

I 部

目 次

巻 頭 言	分子研電子計算機センター長 諸熊 奎治	1
1. 電子計算機センターの経緯と新システムの機種決定		
	分子研電子計算機センター 柏木 浩	2
1.1 これまでの経緯		2
1.2 新システムの機種選定の経過		3
1.3 新システムの構成と能力		4
2. スーパーコンピュータ・ワークショップの活動		6
3. 計算機システムと運用について		8
3.1 計算機システムの特徴		8
3.2 ジョブクラスの構成		9
3.3 運用時間		9
3.4 利用点数		9
3.5 センターの主なサービス		10
4. 一 般 報 告		11
4.1 分子研ライブラリ・プログラムの収集と開発		11
4.2 データベース開発状況		19
4.3 プログラム相談		19
4.4 研究会・学会報告		20
5. 昭和 59 年度稼動状況および利用状況		22
5.1 利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数		22
5.2 分野区分別センター利用日数		22
5.3 システム稼動状況		23

5.4	ジョブ処理件数	23
5.5	CPU時間	23
5.6	無人運転システムの稼動状況	23
6.	速報抜粋 — 速報 (No.32 ~ 37) からの抜粋 —	26
7.	資 料	46
7.1	センター関連組織	46
7.2	岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則	47
7.3	岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター運営委員会規則	48
7.4	電子計算機センター運営委員会委員	49
7.5	電子計算機センター職員 (昭和60年6月現在)	49
7.6	建 物 図	50
7.7	応用プログラム相談員一覧	51
7.8	端末設置状況 (昭和60年5月現在)	51
7.9	マニュアルの紹介と購入方法	52

新システムと計算化学の可能性

電子計算機センター長 諸 熊 奎 治

来年（昭和61年）1月から、本電子計算機センターにスーパーコンピュータが入ることになった。これは、このきびしい緊縮財政にもかかわらず、60年度予算で計算機借料の増額がみとめられたからで、長倉所長はじめ管理局諸氏の御尽力、さらに文部省当局、大蔵省などの深い御理解に、心からの御礼を申しあげたい。また、小谷・福井両先生には、いろいろな段階で強力な御支援をいただいた。Löwdin 評議員はじめ、海外の諸先生からも何度もはげましの言葉を頂戴した。一方、若手の研究者を中心とするスーパーコンピュータワークショップの諸氏には、度重なる討論や試用を通じて、スーパーコンピュータの特長や問題点、導入による新しい発展の可能性などについて貴重なデータを提供していただいた。いずれも深く感謝の意を表したい。そしてこの度のスーパーコンピュータは何と云っても、58年1月以来当センターの現システムを使用して、分子科学の研究に大きな成果をあげて来られた所内外の研究者の努力のたまものである。センターのお守をしている者として、御同慶にたえない。

今回入るシステムは、スカラー能力だけでも現在の約3倍、62年春からは約5倍にもなり、ベクトル化による加速を考えると10～30倍の計算能力を持つことになる。計算能力が低目に見て10倍になるとしても、従来不可能であるとして考えられることすらなかった計算ができるようになり、その結果、新しい分子の世界が開かれてくる可能性が大きく生じてくる。現在の計算機の能力でも分子の平衡構造や反応の遷移状態を計算で求めることができるようになっているし、また、簡単な液体の動的挙動やランダムな分子集団系に対するシミュレーションもできるようになっている。ベクトル性能が80～400倍になろうかという計算機を使えば、より複雑で現実的な系へのより精密な計算が行えるので、これを使って、新しい性質をもった分子の設計、新しい触媒の設計、生体物質の作用機構の解明などが、計算によって可能になる日が来るにちがいない。計算化学でえられた予測によって従来では考えられなかった全く新しい分子の世界が開けるには、今のスーパーコンピュータのさらに10倍、100倍の速度が必要かも知れないが、新システムの能力は計算化学の幕あけをつけるにふさわしいものである。

新システムを大いに活用して成果をあげることが、好意と期待に応える道である。

1. 電子計算機センターの経緯と新システムの機種決定

分子研電子計算機センター 柏木 浩

1.1 これまでの経緯

3年にわたって、スーパーコンピュータ導入のために概算要求を続けてきたが、ようやくして昭和60年度最終四半期の予算が認められ、61年1月より新システムを使用できることになった。この新システムは日立製作所の提案によるもので、ユーザの期待に十分応える高度な機能をそなえた大型システムである。表1.1.1や後出の図1.3.2を見るとわかるように、当センターのジョブ処理能力はここ3～4年の間頭打ちの状態にあって、ユーザの強い要望にもかかわらずCPU時間の配分はほぼ停滞していた。TSS端末、入出力装置も旧式なものになり研究者の作業能率の点でも十分とは言えない状態であった。新システムではほとんどの機器が更新され計算処理能力も飛躍的に増大するので計算分子科学の第二段階の発展の準備がととのったと言える。

これまでの電子計算機の発達の歴史はIBM型の汎用機の発達の歴史であると言ってほとんどさしつかえない。過去20年の汎用機の高速度化はおよそ10年で10倍であった。ところが今後のベクトルプロセッサやパラレルプロセッサなど科学技術用超高速計算機の高速度化はおよそ10年で100倍～1,000倍になると予想される。このような状況の中では、ユーザの研究計画の立案やプログラム開発などの対応がますます重要になってくると思われる。センターは計算機の発達見通しについての情報をワークショップレポートなどを通じてユーザに知らせ、いろいろな面でユーザのプログラム開発を支援したいと考えている。

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	57年度	58年度	59年度
計 算 機 シ ス テ ム	M-180	M-180	M-200 H	M-200 H, M-180	M-200 H	同 左	同 左
運 転 方 式	2 台 8ヶ月 有 人	2 台 9月から 無 人	M-180 200 H 無 人, 180 有 人	疎 結 合 無 人	疎 結 合 2 台 有 人		
利 用 者 数							
機 構 内 a	48	70	69	91	94	102	110
機 構 外	107	254	325	330	375	426	446
合 計	155	388	426	458	521	581	604
稼 動 度 間	1, 087	6, 071	6, 553	6, 721	6, 305	6, 170	6, 316
利 用 C P U 時 間 (200 H 基 準)							
申 請 可 用 時 間	929	4, 666	11, 038	10, 230	11, 988	13, 053 b	14, 799
申 許 可 時 間	816	3, 171	7, 427	8, 306	10, 141	10, 091	10, 768
請 間 使 用	485	2, 253	4, 533	5, 929	7, 742	8, 050	8, 360
総 使 用 C P U 時 間 c	509	2, 405	5, 405	6, 320	8, 205	8, 489	8, 508
ジ ョ ブ 処 理 件 数 c	41, 521	155, 980	183, 840	214, 847	239, 771	286, 519	226, 727
ライブラリプログラム新規登録数	0	20	48	20	699	10	118
データベース新規登録数	0	2	0	0	3	3	0
センター使用論文数 d	0	24	98	118	190	185	202

a: 機構内利用者数にはアイドル課題のための重複を含まない。

b: 申請および使用の詳細については5.1項を参照

c: ここでの値はCPU時間、件数ともにライブラリ開発、センター業務使用などのすべてを含む。

d: センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたもの。

1.2 新システムの機種選定の経過

電子計算機センター運営委員会とその小委員会である次期システム検討委員会における機種選定の経過は次のようであった。

- 昭和58年 8月17日 第5回電子計算機センター運営委員会にて、次期システム検討委員会を作ることを提案
- 9月16日 第77回教授会議にて、電子計算機センター運営委員会の下に次期システム検討委員会を作ることを承認。委員5名を指定
- 10月 8日 検討委 諸熊委員を委員長に選ぶ。提案作成要領案検討。
- 11月19日 検討委 提案作成要領案検討
- 12月17日 検討委 同 上
- 昭和60年 1月11日 検討委 提案作成要領決定
- 1月17日 提案作成要領をメーカー5社（日本クレイ、日本CDC、富士通、日立、日電）に提示
- 2月 8日 提案締切。3社（富士通、日立、日電）より提案
- 2月16日 検討委 各社による提案説明
センターより各社へ質問事項
- 2月25日 検討委 提案検討
- 2月26日 検討委 同 上
- 3月 4日 検討委 同 上
- 3月11日 検討委 同 上
- 3月18日 第8回電子計算機センター運営委員会にて中間報告
- 3月22日 検討委 提案検討
- 3月29日 検討委 同 上
- 4月 9日 検討委 同 上
- 4月24日 （午前）検討委 答申決定
（午後）第9回電子計算機センター運営委員会にて機種決定

次期システム検討委員には電子計算機センター運営委員の中から、岩田末廣（慶大理工）、大野公男（北大理、分子研客員）、正島宏祐（分子研）、諸熊奎治（分子研センター）、柏木 浩（分子研センター）の5名が選ばれた。この委員会は昭和58年10月から12月まで、メーカーに新システムの要求を示す提案作成要領の検討を行ったが、59年度の概算要求が認められなかったため59年12月まで休止の状態であった。60年初頭に予算の内示を受け、1月11日に提案作成要領を決定した。1月17日

のメーカへの提案作成要領の提示以降，4月24日の決定に至るまで3ヶ月余にわたる交渉と検討が行われた。この期間センターの技官，助手もしばしば検討委員会に同席し様々な面で委員会に協力した。最終的には4月24日の運営委員会には長倉所長も出席されて，日立製作所提案のシステムを次期システムとして採用することに決定した。長期間にわたる機種選定作業のために労力を惜しまれなかった検討委員の先生方，秘書を含むセンターの職員に心から感謝したい。

1.3 新システムの構成と能力

昭和61年1月当初の構成は汎用機HITAC M-680Hとスーパーコンピュータ HITAC S-810/10の疎結合システムで，構成は図1.3.1に示す通りである。62年度初めにスーパーコンピュータは

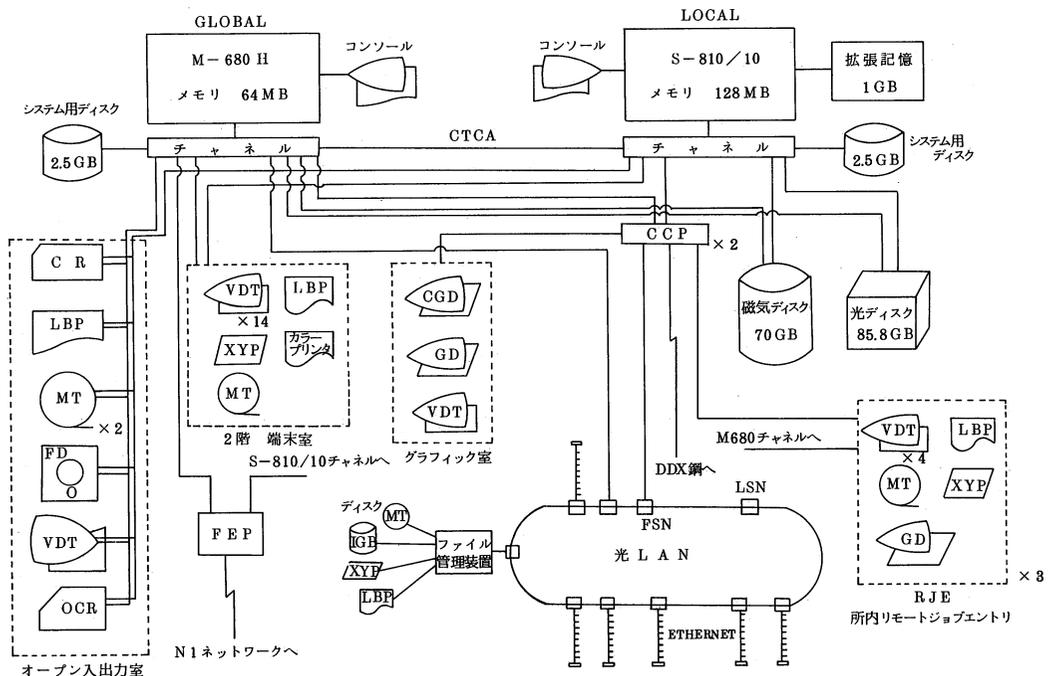


図 1.3.1 新システム 構成概念図

さらに高性能の上位機種におきかわる予定である。図 1.3.2 に分子研センター発足以来の CPU 能力の向上を示した。新システムでは M-200 H 2 台からなる現行システムに比べ計算速度が飛躍的に向上する。S-810/10 のベクトルプロセッサの最高速度は 315 MFLOPS であり、上位機種ではさらにその数倍になると推定されている。

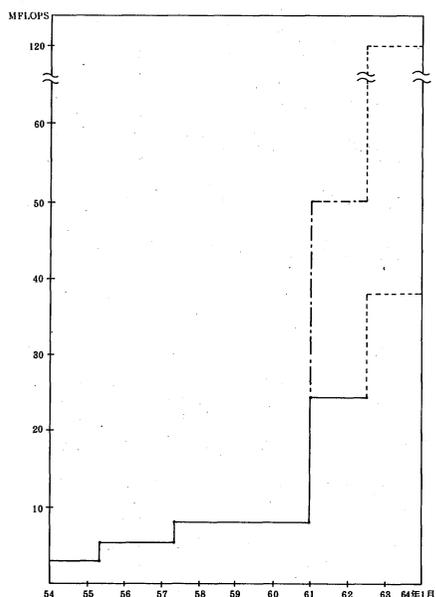
このように高速なプロセッサの能力に均り合うように各種の高速メモリも用意されている。主記憶 192 MB は現行の 6 倍になる。磁気ディスクの数十倍の入出力速度を持つ拡張記憶が 1 GB、磁気ディスクは総計 75 GB で一部はキャッシュメモリ付、半分強はパラレル I/O 専用でやはり数十倍の入出力速度が期待される。この他に遠隔地のユーザおよび大量のデータを扱うユーザのための光ディスクも用意される。

通信システムとしては所外ユーザのための電話公衆網と DDX 網の受口および所内ユーザのための光ローカルエリアネットワークと ETHERNET が準備される。センター内および所内 RJ 45 ステーションには高性能のワークステーション、グラフィックディスプレイ、カット紙型レーザープリンタがおかれ、ラボラトリオートメーションの方向へ機能が強化される。

これまでに概観したように新システムは現行システムに比較して全ての面で非常に強力である。スーパーコンピュータの最高速度は 62 年度には M-200 H の数百倍になり、多量データの入出力速度も現在の数十倍になる。一個のジョブが使用できる記憶容量も主記憶、外部記憶ともに 10 倍以上になる見込みである。このような新システムの超高速性と大規模計算の可能性をいかしてめざましい科学的成果がぞくぞくと生まれることが期待される。私達は新システムを、単に国内の研究者のためばかりでなく、他に類を見ない分子科学の国際的資源として充実させたいと考えている。

図 1.3.2 分子研電子計算機センターにおける CPU 能力の向上

実線はスカラ性能，一点破線はベクトル化率を平均 80% したときの CPU 能力。
破線は推定値である。



2. スーパーコンピュータ・ワークショップの活動

前章で報告したようにスーパーコンピュータから構成される新システムが61年1月から発足することになった。新システムがユーザの期待に十分応えられるような大型システムになった。要因の一つにワークショップの活動、特にSUPERCOMPUTER・WORKSHOPレポートの発刊があると思われる。このワークショップは今後も、スーパーコンピュータの有効利用のために、また分子科学向けスーパーコンピュータの発達のために活動を続けることが必要であろう。

昭和59年度には第4回および分子研研究会をかねた第5回ワークショップが開かれた。内容は以下の通りであり、いずれも高い内容の講演と熱心な討論に満ちたものであった。

第4回公開講演会

昭和59年12月17日(月)午後

- | | | |
|---------------------------|----------|-------|
| ○ワークショップのはじめに | 分子研センター | 柏木 浩 |
| ○アメリカ科学界におけるスーパーコンピュータの利用 | 分子研センター | 長嶋 雲兵 |
| ○スーパーコンピュータSXの特徴 | 日本電気 | 片山 博 |
| ○京大におけるスーパーコンピュータの運用と利用 | 京大大型センター | 島崎 真昭 |
| ○スーパーコンピュータ版数学ライブラリNUMPAC | 名工大 | 二宮 市三 |
| | 名大大型センター | 秦野 甯世 |

12月18日(火)午前

- | | | |
|------------------------------|----------|-------|
| ○固体電子状態計算におけるスーパーコンピュータ利用の一例 | 東大物性研 | 寺倉 清之 |
| ○VPによる水溶液の分子動力学 | 京大理 | 片岡 洋右 |
| ○分子動力学法による超イオン導電体の計算機実験 | 京大工 | 金子 豊 |
| ○蛋白質分子の構造エネルギー極小化 | 早大理工 | 輪湖 博 |
| ○蛋白質の構造転移現象のFACOM VPによる計算機実験 | 九大大型センター | 武富 敬 |
| ○蛋白質分子の立体構造エネルギー関数とその微分の迅速計算 | 九大理 | 郷 信弘 |

12月18日(火)午後

- | | | |
|--|-----------------|-------|
| ○HAP FORTRAN 77の高速入出力機能について | 日立ソフトウェア工場 | 青山 明夫 |
| ○VPを使って | 京大工 | 寺前 裕之 |
| ○京大計算機センター(VP-100/M-382)でのGAMESの利用などについて | 京大工 | 波田 雅彦 |
| ○二電子積分変換プログラムのベクトル化 | 北大理 | 野呂 武司 |
| ○ab initio SCF-CI計算のベクトル化 | 東大理 | 小杉 信博 |
| § ワークショップ打ち合わせ会 | 分子研次期システムへの要望など | |

分子研研究会「スーパーコンピュータの効果的・創造的利用のために」

(第5回スーパーコンピュータ・ワークショップ)

昭和60年3月26日(火)午後

○はじめに	分子研センター	諸熊 奎治
○スーパーコンピュータにいただく夢	分子研研究顧問	小谷 正雄
○新システムのデザイン	分子研センター	柏木 浩
○スーパーコンピュータによる大規模な計算機実験への期待	京大工	中西浩一郎
○私達の研究の経験からの期待	京大工	中辻 博
○固体物理におけるスーパーコンピュータ利用	東大物性研	寺倉 清之
○Gaussian 80のVP-100におけるベクトル化	山口大教養	堀 憲次
○酵素反応の解明に向かって	北里大薬	梅山 秀明

3月27日(水)午前

○励起分子の溶液内化学反応の問題点	分子研	大峰 巖
○二電子積分ベクトル化の試みと遭遇した困難	京大理	小原 繁
○分子軌道計算と拡張記憶	東大理	小杉 信博
○水溶液における輸送係数の異常性とベクトル化の工夫	京大理	片岡 洋右
○物性理論における径路積分法・量子モンテカルロ法の効用	分子研	那須奎一郎

3月27日(水)午後

○Formula tape or direct CI	北大理	田中 皓
○ユニバーサルモレキュラーメカニックス力場の作成計画とスーパーコンピュータ	北大理	大沢 映二
○化学反応の微細機構の解析に向けて	阪大基礎工	笛野 高之
○スーパーコンピュータの現状と将来	東大大型センター	唐木幸比古
○ワークショップ打ち合わせ		

新システムへの要望

3. 計算機システムと運用について

3.1 計算機システムの特徴

当センターのシステム（昭和59年4月～60年3月）は図3.1.1に示すようにHITAC M-200 H 2台からなるLCMP（疎結合マルチプロセサ）システムである。主記憶容量はそれぞれ16MBで合計32MBである。グローバルプロセサ側には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。グローバルプロセサではジョブの入出力の管理、TSSサービスを中心に行い、かつバッチ処理も行う。一方ローカルプロセサでは大型ジョブを中心にバッチ処理のみを行う。ディスク容量は59年12月にシステムディスクが7.6GB、共用ディスクが25.2GBに増設された。周辺機器としては磁気テープ装置3台、カードリーダー（1台）、ラインプリンタ（2台）、レーザビームプリンタ（1台）、グラフィックディスプレイ（3台）、カラーグラフィックディスプレイ（2台）、XYプロッタ（1台）、TSS端末（館内用18台）、フロッピー入出力装置（1台）などがある。また所内の各研究室、実験室に設置される個人用端末の増大に対応するためにポートセレクター（1種の通信回線自動交換機）が1台ある。

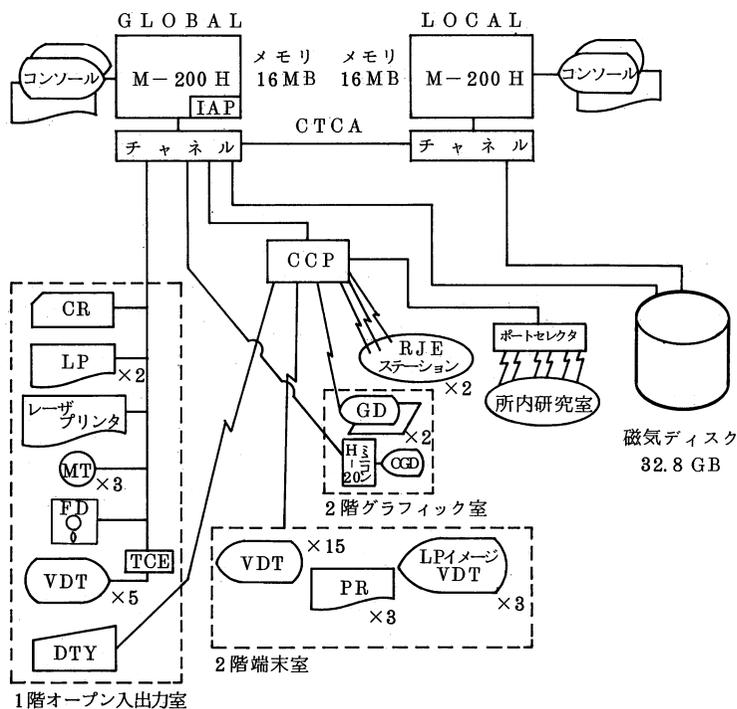


図3.1.1 機器構成（昭和59年度）

3.2 ジョブクラスの構成

ジョブクラスの構成は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ものとなっている。

表 3.2.1 にジョブクラスの構成を示す。

表 3.2.1 ジョブクラスの構成

ジョブクラス	C P U タイム (分)		R E G I O N (KB)	
	標準	上限	標準	上限
A	1	1	512	7,000
B	5	5	1,024	7,000
C	30	30	1,024	7,000
D	30	60	2,048	7,000
E	30	120	2,048	7,000
I	30	30	2,048	7,000
J	30	120	2,048	7,000
S	30	1,480	2,048	7,000
T S S	2	2	1,024	2,048

ここで I, J クラスはアイドルジョブ用のクラスで所内プロジェクトのみ利用できる。

3.3 運用時間

運用時間は昭和 54 年 9 月以来次の通りである。

- ・ 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	
- ・ 無人運転時間帯 深夜・休祭日

3.4 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。

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

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

3.5 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 T S S 端末，ラインプリンタ，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。

- T S S ・ R J E サービス

センター2階の T S S 端末室および分子研所内の研究室にある各種 T S S 端末からの専用回線による T S S 利用，および公衆回線（300 ボー／1,200 ボー）による所外の T S S 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 R J E (Remote Job Entry) サービスも行っている。

- データベース

量子化学文献データベース (QCLDB)，カーネギメロン量子化学アーカイブ (CMQCA)，赤外線スペクトルデータベース (IR2)，有機化合物自動構造解析システム (CHEMICS)，立体化学計算プログラム基礎団データベース (STERIC) の5本の化学関係のデータベースのサービスを行っている。

- プログラムライブラリ

分子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 T S S 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3種類である。

- (1) 分子科学プログラム・パッケージ

国内の研究者，他計算センターなどから提供または開発されたもの。

- (2) QCPEプログラム

アメリカの QCPE (Quantum Chemistry Program Exchange) から購入したもの。

- (3) NUMPACライブラリ

二宮市三教授等のグループにより開発された数学ルーチンパッケージ NUMPAC (Nagoya University Mathematical Package)。

4. 一 般 報 告

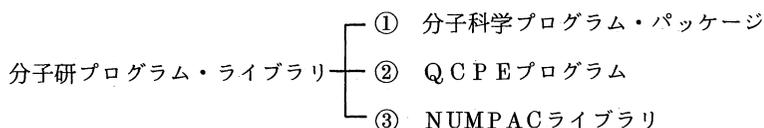
4.1 分子研ライブラリ・プログラムの収集と開発

当センターは開設以来、ライブラリ・プログラムの収集・開発に努めてきているが、昭和59年度においては、表 4.1.1 にあるようにライブラリ開発計画を組んだ。ライブラリ開発の成果は新規プログラムの登録あるいは既存プログラムの改良・発展という形で実っている。

表 4.1.1 昭和59年度 分子研ライブラリプログラム開発作業一覧

1	館脇 洋 友成 六美	北大触媒研 助手 " 大学院学生	Gauss 型関数を使用した ATOMS CF プログラムの開発整備
2	小杉 信博	東大理 助手	ab initio SCF プログラム GSCF 3 及びアレイプロセッサのためのアルゴリズム開発
3	安藤 勲 山延 健 安藤 慎治	東工大工 助教授 " 大学院学生 " "	NMR スピンカップリング計算プログラムの開発整備
4	竹下 幸一	北大理 研究生	グラジエント計算プログラムの開発整備
5	二宮 市三 秦野 甯世	名大工 教授 名大大型センター 助手	汎用数学計算プログラム NUMPAC の整備
6	岩田 末廣 長村 吉洋 青柳 睦 佐藤 信行 鎌田 慎一	慶大理工 助教授 " 助手 " 大学院学生 " " " "	分子軌道計算のプログラム群 MOCIKO の開発整備
7	片山 忠二 本田 正子	名大理 技官 " 大学院学生	X線結晶構造解析の自動化のためのプログラム CRYSTA の開発整備
8	小原 繁 岩井 正博	京大理 助手 " 奨励研究員	SCF・MCS CF・CI 計算のプログラム COLUMBUS のコンバージョン
9	関谷 雅弘	北大理 大学院学生	原子の SCF 計算のプログラムの整備及び CI 計算のプログラムのバージョンアップ
10	江崎 俊之	名大工 研究生	定量薬物設計のためのグラフィックプログラム GPQDD の整備
11	小林 久芳	京府大生活科学部 助手	周期モデル拡張ヒュッケル計算プログラム EHTB の3次元一般 K 点への拡張

分子研プログラム・ライブラリは以下のように構成されている。



①の分子科学プログラム・パッケージには、国内及び国外の研究者から提供されたプログラム、並びに②のQCPEプログラムを現行システム（HITAC Mシリーズ）にコンバートしたものなど約100件が収まっている。これらのプログラムのソースはデータセットとして磁気ディスク上にカタログされている。またその大部分については実行可能ロードモジュールもカタログされているので、ユーザは即座に使うことができる。実行可能ロードモジュールの使用回数は昭和59年度で総計18,434回であった。

昭和59年度に新規登録した分子科学プログラム・パッケージは以下の14件である。その結果総件数は119件となった。

CSACST	CROSS SECTIONS OF ATOMIC COLLISIONS BY SEMICLASSICAL THEORY
MELD	PROGRAM FOR MANY ELECTRON DESCRIPTION
STERIC	STEREOCHEMISTRY BY INPUT OF CHEMO
JANIE1	NUMERICAL INTEGRATION OF ELECTRON DENSITY
SERIES	LOOMIS-WOOD DIAGRAM FOR FINDING LINE SERIES
EMOR1	EXTENDED METHOD OF OPTIMAL RELAXATION FOR EIGENPROBLEMS
ICON	EXTENDED HUCKEL CALCULATIONS FOR MOLECULES
HUCKEL	HUCKEL CALCULATIONS FOR MOLECULES
CNDOS	CNDO/S-CI: MODIFIED CNDO AND CI METHOD
MNDOC	CORRELATED SEMIEMPIRICAL CALCULATIONS WITH GEOM.OPT.
DIIVIB	CALC. OF NUMERICAL VIBRATIONAL WAVEFUNCTION FOR DIATOMICS
DIAINI	CALC. OF FCF AND ELECTRONIC SPECTRA OF DIATOMIC MOLECULES
GRAMOL	GRADIENT METHOD PROGRAM
GORDON	COUPLED CHANNEL SCATTERING MATRICES

②のQCPEプログラムは米国インディアナ大学に登録されているQCPE (Quantum Chemistry Program Exchange) プログラムを購入しているものであり、現在総件数411件である。量子化学の分野でよく使われる有名なプログラムのみならず、広く数学・物理・化学の分野のプログラムも含まれており、非常に有益なものである。ほとんどはFORTRANで書かれたプログラムで、ユーザには磁気テープによるソースプログラムの貸出しサービスを行っている。

③の NUMPAC ライブラリは、二宮市三教授その他の方々の製作による名古屋大学大型計算機センターの数値計算ライブラリプログラムを移植したものである。昭和59年度に新たに下記の104件を追加登録し、総件数は707件になった。

CHOLFZ	MCHLFC	MCHLFB	MCHLFZ	CHLBDC
CHLBDB	CHLBDZ	MCHLBC	MCHLBB	MCHLBZ
HOQRVQ	CHEQIS	CHEQID	CHEQRS	CHEQRD
CHQRIS	CHQRID	CHQRIQ	CHOBSS	CHOBSD
CHOBSQ	CHOQRS	CHOQRD	CHOQRQ	CGHQRS
CGHQRD	CGHQRR	CGHQIS	CGHQID	CGHQIQ
CGHBSS	CGHBSD	CGHBSS	SFC2A	DCPFR1
LSFUNS	LSFUND	LSCOFS	LSCOFD	LSDEGS
LSDEGD	GLBNS	GLBND	GSCNS	GSCND
TNCOTS	TNCOTD	TNCOTQ	TGCHBS	TGCHBD
TGCHBQ	AQOSCS	AQOSCD	AQCHYS	AQCHYD
DTANH	QTANH	EULNO	DEULNO	QEULNO
PCHB1	DPCHB1	PCHB2	DPCHB2	PLEGE
DPLEGE	PLEGA	DPLEGA	PHERM	DPHERM
PLAGU	DPLAGU	PLAGG	DPLAGG	BETIC
DBETIC	QJO	QJ1	QYO	QY1
QIO	QI1	QKO	QK1	BHO
DHO	BH1	DH1	BLO	DLO
BL1	DL1	BIOMLO	DIOMLO	BI1ML1
DI1ML1	ZBJO	DZBJO	ZBJ1	DZBJ1
ZBJOS	ZBJOD	ZBJ1S	ZBJ1D	

固有値問題・連立一次方程式等の線形代数，数値微積分，フーリエ解析，常微分方程式，特殊関数，最適化問題等を扱うことができる。ベクトル化のためのプログラムの書き換えも行われており今後も追加・更新を予定している。

以下，表4.1.2に現在（昭和60年6月6日）登録されている分子科学プログラム・パッケージの一覧を示す。

表4.1.2 分子科学プログラム・パッケージ一覧

==== IMS PROGRAM LIBRARY =====

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

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MDAN03	MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE
002	DVSCAT	NUMERICAL-BASIS-SCC-DV-XALPHA MO AND CLUSTER CALCULATION
003	EHTB	EXTENDED HUCKEL METHOD FOR TWO DIMENSIONAL PERIODIC SYSTEMS

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

NO. PROGRAM ID PROGRAM TITLE

FIELD CODE : AS30
FIELD TITLE : LIQUID AND SOLUTION.

NO. PROGRAM ID PROGRAM TITLE
001 MDANO3 MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE
002 MDSALT MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION FOR MOLTEN SALT
003 CLAMPS CLAMPS: CLASSICAL MANY PARTICLE SIMULATOR
004 NLPLSQ LEAST-SQUARES PROGRAM FOR REFINING LIQUID STRUCTURE MODELS
005 KURVLR PROGRAM FOR ANALYSING X-RAY DIFFRACTION DATA OF LIQUID

FIELD CODE : BI10
FIELD TITLE : BIOMOLECULES.

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

FIELD CODE : CR20
FIELD TITLE : CARTESIAN COODINATES OF ATOMS IN MOLECULES.

NO. PROGRAM ID PROGRAM TITLE
001 ORTEP ORTEP DRAWING OF MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURE
002 BSIP BASIC STRUCTURAL INFORMATION ON PROTEIN FROM PDB DATA
003 TASP ANALYSIS OF PRIMARY AND SECONDARY STRUCTURES OF PROTEIN
004 PDB THE PROTEIN DATA BANK
005 PRTXYZ XYZ COORDINATES OF MODEL STRUCTURE OF PROTEIN
006 GPQDD GRAPHIC PROGRAM FOR QUANTITATIVE DRUG DESIGN
007 MDP MOLECULAR DISPLAY PROGRAM
008 STERIC STEREOCHEMISTRY BY INPUT OF CHEMO

FIELD CODE : CR30
FIELD TITLE : MOLECULAR MECHANICS AND FORCE FIELD CALCULATIONS.

NO. PROGRAM ID PROGRAM TITLE
001 MM2 MOLECULAR MECHANICS CALCULATION BY MM2 FORCE FIELD MODEL
002 MMIPI1 MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 100-ATOM MOLECULES
003 MMIPI3 MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 300-ATOM MOLECULES
004 MMIY3 MOLECULAR MECHANICS CALCULATION FOR 6-COORDINATED COMPOUNDS
005 MDANO3 MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE
006 CLAMPS CLAMPS: CLASSICAL MANY PARTICLE SIMULATOR

FIELD CODE : DB10
FIELD TITLE : DATA BASES.

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

FIELD CODE : EG10
FIELD TITLE : EDUCATIONAL TOOLS.

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

FIELD CODE : EG20
FIELD TITLE : GENERAL UTILITIES.

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

FIELD CODE : GP10
FIELD TITLE : GRAPHIC PROCESSING.

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

FIELD CODE : MI10
FIELD TITLE : MOLECULAR INTEGRALS.

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

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

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

FIELD CODE : NM40
FIELD TITLE : SYMMETRY ANALYSIS.

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

FIELD CODE : SC10
FIELD TITLE : SCATTERING AND TRAJECTORY.

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

FIELD CODE : SC20
FIELD TITLE : CRYSTALLOGRAPHY.

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

FIELD CODE : SL10
FIELD TITLE : SPECIAL LANGUAGES.

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

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

NO. PROGRAM ID PROGRAM TITLE
001 DIAVIB CALC. OF NUMERICAL VIBRATIONAL WAVEFUNCTION FOR DIATOMICS
002 DIAINT CALC. OF FCF AND ELECTRONIC SPECTRA OF DIATOMIC MOLECULES

FIELD CODE : SS30
FIELD TITLE : NMR SPECTROSCOPY.

NO. PROGRAM ID PROGRAM TITLE
001 DNMR3 SIMULATION OF EXCHNGE BROADENED NMR SPECTRA
002 LAOCN3 ANALISIS OF HIGH RESOLUTION NMR SPECTRA
003 CHEMIC CHEMICS :AUTOMATED ORGANIC CHEMICAL STRUCTURE ELUCIDATION

FIELD CODE : SS50
FIELD TITLE : VIBRATIONAL AND ROTATIONAL SPECTROSCOPY.

NO. PROGRAM ID PROGRAM TITLE
001 NCTB NORMAL COORDINATE TREATMENT OF MOLECULAR VIBRATIONS
002 CYOA NORMAL COORDINATE TREATMENT OF CRYSTAL VIBRATIONS
003 LSVR3 LEAST-SQUARES ANALYSIS OF VIB-ROT SPECTRA OF AN ASYM. TOP
004 LSRES3 L.S. ANALYSIS OF VIB-ROT SPECTRA OF ASYM. TOP IN RESONANCE
005 BC3 CALCULATION OF VIB-ROT SPECTRA OF ASYMMETRIC TOP
006 BCRES3 CALC. OF VIB-ROT SPECTRA IN RESONANCE FOR AN ASYMM. TOP
007 ENVLOP CALCULATION OF BAND ENVELOPES OF VIB-ROT SPECTRA
008 DISPL3 DISPLAY OF THEORETICAL VIB-ROT SPECTRA
009 ASSIGN ASSIGN DIAGRAM FOR THE ASSIGNMENT OF VIB-ROT SPECTRA
010 ISLINE ATOMIC AND MOLECULAR SPECTRAL LINE DATA RETRIEVAL SYSTEM
011 CHEMIC CHEMICS :AUTOMATED ORGANIC CHEMICAL STRUCTURE ELUCIDATION
012 IR2 INFRARED SPECTRAL RETRIEVAL SYSTEM
013 SERIES LOOMIS-WOOD DIAGRAM FOR FINDING LINE SERIES
014 DIAVIB CALC. OF NUMERICAL VIBRATIONAL WAVEFUNCTION FOR DIATOMICS
015 DIAINT CALC. OF FCF AND ELECTRONIC SPECTRA OF DIATOMIC MOLECULES

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 SCEP SELF-CONSISTENT ELECTRON PAIRS METHOD
006 IMSPAC AB INITIO SCF MO CALCULATIONS
007 RKN0AU RIKEN GAUSSIAN70
008 IMSPAK GEOMETRY OPTIMIZATION BY AB INITIO SCF-MO CALCULATIONS
009 COMICA A PROGRAM SYSTEM FOR CONFIGURATION MIXING CALCULATION(CI)
010 IPCREF EFFECTIVE HAMILTONIAN MATRIX CONFIGURATION INTERACTION(CEFCI)
011 PA200 LIST OF ONE- AND TWO-ELECTRON INTEGRAL LABELLS
012 PA300 EVALUATE ONE- AND TWO-ELECTRON INTEGRALS
013 PA409 CLOSED-SHELL SCF AND POPULATION ANALYSIS PACKAGE
014 PA600 ONE-ELECTRON PROPERTIES PACKAGE
015 INTCPY INTEGRAL COPY ROUTINE OF POLYATOM SYSTEM
016 GAUS76 AB INITIO MO CALCULATION. GAUSSIAN 76 M-VERSION.
017 ALIS AB INITIO MCSCF PROGRAM FOR ATOMS AND MOLECULES
018 JAPIC1 PLOTTER WRITING OF MO AND DENSITY BY AB INITIO METHODS
019 JAPIC2 PLOTTER AND GRAPHIC DISPLAY WRITING OF MO AND DENSITY
020 GUGACI GRAPHICAL UNITARY GROUP APPROACH CI BY ISAIAH SHAVITT
021 DRAWDG DIAGRAM:GENERATION OF GOLDSTONE AND BLOCH-BRANDOW DIAGRAMS
022 GSCF2 PROGRAM GSCF2 WITH ONE-HAMILTONIAN AND PARTIAL SCF METHOD
023 GAMESS GENERAL ATOMIC AND MOLECULAR ELECTRONIC STRUCTURE SYSTEM
024 GAUS80 GAUSSIAN 80 : AB INITIO MO CALCULATION (HITAC VERSION)
025 ALCHEM ALCHEMY:AB INITIO ELECTRONIC STRUCTURE CALCULATION PACKAGE

026 CMQCA CARNEGIE-MELLON QUANTUM CHEMISTRY ARCHIVE
 027 ATOMCI CONFIGURATION INTERACTION PROGRAM FOR ATOMS
 028 CASSCF A PROGRAM FOR COMPLETE ACTIVE SPACE SCF CALCULATIONS
 029 PSHOND PSEUDOPOTENTIAL VERSION OF MO PROGRAM HONDO
 030 MELD PROGRAM FOR MANY ELECTRON DESCRIPTION
 031 JANIE1 NUMERICAL INTEGRATION OF ELECTRON DENSITY
 032 GRAMOL GRADIENT METHOD PROGRAM
 033 COLMBS COLUMBUS: A PROGRAM SYSTEM FOR SCF,MCSCF AND MR-SDCI CALC.

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MNDO	MNDO SCF CALCULATIONS
002	MINDO3	MO CALCULATIONS BY MINDO/3 METHOD
003	CNINDO	MO CALCULATION BY CNDO AND INDO METHODS
004	MNDOM	MNDIFIED VERSION OF MNDO SCF MO CALCULATION PROGRAM
005	FPTNMR	CALCULATION OF NMR CHEMICAL SHIFT BY FPT-INDO/CNDO
006	CNDO5	CNDO/S-CI: MODIFIED CNDO AND CI METHOD
007	MNDOC	CORRELATED SEMIEMPIRICAL CALCULATIONS WITH GEOM.OPT.
008	FPTSPN	NMR SPIN-SPIN COUPLIN CONSTANT CALCULATION BY FPT INDO

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	HMO	HUECKEL MOLECULAR ORBITAL CALCULATION
002	DVSCAT	NUMERICAL-BASIS-SCC-DV-XALPHA MO AND CLUSTER CALCULATION
003	GPQDD	GRAPHIC PROGRAM FOR QUANTITATIVE DRUG DESIGN
004	PPP	SCF-CI-PI-MO PROGRAM WITH PPP APPROXIMATION
005	EHTB	EXTENDED HUCKEL METHOD FOR TWO DIMENSIONAL PERIODIC SYSTEMS
006	ICON	EXTENDED HUCKEL CALCULATIONS FOR MOLECULES
007	HUCKEL	HUCKEL CALCULATIONS FOR MOLECULES

**** TOTAL NUMBER OF UNIQUE PROGRAMS ****
 123

**** SORTED UNIQUE PROGRAMS ****

ALCHEM	ALIS	ASA	ASSIGN	ATOMCI	ATOMHF	BCRES3
BC3	BENDER	BSIP	CASSCF	CGTOFD	CGTORL	CHEMIC
CLAMPS	CMQCA	CNDO5	CNINDO	COLMBS	COMICA	CONVRT
COUNTF	CRYSTA	CSACST	CVOA	DIAMT	DIIVIB	DISMAP
DISPL3	DNMR3	DRAWDG	DVSCAT	EHTB	EMOR1	ENVLOP
FCBSD	FCMP	FLOW	FORDAP	FPTNMR	FPTSPN	GAMESS
GAUS76	GAUS80	GORDON	GPQDD	GRAMOL	GSCF2	GUGACI
HLISP	HMO	HONDOG	HUCKEL	ICON	IMSPAC	IMSPAK
INTCPY	IPCREP	IR2	ISLINE	JAMOL3	JANIE1	JAPIC1
JAPIC2	KURVLR	LAOCN3	LIBE	LSRES3	LSVR3	MDAN03
MDP	MDSALT	MELD	MINDO3	MMIPI1	MMIPI3	MMIY3
MM2	MNDO	MNDOC	MNDOM	MOLST	MULTAN	NASH
NCTB	NICER	NLPLSQ	ORTEP	OTHELO	OUTFIT	PA200
PA300	PA409	PA600	PDB	PFORTV	PGCCMB	PKIT
POTOPS	PPP	PROFIL	PRTXYZ	PSHOND	PSPART	PSTOPO
QCHECK	QLDB	REDUCE	REPORT	RKNGAU	SALS	SCEP
SERIES	SFORT	STEREO	STERIC	STINGY	SUPPOS	TASP
TSS517	UNICS3	VREPRT	WIGNER			

IMS COMPUTER CENTER: LAST UPDATE = 85-06-06

4.2 データベース開発状況

分子研データベースとして以下の5件が登録されており、ユーザに公開している。

- (1) QCLDB (量子化学文献データベース)
- (2) CMQCA (Carnegie-Mellon 量子化学アーカイブ)
- (3) CHEMICS (有機化合物自動構造解析システム)
- (4) IR2 (赤外線スペクトルデータベース)
- (5) STERIC (立体化学計算プログラム基礎団データベース)

(5)のSTERICは昭和59年4月より公開された。このデータベースは東海大学開発技術研究所、米田幸夫教授作成によるもので、ケモグラムの入力により、有機化合物の構造を推定するシステムである。また(1),(4)のデータベースについてはデータの増補が行われた。さらに59年度からQCBD B (Quantum Chemistry Basis set Data Base)の開発が開始された。これは分子軌道計算の基底関数として用いるCGTO (Contracted Gaussian Type Orbital)などのデータベースであり、量子化学計算の専門家ばかりでなく、将来の広範な科学技術者のニーズに応えることを目標にしている。

4.3 プログラム相談

4.3.1 プログラム相談

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コマンド及び操作、MTMについて、シスアウト編集、カタログドプロシジャ、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受けている。

(2) 応用プログラム相談

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GAUSSIAN 80, IMSPACK, JAMOL 3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、より高度な問題を扱うことを主眼としており、研究者の便宜に供している。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と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 物理学会講習会「スーパーコンピュータ — 現状と将来」

昭和59年7月25～27日 日仏会館ホール（東京）

○スーパーコンピュータの有効な使い方(3) — 分子科学 例題と解答 —

•発表者 柏木 浩

（内容） 分子科学におけるスーパーコンピュータの利用について、問題とその解決法および将来の可能性を紹介した。

4.4.2 第5回研究技術短期研究会

昭和59年8月7～8日 京都大学原子炉実験所

○コンピュータグラフィックスの応用 — 高級型からパソコンまで —

•発表者 伊奈 諭

（内容） 分子科学分野でのコンピュータグラフィックスの応用例として高級型ラスタースキャンカラーグラフィックディスプレイを用いた分子軌道、電子密度分布図などを紹介した。また同様のことを低価格なパソコンを使って行った例を対比させて示した。

4.4.3 計算機と化学・生物学の会 ワークショップ

昭和59年9月7日 東京都臨床医学総合研究所

○生体関連物質への *ab initio* の応用例

•発表者 柏木 浩

（内容） 非経験的分子軌道法の生体分子への適用をコンピュータグラフィックスによるカラー・スライドなどを用いて説明した。

4.4.4 生化学会シンポジウム「生体分子の立体構造のコンピュータ・ディスプレイと分子設計」

昭和59年10月7日 横浜国立大学

○生体分子における分子軌道と電子分布のカラーグラフィックス

•発表者 柏木 浩, 伊奈 諭

（内容） 鉄ポルフィリン、クロロフィルなど生体分子についてカラーグラフィックスによる分子軌道と電子分布の表示の手法について紹介した。

4.4.5 第6回全国共同利用大型計算機センター研究開発連合発表講演会

昭和59年11月1日 北海道大学百年記念会館

○分子研電算機センターにおけるライブラリプログラム管理システム (FLIB) の機能拡張

— 「READ」はできるが「COPY」はできない公開方式 —

• 発表者 山本 茂 義

(内容) ソフトウェアの公開と保護, 特にプログラムソースの公開と保護を主な目的としてライブラリ管理システムの機能拡張を行ったが, それについて説明した。

4.4.6 プラズマ核融合技術研究会

昭和59年11月15～16日 名古屋大学プラズマ研究所

○電算機センターの省電力化について

• 発表者 伊 奈 諭

(内容) 電力も計算機資源の一つであるとの観点からこれまで分子研で行ってきた計算機ハードまわり, ソフトまわり, 空調設備まわりの数々の対策と成果について説明した。

○英論文清書の出力システムの開発

• 発表者 西 本 史 雄

(内容) 英論文清書の出力システムの概要を説明し, 特に清書イメージ作成の高速化の手法, 複数の文字種のサポートについて述べた。

4.4.7 ベクトル計算機応用シンポジウム「ベクトル計算機による超高速計算」

昭和60年3月19～20日 京大大型計算機センター

○パネルディスカッション — ベクトル計算機による超高速計算の現状と将来 —

• 発表者 柏 木 浩

(内容) ベクトル計算機の高速度入出力について, 拡張記憶, パラレル I/O などの性能の紹介と問題点の指摘を行った。

5. 昭和59年度稼働状況および利用状況

5.1 利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数

利用分野	利用区分	プロジェクト数	ユーザ数	時間			点数		
				申請	許可	実績	許可	実績	
分子科学	施設利用	142	407	9,128	5,596	4,140	2,126,480	1,573,099	
	課題研究	1	5	60	51	51	19,380	19,384	
	協力研究	28	28	1,005	663	351	251,940	133,522	
	所内	一般	32	108	1,709	1,666	1,334	633,080	506,976
		アイドル(注)	13	48	2,861	2,756	2,462	1,047,280	935,744
生理学	施設利用	2	5	18	18	10	6,840	3,762	
基礎生物学	施設利用	1	1	12	12	11	4,560	3,993	
	所内	1	2	6	6	1	2,280	303	
合計		220	604	14,799	10,768	8,360	4,091,840	3,176,738	

(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。ユーザ数は所内一般利用と重複している。

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。

5.2 分野区分別センター利用日数

利用分野	利用区分	延べ利用日数 (単位：人日)	1日当りの利用者数	総稼働日数 329日
分子科学	施設利用	8,320	25.3	
	課題・協力研究	599	1.8	
	所内	一般	5,151	15.7
		アイドル	4,578	13.9
生理学	施設利用	20	0.06	
基礎生物学	施設利用	48	0.15	
	所内	10	0.03	
合計		18,726	56.9	

(注) 利用状況はTSSセッションの開設状況から集計したものであり単位を人日としている。人日とは1人の人が1日に1回以上何度使っても1回として計上する仕方である。

5.3 システム稼動状況

表 5.3.1 M-200 H×2 システム稼動状況

年 月	稼 動 時 間		保 守 時 間
	グ ロ ー バ ル	ロ ー カ ル	
59 / 4	568 : 00	568 : 00	12 : 00
5	556 : 00	554 : 00	15 : 00
6	531 : 00	530 : 00	17 : 00
7	586 : 00	586 : 00	22 : 00
8	531 : 30	528 : 30	21 : 30
9	513 : 00	511 : 00	19 : 00
10	464 : 00	463 : 00	18 : 00
11	528 : 00	526 : 00	8 : 00
12	454 : 00	448 : 00	18 : 00
60 / 1	434 : 00	429 : 00	21 : 00
2	435 : 00	435 : 00	28 : 00
3	497 : 00	492 : 00	19 : 00
計	6097 : 30	6070 : 30	218 : 30

5.4 ジョブ処理件数

M-200 H 2 台のトータルジョブ処理件数の月別、クラス別内訳を表 5.4.1、図 5.4.1 に示す。

5.5 CPU時間

M-200 H 2 台のトータル CPU 使用時間の月別、クラス別内訳を表 5.5.1、図 5.5.1 に示す。

5.6 無人運転システムの稼動状況

M-200 H 2 台の無人運転月別稼動状況を表 5.6.1 に示す。

表 5.4.1 月別ジョブ件数

***** ジョブ 月別 *****												
(ヶ月)	< ジョブクラス >											
	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(I)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(TOTAL)
04	3,098	1,695	1,136	194	240	507	0	10,155	37	394	50	17,306
05	3,359	1,990	1,315	231	179	1,042	0	10,883	59	531	2	19,591
06	2,850	1,761	1,454	131	236	779	5	10,507	63	509	22	18,317
07	4,231	2,165	1,629	249	234	663	0	12,971	194	600	42	22,978
08	4,171	2,219	1,516	204	197	739	0	12,393	118	423	0	21,980
09	3,609	1,601	1,061	256	170	873	0	10,958	261	583	52	19,424
10	1,993	1,273	1,070	251	151	652	0	8,480	94	442	48	14,454
11	3,434	1,565	1,344	297	192	847	0	10,307	51	531	12	18,580
12	3,190	1,275	1,070	311	115	854	0	9,833	58	508	64	17,278
01	2,818	1,201	1,322	168	217	1,129	0	9,050	254	679	46	16,884
02	3,256	1,571	1,369	310	209	985	0	10,147	119	645	20	18,631
03	4,258	1,864	1,443	243	372	831	0	11,827	38	426	2	21,304
(TOTAL)	40,267	19,980	15,729	2,845	2,512	9,901	5	127,511	1,346	6,271	360	226,727

図 5.4.1 月別ジョブ件数

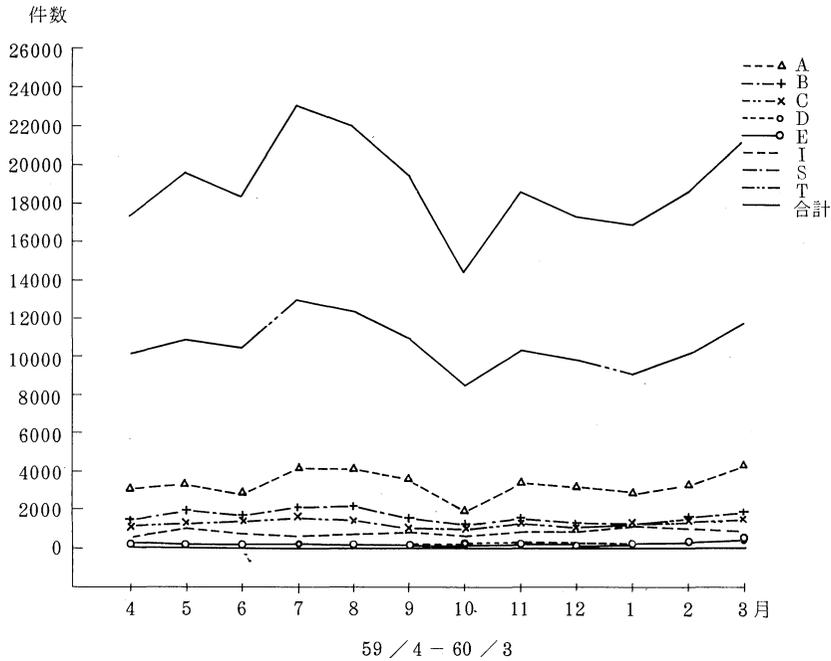


表 5.5.1 月別CPU時間

***** CPU 月別 *****												
< ジョブクラス >												
(ヶ月)	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(I)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(TOTAL)
04	10:31:39	51:42:56	201:24:46	101:24:55	225:05:37	160:55:30	00:00:00	21:46:48	01:14:23	05:29:26	00:02:21	779:38:41
05	11:18:27	53:24:06	195:16:38	71:21:58	160:12:27	330:21:42	00:00:00	28:25:38	01:25:39	02:21:10	00:00:29	853:08:14
06	10:10:57	61:04:13	238:23:46	39:55:31	213:24:06	243:33:56	04:54:10	27:11:34	00:05:05	07:18:17	00:01:56	848:03:31
07	17:34:07	64:49:55	241:25:36	93:50:22	192:38:51	249:31:16	00:00:00	33:45:56	03:17:37	03:18:20	00:11:45	900:23:45
08	15:52:43	69:22:41	237:20:04	60:40:15	165:57:37	229:59:09	00:00:00	30:40:40	01:45:53	02:34:56	00:00:00	814:13:58
09	14:25:20	43:20:18	140:08:29	101:16:50	127:05:18	176:48:55	00:00:00	29:49:40	03:58:44	08:56:49	01:12:58	647:03:21
10	05:39:30	32:19:18	111:13:29	84:39:25	100:25:21	117:06:36	00:00:00	24:12:20	02:04:38	05:10:22	00:54:00	483:44:59
11	11:22:11	53:13:25	183:48:49	115:36:17	164:54:48	136:49:46	00:00:00	26:35:13	00:23:49	12:00:43	00:05:33	704:50:34
12	09:34:52	53:46:03	196:24:45	96:49:41	84:24:57	123:05:22	00:00:00	27:08:13	03:54:34	11:10:30	00:07:13	548:26:10
01	09:10:51	32:39:48	139:34:35	59:13:25	104:32:00	136:21:02	00:00:00	27:06:22	02:57:09	08:33:04	00:29:12	520:30:58
02	11:53:42	51:16:11	181:57:06	87:13:24	118:29:37	119:21:44	00:00:00	29:41:53	07:24:32	17:14:03	03:21:38	627:53:50
03	13:40:07	53:38:26	222:00:14	79:44:33	217:21:08	152:16:57	00:00:00	34:37:42	05:09:29	01:38:14	00:00:24	780:07:14
(TOTAL)	141:08:26	602:37:20	22248:58:17	991:46:36	1874:31:47	2176:11:45	06:54:10	341:01:59	32:41:32	85:45:54	06:27:29	8508:05:15

図 5.5.1 月別CPU時間

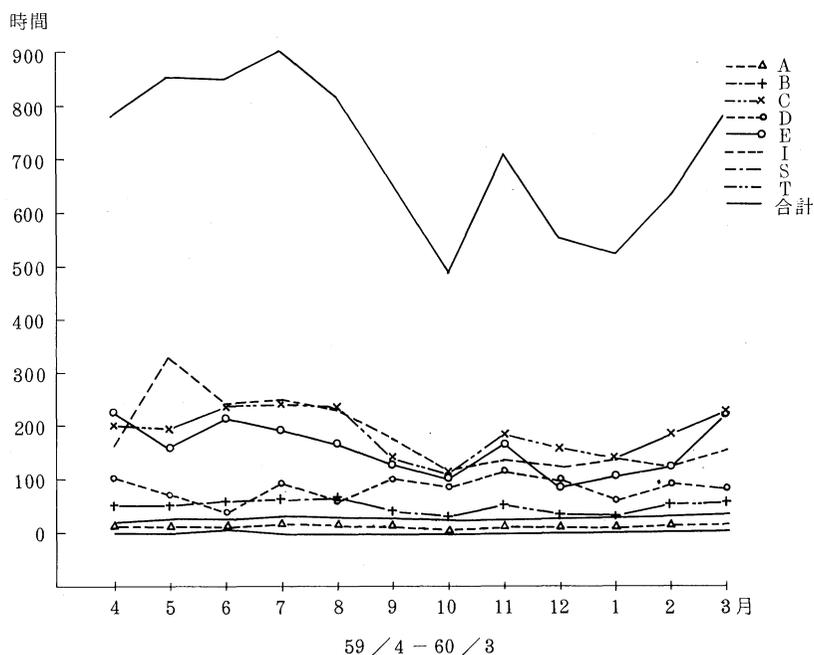


表 5.6.1 無人運転システムの稼働状況

年 月	フリーズ停止		計画停止		合 計	
	回 数	時 間	回 数	時 間	回 数	時 間
84年 4月	2	09 : 43	5	130 : 39	7	140 : 22
5月	11	59 : 09	4	116 : 35	15	175 : 44
6月	13	66 : 37	5	120 : 50	18	187 : 27
7月	10	57 : 43	4	88 : 20	14	146 : 03
8月	19	93 : 23	4	112 : 20	23	205 : 43
9月	15	82 : 45	4	122 : 15	19	205 : 00
10月	17	143 : 33	3	79 : 10	20	222 : 43
11月	14	80 : 54	4	118 : 55	18	199 : 49
12月	11	51 : 11	4	94 : 05	15	145 : 16
85年 1月	17	133 : 36	3	69 : 20	20	202 : 56
2月	14	84 : 21	5	162 : 35	19	246 : 56
3月	14	83 : 59	5	159 : 00	19	242 : 59
合 計	157	946 : 54	50	1374 : 04	207	2320 : 58

6. 速報抜粋 — 速報 (No. 32~37) からの抜粋 —

6.1 大型計算成果発表会について (No. 32)

当センターでは大学計算センターでは実行できないような分子科学の大型計算を一つの特徴にしております。

大型計算課題の研究成果を公表し、今後のプログラム開発、センター運営、利用申請審査の参考とするため、下記のように「分子研電子計算機センター大型計算成果発表会」を開催します。この研究会への出席は自由ですから奮って御参加ください。

「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」プログラム

日 時：昭和59年9月1日(土) 9:30 ~ 12:30

場 所：分子研研究棟101号室

9:30 挨拶 センター長

9:35 笹野 高之, 山口 兆, 福井 裕明, 坂根 康夫 (阪大基礎工)

素反応過程の経路と動力学機構の研究

10:05 津田 稔, 笈川 節子 (千葉大薬)

光化学反応機構に関する量子化学的研究

10:35 柿 茂好 (熊本大工)

遷移金属錯体の電子状態, 反応性, 触媒作用に関するMO研究

11:05 合志 陽一, 飯田 厚夫, 福島 整 (東大工)

分子軌道法によるX線スペクトルの解析

11:35 浅田 寿生, 星野 敏春, 中島 伸治, 長谷 隆 (静大工業短大)

表面および不純物系の電子状態

12:05 大瀧 仁志, 石黒 慎一, 田村 祐介, 伊藤 澄子, 山本 清, 田中 喜郎,

M. Probst (東工大総合理工)

溶液中の錯体の構造解析

6.2 システム新機能 (No. 32)

1. FORTRAN 77 関係

(1) 浮動小数点指数アンダーフロー割り込みの「抑止/受け付け」の実行時選択機能

FORTRAN 77での浮動小数点指数アンダーフロー割り込みの処理がセンターの標準値では「抑

止」となっていますが、実行時のパラメータで変更することができるようになりました。（今までは、IMSUFL サブルーチンを使用することでしか変更の方法はありませんでした。）

実行時のパラメータは RUNOPT () の括弧内に指定します。

/// EXEC FORTCG,

PARM. GO=' RUNOPT (UFLOW) '

実行時のパラメータを指定する場合、従来のようにコンパイル時のオプション RUNOPT は必要ありません。

プログラムの中で割り込みを制御したい場合は、従来どおり IMSUFL サブルーチンを使用することが可能です。

CALL IMSUFL アンダーフロー割り込みを抑止する
CALL IMSUFL (0) アンダーフロー割り込みを抑止する
CALL IMSUFL (1) アンダーフロー割り込みを受け付ける

(2) ビット処理関数の追加

次のビット処理のための関数が追加されました。

K= IOR (I, J) I と J の論理和
K= IAND (I, J) I と J の論理積
K= IEOR (I, J) I と J の排他的論理和
K= NOT (I) I を否定 (全反転)
K= ISHFT (I, N) I を N ビット左へシフト (負なら右へ)
K= BTEST (I, M) I の M ビット目が 1 か 0 をテスト
K= IBSET (I, M) I の M ビット目を 1 に
K= IBCLR (I, M) I の M ビット目を 0 に
K= IBCHNG (I, M) I の M ビット目を反転

(M のビット位置は 1 が右端です)

2. T S S コマンド関係

(1) ディスクボリュームの空きスペース量を表示する LISTDSK コマンドの登録

LISTDSK コマンドはセンターが作成したもので SHRT 及び WORK ボリュームの空きスペース量を表示するものです。ボリュームごとの全空きスペース量と、連続したスペースとして確保できる空きスペース量の大きいもの 5 つを表示します。スペースの単位はシリンダです。

このコマンドで比較的大きなスペースを必要とするデータセットを作成する場合にあらかじめ十分な空きスペースがあるかどうかを調べスペースの初期量、増分量を正確に見積もることができるようになります。使用法が分からないときは、CHELP C (LISTDSK) とキーインしてく

ださい。

LISTDSK [{ALL/SHRT/WORK}]

ALL : SHRTとWORKのボリュームの空きスペース量を表示

SHRT : SHRTボリュームの空きスペース量を表示

WORK : WORKボリュームの空きスペース量を表示

使用例

LISTDSK WORK

VOLUME/UNIT	UNUSE	UNUSE(LARGEST) : CYLINDERS				
-----	(TOTAL)	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)
* IMS067/WORK	541	517	21	2	0	0
* IMS068/WORK	501	280	185	27	7	0
* IMS069/WORK	519	494	10	10	4	0
* IMS070/WORK	503	481	16	6	0	0
* IMS071/WORK	530	504	20	5	0	0
* IMS072/WORK	505	439	52	12	1	0
* IMS073/WORK	549	549	0	0	0	0
* IMS076/WORK	552	548	3	0	0	0
* IMS077/WORK	39	3	3	3	2	2

(2) データベース STERIC を起動するための STERIC コマンドの登録

コマンド名 : STERIC

機能 : データベース STERIC を起動する

パラメータ : な し

6.3 TSSコマンド (QCLDB2) について (No.33)

QCLDB2 コマンドは、量子化学文献データベース (QCLDB) の簡易検索システムを起動します。このシステムは ORION による検索に比べ、より細かい検索条件を課すことができます。(例として中間一致)。

コマンドについての説明は、CHELP コマンドで得ることができます。また、サブコマンドの使い方等より細かな解説は QCLDB2 のサブコマンド「WHAT」, 「HOW」, 「HELP」によって得ることができます。

6.4 磁気ディスク入替に伴う利用者への注意とお願い (No.34)

前号 (No.33) でもお知らせしたように、年末に磁気ディスクをより大容量の H-8598 型に置換え全容量を 14 GB から 32 GB へ拡張します。従来 1トラック 19 KB であったものが 47 KB になりま

すので、利用者のファイルを新しいディスクに移行するにあたってトラブルの発生を避けるため、またディスクのスペースを有効に使用するため利用者の協力をお願いします。利用者の積極的な協力がないとシステム全体として数GBの無駄が発生し、増設の価値が半減する恐れがあります。下記の説明をよく読んで適切な対策をとってくださるようお願いいたします。

(1) 新旧ディスクの比較

OS専用ディスクとして従来のH-8595型が5000MB残りますが、ユーザ用は全て新しいディスクになります。新旧を比較すると次のようになります。

	新 (H-8598)	旧 (H-8595 / 8576)
1 ボリュームあたりの容量	630 MB	317 MB
1 ボリュームあたりのシリンダ数	885 CYL	555 CYL
1 シリンダあたりのトラック数	15 TRK	30 TRK
1 トラックあたりの容量	47476 Byte	19069 Byte
全ディスクのボリューム数	44 個	40 個
全ディスクの容量	27720 MB	12700 MB

旧ディスクから新ディスクへデータセットを移行すると占有するスペースが次の a) と b) のように増加します。データセットはトラック単位でスペースを占有しどんなに小さくとも1トラックを使います。

a) ブロックサイズが19069バイトでRECFMがVBSのデータセット。分子積分のデータセットなど書式なしのファイルに多い。

旧ディスク		新ディスク		比
TRK	KB	KB	TRK	
1	19 →	47	1	2.49
2	38 →	47	1	1.25
3	57 →	94	2	1.49
4	76 →	94	2	1.25
5	95 →	141	3	1.49
6	114 →	141	3	1.25
7	133 →	188	4	1.42
8	152 →	188	4	1.25
9	171 →	235	5	1.38
10	190 →	235	5	1.25

このようなFORTRANの書式なしのファイルはDD文のBLKSIZEを変更することで無駄をなくすることができます。(後述)

b) ブロックサイズが3120バイトでRECFMがFBのデータセット。FORT, CNTL, DATAなどTSSで作るデータセットに多い。

旧ディスク		新ディスク		比
TRK	KB	KB	TRK	
1	19 →	47	1	2.49
2	38 →	47	1	1.25
3	57 →	94	2	1.66
4	76 →	94	2	1.25
5	95 →	94	2	1.00
6	114 →	141	3	1.25
7	133 →	141	3	1.07
8	152 →	188	4	1.25
9	171 →	188	4	1.11
10	190 →	188	4	1.00

このようなカードイメージのファイルは、区分データセットにまとめることで無駄をなくすることができます。

(2) 59年度および60年度のデータセットの容量の上限値について

60年1月から3月までは申請書で許可されている上限値に1.3を掛けたのを実際の上限値として再設定します。従って申請書の許可値と計算機によって出力される保存および短期のデータセットの上限値がこの期間は異なります。プロジェクトによっては1.3では納まらない場合もあるのでできるだけ移行前にデータセットの整理をしておいてください。また利用者の所有するデータセットの種類、個数がそれぞれ異なり移行後の占有スペースが1.0倍から最大2.5倍にわたるので一時的に各メンバーに割り当てる保存データセットの上限値を人数割りからプロジェクトの上限値に揃えます。代表利用者は従来どおりとします。

例 (保存データセットの許可値が3MBの場合)

	旧	新
プロジェクトの許可	3MB	3.9MB
代表利用者	3MB	3.9MB
共同利用者1	0.6MB	3.9MB

共同利用者 2	0.6 MB	3.9 MB
共同利用者 3	0.6 MB	3.9 MB
共同利用者 4	0.6 MB	3.9 MB

各利用者ごとに上限値を再設定したい場合は代表利用者が ACCOUNT コマンドによって次のように変更できます。

READY

ACCOUNT

C (AB1 CD2) NT 1 (2000) 2 MBに変更

END

60 年度の利用申請では保存データセットの標準値は 4 MB、短期データセットの標準値は、200 MB とします。これを超えるスペースを必要とする方は、ファイル移行後の使用スペース量を調べそのデータをもとに 60 年度の利用申請を行ってください。ファイル移行時におこなう 1.3 倍の調整は移行時のみで 60 年度の新規申請にたいしては適用しません。

(3) 保存データセットについて、ファイル移行の前に利用者にしてほしいこと

データセットの新しいディスクへの移行（保存データセット（SAVE ファイル）のみ対象）はセンターで行いますが 1 トラックあたりの容量（19 KB と 47 KB）に違いがあるため 1.1 ～ 2.5 倍（平均約 1.2 倍）各利用者の占有スペースが増加する見込みです。従って現在許可されている上限値を 1.3 倍に上げる（例 3 MB → 3.9 MB）処置をする予定ですが、無駄をできるだけ少なくするように次のような改善を利用者をお願いします。増加が 1.3 倍を越える場合にはトラブルが発生する可能性がありますので必ず以下の準備をしてください。

○ 不要なデータセットは MT に移す（MTM コマンド）か、または消去する（DLN コマンド）。

○ ファイル移行では未使用領域もいっしょに移行されるので各ファイルの割り当て量と未使用量を調べ（LISTSP コマンド、LISTC 2 コマンド）不要な未使用領域は解放する（RLSE コマンド）。

○ 小さなデータセットでも最低 1 トラックを必要とするので順データセットはできるだけ区分データセットにまとめる。1 トラックに満たない順データセットが多くあるとすぐに上限値を越えます。

FORT, CNTL, DATA についてそれぞれカードイメージの複数の順データセットを区分データセットにまとめるコマンド（PSCOLL コマンド）を用意しましたのでご利用下さい。詳細については CHELP コマンドで御覧下さい。

使用例

PSCOLL [COLLECT. FORT]

データセット識別名が FORT の順データセットを区分データセット（COLLECT. FORT）にま

とめる。識別名 (FORT, DATA, CNTL) で対象となるデータセット群が決まります。

- ・ A. FORT → COLLECT. FORT (A)
- ・ B. FORT → COLLECT. FORT (B)
- ・ X. A. FORT → 単純名が2以上あるものは対象外
- ・ A. DATA → ここでは FORT のみのため対象外

(4) 新ディスク使用時の注意

○ 1トラックの容量が 19 K B から 47 K B になるので DD 文の SPACE=(TRK, (10, 5)) の指定は従来と異なったスペース量となります。ALLOC コマンドも同様です。

○ 1 シリンダあたり 30 トラックから 15 トラックになり従来の半分のトラック数となります。

○ 1 ブロックの大きさは 23476 バイト以下を指定する。FORTRAN の書式なしのファイルの場合は DCB の指定を DCB=(RECFM=VBS, BLKSIZE=23476) とする (書式なしファイルについて詳しくは (5) を参照)。これ以上の値を指定すると 1 トラックに 1 ブロックしか入らなくなりスペース効率が落ちてしまいます。(1 トラックの容量は 47476 バイトですが OS で指定可能なブロックサイズが 32760 バイトなので実際には 23476 が最も望ましい) データセットの移行ではブロックサイズはそのままになりますのでできるだけ早く DD 文の変更, またはプログラムの書換えをしてください。

なお, 60 年 1 月より FORTRAN の書式なしデータセットを作成する場合, DD 文で DCB が省略されると標準値として RECFM は VBS に, BLKSIZE は 23476 となります。また, DD 文の DCB パラメータの BLKSIZE の値が 23476 をこえて指定されている場合は JCL エラーになります。

	59 年 12 月まで		60 年 1 月より
RECFM	V S	→	V B S
BLKSIZE	8 0 0	→	2 3 4 7 6

○ 陽にトラックの容量 (BLKSIZE) に依存している直接アクセスファイルを扱うようなプログラムはなるべく早く BLKSIZE を最適値に変更してください。

○ 他のセンターにデータセットを持って行く場合には, 持ち込み先のセンターで使用できるディスクの種類に注意する必要があります。持ち込み先のセンターにブロックサイズが 23476 バイトの順または直接データセットのファイルが作成できるディスクがない場合には, 分子研のセンターで 19069 バイトまたは 6200 バイトでデータセットを作成したものを持って行かなければなりません。ただし, このブロックサイズでは分子研のセンターでのスペース効率・I/O 効率が悪くなるので, センター間でデータの移動が必要なデータセットについてはファイルの互換性のよいカードイメージ形式でも出力できるようにプログラムを工夫しておくとう便利です。

○ 58年7月20日以前のコンパイラで作成したロードモジュールはコンパイルしなおしてください。

(古いコンパイラが新ディスクをサポートしていないため)

○ 新規のデータセットにロードモジュール (オートコールライブラリを含む) を作成する場合、以前と同じファイルの形式にしたい場合、DD文で次のようにDCBを指定してください。

DCB=(RECFM=U, BLKSIZE=19069)

(5) FORTRANの書式なしファイル (RECFM=VBS) のブロック長の変更

FORTRANの書式なしファイルは可変長(V)でブロック化(B)され複数のブロックにデータがまたがって(S:スパンド)いる形式(VBS)になっており1トラックの大きさに制約されないうで効率よくデータを記録できるようになっています。次の図は20Kバイトの大きさをもつ実数型配列(3つ)を別々のWRITE文で出力したときどのように記録されるかを示したものです。旧ディスクのファイルを単純に移すと、新ディスクとのトラックあたりの容量差から約9Kバイトずつ使われずに無駄になりますが、DD文でBLKSIZEを19069から23476に変更するだけで、利用者のプログラムを修正することなく無駄をなくすることができます。

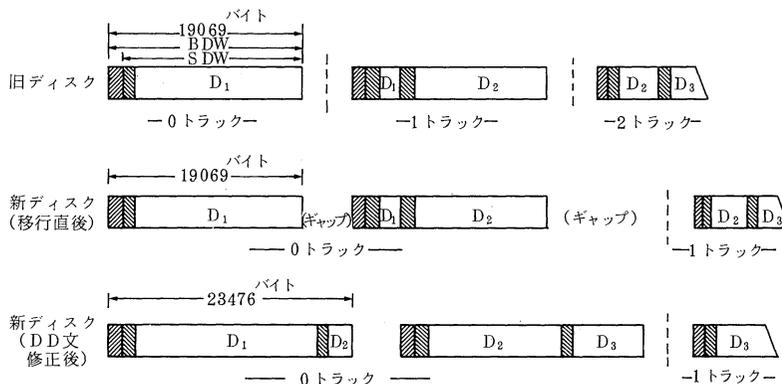
プログラム例

```
REAL * 4   D1 (5000), D2 (5000),
           D3 (5000)

WRITE (2) D1
WRITE (2) D2
WRITE (2) D3
```

DD文でのDCB指定

DCB=(RECFM=VBS, BLKSIZE=23476)



■ BDW ブロック長 (19069 又は 23476, BDW・S DW も含む)
 ■ S DW レコード長 (記録されているデータの長さ, LRECL とは異なり内部での記録の長さ)

(6) その他の注意

ファイルの移行について、センターは万全の注意を払って実施しますが、トラック容量の異なるディスク間の移行は初めての経験ですから不測の事態が発生しないとも限りません。重要不可欠なデータセットについてはあらかじめ磁気テープにバックアップをとっておいてくださるようお願いいたします。

(7) 分子研ライブラリの使用上の注意

ライブラリを使用するためのJCLをお持ちの方はI/Oの多いデータファイルのブロックサイズを大きくするよう変更する必要があります。

新しいディスクH-8598でのFORTRAN Direct Accessをサポートしていない古いコンパイラを用いて作った古いライブラリロードモジュールはセンターで再コンパイルし、新しくロードモジュールを作り、置き換えます。この作業は新ディスクへの変更と同時にを行います。

また、ディスクのスペース効率向上のためライブラリロードモジュールは再リンクを行って大きいブロックサイズのものとして置き換えます。この作業は新ディスクへの変更後に行う方針です。

(8) 分子研ライブラリプログラムの提供者の皆様へ

磁気ディスクの入れ替えに伴い、センターではライブラリプログラムのロードモジュールを新しく作り直します。

また、I/O効率の向上のためI/Oバッファを大きくする等の変更をすることを考えております。その際プログラム提供者の方々のご協力を求めることがあるかもしれませんが、よろしくお願いたします。現在プログラムを開発、整備中の方はI/O効率の点、ANS 77化、互換性の向上等を念頭におきながら作業をお進めくださいますようお願いいたします。

6.5 HAP FORTRAN 77 および VECTIZER の公開について (No. 33)

プログラムをスーパーコンピュータ (HITAC S-810) 向きに書き換えることができるように HAP FORTRAN 77 および VECTIZER を公開しました。VECTIZER はベクトル化支援ソフトウェアで、プログラム単位や D ループごとの実行比率、ベクトル化不能要因などについての情報を示すことにより、プログラムのチューンナップを容易にするものです。このコンパイラで得られるベクトル化したロードモジュールは当センターの計算機では実行できません。

NOHAP オプションの指定を行えばスカラー命令で実行されます。皆さんのプログラムのベクトル化の検討のためにご利用ください。現在当センターでこれらのソフトウェアを利用するためには JOBLIB で SYS 1. FORTHLIB を定義する必要があります。

HAP FORTRAN 77, VECTIZER を使用するためのカタプロには次のものが用意されています。

FORTHC	コンパイル
FORTHCL	コンパイル, リンク
FORTHCLG	コンパイル, リンク, ゴー
FORTHCG	コンパイル, リンク, ロードゴー
FORTHG	ロードゴー
FORHLG	リンク, ゴー
FORTHGX	ゴー
VECTDOS0	ドゥソース (ベクタイザ)
VECTMAP	マップ (ベクタイザ)

〔使用例〕

- (1) HAP FORTRAN 77 でコンパイル, リンク

```
//AB1CD2X3 JOB PSWD, CLASS=C, REGION=2048 K
//JOB LIB DD DSN=SYS1.FORHLIB, DISP=SHR
// EXEC FORTHCL
//FORT.SYS IN DD DSN=@A.FORT, DISP=SHR
```

- (2) HAP FORTRAN 77 で NOHAP オプションを用いてコンパイル, リンクおよび実行 (ベクトル命令は生成せずスカラー命令で実行)

```
//AB1CD2X4 JOB PSWD, CLASS=C, REGION=2048 K
//JOB LIB DD DSN=SYS1.FORHLIB, DISP=SHR
// EXEC FORTHCLG, PARM.FORT='NOHAP'
//FORT.SYS IN DD DSN=@B.FORT, DISP=SHR
```

- (3) ベクタイザ (ドゥソース) を使用

```
//AB1CD2X5 JOB PSWD, CLASS=C, REGION=2048 K
//JOB LIB DD DSN=SYS1.FORHLIB, DISP=SHR
// EXEC VECTDOS0
//FORT.SYS IN DD DSN=@C.FORT, DISP=SHR
```

〔マニュアル, 資料など〕

最適化 FORTRAN 77, HAP FORTRAN 77 使用の手引き 8080-3-258-50

東京大学大型計算機センターニュース Vol. 16 No. 1・2

VECTIZERの有効な使い方 (唐木)

6.6 V.22型モデムによる電話回線（1200BPS）のTSSサービスについて（No.34）

1200BPSでの電話公衆網によるTSS利用は従来から5回線のサービスを行ってありますが、使用できるモデムおよび音響カプラーはすべてVADIC社のVI3400JおよびVI3412Jに限られています。しかし最近では下記の特長をもつモデム（V.22型）が発売されています。

- ① 低価格（約18万円）でNCUを内蔵している。
- ② 近い将来の網間接続サービス（公衆電話網＋DDXパケット網）によるTSS利用にもそのまま利用できる。

特に今1200BPSモデム（カプラー）を購入する場合には②の用途を睨んで現用公衆網を利用できるため魅力があります。したがって当センターでは、とりあえず1200BPSの1回線（53－6113）のみをVADIC型からV.22型へ移行して新型モデム（V.22型）によるサービスを準備しています。当センターで利用できるV.22型モデムは当面FACOM1931Hモデム（NCU内蔵）のみとします。

使用可能時期は来年1月頃を目途としていますが、詳しくはセンター事務局またはテレフォンサービスにてお確かめください。

この措置により当センターの電話回線サービスの内訳は次のようになります。

1200 BPS	VADIC型	53－6114（代）～6117（4回線）
	V.22型	53－6113（1回線）
300 BPS		53－6111（代）～6112（2回線）

6.7 電子計算機センター運営委員会議事報告（No.34）

第7回運営委員会が昭和59年9月1日（土）に開かれました。この席での報告、議事内容、決定事項のうち利用者に関わりのある事項を中心にお知らせします。

1. 計算機稼動・利用状況および電力使用状況報告

M-200H×2システムの稼動状況・障害状況、ジョブ件数・CPU時間が資料に基づいて報告された。この他に、分野区分別使用状況、電話回線によるTSS利用状況、端末設置状況の報告がなされた。次に空調系統の見直しによる節電対策と電力使用状況について説明がなされ、途中経過（7月末現在）で約5%（前年度実績比）の節電が実現されていることが示された。

2. 昭和59年度予算と使途予定報告

3. 昭和59年度前期計算機時間配当、追加状況報告

4. 昭和59年度前期施設利用旅費割当状況報告

例年と同じ割り当て方針すなわち遠方または小規模の研究室を優先させるという方法で合計6件のプロジェクトを選び出し、計205,610円を前期分として割り当てた旨が資料に基づいて報告され

た。

ライブラリ開発状況報告

分子研プログラムライブラリの開発状況が資料に基づいて報告された。

(1) 分子科学プログラムパッケージ

前回（第6回）運営委員会以降新たに6件のプログラムが追加となり、総数110件となった。

(2) QCPEプログラム

前回委員会以降新たに登録はなく、総件数は411件である。

(3) NUMPACライブラリ

前回委員会以降新たに104件のプログラムが追加となり、総数707件となった。

8月末時点での分子研プログラムライブラリ開発計画（計8件）と個々の旅費、謝金の割り当て状況が資料に基づいて報告された。また応用プログラム相談員およびセンター業務補佐に対する謝金の支払い状況が報告された。

5. データベースの開発状況報告

データベースの開発状況が資料に基づいて報告された。

(1) 新規登録

東海大 米田幸夫教授開発の STERICデータベースが新たに登録され、既存の QCLDB, CMQCA, CHEMICS, IR2 と併せて総計5計となった。

(2) 追加更新

① QCLDBは1988年のデータ1177件が追加され総件数6153件となった。

② IR2はデータが追加され総件数11200件となった。

6. スーパーコンピュータの導入について

(1) 昭和60年度概算要求の内容が資料に基づいて説明された。スーパーコンピュータ関係の要求は借料など昨年と同レベルである。

次にセンター長より本年度要求の見直しについて説明があり、緊急にスーパーコンピュータを導入することの必要性があるので各委員にも協力願いたい旨の要請があった。

(2) ワークショップの活動については後期はよりいっそう活発に行いたいとの意向が示された。

(3) 次期システム検討委員会はメンバーは昨年通りで、引き続き今年度も活動する旨が述べられた。ベンチマークテストについては、その後新しい機種等が出てきているものを含めてこの秋から再度実施する予定が述べられた。

(4) 概算要求通過の場合の機種選択、導入のスケジュールの概要が述べられた。

(5) センター側から各委員に対して今後の検討項目について提案が求められた。この中で、拡張メモリを含めたベンチマークテストについても秋のうちに詰めておく必要があるなどの意見が述べ

られた。これに対し、I/Oまわり、新機能を含めた形で調査していきたいとの回答がなされた。

(6) 東北大、阪大、北大などの他大学および他研究所のスーパーコンピュータ導入のための活動状況が話された。

7. 昭和60年度運用方針について

60年度の運用方針は現実には60年度概算要求の結果に大いに依存するが、小規模な変更は59年度後期から行うことになっており、これらは前回委員会の59年度運用方針として挙げた各種機器入れ替えのうちほとんどが実現することになったものである。

(1) スーパーコンピュータ用ソフトウェアの導入・公開（8月中旬）

HAP FORTRAN 77とベクタイザを導入、一般利用者にも公開した。またライブラリの中で使用頻度の高いものは、このソフトウェアを用いてテスト中である。

(2) DDXパケット網を使ったTSSサービスの開始（10月中旬）

DDXパケット網を使った通信のできる新型CCP（通信制御装置）および関連ソフトウェアを導入する。これにより遠隔地利用者はずっと割安にTSS利用を行うことができる。従来の公衆電話網との網間接続サービスは、電々公社から郵政省に提出される申請認可の遅れにより早くても11月初旬からになる見通しである。DDXパケット網への直接加入申請を行えば、申請時間（約3ヶ月）と初期費用（11～14万円）がかわるが、利用は10月中旬以降可能である。

(3) 大容量磁気ディスクの導入（12月下旬）

新規導入する大容量磁気ディスクの概要が説明された。入れ替えにより総ディスク容量は14GBから32GBへと増大することになる。ディスクの入れ替えに伴い新たに発生する問題点について説明がなされた。

(4) 空調機パッケージの入れ替え（12月下旬）

緊急営繕要求による空調機パッケージ（7台）の入れ替えが認められたため、今年度と来年度の2回に分けて入れ替えを行う。低消費電力型となった新型パッケージ（冷媒レヒート方式）の性能が説明された。

8. 昭和59年度後期申請審査について

まず59年度後期CPU時間配当資料に基づいて所外、所内の計算機時間配分が検討された。所外に関して新配当分は昨年並みであったのに対し、所内は申請時間が非常に大きく、新配当分がきわめて少なく、今後の申請に対して問題が残った。この件については、センター側でもう少し様子を見て電力量の使用状況と見合わせて検討していくことになった。

続いて協力研究12件、施設利用2件の個別申請審査が行われた。議論は主に評点の差の大きい（4以上）もの3件（いずれも協力研究）について行われ、評価通りに承認されることになった。しかし、一つのプロジェクトからの申請書は記述が簡単すぎるとの意見があり、委員会の意向を委

員長より受入れ教官に口答で伝えるということでした。

9. 追加申請審査について

追加申請審査についてはすでに郵便で各委員に送付され、採点ずみのものについて報告の形で行われた。このうち特に問題のあったプロジェクトの申請に対しては、センターから送られた警告文とその回答書が添付説明された。

6.8 磁気ディスクの変更に伴う利用者への注意事項 (No. 35)

昨年末12月22日から今年1月6日までの作業によって磁気ディスクは従来のH-8595タイプからH-8598タイプへ全面的に入れ替っています。これに伴う全般的な注意事項については6.4項をご覧ください。

1. ディスク入替以前作成のロードモジュールについての注意

- (1) 58年7月20日以前のコンパイラで作成したロードモジュールはコンパイルしなおしてください。(古いコンパイラが新ディスクをサポートしていないため)
- (2) オーバーレイ構造をもったロードモジュールは、センター側の作業の都合で作成日付が変更されています。通常の利用には障りはありませんが、この日付を何らかの管理に使っている場合には問題がありますので、該当者はセンター事務室またはプログラム相談室までお申し出ください。

2. MTMやオープンMTで磁気テープからディスクへデータセットを移動する場合の注意

- (1) 新しいディスクはトラック容量、シリンダ容量が異なるのでスペース量の指定の際、無駄が生じないように注意する。
- (2) MTMでは、59年12月以前のMTM情報が古いディスクのスペース(トラック数)になっているので、メニュー画面に示されるスペース量をそのまま用いると多すぎるため、およそ3/4程度に減らす。
- (3) LISTSP, LISTC 2 コマンドで各ファイルの割り当て量と未使用量を調べ、RLSE コマンドで不要な未使用領域は解放する。ただし、FORTRANの書式なしファイル(RECFM=VBSまたはVSのもの)はRLSEコマンドが使えないので、作成時のスペース量の指定に十分注意してください。

3. GPSLによるプロッタファイル出力時の注意

GPSLを使ってXYプロッタ用の作画ファイル(FT 20 F 001)を作成する場合には次の下線部分の指定を明確に行うようにしてください。これが省略されるとRECFM=VBSが仮定されてオフラインXYプロッタにテープを掛けても作動しません。

(例) コンパイルしてすぐ実行する場合

```
/// EXEC FORT7 CG
```

//FORT. SYS IN DD *

ソースプログラム

//GO. FT20 F001 DD DSN=@PLOT, UNIT=SHRT, DISP=(NEW, CATLG),
SPACE=(TRK, (10, 1), RLSE), DCB=(RECFM=VS, BLKSIZE=488)
//GO. FILE01 DD DSN= 'SYS1.MTABLE', DISP=SHR
//

6.9 HOSOSについて (No. 35)

北海道大学大型計算機センター開発のプログラム相談システムをレベルアップしました。PL/Iのメッセージ等が加わり、さらに充実したものになりました。

6.10 網間接続サービスによるTSS利用について (No. 37)

速報No. 31でお知らせしていましたDDXパケット網と公衆電話網との網間接続サービスが日本電信電話株式会社 (NTT) によって4月1日より開始されました。これに伴って当センターでは網間接続を利用したTSS利用サービスを開始しましたので御利用ください。以下に本サービスの特徴、申請方法、利用方法について簡単に紹介します。

1. 特徴

- (1) DDX網は従来の電話公衆網に比べて回線品質が格段によく、信頼性が高い。
- (2) DDXパケット網の料金体系は従量制となっているため、原則として接続時間には関係がなく、やりとりしたデータ量に比例して課金される。

ただし、網間接続利用の場合には網間接続料として3分ごとに20～30円の課金が付加される。

- (3) DDXパケット網は従来の電話のように距離依存性がほとんどなく、東京でも北海道でも、九州でも全国からほとんど同じ料金 (128 Bあたり0.4～0.6円) で利用できる。

2. 利用形態

DDXパケット網を利用するには、本来は専用のパケット端末が必要であるが、当センターでは従来からよく使用されている無手順端末でもそのままDDXパケット網および網間接続で利用できる方法をとる。また回線スピードは、従来の電話網と同じく300 BPSと1200 BPSとする。

3. 網間接続のサービス区域と今後の予定

網間接続の利用申請を行うにあたって、利用者は自分の地域が網間接続のサービス区域に入っているのかどうかをNTTへ確認しなければならない。昭和60年度に網間接続サービスが開始されたのは以下の21区域であるが、今後一年間でその数は286区域にまで増加する予定である。

札幌，仙台，東京，横浜，日吉，川崎，登戸，千葉，新潟，金沢，名古屋，静岡，大阪，豊中，千里，京都，神戸，広島，松山，福岡，北九州

4. 利用者の準備すること

(1) NTTへの申請

「第2種パケット交換サービス契約申込書（電話網データ端末用）」をNTTへ提出しなければならない。手数料は800円である。

なおこの際付加サービスの着信課金の指定はしないこと。

(2) 音響カプラーまたはNCU（網制御装置）＋モデムの用意

300 BPSでは従来電話網で使われていた音響カプラーの多くがそのまま使用できる。しかし、1200 BPS用に使われていたカプラー（VADIC 3412 J）はここでは使えない。

このため、1200 BPSでは新たにNCU＋モデム（CCITT V. 22 準拠）を購入設置する必要がある。価格は18万円前後で市販されているようである。

（利用可能モデムの例）

富士通 F 1931 HA

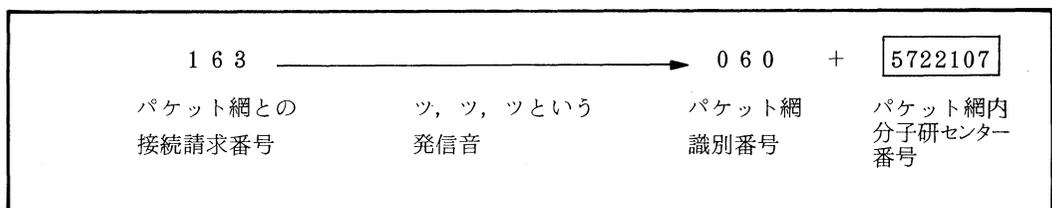
日本電気 DATAXN - 1212

(3) センターへの端局設置申請書の提出

従来の電話公衆網用端局設置申請書とは別に提出のこと。

5. 接続の仕方

パケット網との接続要求番号のあと、パケット網識別番号、パケット網内のセンター番号の順にダイヤルすることによって通信回線が設定される。



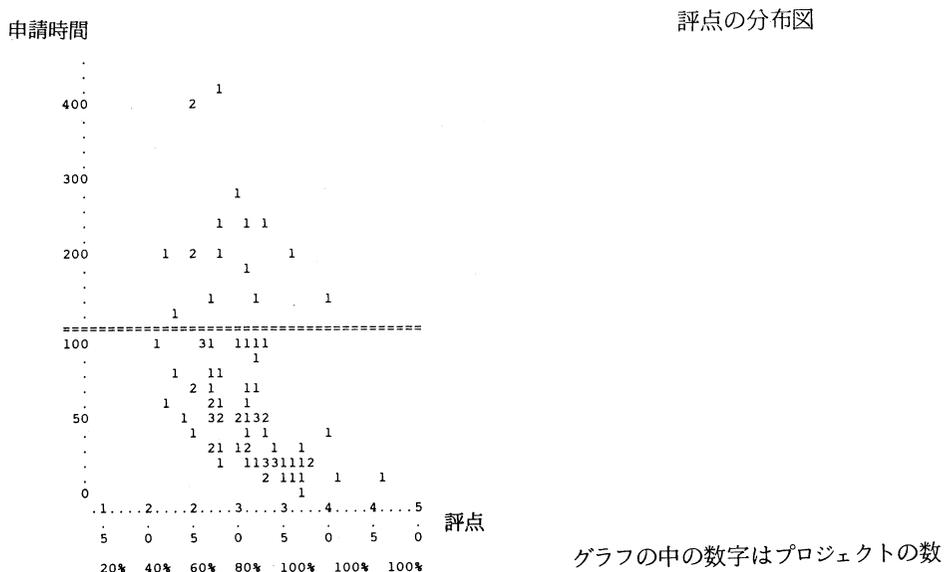
6.11 昭和60年度利用申請の審査結果について (No. 37)

第8回電子計算機センター運営委員会における審査の結果、各プロジェクトの評価及び許可時間が決まりました。評点は運営委員会の個別の採点（0～5点）の平均値に基づいています。許可率は、所外利用者に配分可能な全CPU時間に依存する簡単な関係式を用いて評点及び前年度使用率から算出されます。許可時間は申請時間に許可率をかけたものです。

今年度の平均許可率は 70 % になりました。

各申請の評価は申請書に記述された研究内容、研究計画、継続の場合は利用報告や発表論文などにあらわれた過去の実績、また関連分野の場合分子科学への波及効果の期待などが考慮され、委員の採点と委員会における討議によって決められます。また評価には申請時間が研究内容や共同研究者数に対して適切かどうかの判断ももちろん含まれます。研究内容が高く、計画のしっかりした、申請時間の妥当な提案をするよう努めてください。

次図に見られるように評点は 2.11 から 4.67 まできわめて幅広く分布しており、これによって許可率も 38 % から 100 % にわたっています。



6.12 電子計算機センター運営委員会議事報告 (No. 37)

第 8 回運営委員会が昭和 60 年 3 月 18 日 (土) 開かれました。この席での報告、議事内容、決定事項のうち利用者に関わりのある事項を中心にお知らせします。

1. 昭和 59 年度校費の用途報告
2. 計算機稼動・利用状況および電力使用状況

M-200 H×2 システムの稼動状況、ジョブ件数・CPU 時間が説明された。この他に分野区分別使用状況、電話回線による TSS 利用状況、端末設置状況の報告がなされた。

この中で電話回線 300 BPS 2 回線の利用率が低く、1 回線にする案も示されたが DDX の普及と見合わせて検討することとし、当分は 2 回線のままとすることで了承された。また、59 年 12 月末の新型空調パッケージへの入替による節電の状況などが説明された。

3. 昭和 59 年度 計算機時間配当, 追加状況

昭和 59 年度の計算機利用時間割り当て状況が報告された。3 月 16 日現在で所内外を含め、プロジェクト数延 220 件 (延 604 名), CPU 時間で申請 14,759 時間, 許可 10,740 時間である。

前回警告文を発することになったプロジェクト (分野に問題のあった 4 件と, 申請の書き方に問題のあった 1 件) に対する送付文面が示された。次に, 追加申請の処理状況が一覧表によって示された。

この中で郵送によって採点評価されたもののまとめとコメントが述べられ, 特に評価点数に開きがあるなど問題のあるプロジェクトについての検討が行われ, それぞれ審査結果の通りに承認された。

4. 昭和 59 年度 計算機施設利用旅費の割当状況

計算機施設利用旅費として前期は 205,610 円を 6 プロジェクトへ, 後期は 296,160 円を 7 プロジェクトへ割り当てた。割り当て方針は例年通り, 遠方, 小規模の研究室を優先することとした。ただし, 最後の 1 プロジェクトに関しては, 3 月半ばに旅費追加があつて急きょ割り当てたので, やや原則をはずれる割り当てになったとの説明があつた。

5. 昭和 59 年度 ライブラリプログラム開発状況

プログラムライブラリの開発状況が説明された。

(1) 分子科学プログラムパッケージ

前回 (第 7 回) 運営委員会以降新たに 9 件のプログラムが追加となり総数 119 件となった。

(2) QCPE プログラム

前回委員会以降新たに登録はなく総件数は 411 件である。

(3) NUNPAC ライブラリ

前回委員会以降新たに登録はなく総件数は 707 件である。

分子科学プログラムパッケージの管理・運営について委員から質問があり, 古いプログラムの使い方を示す使用上の指針が必要であり, 不要なプログラムは整理していくような運用も必要であるとの意見が示されたためセンターの今後の検討事項とすることになった。

6. 昭和 59 年度 データベース開発状況

登録データベースの現状と開発の現状計画が示された。現在, 開発を外注しているデータベースは, QCLDB, IR2, STERIC, AODB の 4 件であり, AODB は大野公男氏 (北大) を代表者とする量子化学文献データベース研究会に今年度から新しく外注することになったものである。

続いて, データベースの追加・更新状況が報告された。

7. ライブラリプログラム開発計画およびプログラム相談

昭和 59 年度のプログラムライブラリの開発計画 (計 15 件) とその謝金, 旅費の支払い状況が示

された。また応用プログラム相談のためのセンター補佐員と業務、謝金の割り当て状況が示された。

8. 昭和60年度 予算内示について

昭和60年度の電子計算機経費として運営費と借料、導入経費の内訳、付属施設経費の予算内示額が示された。

続いて、新システムの導入活動状況の中間報告が行われた。

システム検討委員会では4月初旬には優先度付けを行い4月24日に運営委員会で結論を出したい意向である。

所長から研究所全体としての予算状況の報告がなされた。この中で60年度スーパーコンピュータ予算獲得により借料は増えたが運営費は従来通りであるため電気料等の問題が残っており、今後獲得の努力をしていくこと、所内での電力サポートの配慮を行いたい旨が述べられた。

同時にこの問題について解決策としての負担金の徴収の検討、消費電力量を抑えるための工夫など本委員会でも十分検討されるようにとの意向が示された。

9. 昭和60年度 計算機運用方針

昭和60年12月末までは現システム構成（M-200 H×2）でサービスを行い、昭和61年1月より新システムでサービスを行う。新システムの運用については機種決定後随時検討を行い、第10回運営委員会（60年9月）にて方針を決定する旨が述べられた。同時に要検討項目の内容が示され、議論が行われた。

この中で負担金については、運営費が前年通りであり、光熱水量費が増えていない問題に対する解決策のひとつとして議論され、いくつかの可能性が論じられた。新システムの運用方針については運営委員会以前にもいろいろ意見を聞かせてくださるようセンターより各委員に依頼がなされた。

10. 昭和60年度 計算機時間配分案

昭和60年度計算機時間配分案が資料に基づいて提案・議論された。問題点は主に所内と所外の許可バランスをどうするかという点にあり、所内・所外比があまり開くのは好ましくないとの観点から原案では所外の平均許可率を60%→70%へ上げること、従来100%（本年度12月からのみ70%）認めていた所内申請を一律90%に査定することになっている。所内を一律に下げることはリソースに限りがあることを所内ユーザにも認識してもらい意味で実施した方がよいとの見解が所長より示された。この点に関しては、所内でも了承を得ることとし、配分案（下記）が承認された。

(内：分子研所内，外：分子研所外 かつこ内は前年比%)

		58年度	59年度	60年度
4月分	申請 内	2876	3424 (+19)	3692 (+8)
	外	6879	8134 (+18)	7681 (-6)
	計	9755	11558 (+18)	11373 (-2)
(委員会現在)				
	許可 内	2876	3424 (+19)	3323 (-3) 一律 90%
	外	4915	5058 (+3)	5377 (+6)
	計	7791	8482 (+9)	8700 (+5)
	所外平均許可率	71%	62%	70%
	許可所内外比	37:63	40:60	38:62

11. 昭和60年度 利用申請審査

利用申請審査に入り，各委員によって予め評価採点された結果をまとめた原案をもとに個別申請について議論がかわされた。特に，評価点数に大きなばらつきがあるもの，点数の低いもの，申請分類などにつき変更や問題のあるものなどについて議論が行われた後，計算機審査結果が原案通り承認された。また，所外の全申請に対して従来と同様に前年度の利用率を点数に反映させることが了承された。

委員より申請審査の際にプロジェクトの論文出版状況を知ることが大いに評価の参考になるとの意見が出され，61年度からセンターの利用申請書の様式を変更して継続プロジェクトの場合には論文の出版状況を記入する欄を設けることになった。

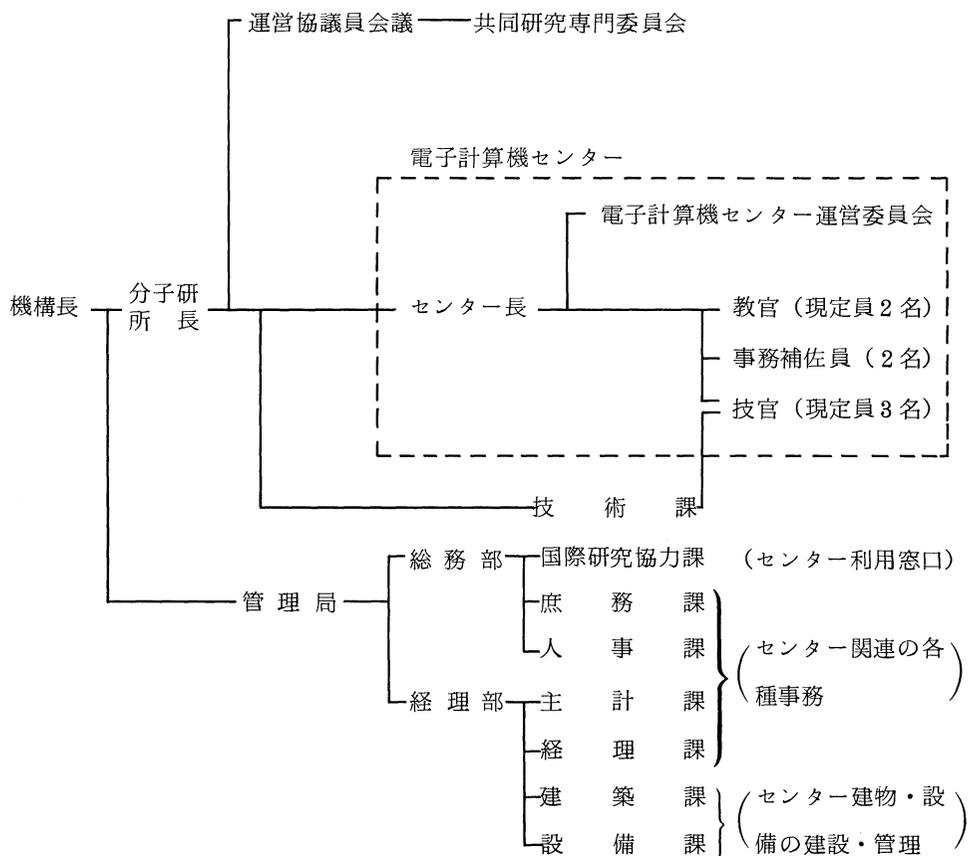
7. 資 料

7.1 センター関連組織

センター関連組織は図に示す通りである。

課題・協力研究の運営は運営協議員会議及びその共同研究専門委員会で行われる。

電子計算機センター運営委員会の規則と委員については資料7.2, 7.3, 7.4を参照されたい。



7.2 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則

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。

7.3 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター運営委員会規則

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1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、あらかじめ委員多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。

7.4 電子計算機センター運営委員会委員

(昭和58～59年度)

諸熊奎治	分子研理論第一部門教授，センター長	センター委員
柏木浩	分子研電子計算機センター助教授	〃
大野公男	北大理教授，分子研客員教授	分子研所内委員
正畠宏祐	分子研基礎光化学部門助教授	〃
土方克法	電通大教授	分子研所外委員
細矢治夫	お茶大理教授	〃
岩田末広	慶理工助教授	〃
平尾公彦	名大教養助教授	〃
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

(昭和60～61年度)

諸熊奎治	分子研理論第一部門教授，センター長	センター委員
柏木浩	分子研電子計算機センター助教授	〃
中村宏樹	分子研理論第二部門教授	分子研所内委員
北川禎三	分子研分子動力学部門教授	〃
大野公男	北大理教授	分子研所外委員
郷信広	九大理助教授	〃
塚田捷	東大理助教授	〃
寺倉清之	東大物性研助教授	〃
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

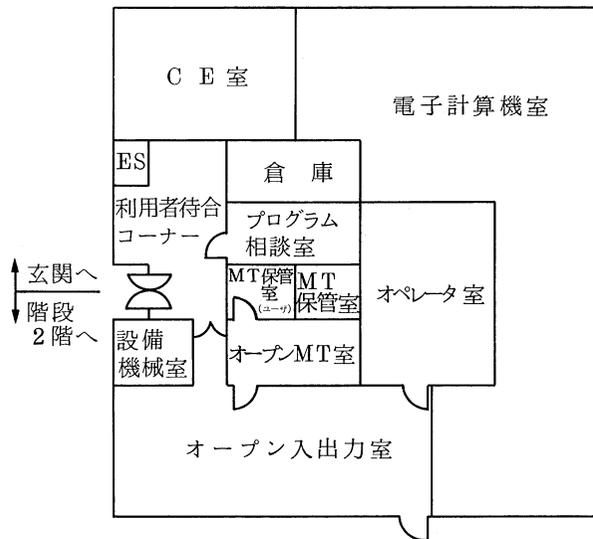
7.5 電子計算機センター職員（昭和60年6月現在）

諸熊奎治	センター長（併任）
柏木浩	助教授
長嶋雲兵	助手
伊奈諭	技官（係長）
西本史雄	技官
山本茂義	技官

中島 裕 紀 事務補佐員（昭和 59 年 9 月辞職）
 加藤 景 子 事務補佐員
 加藤 真由美 事務補佐員（昭和 59 年 10 月採用）

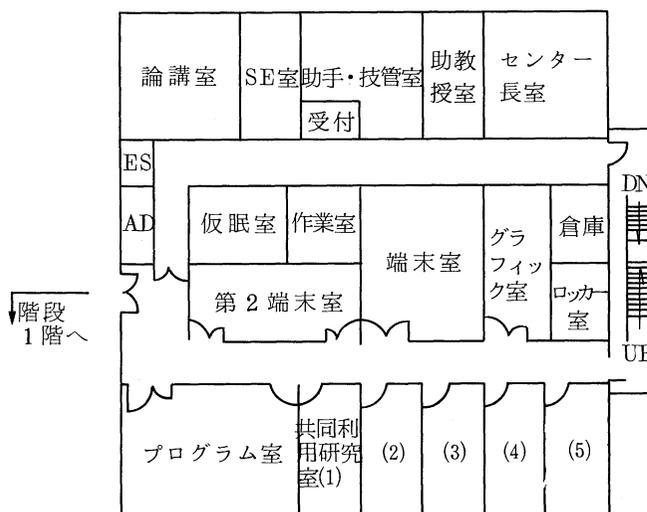
7.6 建 物 図

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，XYプロッタ出力，ジョブ状態表示のためのオープン利用室。
- (4) オープンMT室
オープンMTシステムの利用を行う。
- (5) ユーザ用MT保管室
ユーザ用MTを置くが，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 T S S 端末が置かれ，自由に利用できる。

4) グラフィック室

カラーグラフィックディスプレイやモノクロの蓄積型グラフィックディスプレイが置かれ自由に利用できる。

7.7 応用プログラム相談員一覧

斎藤 稔	名大理，分子研受託大学院生	昭和 59 年 4 月 ～ 昭和 60 年 3 月
神谷 健秀	東大工，分子研受託大学院生	〃
中村振一郎	分子研，特別協力研究員	昭和 59 年 11 月 ～ 昭和 60 年 3 月

7.8 端末設置状況（昭和 60 年 5 月現在）

(1) R J Eステーション

(分子研)	所内	実験棟	HT540 / 30
		研究棟	〃

	サービスプログラムメッセージ	8091-9-068
MSL II	MSL II 機能編第1分冊	8080-7-120
	" " 第2分冊	8080-7-121
	" " 第3分冊	8080-7-141
ジョブ管理	ジョブ制御言語	8091-3-017
	ジョブ管理解説	8091-3-016
	リンケージエディタ/ローダ	8080-3-301
	リンケージエディタ/ローダLNK/LD2	8090-3-317
データ管理	データ管理解説	8091-3-042
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
	" " 端末使用の手引	8090-3-215
数学関係	数学関数	8080-3-218
SAFE	SAFE使用の手引	8090-3-127
RUNOFF	RUNOFF	8090-3-312
PREVIEW	PREVIEW	8080-7-130
LINEPLOT	LINEPLOT	8080-7-129