

# 目 次

寄 語	北大教授 大野 公 男	1
<b>1. 電子計算機センターの経過と成果発表会</b>		<b>2</b>
1.1 センターの経過		2
1.2 大型計算成果発表会		3
1.3 昭和56年度からのセンター関連組織		4
<b>2. 計算機システムと運用について</b>		<b>6</b>
2.1 計算機システムの特徴		6
2.2 ジョブクラスの構成		7
2.3 運用時間		7
2.4 利用点数		8
2.5 センターの主なサービス		8
2.6 新年度(昭和57年度)からの運用について		9
<b>3. 研究開発レポート</b>		<b>14</b>
3.1 スーパーコンピュータの動向とIAPのすすめ	助教授 柏 木 浩	14
3.2 論文清書システムの開発	技 官 西 本 史 雄	23
3.3 パソコン(PC-8800)を使ったTSSグラフィック端末 とソフトウェアについて	係 長 伊 奈 諭	27
<b>4. 一 般 報 告</b>		<b>38</b>
4.1 ライブラリプログラムの収集と開発		38
4.2 SOMによるLP節約の効果		44
4.3 講習会・プログラム相談		44
4.4 研究会・学会報告		45
<b>5. 昭和56年度稼働状況および利用者数</b>		<b>48</b>
5.1 利用申請プロジェクトおよび利用者数		48

5.2	システム稼動状況	48
5.3	ジョブ件数	48
5.4	CPU時間	48
5.5	無人運転状況	53
5.6	ジョブ処理状況の推移	53
<b>6.</b>	<b>センターより — 速報 (No.14 ~ 19) から再録 —</b>	<b>54</b>
<b>7.</b>	<b>昭和56年度システム新機能 — 速報 (No.14 ~ 19) から再録 —</b>	<b>63</b>
<b>8.</b>	<b>資料</b>	<b>73</b>
8.1	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規則	73
8.2	岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター運営委員会規則	74
8.3	電子計算機センター運営委員会委員	75
8.4	電子計算機センター職員 (昭和57年6月現在)	75
8.5	建物図	75
8.6	応用プログラム相談員一覧	77
8.7	端末設置状況 (昭和57年5月現在)	77
8.8	マニュアルの紹介と購入方法	77
8.9	ユーザ論文一覧	79
<b>9.</b>	<b>昭和56年度研究課題および利用報告書</b>	<b>96</b>
9.1	昭和56年度研究課題一覧と利用報告書提出状況 (利用点数3800点未満)	97
9.2	昭和56年度利用報告書 (利用点数実績3800点以上)	105

寄 語

## 分子研電子計算機センターについて思うこと

北海道大学教授 大野 公 男

DNAの塩基対G-Cについて、プロトンの位置を変えて27個の異った核配置の非経験的SCFMO計算をClementi達がやってのけたのが論文<sup>\*</sup>)となって発表されたのは1971年のことだからもう10年余も昔のこととなる。日本では全国共同利用のいわゆる大型計算機センターが7ヶ所やっと揃って稼働し始めたころであった。105個の短縮GTOを用い、 $7.7 \times 10^6$ 個の分子積分を計算し、当時の最高速機IBM360/195<sup>\*\*</sup>)を8日間使ってなしとげられたClementi達の計算は全く驚くべきもの、日本にいる我々にとって全然手のとどかない世界の出来事に思われた。

電子計算機の進歩、特に日本におけるこの分野の急速な生長、それに分子研電子計算機センターの誕生とそのすぐれた運用により今や事情はすっかり変わったと言ってよいであろう。我々日本の分子科学者の利用しうる計算機資源は世界の先進国のそれと比較して優ることはあっても劣ることはなくなった。国際学会での発表や学術雑誌にあらわれる論文にも、この計算機事情の変化による効果は鮮明に現われている。分子研電算センターの運営に携わる諸熊センター長を始めとする教職員の方々の絶ゆまぬ努力に心から感謝すると共に、巨大な計算機システムの能力を十分に活用するために傾けられる研究者の英知に深い敬意を払いたい。

一方計算機はあくまでも道具である。加速機が高エネルギー物理学の実験的研究に必要であるように、分子科学の研究一般、特に計算分子科学とでも呼ぶべき研究(例えば反応の動力学、結晶の構造解析、蛋白質を含む高分子の構造、表面の物理化学、多電子系の諸性質などの主に理論的研究)に欠くことのできぬものであるが、しかし道具である。加速機建設について開発される多くの新工夫が学問の評価を受けるのと同様に、大型計算機を活用するためのアルゴリズムの発展は十分に評価されねばならない。しかしより総合的な評価は、この分子研電算センターを使った研究によって、分子科学がどれだけ進歩したか、あるいは世界の分子科学者がどれだけギクリと感じるかによって下されることになろう。

またこれは分子科学に限ったことではないが、学術研究における電子計算機の利用は、今まで主であった情報処理による学術情報の生産以外に、その蓄積、流通に大きな役割を果そうとしている。そのためのいわゆる“学術情報システム”が有効に作動するためには、国内的な協同作業、システム化が必要であるばかりか、国際間の協力も欠くことができなくなろう。相当な規模の初期投資があるにも拘らずお国の台所事情が悪くて、なかなか離陸できないでいるこの大型プロジェクトが走り出す日の遠くないことを期待したい。その暁には分野別共同利用機関の電算センターとして分子研電算センターが先導的役割を果すことを願って止まないものである。

<sup>\*</sup>) E. Clementi, J. Mehl, W. uon Niessen: J. Chem. Phys. 54, 508 (1971).

<sup>\*\*</sup>) その演算速度はM200Hの約半分と推定される。

# 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、表1.1.1のような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、レーザープリンタ出力システムLAMなど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61本あり56年には10200回利用された。

表1.1.1に示すように利用者数は昭和56年度に450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かるかに上まわっている。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57年度ではM-200H 2台の疎結合によって処理能力が45%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8.4）。これまでの2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。

表 1.1.1 利用者数と CPU 時間の推移

	53 年度	54 年度	55 年度	56 年度
計算機システム	M-180 × 2	M-180 × 2	M-200 H M-180	M-200 H } LCMP M-180 }
運 転 方 式	1 ~ 3 月 有 人	9 月 から 無 人	200 H 無 人 180 有 人	
利 用 者 数				
所 内	48	84	101	128
所 外	107	254	325	330
合 計	155	338	426	458
CPU 時間 (200 H 規 準)				
申 請	929	4666	11033	10230
許 可	816	3171	7427	8306
使 用	509	2405	5405	6320
最大限使用可能	822	3373	7045	8125
使用 / 最大限 %	62	71	77	78

注) 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 %  
 } LCMP : 162.5 時間 × (1 + 1/3) × 50 週 × 75 %

申請・許可分にはライブラリ開発使用分も含む。

使用実績はライブラリ開発、センター業務使用分などをすべて含む。

## 1.2 大型計算成果発表会

昭和 57 年 2 月、昨年に引き続き「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、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 57 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 : 1982年2月16日(火) 9:00 ~ 12:35

場 所 : 分子研・研究棟 101号室

プログラム

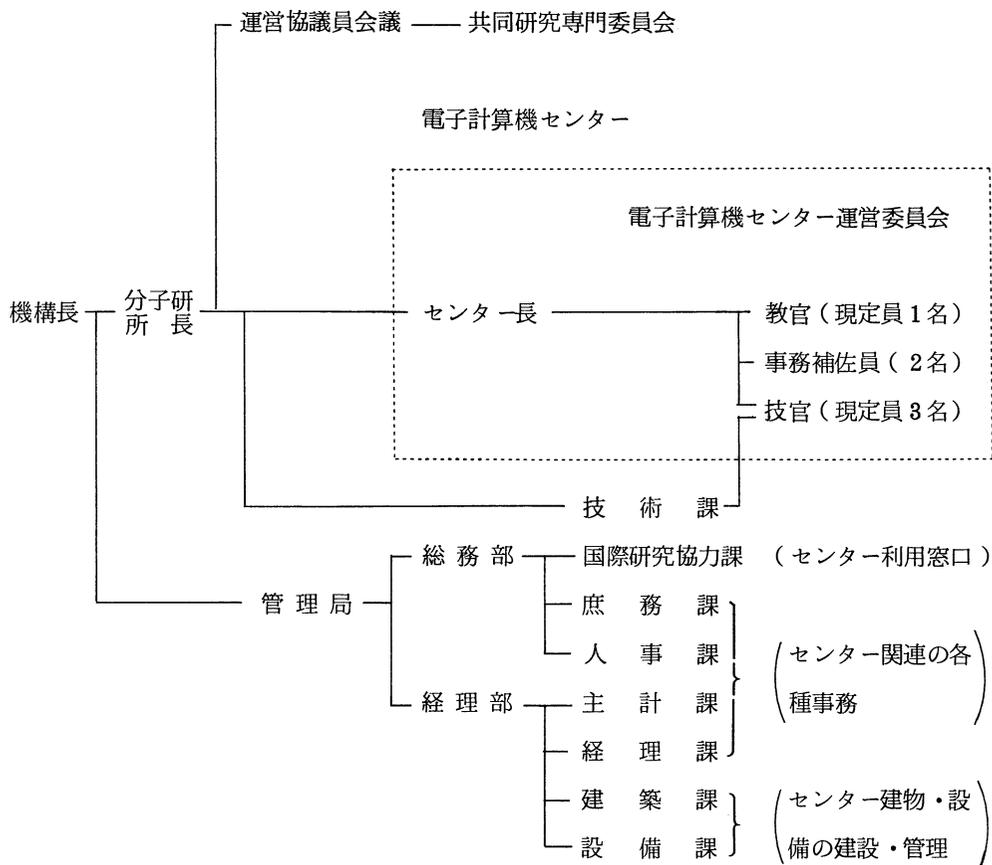
日 時 : 1982年2月16日(火) 9:30 ~ 12:35

場 所 : 分子研・研究棟 101号室

- 9:30 挨拶 センター長
- 9:35 中辻 博(京大 工)  
分子の電子状態の理論的研究
- 10:05 岡田 勲(東工大 総合理工学研)  
分子動力学シミュレーションによる熔融塩の輸送現象及び構造の研究
- 10:35 永瀬 茂(横浜国大 教育)  
非経験的分子軌道法によるラジカルイオン及び反応中間体の研究
- 11:05 権平権一郎, 神原武志(電通大 電気通信)  
二元及び三元化合物結晶とその混晶系の電子構造
- 11:35 福井謙一, 藤本 博(京大 工)  
化学反応の動的過程に関する理論的研究
- 12:05 梅山秀明(北里大 薬)  
酵素反応機構及び分子間相互作用の分子軌道法的研究
- 12:35 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8.1, 8.2, 8.3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56年4月～57年8月）は、図2.1.1に示すようにHITAC M-200H 1台とM-180 1台からなるLCMP（疎結合マルチプロセサ）システムである。M-200Hの主記憶容量は12MB、M-180は4MBでそれぞれベクトル演算高速化のための内蔵アレイプロセサ（IAP）を所有している。ディスク容量はシステムディスクが1600MB、共用ディスクが8890MBである。M-200Hをグローバルプロセサ、M-180をローカルプロセサとしTSS サービス、ジョブの入出

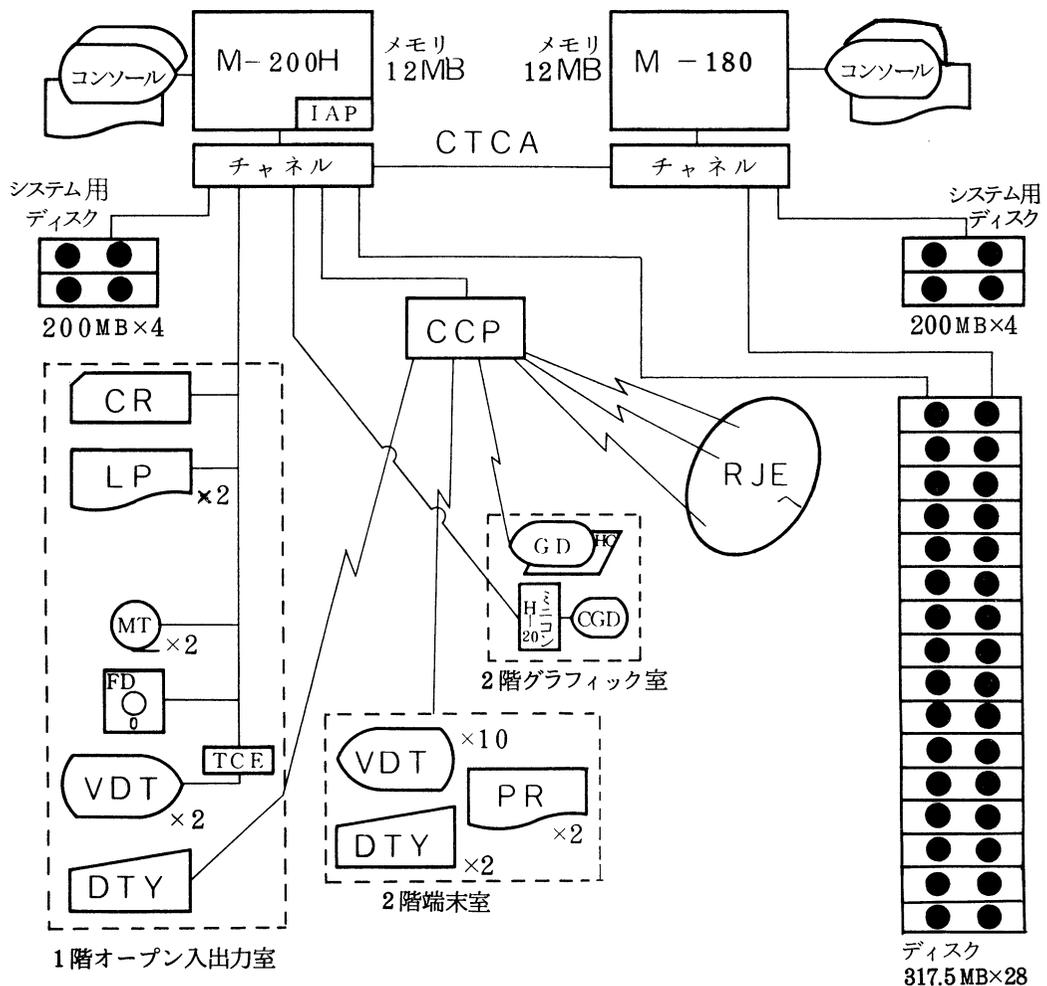


図 2.1.1 機器構成（昭和56年度）

力管理などはすべてグローバルプロセサが行っている。処理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(2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。7月にはTSSの普及により利用率の低くなったカードリーダー1台、オンラインカードパンチ機およびインタプリター、オフラインカードパンチ機4台が撤去され、代わりに大画面のLPイメージビデオディスプレイ10台が導入された。

## 2.2 ジョブクラスの構成

センター設立当初からの方針で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タイムはM-200Hの処理速度を基準としているためM-180側でのCPU時間は自動的に1/2のファクタが掛けられてM-200H相当のCPUタイムに変換されるようになっている。各ジョブクラスの処理プロセサとジョブクラスの構成を表2.2.1に示す。

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	8	2
TSS	M-200H	1000	2	2	2	0.5

表2.2.1 ジョブクラスの構成(昭和56年度)

## 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	
- ・無人運転時間 深夜・休祭日

但し、昭和56年4月~昭和57年3月はM-200HとM-180の2台で常時稼働サービスを行った。

## 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。

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

$a = 0.1 \text{ 点/秒}$      $b = 0.1 \text{ 点/頁}$      $c = 0.03 \text{ 点/枚}$      $d = 0.000006 \text{ 点/KB} \cdot \text{時}$

## 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うオープン方式である。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、教官によって行われ、データの再チェック、データベースへの登録を担当している。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～1981年の文献約3,011件を収容している。またこのQCLDBの文献データはElsevier社より出版の運びとなった。

### ・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) から購入したものの。

## 2.6 新年度（昭和57年度）からの運用について

### 2.6.1 システム構成と運用

システム構成は、M-200H + M-180 LCMP（疎結合マルチプロセサ）システムから M-200H × 2 LCMPシステムに移行し、磁気ディスクが 317.5 MB × 4 ボリューム（1270 MB）増強された。さらにラインプリンタ 1台がレーザビームプリンタ 1台に置き替えられた。昭和57年4月以降のシステム概要を図 2.6.1 に示す。また昭和57年3月にはポートセクタが設置され、所内回線網も 250回線分が整備されて今後の TSS 端末急増傾向に対する対策を行った。

またジョブクラスについては、M-200H × 2 LCMPシステムとなり主記憶容量も 12MB × 2 と増強されたため、REGION サイズの上限値を大幅にアップした。また E、I クラスの CPU タイム上限値が 120分に引き上げられた。昭和57年度ジョブクラスの構成を表 2.6.1 に示す。

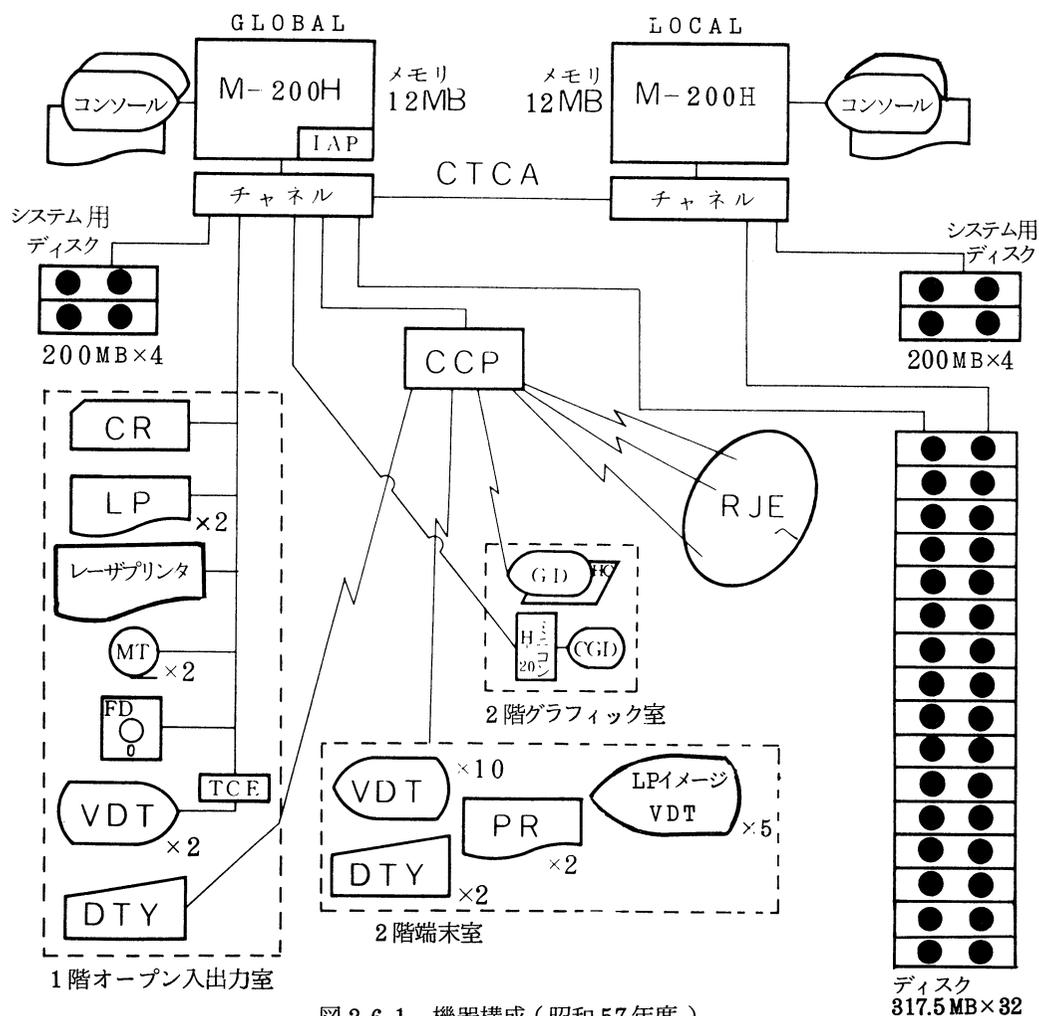


図 2.6.1 機器構成（昭和57年度）

ジョブクラス	CPUタイム (分)		REGION (KB)	
	標準	上限	標準	上限
A	1	1	512	7000
B	5	5	1024	7000
C	30	30	1024	7000
D	30	60	2048	7000
E	30	120	2048	7000
I	30	120	2048	7000
S	30	1430	2048	7000
TSS	2	2	1024	2048

表 2.6.1 ジョブクラスの構成 (昭和 57 年度 6 月現在)

## 2.6.2 電話回線による TSS 利用方法の一部変更

当センターでは、現在 300BPS (3 回線)、1200BPS (4 回線) で電話回線による TSS サービスを行っている。

電話番号は次のとおり

<0564> 53 - 6111 (代表) 300BPS

<0564> 53 - 6114 (代表) 1200BPS

接続端末の多様化に伴ない、接続の方法が一部次のように変更になった。

(従来)	ENTER LOGON	システムからのメッセージ
	<u>LOGON AB1CD2</u> /パスワード	ログオンコマンドの投入
(4月より)	ENTER TERMINAL TYPE	システムからのメッセージ
	<u>type</u>	ターミナルタイプの入力
	ENTER LOGON	
	<u>LOGON AB1CD2</u> /パスワード	

ターミナルタイプとしては、次のタイプがある。

<u>5215</u>	サイレント 700 (TI 社) 等の市販 TSS 端末 (従来どうり)
TERMA	ASCII コード系の TSS 端末 (マイコン端末やプリンタ付端末向)
TERMJ	JIS コード系の TSS 端末 ( " )
8844-10	グラフィックディスプレイ (テクトロ社相当) の TSS 端末

5215 が標準なので単にリターンキーのみ入力すれば 5215 とみなされる。

TERMA及びTERMJを指定すると次の機能を使うことができる。

速度の遅いプリンタ（ハードコピー）を持つディスプレイ端末でも300BPS及び1200BPSのスピードに対応できる。

一行送信後、プリンタが出力を終えるまで、一定時間送信を止める必要があるが、それはTERMINALコマンドで指定する。

TERMINAL FILLER (n) 又はNOFILLER

n: 200T ~ 2000T (200ミリ秒 ~ 2000ミリ秒 (2秒))

1C ~ 30C (1キャラクタタイム ~ 30キャラクタタイム)

当センターでの端末の条件設定値は次のとおり。

- 半2重
- 偶数パリティ (パリティ有)
- データ7ビット
- ストップビット1
- ボーレート300又は1200

#### (1) M-200H × 2の運用

サービスはIAP (内蔵アレイプロセサ) 付のM-200HとIAPなし (NOIAP) のM-200Hの2台で行い、メモリはそれぞれに12MBが付く。

IAP付M-200Hをグローバルプロセサとし、LCMPシステム全体の制御およびTSSサービス、通常のバッチジョブの処理を受け持つ。NOIAPのM-200Hはローカルプロセサとなり、バッチジョブの処理に専念する。IAP使用を陽に指定したジョブはグローバルプロセサに割り付けられるが、それ以外のジョブはシステムによって自動的にどちらかのプロセサへ割り付けられる。

運用時間帯、無人運転時間帯は従来と同じであるが、ジョブの混雑が比較的小さい場合には、節電のために、平日夜10時以降、土曜日夕方5時以降ローカルプロセサを停止してグローバルプロセサ (IAP付) のみでサービスをすることになる。混雑が大きい場合にはそのまま両プロセサのまま無人運転サービスを続ける。

#### 2.6.3 IAP (内蔵型アレイプロセサ) を使用するジョブについての注意

2台のM-200Hのうち、IAPは1台 (GLOBAL) のみに付いているので、IAPを使用するジョブは実行するプロセサを次のように指定しなくてはならない。

```
///AB1CD2X3 JOB PSWD, CLASS=A
```

```
///*MAIN SYSTEM=IAP
```

//EXEC.....

これはプログラムを実行させる場合に必要であり、コンパイルやリンケージのみ行う場合は必要ない。

#### 2.6.4 レーザープリンタの利用方法

4月よりレーザープリンタが利用できる様になった。

・利用目的として

- (1) GPSL (汎用図形パッケージ)による作図をレーザープリンタに出力する。
- (2) エディタなどによる作表を出力する。
- (3) RUNOFF (英文清書プログラム)によって清書された論文, 手紙を出力する。

などがあり, 高品質の出力が得られる。

出力させる内容 (イメージ及びテキスト) はあらかじめ特定のファイルに作成しておかなければならない。

イメージ : 書式オーバーレイともいわれ, レーザープリンタではドットという点で出力できる。この機能を利用して, 図形を出力させたり, 論文 (ギリシャ・科学記号, 上つき・下つきを含む) を出力することができる。

テキスト : 文字形式のデータ。ディスプレイに表示したり, 従来のプリンタに出力しているデータのことを総称する。

なお, イメージとテキストは同一ページに重ねて出力できる。

##### (1) イメージの作りかた

従来XYプロッタに出力していた図形をレーザープリンタに出力できる。時間が少しかかるので, 当面はバッチジョブで処理を行う。(GPSLのコマンドファイルをレーザープリンタのイメージに変換する)

・バッチジョブのJCLは次のように指定する。

//EXEC GPSL, INDSN=▼コマンドファイルの入っているデータセット名▼

イメージは@@ IMAGE. LOADという区分データセットにFORMA001というメンバー名で作成される。

##### (2) テキストの作りかた

テキストとしてプログラム, データ, ジョブの出力結果などのカード及びLPイメージがそのまま扱える。

・レーザープリンタへの出力のしかた。

オープンI/O室のTSS端末で, LAM(LASer beam printer Manager) コマンドシ

ステムにより出力する。次に例を示す。

LAM

L/INDSN    テキストの入っているデータセット名 } いずれか、又は両方(重ね合わ  
L/IMAGE    イメージのメンバー名                    } せ)が必要

L/PRINT    ..... レーザープリンタへの出力を行う。

L/END       ..... 終了

詳細及び他のサブコマンドについては、利用の手引を参照のこと。

なお、レーザープリンタについての経費が普通のプリンタの4～5倍かかるので、そのことを注意して使うことが必要である。

### 2.6.5 ポートセレクターの設置と構内通信回線の整備

最近各研究室または実験室にTSS端末を置いてセンターを利用するケースが増えてきている。この結果回線数が現在のコンピュータの回線収容能力を越えてしまうところまできている。一方回線数の増大に伴って研究棟を始めとする電話線も底をついてきた。当センターではこうした状況を回避するために将来の需要増を見越して構内通信回線網の整備を行うと同時にポートセレクタ(一種の通信回線自動交換機)を導入してより多くのユーザにTSS端末を利用してもらえるように配慮を行った。このポートセレクタは全部で128ポート、256ラインまで収容可能であるが現在は20ポート、40ラインの構成で1200BPSのサービスを行っている。構内通信回線の系統図を図2.6.2に示す。

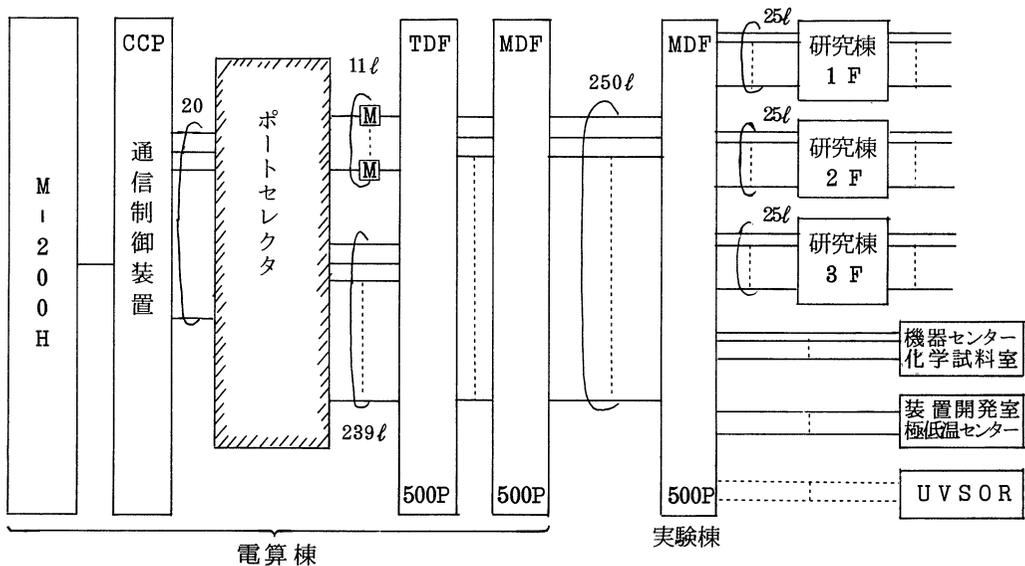


図 2.6.2 構内通信回線系統図

### 3. 研究開発レポート

#### 3.1 スーパーコンピュータの動向とIAPのすすめ\*

助教授 柏木 浩

##### 3.1.1 スーパーコンピュータの可能性<sup>1-3)</sup>

1970年代の中頃から欧米においては科学技術計算専用の超高速計算機が市場に出始めた。最も代表的なのがCRAY-1というパイプライン方式のベクタプロセッサで150MFLOPS(浮動小数点演算を $150 \times 10^6$ 回/秒)の最高速度を持っている。この他に同系列のCYBER-205, パラレルプロセッサのBSP, DAPなどが開発され、総称してスーパーコンピュータと呼ばれている。我が国においても日立、富士通、日電の各社がスーパーコンピュータを開発中であり、昭和58年頃から市場に出てくる見込みである。この他、FPS-164などのアタッチドアレイプロセッサがそのコストパフォーマンスの高さから急速に普及しつつあり、超高速科学技術計算のための専用機の利用が世界的なすう勢となっている。

量子化学の分野ではアメリカのローレンスリヴァモア研究所、NASA エームズセンター、ベル研究所、イギリスのダースベリ研究所、西ドイツのマックスプランク研究所などでCRAY-1を用いて分子軌道計算が行われている。これらの経験を総合するとベクタプロセッサには色々な制約があって最高速度の実現は大きな研究課題である。

現在日本で開発中のものも含めて近い将来利用可能なスーパーコンピュータの演算処理速度はM-200Hの2~100倍である。もし演算のベクタ化、パラレル化ができなければ高々2倍の速度、すなわち汎用機(スカラプロセッサ)の高速化のわくの中にとどまる。もしベクタプロセッサ、パラレルプロセッサの機能を100%活用できれば100倍のオーダーになる。100倍の高速化は物足りないと思われる向きもあろう。しかし、M200Hより100倍遅い計算機は何んであったろうか。20年近く前に東大大型センターに導入されたHITAC5020がこれに当る。もしスーパーコンピュータの最高速度を実現できるなら、我々は20年のタイムトリップを1~2年後に経験することになる。

表3.1.1は最近我々が分子研のM-180, M200Hを用いて計算した主な分子の一覧表である。現在この程度の分子のab-initio-SCF計算は比較的容易に実行できる。<sup>4)</sup>最後の行のクロロフィルの計算は側鎖を全て水素原子に置き替えたminimal basisの計算でM200Hで約20時間のCPU時間を要した。光合成の反応中心Iでは太陽光からの励起エネルギーで電荷分離が起り光合

---

\*文献1および東京大学大型計算機センターニュース(Vol.14, No.4, 1982)から一部追加削除の上転載。

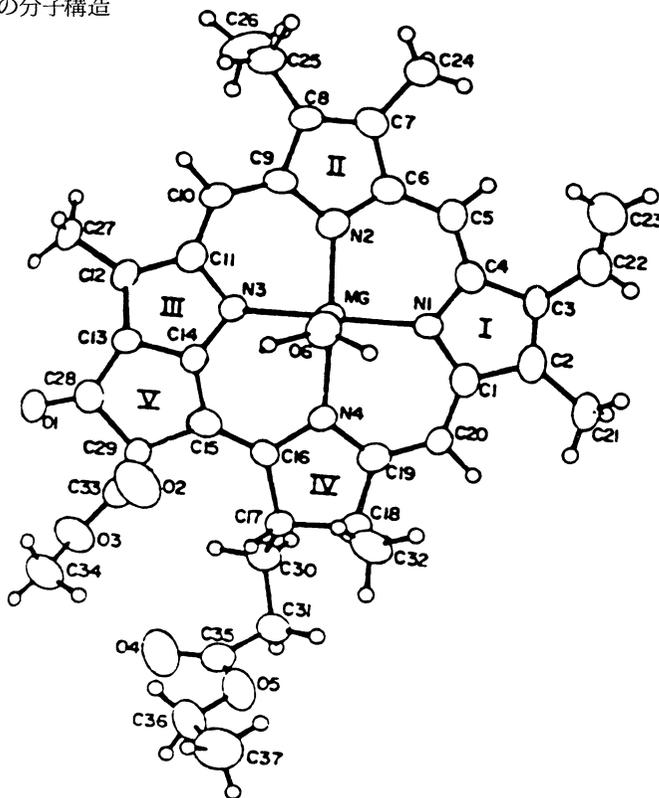
表 3.1.1 Ab initio MO calculations of Fe-porphine (FeP) complexes etc., using the JAMOL3 program package.

molecule/	symmetry/	atom/	electron/	basis set/	A0
FeP	D <sub>4h</sub>	37	186	DZ	300
FeP	D <sub>4h'</sub> C <sub>4v</sub>	37	186	PD	184
FeP(py)	C <sub>2v</sub>	48	228	PD	223
FeP(py)CO	C <sub>2v</sub>	50	242	PD	241
FeP(MH <sub>3</sub> )O <sub>2</sub>	C <sub>s</sub>	43	216	M (3d split)	173
Chlorophyll	C <sub>1</sub>	45	204	M (3s, 3p split)	169

DZ; double zeta. PD; partial double. M; minimal.

成が開始される。反応中心 I は図 3.1.1 のクロロフィル 2 個からなるダイマであると言われているが、その構造も電子レベルでのメカニズムも明らかでない。クロロフィルダイマの原子数は 174 個、電子数は 788 個である。内殻には minimal basis を用い、原子価軌道には double

図 3.1.1 クロロフィルの分子構造



zeta basis を用いると原子軌道の総数は 1,042 個になる。

SCF 計算のための CPU 時間が仮に軌道の数の 3 乗に比例するとして、表 3.1.1 のクロフィルモノマの計算を規準にすると  $(1,042/169)^3 \times 20$  時間  $\approx 4,700$  時間になる。これは M200H の 1 年分の CPU 時間に相当する。もしスーパーコンピュータで 100 倍の速度が実現すればこの計算時間は 47 時間になり、反応中心 I の構造の決定、電子レベルのメカニズムの解明も行われ光合成の初期過程は秘密のヴェールをぬぐ。もう少し飛躍した言い方をすればエネルギー問題は解消する。ここに挙げたのは演算処理速度が 100 倍になった時に、分子軌道計算の対象をどこまで大きくできるかという単純な例である。M200H より 100 倍遅い計算機では ab-initio-SCF 計算もおぼつかなかったのである。100 倍の高速化は分子科学の色々な面で新たな飛躍をもたらさだろう。

### 3.1.2 プログラムのスーパーコンピュータへの適合理化

量子化学計算のプログラムの CRAY-1 への書替えの経験はアメリカとイギリスのいくつかの研究グループで蓄積されている。HITAC の IAP についても簡単なテストが行われている。これらの経験を図 3.1.2 に要約した。既存の大部分のプログラムはコンパイラによる自動ベクタ化①ではほとんど効果がない。内側の DO LOOP の組替えなど局所的な修正②で 2 倍程度加速できる場合が多い。新しいアルゴリズムによる全面的な書替え③を行えば最高速度に近づく部分が相当ある。

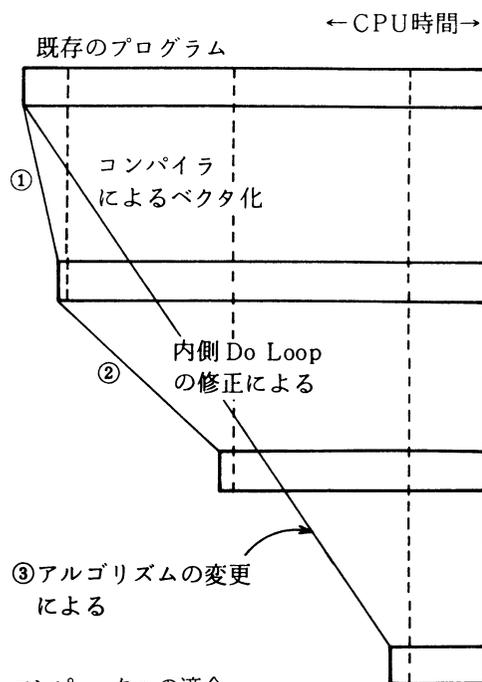


図 3.1.2 プログラムのスーパーコンピュータへの適合

②の好例が分子軌道計算のプログラム Gaussian 80 の CRAY-1 へのコンバージョンである。<sup>5)</sup> Gaussian 80 は主として FORTRAN で書かれた約 10 万ステップのプログラムである。このプログラムは元々 VAX-11 のために書かれているので、まず CRAY と同系統の CDC の FORTRAN に変換された。次に 5 個のサブプログラムの DO LOOP の組替えが行われた。効果は表 3.1.2 に示す通りである。二電子積分の原子軌道から分子軌道への変換は 5 倍に加速されている。CRAY-1 の最高加速率の 3 分 1 程度である。わずかなプログラムの修正でこれだけの効率を挙げられるのは評価できる点である。

イギリスのダースベリ研究所のグループは始めから CRAY-1 に適合したアルゴリズムで量子化学計算のプログラムを開発している。<sup>6)</sup> 表 3.1.2 にも表われた二電子積分の変換のステップは配置間相互作用計算や摂動計算に欠かせたいステップであるが、軌道の数が多い場合非常に長時間の CPU 時間を必要とする。このステップは次のような線型変換に分解できる。

$$X_{IJ} = \sum_{K=1}^N A_{IK} Q_{KJ} \quad (1)$$

表 3.1.2 Gaussian 80 のベクタ化<sup>5)</sup>

	CDC	CRAY	効率
	7600	1	
積分計算			
s, p のみ	2	1	1
s, p, d,	6	2	1.5
SCF 計算	5	1	2.5
積分変換	10	1	5
多体摂動計算	100	10	5


  
 (相対的な CPU 時間)

ここで、A は二電子積分の行列、Q は分子軌道の係数行列、X は部分的に変換された二電子積分の行列、N は軌道の数である。一個の二電子積分は 4 個の軌道で規定されるので (1) 式の変換を 4 回繰り返すことによって変換は完了する。全演算回数は例えば次の式で表わされる。

$$(33N^5 + 42N^4 + 15N^3 + 6N^2) / 24 \quad (2)$$

M200H で演算 1 回に  $1\mu\text{sec}$  かかるとして (2) 式の値を見積ると表 3.1.3 のようになる。

表 3.1.3 積分変換に要する CPU 時間

軌道数 N	CPU 時間
50	7 分
100	4 時間
200	5 日 ( 120 時間 )
400	5 ヶ月 ( 3,600 時間 )
800	14 年 ( 122,640 時間 )

この標準的なアルゴリズムでは軌道数 100 を超えることは極めて困難である。(1) 式を計算するための CRAY-1 用に考えられたアルゴリズム<sup>6)</sup> を図 3.1.3 に示した。ここでは分子軌道の係数行列 Q は密な行列であるが、積分 A はスパースな行列と想定されている。このアルゴリズムではまず一個の積分が拾い出され (SCALAR = A(I, K)), 一番内側の DO LOOP (DO 4, DO 5 など) は分子軌道について 64 個を単位に走る。64 というのは CRAY-1 のベクタレジスタの長さである。従って、CRAY の最高速度を実現できる上に積分の行列がスパースであることも利用できる。もしゼロでない積分の割合が 1% の大きな分子の計算を M200H より 100 倍速いスーパーコンピュータで実行すれば、1 万分の 1 の CPU 時間になり表 3.1.3 の 800 軌道の積分変換も 12 時間でできることになる。

CRAY-1 や M200H-IAP ではベクタ化できる演算の種類が極めて限られているが、CYBER 205 ではかなり改善されている。これから登場するスーパーコンピュータではベクタ化またはパラレル化できる演算のわくがずっと拡がることが期待されている。量子化学計算ではほとんどが

図 3.1.3 積分変換の新しいアルゴリズム<sup>6)</sup>

```

DO 1 I=1, NROW
  IPARIT=1
  DO 2 J=1, NCOL
    2  V1(J)=0.0
    DO 3 K=1, N
      SCALAR=A(I, K)
      IF (SCALAR) 88, 3, 88
    88  IF (IPARIT) 66, 77, 77
  
```

```

77 DO 4 J=1,NCOL
4 V2(J)=V1(J)+Q(K,J)*SCALAR
GO TO 55
66 DO 5 J=1,NCOL
5 V1(J)=V2(J)+Q(K,J)*SCALAR
55 IPARIT=-IPARIT
3 CONTINUE
IF(PARIT)33,44,44
44 DO 6 J=1,NCOL
6 X(I,J)=V1(J)
GO TO 1
33 DO 7 J=1,NCOL
7 X(I,J)=V2(J)
1 CONTINUE

```

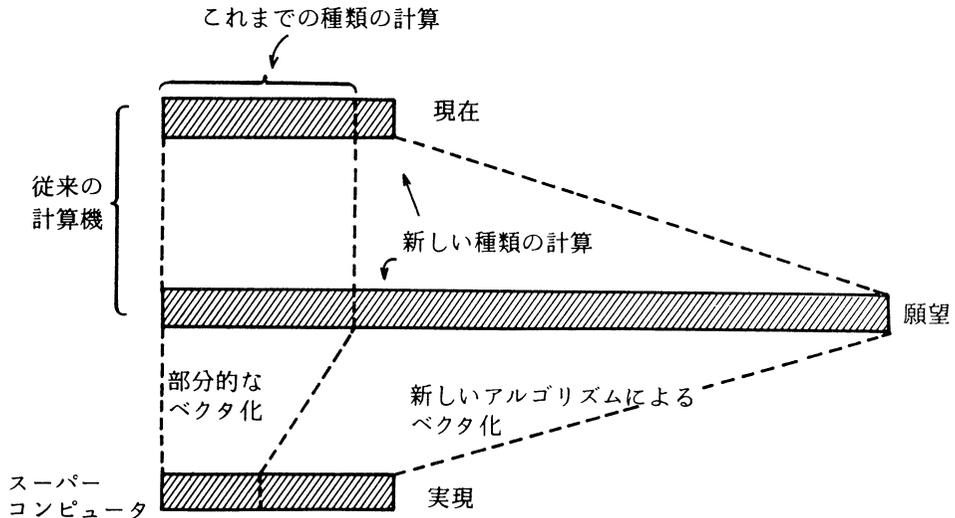
線型演算であるにもかかわらず、ベクタ化、パラレル化が効果を挙げない主な理由は行列の次元が大きかつスパースであるためである。たとえば、クロロフィルダイマのような系では二電子積分の行列の次元は $5 \times 10^5$  でゼロでない積分の割合は1%程度であろう。このような行列の線型演算にはA (M (IK))のようなリストベクタを含む演算のベクタ化が必要であろう。ゼロでない積分A<sub>IK</sub>とそのリストM (IK)を直接計算に使えるかどうかの問題である。言換えるとスパースな行列を圧縮して、しかもランダムなまま線型演算を行えるかどうかである。このような能力を持ったスーパーコンピュータが広範囲の科学技術計算に適合する電子計算機である。

### 3.1.3 スーパーコンピュータによる新しい種類の計算の実現

前に述べたようにこれから出まわってくるスーパーコンピュータの最高速度が実現できれば過去20年間の進歩に匹敵する飛躍になる。しかし、スーパーコンピュータにはそれぞれの制約があって、これまで蓄積されたプログラムが100倍に加速されるとは考えられない。従来の計算機でこれまで達成された種類の計算と、陽に陰に願望として存在する新しい種類の計算がある。この

ような状況が図3.1.4の上2本の棒グラフで表わされている。スーパーコンピュータが利用できるよ  
うになれば、これまでの種類の計算は局部的な修正②でCPU時間を数分の1に短縮し、新しい種  
別の計算を新しいアルゴリズムの開発により超高速で実現できるだろう。このような飛躍的な技  
術革新に際しては従来とは根本的に発想の異なる新しい方法を生み出せる可能性がある。

図3.1.4 スーパーコンピュータによる新しい種類の計算の実現



### 3.1.4 IAPのすすめ

分子研センターにおいてもスーパーコンピュータの導入が計画されている。これまで述べてきたようにスーパーコンピュータの高速性を引出すためにはプログラムの適合化や新しいアルゴリズムの開発が必要である。このような転換は一朝一夕ではできないのでユーザ側においてもスーパーコンピュータの導入に際して急速に適應する準備が要請される。スーパーコンピュータの代名詞のようになっているCRAY-1は日本で2台運転されているが、使用料は民間ベースで極めて高価なので大学の研究者には容易に使えない。しかし、幸いなことに当センターのM-200HにはIAP (Integrated Array Processr)と呼ばれるアレイプロセッサがある。M-200HとCRAY-1の非ベクタ演算速度の比はおおよそ1 : 2.5, ベクタ化最大加速率はそれぞれ数倍と十数倍であるが、ベクタ化できる演算の種類には大差ない。表3.1.4にベクタ化のためのループ条件の比較<sup>7)</sup>を示した。日立のFORTAN77のプリプロセッサSAFを利用すると表3.1.4の2と6項のCALL文またはユーザ定義関数のあるものはベクタ化することができる。このようにM-200H IAPは1~2年後に登場してくる新しいスーパーコンピュータのIF文のベクタ化

や A(M(IK)) の型のリストベクタの機能もなく、数十倍と言われるベクタ化最大加速率とは比較できないが、ベクタプロセッサとしては共通の性格を持っている。(IF文については東大に導入された M-280H ではベクタ化される。)したがって、M-200H あるいは M-280H はベクタプロセッサへのプログラムの適合化とアルゴリズムの開発のために、少くともテストマシンとして十分に有用である。新しいスーパーコンピュータが導入されるまでの間、IAP によってプログラムの処理能力を向上させる試みは現在におけるユーザの利益と将来の飛躍の準備のために必要と考えられる。

表 3.1.4 ループ条件の比較<sup>7)</sup>

	適用性	M-200H IAP	CRAY-1
1	最内側の DO ループである	○	○
2	IF文, GO TO文, CALL文を含んでもよい	×	×
3	実数型演算がベクトル化される	○	○
4	複素数型演算もベクトル化される	×	○
5	整数型, 論理型演算もベクトル化される	×× <sup>注1)</sup>	○
6	ユーザ定義関数の引用を含んでもよい	×	×
7	組込関数の引用を含んでもよい	△ <sup>注2)</sup>	○
8	添字式に制約がある(線型変動)	○	○
9	データの定義参照関係に矛盾が生じない <sup>注3)</sup>	○	○
10	互に EQUIVALENCE 結合された変数, 配列の対の両者が DO ループに出現する場合, 両者共に DO ループ内で値を参照するのみである。	○	○
11	組込関数の中にベクトル化されるものがある	×	○
12	IF文に代るベクトル分岐関数がある	×	○

注1) 整数型代入文等を含むと、DO ループはベクトル化されなくなる。

注2) SIN, COS, ALOG, ALOG10, EXP, SQRT の単精度/倍精度関数, 及び DBLE/SINGL だけが許される。

注3) M-200H も CRAY-1 も 
$$\left[ \begin{array}{l} \text{DO } 10 \text{ I}=1, \text{N} \\ \text{A(I)}=\text{A(I-1)} \end{array} \right]$$
 等の上昇型ループは苦手としている

が、特殊なケースでの例外もある。M-200H IAP は、CRAY-1 には無い逐次命令等によって、ベクトル化の範囲をより拡大している。

CRAY-1 には、ユーザの指定による強制ベクトル化の機能がある。

## 文 献

- 1) 分子研研究会報告集「スーパーコンピュータとその分子科学への応用」(1982)。
- 2) 特集「スーパーコンピュータの応用」, 情報処理, Vol.22.No12, 1102 (1981)。
- 3) “Proceedings of Vector and Parallel Processors in Computational Science”, in press (North-Holland Publishing Co.1982)。
- 4) H. Kashiwagi and S. Obara, Int. J. Quant. Chem. 20, 843 (1981)。
- 5) S. Binkley, private communication.
- 6) M. F. Guest and S. Wilson, “Supercomputers in Chemistry”, pl (The American Chemical Society 1981)。
- 7) 唐木幸比古, 東京大学大型計算機センターニュース, Vol.14, No 4, 46 (1982)。

## 3.2 論文清書システムの開発

技 官 西 本 史 雄

RUNOFFは、英語論文、手紙などを清書するためのプログラムで、日立製作所より提供されているものである。このRUNOFFに活字交換機能を持ったタイプライタへの出力及び、レーザープリンタへの出力ができるように機能を強化して、分子研における総合的な論文清書システムを開発した。

RUNOFFは、オリジナルテキストを入力して、その中に含まれている制御語にもとづいて、清書を進めていくが、豊富な制御語により、きめ細かな様式表現で清書ができるようになっている。しかしながら、論文においては、必ずといってよいほど、Scientific記号( $\Sigma$ とか $f$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ など)を使用していて、タイプライタへの出力の際に活字交換の必要がある。そこで、RUNOFFではサポートしていない活字交換を含めた、タイプライタのコントロールのためのインターフェイスプログラムが必要となってくるが、この方式は、出力先が異なる場合でも、出力先に応じたインターフェイスプログラムを用意するだけでよく、拡張性に富んでいる。又、基本的な清書の仕方は、RUNOFFの通りなので、使い方の習得はきわめてやさしくなっている。

分子研では、論文清書用の高品質タイプライタとして、Diablo 1650を採用している。Diablo 1650では、メタルホイールとフィルムリボンが使われていて、印字品質が極めてよい上に、高速印字、インテリジェントな動作機能を持っている。TTY手順のTSS端末として接続されているが、操作は主に、親端末であるディスプレイ端末から行って、操作性を良くしている。通信スピードはバッファメモリの増設とページコントロールにより、1200bpsを実現し、50cpsという高速印字を保証している。Diablo 1650には、正/逆両方向の改行/半改行機能の他、数多くの有用な機能があり、論文清書タイプライタとしては、最高レベルといえる。

### (1) Diablo 1650 タイプライタへの出力インターフェイス RUNOFF 2

これらの機能を持ったDiablo 1650タイプライタへの清書出力のために開発したインターフェイスプログラムRUNOFF 2は、複数の文字セットを使用する論文を効率よく出力するとともにDiablo 1650タイプライタの動作をコントロールしている。

RUNOFF 2の機能を、次に示す。

- 最大、6種類の活字セットが使用でき、活字交換が可能。

活字交換は、最大5ページで1回/1種類必要なだけになっている。

RUNOFFで清書されたテキストを入力し、まず、第1活字セットを1ページ分(最大5ページ)出力し、一旦停止し、第2活字セットへの交換後、先頭ページの第1行まで自動復帰し

て、第2活字セット分を出力する。使用している活字セットの数だけこの動作をくり返すが通常、2種類の活字セット（TITAN及びScientific）を使うことが多い。

○デバッグモードがある。

複数の活字セットを使用しているも、デバッグモードを用いることにより、第1活字セットのみで全て出力が可能なので、出力時間の短縮と操作の簡略化ができるようになっている。

○柔軟な活字セットの指定。

テキスト中に活字セットの指定をする場合、任意の特殊文字（例えば！）で、テキストを囲むことで容易に行えるようになっている。

! a !……………α

又、実際の活字ホイールと活字セットの対応は、自由に決めることができる。

RUNOFFとRUNOFF2の関係は、図3.2.1のようになっている。

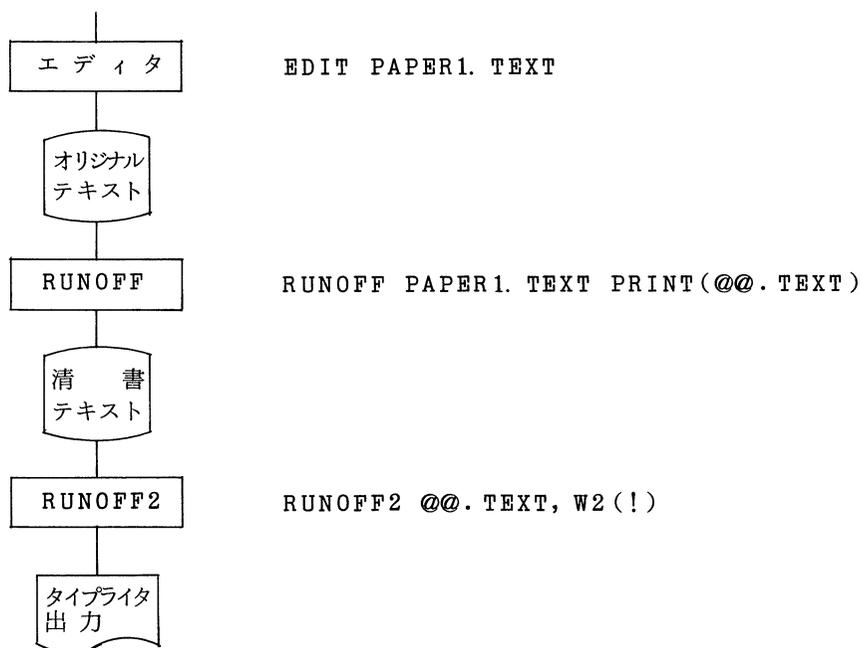


図3.2.1 RUNOFFとRUNOFF2の関係

## (2) レーザープリンタへの出力インターフェイス ROFFINT

ROFFINTは、清書テキストをタイプライタではなく、レーザープリンタに出力するためのインターフェイスプログラムである。レーザープリンタを論文清書出力のために用いることにより、より高速で、高品質、タイプライタのように操作に手がかからずに、清書出力を得ることができ

るようになった。清書テキストをレーザープリンタに出力するためには、書式オーバーレイ<sup>1)</sup>機能を使うことになるが、ROFFINTは、書式オーバーレイを作成するFOG<sup>2)</sup>というユーティリティに清書テキストを引き渡して、ページ単位に書式オーバーレイモジュールを作成させる。

ROFFINTの機能を次に示す。

- 清書されたテキストを入力し、EBCDICコードをJISコード、漢字コード(論文用)へ変換した上で、FOGへの入力レコードを作成する。

FOGへの入力レコードには、次の2種類がある。

FORMS : 書式の大きさを定義する。

CHAR : 指定した文字コードと位置に基づいて、文字を書式内に配置する。

- 1ページ分が処理されたところで、FOGを(ダイナミックに)呼び出して、書式オーバーレイモジュールを作成させる。

複数ページある場合は、これらの処理をくりかえす。(一括して処理できるページ数に制限はない)

ROFFINTの処理の流れは、図3.2.2のようにになっている。

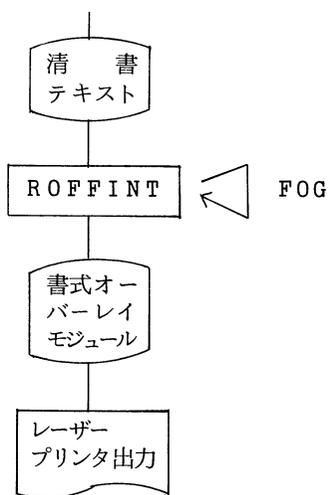


図3.2.2 ROFFINTの処理の流れ

RUNOFFを中心とした論文清書システムは今後さらに高度化が予想されるが、レーザープリンタの改良、論文清書関係のソフトウェアの進歩、よりインテリジェントなディスプレイ端末の出現で、研究者にとって、簡単に扱えるものになっていくだろう。

#### 1) 書式オーバーレイ

レーザープリンタでは、ハードウェアが文字をドットという点の集合で印刷する方式をとっている。この方式を利用して、ラインプリンタに1ページ分のドットパターン(書式)を出力することができる。書式オーバーレイでは、通常の英数字、漢字のほか、図形の表現もできるようになっている。

#### 2) FOG (Forms Overlay Generator)

書式オーバーレイを行うための書式データを作成するプログラム。

### 3.3 パソコン(PC-8800)を使ったTSSグラフィック端末とソフトウェアについて

係長 伊奈 諭

パソコンでどの程度のグラフィック処理が可能であろうか。これはこれまでのパソコンユーザならば少なからず抱いていた疑問であり希望でもあると思う。当センターでは最近発売されたところであり、グラフィック処理の面でも最もすぐれていると考えられるNEC PC-8800を購入したので早速テストしてみた。PC-8800は8ビットマシンの中では最も新しいだけあって数多くの特長を備えている。以下にマニュアルから代表的なものを羅列してみると次のようになる。

- ① グラフィック機能の充実
- ② 漢字ROMの実装(オプション)
- ③ 184Kバイトの標準メモリを実装
- ④ N<sub>88</sub>-BASIC
  - ・リモートBASIC機能
  - ・飛び先指定のラベル名付加可能など

これらの特長をグラフィック処理という観点から見直してみると

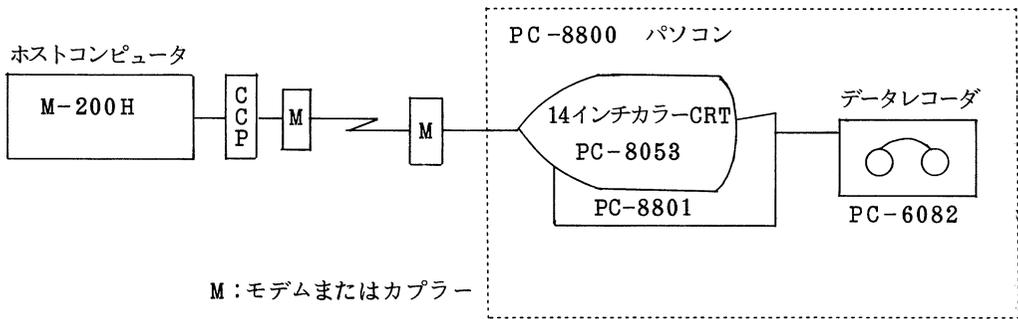
- ・仮想画面(ワールド座標)と実画面(スクリーン座標)の定義ができる。
- ・白黒モードで640×400, カラーモードで640×200ドットまでを個別に制御できる。
- ・リモートBASICによりホスト側から直接グラフィック命令を使用できる。
- ・グラフィック画面とテキスト画面が独立メモリを持ち別々に扱える。
- ・カラー画面のドット単位に画像演算ができる。

といったような点が浮かび上がってくる。

ここではこうした特長を生かしたグラフィック端末システムについて紹介する。

#### 3.3.1 システム構成

端末システムとしては、本体(PC-8801)以外にはグラフィック用に高解像度14インチカラーディスプレイを接続し、補助記憶としてカセットデータレコーダをつけただけであり、全体で45万円を切る価格となっている。



### 3.3.2 グラフィック画面

PC-8053 カラーディスプレイは 14 インチであるがその表示可能領域は実測で約 240 mm (横) × 150 mm (縦) になる。

アドレッシング可能なドット (画素) 数は

白黒モードで 640 × 400 (640 × 200 を 3 画面もつこともできる)

カラーモードで 640 × 200

になっている。ということはカラーモード (あるいは白黒 3 画面モード) では縦横のドット間隔が白黒モードと比べて異なることを意味する。

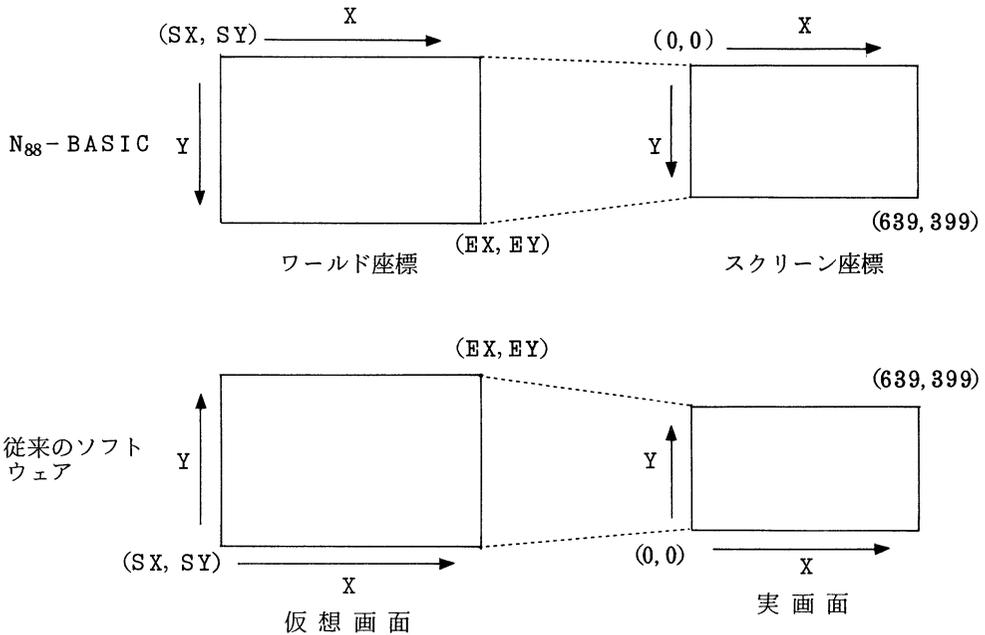
横方向 常に  $240 \text{ mm} / 639 \approx 0.376 \text{ mm} / \text{DOT}$

縦方向  $\left\{ \begin{array}{l} \text{白黒モード} \quad 150 \text{ mm} / 399 \approx 0.376 \text{ mm} / \text{DOT} \\ \text{カラーモード} \quad 150 \text{ mm} / 199 \approx 0.754 \text{ mm} / \text{DOT} \end{array} \right.$

カラーモードの場合の縦横のドット間隔の違いは実際に図形を作画する場合に実画面 / 仮想画面の定義において重要な意味を持っている。これについては 3.3.5 節で述べる。

### 3.3.3 座 標 系

N<sub>88</sub>-BASIC グラフィック機能ではワールド座標系とスクリーン座標系の二つを標準サポートしている。これは大型コンピュータシステムのグラフィックソフトウェア (日立プログラムプロダクト GPSL など) である仮想画面と実画面に相当するもので、ユーザ定義の論理的な座標と CRT 表示域の物理的座標との独立性が保たれることになりマイコングラフィックとしては大幅な進歩と考えられる。N<sub>88</sub>-BASIC であるグラフィック座標系と従来のグラフィックソフトウェアの座標系とで一つ異なる点は原点の位置と Y 軸の方向である。その違いを次に示す。



本文では従来のソフトウェアの座標系にのって話を進める。

### 3.3.4 リモート BASIC

PC8800 の N88-BASIC では標準機能としてリモート BASIC すなわちホストコンピュータ側からターミナル (PC8800) 側の BASIC 言語をそのまま利用 (制御) できる手順 (スペシャルエスケープシーケンスと呼ばれる) がサポートされている。したがって従来のようにマイコン側でわざわざ特別の読み込み作画プログラムを用意しなくても直接グラフィック命令を実行することが可能となる。

その使用方法は次のように BASIC 命令の前に ESC (エスケープ) コードをつけて転送するだけでよい。

ESC . BASIC の命令

これを使えば PC-8800 用グラフィックサブルーチンが簡単に作成できる。

### 3.3.5 簡易サブルーチンライブラリの作成

リモート BASIC を使えばサブルーチンコール形式のプログラムがいつも簡単にできることになる。その EXAMPLE を表 3.3.1 に示し、FORTRAN を使ったコーディング例を本文末に掲載

しておく。

表 3.3.1 サブルーチンの例

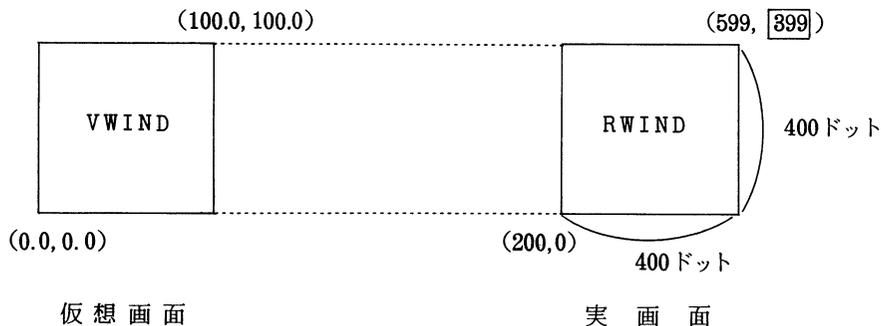
No.	ルーチン名	機能
1	GINIT	出力ファイル, ディスプレイモードの選択などの初期化を行う。
2	RWIND	実画面の定義
3	VWIND	仮想画面の定義
4	PLOT	現在ポインタ位置から指定点まで線を引く
5	PLOT1	一連の座標点データを直線で結ぶ
6	NEWPEN	色の選択 (8色まで)
7	RECT	長方形の作画
8	CIRC	円の作画

この他にもいくらかでも便利なサブルーチンを作成可能であるから必要に応じて追加充実すればよい。ここで一つ注意しなければならないことは2節で述べたようにカラーモードの場合には縦横のドット間隔が約2倍異っているけれども、実際に面を描く場合には仮想画面と実画面の縦横の長さの比率が同じになっていないと作画された図形・画像がゆがむという現象が現れる。(ただし円の場合はN<sub>88</sub>-BASICのCIRCLE命令の特性上常に真円になりますが。)

白黒モードの場合には縦横のドット間隔がほぼ同じであるため比率はそのままのスクリーン座標の値で考えればよい。

カラーモードの場合には縦横のドット間隔が2:1であるから実寸で比率を出すためには縦方向のスクリーン座標上の長さを2倍した値で考えなければならない。図3.3.1にその一例を示す。この例では正方形の領域を定義しているが、カラーモードの実画面(RWIND)では縦方向のドット数は横方向のドット数の1/2で同じ長さとなる。

○白黒モード



○カラーモード

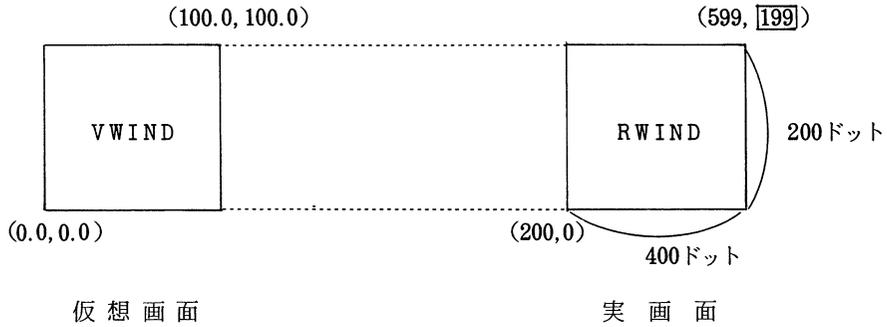


図 3.3.1 仮想画面と実画面の対応例

出力方法については次の二通りが可能である。

- ① パソコンのディスプレイへの直接出力
- ② ホスト側のファイルへ作画コマンドを一旦出力したあと TSS システム EDIT コマンドの LIST サブコマンドでパソコンのディスプレイに表示する。

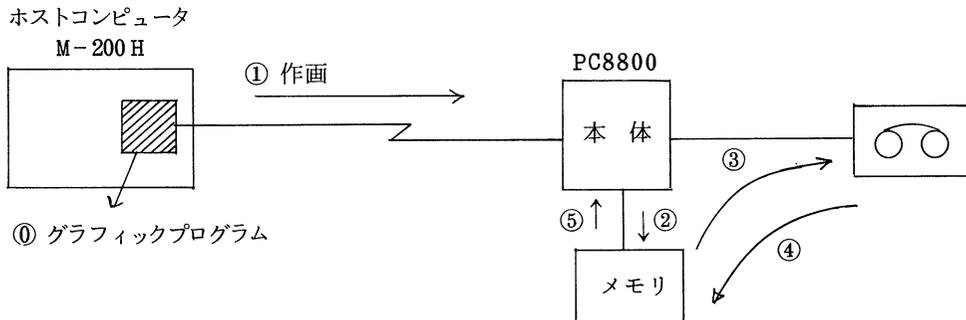
ホスト側の出力ファイルは次のような属性にしておけばよい。

$$\left( \begin{array}{l} \text{DSORG} = \text{PO/PS}, \text{RECFM} = \text{FB}, \\ \text{LRECL} = 51, \text{BLKSIZE} = 5100 \\ \text{NONUM属性} \end{array} \right)$$

この選択は GINIT ルーチンの IDEVIC パラメータで指定できる。IDEVIC パラメータを 6 にすると端末 (パソコン) 自身を出力先にしたことになりダイレクトにディスプレイ表示をする。

### 3.3.6 リモート図形・画像処理システムの試み

PC8800 を利用した簡単なリモート図形・画像処理システムとして次のようなことができる。



- ① 時間のかかる計算，規模の大きな計算はホスト側の FORTRAN プログラムで行わせる。
- ① 計算結果の図形・画像を TSS 下でマイコン側へ表示する。
- ② 端末モードから BASIC モードへ戻してマイコン側で色付けなどの加工を行ったのちメモリへ図形・画像を格納する。  
(GET @ 命令を利用)
- ③ ②でメモリ上にある図形・画像を補助記憶へ保存する。  
(PRINT # 命令を利用)
- ④ ①～③の繰り返しにより得られた図形・画像のうち興味あるものを補助記憶からメモリへ取り出す。  
(INPUT # 命令を利用)
- ⑤ メモリ上にある図形・画像をそのまま CRT 画面へ表示する。  
(PUT @ 命令を利用)
- ⑥ ④～⑤複数回行って図形・画像の重ね合わせや合成，カラーパレットによる瞬時色変換を行い望みの図形・画像を生成する。重ね合わせや合成では画素単位の AND，OR，XOR，PSET，PRESET などのちょっとした演算が行えるのもありがたい。

図 3.3.2 にカセットデータレコーダを用いた場合の GET @，PUT @ 命令の使用例を示す。

実際の利用に際してはメモリ容量の制約から GET @，PUT @ 命令一回では全画面を格納できないため大きな図形・画像の場合は分割して処理する必要がある。

処理速度の点からできればフロッピーディスクを使った方がよいことはいうまでもない。

```

10 'EXAMPLE MAIN PROGRAM FOR IMAGE GET/PUT
20 '                                     by S. INA   1982.04.14
30 DEFINT G,Y,I,K
40 XD=400:YD=100
50 BYTE=((XD*7)*8)*YD*3+4
60 FACT=BYTE*2+1
70 FACT=FACT+30
80 PRINT FACT
90 'GET IMAGE FROM PC8800 DISPLAY TO TAPE
100 OPEN "CAS:IMAG" FOR OUTPUT AS #1
110 YS=0:YE=99
120 GOSUB XGETI
130 YS=100:YE=199
140 GOSUB XGETI
150 CLOSE #1
160 CLS 2
170 'PUT IMAGE FROM TAPE TO PC8800 DISPLAY
180 OPEN "CAS:IMAG" FOR INPUT AS #1
190 YS=0
200 GOSUB XPUTI
210 YS=100
220 GOSUB XPUTI
230 CLOSE #1
240 END
250 '
                                     SUBROUTINE GET (CRT ---) TAPE)
260 XGETI
270 GET@ (0,YS)-(399,YE),G
280 FOR I=0 TO FACT STEP 30
290 PRINT #1,G(I),G(I+1),G(I+2),G(I+3),G(I+4),G(I+5),G(I+6),G(I+7),G(I+8),G(I+9),
,G(I+10),G(I+11),G(I+12),G(I+13),G(I+14),G(I+15),G(I+16),G(I+17),G(I+18),G(I+19),
,G(I+20),G(I+21),G(I+22),G(I+23),G(I+24),G(I+25),G(I+26),G(I+27),G(I+28),G(I+29)

```

```

300 NEXT I
310 RETURN
320 '
SUBROUTINE PUT (TAPE---) CRT )
330 *PUTI
340 FOR I=0 TO FACT STEP 30
350 INPUT #1,G(1),G(1+1),G(1+2),G(1+3),G(1+4),G(1+5),G(1+6),G(1+7),G(1+8),G(1+9)
,G(1+10),G(1+11),G(1+12),G(1+13),G(1+14),G(1+15),G(1+16),G(1+17),G(1+18),G(1+19)
,G(1+20),G(1+21),G(1+22),G(1+23),G(1+24),G(1+25),G(1+26),G(1+27),G(1+28),G(1+29)
360 NEXT I
370 PUT#(0,YS),G,PSET
380 RETURN

```

図 3.3.2 画像の保存再生プログラム

以上から分るように規模の大きい時間のかかる演算はホストコンピュータで行い、その結果の図形・画像表示にはパソコングラフィック端末を主体的に用いることによって融通性に富んだ安価なシステムを構築できるわけである。

出力例のひとつとして量子力学における原子の d 軌道等電子密度面の立体表示を図 3.3.3 に示す。これは密度 0.13 と 0.0001 electron/(Bohr)<sup>3</sup> の二つの面を求めそれぞれを黄、白で作画して重ね合わせたものである。

カラーの場合縦方向 200 ドットとやや粗さが目立つが思ったよりキレイに描けた。表示に関しては 8 ビットパソコンでもこの程度のことまで可能となったのかという感じがする。所要時間は計算に約 4 分、作画に約 20 分である。

この程度の絵はパソコン単体でも作画可能であるが、BASIC インタプリタで実行した場合は演算スピードが遅く非常に時間がかかることを覚悟しなければならない。ちなみに同じ絵 (図 3.3.3) を計算・作画するのに約 4 ~ 5 時間はかかる。

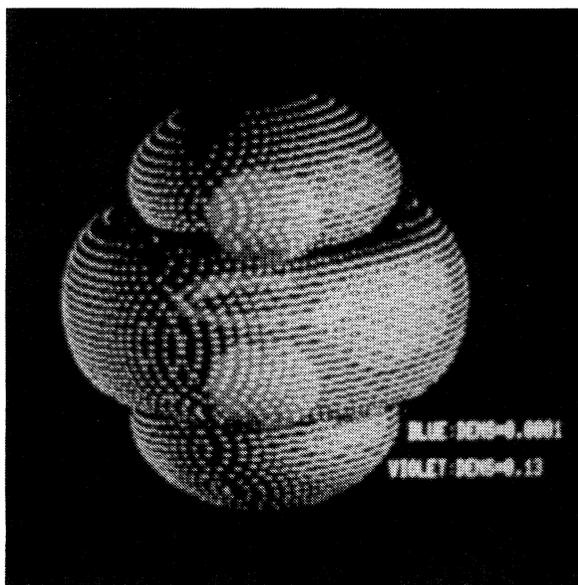


図 3.3.3 d 軌道等電子密度面

### 3.3.7 おわりに

PC8800 を 1200BPS で接続して使ってみた。この場合簡単な図形ならばすぐに作画できるが複雑な図形・画像となると作画時間が非常にかかる。たとえば図 3.3.3 のようなものと重ね描きを行っていることもあって作画だけで 20 分ぐらいを要す。これは次の点が原因である。

すなわちリモート BASIC (スペシャルエスケープシーケンス) を使うと情報転送量が必要以上に大きくなる。たとえば 1 LINE を描くのに

`(ESC).LINE(E9.3, E9.3) - (E9.3, E9.3), I`

というように 51 バイトを転送しなければならない。

これは毎秒 2 LINE 強の割合である。

これを防ぐには

- 実数部分 (9 バイト) を整数 (8 バイト) にして転送する。この場合には仮想画面 → 実画面の変換をホスト側で行ってやる必要があるが、これだけでも約 2 倍早くなる。
- コマンド名を短かくしたり、余分なカッコやハイホンを省略して転送する。
- 座標データをバイナリ表現にして転送する。

などの方法が考えられる。

しかし後の二つについてはリモート BASIC 機能は使えないので専用プログラムを作成しなければならない。

次にカラーディスプレイであるが、メーカーもキャラクタディスプレイと呼んでいるだけあって、カラーのとき縦横のドット間隔が異なるというグラフィックディスプレイにはあるまじき仕様となっている。この点にまだ 8 ビットパソコンのグラフィックスの弱点が残されているといえる。

しかし、コストパフォーマンスから言えば非常にすぐれているのは確かである。

(参考文献) 伊奈「PC-8801 のカラーグラフィック機能を探る」マイコン 7月号 (1982)

```

00020 C
00030 C>>>>>>INITIALIZE ROUTINE
00040 SUBROUTINE GINIT(IDEVIC,MODE)
00050 C IDEVIC ---OUTPUT DEVICE LOGICAL NO.
00060 C MODE=0 ---MONOCHRO(640*400 DOTS)
00070 C =1 ---COLOR (640*200 DOTS)
00080 COMMON /DEV/IDEV,MOD
00090 COMMON /WIND/XL,YL,XH,YH
00100 COMMON /COL/ICOL
00110 LOGICAL*1 ESCP,CRTN
00120 DATA ESCP/Z27/,CRTN/ZOD/
00130 IDEV=IDEVIC
00140 MOD=MODE
00150 ICOL=7
00160 IXL=0
00170 IYL=0
00180 IXH=639
00190 IYH=399
00200 XL=0.0
00210 YL=0.0
00220 XH=639.0
00230 YH=399.0
00240 MSCRN=2
00250 IF(MOD.EQ.0) GO TO 5
00260 IYH=199
00270 MSCRN=0
00280 5 IF(IDEV.EQ.6) GO TO 10
00290 WRITE(IDEV,100)ESCP,CRTN
00300 100 FORMAT(A1,`.WIDTH 80,25`,A1)
00310 WRITE(IDEV,110)ESCP,MSCRN,CRTN
00320 110 FORMAT(A1,`.SCREEN `,I1,`,0`,A1)
00330 WRITE(IDEV,120)ESCP,MOD,CRTN
00340 120 FORMAT(A1,`.CONSOLE 0,25,0,`,I1,A1)
00350 WRITE(IDEV,130)ESCP,IXL,IYL,IXH,IYH,CRTN
00360 130 FORMAT(A1,`.VIEW(`,I3,`,`,I3,`)-(`,I3,`,`,I3,`)`,A1)
00370 WRITE(IDEV,140)ESCP,XL,YL,XH,YH,CRTN
00380 140 FORMAT(A1,`.WINDOW(`,E9.3,`,`,E9.3,`)-(`,E9.3,`,`,E9.3,`)`,A1)
00390 GO TO 99
00400 10 WRITE(IDEV,200)ESCP,CRTN
00410 200 FORMAT(1H ,A1,`.WIDTH 80,25`,A1)
00420 WRITE(IDEV,210)ESCP,MSCRN,CRTN
00430 210 FORMAT(1H ,A1,`.SCREEN `,I1,`,0`,A1)
00440 WRITE(IDEV,220)ESCP,MOD,CRTN
00450 220 FORMAT(1H ,A1,`.CONSOLE 0,25,0,`,I1,A1)
00460 WRITE(IDEV,230)ESCP,IXL,IYL,IXH,IYH,CRTN
00470 230 FORMAT(1H ,A1,`.VIEW(`,I3,`,`,I3,`)-(`,I3,`,`,I3,`)`,A1)
00480 WRITE(IDEV,240)ESCP,XL,YL,XH,YH,CRTN
00490 240 FORMAT(1H ,A1,`.WINDOW(`,E9.3,`,`,E9.3,`)-(`,E9.3,`,`,E9.3,`)`,A1)
00500 99 RETURN
00510 END
00520 C>>>>>>REAL WINDOW DEFINE
00530 SUBROUTINE RWIND(IXL,IYL,IXH,IYH)
00540 C IXL ---UNDER LEFT(X-COORD)
00550 C IYL ---UNDER LEFT(Y-COORD)
00560 C IXH ---UPPER RIGHT(X-COORD)
00570 C IYH ---UPPER RIGHT(Y-COORD)
00580 COMMON /DEV/IDEV,MOD
00590 COMMON /COL/ICOL
00600 LOGICAL*1 ESCP,CRTN
00610 DATA ESCP/Z27/,CRTN/ZOD/
00620 IF(IDEV.EQ.6) GO TO 10
00630 WRITE(IDEV,100)ESCP,IXL,IYL,IXH,IYH,CRTN
00640 100 FORMAT(A1,`.VIEW(`,I3,`,`,I3,`)-(`,I3,`,`,I3,`)`,A1)
00650 GO TO 99
00660 10 WRITE(IDEV,200)ESCP,IXL,IYL,IXH,IYH,CRTN
00670 200 FORMAT(1H ,A1,`.VIEW(`,I3,`,`,I3,`)-(`,I3,`,`,I3,`)`,A1)
00680 99 RETURN
00690 END
00700 C>>>>>>VIRTUAL WINDOW DEFINE
00710 SUBROUTINE VWIND(XLL,YLL,XHH,YHH)
00720 C XLL ---UNDER LEFT(X-COORD)
00730 C YLL ---UNDER LEFT(Y-COORD)
00740 C XHH ---UPPER RIGHT(X-COORD)
00750 C YHH ---UPPER RIGHT(Y-COORD)

```

```

00760      COMMON /WIND/XL,YL,XH,YH
00770      COMMON /DEV/IDEV,MOD
00780      LOGICAL*1 ESCP,CRTN
00790      DATA ESCP/Z27/,CRTN/ZOD/
00800      XL=XLL
00810      YL=YLL
00820      XH=XHH
00830      YH=YHH
00840      IF (IDEV.EQ.6) GO TO 10
00850      WRITE (IDEV,100) ESCP,XL,YL,XH,YH,CRTN
00860 100  FORMAT (A1, '.WINDOW(',E9.3,',',E9.3,')-(',E9.3,',',E9.3,')',A1)
00870      GO TO 99
00880      10 WRITE (IDEV,200) ESCP,XL,YL,XH,YH,CRTN
00890 200  FORMAT (1H ,A1, '.WINDOW(',E9.3,',',E9.3,')-(',E9.3,',',E9.3,')',A1)
00900      99 RETURN
00910      END
00920 C>>>>>>PLOT A LINE
00930      SUBROUTINE PLOT(X,Y,IPEN)
00940 C
00950 C
00960 C
00970      COMMON XX(2),YY(2)
00980      COMMON /WIND/XL,YL,XH,YH
00990      COMMON /DEV/IDEV,MOD
01000      COMMON /COL/ICOL
01010      LOGICAL*1 ESCP,CRTN
01020      DATA ESCP/Z27/,CRTN/ZOD/
01030      IF (IPEN.EQ.2) GO TO 10
01040      XX(1)=X
01050      YY(1)=YH-Y+YL
01060      GO TO 99
01070 10  XX(2)=X
01080      YY(2)=YH-Y+YL
01090      IF (IDEV.EQ.6) GO TO 20
01100      WRITE (IDEV,100) ESCP,XX(1),YY(1),XX(2),YY(2),ICOL,CRTN
01110 100  FORMAT (A1, '.LINE(',E9.3,',',E9.3,')-(',E9.3,',',E9.3,')',I1,A1)
01120      GO TO 99
01130      20 WRITE (IDEV,200) ESCP,XX(1),YY(1),XX(2),YY(2),ICOL,CRTN
01140 200  FORMAT (1H ,A1, '.LINE(',E9.3,',',E9.3,')-(',E9.3,',',E9.3,')',I1,A1)
01150      1
01160      XX(1)=XX(2)
01170      YY(1)=YY(2)
01180      99 RETURN
01190      END
01200 C>>>>>>DRAWING A SERIES OF LINES(POLYGONAL LINES)
01210      SUBROUTINE PLOT1(XARY,YARY,NPT)
01220 C
01230 C
01240 C
01250      DIMENSION XARY(NPT),YARY(NPT)
01260      CALL PLOT(XARY(1),YARY(1),3)
01270      DO 20 I=2,NPT
01280 20  CALL PLOT(XARY(I),YARY(I),2)
01290      RETURN
01300      END
01310 C>>>>>>SELECT COLOR
01320      SUBROUTINE NEWPEN(ICOLR)
01330 C
01340      COMMON /COL/ICOL
01350      ICOL=ICOLR
01360      RETURN
01370      END
01380 C>>>>>>DRAWING RECTANGULAR
01390      SUBROUTINE RECT(X,Y,H,W,TH)
01400 C
01410 C
01420 C
01430 C
01440 C
01450      DIMENSION XA(5),YA(5)
01460      PAI=3.1416
01470      XA(1)=X
01480      YA(1)=Y
01490      XA(5)=X

```

```

01500      YA(5)=Y
01510      XA(2)=X+W*COS(TH/180.)
01520      YA(2)=Y+W*SIN(TH/180.)
01530      XA(3)=XA(2)+H*COS((TH+90.)/180.*PAI)
01540      YA(3)=YA(2)+H*SIN((TH+90.)/180.*PAI)
01550      XA(4)=X+H*COS((TH+90.)/180.*PAI)
01560      YA(4)=Y+H*SIN((TH+90.)/180.*PAI)
01570      CALL PLOT1(XA,YA,5)
01580      RETURN
01590      END
01600 C>>>>>>DRAWING CIRCLE
01610      SUBROUTINE CIRC(X,Y,R)
01620 C
01630 C
01640 C
01650      COMMON /WIND/XL,YL,XH,YH
01660      COMMON /DEV/IDEV,MOD
01670      COMMON /COL/ICOL
01680      LOGICAL*1 ESCP,CRTN
01690      DATA ESCP/Z27/,CRTN/Z0D/
01700      IF(IDEV.EQ.6) GO TO 20
01710      WRITE(IDEV,100)ESCP,X,Y,R,ICOL,CRTN
01720 100 FORMAT(A1,'.CIRCLE(',E9.3,E9.3,')',',',E9.3,I1,A1)
01730      GO TO 99
01740 20 WRITE(IDEV,200)ESCP,X,Y,R,ICOL,CRTN
01750 200 FORMAT(1H ,A1,'.CIRCLE(',E9.3,E9.3,')',',',E9.3,I1,A1)
01760 99 RETURN
01770      END

```

## 4. 一 般 報 告

### 4.1 ライブラリ・プログラムの収集と開発

多数の方々の協力により分子科学・生物科学関連のプログラムの収集・開発は着実に進んでおり、昭和57年6月現在、IMSプログラムライブラリは、総件数84、QCPBプログラムは387件に達している。現在昭和57年度の開発計画を推進中である。昭和56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・プログラムの一覧表を表4.1.2に示す。

ライブラリの使用頻度統計情報を1980年4月より摂取しているが、82年6月までにライブラリの総使用件数は約1万8千回であり使用者は215名に昇っている。計算機センターの利用者は450名余りであるからユーザーの約半数が何らかの形でライブラリを実行し、又平均して1日に20回余りライブラリを使ったことになる。ライブラリプログラムの検索システムの利用者の数も約80名に及んでいる。

表 4.1.1 昭和56年度プログラムライブラリ開発

1	中 辻 博 太 田 勝 久 牛 尾 二 郎	京都大工	助手 大学院学生 "	Pseudo-orbital theory による分子スピン密度プログラ ムの開発
2	小 杉 信 博	東京大理	奨励研究員	GSCF3 開発, GSCF2 整備
3	佐々木 不可止 富 樫 雅 文	北海道大理 "	助教授 研究生	Programmer's Kit 開発
4	田 中 皓 野 呂 武 司 野 村 力	北海道大理 " "	講師 助手 研究生	新 CI プログラム開発
5	足 立 裕 彦 藤 間 一 美 福 谷 和 彦	兵庫教育大自然系 東京大教養 大阪大工	助教授 大学院学生 "	DV-X $\alpha$ 法による分子軌道計算 プログラムの開発
6	岩 田 末 廣	慶応大理工	助教授	光イオン化断面積プログラムの 開発及び GAUSSIAN70 と EFCI の整備
7	中 島 広 志	金沢大医療技術短大	講師	タンパク質構造解析プログラ ムの開発

8	花村光泰	東北大理	大学院学生	IMSPAC, IMSPAKのエラー修正及び整備
9	小笠原恵子	愛知教育大	学部4回生	量子化学文献データベースのレベルアップ
10	大場茂	慶応大理工	助手	MULTAN78 整備
11	堀憲次	京大工	大学院学生	GAUSSIAN80 の整備
	寺前裕之	〃	〃	
	山下晃一	〃	〃	
12	赤木和夫	京大工	大学院学生	量子化学文献データベースの検証
13	竹下幸一	北海道大理	研究生	GRAMOL 開発整備
14	大野公男	北海道大理	教授	量子化学文献データベースの様式変更
15	鈴木巧	筑波大電子情報工学系	教授	赤外スペクトルデータシステムの導入
16	佐々木慎一	豊橋技術大第五工学系	教授	有機化合物自動構造解析システムの導入

表 4.1.2 ライブラリプログラム一覧

==== IMS PROGRAM LIBRARY ====

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

FIELD CODE : 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 : MI10

FIELD TITLE : MOLECULAR INTEGRALS.

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

FIELD CODE : 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
021	GUGACI	GRAPHICAL UNITARY GROUP APPROACH CI BY ISAIAH SHAVITT
022	DRAWDG	DIAGRAM:GENERATION OF GOLDSTONE AND BLOCH-BRANDOW DIAGRAMS
023	GSCF2	PROGRAM GSCF2 WITH ONE-HAMILTONIAN AND PARTIAL SCF METHOD

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MNDO	MNDO SCF CALCULATIONS
002	MIND03	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
002	DVSCAT	NUMERICAL-BASIS-SCC-DV-XALPHA MO AND CLUSTER CALCULATION

FIELD CODE : SC10  
FIELD TITLE : SCATTERING AND TRAJECTORY.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MOLSCT	MOLSCAT: MOLECULAR SCATTERING PROGRAM

FIELD CODE : SC20  
FIELD TITLE : CRYSTALLOGRAPHY.

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

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	MDANO3	MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE
006	CLAMPS	CLAMPS: CLASSICAL MANY PARTICLE SIMULATOR

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MDANO3	MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE
002	DVSCAT	NUMERICAL-BASIS-SCC-DV-XALPHA MO AND CLUSTER CALCULATION

FIELD CODE : AS30  
FIELD TITLE : LIQUID AND SOLUTION.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MDANO3	MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE
002	MDSALT	MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION FOR MOLTEN SALT
003	CLAMPS	CLAMPS: CLASSICAL MANY PARTICLE SIMULATOR

FIELD CODE : BI10  
FIELD TITLE : BIOMOLECULES.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	NASH	SEARCH FOR NEAR ATOMS IN A PROTEIN
002	STEREO	STEREO DRAWING OF SKELETAL MODEL OF PROTEINS.
003	CONVRT	CONVERSION OF BNL DATA FORMATS TO PSPCS FORMAT
004	DISMAP	TRIANGULAR DISTANCE MAP OF A PROTEIN
005	ASA	ACCESSIBLE SURFACE AREA OF A PROTEIN
006	BENDER	PARAMETER CALCULATION FOR BYRON'S BENDER MODEL
007	SUPPOS	SUPERPOSITION OF TWO SIMILAR CONFORMATION OF PROTEIN(S)
008	QDD	GRAPHIC PROGRAM FOR QUANTITATIVE DRUG DESIGN
009	BSIP	BASIC STRUCTURAL INFORMATION ON PROTEIN FROM PDB DATA
010	TASP	ANALYSIS OF PRIMARY AND SECONDARY STRUCTURES OF PROTEIN
011	PDB	THE PROTEIN DATA BANK
012	PRTXYZ	XYZ COORDINATES OF MODEL STRUCTURE OF PROTEIN

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
012	SFORT	FORMAT TRANSFORMER FOR FORTRAN COMPILER LIST
013	PSPART	EXTRACT SPECIFIED ROUTINES FROM A FORTRAN PROGRAM PACKAGE
014	DRAWDG	DIAGRAM:GENERATION OF GOLDSTONE AND BLOCH-BRANDOW DIAGRAMS

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 \*\*\*\*  
84

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

ALIS	ASA	ASSIGN	ATOMHF	BCRES3	BC3	BENDER
BSIP	CGTOFD	CGTORL	CLAMPS	CNINDO	COMICA	CONVRT
CVOA	DISMAP	DISPL3	DNMR3	DRAWDG	DVSCAT	ENVLOP
FCBSD	FCMP	FLOW	FORDAP	GAUS76	GSCF2	GUGACI
HLISP	HMO	HONDO	HONDOG	IMSPAC	IMSPAK	INTCPY
IPCREF	JAMOL3	JAPIC1	JAPIC2	LAOCN3	LIBE	LSRES3
LSVR3	MDANO3	MDSALT	MINDO3	MMIPI1	MMIPI3	MMIY3
MM2	MNDO	MOLSCT	MULTAN	NASH	NCTB	NICER
ORTEP	OTHEL0	PA200	PA300	PA409	PA600	PDB
PFOVRT	PGCCMB	POTOPS	PROFIL	PRTXYZ	PSPART	PSTOPO
QCHECK	QCLDB	QDD	REDUCE	REPORT	RKNGAU	SALS
SCEP	SFORT	STEREO	STINGY	SUPPOS	TASP	UNICS3

IMS COMPUTER CENTER: UPDATE DATE = 82-04-05

○QCPEプログラムサービス

インディアナ大学よりQCPE (Quantum Chemistry Program Exchange)プログラムを購入しMTによる貸し出しサービスを行っている。56年度は# 408~# 431の24件のプログラムが新規追加され、総件数は387件である。

PROG -ID	TITLE
QC0408	BONDO:BOND ORBITALS IN THE NDO APPROXIMATION
QC0409	NICER:NAGOYA ITERATIVE COMPUTATION EIGEN ROUTINES
QC0410	BIGSTRAIN2:EMPIRICAL FORCE FIELD APPROXIMATION
QC0411	CHARGES:CALCULATE CHARGES USING AB INITIO WAVE FUNCTIONS
QC0412	GEPORT:GENERATION,ENUMERATION AND PLOTTING OF ROUTED TREES
QC0413	SAREA:VAN DER WAALS SURFACE AREA OF MOLECULES
QC0414	QUAD:QUADRATIC FITTING PROGRAM
QC0415	MULFRA:ENERGY HYPERSURFACE AND STATIONARY POINTS ANALYSIS
QC0416	SOGEQ:CHEMICAL EQUILIBRIA CALCULATION
QC0417	ENERFIT:ENERGY FITTING PROGRAM
QC0418	ZMAT:INTERACTIVE STEREO GRAPHICS PROGRAM
QC0419	COORD:INTERCONVERSION OF CARTESIAN AND INTERNAL COORDINATES
QC0420	BTERM:FARADAY MCD B-TERMS FOR PLANAR PI SYSTEMS
QC0421	GAVSSIAN79:DEC10 VERSION WITH PROPERTIES PACKAGE
QC0422	SCEP:IBM VERSION TO WORK WITH GAUSSIAN76 (QCPE 391)
QC0423	MM2:MOLECULAR MECHANICS VERSION 2 (CDC VERSION OF QCPE #395)
QC0424	PCILO/2:INCLUDING TRANSITION METAL COMPLEXES (CDC VERSION)
QC0425	HYMAT:LOWEST EIGENVALUES & EIGENVECTORS BY DAVIDSON'S METHOD
QC0426	PAIRS:ANALYSIS OF INFRARED SPECTRA
QC0427	FORCE/DRVEXP:ANALYTICAL ENERGY GRADIENTS FOR LCAO-MO-SCF
QC0428	MNDO:MODIFIED NEGLECT OF DIATOMIC OVERLAP (VAX VERSION)
QC0429	MOLECULAR SURFACE PROGRAM
QC0431	MINDO/3:WITH ROUTINES, 'JOINBO' & 'MIXUP' FOR CONVERGENCE

## 4.2 SOMによるLP節約の効果

昭和56年4月より、出力編集のためのSOM (Sysout Manager) コマンドシステムを公開し、研究能率の向上とLP用紙の節約を進めてきたが、1年を経過したのでLPの節約状況について報告する。

表4.2.1にLPの出力量を示す。SOMにより、実際のLP出力は約40%弱にまで減少している。LP箱数にして727箱節約になっている。

表 4.2.1 SOM コマンドの利用によるLP用紙の節約

	スプール出力 ページ数	LP出力 ページ数	LP出力割合	LP出力箱数
56.4	168966	101317	( 60.0%)	< 50.7>
5	202420	76280	( 37.7%)	< 38.1>
6	170672	69625	( 40.8%)	< 34.8>
7	202584	70083	( 34.6%)	< 35.0>
8	169449	59647	( 35.2%)	< 29.8>
9	212780	79906	( 37.6%)	< 40.0>
10	249819	78878	( 31.6%)	< 39.4>
11	239741	58590	( 24.4%)	< 29.3>
12	257967	87911	( 34.1%)	< 44.0>
57.1	165208	84648	( 51.2%)	< 42.3>
2	188538	90312	( 47.9%)	< 45.2>
3	151008	68660	( 45.5%)	< 34.3>

$$\text{LP出力割合} = \frac{\text{LP出力ページ数}}{\text{スプール出力ページ数}} \times 100(\%)$$

しかし、当初目標としたLPの出力率は30% (削減率70%)で、現在のところ目標を下まわっている。今後も利用者に協力をお願いすると同時に、さらにSOMの改良を進めて研究能率の向上に役立つよう電算機センターとしても、一層の努力をしていきたい。

## 4.3 講習会・プログラム相談

### □ 講習会等開催

- (1) 新システム(M200H×2 LCMP)の運用説明と、MTM・SOMコマンドシステム及びHQEDエディタについての講習会 昭和57年2月17日

### □ 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操作、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、オープンMT、運用についての問い合わせなどである。一般利用を行う上での相談を行っている。

#### (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、その中でも特に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。

### 4.4 研究会・学会報告

#### 4.4.1 分子研研究会

○「スーパーコンピュータとその分子科学への応用」昭和57年2月17～18日

提案者 柏木 浩，諸熊奎治，土方克法（電通大）

当センターはM-200Hの数十倍の速度を持つと言われているスーパーコンピュータを近い将来に導入することを計画している。この研究会にはスーパーコンピュータの識者と当センターで大規模な科学計算を実行、または計画しているユーザに参加していただいて下記のプログラムに従って講演と討論を行った。詳細については分子研センター発行の研究会報告集を参照されたい。

- (1) 研究会のはじめに…………… 諸熊奎治（分子研）
- (2) スーパーコンピュータの海外における利用と問題点…………… 柏木 浩（分子研）
- (3) Cray-1 はなぜ速いか …………… 武田喜一郎（日本クレイ）
- (4) 超高速演算の動向とプログラムの適合性…………… 小高俊彦，青山智夫（日立製作所）
- (5) 分子科学研究者の欲しいコンピュータ…………… 佐々木不可止（北大理）
- (6) 原子衝突の大型計算…………… 佐藤浩史（お茶大）・島村 勲（宇宙研）
- (7) アレイプロセッサの効果的な利用方法…………… 唐木幸比古（東大センター）
- (8) 大次元行列の固有値問題とアレイプロセッサ…………… 小杉信博（東大理）

- (9) 生体高分子の立体構造研究におけるスーパーコンピュータの利用  
 …………… 武富 敬(九大センター)・郷 信広(九大理)
- (10) 溶液の計算機実験の可能性…………… 片岡洋右(京大理)
- (11) モンテカルロ法によるアルコール分子周囲の水和構造…………… 中西浩一郎(京大工)
- (12) 核融合研究分野におけるスーパーコンピュータの必要性和利用計画  
 …………… 阿部芳彦(プラズマ研センター)
- (13) 東大大型計算機センターにおけるスーパーコンピュータ導入計画  
 …………… 石田晴久(東大センター)
- (14) 分子科学計算のためのアルゴリズムの開発…………… 柏木 浩(分子研)

#### 4.4.2 技術研究会

第11回 技術研究会 昭和57年3月4日(木)13:00～3月5日(金)15:00

(場所) 分子科学研究所

(内容) 電子計算機部門が発足して3回目であるが年々盛大なものとなり今回の参加者は24名、発表者は10名であった。一方規模が大きくなるに従って発表内容が広範囲に発散すること、遠方の参加者が増えることによる旅費の問題などが出始めていることも事実である。次回は高エネルギー物理学研究所に場所を移して行われる予定である。

(発表者) 西本史雄「分子研における論文清書システムの展開」

伊奈 諭「カラーグラフィックスの分子科学への応用について」

#### 4.4.3 情報化学討論会

昭和56年10月19～20日 東京

○分子科学におけるカラーグラフィックスの展開

発表者 柏木 浩, 伊奈 諭

(内容) 分子研センターのカラーグラフィックシステムと図形処理ルーチンCANVASの紹介及び金属ポルフィリンなど複雑な分子の分子軌道, 電子密度の表示方法について報告を行った。

#### 4.4.4 情報処理学会

第23回全国大会 昭和56年10月14日(水)～10月16日(金)

(場所) 東京大学工学部

○カラーグラフィックシステムCANVASの開発と応用について

発表者 伊奈 諭

(内容) 分子科学, 生物科学におけるコンピュータグラフィックスの発展としてカラーグラフィックスを使った新しい研究手段, 表示方式の開発, 教育効果の高い斬新なカラー画像の作成などを行ったことの紹介をした。

## 5. 昭和56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	112	279	5,565	3,893	2,926	1,479,340	1,111,905
	協力研究	35	35	1,202	980	355	372,400	135,037
	所内	27	88	1,324	1,299	1,004	498,620	381,519
	アイドル (注)	10	37	2,100	2,100	1,608	798,000	610,869
生理学	施設利用	3	8	26	23	16	8,740	6,222
	所内	1	2	10	10	10	3,800	3,809
基礎生物学	施設利用	3	7	30	28	9	10,640	3,274
	協力研究	1	1	5	5	1	1,900	449
	所内	1	1	5	5	0	1,900	0
合計		193	458	10,267	8,343	5,929	3,170,340	2,253,084

(注) ① 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。

② ここでのCPU時間実績は点数管理の方から(点数/380)を行って逆算したものであるため、LP用紙使用量、ディスク使用量等の要素による点数も反映されている。したがって純粋のCPU使用時間とはなっていないことに注意のこと。

### 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

M-180システム 表 5.3.2

} 図 5.3.1

### 5.4 CPU時間

M-200Hシステム 表 5.4.1

M-180システム 表 5.4.2

} 図 5.4.1

表 5.2.1 M-200H システム稼動状況

メ ン タ	ユ ー ザ ー サービス	シ ス テ ム 障 害	メ ン テ ナ ンス	セ ン タ 業 務	合 計
81-04	530:54	00:00	06:00	12:00	548:54
81-05	643:57	00:00	06:30	11:30	661:57
81-06	493:32	00:00	11:00	15:33	520:05
81-07	540:40	00:00	04:00	47:30	592:10
81-08	512:18	00:00	14:00	13:30	539:48
81-09	560:17	00:30	08:15	10:15	579:17
81-10	631:09	00:40	06:00	12:00	649:49
81-11	511:25	00:00	06:00	16:30	533:55
81-12	508:14	00:00	06:00	07:30	521:44
82-01	535:20	00:00	04:30	13:30	553:20
82-02	489:43	00:00	06:00	12:00	507:43
82-03	392:14	00:00	26:00	94:00	512:14
コ ー デ ィ ン ー	6349:43	01:10	104:15	265:48	6720:56

表 5.2.2 M-180 システム稼動状況

年 月	ユ ー ザ ー サービス	シ ス テ ム 障 害	メ ン テ ナ ンス	セ ン タ 業 務	合 計
81-4	548:00	—	14:00	—	562:00
81-5	650:00	—	19:00	—	669:00
81-6	526:00	—	26:00	—	552:00
81-7	576:00	—	21:00	—	597:00
81-8	557:30	—	30:30	—	588:00
81-9	571:00	—	20:00	—	591:00
81-10	619:15	00:45	19:00	—	639:00
81-11	528:00	—	18:00	—	546:00
81-12	535:30	—	14:30	—	550:00
82-1	548:00	—	11:00	—	559:00
82-2	500:30	—	15:30	—	516:00
82-3	220:07	00:53	9:00	—	230:00
合 計	6379:52	01:38	217:30	—	6599:00

表 5.3.1 M-200H システムジョブ件数

***** ヲヨフ***** カンラク ***** ヲヨフ*****												
( ヱキ )	( A )	( B )	( C )	( D )	( E )	( I )	( S )	( T )	( X )	( Y )	( Z )	( TOTAL )
04	2	15	1,407	178	111	121	0	9,773	0	392	17	12,016
05	0	0	1,359	229	42	449	0	9,595	0	828	1	12,503
06	0	0	1,217	231	44	566	0	9,230	0	697	1	11,986
07	0	0	1,287	153	48	465	4	11,303	0	539	0	13,799
08	0	0	1,303	110	26	685	0	9,959	0	408	0	12,491
09	15	15	1,176	118	69	418	9	12,779	0	422	0	15,021
10	109	59	1,355	123	97	259	48	12,378	0	401	3	14,832
11	0	0	1,146	112	50	368	84	9,098	0	416	16	11,290
12	0	0	1,232	69	52	247	44	9,975	0	371	96	12,086
01	0	0	1,458	168	43	244	92	8,828	1	674	12	11,520
02	0	0	1,163	83	65	222	27	10,153	0	249	0	11,962
03	1,104	492	773	80	19	160	26	8,188	0	172	3	11,017
(TOTAL)	1,230	581	14,876	1,654	666	4,204	334	121,259	1	5,569	149	150,523

表 5.3.2 M-180 システムジョブ件数

***** ヲヨフ***** カンラク ***** ヲヨフ*****												
( ヱキ )	( A )	( B )	( C )	( D )	( E )	( I )	( S )	( T )	( X )	( Y )	( Z )	( TOTAL )
04	3,217	1,971	0	0	0	231	0	0	0	175	0	5,594
05	3,326	2,122	0	0	0	719	0	0	0	158	1	6,326
06	2,787	1,503	0	0	0	533	0	0	0	66	0	4,889
07	3,641	1,638	0	0	0	411	0	1	0	87	0	5,778
08	3,280	1,650	0	0	0	274	0	0	0	24	0	5,228
09	3,849	2,086	0	0	0	239	0	0	0	77	0	6,251
10	3,528	1,970	0	0	0	238	0	0	0	76	0	5,812
11	3,063	1,637	0	0	0	187	0	0	0	37	0	4,924
12	3,608	1,722	0	0	0	277	0	0	0	26	0	5,648
01	3,023	1,532	0	0	0	220	0	0	0	52	0	4,827
02	4,123	1,671	0	0	0	150	0	0	0	12	0	5,956
03	2,003	993	0	0	0	93	0	0	0	2	0	3,091
(TOTAL)	39,448	20,495	0	0	0	3,572	0	1	0	792	16	64,324

表 5.4.1 M-200H システム C P U 時間

( 仕様 )	( A )	( B )	( C )	( D )	( E )	( I )	( S )	( T )	( X )	( Y )	( Z )	( TOTAL )
04	00:00:00	00:00:00	223:27:16	86:53:37	74:32:40	23:51:37	00:00:00	18:38:25	00:00:00	01:21:05	00:07:04	428:51:44
05	00:00:00	00:00:00	244:15:40	112:52:15	25:52:26	82:51:30	00:00:00	18:55:43	00:00:00	02:33:37	00:00:00	487:21:11
06	00:00:00	00:00:00	153:47:24	65:24:49	20:45:46	74:40:33	00:00:00	16:50:19	00:00:00	01:02:42	00:00:00	332:31:33
07	00:00:00	00:00:00	227:43:43	78:40:33	36:38:11	86:31:09	01:18:15	21:22:19	00:00:00	01:59:45	00:00:00	454:13:55
08	00:00:00	00:00:00	171:54:14	38:53:02	13:53:04	160:41:25	00:00:00	22:38:09	00:00:00	01:24:31	00:00:00	409:24:25
09	00:02:42	00:13:57	221:50:12	57:22:21	38:30:57	94:40:51	00:00:00	24:43:04	00:00:00	11:55:44	00:00:00	449:19:48
10	00:26:13	02:22:07	267:07:19	58:29:59	62:22:52	87:27:32	01:32:52	24:45:41	00:00:00	10:58:38	00:00:16	515:33:34
11	00:00:00	00:00:00	189:30:55	44:25:53	24:17:56	112:53:10	19:18:04	19:49:41	00:00:00	03:52:02	00:45:26	387:12:50
12	00:00:00	00:00:00	259:30:24	33:35:10	42:22:54	76:35:51	19:49:33	19:52:36	00:00:00	05:45:52	10:56:12	468:28:32
01	00:00:00	00:00:00	189:13:15	79:57:44	34:54:53	57:54:40	45:47:26	19:04:39	00:00:02	03:17:31	00:00:00	430:10:10
02	00:00:00	00:00:00	189:18:13	41:22:18	23:13:13	72:35:37	18:21:53	21:17:07	00:00:00	01:12:06	00:00:00	367:20:27
03	03:56:57	11:11:00	153:18:03	43:13:44	12:40:56	56:41:42	14:01:38	18:36:42	00:00:00	00:21:10	00:00:10	314:02:02
(TOTAL)	04:25:52	13:47:04	2490:56:38	741:11:25	410:05:53	959:45:20	120:09:41	246:34:25	00:00:02	45:44:43	11:49:08	5044:30:11

表 5.4.2 M-180 システム C P U 時間

( 仕様 )	( A )	( B )	( C )	( D )	( E )	( I )	( S )	( T )	( X )	( Y )	( Z )	( TOTAL )
04	21:42:04	121:04:53	00:00:00	00:00:00	00:00:00	101:10:10	00:00:00	00:00:00	00:00:00	00:02:28	00:00:00	243:59:35
05	19:16:46	127:29:07	00:00:00	00:00:00	00:00:00	173:07:08	00:00:00	00:00:00	00:00:00	00:12:46	00:00:00	322:05:47
06	21:30:07	95:39:06	00:00:00	00:00:00	00:00:00	123:24:30	00:00:00	00:00:00	00:00:00	00:01:17	00:00:00	240:35:00
07	32:47:56	121:57:03	00:00:00	00:00:00	00:00:00	182:34:31	00:00:00	00:00:03	00:00:00	00:43:17	00:00:00	338:02:50
08	26:50:08	106:15:30	00:00:00	00:00:00	00:00:00	200:37:56	00:00:00	00:00:00	00:00:00	00:01:01	00:00:00	333:44:35
09	34:49:44	150:22:27	00:00:00	00:00:00	00:00:00	136:47:52	00:00:00	00:00:00	00:00:00	01:39:40	00:00:00	323:39:23
10	26:45:45	144:17:45	00:00:00	00:00:00	00:00:00	158:48:06	00:00:00	00:00:00	00:00:00	00:24:20	00:00:00	330:15:56
11	26:43:16	116:52:07	00:00:00	00:00:00	00:00:00	94:56:50	00:00:00	00:00:00	00:00:00	00:11:28	00:00:00	238:43:41
12	30:57:15	147:01:53	00:00:00	00:00:00	00:00:00	148:09:19	00:00:00	00:00:00	00:00:00	00:11:38	02:41:36	329:01:41
01	24:08:28	98:06:02	00:00:00	00:00:00	00:00:00	118:26:11	00:00:00	00:00:00	00:00:00	00:03:34	00:00:00	240:44:15
02	32:15:18	144:11:46	00:00:00	00:00:00	00:00:00	135:33:56	00:00:00	00:00:00	00:00:00	00:01:24	00:00:00	312:02:24
03	18:05:10	87:41:57	00:00:00	00:00:00	00:00:00	86:21:30	00:00:00	00:00:00	00:00:00	00:00:07	00:00:00	192:08:44
(TOTAL)	315:51:57	1460:59:36	00:00:00	00:00:00	00:00:00	001661:57:39	00:00:00	00:00:03	00:00:00	03:33:00	02:41:36	3445:03:51

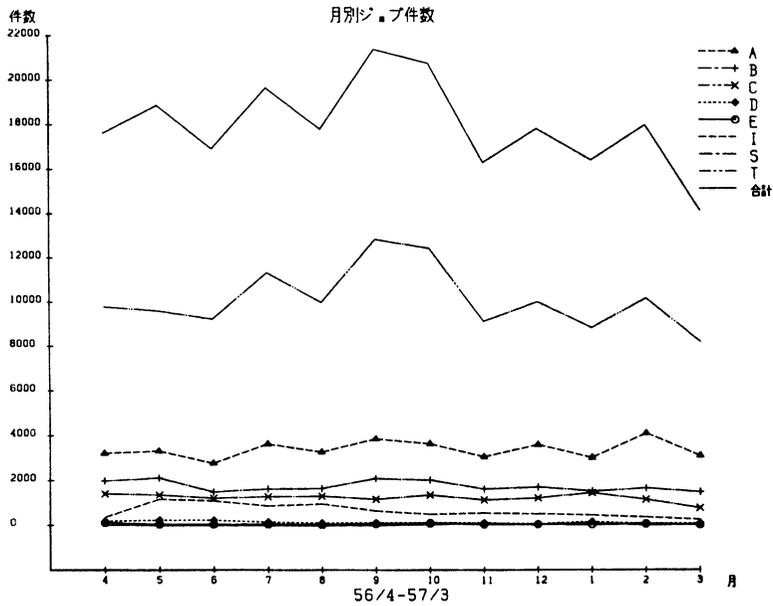


図 5.3.1 システムジョブ件数  
(M-200H+M-180)

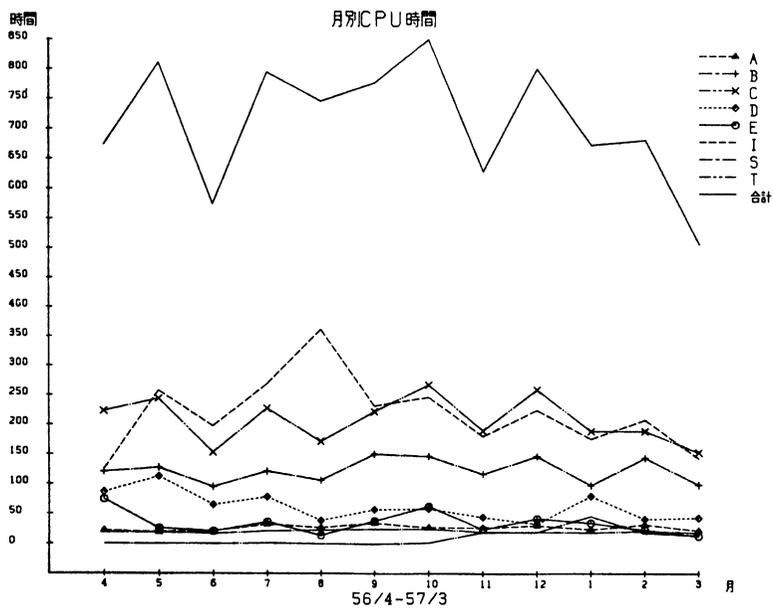


図 5.4.1 システムCPU時間  
(M-200H+M-180)

(但しM-200H処理速度を基準とするためM-180のCPU時間は $1/2.7$ のファクタ)をかけた上で合計されています。

## 5.5 無人運転状況

M-200H+M-180

表 5.5.1

表 5.5.1 無人運転状況

ネットワーク	フリーアクセス		タイカク		コックパイ	
	カイスウ	タイム	カイスウ	タイム	カイスウ	タイム
81-04	13	75:59	4	95:07	17	171:06
81-05	7	31:05	5	50:58	12	82:03
81-06	14	83:22	4	116:33	18	199:55
81-07	7	34:30	5	93:20	12	127:50
81-08	11	81:31	5	122:41	16	204:12
81-09	7	64:45	4	75:58	11	140:43
81-10	6	36:23	4	57:48	10	94:11
81-11	12	67:13	4	118:52	16	186:05
81-12	6	23:48	4	102:28	10	126:16
82-01	8	60:23	4	58:17	12	118:40
82-02	8	70:11	2	70:06	10	140:17
82-03	3	19:11	11	236:35	14	255:46
コックパイ	102	648:21	56	1198:43	158	1847:04

## 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5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、LCMPシステムの実現などにより表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	509 <sup>H</sup>
54年度	155,980	2405
55年度	183,840	5405
56年度	214,847	6320

但し、CPU時間はM-200Hの処理速度を基準としている。

(M-200H:M-180=2.7:1として換算)

## 6. センターより（速報No.14～No.19から再録）

### 6.1 LPイメージビデオディスプレイターミナル（LPIVDT）の導入と利用（No.14）

6月末にLPIVDT（HT-5425-C51）を合計10台導入し、うち1台をオープン入出力室、4台を従来のパンチ室、1台を端末室に設置しました。残りの4台はそれぞれRJE1、RJE2に2台ずつ配置しました。LPIVDTには次の特長があります。

- (1) LP 一頁に相当する132カラム、66行を一画面に1度で表示できる。
- (2) SOM コマンドと併用することにより出力編集が容易にできる。DESP エディタを除く、EDIT、HQED、SO エディタ……が使用できます。

以上の特長からSOMコマンド プラス HQED エディタをこのLPIVDT で用いれば、出力結果の編集が非常に便利となり、LP出力ページ数の削減にもなりますので有効に御利用ください。

### 6.2 SOMによるLP用紙の節約の成果（No.14）

出力結果の取り出し方式の変更を4月から行いましたが、LP用紙の節約状況が出ましたので、中間報告します。

期 間	SPOOL 総出力ページ	実際に出されたページ数	出力LP用紙箱数	削減率(%)
4/1 ~ 6/14	470,418	221,908	111	52.8%

利用者の皆様のご協力により全体的には全出力枚数が約半分に削減され、LP用紙の宅急便利用が激減し、業者から心配する電話がかかるほど効果を上げることができました。今後さらに70%以上の削減率を目指して努力くださるようお願いいたします。中には下記削減ワーストプロジェクトのようにまだSOMコマンドの機能を十分に利用されていないプロジェクトもありますので一層の御協力をお願いします。

#### (1) 削減ワースト3プロジェクト例

プロジェクト	SPOOL総出力ページ	実出力ページ	出力箱数	削減率(%)
例 1	11,470	11,008	5.5	4%
例 2	9,221	10,168	5.1	-10.3%
例 3	7,404	7,033	3.5	5%

## (2) 削減ベスト3プロジェクト例

プロジェクト	SPOOL総出力ページ	実出力ページ	出力箱数	削減率(%)
例 4	4,483	0	0	100%
例 5	3,951	1	0	100%
例 6	10,878	2,663	1.3	75.5%

### 6.3 SOMによるLP用紙の節約状況について(No.15)

前号(No.14)でお知らせしましたように、出力結果の取り出し方式の変更を4月に行って以来、6月中旬までで約50%のLP用紙出力を節約できました。その後8月末までの統計が出ましたので再度ご報告します。

期間	SPOOL総出力ページ	実際に出されたページ数	出力LP用紙箱数	削減率(%)
4/1 ~ 6/14	470,418	221,908	111	52.8
6/15 ~ 8/30	436,227	153,408	77	64.9
トータル 4/1 ~ 8/30	906,645	375,316	188	58.7

前号でLP用紙節約に対するお願いをして以来、皆様の一層の御協力を得ることができ、その後さらに10.2%の削減率向上が得られ、約65%の削減率を挙げることができました。どうもありがとうございました。今後もこの調子で70%の削減率を目指して努力をお願いします。なお一部ユーザにはまだ趣旨をご理解いただけていない点もあるようですので、今後の御協力をお願い致します。

### 6.4 蓄積型グラフィックディスプレイ使用時の注意事項(No.14)

蓄積型グラフィックディスプレイでGPSLを利用して作画(特に文字)を行う場合、必ず次のデータセットを割り当ててください。

```
ALLOC △ DD(FILE01)△DS(▽SYS1, MTABLE▽) △ SHR
```

この割り当てをしないで文字を作画しようとするエラーが発生します。

### 6.5 昭和56年度協力研究(前期)のプロジェクト有効期間とデータセットの消去について(No.15)

協力研究(前期)のプロジェクトは9月30日で有効期間をすぎます。協力研究(後期)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11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。

有効期間内であればMTMにより磁気テープに一括バックアップがとれます。

## 6.6 センターレポートNo.2発行のお知らせ(No.15)

昭和55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状況、ユーザ発表論文一覧などを収めたセンターレポートNo.2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、どうぞご高覧ください。

## 6.7 昭和57年度(前期)の利用申請について(No.16)

昭和57年度(前期)の共同・協力研究および施設利用の利用申請期限が近づいています。希望者は忘れずに手続きしてください。

なお、計算機利用申請書を一部同封しましたのでご利用ください。

- (1) 57年度(前期)利用申請期限：昭和57年1月23日(土)
- (2) 提出先：国際研究協力課研究協力第一係

## 6.8 昭和57年度からの運用について(No.16)

昭和57年4月から次のようにレベルアップした新システムでサービスを行います。

### (1) M-200H×2のLCMP(疎結合マルチプロセサ)システム

従来のM-200H+M-180のLCMPにおいてM-180を撤去し、新たにM-200Hを導入し、M-200H×2のLCMPになります。これによりシステムの処理能力は約1.5倍になります。ただし、ローカルプロセサにはIAPがついていません。電力節約のためローカルプロセサの夜間・休日の運転は縮少する予定です。

### (2) レーザプリンタの導入

高品質の英数字、漢字、表、図形を出力できるレーザプリンタを設置します。印刷速度は、2,730行/分です。利用形態はSOM、OPENMTなどと同様のオープン方式です。詳細については次の速報を御覧ください。

### (3) 磁気ディスクの増設

317.5MBの磁気ディスクを4ボリューム増設します。

## 6.9 年末年始のお知らせ (No. 16)

年末年始の次の期間サービスを停止します。

昭和56年12月28日(月) 22:00 ~ 昭和57年1月4日(月) 13:30

## 6.10 システム停止予定のお知らせ (No. 16)

6.8項でお知らせしましたようにシステムレベルアップ作業のため次の期間サービスを停止します。

昭和57年3月13日(土) 8:00 ~ 3月16日(火) 9:00

昭和57年3月21日(日) 8:00 ~ 3月31日(水) 13:30

なお、3月16日~3月20日はサービスを行いますが、M-200H 1台のみが稼働します。A、BクラスはM-200H側でサービスします。

## 6.11 今年度利用点数の有効期限について (No. 16)

計算機施設利用(プロジェクトIDの第1字目がC~G, K~N, Q~T)と共同・協力研究(プロジェクトIDの第1字目がB, J, P)

の計算機利用の点数有効期限を次のように延長します。

有効期限 : 昭和57年4月30日
-------------------

ただし、所内の計算機利用は昭和57年3月31日で有効期限が切れますのでご注意ください。

## 6.12 出力結果のメール(郵送)指定について (No. 16)

遠隔地より電話回線による計算機利用で、出力結果の一部をセンターより郵送するサービスを行っています。

メールの指定はTSSよりSOMを使って、次のようにします。

READY

SOM

SOM コマンドシステムを呼び出す。

S/\*X3

ジョブの結果を取り出す。

⋮

S/PRINT

      , M

第2パラメータの出力クラスにM(メール)を指定する。

S/END

READY

なお、バッチのJCLで、MSGCLASS=Mとしても無効ですのでご注意ください。郵送を希望するリストは必要最少限としてください。

### 6.13 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 (tss29シリーズ)の提供について(No.16)

tss29はパーソナルコンピュータをそのスクリーンエディタ機能を生かしてインテリジェントTSS端末にするプログラムです。(スクリーンエディタとは、既にパーソナルコンピュータでは一般化している機能で、画面上任意の位置のプログラムやデータ、コマンドをカーソルと挿入、削除キーを使って、自由に修正し、再入力(送信)できるものです。)

tss29a, tss29b(日電のPC-8001), tss29h(日立のベーシックマスターレベル3)のバージョンがあり、手引も用意してあります。特に今回開発したtss29bは、最も普及しているPC-8001を、その本体のみで300/1200BPSのTSS端末とする極めてコストパフォーマンスの高いもので、かつ、Basicで書かれているので研究者のパーソナルな機能追加も自由に容易にできます。市販のTSS端末でこの機能を上まわるものは現在のところありません。パーソナルコンピュータをTSS端末にする際の参考としてください。

なお、手引はセンター事務受付で受け取ることができます。

### 6.14 計算結果の編集と保存についての講習会(No.17)

SOM(SYSOUT Manager, 計算結果の取り出し)およびMTM(MT Manager, データセットの磁気テープへのバックアップおよびデータセット情報の管理)コマンドの講習会を次のように行います。特にSOMは当センターで計算結果を取り出すための必須コマンドですから是非御参加ください。

日 時 : 1982年2月17日(水) 10:00 ~ 12:00

場 所 : 分子研研究棟 101号室

講習内容 : SOMコマンドの使用法(EDIT, HQED, DESPによるSYSOUT データセットの検索/編集を含む)およびMTMコマンドの使用法。実習も行います。

### 6.15 昭和57年3月のシステム停止予定について(No.17)

システムレベルアップ作業のため次の期間サービスを停止します。

昭和57年3月13日(土)8:00 ~ 3月16日(火)9:00

昭和57年3月21日(日)8:00 ~ 3月31日(水)13:30

なお、3月16日~3月20日はサービスを行いますがM-200H1台のみが稼動しA, Bクラスも

M-200H側でサービスします。

#### 6.16 論文別刷の提出について（ライブラリプログラムの使用を論文に明記してください）

（No.17）

分子研計算機センターやライブラリを使用した結果にもとづいて論文発表をした場合、その別刷2部を当センター宛必ず提出してください。今までに提出された論文の多くには、分子研センターまたはライブラリを利用した旨が論文上のどこにも明記されていないものがほとんどであり、センターの利用規約に反しておりますのでご注意ください。度かさなる違反には当センターの利用をお断りする場合があります。

なお、提出される論文別刷はセンターレポートの論文一覧に掲載しますので整理の都合上、当論文に関与したプロジェクトコード、代表利用者氏名、発表誌名、発表年月を添付されるようお願いいたします。

#### 6.17 本年度（56年度）プロジェクトのデータセットの消去について（No.17）

昭和57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。磁気テープへのコピーはMTMコマンドを使うと便利です。

#### 6.18 昭和56年度利用報告書の提出について（No.18）

昭和56年度利用報告書の提出期限は次の通りです。プロジェクト代表利用者は忘れずに提出してください。

昭和57年5月31日 必着（厳守のこと）

原稿用紙と「記入要領と注意事項」を本速報と同封して送付しました。「記入要領と注意事項」を熟読の上、規定枚数を一ぱいに使用してできるかぎり詳細な報告をしてください。提出された原稿のうち施設利用B相当（CPU時間10Hを超える）のものは分子研計算機センターの「センターレポートNo.3」に掲載します。提出されないプロジェクトについてはその旨明示します。また利用区分に関係なくこの報告書はセンター運営委員会における今後のCPU時間割当て審査の資料となりますので充分留意してください。提出がない場合あるいは記載が不十分の場合には今後の利用をご遠慮していただくこともありますのでご注意ください。

## 6.19 昭和56年度利用点数の有効期限について（No.18）

計算機施設利用（プロジェクトIDの第1字目が C～G, K～N, Q～T）と共同・協力研究（プロジェクトIDの第1字目が B, J, P）の計算機利用の点数有効期限を次のように延長します。

有効期限：昭和57年4月30日

ただし、所内の計算機利用は昭和57年3月31日で有効期限が切れますのでご注意ください。

## 6.20 ライブラリプログラムの開発公募について（No.18）

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。

今年度は特にデータベースのデータチェックと管理、アレイプロセッサのためのアルゴリズムの開発についてセンターを援助してくださる人を求めています。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下さい。

- (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

## 6.21 ロッカーの返却について（No.18）

昭和56年度のプロジェクトはロッカーの貸し出し期限が

昭和57年4月30日

で終了します。この期限を過ぎたものはこちらで鍵を開けて処分しますので必要なものはあらかじめ

め持ち帰って、センター事務室へ返却通知をしてください。昭和57年度も継続して使用したい場合は上記期限にその旨をセンター事務室へ申し出てください。

## 6.22 プログラム室（デバッグ室）の整理について（No.18）

センター2階のプログラム室（デバッグ室）に置かれているLP出力用紙、カード、MTなどの保存期限がそろそろ切れます。期限を切れて放置されているものについてはセンター側で廃棄処分しますので、必要なものはあらかじめ持ち帰ってください。また、昭和57年度も新規に保存をしたい利用者はセンター事務室にて手続きをしてください。

## 6.23 利用報告書の提出について（No.19）

昭和56年度利用報告書の提出期限が近づいています。プロジェクト代表利用者は必ず期限までに提出してください。

提出された原稿のうちCPU使用実績が10時間を超えるものについては分子研計算機センターの「センターレポートNo.3」（年刊）にすべて掲載します。提出のなかったプロジェクトについてはその旨を明示します。また利用区分に関係なくこの報告書はセンター運営委員会における今後のCPU割当て審査の資料となりますので充分留意してください。提出がない場合あるいは記載が不十分の場合には今後の利用をご遠慮していただくこともありますのでご注意ください。

原稿提出期限：昭和57年5月31日（月）必着
------------------------

## 6.24 論文別刷の提出について（No.19）

分子研計算機センターやライブラリを使用した結果にもとづいて論文発表した場合、その旨を論文内に明記する必要があることは利用規則から明らかですが、そうした論文については、別刷（プレプリントは除く）を当センター宛に必ず2部提出してください。提出に際しては関与したプロジェクトコード、代表利用者名、発表論文誌名と発行年月を添付してください。

提出された論文名はセンターレポートNo.3に記載し、また今後の申請審査の有力な資料となります。

## 6.25 IMS プログラムライブラリ利用者に対する注意（No.19）

現在登録されているIMSプログラムライブラリのロードモジュールの中には、M-180用のクロックルーチンがリンクされているものがあります。このロードモジュールをローカルプロセッサのM200H（IAPないしプロセッサ）で実行すると、CPU時間が実際の約 $\frac{1}{3}$ になります。センタ

ーでは逐次ロードモジュールを修正していく方針です。異常に気づかれた方はセンターまでご連絡ください。

#### **6.26 昨年度（56年度）プロジェクトのデータセットの消去について（No.19）**

前々号でお知らせしましたが、本年度（57年度）に継続されなかった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。磁気テープへのコピーはMTMコマンドを使うと便利です。

#### **6.27 パソコン（PC-8800）をTSSグラフィック端末とする方法について（No.19）**

PC-8800パーソナルコンピュータを使うと単にTSSターミナルとしてだけでなく安価な簡易型カラーグラフィック端末としての利用が可能です。カラーグラフィックスを使用するための方法と簡単な基本サブルーチンライブラリの作り方を書いた手引きがありますので、希望者は受付に申し出てください。また、簡単なプレビュープログラムも提供致します。

#### **6.28 おわび（No.19）**

昭和56年度末（3月）から昭和57年度初め（4月）にかけてハードシステムの一部入れ替え、システムジェネレーションに関連してシステムダウンやソフトウェア障害が発生し、利用者JOBがキャンセルされ、臨時のシステム停止が行われました。これにより利用者の方々に多大のご迷惑をお掛けしましたことを本紙面を借りて深くお詫び申し上げます。



## 主な例

① EDIT △ A △ FORT77 △ NEW

不要 → ALLOC △ DS (A. FORT) △ NEW △ SPACE (2,2) ……………

SAVE (A. FORT に保存)

② COPY △ A. FORT △ B. FORT

B. FORT のアロケーションが不要

この機能のサポートによりコマンドの操作性がよくなる反面、データセット数の増加、不要なデータセットが残ることによるディスクの容量不足となりますので、プロジェクト・ユーザのデータセットの管理に十分配慮される様、よろしくお願い致します。

(一時的な仮のデータセットは@付の名称(短期データセット)とし、使用後は速やかに消去してください)。

### (5) 11M/19M型端末での画面のラップアラウンドモード

画面がいっぱいになると、最下行に\*\*\*が表示され、送信キーを押すと画面消去され、次の画面となりますが、送信キーのかわりにPA1キーを用いると、以後ラップアラウンドモードとなり、画面消去は行われず、最上行から部分消去されていきます。この機能は再入力機能を使う際、常に1画面分が残されているため、便利になります。この機能を解除したい場合は、\*\*\*が表示されたとき、PA1キーを入力する。継続したい場合は送信キーでよい。

### (6) LP イメージ VDT の再入力機能

画面の以前にコマンドを投入した入力フィールドへカーソルを移動させ、一部修正後、送信(復改)キーを押すと、そのフィールドが再利用され、入力されます。(11M/19M 端末では以前から使用可能な機能です。)

### (7) オープンMT機能の追加

① 区分データセットのメンバー指定ができます。

メニューのメンバー指定の位置にメンバー名をキー入力することにより、磁気テープの順データセットを指定メンバーに移したり、指定メンバーを磁気テープに移すことができます。

② 磁気テープのラベルプリントをLPに出力できます。

OPEN - MT △ PROCESS で 4. TAPE △ PRINT を指定すると、端末にラベル情報が表示されますが、これをプリンタに出力したい場合、SELECT △ PROCESSING で、SYSOUT と応答し、ENTER △ SYSOUT △ CLASS で、D (デマンド) を指定してください。

### (8) SOM のオプション追加

SOM コマンドでは、利用者のコマンド使用時の操作性を良くするため、オプション設定に

より標準値を選ぶことができますが、次の2つのオプションが今回追加されました。

CANCEL/DELETE/QUIT サブコマンドで確認の問い合わせをするか否かを決めて保存することができる。又、PRINT サブコマンドで改ページ機能を有効とするか否かも決めて保存できる。

OS△,,, , 確認の問い合わせを、改ページが有効と

するか否か                    なるか否か

Y又はN                    Y又はN

プリンタ出力については用紙節約のため改ページを無効とするのを標準にしています。改ページを有効としたい場合は

PRINT△,, Y

と個別にYを選択されるようお願い致します。

#### (9) その他の機能追加（一覧）

詳細は各室にそろえてあるマニュアルをご覧ください。

##### ① HQED

HQED コマンドでLS(80) オペランドを指定することにより固定長のデータセットで作成することができる。80以外は可変長になる。（既に作成済のデータセットを除く）

マニュアル：HQED使用の手引（基礎編・応用編）、文法

##### ② DESP：

小文字がサポートされた。

EDIT 機能にSUBMIT コマンドが加わった。

表示・検索機能が追加された。

マニュアル    DESP, DESP操作

##### ③ TSDUT

(4)の自動アロケーションのサポートにより、COPY, CONDENSEコマンドが使用できます。

LIST コマンドはデータセットの内容の表示、プリンタへの出力に便利です。

マニュアル：TSDUT

##### ④ TSLOG

RESHOW オペランドにより以前端末に表示された部分を再表示することができます。

マニュアル：TSLOG

##### ⑤ GPST/LINEPLOT

GPST では大幅な機能追加により、幾何形状及びレポートルーチンなどが使用できます。

同じサブルーチンで、TSS 端末 (H-9415 11M/19M) やラインプリンタに図形を出力できる LINEPLOT も使用可能です。

マニュアル：GPSL機能編第1～第4分冊

## LINPLOT

### 7.1.2 PREVIEW (プロッター出力のグラフィックディスプレイへの表示プログラム)の公開(No.17)

昭和57年4月より、PREVIEWが公開され、使用可能となります。PREVIEWは次の特徴を持っています。

- (1) 表示したいブロックを選択してグラフィックディスプレイに表示できる。
- (2) 1つのブロックを図形操作(平行移動, 拡大, 縮小表示)を行い何度でもくりかえし表示できる。
- (3) XYプロッタと比較して作図時間が短い。(特にセンターには鮮明なコピーのとれるハードコピー装置が設置されているので、プロッタへの出力でなくグラフィックディスプレイへの出力でよい場合も多い)
- (4) 操作が簡単である。

コマンド名はPREVIEWです。

詳しい説明は、マニュアルを参照してください。

図形出力ユーティリティプレビュープログラム PREVIEW 8080-7-130

### 7.1.3 カラーグラフィックディスプレイの利用について(No.17)

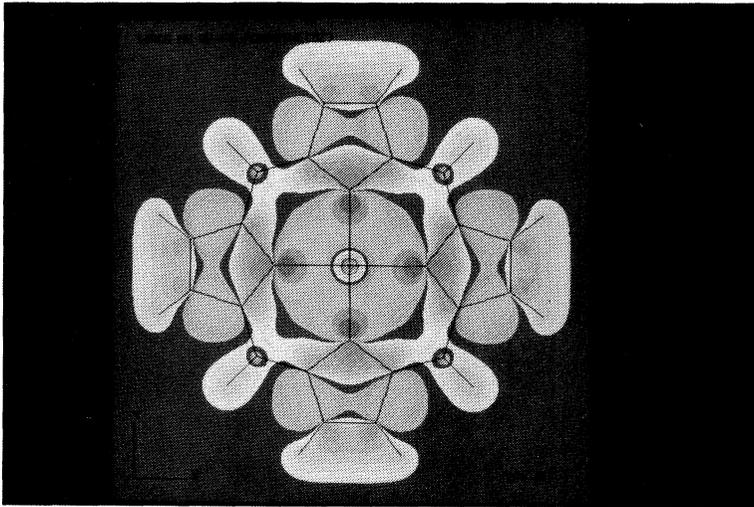
カラーグラフィックディスプレイとソフトウェア CANVAS の利用が、昭和56年度からできるようになっています。CANVAS の特徴は次の3点にあります。

- ① 従来のベクトル作画タイプのソフトウェア(例 GPSL)とほぼ同じ手続きで利用できる。
- ② 約260,000色までの色表現ができる。
- ③ 線画だけでなく面画(ぬりつぶし画)を表現できる。

①の特徴により、従来のグラフィックス利用者は特に容易に使用することができます。カラーで表現された図形・画像はスライドにして研究発表用に使用するか、カラープリントにして教育用に使用する場合、非常に説得力のある分かり易い資料作りができます。基本ソフトウェア CANVAS についてセンターに利用の手引きを用意していますので申し出てください。利用希望者は操作方法を説明しますので、センターへご相談ください。また、波動関数、電子密度などの等高図を作画される場合には、CANVAS CONTORプログラムも利用できます。

なお、カラーグラフィックディスプレイにはハードコピー装置がありませんが、接写のための

カメラを貸し出しますのでご利用ください。



#### 7.1.4 HOSOS システムの導入 (No 18)

北海道大学大型計算機センターで開発されたプログラム相談機械化のための相談システムHOSOSを導入しました。スーパーバイザ、データ管理、TSS、ユーティリティ、TSDUT、TSLOG、DESP、SAFE、最適化FORTRAN77、サービスプログラムのメッセージ、エラーコード、その他システム用語についての解説と対策をコマンドの入力によって得ることができます。コマンドは“HWHAT”、“HWHY”、“HHOW”の3種で、以下のように質問の性格の分類に対応します。

- (a) HWHAT : メッセージ、用語の解説
- (b) HWHY : エラーの原因と対策例
- (c) HHOW : カタログドプロシジャや一般的用語に対し、使用例とともに解説する、いわば、HELP機能

以下に実際の使用例を示す。

```
=====
= ONLY COMPILE :INPUT ----- PARTITIONED DATA_SET =
=====
//USERID* JOB PASSWORD,CLASS=P,MSGCLASS=H
//STEP EXEC FORT7C
//FORT.SYSLIB DC DSN=SOURCE.FORT,DISP=SHR
//FORT.SYSIN DD *
*STARTC SOURCE01
*STARTC SOURCE02
:
:
/*
//
HC*900I HOW ENDED RETURN CODE IS 0
```

READY  
HWHAT R37-04

SB37-04;B37-04;

ツキノ VOLUME オ MOUNT スル タメ、シヨリ ノ シヨウリヨウシヨク VOLUME ノ DEFQUANT カ ヒツ  
ヨウ ト ナツタカ、イカノ イスシカ ノ ケンクイン テン DEFQUANT カ オコトナヒナツタ。

- シヨウチヨウ VOLUME テンアツタ。
- ヨウクサレタ VOLUME テンアツタ。
- キヨウヨウ VOLUME テンアツタ。
- タノ JOB テン シヨウチヨウ ノ DATA-SET カ コノ VOLUME チヨウ ニ アツタ。
- イシヨウシヨウリヨウ シタ TASK テン OPEN サレタ DATA-SET カ コノ VOLUME チヨウ ニ アツ  
タ。

<チヨウキ>

DASD ノ シヨウリヨウ DATA-SET ノ カンパイ、VOLUME ノ DEFQUANT カ ヒツヨウ ト ナツタ ケ  
ンクイン ハ ツキノ イスシカ テンアル。

- コノ VOLUME ニ ソウクワシクワリテ テンキル SPACE カ ナイ。
- VTOC リヨウイキ カ マシカノイ ノ タメ ソウクワシクワリテ テンキナイ。
- カソウ DATA-SET ト シテ ワリアラレタ SPACE オ スルテ シヨウシタ。カソウ DATA-SET ト シテ  
SPACE ワリアテ ニ カンシテ ハ、"VOS3 JOB ナイキ" ヲカシクシ "MANUAL" オ サカシヨウ シルタイ。  
P: VOLUME カ ヒツヨウ ト スル タク ノ ソウク オ ALLOCATE スル。

HC#900I WHAT ENDED RETURN CODE IS 0

READY  
HWHY R37-04

SB37-04;B37-04;

ツキ ノ ケンクイン ト タイサク カ カンカニエラシル。

-----  
ケンクイン 1: アタ カ シヨウシタ SPACE ワリアリヨウ テンハ クリナツタ。

タイサク 1: シヨリ ニ シヨウクワシクワリタ SPACE リヨウ オ ワリアレ。

H8595 NATIVE MODE DISK ノ 1 TRK アタリ ノ シヨウリヨウ  
= (19254 / (185 + BLKSIZE)) \* BLKSIZE

EX) BLKSIZE=6160 ト スルハ、1 TRK アタリ ノ シヨウリヨウ ハ、  
= (19254 / (185 + 6160)) \* 6160  
= 18480 BYTE  
ト ナリ、CARD IMAGE DATA-SET テンハ、18480 / 80 = 231  
ニ シヨリ、231 ナリ / TRK ト ナル。

-----  
ケンクイン 2: アタ カ シヨウシタ SPACE リヨウ オ DISK シヨウ ニ カクホ テンキナイ。

タイサク 2: ソウクワシクワリタ (TEL 2952) ニ シヨウクワシクワリテ シヨウシタ。

-----  
ケンクイン 3: USER PROGRAM ノ シヨウリヨウ ナリ ノ ケンクイン テン、DATA-SET ノ カンクイン カ

キヨクシタ ニ オオク オコトナヒタ タメ、ワリアラレタ SPACE カ クリナツタ。

タイサク 3: PROGRAM, DATA ナリ ノ ミナシ オ オコトナヒ。トクニ ヒキスル ノ TYPE, DO ノ  
CONTROL VARIABLE ノ アタイ ノ CHECK オ シヨウクワシクワリテ ニ オコトナヒ。

-----  
LOOK AT HOW SPACE  
HC#900I WHY ENDED RETURN CODE IS 0

READY  
HHOW FORT7C

FORT7C;

=====  
= ONLY COMPILE :INPUT ----- CARD =  
=====

//USERID\* JOB PASSWORD  
//STEP EXEC FORT7C  
//FORT.SYSIN DD \*

+-----+  
^ SOURCE PROGRAM ^  
+-----+

/\*  
//

## 7.1.5 FORTRAN77と汎用図形出力パッケージGPSLに一部機能拡張がなされました。(No.19)

### (1) FORTRAN77 関係

区分データセットの原始(ソース)プログラム入力に対して

\*STARTCパラメータ1枚で全メンバーコンパイルが可能になりました。

\*STARTC \* 全メンバーをコンパイルする。

\*STARTC C<sub>1</sub>...C<sub>n</sub>\*. 文字列C<sub>1</sub>...C<sub>n</sub>で始まるメンバー全てをコンパイルする。

(X\*とすると、X1、X2やXA、XB  
などがコンパイルできる)

### (2) GPSL(汎用図形出力パッケージ)関係

従来の作画ルーチンに加えて、製図ルーチン、3次元ビジネスルーチン、等高線ルーチン、  
2次元トリミングルーチンが使用でき、より豊富な表現ができる様になりました。

製 図 ル ー チ ン : 製図用の寸法線、寸法、引出線を作成する。

3次元ビジネスルーチン : 各種凸多面体の透視図を作成する。

等 高 線 ル ー チ ン : 与えられたデータにより、地図、天気図、海図、温度分布図などを  
等高線として作図する。

2次元トリミングルーチン : 2次元図形に対してマスクにより、トリミングする。

マニュアル

汎用図形出力ルーチン集 GPSL 機能編 第2分冊

幾何形状、製図ルーチン(8080-7-097-30)

## 7.2 コマンド紹介

### 7.2.1. センター開発のコマンドについて (No.14)

センター開発コマンドについては、コマンドCHHELPによって解説を得ることができ、またそ  
の一覧表はコマンドCOMNDLPによってLP出力することもできます。

```
*****  
LIST OF COMMANDS DEVELOPED AT IMS COMPUTER CENTER  
*****
```

--DATA SET MANAGEMENT--

```
CONDENSE CONDENSE PARTITIONED DATA SET  
LISTC1 LIST UP ONE'S ALL CATALOGED DATASET NAMES ON FULL SCREEN  
LISTC2 LIST INFORMATIONS ON ONE'S ALL CATALOGED DATASETS  
LISTDI LIST INFORMATIONS ON A DATA SET  
LISTDM LIST INFORMATIONS ON A PARTITIONED DATA SET  
RLSE RELEASE DATA SET (OTHER THAN SPANNED RECORD)  
SYSFREE FREE ALL  
XCNDENS CONDENSE PARTITIONED DATA SET
```

```

--DATA SET UTILITY--
DSCOPY    COPY DATA SET
MCCOPY    COPY SPECIFIED MEMBERS OR GROUP OF PARTITIONED DATA SET
POTCLP    PRINT PARTITIONED DATA SET
PSTCLP    PRINT SEQUENTIAL DATA SET
POTOPS    MERGE PARTITIONED DATA SET TO SEQUENTIAL DATA SET
PSTOPO    PARTITION SEQUENTIAL DATA SET INTO PARTITIONED DATA SET
XPOTCLP   PRINT PARTITIONED DATA SET
XPSTCLP   PRINT SEQUENTIAL DATA SET
XPOTOPS   MERGE PARTITIONED DATA SET TO SEQUENTIAL DATA SET
XPSTOPO   PARTITION SEQUENTIAL DATA SET INTO PARTITIONED DATA SET

--SYSOUT EDITION--
SOPRINT   PRINT OUTLIST DATA SET

--SUBCOMMANDS IN EDIT MODE--
FA        LIST ALL LINES INCLUDING SPECIFIED TEXT
SFA       LIST ALL LINES INCLUDING SPECIFIED WORD

--LIBRARY--
FLIB      SEARCH FOR IMS PROGRAM LIBRARY
ULIB      LIST USERS OF IMS LIBRARY PROGRAMS (COMPLETE PROGRAM)
LIBLP     PRINT THE TABLE OF IMS PROGRAM LIBRARY
QCPELP    PRINT THE TABLE OF QCPE PROGRAMS

--DATA BASE--
QCLDB     START TO SEARCH QCLDB DATA BASE USING ORION
WHAT      EXPLAIN FUNCTIONS AND SYNTAX OF SUBCOMMANDS OF ORION
HOW       EXPLAIN HOW TO USE SUBCOMMANDS OF ORION WITH EXAMPLES

--GENERAL UTILITIES--
CHELP     LIST INFORMATIONS ON COMMANDS DEVELOPED AT IMS
COMNDLP   PRINT INFORMATIONS ON COMMANDS DEVELOPED AT IMS
FCMP      COMPARE TWO SIMILAR SOURCE TEXT FILES
FLOW      AUTO FLOW CHARACTER OF FORTRAN PROGRAM
FORDAP    FORTRAN PROGRAM DYNAMIC ANALYSIS SYSTEM
STINGY    PRINT OUT TEXT FILE IN A DOUBLE COLUMN FORMAT
PSPART    SELECT AND COPY SPECIFIED ROUTINES FROM A FORTRAN PROGRAM

```

## 7.2.2 CONVDCB

このコマンドについてはCHELPコマンドによって、その解説を得ることができます。

### ① 機能

異なるDCB属性をもつ順編成データセット間のコピーを行う。ただし、レコード形式S、Uに対しては適用できない。入力データセットのコピー開始カラムを指定することができる。出力データセットのレコード長が入力レコード長より長い場合は切り落される。また、ブロック化レコードの場合、ブロックサイズはFBの場合、レコード長の整数倍、VBの場合は、レコード長の整数倍+4(バイト)を指定してください。

新規作成の出力ファイルについては、スペースをシステムが自動的に確保する。また、既存ファイルに対してはDISPを指定することができる。(標準はRENEW)

### ② 書き方

CONVDCB	(入力データセット名)	(出力データセット名)
---------	-------------	-------------

DCB, DISP については、サブコマンドで指示してください。サブコマンドの入力方法の解説は“?”の入力で行うことができます。

(i) 新規作成ファイルの場合

```
READY
convdcb a.data b.data
COLUMN=1 LRECL=80 BLKSIZE=3120 RECFM=F,B,
ENTER NULL(OK) OR DCB-SUBCOMMAND OR "?" OR "END"

CONVDCB STARTED
CONVDCB ENDED : RTN-CODE=0
READY
```

(ii) 出力ファイルが既存の場合

```
READY
convdcb a.data b.data
ENTER NULL(OK : DISP=RENEW) OR DISP-SUBCOMMAND OR "?" OR "END"
?
DISP-SUBCOMMAND
. RENEW
. SHR
. OLD
. MOD
ENTER NULL(OK : DISP=RENEW) OR DISP-SUBCOMMAND OR "?" OR "END"

COLUMN=1 LRECL=80 BLKSIZE=3120 RECFM=F,B,
ENTER NULL(OK) OR DCB-SUBCOMMAND OR "?" OR "END"
?
DCB-SUBCOMMAND
. COLUMN/COL/CO : STARTING COLUMN IN INPUT RECORD
. LRECL/LR : RECORD LENGTH OF OUTPUT FILE (BYTE)
. BLKSIZE/BLK/BL : BLOCK SIZE OF OUTPUT FILE (BYTE)
. RECFM/REC : RECORD FORMAT OF OUTPUT FILE
INPUT AS "RECFM,V,B" OR "LRECL 80"

COLUMN=1 LRECL=80 BLKSIZE=3120 RECFM=F,B,
ENTER NULL(OK) OR DCB-SUBCOMMAND OR "?" OR "END"
lr 133
COLUMN=1 LRECL=133 BLKSIZE=3120 RECFM=F,B,
ENTER NULL(OK) OR DCB-SUBCOMMAND OR "?" OR "END"
b1 3990
COLUMN=1 LRECL=133 BLKSIZE=3990 RECFM=F,B,
ENTER NULL(OK) OR DCB-SUBCOMMAND OR "?" OR "END"
col 2
COLUMN=2 LRECL=133 BLKSIZE=3990 RECFM=F,B,
ENTER NULL(OK) OR DCB-SUBCOMMAND OR "?" OR "END"

CONVDCB STARTED
CONVDCB ENDED : RTN-CODE=0
READY
```

### 7.2.3 ORION - QCLDB (No.18)

(i) NOW, WHAT を入力した際出力されるメッセージが英小文字となりました。英小文字の利用できない端末の場合は、ORIONセッション開始時に

QCLDB □ CASE (U)

と入力してください。

(ii) PRINT の出力先は省略値はD (デマンド, センター1階ラインプリンター)です。D以外を指定したい場合はORIONセッション開始時に、

QCLDB □ MSGCLASS (出力先識別名)

とし入力してください。

### 7.2.4 MTM (MT Manager) のすすめ (No.15)

MTMは特定のデータセット/特定のデータセットグループ/全てのデータセットを選択して、磁気テープに保存すると同時に、ディスク上及び磁気テープ上のデータセット情報をボリューム情報と共に指定されたデータセットに記録蓄積することができるMT管理システムです。

MTMでは次の機能追加により、操作性を高めています。

MTMDSN △ MTM情報を記録蓄積するデータセット名 [ , SAVE ]

PARM △ データセット選択パラメータ [ , SAVE ]

OS △ ボリュームコメント    データセットコメント    メンバーコメント  
    問い合わせ回数    ,    問い合わせ回数    ,    問い合わせ回数    ,  
          n<sub>1</sub>    1                    n<sub>2</sub>    1                    n<sub>3</sub>    1

ユーティリティの選択(SCPY/DCDP)    ユーティリティの標準値  
の問い合わせをするか否か            ,    SCPY 又は DCDP  
          Y 又は N

なお、セッション内のみ有効なオプション値の設定はOコマンドで行うことができる。

ディスク to 磁気テープに関してメニュー方式のOPEN - MT に比べてはるかに能率が上がり、かつデータセットの管理情報も保存でき、データセットのBackupも気軽にできます。ぜひご利用ください。

## 8. 資 料

### 8.1 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規則

分子研規則第4号

昭和56年4月14日制定

(目的)

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

(職員)

第2条 センターに、次の職員を置く。

- 一 センター長
- 二 助教授
- 三 助手
- 四 その他必要な職員

(センター長)

第3条 センター長は、分子科学研究所の教授又は助教授をもって充てる。

2 センター長は、センターの業務を掌理する。

(運営委員会)

第4条 センターに、センターの管理運営に関する重要事項を審議し、センター長に助言するため、分子科学研究所電子計算機センター運営委員会(以下「運営委員会」という。)を置く。

2 運営委員会の組織及び運営に関し必要な事項は、分子科学研究所長が定める。

附 則

この規則は、昭和56年4月14日から施行する。

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

分子研規則第9号

昭和56年4月14日制定

### (目的)

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

### (委員長)

第4条 運営委員会に委員長を置き、委員の互選による。

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

### (議事)

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

### (委員以外の者の出席)

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

### (庶務)

第7条 運営委員会の庶務は、総務部国際研究協力課において処理する。

### 附則

この規則は、昭和56年4月14日から施行する。

### 8.3 電子計算機センター運営委員会委員

(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	〃
伊藤翼	分子研助教授	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
中研一	基生研教授	基生研委員

藤山常毅教授が亡くなられたためその後任として伊藤翼助教授が就任された。開催日は，昭和56年9月11日と昭和57年2月16日の2回でセンター運営方針，次期システムの計画の討議及び利用申請の審査が行われた。

### 8.4 電子計算機センター職員（昭和57年6月現在）

諸熊奎治	センター長（併任）
柏木浩	助教授
伊奈諭	技官（係長）
西本史雄	技官
山本茂義	技官
中根三恵	事務補佐員
中島裕紀	事務補佐員

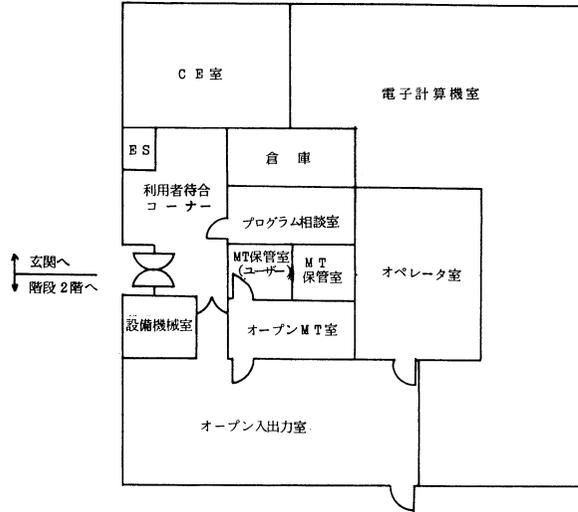
### 8.5 建 物 図

◀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。

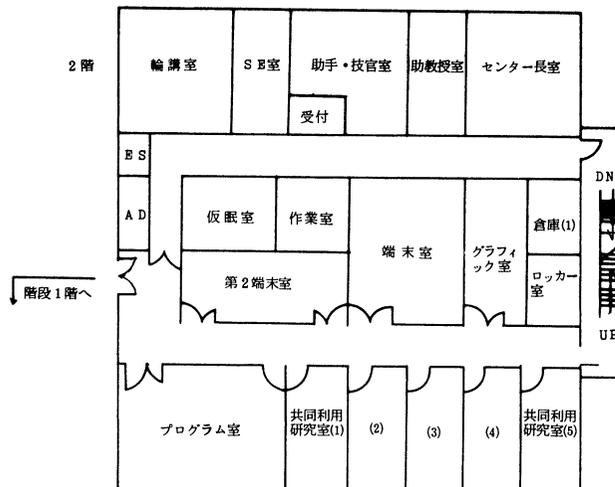
ユーザーが利用できる室は以下のとおり。

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  
プログラムとシステムに関する相談指導を行う。
- 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, X Y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。

2 階



- 1) プログラム室  
ユーザの卓上作業のための室，ジョブ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) 端末室，第2端末室  
ディスプレイ型の各種TSS端末が置かれ，自由に利用できる。

## 8.6 応用プログラム相談員一覧

花村光泰	東北大理，分子研受託大学院生	昭和55年8月～昭和56年9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56年10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
吉岡泰規	大阪大基礎工，研究生	昭和56年10月～昭和57年3月

## 8.7 端末設置状況（昭和57年5月現在）

### (1) RJEステーション

（分子研）所内	実験棟	HT 540 / 30
	研究棟	〃
生理学研究所		HITAC M-150
		HITAC 20
機構総合図書館		HITAC L-330

### (2) 電話回線

300ボー	3回線	設置端末数	45回線
1200ボー	4回線	〃	15回線

### (3) 構内回線（専用線）

1200ボー	8回線
--------	-----

## 8.8 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 FORTRAN 77 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
データベース	ORION 利用の手引 .....	8090-6-502
メッセージ	システムメッセージコード .....	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
	TSS 入門 (DESP 編) .....	8090-3-012
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
	第 3 分冊 ビジネスルーチン .....	8080-7-098
FORTRAN 関係	FORTRAN 言語 .....	8080-3-205
	最適化 FORTRAN 使用の手引 .....	8080-3-208

	最適化 FORTRAN 端末使用の手引 .....	8 090 - 3 - 215
数学関数	数学関数 .....	8 080 - 3 - 218
SAFE	SAFE 使用の手引 .....	8 090 - 3 - 127
RUNOFF	RUNOFF .....	8 090 - 3 - 312
PREVIEW	PREVIEW .....	8 080 - 7 - 130

## 8.9 ユーザ論文一覧

当センターの利用に基いて発表された論文のうち当センターに提出されたものを以下に掲載する。論文の掲載順序はセンターの整理の都合上題名のアルファベット順になっている。論文に関与したプロジェクト名(コード)は原則として代表利用者の後に( )付で明記した。また二つ以上のプロジェクトにまたがる論文の場合には、それぞれの代表利用者にそれぞれのプロジェクトコードを付加した。なお提出論文の管理はプロジェクト単位で行っているため、複数プロジェクトにまたがる論文の場合でも、実際に提出のあったプロジェクトのプロジェクトコードしか明記されない。複数プロジェクトから同一の論文の提出があった場合はこの限りではない。

### A Comparative Study of Ab-Initio Effective Core Potential and All-Electron Calculations for Molecular Structures and Transition States

Shigeru OBARA, Kazuo KITAURA and Keiji MOROKUMA (AA0)  
/ Theoret.Chim.Acta, 60(1981)227

### A Generalization of the Davidson's Method to Large Nonsymmetric Eigenvalue Problems

Kimihiko HIRAO and Hiroshi NAKATSUJI (CC2) /  
J.Comput.Phys., 45(1982)246

### A Monte Carlo Study of Phase Transitions in a FCC Octopolar Array

Shuichi NOSE, Yosuke KATAOKA, Kenkichi OKADA and  
Tsunenobu YAMAMOTO (CA8) / J.Chem.Phys., 75(1981)985

### A Monte Carlo Study on the Size Dependence in Hydrophobic Hydration

Susumu OKAZAKI, Koichiro NAKANISHI (CD0), Hidekazu  
TOUHARA and Nobuatsu WATANABE / J.Chem.Phys.,  
74(1981)5863

A Structure Analysis of Ag-Adsorbed Si(III) Surface by  
LEED/CMTA

Yasushi TERADA, Tohru YOSHIZUKA, Kenjiro OURA and  
Teruo HANAWA (BH5) / Surf.Sci., 114(1982)65

A Theoretical Study of the Structure and Stability of  
 $H^+(CO)_n$ ,  $H^+(N_2)_n$ , and  $H^+(O_2)_n$  Clusters (n=1-6)

Shinichi YAMABE (BC6) and Kimihiko HIRAO /  
J.Am.Chem.Soc., 103(1981)2176

A Theoretical Study of Unimolecular Reactions of Vinyl  
Fluoride. Potential Surface Characteristics and their  
Mechanistic Implications

Shigeki KATO and Keiji MOROKUMA (AA0) / J.Chem.Phys.,  
74(1981)6285

Ab Initio Calculation of Geometries and HFS Constants of  
 $CH_3$ ,  $SiH_3$ , and  $GeH_3$  Radicals

K.OHTA, H.NAKATSUJI (CC2), I.MAEDA and T.YONEZAWA /  
Chem.Phys., 67(1982)49

Ab Initio Calculation of the Potential Curves for the  
Reaction  $O^{3+} + H+O^{2+} + H^+$  and the Related Diabatic Coupling  
Matrix Elements

Junichi YOSHIDA and Kiyoshi OHATA (CA0) /  
J.Phys.Soc., 51(1982)1274

Ab Initio MO Study on Base Stacking: Adenine-Adenine  
Interaction in Single-Stranded Polyadenylic Acid (POLY A)

Misako AIDA and Chikayoshi NAGATA (CG9) /  
Chem.Phys.Lett., 86(1981)44

Ab Initio Molecular Orbital Calculation of Fe-Porphine with  
a Double Zeta Basis Set

Hiroshi KASHIWAGI (AA6) and Shigeru OBARA /  
Int.J.Quant.Chem., XX(1981)843

An Ab Initio Calculation of the Electronic Structure of the  
[Co(CN)<sub>6</sub>]<sup>3-</sup> Ion

Mitsuru SANŌ, Yasuyo HATANŌ, Hiroshi KASHIWAGI (AA6)  
and Hideo YAMATERA (CD3) / Bull.Chem.Soc.Jpn.,  
54(1981)1523

An Ab Initio MO Calculation for the Bonding Structure of  
[Ni(CN)<sub>4</sub>]<sup>2-</sup>

Mitsuru SANŌ, Hiroshi KASHIWAGI (AA6) and Hideo  
YAMATERA (CD3) / Bull.Chem.Soc.Jpn., 55(1982)750

An Analysis of the Through-Bond Interaction Using the  
Localized Molecular Orbitals with Ab Initio Calculations-II

Akira IMAMURA, Akitomo TACHIBANA and Masaru OHSAKU  
(CK1) / Tetrahedron, 37(1981)2793

An MO Study of the Reaction Mechanism of Photoisomerization  
from Isoxazole via Azirine Intermediate to Oxazole

Hidetsugu TANAKA, Yoshihiro OSAMURA, Toshio  
MATSUSHITA and Kichisuke NISHIMOTO (CD5) /  
Bull.Chem.Soc.Jpn., 54(1981)1293

Acid Cleavage of Humulene 9,10-Epoxyde. Anomalous Products  
and Effects of Strain on the Reaction Course

Haruhisa SHIRAHAMA, Kiyoharu HAYANO, Toshikazu  
OHTSUKA, Eiji OSAWA (CJ6) and Takeshi MATSUMOTO /  
Chem.Lett., (1981)351

Autoionization of Highly Excited Rydberg States of Diatomic  
Molecules

Hidekazu TAKAGI and Hiroki NAKAMURA (CA9) /  
J.Chem.Phys., 74(1981)5808

Bonding in Ni(PH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>) and Ni(PH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>). An Ab Initio  
SCF-MO Study

Kazuo KITaura, Shigeyoshi SAKAKI (CD2) and Keiji  
MOROKUMA (AA0) / Inorg.Chem., 20(1981)2292

Cluster Expansion of the Wave Function. Electron Correlations in Singlet and Triplet Excited States, Ionized States, and Electron Attached States by SAC and SAC-CI Theories

Hiroshi NAKATSUJI (CC2) and Kimihiko HIRAO / Int.J.Quant.Chem., XX(1981)1301

Cluster Expansion of the Wave Function. Electron Correlations in the Ground State, Valence and Rydberg Excited States, Ionized States, and Electron Attached States of Formaldehyde by SAC and SAC-CI Theories

H.NAKATSUJI (CC2), K.OHTA and K.HIRAO / J.Chem.Phys., 75(1981)2952

Cluster Expansion of the Wavefunction. Symmetry-Adapted-Cluster (SAC) Theory for Excited States

K.HIRAO and H.NAKATSUJI (CC2) / Chem.Phys.Lett., 79(1981)292

CNDO/2 Calculation of the Relative Stability of Poly( $\gamma$ -hydroxy-L-proline)

Masaru OHSAKU (CK1), Tetsuo KAWAMURA, Hiromu MURATA, and Akira IMAMURA / Int.J.Biol.Macromol., 4(1982)37

CNDO/2 Calculations of the Relative Stability of the Gonionomers in Poly(DL-alanine)

Masaru OHSAKU (CK1), Hiromu MURATA and Akira IMAMURA / Int.J.Biol.Macromol., 4(1982)103

Computer-Aided Structure Elucidation of Organic Compounds with the Chemics System

I.FUJIWARA, T.OKUYAMA, T.YAMASAKI, H.ABE and S.SASAKI (CF8) / Anal.Chim.Acta, 133(1981)527

Conformational Aspects of Caryophyllene. Population of Stable Conformers and Ring Inversion Barrier of Trans Cyclononene Ring Portion

H.SHIRAHAMA, E.OSAWA (CJ6), B.R.CHHABRA, T.YOKONO, T.KANAIWA, T.AMIYA and T.MATSUMOTO / Tetrahedron Lett., 22(1981)1527

Conformational Stability of Poly(trimethylene oxide) by the  
CNDO/2 Calculations

Masaru OHSAKU (CK1), Takeshi IZUOKA, Hiromu MURATA  
and Akira IMAMURA / Polymer, 22(1981)624

Design of UVISOR Light Source at IMS

M.WATANABE (AC1), A.UCHIDA, O.MATSUDO, K.SAKAI,  
K.TAKAMI, K.YOSHIDA and M.KIHARA / IEEE  
Trans.Nucl.Sci., 28(1981)3175

Diode Laser Spectroscopy of the  $\text{BO}_2$  Radical Vibronic  
Interaction between the  $\tilde{X}^2\Pi_u$  and  $\tilde{X}^2\Pi_g$  States

Kentarou KAWAGUCHI, Eizi HIROTA (AA2) and Chikashi  
YAMADA / Mol.Phys., 44(1981)509

Diode Laser Spectroscopy of the CCI Radical

Chikashi YAMADA, Keiichi NAGAI and Eizi HIROTA (AA2)  
/ J.Mol.Spectrosc., 85(1981)416

Diode Laser Spectroscopy of the  $\text{HO}_2$   $\nu_2$  Band

Keiichi NAGAI, Yasuki ENDO and Eizi HIROTA (AA2) /  
J.Mol.Spectrosc., 89(1981)520

Diode Laser Spectroscopy of the  $\nu_{11}$  Band of Ethylene- $\text{d}_4$

Nobukimi OHASHI, Kentarou KAWAGUCHI and Eizi HIROTA  
(AA2) / J.Mol.Spectrosc., 85(1981)427

Diode Laser Study of the  $\nu_2$  Band of the Methyl Radical

Chikashi YAMADA, Eizi HIROTA (AA2) and Kentarou  
KAWAGUCHI / J.Chem.Phys., 75(1981)5256

Doppler-Limited Dye Laser Excitation Spectroscopy of DCF

Tetsuo SUZUKI, Shuji SAITO and Eizi HIROTA (AA2) /  
J.Mol.Spectrosc., 90(1981)447

Doppler-Limited Dye Laser Excitation Spectroscopy of HCF

Masao KAKIMOTO, Shuji SAITO and Eizi HIROTA (AA2) /  
J.Mol.Spectrosc., 88(1981)300

Double Breakdown of Koopmans' Theorem and Strong Correlation  
Satellites in the He II Photoelectron Spectrum of O<sub>3</sub>  
Nobuhiro KOSUGI, Haruo KURODA and Suehiro IWATA (AB4)  
/ Chem.Phys., 58(1981)267

Dynamics of Folding and Unfolding Transition in a Globular  
Protein Studied by Time Correlation Functions from Computer  
Simulation  
Fumiaki KANO and Nobuhiro GO (CA4) / Biopolymers,  
21(1982)565

Effect of Dielectric Constants of Solvents on the  
Bathochromic Shifts in Retinal Isomers Studied through  
Carbon-13 NMR and CNDO/2 Methods  
Minoru SAKURAI, Isao ANDO (CK0), Yoshio INOUE and  
Riichiro CHUJO / Photochem.&Photobio., 34(1981)367

Electronic and Molecular Structures of  $\{-\text{HCN}-\}_n$  Polymers:  
 $\{-(\text{HCN})_3-\}_n$   
M.OHSAKU (CK1), T.SASAKI, H.MURATA and A.IMAMURA /  
Eur.Polym.J., 17(1981)913

Electronic and Molecular Structures of  
Poly(hydroxymethylene) and Poly(vinyl alcohol)  
Masaru OHSAKU (CK1), Toshie HATAMOTO, Akira IMAMURA  
and Hiromu MURATA / Polym.J., 13(1981)733

Electronic Structure and Photoelectron Spectroscopy of  
Phenyl Azide  
Yoshiya HARADA, Kiyoshi MUTAI, Toshiaki MUNAKATA,  
Kozo KUCHITSU, Kazuhiko SEKI (AB1), Naoki SATO and  
Hiroo INOKUCHI / Scientific Papers of the College of  
General Education, Univ.of Tokyo, 31(1981)101

Electronic Structure and Spin Polarisation of the Transition  
Metal Thin Film V(100)  
G.YOKOYAMA, N.HIRASHITA, T.OGUCHI, T.KAMBARA and  
K.GONDAIRA (CH1) / J.Phys.F: Metal Phys., 11(1981)1643

Electronic Structure of Antiferromagnetic Chromium (100)  
Thin Film

N.HIRASHITA, G.YOKOYAMA, T.KAMBARA and K.GONDAIRA  
(CH1) / J.Phys.F: Metal Phys., 11(1981)2371

Electronic Structure of Dirhodium Tetracarboxylate Complexes  
by the Ab Initio SCF MO Method

H.NAKATSUJI (CC2), J.USHIO, K.KANDA, Y.ONISHI,  
T.KAWAMURA and T.Yonezawa / Chem.Phys.Lett.,  
79(1981)299

Electronic Structure of Porphyrins. II. Mutual Influence  
between Ligands of Co(III)-Porphyrins

K.NISHIMOTO (CD5) and E.KAI / Inorg.Chim.Acta,  
58(1981)107

Electronic Structure of the Si (111) Reconstructed Surface  
in the Vacancy Model

H.NAGAYOSHI (BB7) and M.TSUKADA (AA1) / Surf.Sci.,  
116(1982)163

Electronic Structure of Transition Metal Complexes. III. A  
Comparative Study of Bondings in Metal Porphyrins

Eiko KAI and Kichisuke NISHIMOTO (CD5) /  
Bull.Chem.Soc.Jpn., 55(1982)1242

Electronic Structure of Vacancy and Chemisorptive Bond on  
Si(111) Surface by the DV-X<sub>α</sub> Cluster Calculation

Masaru TSUKADA (AA1) and Toshiharu HOSHINO /  
Int.J.Quant.Chem.Symp., 15(1981)445

Electronic Structures and Conformational Stabilities of Some  
Organo-Sulfur Compounds

Masaru OHSAKU (CK1) and Hiromu MURATA /  
J.Mol.Struct., 85(1981)125

Fluorescence of the  $C^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  Transition of NaK and the  
Dissociated Atoms

Chifuru NODA and Hajime KATO (AD0) / Chem.Phys.Lett.,  
86(1982)415

Formation of the Crossed Product 1,4-Disubstituted  
2,3,5,6,11-Pentaoxabicyclo[5.3.1.]undecane from a Mixture of  
Two Kinds of Ozonides in the Presence of an Acid Catalyst.  
Elucidation of the Intermediates in the Acidolysis of an  
Ozonide

Masahiro MIURA, Masatomo NOJIMA (CJ3), Shigekazu  
KUSABAYASHI and Shigeru NAGASE / J.Am.Chem.Soc.,  
103(1981)1789

Four-M Calculations on Methanol-Water Solutions

Susumu OKAZAKI, Koichiro NAKANISHI (CD0) and Hidekazu  
TOUHARA / Anal.Chim.Acta, 133(1981)753

HQR11: A Fast Diagonalization Subroutine

Yoshitaka BEPPU (CQ3) and Ichizo NINOMIYA /  
Comput.Chem., 6(1982)87

Hydration Structure around a Non-Electrolyte Molecule as  
Revealed by Monte Carlo Calculation: Have You Seen the  
"Iceberg"?

Koichiro NAKANISHI (CD0), Susumu OKAZAKI, Kenji IKARI  
and Hidekazu TOUHARA / Chem.Phys.Lett., 84(1981)428

Hydrogen Atoms and Hydrogen Bonding in Rhombohedral 2Zn  
Insulin Crystals by X-Ray Analysis at 1.2Å Resolution

Noriyoshi SAKABE (CB0), Kiwako SAKABE and Kyoyu  
SASAKI / Structural Studies on Molecules of  
Biological Interest, G.Dodson etc.ed., Clarendon  
Press, (1981)509

Infrared Diode Laser Spectroscopy of FCO: The  $\nu_1$  and  $\nu_2$   
Bands

Keiichi NAGAI, Chikashi YAMADA, Yasuki ENDO and Eizi  
HIROTA (AA2) / J.Mol.Spectrosc., 90(1981)249

Infrared Diode Laser Spectroscopy of the CF Radical

Kentarou KAWAGUCHI, Chikashi YAMADA, Yoshiaki HAMADA  
and Eizi HIROTA (AA2) / J.Mol.Spectrosc., 86(1981)136

Internal Lithium Coordination by a  $\pi$ -Bond in  
7-Lithionorbornadiene

Shigeru NAGASE (CO7) and K.N.HOUK / Tetrahedron  
Lett., 23(1982)19

Intramolecular Hydrogen Bonding and Conformations of  
 $\alpha,\alpha$ -Dialkyl- and  $\alpha$ -Alkyl-*o*-methoxybenzyl Alcohols.

II. Enthalpies of Hydrogen Bond Formation and Molecular  
Force Field Calculations on  $\alpha$ -Alkyl-substituted Benzyl  
Alcohols

Masayuki ITO and Minoru HIROTA (CO6) /  
Bull.Chem.Soc.Jpn., 54(1981)2093

Local Structures in the Process of Protein Folding

Nobuhiro GO (CA4), Haruo ABE, Hiroshige MIZUNO and  
Hiroshi TAKETOMI / Protein Folding, Elsevier,  
(1980)167

Long-Range Resonance and Electrostatic Interactions in  
Poly(L-proline) by the CNDO/2 Procedure

Masaru OHSAKU (CK1), Hiromu MURATA and Akira IMAMURA  
/ Int.J.Biol.Macromol., 2(1980)381

Magnetic Circular Dichroism Spectra and Electronic Spectra  
of Polyquinocycloalkanes

Hiroyuki YAMAGUCHI (BA7), Kunihiro NINOMIYA and  
Robert WEST / J.Chem.Soc.Faraday Trans., 2(1981)481

Magnetic Circular Dichroism Spectrum of  
1,3-Diquinocyclobutanedione

Hiroyuki YAMAGUCHI (BA7), Kunihiro NINOMIYA and  
Robert WEST / J.Chem.Soc.Faraday Trans., 2(1981)2141

Metastable States in Some Transient Molecules by  
High-resolution Laser Spectroscopy

Eizi HIROTA (AA2) / Faraday Discussions of the Royal  
Soc.Chem., 71(1981)88

Microwave Spectra of cis- and  
trans-1-Chloro-1,2-difluoroethylene

Teruhiko OGATA (CJ1) / Bull.Chem.Soc.Jpn., 55(1982)9

Microwave Spectra of Deuterated Ethanes: Internal Rotation Potential Function and  $\gamma_z$  Structure

Eizi HIROTA (AA2), Yasuki ENDO, Shuji SAITO and J.L.DUNCAN / J.Mol.Spectrosc., 89(1981)285

Microwave Spectra of Deuterated Ethylenes: Dipole Moment and  $\gamma_z$  Structure

Eizi HIROTA (AA2), Yasuki ENDO, Shuji SAITO, Kazuhiko YOSHIDA, Ichiro YAMAGUCHI and Katsunosuke MACHIDA / J.Mol.Spectrosc., 89(1981)223

Microwave Spectra of the HSO and DSO Radicals

Yasuki ENDO, Shuji SAITO and Eizi HIROTA (AA2) / J.Chem.Phys., 75(1981)4379

Microwave Spectrum, Spin-Rotation, and Hyperfine Interaction Constants, Dipole Moment, Molecular Structure, and Harmonic Force Constants of the FSO Radical

Yasuki ENDO, Shuji SAITO and Eizi HIROTA (AA2) / J.Chem.Phys., 74(1981)1568

Molecular and Electronic Structures of Polythiomethylene (PTM)

Masaru OHSAKU (CK1), Hiromu MURATA, Akira IMAMURA and Akitomo TACHIBANA / Polymer, 22(1981)1345

Molecular Orbital Study of the Effects of Ionic Amino Acid Residues on Proton Transfer Energetics in the Active Site of Carboxypeptidase A

Setsuko NAKAGAWA and Hideaki UMEYAMA (CB2) / Chem.Phys.Lett., 81(1981)503

Molecular Parametrized CNDO Method for Hydrogen Adsorption on LiF Surfaces Compared with Ab Initio Approach

Keiko MATSUMURA, Shinichi YAMABE (CO5), Yasunori YANAGISAWA and Ryoitiro HUZIMURA / Jpn.J.Appl.Phys., 20(1981)720

Molecules in an Electric Field. Model for Molecular  
Geometry

Hiroshi NAKATSUJI (CC2), Toshiaki HAYAKAWA and  
Teijiro YONEZAWA / J.Am.Chem.Soc., 103(1981)7426

Monte Carlo Simulation Study of Thermal Fluctuations and  
Conformational Energy Surface of a Small Protein, Basic  
Pancreatic Trypsin Inhibitor

Toshiyuki NOGUCHI, Nobuhiro GO (CA4), Tatsuo OOI and  
Ken NISHIKAWA / Biochim.Biophys.Acta, 671(1981)93

NICER-Fast Eigenvalue Routines

Yoshitaka BEPPU (CO3) and Ichizo NINOMIYA /  
Comput.Phys.Comm., 23(1981)123

On the Lower Excited States of the Formyl Radical HCO

Kiyoshi TANAKA and Kouichi TAKESHITA (CE0) /  
Chem.Phys.Lett., 87(1982)373

On the Mechanism of Photooxygenation Reactions.

Computational Evidence against the Diradical Mechanism of  
Singlet Oxygen Ene Reactions

K.YAMAGUCHI (CB7), S.YABUSHITA, T.FUENO and K.N.HOUK  
/ J.Am.Chem.Soc., 103(1981)5043

Photochemical Ring Opening Paths of Azirine -An Ab Initio  
GVB Energy Gradient Approach

Shigeki KATO and Keiji MOROKUMA (AA0) / Chem.Lett.,  
(1981)1021

Photoelectron Spectrum of the Water Dimer

Shinji TOMODA, Yohji ACHIBA and Katsumi KIMURA (AB7)  
/ Chem.Phys.Lett., 87(1982)197

Photoionisation Mass Spectrometric Study of Acetylene in the  
VUV Region

T.HAYAISHI (CN9), S.IWATA (AB4), M.SASANUMA,  
E.ISHIGURO, Y.MORIOKA, Y.IIDA and M.NAKAMURA /  
J.Phys.B:At.Mol.Phys., 15(1982)79

Potential-Energy Surfaces in the Lower Excited States of  
Benzen  $\rightleftharpoons$  Dewar-Benzene Isomerization Process

Minoru TSUDA (CC1), Setsuko OIKAWA and Katsuhiko  
KIMURA / Int.J.Quant.Chem., XVIII(1980)157

Potential Energy Surfaces of the Reaction  $C^+ + H_2 \rightarrow CH^+ + H$   
Shogo SAKAI, Shigeki KATO, Keiji MOROKUMA (AA0) and  
Isao KUSUNOKI / J.Chem.Phys., 75(1981)5398

Quantum Chemistry Literature Data Base

Y.OSAMURA, S.YAMABE, F.HIROTA, H.HOSOYA, S.IWATA,  
H.KASHIWAGI (AA6), K.MOROKUMA, M.TOGASHI, S.OBARA,  
K.TANAKA and K.OHNO / J.Chem.Inf.Comput.Sci.,  
21(1981)86

Potential Energy Surfaces of the Reaction  $C^+ + H_2 \rightarrow CH^+ + H$   
Shogo SAKAI, Shigeki KATO, Keiji MOROKUMA (AA0) and  
Isao KUSUNOKI / J.Chem.Phys., 75(1981)5398

Quantum Chemistry Literature Data Base

Y.OSAMURA, S.YAMABE, F.HIROTA, H.HOSOYA, S.IWATA,  
H.KASHIWAGI (AA6), K.MOROKUMA, M.TOGASHI, S.OBARA,  
K.TANAKA and K.OHNO / J.Chem.Inf.Comput.Sci.,  
21(1981)86

Reagent Design and Study of p-Benzoquinone Derivatives as  
Highly Reactive Electron-Attracting Dienophiles. A

Promising Class of Reagents (Synthons) for Cycloaddition

Ken KANEMATSU, Shiro MORITA, Sunao FUKUSHIMA and Eiji  
OSAWA (CJ6) / J.Am.Chem.Soc., 103(1981)5211

Reconstruction of Sino-Atrial Node Pacemaker Potential Based  
on the Voltage Clamp Experiments

Kaoru YANAGIHARA, Akinori NOMA and Hiroshi IRISAWA  
(KA5) / J.Physiol., 30(1980)841

Restricted Hartree-Fock Calculations on  $CGeH_4$  and  $CGeH_5^+$ .  
The Properties of a Germanium-Carbon Double Bond

Takako KUDO and Shigeru NAGASE (CO7) /  
Chem.Phys.Lett., 84(1981)375

Role of Asp 102 in the Enzymatic Reaction of Bovine  
 $\beta$ -Trypsin: A Molecular Orbital Study  
Hideaki UMEYAMA (CB2), Setsuko NAKAGAWA and Takako  
KUDO / J.Mol.Biol., 150(1981)409

Role of Local Induced-Fit of Ser 195 in  $\beta$ -Trypsin: A  
Molecular Orbital Study  
Setsuko NAKAGAWA and Hideaki UMEYAMA (CB2) / FEBS  
Lett., 139(1982)181

Self-Consistent Electronic Structures of Magnetic  
Semiconductors by a Discrete Variational  $X\alpha$  Calculation.

II.  $H_gCr_2Se_4$   
Tamio OGUCHI, Takeshi KAMBARA and Kenichiro GONDAIRA  
(CH1) / Phys.Rev., 24(1981)3441

Self-Consistent Electronic Structures of Magnetic  
Semiconductors by a Discrete Variational  $X\alpha$  Calculation.

III. Chalcopyrite  $CuFeS_2$   
Toshiki HAMAJIMA, Takeshi KAMBARA, Kenichiro GONDAIRA  
(CH1) and Tamio OGUCHI / Phys.Rev., 24(1981)3349

Some Properties of Molten KCl at High Density Studied by MD  
Simulation

Ryuzo TAKAGI, Isao OKADA (CD1) and Kazutaka KAWAMURA  
/ Z.Naturforsch, 36(1981)1106

Structure and Coordinate Bonding Nature of Nickel(0) and  
Copper(I) Carbon Dioxide Complexes. An Ab Initio Molecular  
Orbital Study

Shigeyoshi SAKAKI (CD2), Kazuo KITAURA and Keiji  
MOROKUMA (AA0) / Inorg.Chem., 21(1982)760

Study of Liquid Water by Computer Simulations. I. Static  
Properties of a 2D Model

Keiji OKAZAKI, Shuichi NOSE, Yosuke KATAOKA and  
Tsunenobu YAMAMOTO (CA8) / J.Chem.Phys., 75(1981)5864

Substituent Effects in  $[2\sigma + 2\sigma + 2\sigma]$  Thermal  
Decarbonylation of Cage Ketones. Remarkably Effective  
Elongation of Strained C-C Bond by Through-Bond Coupling  
Kazunobu HARANO, Takashi BAN, Masami YASUDA, Eiji  
OSAWA (CJ6) and Ken KANEMATSU / J.Am.Chem.Soc.,  
103(1981)2310

Surface Electronic Structure of Binary Metal Oxide Catalyst  
 $ZrO_2/SiO_2$   
Maki KAWAI (BH3), Masaru TSUKADA (AAl) and Kenzi  
TAMARU / Surf.Sci., 111(1981)716

Syn and Anti Transition States in the Addition of Ammonia to  
Cyanoacetylene. Formation of a Stable Zwitterionic  
Intermediate  
K.N.HOUK, Robert W.STROZIER, Melvin D.ROZEBOOM and  
Shigeru NAGASE (CO7) / J.Am.Chem.Soc., 104(1982)323

The Central Bond Length in Hexaphenylethane and  
Hexakis(2,6-di-tert-butyl-4-biphenyl)ethane  
Eiji OSAWA (CJ6), Yoshiaki ONUKI and Kurt MISLOW /  
J.Am.Chem.Soc., 103(1981)7475

The Electronic Structure of  $ZrO_2$  by the DV X $\alpha$  Cluster  
Method  
M.MORINAGA (CH8), H.ADACHI and M.TSUKADA (AAl) /  
Sol.Stat.Ionics, 4(1981)131

The Electronic Structure of Linear Dicyano Complexes  
Mitsuru SANO, Hirohiko ADACHI and Hideo YAMATERA  
(CD3) / Bull.Chem.Soc.Jpn., 55(1982)1022

The Maximum of the Conductivity of an Ionic Melt from MD  
Simulations at Various Temperatures  
Isao OKADA (CD1) and Ryuzo TAKAGI / Z.Naturforsch.,  
36(1981)378

The Isolation and Structures of Euphoscopins A and B  
Shosuke YAMAMURA, Seiji KOSEMURA, Shigeru OHBA,  
Masatoki ITO (CQ1) and Yoshihiko SAITO / Tetrahedron  
Lett., 22(1981)5315

The Systematic Prediction of the Most Stable Neutral  
Hydrocarbon Isomer  
Stephen A.GODLESKI, Paul V.R.SCHLEYER, Eiji OSAWA  
(CJ6) and W.Todd WIPKE / Progr.Phys.Org.Chem.,  
13(1981)63

The UVISOR Facility at IMS  
I.KOYANO, Y.ACHIBA, H.INOKUCHI, E.ISHIGURO, R.KATO,  
K.KIMURA, K.SEKI, K.SHOBATAKE, K.TABAYASHI, Y.TAKAGI,  
K.TANAKA, A.UCHIDA and M.WATANABE (AC1) / Nuclear  
Instruments and Methods, 195(1982)273

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 (CO6), Kazuhisa ABE, Toshiyuki SEKIYA,  
Hiroshi TASHIRO, Motohiro NISHIO and Eiji OSAWA (CJ6)  
/ Chem.Lett., (1981)685

Theoretical Interpretation of the Standard Redox Potential  
of Benzene-1,2diol and Its Derivatives  
Shinich YAMABE (CO5), Tsutomu MINATO and Masaru  
KIMURA /J.Phys.Chem., 85(1981)3510

Theoretical Study of Excitation Energies of Some CoF<sub>6</sub><sup>n-</sup>  
Complexes  
Eisaku MIYOSHI, Toshikazu TAKADA, Shigeru OBARA,  
Hiroshi KASHIWAGI (AA6) and Kimio OHNO /  
Int.J.Quant.Chem., XIX(1981)451

Theoretical Study of Structure and Stability of H<sup>+</sup>X...(H<sub>2</sub>)<sub>n</sub>  
Clusters  
K.HIRAO (CE6) and S.YAMABE / Chem.Phys.Lett.,  
79(1981)279

Theoretical Study on the Structure and Stability of  
 $X^-(CH_3CN)_n$  ( $X=F$  and  $Cl$ ,  $n=1,2,3,4$ ) Clusters  
S.YAMABE (CO5) and K.HIRAO / Chem.Phys.Lett.,  
84(1981)598

Theoretical Studies of Photo-Oxidative Cleavage Reactions of  
Nitrogen-Activated C-C Double Bonds of Enamines, Indoles,  
and Tryptamines  
Kizashi YAMAGUCHI (BG5) / Int.J.Quant.Chem.,  
XX(1981)393

Theoretical Studies of Underlayer Chemisorption I:  
Electronic Structure of  $Ti_6$  and  $Ti_6N$  Clusters  
K.SHINJO, S.OHNISHI, M.TSUKADA (AA1) and S.SUGANO /  
Sol.Stat.Phys., 14(1981)5575

Theory of Electronic Structure of the Polar ZnO Surface by  
the Cluster Models  
Masaru TSUKADA (AA1), Eizo MIYAZAKI and Hirohiko  
ADACHI / J.Phys.Soc.Jpn., 50(1981)3032

Theory of the Finite-Temperature Magnetism of NiMn: Local  
Environment Effect and Glass-Like Phase  
Yoshiro KAKEHASHI (CR5) / J.Phys.Soc.Jpn., 51(1982)94

Three dimensional Structure of G-Actin·DNase I Complex at  
6Å Resolution  
Noriyoshi SAKABE (CB0), Kiwako SAKABE, Kyoyu SASAKI,  
Hiroshi KONDO, Takehiro EMA, Nobuo KAMIYA and Masaaki  
MATSUSHIMA / Progress Report, Nagoya Univ., (1982)1

Transition State of Oxidative Addition Reaction:  $Pt(PH_3)_2 +$   
 $H_2 \rightarrow Pt(H)_2(PH_3)_2$   
KazuO KITAURA, Shigeru OBARA and Keiji MOROKUMA (AA0)  
/ J.Am.Chem.Soc., 103(1981)2891

Valence Type Vacant Orbitals for Configuration Interaction  
Calculations  
Suehiro IWATA (AB4) / Chem.Phys.Lett., 83(1981)134