeyoshi YAMAMOTO A. SAIKA	Chem. Phys. Lett. <b>78</b> (1981)316
An Ab Initio Calculation of the Electronic Structure of the $[\text{Co}(\text{CN}_6)]^{3-}$ Ion	Mitsuru SANO Yasuyo HATANO Hiroshi KASHIWAGI Hideo YAMATERA	Bull. Chem. Soc. Japan <b>54</b> (1981)1523