

I 部

目 次

寄 語	分子研助教授 大峰 巖	1
1. S-820/80の導入とセンターの10年		
	分子研電子計算機センター 柏木 浩	2
2. スーパーコンピュータ・ワークショップの活動		10
3. 計算機システムの運用と使い方		12
3.1 システムの特徴		12
3.2 S-820/80のハードウェア		13
3.3 S-820/80の性能		13
3.4 ジョブクラスの構成		14
3.5 利用点数の改訂について		15
3.6 JCL MAIN文での新スーパーコンピュータの指定について		15
3.7 新FORTRAN (21-00)の利用法について		15
3.8 ワークステーション2020Eの導入と利用について		21
3.9 ファイル転送ユーティリティIFITの使い方について		23
3.10 2020E用MS-DOSエディタFINALの導入と使い方		23
3.11 各種インフォメーションの電子化について		25
3.12 ファイル転送機能KERMITの試験的公開について		26
3.13 KAMUYコマンドの新設		27
3.14 データセットの保護について		28
4. 研究開発レポート		29
4.1 分子軌道計算結果の modeling	分子研電子計算機センター 伊奈 諭	29
5. 一般報告		37
5.1 データベースやプログラムの著作権の帰属について		37
5.2 分子研ライブラリプログラムの収集と開発		38
5.3 データベース開発状況		46
5.4 プログラム相談		46

5.5	研究会, 学会報告	47
6.	昭和62年度稼働状況および利用者数	49
6.1	利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数	49
6.2	システム稼働状況	49
6.3	CPU時間	50
6.4	ジョブ処理件数	51
7.	速報技粋 - 速報 (No. 50 ~ 55) -	52
7.1	大型計算成果発表会について	52
7.2	GAUS 80, GAUS 82 ユーザへの注意	53
7.3	第14回電子計算機センター運営委員会議事報告	53
7.4	登録済みライブラリプログラムについて	56
7.5	分子研データベースについて	58
7.6	第15回電子計算機センター運営委員会議事報告	60
7.7	昭和63年度利用申請の審査について	63
8.	資料	65
8.1	センター関連組織	65
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規則	66
8.3	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	67
8.4	電子計算機センター運営委員会委員	68
8.5	電子計算機センター職員 (昭和63年7月現在)	68
8.6	建物図	69
8.7	応用プログラム相談員一覧	70
8.8	端末設置状況 (昭和63年7月現在)	70
8.9	マニュアルの紹介と購入方法	71

寄 語

化学現象とコンピューター

分子研 大 峰 巖

ここ数年、水について学んでいます。明けても暮れても水ばかりで、水に溺れそうです。わずか2つの水素原子と1つの酸素原子からなる小さな水分子が集ることによって水という特異な性質をもつ物質ができあがる。ただ電子と原子核のクーロン力を基本としてできあがっている化学物質が何故多様なものになるのだろうか。原子から分子へ、またその集まりである物質へと一つ一つの段階で新しい性質が生れてくる発生的なおもしろさが分子科学を研究する者の楽しみだと考えています。このような多様性を生ずるのは、分子系が各段階で本質的に多体的であるからですが、これを我々理論化学を専門とするものがどこまで学べてきているでしょうか。例えば、分子の電子状態の基底状態の記述は、ある程度満足いく概念と計算方法がありますが、励起状態となるともうお手上げです。今までの分子軌道プラス電子相関という考え方を離れて、電子の波動性と多体性を新しい形で取り入れた方法の開発が必要かも知れません。それには電子の“相”に関する一種の直観を必要とすると思います。また分子の集合体の運動、例えば水の中の水分子の運動もある面では長く研究され理解が進んでいますが、運動論の本質的な部分（集団的運動の時間スケール、集合形態の大きさ、各分子運動と集団運動の関係など）の研究は今やっと始まった所であるといえます。水の中の水分子の運動をシミュレーションを用いコンピューター・グラフィックで初めて見た時はただ複雑な運動とのみ感ぜられますが、しばらく見ていると水素結合系の特徴ある集団的運動があることが分ってきます。この集団的運動と、それに結合した各水分子の運動によって水の基本的結合構造が変化してゆくわけですが、この集団運動がどの大きさと時間のスケールで変化してゆくのかは、今の問題になっています。この問題を解くにもやはり水分子の個性に立脚した分子レベルでの集団運動に対する直観を必要とするでしょう。

このように現在でも、我々は化学現象のほんの一部しか理解していないわけで、孤立分子から溶液、固体にわたる化学系のもつ多様性の源を探っていくのは正にこれからの仕事ともいえます。幸いなことに我々理論の仲間には分子研のコンピューターという強い味方がいます。このレベルのコンピューターになると、ある程度自然と同じように単純に多体の相互作用を再現し、その結果を分子レベルで見せてくれます。我々の思考のみでは、その一断面しか切り出せない、自然の本当の多様性を理解するためのまたとない手段といえます。このパワフルな分子研のコンピューターが単にいわゆる成果を上げるためではなく、化学系の多様性の発現の源を探るといふ本来の目的の為に充分利用されることを願っています。

1. S-820/80の導入とセンターの10年

分子研電子計算機センター 柏木 浩

写真1.1はS-820スーパーコンピュータを分子研センター棟へ搬入しているシーンである。S-820は1988年2月15日から動き始めた。1982年2月にスーパーコンピュータ・ワークショップの前身となる分子研研究会「スーパーコンピュータとその分子科学への応用」の開催から数えても6年。ようやく当初の目標が達成された。この記事では、まずS-820の性能のあらましを紹介し、この機会に図表を中心にして分子研センター10年の歩みを振り返ってみたい。

写真1.1 S-820の搬入

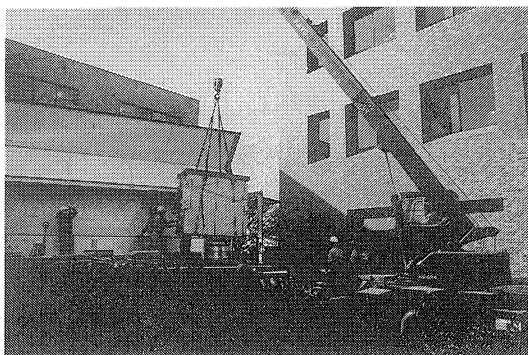
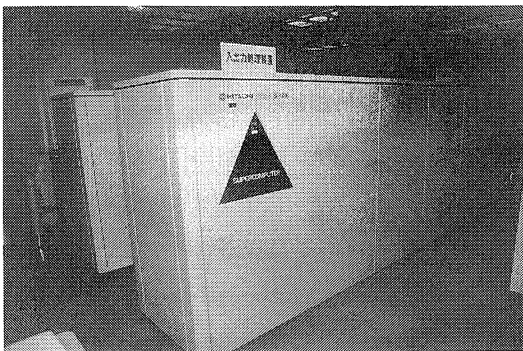


写真1.2 分子研センター主機室のS-820



1.1 S-820スーパーコンピュータの性能

S-820/80は単一プロセッサとしては現在世界最高速である。理論的なピーク能は3 GFLOPS、実行最大性能は2 GFLOPSである。図1.1にリバモアループの各グループごとの計算速度が示されている。このように高速な計算機を空冷で実現した背景には高度なLSIの技術と実装技術がある。それを示すデータが表1.1であるが、例として写真1.3を見ていただくのがわかりやすい。これは主記憶用パッケージである。LSIは64 KビットBi-CMOS SRAMと呼ばれるものでアクセス時間20 ns、消費電力300 mWという最新のものである。表8個、裏4個の計12個のLSIを組込んだモジュール48個が1枚の基板の上に並べられている。基板1枚で4 MBであり、分子研のS-820には32枚実装されている。基板右下部分はバイポーラ論理LSIで複数のSRAMを同時に駆動するためのものである。

図1.2がS-820/80の構成図である。詳細なデータは表1.2に示す。S-810のサイクルタイムは14 nsであったが、S-820では4 nsになっている。S-820/80では、加算/論理演算パイプライン4本、乗算と加算のパイプラインそれぞれ4本が並列動作できるようになっている。乗

算と加算の計8本が並列動作すると $8 \times (1/4 \text{ ns}) = 2 \text{ GFLOPS}$ の性能がでる。例えば、内積計算 $S = \sum A_i \cdot B_i$ は図 1.3 のように実行される。実行時間は、 $\alpha + (N/4) \times 4 \text{ ns} + \beta$ である。ここで N は要素の数、 α と β は N によらない前後処理の時間である。

計算機の各部分の間のデータ転送も高速化している。例えば、主記憶と拡張記憶の間のデータ転送のハード性能は 2 GB/sec である。実効速度としては 1.6 GB/sec が測定されている。S-820 についての詳細を知りたい方は、河辺 峻・他、日経エレクトロニクス、1987年12月28日号、No.437, P. 111 ~ 125 を参照されたい。

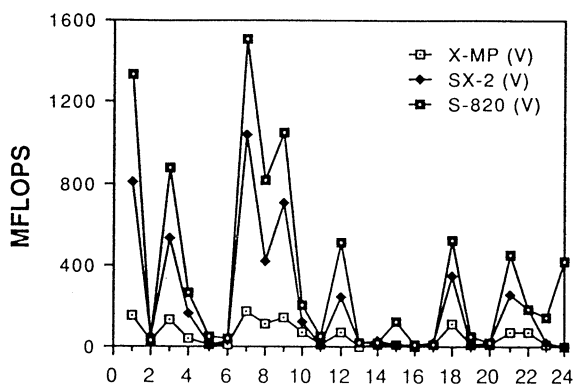


図 1.1 スーパーコンピュータの CPU 速度比較

プログラムはリバモアグループ (24 本セット)。横軸はプログラムナンバー。

(リクルート・スーパーコンピュータ研究所, Vector Register, Vol. 1, No.4, 1988 から転載)

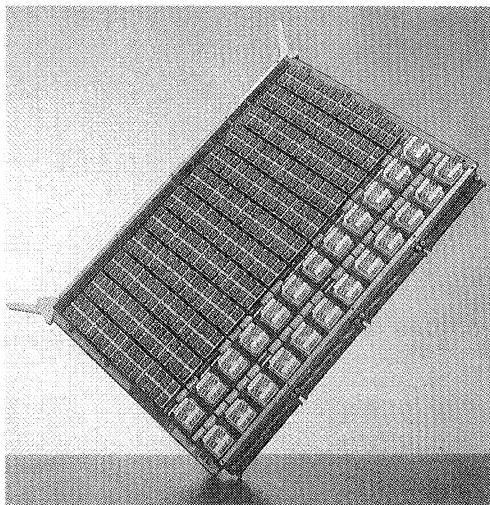


写真 1.3 S-820 高速主記憶用パッケージ

高速、高集積のスタティックメモリ素子 12 個 (表側 8 個, 裏側 4 個) を実装したハイブリッド RAM モジュールを 48 個実装し (写真左上部分), 制御用の論理 LSI (写真右下部分) と合わせて高速 (アクセス時間 20 ns) の主記憶装置を実現している。

表 1.1 ハードウェア技術の特徴

項番	ハードウェア技術	S-820	S-810
1	超高速バイポーラLSI 1) 集積度 (ゲート) 2) 回路遅れ (ns)	2,000/5,000 0.2/0.25	550/1.500 0.35/0.45
2	高集積高速MOS LSI 1) 集積度 (ゲート)	24,000/40,000	
3	ロジックインメモリ 1) アドレスアレイ用 2) ベクトルレジスタ用	ゲート Kビット 1,200 + 7 2,500 + 7	ゲート Kビット 770 + 6
4	超高速バイポーラRAM 1) 集積度 (ビット) 2) アクセス時間 (ns)	4 K/16 K 4.5/12	4 K 7
5	高速大容量メモリーモジュール 1) 集積度 (ビット)	768 Kビット	576 Kビット
6	超高速ハイブリッドRAMモジュール 1) 集積度	ゲート Kビット Kビット 700 + 32/128	
7	高密度パッケージ 1) 集積度 (ゲート) 2) プリント板	100,000 22 層	50,000 14 層
8	配線技術 1) コネクタ (ピン/パッケージ) 2) 高速ケーブル遅延時間 (ns/m)	1,776 3.8	900 5.0
9	冷却	強制空冷 (風量調整構造) 熱拡散構造	間接水冷

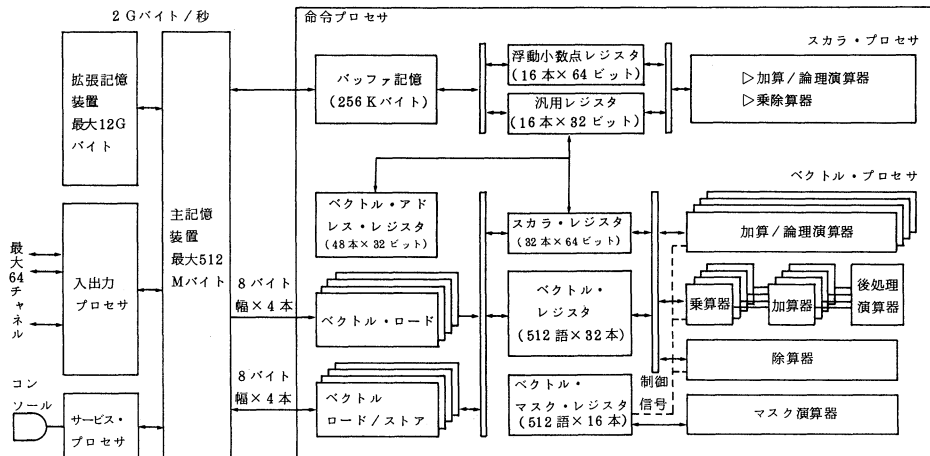


図 1.2 システム構成

命令プロセッサ、主記憶装置、拡張記憶装置、入出力プロセッサ、サービス・プロセッサから成る。命令プロセッサは、さらにベクトル・プロセッサとスカラ・プロセッサに分かれる。この各部分は独立して動作できる。(日経エレクトロニクスNo.437)

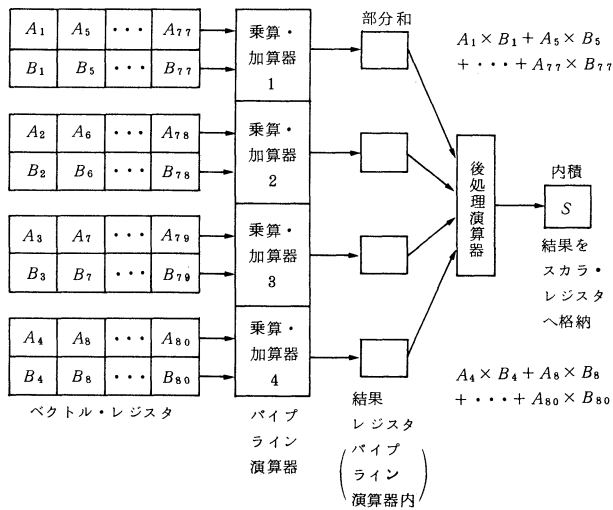


図 1.3 内積の計算手順

$S = \sum_{i=1}^{80} A_i \cdot B_i$ 各パイプライン演算器 (乗算・加算器 1～4) の計算結果 (部分和) は結果レジスタに格納される。最後に後処理演算器がその結果を合計し、内積計算が終了する。(日経エレクトロニクス No. 437)

表 1.2 S-820 プロセッサ概略仕様

モデル		S-820/60	S-820/80		
命令プロセッサ (IP)	最大性能		1 GFLOPS	2 GFLOPS	
	演算器ピーク性能		1.5 GFLOPS	3 GFLOPS	
	命令種類	スカラ	216		
		ベクトル	90		
	レジスタ	汎用レジスタ		16 (32 ビット)	
		浮動小数点レジスタ		16 (64 ビット)	
		制御レジスタ		16 (32 ビット)	
		ベクトルレジスタ		256 語 × 32	512 語 × 32
		ベクトルマスクレジスタ		256 語 × 16	512 語 × 16
		スカラレジスタ		32 (64 ビット)	
		ベクトルアドレスレジスタ		48 (32 ビット)	
	データ形式	固定小数点		32 ビット	
		浮動小数点		32, 64 ビット	
		論理		64 ビット	
	ベクトルタイマ機構		有		
	バッファ記憶		256 KB		
パイプライン	加算/論理		2	4	
	乗算・加算		2	4	
	除算		1	1	
	マスク演算		1	1	
	ベクトルロード		2	4	
	ベクトルロード/ストア		2	4	

主記憶装置(MS)	容量	64 ~ 256 MB	128 ~ 512 MB
	エラーチェック	1 ビット訂正, 2 ビットエラー検出	
拡張記憶装置 (ES)	容量	0.5 ~ 6 GB	0.5 ~ 12 GB
	最大転送速度	1 GB/秒 または 2 GB/秒	
	エラーチェック	2 ビットエラー訂正	
入出力プロセッサ (IOP)	チャンネル数	合計	16 ~ 64 (8チャンネル単位)
		光チャンネル	0 ~ 64 (8チャンネル単位)
		6 MB/秒チャンネル	0 ~ 32
	トータルチャンネルスループット	最大 288 MB/秒	
	チャンネル種類	BLMPX, BYMPX	
サービスプロセッサ (SVP)	コンソール	主コンソール	1
		副コンソール	0 ~ 1
	チャンネル間結合装置	0 ~ 2	
	統合入出力制御機構	0 ~ 1	

1.2 分子研センターの10年

1979年1月のM-180の運転開始以来9年半のセンターの進展は図1.4, 図1.5と表1.3に見られる通りである。スカラ速度で11倍, 最高速度で56倍, 主記憶容量が22倍, 磁気ディスク容量が12倍に増加した。拡張記憶も新設され, 1986年に1GB, 1988年に2GBになり, ジョブがどんどん出てくるようになった。図1.6の鉄ポルフィンの分子軌道計算のベンチマークテストに見られるように, CPU時間と実行時間の短縮は顕著である。S-820上のテスト計算では全てのデータセットを拡張記憶に割当て, CPU時間13分12秒, 実行時間13分22秒という結果が得られている。

このように分子研センターのハードウェアの拡張は極めて順調に行われてきた。この10年の分子研センターは時代に恵まれていたとすることができる。それには二つの要因が考えられる。一つは日本のコンピュータテクノロジーの急速な進歩である。この10年の間に日本のハードウェア技術は世界一になった。もう一つは分子科学が科学として充実し, 材料開発やバイオテクノロジーなどこれからの技術開発の基礎として重要であることが認識されるようになったことにある。分子研センターの重要性は容易に理解されるものなので, 各方面からの積極的な支援が得られた。中でも日立製作所と関連会社の協力と分子研職員の努力が大変大きい。

一方, この10年の間に計算機をめぐる状況も大きく変わりつつある。生活の色々な部分にマイクロコンピュータが入込み, ファミコンやパソコンが普及して計算機文化が変わりつつある。大型計算機に要求されるものはますます多くなり, ソフトウェアの開発労力が肥大化して, ユーザの要望を即座に満足させることが困難になっている。これは文化の変革の大きな流れの一部であるから, 自分の間はいろいろな問題が派生しつづけるだろう。このためユーザーの願望を創意的に整理することがこれまで以上にセンターの重要な課題になると考えられる。

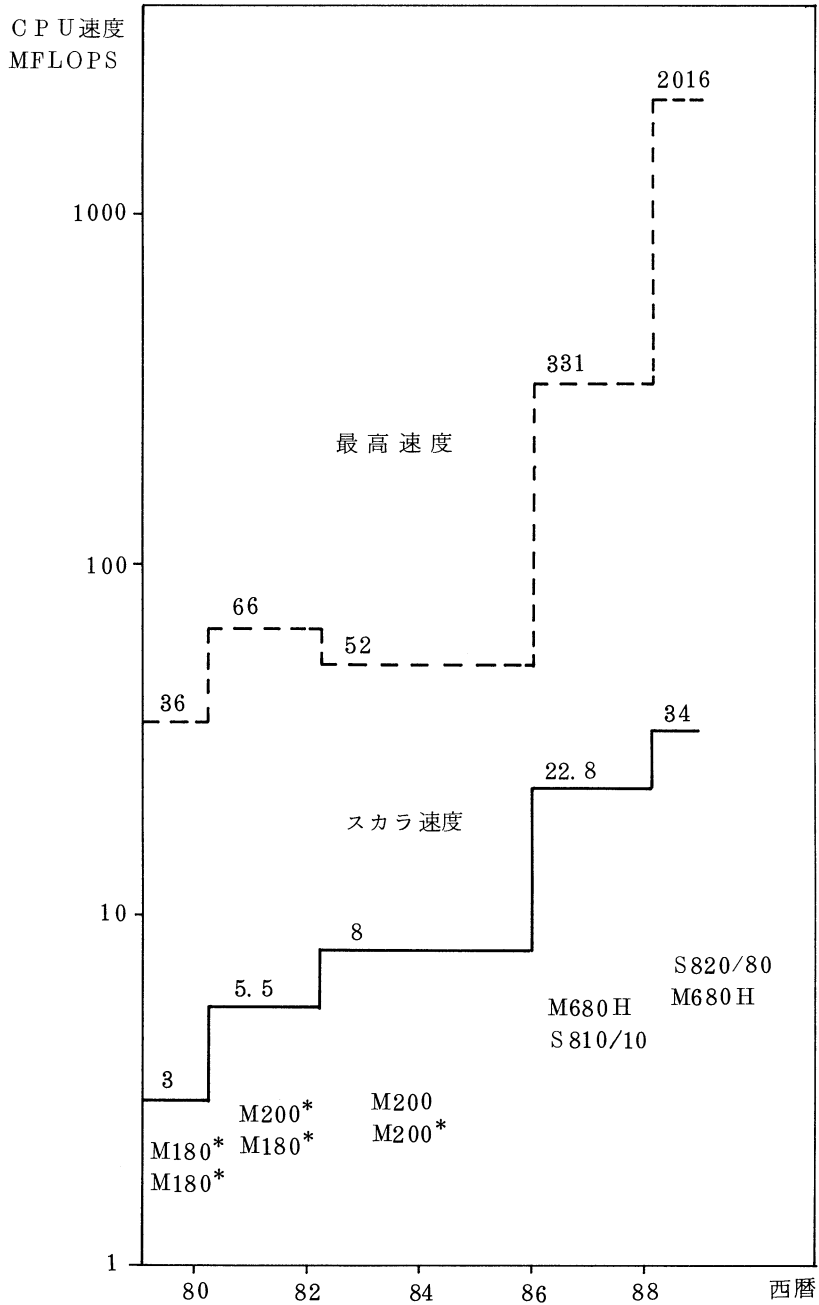


図 1.4 分子研電子計算機センターにおける CPU 能力の拡張

実線はスカラ速度合計，破線は最高速度合計。*印は IAPつき。IAP の最高速度はスカラ速度の 12 倍とした。各計算機のスカラ速度は MFLOPS 単位で，M180 = 1.5，M200H = 4，S810/10 = 6.8，M680H = 16，S820/80 = 18 とした。

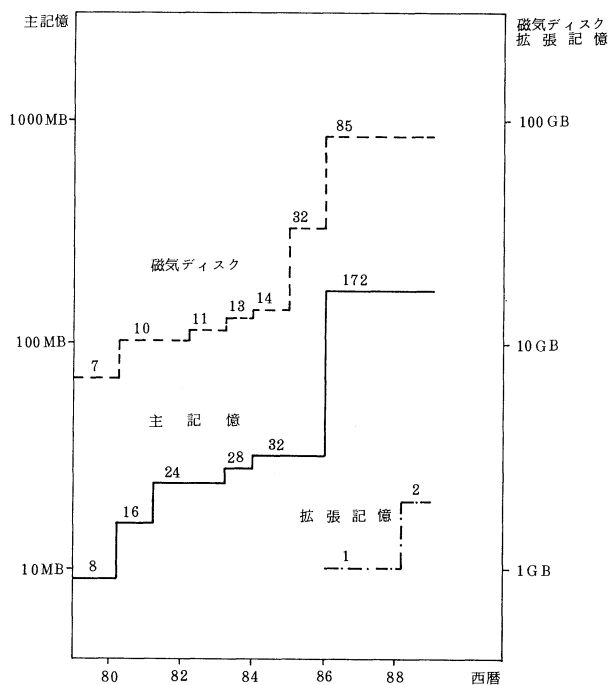


図 1.5 分子研電子計算機センターにおける記憶容量の増加

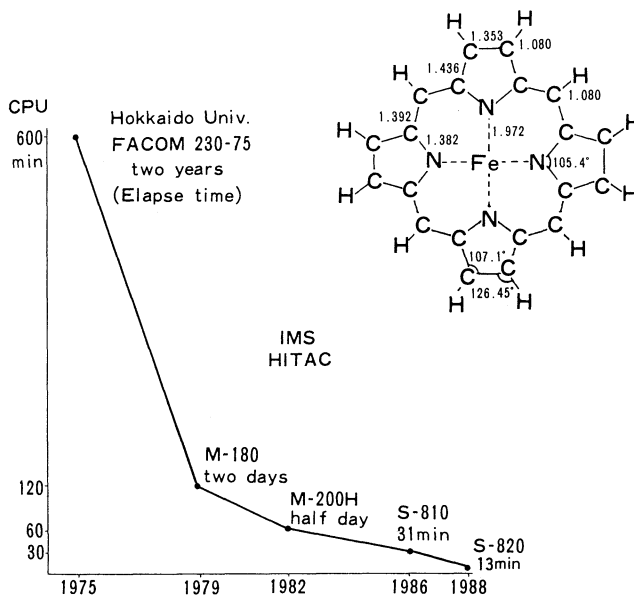


図 1.6 CPU時間と実行時間 (Elapse time) の短縮

基底関数 (CGTO) 184 個の鉄ポルフィンの *ab initio* SCF MO 計算。但し、1975 年の計算はコバルトポルフィン。プログラムは 1975 年: JAMOL 2, 1979 ~ 1986 年: JAMOL 3, 1988 年: JAMOL 4 (SCF 繰返し計算のみベクトル化)。1986 年と 1988 年の場合は単一ジョゴのテスト結果。

表 1.3 利用者数とCPU時間の推移

	53 年 度	54 年 度	55 年 度	56 年 度	57 年 度
計 算 機 シ ス テ ム 運 転 方 式	M-180 2 台 3 月 有 人	M-180 2 台 9 月 从 無 人	M-200 H M-180 200 H 無 人 180 有 人	M-200 H M-180 疎 結 合 人 無 人	M-200 H 2 台 疎 結 合 人 無 人
プ ロ ジ ェ ク ト 数	63	176	192	183	198
利 用 者 数					
機 構 内 ^a	48	70	69	91	94
機 構 外	107	254	325	330	375
合 計	155	334	394	421	469
稼 動 時 間	1,087	6,071	6,553	6,721	6,305
利 用 申 請 時 間					
(200H 基 準)					
申 請	929	4,666	11,033	10,230	11,938
許 可	816	3,171	7,427	8,306	10,141
総 使 用 C P U 時 間 ^c	509	2,405	5,405	6,320	8,205
ジ ョ ブ 処 理 件 数 ^c	41,521	155,980	183,840	214,847	239,771
ライブラリプログラム新規登録数	0	20	43	20	699
データベース新規登録数	0	2	0	0	3
センター使用論文数 ^d	0	24	93	118	190

	58 年 度	59 年 度	60 年 度	61 年 度	62 年 度
計 算 機 シ ス テ ム 運 転 方 式	同 57 年 度	同 57 年 度	(~11月) 同 57 年 度 (1月~) M-680 H S-810/10	M-680 H S-810/10 疎 結 合 人 無 人	M-680 H (~1月 S-810/10 (2月~) S-820/80 疎 結 合 人
プ ロ ジ ェ ク ト 数	199	207	226	234	213
利 用 者 数					
機 構 内 ^a	102	110	130	141	143
機 構 外	426	446	464	496	520
合 計	528	556	594	637	663
稼 動 時 間	6,170	6,316	6,016	6,368	6,444
利 用 申 請 時 間					
(200H 基 準)					(M-680 H 基 準) ^b
申 請	13,053	14,799	15,536	33,832/8,453 *	9,880
許 可	10,091	10,768	12,080	28,184/7,046 *	7,978
総 使 用 C P U 時 間 ^c	8,489	8,508	12,770	20,092/5,023 ^e *	6,624 ^e
ジ ョ ブ 処 理 件 数 ^c	236,519	226,727	274,431	289,915	278,956
ライブラリプログラム新規登録数	10	118	160	39	4
データベース新規登録数	3	0	1	0	1
センター使用論文数 ^d	185	202	206	237	223

a : 機構内利用者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 6.1 項を参照。

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

d : センターを使用した計算に基づく論文としてセンターに提出されたもの。

e : S-810, S-820 については SPU と VPU の CPU 時間の単純な和である。

* : 下段は M-680 H 基準

2. スーパーコンピュータ・ワークショップの活動

S-820 導入直後のワークショップであるため、日立製作所の河辺さん柴宮さんに S-820 のハードウェアとソフトウェアの特徴について紹介していただいた。中部大学の二宮先生から数値計算プログラム NUMPAC によるスーパーコンピュータの CPU 時間比較の結果が示され、S-820 の高速性が客観的に立証された。

今回は日本電気基礎研究所、蛋白工学研究所、リクルート・スーパーコンピュータ研究所など民間の研究所からの発表が顕著であった。発表者以外でも民間企業の分子科学研究者の参加が多く、今後の民間における計算化学の発展が期待される。

大学の若手研究者の報告も充実したものが多く、1988 年 1 月の第 1 回ワークショップ以来、若手の成長ぶりはたのもしい限りである。最後はサバティカルで帰国中の藤永先生に量子化学のこれからの課題について展望を話していただいた。どの講演一つをとってみても内容の高いものばかりであり、大変面白く拝聴させていただいた。

第 8 回公開講演会

(昭和 63 年 3 月 11 日午後)

☆ S-820 システムについて

分子研センター 柏木 浩

☆ HITAC S-820/80 スーパーコンピュータのハードウェアの特長について

日立製作所 河辺 峻

☆ HITAC S-820/80 スーパーコンピュータのソフトウェアの特長について

日立製作所 柴宮 実

☆ 最近のスーパーコンピュータの性能比較

中部大経営情報 二宮 市三

中京大教養 秦野 甯世

☆ 二次元 Schrödinger 方程式の数値解法

慶大理工 佐藤 信行

☆ ガウス関数を基底とした分子積分の一般漸化表式

京大理 小原 繁

(昭和 63 年 3 月 12 日午前)

☆ スーパーコンピュータ SX-2 における分子軌道計算プログラムの開発と将来展望

日本電気基礎研 高田 俊和, 八尋 秀一

☆ 共役系の励起状態について - ベクトル計算機の意味

京大工 北尾 修

☆ ATOMCI プログラムにおけるエネルギー表現

北大理 関谷 雅弘, 佐々木不可止

☆ モデルポテンシャル法を用いた分子の計算

九大教養 酒井 嘉子

福岡歯科大 三好 永作

アルバータ大 藤永 茂

(昭和 63 年 3 月 12 日午後)

☆ 蛋白工学とモレキュラダイナミックス

蛋白工学研 中川 節子

☆ シミュレーションのための新しいポテンシャル関数

阪市大理 本多 一彦

☆ 分子軌道計算結果の modeling

分子研センター 伊奈 諭

☆ The Performance of Distributed Memory Paralell Machines on
Real Applications

リクルート・スーパーコンピュータ研究所 Raul H. Mendez

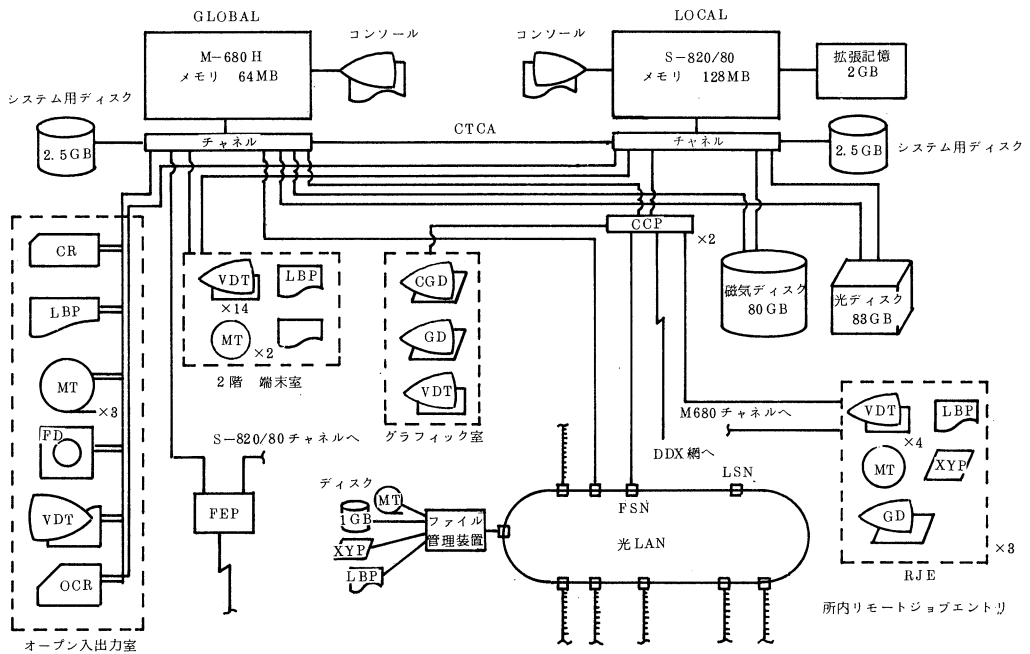
☆ 分子計算の近未来

アルバータ大 藤永 茂

3. 計算機システムの運用と使い方

3.1 システムの特徴

当センターのシステムは昭和63年2月よりHITAC S-820/80が導入され、図3.1.1に示すようにM-680HとS-820/80との疎結合マルチプロセサ（LCMP）構成となっている。所外からは公衆電話網、DDXネットワークを通じて随時利用することができる。



63. 8 現在

図 3.1.1 システム構成概念図

本システムの特徴は以下のような点にある。

- ・自動ジョブスケジュール機能（日立製作所と共同開発）により各種資源の柔軟かつ最適な割り当てが行える。また各資源を最大限に必要なジョブも他のジョブと混在させてシステムを有効に使うことができる。

- ・ S - 820/80 では拡張記憶装置を 2 G B 有し、通常の磁気ディスクと同様な使い方で 2 G B / 秒の高速入出力を行うことができる。
- ・ 総計 85 G B の磁気ディスク装置を擁し、CPU の高速化とあわせて大規模科学計算を可能としている。
- ・ 磁気ディスクの中 40 G B はパラレル入出力専用である。各計算機 16 本のチャンネルにより、通常磁気ディスクの最高 48 倍の入出力が可能である。
- ・ 大容量の光ディスク装置を遠隔磁気テープ倉庫の代替機能として利用でき、所外の遠隔地ユーザの便に供している。

3.2 S - 820/80 のハードウェア

新しい計算機は S - 820/モデル 80 と呼ばれ最大性能 2 G FLOPS を有す。以下に概要を示す。

- (1) 主記憶 128 M B
- (2) 拡張記憶 2 G B

転送スピードは最高 2 G B / 秒で従来機の 2 倍の性能を持つ。

- (3) ベクトル演算器

並列パイプラインと超高速ベクトルレジスタにより最高 2 G FLOPS の高速処理を行う。これは従来機 S - 810/10 の約 6 倍の性能である。

- (4) スカラ演算は従来機 S - 810/10 の約 3 倍である。

S - 820/80 プロセッサ概略仕様については 1 章の表 1.2 を参照のこと。

3.3 S - 820/80 の性能

昭和 63 年 2 月より公開される S - 820/80 の性能の調査のために、様々なテストを行ってきたが、ここではリバモアループと西本ループの性能を S - 810/10 の性能と比較して示す。

リバモアループと言うのはローレンスリバモア研究所が作った、浮動小数点演算の性能を調査するためのベンチマークテスト用のプログラムである。西本ループは分子研電子計算機センターが作成したもので、ベクトルの和や積、内積など基本的なベクトル演算の性能を調査するためのプログラムである。

結果は以下のようになっている。S - 810/10 のコンパイルオプションは OPT(3), HAP である。

テ ス ト	C P U 時間 (S E C)			コンパイルオプション (S 820)
	S 820/80	S 810/10	RATIO (S810/S820)	
リバモアループ	5.17	14.71	2.58	OPT(3) HAP (MODEL80), XFUNC (XFR)
リバモアループ	2.92	14.71	5.04	SOPT, HAP (MODEL80), RDLINK
西本ループ	0.17	0.73	4.29	OPT(3), HAP (MODEL80), XFUNC (XFR)
西本ループ	0.16	0.73	4.56	SOPT, HAP (MODEL80), RDLINK

コンパイルオプションの S O P T というのは O P T (3) よりさらにプログラムの最適化を進めるオプションである。組み込み関数の内部展開，先行制御を意識した命令の並べ替え等まで考慮されている。X F U N C と言うのはハードウェア拡張命令の使用を指示し，R D L I N K は実行時サブルーチンのダイナミックリンクを指示するオプションである。

見て分るようにコンパイルオプションによって性能がかなり違ってきているが，S - 810 / 10 に比べ，最高で 5 倍程度加速されている。リバモアループの平均 M F L O P S 値は S O P T 指定時 418 M F L O P S ， O P T (3) 指定時 390 M F L O P S となっている。

3.4 ジョブクラスの構成

ジョブクラスは基本的に M - 680 H ， S - 820 / 80 とともに従来と変化はない。ただし，S - 820 / 80 では E S (拡張記憶) が増設されたので一率に上限が引き上げられて 1 G B となり，また S - 820 / 80 の性能が上った分だけ，各ジョブクラスの実質的な C P U 時間の制限が拡張されたことになる。

ジョブクラスの構成

(S - 820 / 80 のクラス構成)

クラス	C P U time		基本リージョン		拡張リージョン		E S		P I O	G R A P H I C
	(min)		(M B)		(M B)		(M B)			
	MAX	STAN.	MAX	STAN.	MAX	STAN.	MAX	STAN.		
A	1	1	2.0	0.5	64	4	1024	0	○	×
B	5	5	2.0	0.5	64	4	1024	0	○	×
C	30	30	2.0	0.5	64	4	1024	0	○	×
D	120	30	2.0	0.5	64	4	1024	0	○	×
G	30	30	2.0	2.0	64	4	1024	0	○	○
S	600	30	max	0.5	max	4	max	0	○	×

E S (拡張記憶) の総枠は 1.5 G B

(M - 680 H のクラス構成)

クラス	C P U time		基本リージョン		拡張リージョン		P I O	G R A P H I C
	MAX	STAN.	MAX	STAN.	MAN	STAN.		
A	1	1	7	2	28	4	○	×
B	5	5	7	2	28	4	○	×
C	30	30	7	2	28	4	○	×
D	120	30	7	2	28	4	○	×
G	30	30	7	2	28	4	○	○
S	600	30	max	0.5	max	4	○	×
T S S		1	2	2	2	2	(○)	○

3.5 利用点数の改訂について

63年度6月よりS-820/80の利用課金点数を再度変更した。

これは4月に設定を行ったS-820の利用点数の係数0.20をその後のM-680, S-820両システムの利用バランスの調査に基づいて再度訂正を行ったものである。この結果S-820の利用点数の係数は0.175となり従来より割安となった。利用点数の算出式と新しい係数は以下の通り。

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

CPUs_m : 全CPU時間 (M-680)

CPUs_s : 全CPU時間 (S-820)

VPU_s : ベクトル演算器の全CPU時間 (S-820)

LP : 出力枚数

DISK : DISK使用総量 (MB * hour)

係数の値は以下の通り。

a : 0.10/sec

b : 0.175/sec (改訂前: 0.20)

c : 0.175/sec (改訂前: 0.20)

d : 0.045/ページ (1ページがM-680の0.45秒分)

e : 0.00067/MB * hour

3.6 JCL MAIN文での新スーパーコンピュータの指定について

従来S810と指定していたのをS820にすること。

```
//*MAIN SYSTEM=S820
```

また、MAIN文で指定する資源要求量はできるだけ実際の使用量に近い値を指定することが必要である。使用しない分まで指定すると資源が空くまで必要以上に待たされるだけでなく、他のジョブの実行を妨げることになる。

3.7 新FORTRAN (21-00) の利用法について

現在のところ(21-00)には虫が多いので、'SYS7. NEWS DATA'などのセンターからの通知を見ながら注意深く使用すること。センターの標準コンパイラはこれまで通り(02-04)である。

(1) 新FORTRANの利用法

バージョン番号(20-02)の場合とカタプロ等の名称や使用方法は全く変わらない。

新FORTRAN (21-00)の主な特徴は、最適化機能(ベクトル化機能も含む)の強化、ステートメント数等の量的制限の撤廃及びFORTRAN開発支援プログラムFORT/ASSISTとの密な連携にある。またS-820の新しい機能をサポートしている。

この新しいFORTRANを使用する場合は、FORTECLG, FORTECL, FORTECGのようにFORTの後にEのつくカタプロを使う。展開形を使用している方は、プログラム名称JNKFORTはそのまま、'SYS1.FORTELIB'をJOB LIBやSTEPLIBに定義して使用すること。TSSではLIBコマンドやリンケージのLIBオペランドで'SYS1.FORTELIB'を指定して使用すること。コンパイル・リンクのみならず、プログラムの実行時にもSTEPLIBやJOB LIBに'SYS1.FORTELIB'の指定を忘れないように。

MSL/MATRIX/HAPなどのデータセットの名称については名前の最後にE2が付いている。具体的には以下のようになっている。

02-04	21-00
SYS1. MATRIX. HAP	SYS1. MATRIX. E2. HAP
SYS1. MATRIX. NOHAP	SYS1. MATRIX. E2. NOHAP
SYS1. MSL2. NOHAP	SYS1. MSL2. E2. NOHAP
SYS1. MSL2. HAP	SYS1. MSL2. E2. HAP
SYS1. GPLIB	SYS1. GPLIB. E2
SYS1. GLIB	SYS1. GLIB. E2

例 カタプロ

```
//EXEC FORTECL
```

例 展開形

```
//JOB LIB DD DSN= 'SYS1. FORTELIB', DISP=SHR
```

または

```
//STEPLIB DD DSN= 'SYS1. FORTELIB', DISP=SHR
```

(2) 新FORTRANの注意事項

これまでの継続性のため、当分のあいだ旧FORTRAN (02-04)を当センターの標準として扱うので、新FORTRANを使用する場合は以下の注意が必要である。

- ① コンパイル時に必要なメモリサイズがプログラムによって変わる。拡張領域がメモリとして主に使用されるが、サブルーチン等のプログラムモジュールのソース枚数が500枚の時、コンパイルオプションOPT(3), NOHAP指定時で1.2MB程度、HAP指定時だと1.4MB程度必要である。1,000枚になると、NOHAPで2.0MB程度、HAPで2.3MB程度必要と

なる。ただしモジュール内のCOMMON変数や引用するサブルーチンの数が多い場合は、更にメモリを必要とする。

- ② コンパイルにかかるCPU時間が4倍程度長くなる。
- ③ 新旧オブジェクトモジュールの混在は、I/Oをしているモジュールとアセンブラルーチンを読んでいないもの以外は可能である。混在させる場合は実行時ルーチンの取り込みの際に、以前のを先に取り込むようにすること。具体的にはLINKの際にSYSLIBを以下のよう指定する。

バッチJOBの場合

```

//SYSLIB DD DSN= 'SYS1.FORT7LIB', DISP=SHR
..... 以前の実行時ルーチンライブラリ
//          DD DSN= 'SYS1.FORTELIB', DISP=SHR
.....  新しい実行時ルーチンライブラリ

```

TSSJOBの場合

```

RUN.....LIB (#SYS1.FORT7LIB, #SYS1.FORTELIB)
または
LIB (#SYS1.FORT7LIB, #SYS1.FORTELIB)

```

(3) コンパイルオプション

センターで公開している新FORTRAN(21-00)のコンパイルオプションは、62年夏より公開している(20-00)のものと同様で変わらない。

以下に標準のオプションを示す。

ALC	FLAG(O)	NOAGOCK.	NOIAP
ANS77	INLINE	NOAPPROX	NOINTLANG
AUTODBL(NONE)	LD(ANY)	NOARGCHK	NOISCHEDULE
CODE(N)	LINECOUNT(O)	NOBREAK	NOLCHECK
DLINE	OBJECT	NOCOMARY	NOLIST
DT(ANY)		NOCOMBA	NOMAP
EBCDIK	OPTIMIZE(3)	NOCONV	NONAME
ELIST	OVFLCHK	NOCOUNT	NONUM
ERCHK	PROD	NODCOM	NOPAUSE
ERSTMT	RDLINK	NODCOMINIT	NOREENT
EX(EA)	SIZE(MAX)	NODISBRACKET	NOREUSE
EXPMOVE	XFUNC(XFR)	NODIVMOVE	NOSOURCE
FIXED		NODLINK	NOSUBCHK
		NOEXPAND	NOTD
		NOGO	NOTERMIAL
		NOHAP	NOXREF
		NOH8000	

注意すべき点はDCOMでDCOM(±:.....)という指定方法が日立発行のマニュアルでは明示的に示されていないため、あたかも許されていないかのように誤解されるが、このような指定は許される。

またDCOMについてはMAX, NOMAXのオペランドが追加された。これはCOMMON領域をJOBの実行中に動的に確保する際、そのCOMMON領域の最大を確保するかそうでないかを指示するオペランドである。従来は、最初にCOMMON領域が定義される場所にその最大長を定義しておかなければ、実行途中でERRORでJOBが止まってしまったが、新FORTRAN(21-00)からはDCOM(MAX)を指定すればよくなった。これは他社の計算機を使っているユーザからの要望の強かった機能である。DCOMを指定した時は、リンケージエディタのパラメータに'LD=ANY, EX=EA'を指定することを忘れないこと。以前のように'LD=ANY, EX=EA'が指定されなくともDCOMの指定が許されることはない。

最適化のコンパイルオプションにSOPTの指定をすると以下のようなオプションが仮定される。他に指定したオプションが無視されることがあるので御注意を。オプションは、後に指定されたものが優先されるので、SOPTはオプションの並びの先頭に指定し、さらにOPLISTを指定してオプションが意図したように指定されているかを確認するようにすること。

APPROX, DISBRACKET, DIVMOVE, EXPAND, NOAGCHK,
NOARGCHK, NOBREAK, NOCOMARY, NOCOUNT, NODCOM,
NODLINK, NOERCHK, NOERSTMT, INLINE, NOINTLANG,
ISCHEDULE, NOLCHECK, OPTIMIZE(4), NOOVFLCHK, PROD,
NORDLINK, NOREENT, NOREUSE, NOSUBCHK, NOTD, XFUNC
(DXR, XI)

02-04から移行についてはほとんどのオプションが共通なので簡単であるが、新FORTRAN(21-00)で使用するにはオプションの省略形は使用しないことが肝心である。例えばメンバー毎にリンケージエディタの制御文を生成するというオプションのMEMBERの省略形MEMが許されなくなっているといったようなことがあるからである。

オプションの詳細については62年8月に発行した利用の手引(システム概説編-差替え, 追加分)を参照のこと。

(4) FORT/ASSISTの公開

63年2月よりFORTRAN/E2コンパイラ(21-00)の公開にともない、ベクタイザやSAF, VREPO(当センタ開発)の機能を包含したFORTRAN開発支援プログラムFORT/ASSISTのFORTRAN/E2対応版が公開された。当初公開するのは、ベクタイザやSAF, VREPO(当センタ開発)の機能のみであるが、段階的にチューニングインストラクタ機能等を付け加えて行く予定である。会話的に作業を進めることができるようにASPENから起動できるのが特徴である。以前と比較して、HELP機能が充実しているが、センターの運

用上 TSS 空間を大きくできないため、GAUSSIAN 82 のような大きなプログラムを扱うことはできない。

TSS での利用法は、ASPEN に入る前に LIB 'SYS1.FORTELIB' と入力する。ASPEN では @ ASPEN 画面で 10 番（拡張機能 ASPEN 2）を選択すれば、ASSIST に入れる。

63 年 2 月に公開した機能と使用手順を簡単に示す。(無手順端末でも同じ様に番号を入力する。)

```

@ ASPEN *** 機能選択メニュー*****
1 @ EDIT      編集
2 @ VIEW      表示・検索
3 @ TSS       TSS コマンド実行
4 @ FRONT     プログラム加工 (TSS)
5 @ BEHIND    プログラム加工 (バッチ)
6 @ UTILITY   ユティリティ
7 @ ENVIRON   環境定義情報の更新
8 @ SLIST     SYSOUT 入出力編集
9 @ END       ASPEN の終了
10 @ ASPEN 2  拡張機能

??          ASPEN のガイド機能

ALL RIGHTS RESERVED, COPYRIGHT (C) 1987,
HITACHI, LTD.

コマンド (10 )
    
```

ASPEN の機能選択メニューで FORTRAN の開発支援プログラムを選択する。



```

@ ASPEN 2 *** 拡張機能選択メニュー*****
11 @ RECOVER  LIME 変更履歴管理
12 @ ASSIST    FORT/ASSIST

??          ASPEN のガイド機能

コマンド (12 )
    
```



```

@ ASSIST *** 機能選択メニュー*****
1 @ ACOMP    コンパイル/実行サブシステム
2 @ AVEC     対話型ベクトルチューニング支援システム
              (FORT/VF)

? ASSIST     ASSIST のガイド機能

ALL RIGHTS RESERVED, COPYRIGHT (C) 1987,
HITACHI, LTD.

コマンド (2 )
    
```

FORT/ASSIST の機能選択メニューでベクトル化チューニング支援サブシステムを選択する。



```

@ A V E C *** ベクトルチューニング選択メニュー*****
1 @ A N A      解析実行
2 @ A N A D    解析実行 (詳細)
3              レポート出力
4              チューニング

      解析実行済みの場合は、3 または 4 を選択できます。
      3 または 4 を選択する場合に指定して下さい。

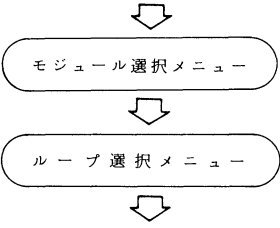
      データセット名
静的解析情報 ( )
動的解析情報 ( )

      ALL RIGHTS RESERVED COPYRIGHT (C) 1987,
      HITACHI, LTD.

コマンド ( 1 )

```

FOR T / A S S I S T
のベクトル化チューニング選
択メニューでチューニングを
選択する。



チューニングを実施す
るモジュールと D O ルー
プを選択する。
モジュール及び D O ルー
プは実行比率の高い順に
ソートし、表示する。

```

E E *** D S 名 ( ' A S S I S T . S O U R C E ( T O O L 1 ) ' ) *****
目盛行 ---+---1---+---2---+---3---+---
000900      D O  20  J = 2 , J E
001000          D O  10  I = 2 , I E
001100              A L 2 ( I , J ) = W H X ( I ) / H Y ( J )
001200  10      C O N T I N U E
001300          A L 3 ( I , J ) = W W X ( J ) * W W Y ( I )
001400  20      C O N T I N U E
-----
ベクトル化診断メッセージ
      J O K 802 I      D O  20  I S  U N V E C T O R I Z A B L E
                                          N O = 00900

コマンド ( )

```

チューニング用画面は、
A S P E N が表示するソー
ス表示領域と F O R T / V E
が表示するベクトルチュ
ーニング情報表示領域から構
成される。
ソース表示領域に対して
はカーソルをセットしての
直接修正や、コマンドによ
る修正が A S P E N の単独
画面と同じようにできる。
また、ベクトルチュ
ーニング情報表示領域には、
コマンドにより次の情報が表
示できる。
・修正例
・実行比率
・ベクトル化診断メッセージ
・ベクトル化応答メッセージ
など

(5) 拡張記憶と一般ファイルの変換ユーティリティの使い方

拡張記憶は高速アクセスが可能であるが、ジョブが終了すると消えてしまう。保存したい場合は自分のプログラムでディスクに出力するか、次に説明する変換ユーティリティを使ってコピーする。変換ユーティリティはディスクから拡張記憶、拡張記憶からディスクと相互に変換できる。出力がディスクの場合、DCBパラメータを必ず定義しなければならない。この変換ユーティリティを自分のプログラムから呼び出すためにサブルーチンが用意されているが、使用方法に制約があること、ディスク上に作成されるファイルの形式が特殊であることなどからセンターとしてあまりすすめられない。

使用例……拡張記憶からディスクへの場合

```
//EXEC PGM=JNLESCV, PARM='HES SAM'  
//STEPLIB DD DSN=SYS1.F7HPRG.E2, DISP=SHR  
//IN DD DSN=&..., UNIT=ES, DISP=SHR, ...  
//OUT DD DSN=@..., DISP=..., DCB=(.....), ...  
//SYSPRINT DD SYSOUT=*
```

使用例……ディスクから拡張記憶への場合

```
//EXEC PGM=JNLESCV, PARM='SAMHES'  
//STEPLIB DD DSN=SYS1.F7HPRG.E2, DISP=SHR  
//IN DD DSN=@..., DISP=SHR  
//OUT DD DSN=&..., UNIT=ES, DISP=(NEW, PASS), ...  
//SYSPRINT DD SYSOUT=*
```

注意……この変換ユーティリティではディスクとしてパラレルI/Oデータセットを使用できない。ディスクの入出力で区分データセットを対象とした場合の動作は保証できない。

3.8 ワークステーション 2020 E の導入と利用について

62年8月31日(月)より従来のT-560/20型センター端末をワークステーション2020 Eに置き換えた。従来どおりのオンライン機能の他オフラインOSとしてMS-DOSが使える。メモリ2MB、ハードディスク(HD)20MB内蔵のものとメモリ4MB、HD40MB内蔵のものが用意してある。また全て数値演算プロセッサ80287を所有している。マイクロメインフレームリンク機能としては2020 Eとホスト計算機間のファイル転送機能が使える。HDあるいは5インチ、3.5インチ、8インチのFDを使ってMS-DOSファイルとホスト計算機のファイル転送ができる。NEC PC 9800のMS-DOSでフォーマットされたFDが2020 Eでも読み書きできるがその逆はできない。

また市販ソフトとして有用なパソコンエディタ F I N A L が使える。

2020Eシステム装置仕様

項目		形名	
		HT-2021-N21E	HT-2021-N31E
C P U		80286 (10 MHz)	
メ イ ン メ モ リ		1 MB	
漢 字 表 示		J I S 第 1, 第 2 水準漢字 R O M 内蔵	
文 字 フ ォ ン ト		<input type="checkbox"/> E : 12 (ヨコ) × 24 (タテ) ドット <input type="checkbox"/> K : 24 (ヨコ) × 24 (タテ) ドット	
内 蔵 フ ァ イ ル		5"FD×1	5"FD×1
		20 MBHD×1	40 MBHD×1
増 設 ハ ー ド デ ィ ス ク		増設可 (20/40/65 MB)	
時 計 機 構		内蔵 (電池バックアップ)	
オ プ シ ョ ン ス ロ ッ ト		4 スロット (除く増設メモリ)	
グ ラ フ ィ ッ ク 機 構		標準にて内蔵	
数 値 演 算 プ ロ セ ッ サ		80287 オプション	
内 蔵 の F D / H D 仕 様		内蔵 20 MBHD	内蔵 40 MBHD
		記 憶 容 量	19,655,168 バイト 39,390,208 バイト
		セ ク タ 容 量	256 バイト
		トラック当りの論理セクタ数	26 セクタ
		論 理 ト ラ ッ ク 数	2,953 トラック 5,918 トラック
		回 転 周 期	16.7 ms
		平 均 シ ー ク 時 間	85 ms 40 ms
		平 均 回 転 待 時 間	8.4 ms

2020ディスプレイ装置仕様

項目		形式
		HT-4421-D2
接続可能なシステム装置		24×24ドットモデルシステム装置
C R T サ イ ズ		15 インチ
表 示 色		カラー (7色)
画 面 構 成	<input type="checkbox"/> E	80字×24行=1,920字/画面
	<input type="checkbox"/> K	40字×24行= 960字/画面

文字フォント	Ⓔ	ボディサイズ：12（ヨコ）×24（タテ）ドット レターサイズ：10（ヨコ）×18（タテ）ドット
	Ⓚ	ボディサイズ：24（ヨコ）×24（タテ）ドット レターサイズ：22（ヨコ）×22（タテ）ドット
分 解 能		1,120（ヨコ）×780（タテ）ドット
ド ッ ト 密 度		109 dpi（4.3本/mm）
グ ラ フ ィ ッ ク 表 示		1,120（ヨコ）×720（タテ）ドット
文 字 サ イ ズ	Ⓔ	2.2（ヨコ）×4.7（タテ）mm
	Ⓚ	5.1（ヨコ）×5.4（タテ）mm
表 示 文 字 種	Ⓔ	127種または158種（スペース含む）
	Ⓚ	J I S第1・第2水準・ユーザ定義文字
カ ー ソ ル 表 示		アンダライン プリンキングアンダライン リバースブロック プリンキングリバースブロック } プログラム設定による
表 示 属 性		リンク/リバース/拡大（横2倍，縦2倍，縦・横2倍），けい線

3.9 ファイル転送ユーティリティ I F I Tの使い方について

パーソナルワークステーションHITAC - 2020 E（及びマルチワークステーションT-560/20）を使えば、日立提供のファイル転送ユーティリティI F I Tにより、MS-DOSファイル（3.5，5，8インチフロッピーディスク）と大型機上のファイルの相互転送が可能である。2020 EでI F I Tを使うには以下のようにする。

- ① 端末モードの状態ではコントロールキーと◎を同時に押して、MS-DOSモードにする。
- ② E>の状態ではOT/MSとキーインする。O F I Sが呼び出され、T S Sモードに戻る。
- ③ READYモードでI F I Tとキーインする。I F I Tが呼び出される。メニュー画面に応答する。

O F I Sモードを解除してMS-DOSモードに戻りたい場合は、コントロールキーと中断キーを同時に押せばよい。NEC PC-9800などでフォーマットされたフロッピーディスクが利用できる。ディスクユニット機番は内蔵ハードディスクがE，F，G，内蔵5インチフロッピーがA，外付けフロッピーがB，Cとなっている。Eはシステム用，Fはユーザ用である。

3.10 2020 E用MS-DOSエディタFINALの導入と使い方

センター設置のパーソナルワークステーション2020 Eに市販ソフトウェアとして好評のMS-DOS用エディタFINALを導入した。FINALはオンラインエディタにはない優れた機能を

もつマルチスクリーンエディタである。現在のバージョンは3である。FINALとファイル転送機能OT(OFFICE TRANS), IFITを組み合わせるとたいへん有効なプログラム開発やデータセット編集が可能となる。

主な機能は以下の通り。詳しくは各端末室に備え付けのユーザマニュアルを参照のこと。

- フリー・カーソル機能
- タグ・ジャンプ機能
- ワンタッチ文字列短縮入力
- カーソル行のマークおよび、マーク行へのジャンプ
- 正規表現
- 文字列の探索と置換
- エディット終了状態の記憶と再現
- 対応するカッコの探索
- マルチ・ウインドウ/マルチ・ファイル
- MS-DOSコマンドの実行
- ポップ・アップ・メニュー
- パーマネント・マクロ
- バイナリーエディット・モード
- キーボード・マクロ
- ヒストリー機能
- オート・インデント
- 高速画面処理
- 可変タブ・ステップ
- オンメモリー・エディット
- スペースによるタブの置き換え
- Word Star ライクなコマンド体系 (初期設定)
- 表示画面の変更と設定
- コマンドの再定義
- UNDO機能
- カット&ペースト機能
- ASCIIコード表の表示
- BOX型でのカット&ペースト
- ドキュメント・モード
- 指定範囲のプリントアウト
- C言語用クロスリファレンス
- 編集中に実行できる G R E P

(1) FINALの使用法

端末をたちあげた後、CTRL+◎キーを同時に押してMS-DOSモードに切り替える。このときシステムディスクの論理機番はE:である。CTRL+◎キーで交互にMS-DOSモードとTSSモードに切り替えが可能である。ここでFEDコマンドを投入する。

```
E> FED [ファイル名]
```

これでFINALが起動される。ファイル名が省略の場合はファイル名を尋ねてくるのでF:XXXX.XXX, A:XXXX.XXXのように直接ファイル名を答える。既存ファイルの場合にはA:*.*のようにワイルドカードで答えておいて、ファイル一覧からカーソルで選択もできる。

(2) FINALの機能一部紹介

④ CNTL+PF1キーでBOX編集, フリーカーソルモードやスクリーンの縦横分割の指定ができる。

- ⑤ P A 1 キーで H E L P 情報表示, P F 2 キーで終了ができる。
- ⑥ 文字列検索, 置換, g r e p に正規表現が使える。
- ⑦ 前頁, 次頁キーでページ単位のスクロールができる。
- ⑧ P F 1 キーでエディットの終了を選択できる。

3.11 各種インフォメーションの電子化について

センターニュース, 速報, メッセージヘルプ情報, マニュアルなどの各種インフォメーションが電子化されてセンター端末をはじめユーザの端末から自由に参照できるようになってきた。しかしこれらの表示は基本的には日本語を前提としている。これからはますます日本語を前提とした便利な電子化情報が増えてくる。したがってまだ日本語対応の端末, あるいはパソコン端末をお持ちでない方はなるべく早くそちらへ移行されることをお勧めする。

(1) 使用方法

パソコンを漢字端末化するための端末ソフトは市販されているものや大学センターニュースなどに掲載されているものなどが使用できる。日本語を使用する場合は T S S 開設時に端末タイプとして T E R M K を指定することが必要である。

```
ENTER TERMINAL TYPE  
TERMK
```

(2) 速報 (センターニュース)

ユーザへの緊急連絡や従来の速報に相当するものを端末から自由に参照できるようになった。参照の仕方は次の二つの方法がある。

① N E W S コマンド

N E W S とキーインすることにより一覧が表示されるので見たい項目の番号を入力することによって参照できる。

② ' S Y S 7 . N E W S . D A T A (S 6 3 M M D D) ' ファイル参照

直接 N E W S メッセージの入っているファイルを A S P E N , E D I T などのエディタをつかって参照するか L I S T コマンドを使って表示できる。メンバー名と内容の関連を示すインデックスは ' S Y S 7 . N E W S . D A T A (I N D E X) ' に入っている。

(3) メッセージヘルプ (M S G H E L P)

M S G H E L P が機能強化された。M S G H E L P は (エラー) メッセージについての説明を T S S 端末に表示するものである。

今回の機能強化では英文テキストの表示と無手順端末 (パソコンなど) による利用がサポートされている。

FORTRANのエラーメッセージもサポートされている。

日本語テキストと英文テキストのどちらを表示するかはコマンドのパラメータ（JまたはEN）で選択できるが標準は端末で決まる（2020 端末では日本語、無手順端末では英文）。

次のユーザーコマンド記号の値を設定することによりユーザー毎に標準を決めることもできる。

```
SETCS ¥MSGHELPLANGTYPE VALUE (ENGLISH)
                                     またはVALUE (JAPANESE)
```

メッセージはシステムメッセージ、JSS4メッセージ、TSSメッセージが格納されている。無手順端末で日本語対応のものは日本語メッセージで表示できる。ターミナルタイプはTERMKを指定すること。無手順端末は21行表示毎に一旦停止してコマンド入力状態になり、送信のみなら次の表示、ENDなら終了する。

MHの簡単な説明はHELPコマンドで見ることができる。

(使用例)

```
MH JBB0411 EN
```

```
MH 0C4 J
```

(4) マニュアル

マニュアルはまずFORTRAN使用の手引きを手始めに電子化を行う。その後順次他のマニュアルも行う。FORTRAN版ができ次第連絡するので(2)のNEWSに注意のこと。

3.12 ファイル転送機能KERMITの試験的公開について

パソコンとホスト間のデータ転送のためのプログラムVOS3版KERMITを東大計算センターから移植した。ただ東大と分子研の計算センターの運用の違いから若干の手直しを必要としたのでまだ十分なテストが行われていない。プログラムが安定して動くことを一応確認するまでは、正式にライブラリに登録できないので、いろいろご意見をお聞かせいただきたい。一応公衆回線とDDXを用いて3000行程度のFORTRANプログラムを3つほど、ホストとパソコンの相互に転送してみたが、エラーはなかった。

KERMITの一般的な解説については次の文献を参照のこと。

石田晴久 ファイル転送のための汎用プログラム Kermit

石田他編 コンピュータ・ネットワーク bit 増刊 (1986)

本岡茂哲他 ファイル転送のためKermit方式について

東大大型計算機センターニュース Vol. 17, No. 12 1985

本岡茂哲 汎用ファイル転送プログラムKermitの使い方

東大大型計算機センターニュース Vol. 17, No. 12 1985

本岡茂哲 再び Kermit ファイル転送プログラムについて

東大大型計算機センターニュース Vol. 18, No 5 1986

村上健一郎 Kermit - ファイル転送プログラム

Computer Today 1988/1 No 23 p. 34

使用方法は以下の通りである。TERMINAL TYPEでコマンド名が異なる。

まず、LIB #ZA2AV6. @KERMIT. LOADを指定すること。(まだ試験的公開なので、センターのライブラリーには登録されていない。)この後にTERMINAL TYPEに対応したコマンドを投入してKERMITを起動する。

(1) TERMA (アスキー端末) の場合

AKERMITまたはCKERMIT (EBCDICの場合)

(2) TERMA以外 (TERMJ, TERMK等)

KERMIT

TERMA以外はEBCDICコードをサポートしていないので、注意のこと。

READYモードでTERMINAL TYPEが判らなくなった場合は、

TERM TERMTYPE (*****)

(ここで*****はTERMJとかTERMAとかといったTERMINAL TYPEである。)

と入力したのちにKERMITを起動する。転送が終了しKERMITから離れたのちにTERMINOTERMTYPEと入力すると元に戻る。KERMITの設定は以下のようになっている。

BLKSIZE	DEFAULT 6160
CODE	K OR C
DEBUG	OFF
DELAY	10 SEC.
END-OF-LINE	13 (DECIMAL) '015' (CR) (OCTAL)
LRECL	DEFAULT 136
QUOTE	SINGLE CHARACTER
REC. PACKET SIZE	94
RECFM	FB OR VB (DEFAULT VB)
SPACE	DEFAULT 5 TRACKS
START-OF-LINE	1 (DECIMAL) '001' (SOH) (OCTAL)

3.13 KAMUYコマンドの新設

ライブラリプログラムKAMUYを使用するための初期環境設定をおこなうコマンド。パラメー

タはない。

3.14 データセットの保護について

現在、利用者のデータセットはTRUSTにより保護されている。すでに作成済のデータセットおよびこれから作成するデータセットは他の利用者から参照できないようにしてある（標準値NONE）。ただしプロジェクト内の利用者はお互いに参照できるように設定してある（標準値READ）。以前のSAFEにより保護がかけられていたデータセットはアクセス権限がそのまま引き継がれている（NONE, READ, MASTERなど）。標準はREADであったからユーザが変更しない限りそのままになっている。個々のデータセットはアクセス権限がどのように設定されているかはTRLISTコマンドによって知ることができる。データセットのアクセス権限を変更したい場合はTRCHANGEコマンドを使用のこと。

また、例外的に保護がされていないデータセットがあった場合はTRPROTECTコマンドを使用して変更できる。

```
(例)  TRLIST DS NAME (%) SECURITY (ALL)
      TRCHANGE DS データセット名 GRPSAA (READ)
                                           ALLSAA (NONE)
      TRPROTECT DS データセット名 GRPSAA (READ)
                                           ALLSAA (NONE)
```

コマンドについての詳細は利用の手引き - プロジェクト管理・データセット保護編 - (配布済)を参照のこと。

4. 研究開発レポート

4.1 分子軌道計算結果のmodeling

分子研電子計算機センター 伊奈 諭

本プログラムは柏木浩助教授，筆者により計画立案されプログラム製作は筆者，長嶋雲兵および中部システムズの岡本政久，田中清二，玉谷祐の3名を中心に行った。

1. modelingとは？

CAD/CAMなどの分野ではよくソリッドモデリングという言葉を目にする。試しにめったに索かない辞書を開いてみると次のような訳があった。

modeling：実体感表現法，（彫刻の）肉づけ

我々がこれまで分子軌道計算結果のグラフィック処理を行ってきた努力の多くが目に見えない実体あるいは確率に基づいた仮想的な実体をいかに本物らしく，美しく，存在感のあるものとして表現できるかに注がれているのでこの便利な単語を使用することにした。

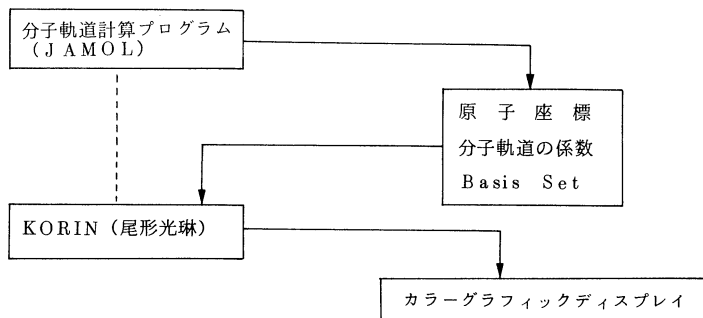
2. 目的およびプログラム概要

本modelingプログラムはKORINと呼ばれ非経験的分子軌道法によって得られた分子軌道，電子密度などの物理量を迅速に把握できるようにコンパクトに情報圧縮して人間の右脳で直観できる形の出力にデフォルメすることをねらいとしている。

あえて目的をあげれば次のようになる。

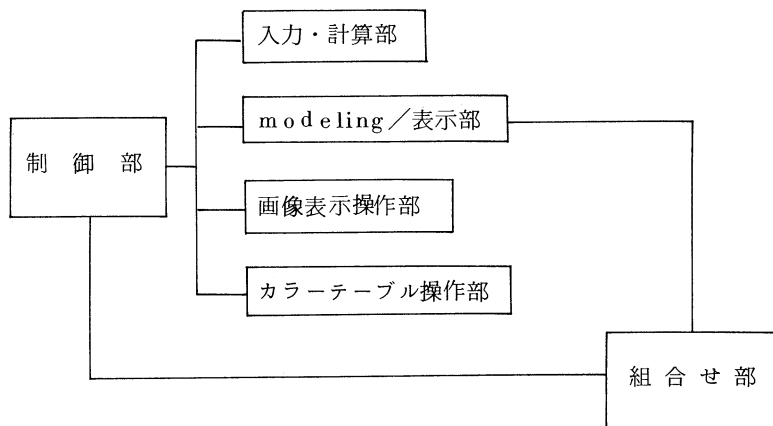
- (1) 人間へのインプットを効率化して解析のターンアラウンドの短縮。
- (2) 多くの情報を凝縮整理した情報量の多い出力。
- (3) 啓発的かつ教育的な面での効果。

(プログラムの関係と入出力)



3. 機能概要

KORINは大きく以下の六つの機能モジュールから構成されている。



(各モジュールの機能)

- ・ 制御部 全体の流れ制御
- ・ 入力/計算部 JAMOL計算結果→立体格子計算 (MO, 密度)
- ・ modeling/表示部 ボンド図
 ボールスティックモデル
 スペースフィルモデル
 3次元等値表面モデル
 3次元等値表面網目図
 3次元断面カラーパターン
 等高線図
 流線図
 鳥瞰図
- ・ 組合せ部 KORINの最も得意とする機能であり以下のような組合せを自在に行なう。
 (3次元的組合せ)
 半透明重ね合わせ
 複数任意断面によるカッティング
 (2次元的組合せ)
- ・ 画像表示操作部 単画表示
 n枚同時表示 (拡大・縮小)

n 枚連続繰返表示 (原寸)

- ・ カラーテーブル操作部 断面カラーパターンの色指定, 保存

4. アルゴリズムまたは出典

- ・ 3次元等値表面モデル
- ・ 3次元任意断面カラーパターン
- ・ ボールスティックモデル
- ・ スペースフィルモデル

これらは基本的には光線追跡法を使用した。

3次元補間はエルミート補間を使用 (NUMPAC HERM 32 の3次元拡張) した。

HERM 32 の3次元拡張については基本式と助言を中京大秦野先生からいただきプログラムを作成した。

- ・ 3次元等値表面網目図

PSI/77 (QCPE) からの図形処理部を抜き出して KORIN 用に移植修正サブルーチン化した。

- ・ 等高線図/流線図/鳥瞰図

中京大秦野先生作成のプログラムから移植した。

5. 3次元等値曲面, 任意断面の計算方法

4.で示したようにスペースフィル, ボールスティックモデル, 3次元等値表面モデル, 任意断面カラーパターンはすべて光線追跡法をベースとして画像生成を行っており, 陰影づけ (shading) は光源, 視点, 物体の材質等を反映して行なっている。視点に関しては無限遠, 有限の両方に対応している。ここでは特に三次元等値曲面, 任意断面の計算方法について述べることにする。図 5.1 のように一般に物体表面 P での輝度は次のような計算式で求めることができる。ただしここでは屈折, 透過の効果は省いてある。¹⁾

$$\begin{aligned}L &= L_e + L_d + L_s \\ &= a + b \cdot \cos(i) + c \cdot (\cos(e))^n\end{aligned}$$

ここで

L_e : 周囲環境の散光による輝度

L_d : 光源からの入射光による散光の輝度

L_s : 光源からの入射光の正反射による輝度

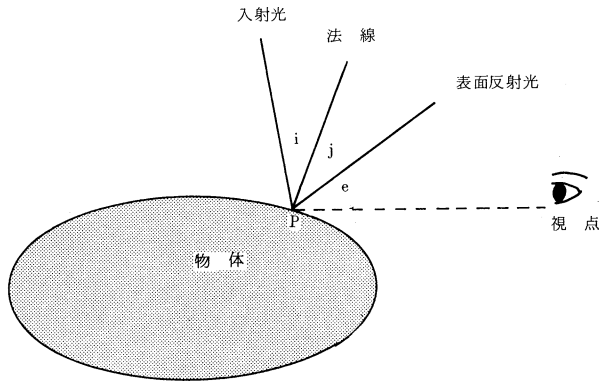


図 4.5.1 物体表面から眼に入る光

次に等値曲面の形状であるがこれは一つの関数形で表されるような幾何学形状を持っていないため、予め求められた 3 次元直方格子上の値をもとにしてその形状を決定する必要がある。その方法を図 4.5.2 に示す。3 次元直方格子にたいして視点位置から決定される視点ピラミッドを構築し、その中の格子を逐次探索して求める等値点の位置を計算していく。等値点の位置が決まればその点での輝度計算ができる。視点ピラミッド内の格子点計算には 4. で述べたように 3 次元エルミート補間を使った。

投影面での格子精度は本来ディスプレイの分解能 1024×1024 とするべきであるがここでは計算時間、実用面での配慮から $1/4$ の 512×512 で行い作画時には 4 ピクセルを 1 表示単位として表示した。

3 次元等値曲面の計算

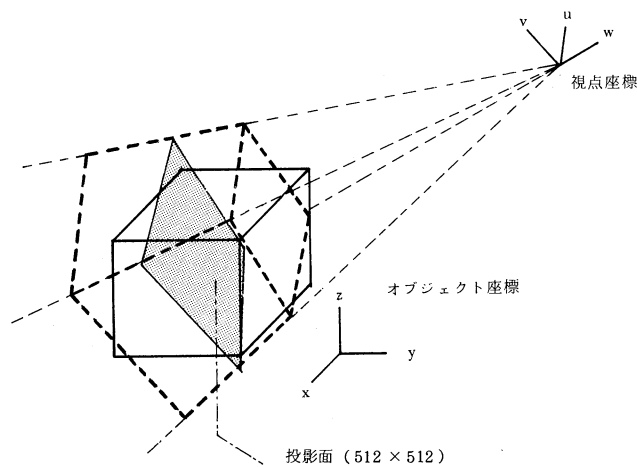


図 4.5.2 3 次元等値曲面の探策

任意断面上の等高値計算の方法もほとんど3次元等値曲面の計算方法と同じように行なった。ただしここでは等値点の探索，輝度計算の必要はなく図4.5.3のように投影面上の1ピクセルに対応する任意断面上の等高値を3次元エルミート補間を用いて計算しそれを等高値に応じたカラーに変換するだけでよい。この場合は計算時間の制約はないため投影面での格子精度はディスプレイの分解能と同じ 1024×1024 で行なった。

任意断面の計算

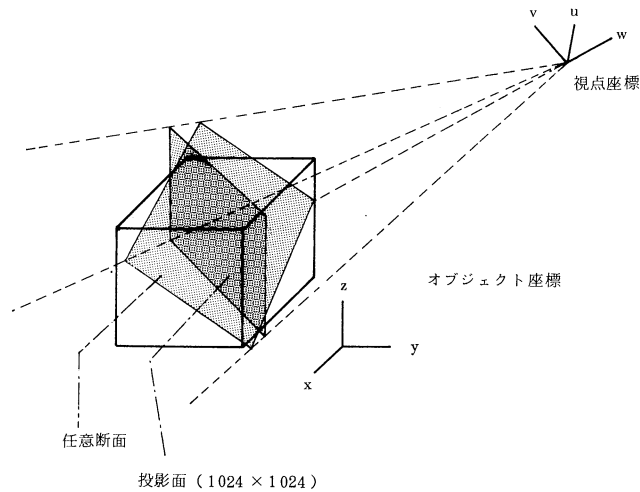


図 4.5.3 任意断面の探策

6. 高速化の経緯

プログラムの高速化のために以下の3点に留意して開発を行なった。

- (1) 31ビットアドレス化
- (2) 拡張記憶装置の利用
- (3) ベクトル演算器の利用

サブルーチンコールをやめてできるかぎり最内側DOループを大きくした。

極力ループ展開，数式の展開を行なった。

極力変数は配列化してベクトル化した。

(1)と(2)は磁気ディスクの入出力を極力利用せず経過時間の短縮のために効果が出た。

(3)はCPU時間の短縮のために効果が出た。

(CPU時間高速化の事例)

3次元等値表面モデル計算の高速化例

KORINプログラム中最もCPU時間のかかっていた所である。

処理内容は以下のように元格子から画像のピクセル数に対応した大きさの新格子を構築し、そこから求める等値点を特定してそこでの輝度計算をおこなって色変換を行なうものである。

	(x)	(y)	(z)
元格子	90 ×	90 ×	60
		↓ 発生	
新格子	512 ×	512 ×	101 の格子の場合

無修正 ———— > 数式展開 ———— > ベクトル化 ———— > ベクトル化

M-680 H	M-680 H	S 810 / 10	S 820 / 80
72 min	12 min	6 min	59 sec (VPU/CPU=70%)

1 pixelあたりの計算時間 (S 820) 見積は $59 \text{ sec} / 5122 = 0.225 \text{ ms}$ であった。

(ベクトル化した断面と等値面計算プログラムの主要部の構造)

3D等値面の探索

```
DO 1000 V=1, NY
      (512)
DO 2000 U=1, NY
      (512)
      (16 steps)
```

```
DO 3000 W=1, NZ
      (101)
```

(ベクトル化)

エルミート補間値の計算

等値面の探索と線形補間

(250 steps)

```
3000 CONTINUE
```

(3 steps)

3D断面の探索

```
DO 1000 V=1, NY
      (1024)
DO 2000 U=1, NX
      (1024)
```

(ベクトル化)

断面上の交点計算

エルミート補間値計算

(164 steps)

2000 CONTINUE
 (7 steps)
 1000 CONTINUE

2000 CONTINUE
 (6 steps)
 1000 CONTINUE

新FORTRAN (21-00) での速度比較

単位 秒

断 面			等 値 面		
M680 H	S 820		M680 H	S 820	
	NOHAP	HAP		NOHAP	HAP
28.05	24.53	2.42	679.24	604.07	59.38

比率 1.0 1.14 11.6 1.0 1.12 11.44

S 820 のスカラー速度は M680 H より 1 割強は速い。

また HAP では 10 倍以上速くなった。

7. 今後の抱負

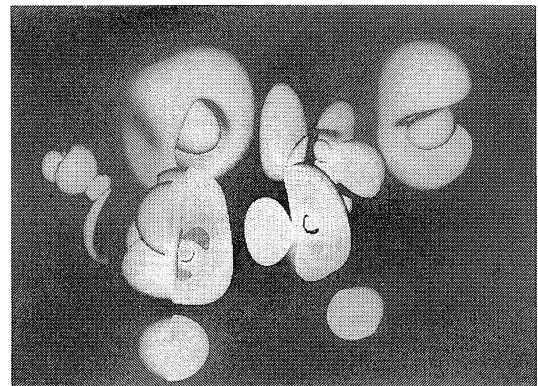
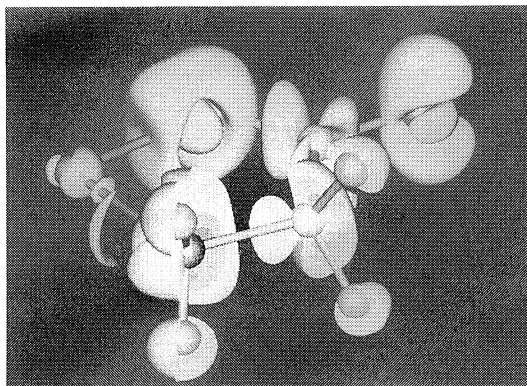
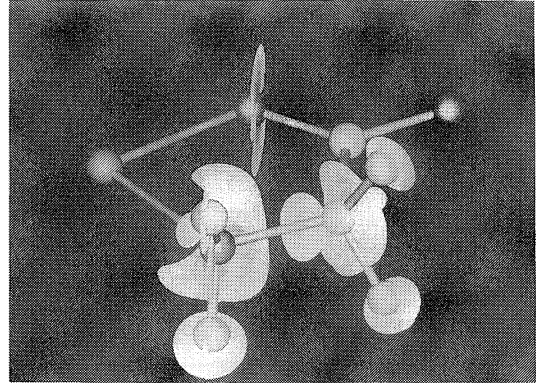
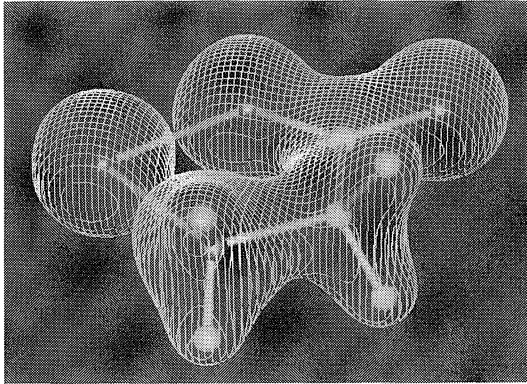
今回の画像はすべて静止画像であったが、これからは動画像にも発展させたい。その手法としては以下のようなものがあげられる。

- ・リアルタイム性のある会話型画像処理表示
 - 3次元グラフィックワークステーションの高速プロセッサ有効利用
 - MO, 電子密度, 断面など3次元立体の多面体分割表示
- ・ビデオ等による動画作成
 - 発表用, 教育用

参考文献

- 1) 山口富士夫, 「図形処理工学」 日刊工業 (1981)

8. KORINによる製作画像



5. 一 般 報 告

5.1 データベースやプログラムの著作権の帰属について

データベースやプログラムの著作権については長期間の議論の結果、昭和60、61年の著作権法の改正によって、著作物として保護されるようになった。これに関連して、国立大学の教官などが作成したプログラムやデータベースの著作者の取扱いについても検討が行われて来たが、昭和62年学術審議会学術情報部の報告にもとづいて、文部省から通達が出された。これによって、(1)国からデータベース等の作成を直接の目的とする国立学校特別会計経費を受けて作成したデータベース等の著作権は国に属する。(2)データベース等の作成を直接の目的とする民間等との共同研究や受託研究により作成したデータベース等の著作権は国と民間との共有にできる。(3)上記以外の著作権は作成者である教官等に属することが決められた。これによれば、教官等が研究活動の一部として作成したデータベースやプログラム、あるいは科学研究費補助金や民間の援助などによって作成したものは、上記(3)によって教官等に著作権が所属することになる。

このような教官等が作成したデータベースやプログラムの著作権の取扱いを決めるため、岡崎研究機構でも本年2月データベース等取扱規程が定められた。この規程の下に各研究所の主幹各2名、研究施設長各1名、技術課長と分子研電子計算センター長から成るデータベース等取扱委員会が発足し、機構長の諮問に応じてデータベース等の権利の所属を審議することになった。また、本機構の教官や機構外の研究者などが、本機構の経費をうけて上記(1)、(2)に関連するデータベース等を作成した時には、機構長あて年度末に届け出るようになった。

分子研電子計算機センターに関連していえば、同センターのデータベース作成経費をうけて作成されたデータベースの著作権は、(1)により国に属するのが原則となる。一方、多くの方々に協力していただいているプログラム開発の謝金や旅費は、その使用目的がすでに開発されたプログラムを分子研電子計算機センターに移植・公開していただくことにあるので、著作権の帰属には関係しないと考えられる。

原則は上記のように決められても、実際には必ずしも簡単ではない。たとえば、データベースの多くは、研究者によって長期間にわたる研究活動の一部として、また、ボランティア活動によって創作・開発され、科研費や民間・財団などの援助をうけて育てて来たものであり、この部分の著作権は当然上記(3)により作成者に属すると考えられる。その後、国のデータベース開発費によって継続して作成される部分の著作権は国に属するが、データベースは長年の蓄積をあわせて全体としてはじめて役に立つものなので、全体としては国と作成者との共有にすることが適当であると考えられる。この

場合、持分比などは上記のデータベース等取扱委員会で審議のうえ決められることになる。

分子研電子計算機センターでは、量子化学データベース研究会（代表：北大理 大野公男教授）と協力し、全国の量子化学研究者の応援を得て量子化学文献データベース（QCLDB）の開発を行って来た。研究会は昭和51年度から活動を開始し、科研費や財団などの援助により、データベースの構想・試作・改良と計3200件のデータ収集を昭和56年度までに行ってきた。昭和57年度からは、電子計算センターのデータベース開発費によって継続作成されている。このデータベースは、外国研究機関からの頒布希望が数多くあったが、昭和59年から著作権の問題は一応たなあげしたまま、文部省・分子研研究会の申合せによって無償（手数料のみ）で外国の大学・研究所に限って頒布されて来た。データベース開発費で作成されたデータベースで外国からの引合いの多いはじめてのケースとして、その著作権の持分について4年間にわたる長い交渉がつつけられた結果、データベースの著作権の持分は、昭和63年度から65年度の3年間は、国50%、量子化学データベース研究会50%とすることで話合いがつき、データベース等取扱委員会の承認も得られて結着した。このデータベース作成への国の寄与はデータベース開発費であるが、研究会の寄与として、科研費・財団からの援助による旅費・謝金などの実支出のほか、国の開発費が出る以前に研究会が行ったデータベース構築のための打合せ、試作、データ収集などの創作活動の一部が考慮されている。このことは、データベース作成者にとっては極めて重要なことで、研究者が営々と続けて来た創作活動が認められたことは大変喜ばしい。なお、QCLDBについては、国の持分に当る部分の複製権と頒布権（国内の大学への頒布は分子研で行うことを除く）を最近発足した学術情報センターに移管すること、データベースのこの分と研究会の持分に当る部分および研究会が著作権を100%持つ検索プログラムを合わせて化学情報協会（JAICI）を総代理店として、国内民間および国外の大学・研究所・民間に有償で頒布すること、頒布に際してQCLDBの作成・頒布者を量子化学データベース研究会・分子研・学術情報センターの3者とする事などが決められている。長い間待っていただいた民間の研究者にも利用していただけるのももうすぐである。

5.2 分子研ライブラリプログラムの収集と開発

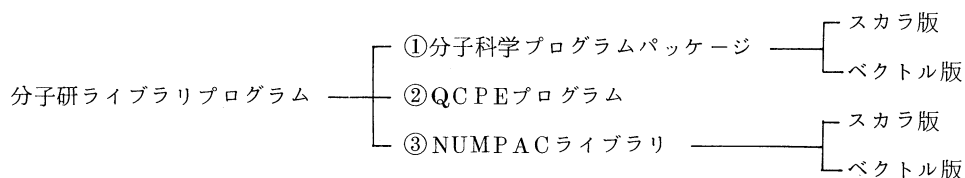
昭和62年度のライブラリ開発計画を表5.2.1に示す。開発されたライブラリは新規プログラムの登録あるいは既存プログラムの改良・発展というかたちでライブラリ管理システムを介してユーザに公開されている。

表 5.2.1 昭和62年度分子研ライブラリプログラム開発作業一覧

1	安藤 勲	東工大	助教授	NMRしゃへい定数計算
	安藤 慎治		大学院生	プログラムFPTCHTの開発
	黒子 弘道		大学院生	

2	長村吉洋	慶大 助手	MCSCF計算プログラムGAMESS
3	村上明德	北大 大学院生	CI計算プログラムMICA3のレベルアップ
	寺嶋秀美	大学院生	
	庄田孝行	大学院生	
	野呂武司	助手	
	岩城宏明	大学院生	
4	野村興雄	理研 研究員	MCSCFプログラムGAMESSのCADPAC版の整備
	生田茂	都立大 助教授	General Spin Orbital
5	井川明雄	東京電気大 助教授	Hartree-Fock計算のプログラムの開発
	福留秀雄	京大 助教授	分子軌道計算プログラムCOLMBSのレベルアップ
6	藪下 聡	分子研 技官	固体バンド計算のプログラムFLAPWの開発
7	寺倉清之	東大 助教授	
	石田浩	助手	
	柳瀬章	大阪府大 教授	
8	富樫雅文	北大 研究生	半経験的分子軌道計算プログラムMOPACの開発整備
	イエジ・ルジンスキー	大学院生	
9	二宮市三	中部大 教授	汎用数学計算プログラムNUMPACのベクトル化
	秦野甯世	中京大 助教授	
10	片岡洋右	京大 助手	CCP5のプログラムパッケージの整備登録
11	別府良孝	愛知技術短 講師	高性能固有値ルーチンANGELの開発
12	佐々木不可止	北大 助教授	新CIプログラムKAMUYのレベルアップ
	田中 皓	講師	
	関谷雅弘	分子研 受託大学院生	
13	酒井嘉子	九大 助手	モデルポテンシャルの関数データの整備
	三好永作	福岡歯大 助手	
	富樫雅文	北大 研究生	
14	田中英次	阪工大 非常勤講師	CI計算プログラムGSDTCIの開発
	荒川透	阪市大 研究生	
15	小笠原隆亮	高エネ研 助手	星間分子の遷移周波数のデータベース及び検索システムのバージョンアップ

分子研ライブラリプログラムの構成は以下の様に3部構成になっている。



①の分子科学プログラムパッケージには、国内および国外の研究者から提供されたプログラム、②のQCPEプログラムを現行システムにコンバートしたものなど約100件が収まっている。①のソースプログラムはデータセットとして磁気ディスク上にカタログされている。汎用機(M-680H)で実行させるためのスカラ版とスーパーコンピュータ(S-820/80)で実行させるためのベクトル版の2

者を用意している。ライブラリプログラムの大部分については実行可能ロードモジュールも登録されているので、ユーザは即座にプログラムを実行することができる。

昭和62年度に新規登録した分子科学プログラムパッケージは以下の2本である。

KAMUY AB INITIO CI CALCULATION OF ELECTRONIC STRUCTURE
CCP5 CCP5 SIMULATION PROGRAMS

プログラム RKNGAU, IPCREF は SCMOLX 及び CIMOLX で代替可能であるためライブラリより削除した。総件数は 135 件である。

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 481 本である。量子化学の分野でよく使われる有名なプログラムのみならず、数学・物理・化学一般のプログラムも含まれており、非常に有益なものである。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サービスを行っている。

昭和62年度に新規登録したQCPEプログラムは以下の14件である。

QC0513 AMPAC: GENERAL SEMI-EMPIRICAL MO PACKAGE (APPOLO VERSION)
QC0514 BIGSTRN-3: EMPIRICAL FORCE FIELD PROGRAM (VAX VERSION)
QC0515 UNIMIR: UNIMOLECULAR REACTION INDUCED BY MONOCHROMATIC IR
QC0516 AMPAC: GENERAL SEMI-EMPIRICAL MO PACKAGE (CRAY-XMP VER.)
QC0517 FORTICON8: EXTENDED HUCKEL CALCULATIONS (VAX VERSION)
QC0518 DAISY: SIMULATION AND AUTOMATED ANALYSIS OF HR-NMR SPECTRA
QC0519 DOKI77/DOKI78: NMR SPECTRA SIMULATION
QC0520 POWDRFIT: UNIT-CELL PARAMETERS FROM POWDER PATTERN
QC0521 CLUST: SIMULATION OF DIFFRACTION INTENSITY OF CLUSTER
QC0522 GEAR: GEAR ALGORITHM INTEGRATION OF CHEMICAL KINETICS EQ.
QC0523 AMPAC: GENERAL SEMI-EMPIRICAL MO PACKAGE (IBM VERSION)
QC0524 CHELP: NET ATOMIC CHARGES FROM AB INITIO WAVE FUNCTIONS
QC0525 GAUSSIAN80: IBM VERSION III (CMS)
QC0526 ARKMOD: ARKANSAS MOLECULAR DISPLAY PROGRAM

③のNUMPACプログラムは二宮市三教授(中部大)、秦野甯世助教授(中京大)らにより製作された名古屋大学大型計算機センターの数値計算ライブラリプログラムを移植したものである。昭和62年度、新たに以下の31本のプログラムを追加登録し、総件数は 857 本となった。

スカラー版(8件)

ABRMO	DABRMO	ABRM1	DABRM1	ABRM2	DABRM2	ABRMM
DABRMM						

ベクトル版(23件)

MULMVV	MULMVW	MULMVX	MULMVY	MULMMV	MULMMW	MULMMX
MULMMY	ADDMMV	ADDMMW	ADDMMX	ADDMMY	SUBMMV	SUBMMW
SUBMMX	LEQLUX	LEQLUY	CHLBDV	CHLBDW	MCHLBV	MCHLBW
MINVX	MINVY					

以下、表 5.2.2 に現在登録されている分子科学プログラムパッケージの一覧を掲げる。(昭和63年
6月6日付)

表 5.2.2 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  MDANO3  MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE
002  DVSCAT  NUMERICAL-BASIS-SCC-DV-XALPHA MO AND CLUSTER CALCULATION
003  EHTB    EXTENDED HUCKEL METHOD FOR TWO DIMENSIONAL PERIODIC SYSTEMS

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

NO. PROGRAM ID      PROGRAM TITLE
001  BAND1    EXTENDED HUCKEL CALCULATIONS OF ONE-DIMENSIONAL POLYMERS

FIELD CODE   : AS30
FIELD TITLE  : LIQUID AND SOLUTION.

NO. PROGRAM ID      PROGRAM TITLE
001  MDANO3  MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE
002  MDSALT  MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION FOR MOLTEN SALT
003  CLAMPS  CLAMPS: CLASSICAL MANY PARTICLE SIMULATOR
004  NLPLSQ  LEAST-SQUARES PROGRAM FOR REFINING LIQUID STRUCTURE MODELS
005  KURVLR  PROGRAM FOR ANALYSING X-RAY DIFFRACTION DATA OF LIQUID
006  CCP5    CCP5 SIMULATION PROGRAMS

FIELD CODE   : BI10
FIELD TITLE  : BIOMOLECULES.

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

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

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

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MM2	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION BY MM2 FORCE FIELD MODEL
002	MMIPI1	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 100-ATOM MOLECULES
003	MMIPI3	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 300-ATOM MOLECULES
004	MMIY3	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION FOR 6-COORDINATED COMPOUNDS
005	MDANO3	MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE
006	CLAMPS	CLAMPS: CLASSICAL MANY PARTICLE SIMULATOR
007	BGSTR3	BIGSTRN3: A GENERAL PURPOSE EMPIRICAL FORCE FIELD PROGRAM
008	CCPS	CCPS SIMULATION PROGRAMS

FIELD CODE : DB10
FIELD TITLE : DATA BASES.

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

FIELD CODE : EG10
FIELD TITLE : EDUCATIONAL TOOLS.

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

FIELD CODE : EG20
FIELD TITLE : GENERAL UTILITIES.

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

FIELD CODE : GP10
FIELD TITLE : GRAPHIC PROCESSING.

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

005 MDP MOLECULAR DISPLAY PROGRAM
006 CRYSTA PROGRAM SYSTEM FOR CRYSTAL STRUCTURE ANALYSIS
007 EXAFS GRAPHIC PROGRAM SYSTEM FOR EXAFS ANALYSIS

FIELD CODE : MI10
FIELD TITLE : MOLECULAR INTEGRALS.

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

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

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

FIELD CODE : NM40
FIELD TITLE : SYMMETRY ANALYSIS.

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

FIELD CODE : SC10
FIELD TITLE : SCATTERING AND TRAJECTORY.

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

FIELD CODE : SC20
FIELD TITLE : CRYSTALLOGRAPHY.

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

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	DIABIB	CALC. OF NUMERICAL VIBRATIONAL WAVEFUNCTION FOR DIATOMICS
002	DIABIB	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
004	JHH	3JHH: NMR VICINAL COUPLING CONSTANTS
005	FPTSPN	NMR SPIN-SPIN COUPLIN CONSTANT CALCULATION BY FPT INDO
006	FPTNMR	CALCULATION OF NMR CHEMICAL SHIFT BY FPT-INDO/CNDO

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	NCTB	NORMAL COORDINATE TREATMENT OF MOLECULAR VIBRATIONS
002	CVOA	NORMAL COORDINATE TREATMENT OF CRYSTAL VIBRATIONS
003	LSVR3	LEAST-SQUARES ANALYSIS OF VIB-ROT SPECTRA OF AN ASYM. TOP
004	LSRES3	L.S. ANALYSIS OF VIB-ROT SPECTRA OF ASYM. TOP IN RESONANCE
005	BC3	CALCULATION OF VIB-ROT SPECTRA OF ASYMMETRIC TOP
006	BCRES3	CALC. OF VIB-ROT SPECTRA IN RESONANCE FOR AN ASYMM. TOP
007	ENVLOP	CALCULATION OF BAND ENVELOPES OF VIB-ROT SPECTRA
008	DISPL3	DISPLAY OF THEORETICAL VIB-ROT SPECTRA
009	ASSIGN	ASSIGN DIAGRAM FOR THE ASSIGNMENT OF VIB-ROT SPECTRA
010	ISLINE	ATOMIC AND MOLECULAR SPECTRAL LINE DATA RETRIEVAL SYSTEM
011	CHEMIC	CHEMICS :AUTOMATED ORGANIC CHEMICAL STRUCTURE ELUCIDATION
012	IR2	INFRARED SPECTRAL RETRIEVAL SYSTEM
013	SERIES	LOOMIS-WOOD DIAGRAM FOR FINDING LINE SERIES
014	DIABIB	CALC. OF NUMERICAL VIBRATIONAL WAVEFUNCTION FOR DIATOMICS
015	DIABIB	CALC. OF FCF AND ELECTRONIC SPECTRA OF DIATOMIC MOLECULES
016	FEMSE2	FINITE ELEMENT METHOD FOR 2-DIMENSIONAL SCHRODINGER EQ.

FIELD CODE : WF10
FIELD TITLE : WAVEFUNCTIONS BY AB INITIO METHODS.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	QCLDB	QUANTUM CHEMISTRY LITERATURE DATA BASE SYSTEM
002	JAMOL3	AB INITIO LCAO MO SCF CALCULATION
003	ATOMHF	AB INITIO LCAO SCF OF ATOMS. GAUSSIAN ORBITALS ARE USED.
004	HONDOG	AB INITIO LCAO-SCF-MO METHOD AND GRADIENT METHOD
005	SCEP	SELF-CONSISTENT ELECTRON PAIRS METHOD
006	IMSPAC	AB INITIO SCF MO CALCULATIONS
007	IMSPAK	GEOMETRY OPTIMIZATION BY AB INITIO SCF-MO CALCULATIONS
008	PA200	LIST OF ONE- AND TWO-ELECTRON INTEGRAL LABELLS
009	PA300	EVALUATE ONE- AND TWO-ELECTRON INTEGRALS
010	PA409	CLOSED-SHELL SCF AND POPULATION ANALYSIS PACKAGE
011	PA600	ONE-ELECTRON PROPERTIES PACKAGE
012	INTCPY	INTEGRAL COPY ROUTINE OF POLYATOM SYSTEM
013	GAUS76	AB INITIO MO CALCULATION. GAUSSIAN 76 M-VERSION.
014	ALIS	AB INITIO MCSCF PROGRAM FOR ATOMS AND MOLECULES
015	JAPIC1	PLOTTER WRITING OF MO AND DENSITY BY AB INITIO METHODS

016 JAPIC2 PLOTTER AND GRAPHIC DISPLAY WRITING OF MO AND DENSITY
017 GUGACI GRAPHICAL UNITARY GROUP APPROACH CI BY ISIAH SHAVITT
018 DRAWDG DIAGRAM:GENERATION OF GOLDSTONE AND BLOCH-BRANDOW DIAGRAMS
019 GSCF2 PROGRAM GSCF2 WITH ONE-HAMILTONIAN AND PARTIAL SCF METHOD
020 GAMESS GENERAL ATOMIC AND MOLECULAR ELECTRONIC STRUCTURE SYSTEM
021 GAUS80 GAUSSIAN 80 : AB INITIO MO CALCULATION (HITAC VERSION)
022 ALCHEM ALCHEMY:AB INITIO ELECTRONIC STRUCTURE CALCULATION PACKAGE
023 CMQCA CARNEGIE-MELLON QUANTUM CHEMISTRY ARCHIVE
024 ATOMCI CONFIGURATION INTERACTION PROGRAM FOR ATOMS
025 CASSCF A PROGRAM FOR COMPLETE ACTIVE SPACE SCF CALCULATIONS
026 PSHOND PSEUDOPOTENTIAL VERSION OF MO PROGRAM HONDO
027 MELD PROGRAM FOR MANY ELECTRON DESCRIPTION
028 JANIE1 NUMERICAL INTEGRATION OF ELECTRON DENSITY
029 GRAMOL GRADIENT METHOD PROGRAM
030 COLMBS COLUMBUS: A PROGRAM SYSTEM FOR SCF,MCSCF AND MR-SDCI CALC.
031 ATOMST SCF PROGRAM FOR ATOMIC CONTRACTED STO CALCULATIONS
032 GAUS82 GAUSSIAN 82:AB INITIO MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS
033 MICA3 A PROGRAM SYSTEM FOR CONFIGURATION MIXING CALCULATION(CI)
034 SAC85 SAC/SACCI PROGRAM FOR GROUND,EXCITED,IONIZED AND ANION STATE
035 GSCF3 PROGRAM GSCF3 FOR SCF AND CI CALCULATION
036 QCBDB QUANTUM CHEMISTRY BASIS SET DATA BASE
037 JASON2 CASSCF CALCULATION WITH LARGE BASIS SET
038 SCMOLX MOLYX-SCF
039 CIMOLX MOLYX-CI
040 KAMUY KAMUY:AB INITIO CI CALCULATION OF ELECTRONIC STRUCTURE
041 FEMSE2 FINITE ELEMENT METHOD FOR 2-DIMENSIONAL SCHRODINGER EQ.
042 MPBDB MODEL POTENTIAL BASIS SET DATA BASE

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MINDO3	MO CALCULATIONS BY MINDO/3 METHOD
002	CNINDO	MO CALCULATION BY CNDO AND INDO METHODS
003	MNDOM	MNDIFIED VERSION OF MNDO SCF MO CALCULATION PROGRAM
004	FPTNMR	CALCULATION OF NMR CHEMICAL SHIFT BY FPT-INDO/CNDO
005	CNDOS	CNDO/S-CI: MODIFIED CNDO AND CI METHOD
006	MNDOC	CORRELATED SEMIEMPIRICAL CALCULATIONS WITH GEOM.OPT.
007	FPTSPN	NMR SPIN-SPIN COUPLIN CONSTANT CALCULATION BY FPT INDO
008	MOPAC	A GENERAL MOLECULAR ORBITAL PACKAGE
009	GHFID	GENERAL HARTREE-FOCK CALCULATION
010	BAND1	EXTENDED HUCKEL CALCULATIONS OF ONE-DIMENSIONAL POLYMERS

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

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

**** TOTAL NUMBER OF UNIQUE PROGRAMS ****
139

**** SORTED UNIQUE PROGRAMS ****

ALCHEM	ALIS	ASA	ASSIGN	ATOMCI	ATOMHF	ATOMST
BAND1	BCRES3	BC3	BENDER	BGSTR3	BSIP	CASSCF
CCP5	CGTOFD	CGTORL	CHEMIC	CIMOLX	CLAMPS	CMQCA
CNDOS	CNINDO	COLMBS	CONVRT	COUNTF	CRYSTA	CSACST
CVOA	DIAINT	DIAVIB	DISMAP	DISPL3	DNMR3	DRAWDG

DVSCAT	EHTB	EMOR1	ENVLOP	EXAFS	FCBSD	FCMP
FEMSE2	FLOW	FORDAP	FPTNMR	FPTSPN	GAMESS	GAUS76
GAUS80	GAUS82	GHFID	GORDON	GPQDD	GRAMOL	GSCF2
GSCF3	GUGACI	HLISP	HMO	HONDOG	HUCKEL	ICON
IMSPAC	IMSPAK	INTCPY	IR2	ISLINE	JAMOL3	JANIE1
JAPIC1	JAPIC2	JASON2	JHH	KAMUY	KURVLR	LAOCN3
LIBE	LSRES3	LSVR3	MDANO3	MDP	MDSALT	MELD
MICA3	MINDO3	MMIPI1	MMIPI3	MMIY3	MM2	MNDOC
MNDOM	MOLSC1	MOPAC	MPBDB	MPXALP	MULTAN	NASH
NCTB	NICER	NLPLSQ	ORTEP	OTHELO	OUTFIT	PA200
PA300	PA409	PA600	PDB	PFORTV	PGCCMB	PKIT
POTOPS	PPP	PROFIL	PRTXYZ	PSHOND	PSPART	PSTOPO
QCBDB	QCHECK	QCLDB	REDUCE	REPORT	SAC85	SALS
SCEP	SCMOLX	SERIES	SFORT	STEREO	STERIC	STINGY
SUPPOS	TASP	TSS517	UNICS3	VREPR1	WIGNER	

IMS COMPUTER CENTER: LAST UPDATE = 88-06-06

5.3 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6件が登録されており、ユーザに公開している。

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

5.4 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二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コーナーで行っている。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、TSSコマンドおよび操作、ASPENなどのエディタ、MTM、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(主に理論系および電算機センターの受託大学院学生)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GAUSSIAN80、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。

5.5 研究会・学会報告

5.5.1 第12回国研セミナー

昭和62年9月26日 分子研

- ・コンピュータで探る分子の世界
- ・発表者 柏木 浩

(内容) 岡崎市内の小中学校の先生に最近の計算化学の現状をモレキュラグラフィックスのスライドなどを用いて紹介した。

5.5.2 高校生のための化学講座 — 講演と映画の会 —

昭和62年10月24日 長野県立明科高校

- ・コンピュータで探る分子の世界
- ・発表者 柏木 浩

(内容) 高校生を対象として、コンピュータを用いることにより分子の世界がどのように明らかになりつつあるか解説した。

5.5.3 情報化学討論会

昭和62年11月6－8日 北里大学(東京)

- ・分子軌道, 電子密度の図形表示システム(その2)
- ・発表者 秦野甯世(中京大), 柏木 浩

(内容) 図形処理システム JAPIC3 を用い, アミノ酸エステルの活性化を分子周辺の静電場の表現により解析した。

5.5.4 情報化学討論会

昭和62年11月6－8日 北里大学(東京)

- ・電子構造を映像化するプログラム KORIN の開発
- ・発表者 柏木 浩, 伊奈 諭, 長嶋雲兵(分子研), 田中清二, 玉谷 祐, 岡本政久(中部システムズ)

(内容) 分子軌道，電子密度の多様な三次元表示のためのプログラム KORIN の特徴と表現を発表した。

5.5.5 名大大型計算機センター研究会

昭和63年2月12日 名大大型計算機センター

- ・スーパーコンピュータと分子のイメージ
- ・発表者 柏木 浩

(内容) グラフィックプログラム KORIN を S-810 で走らせると，分子についてどのような映像が得られるかカラー 슬라이ドを用いて紹介した。

5.5.6 スーパーコンピュータワークショップ

昭和63年3月11日～12日 分子科学研究所

- ・分子軌道計算結果の modeling
- ・発表者 伊奈 諭

(内容) 分子軌道計算によって得られた MO，電子密度を眼に見える形で画像化するための手法を中心に発表した。同時に汎用計算機，スーパーコンピュータを使った場合のレイトレーシングモデルの高速化についても述べた。

6. 昭和62年度稼働状況および利用者数

6.1 利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数

利用状況	利用区分	プロジェクト数	ユーザー数	時間			点数	
				申請	許可	実績	許可	実績
分子科学	施設利用	146	494	5,585	4,233	3,648	1,693,200	1,313,380
	課題研究	2	7	80	70	17	28,000	6,271
	協力研究	19	19	870	672	460	268,800	165,430
	所内	41	130	3,269	2,948	2,953	1,179,200	1,063,152
生理学	施設利用	2	4	12	10	6	4,000	1,972
基礎生物学	施設利用	3	9	64	45	3	18,000	927
合計		213	663	9,880	7,978	7,087	3,191,200	2,551,132

(注) ここでのCPU時間実績は点数管理の方から(点数/360)を行って逆算したものであるため、LP用紙使用量、ディスク使用量等の要素による点数も反映されている。したがって純粋のCPU使用時間となっていないことに注意。

6.2 システム稼働状況

表 6.2.1 システム稼働状況

年月	稼働時間		保守時間
	グローバル	ローカル	
62 / 4	548 : 30	546 : 30	14 : 30
5	560 : 00	558 : 00	12 : 00
6	593 : 00	591 : 00	11 : 00
7	533 : 00	528 : 00	11 : 00
8	481 : 30	478 : 30	13 : 30
9	545 : 30	544 : 30	10 : 30
10	458 : 30	454 : 30	11 : 30
11	525 : 30	521 : 30	9 : 30
12	448 : 00	446 : 00	8 : 00
63 / 1	491 : 30	490 : 30	9 : 30
2	534 : 00	452 : 00	4 : 00
3	600 : 30	598 : 30	9 : 30
計	6319 : 30	6209 : 30	124 : 30

6.3 CPU時間

(M-680H CPU時間)

(#)	(A)	(B)	(C)	(D)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(TOTAL)
04	8:29:05	42:47:28	121:45:30	137:20:53	1:58:48	0:00:00	16:12:55	2:40:58	12:44:51	25:54:22	369:54:50
05	12:49:44	40:10:44	118:48:04	159:31:33	0:20:04	0:00:00	14:52:58	3:14:55	1:54:18	15:56:15	395:38:35
06	8:40:35	30:07:12	118:52:36	228:00:41	7:18:53	0:00:00	14:43:27	3:05:46	5:27:12	2:06:11	418:22:33
07	10:56:14	30:14:03	126:58:23	140:14:10	2:29:16	0:00:00	15:04:11	3:20:52	1:32:30	1:58:57	332:48:36
08	7:43:00	30:51:01	101:25:56	161:30:38	4:28:00	0:00:00	12:54:56	3:33:48	2:02:08	2:22:26	326:51:53
09	10:21:39	37:55:09	110:21:56	204:00:35	4:08:28	0:00:00	16:38:22	3:03:48	3:45:54	1:25:01	391:40:54
10	5:31:03	24:43:52	93:55:37	122:32:05	15:35:01	0:00:00	13:14:54	2:26:22	19:43:15	15:16:39	312:58:48
11	5:15:25	22:46:39	100:57:30	222:52:49	0:33:24	0:00:00	12:11:08	4:23:25	8:10:11	3:32:42	380:43:13
12	7:09:26	21:52:25	100:43:50	143:08:25	2:25:02	0:00:00	12:19:54	4:44:32	4:30:19	8:52:53	305:46:46
01	11:41:44	37:00:12	139:47:12	185:43:19	0:00:00	0:00:00	12:13:56	5:08:16	1:17:23	1:28:57	394:21:00
02	4:03:25	10:38:06	46:48:34	116:26:28	0:00:00	0:00:00	8:46:49	3:31:47	2:01:12	2:49:56	195:06:17
03	11:22:12	29:57:51	140:14:51	283:08:28	0:00:00	0:00:00	19:23:35	3:56:57	5:27:06	5:04:47	498:35:47
(TOTAL)	104:08:32	359:04:48	1820:39:59	2104:30:04	89:16:56	0:00:00	168:37:05	71:11:26	68:86:21	86:49:06	4822:49:12

(S-810/10 CPU時間)

(#)	(A)	(B)	(C)	(D)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(TOTAL)
04	2:30:34	25:08:16	119:42:41	302:28:58	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:03:47	7:04:06	0:00:00	456:58:22
05	2:07:11	20:03:01	136:20:34	341:08:53	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	6:02:45	0:00:00	505:42:24
06	3:05:21	22:18:36	164:21:01	332:08:30	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1:39:24	0:00:00	523:32:52
07	2:57:49	19:54:31	118:54:19	256:56:03	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1:21:15	0:00:00	400:03:57
08	2:07:48	16:13:10	98:32:11	217:04:40	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	3:30:13	0:00:00	337:28:02
09	2:23:59	20:26:10	123:52:49	253:24:41	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	14:45:03	0:00:00	384:52:42
10	1:31:45	17:56:59	46:27:08	226:54:20	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	4:54:06	0:00:00	297:44:18
11	1:40:19	19:55:30	106:41:35	207:29:34	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	3:41:37	0:00:00	339:28:35
12	3:10:42	32:08:27	89:55:43	212:02:06	2:50:36	0:00:00	0:00:00	0:00:00	7:51:42	0:00:00	347:59:16
01	4:12:19	18:33:46	110:16:18	286:14:31	4:44:58	0:00:00	0:00:00	0:00:00	4:15:56	0:00:00	430:37:48
02	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
03	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
(TOTAL)	25:47:47	212:58:26	1115:04:19	1926:05:12	9:35:34	0:00:00	0:00:00	0:03:47	55:06:07	0:00:00	4024:28:16

(S-820/80 CPU時間)

02	1:32:16	8:01:12	67:47:51	133:44:59	1:13:33	0:00:00	0:00:02	0:08:28	2:58:13	0:15:21	215:41:55
03	3:41:31	26:10:34	140:45:44	224:46:36	3:29:10	0:00:00	0:00:11	0:00:00	13:47:23	0:00:00	412:41:09
(TOTAL)	5:13:47	34:11:46	208:33:35	358:31:35	4:42:43	0:00:00	0:00:13	0:08:28	16:45:36	0:15:21	628:23:04

(S-810/10 VPU時間)

(#)	(A)	(B)	(C)	(D)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(TOTAL)
04	0:36:22	6:09:35	27:11:06	135:38:13	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:02:13	0:59:03	0:00:00	170:36:32
05	0:23:51	4:28:07	28:02:47	155:03:45	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:13:37	0:00:00	188:36:07
06	0:44:56	4:26:09	51:40:05	130:36:18	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:10:45	0:00:00	187:36:13
07	0:46:45	4:14:53	35:11:47	107:34:42	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:10:35	0:00:00	147:58:42
08	0:34:27	1:51:58	16:31:54	70:10:43	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:22:47	0:00:00	89:31:49
09	0:18:13	4:36:58	35:06:24	67:02:09	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:24:14	0:00:00	107:27:58
10	0:16:36	3:28:23	14:58:52	104:18:42	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:19:40	0:00:00	123:22:13
11	0:08:05	3:43:17	25:50:49	96:33:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:27:20	0:00:00	126:42:31
12	0:28:44	4:36:08	12:24:43	68:55:30	0:01:45	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:23:08	0:00:00	86:49:58
01	0:32:29	4:23:29	22:58:37	174:10:50	0:43:13	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:10:19	0:00:00	202:58:57
02	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
03	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00	0:00:00
(TOTAL)	4:50:28	41:58:57	269:57:04	1110:01:52	0:44:58	0:00:00	0:00:00	0:02:13	4:05:28	0:00:00	1431:41:00

(S-820/80 VPU時間)

02	0:17:13	1:08:52	24:47:40	62:53:41	0:05:52	0:00:00	0:00:00	0:00:37	0:09:06	0:01:04	91:24:05
03	0:36:25	5:54:39	66:00:10	118:20:09	0:31:12	0:00:00	0:00:00	0:00:00	1:20:37	0:00:00	192:43:12
(TOTAL)	0:53:38	7:03:31	92:47:50	181:13:50	0:37:04	0:00:00	0:00:00	0:00:37	1:29:43	0:01:04	284:07:17

6.4 ジョブ件数

(M-680H ジョブ件数)

(㊦)	(A)	(B)	(C)	(D)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(TOTAL)
04	3,971	1,975	1,272	414	57	0	14,074	1,126	816	564	24,269
05	4,763	1,825	1,144	356	28	0	12,476	385	595	523	22,095
06	4,865	1,531	1,099	472	226	0	13,295	468	733	522	23,211
07	4,575	2,169	1,114	376	76	0	12,463	352	598	380	22,103
08	3,734	1,693	1,132	388	108	0	10,654	191	564	399	18,863
09	4,767	2,078	1,183	365	301	0	12,268	454	943	420	22,779
10	3,662	1,548	903	265	642	0	8,724	740	650	521	17,655
11	3,551	1,532	745	308	207	0	8,646	476	387	297	16,149
12	4,416	1,308	918	317	240	0	9,415	813	563	623	18,613
01	5,298	1,807	996	329	1	0	10,011	365	336	448	19,591
02	2,204	784	386	168	2	0	5,961	299	437	194	10,435
03	4,928	1,607	1,162	428	0	0	14,168	760	756	388	24,197
(TOTAL)	50,784	19,857	12,054	4,186	1,888	0	132,155	6,429	7,378	5,279	289,960

(S-810/10 ジョブ件数)

(㊦)	(A)	(B)	(C)	(D)	(G)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(TOTAL)
04	506	952	780	372	0	0	0	7	242	5	2,864
05	671	879	932	431	0	0	0	0	234	0	3,147
06	729	914	911	345	0	0	0	0	207	0	3,106
07	810	1,095	921	399	0	0	0	1	783	0	4,009
08	610	756	733	377	0	0	0	1	164	0	2,641
09	594	833	766	461	0	0	0	0	219	0	2,873
10	342	1,098	444	360	0	0	0	0	204	0	2,448
11	510	1,126	1,024	333	0	0	0	0	220	0	3,213
12	729	1,216	659	394	368	0	0	0	315	0	3,681
01	894	872	684	305	109	0	0	0	280	0	3,144
02	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
03	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
(TOTAL)	6,395	9,741	7,854	3,777	477	0	0	9	2,868	5	31,126

(S-820/80 ジョブ件数)

02	508	461	513	235	124	0	9	14	435	3	2,302
03	1,344	1,568	1,030	538	196	0	14	0	878	0	5,568
(TOTAL)	1,852	2,029	1,543	773	320	0	23	14	1,313	3	7,870

7. 速報抜粋——速報 (No. 50～55) ——

7.1 大型計算成果発表会について (No. 50)

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としております。

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。

電子計算機センター 第7回大型計算成果発表会

『使用プログラムの特徴と研究成果の報告』

日 時 : 昭和62年9月9日(水) 9:30～12:35

場 所 : 分子研 研究棟 101号室

9:30 挨拶 センター長

9:35 大野公男, 佐々木不可止, 田中 皓, 野呂武司, 野村 力, 竹下幸一, 長内 有, 村上明德, 寺嶋秀美, 庄田孝行, 山本裕一, 村上 弘, 望月祐志, 阪井健男, 岩城宏明, 青木 仁 (北大 理)

分子のSCF-CI計算

10:05 中辻 博, 北尾 修, 中尾武寿, 小森正敏, 伊沢 勝, 中井浩巳 (京大 工)

励起分子と触媒系の電子状態と化学反応

10:35 大沢映二, J. RUDZINSKI, D. BARBIRIC (北大 理)

有機化学にたいする計算化学的手法の適用

11:05 森永正彦, 加藤正人, 上村高敏 (豊橋技科大 生産システム工学系)

遷移金属化合物および合金の電子構造

11:35 片岡洋右, 辰巳 武, 岡本博文, 松本充弘, 木村光男 (京大 理), 岡田謙吉 (岐阜大 教養)

固体メタンおよび水の物性の研究

12:05 田仲二朗, 田中智津子 (名大 理), 平尾公彦 (名大 教養)

近赤外部におけるラマン効果によるポリアセチレンの構造の研究

— ポリアセチレンのモデル分子の分子軌道計算 —

7.2 GAUS 80, GAUS 82 ユーザへの注意 (No. 50)

GAUS 82 は振動解析, MP 計算, CI 計算を行う場合, 分子積分を FT 01 のランダムアクセスファイルに収納しますが, その I/O 効率が良くありませんので, CPU 時間に比べ経過時間がかかるようになります。経過時間を減らすには ES (拡張記憶) やパラレル I/O (PIO) を積極的に利用することが賢明です。FT 01 だけでなく FT 19 (2 電子積分, 順編成ファイル), FT 20 (derivative, 順編成ファイル), FT 02 (チェックポイントファイル, ランダムアクセスファイル) も ES や PIO を割り当てましょう。GAUS 80 も同様です。

ただし, PIO はランダムアクセスファイルには使えません。また ES は 1 ユーザ最大 768 MB までしか取れませんし M-680H では使えません。ランダムアクセスファイルは ES, 順編成ファイルは PIO を割り当てれば, その分 FT 01 に多くの ES を割り当てることができます。このような方針でセンターは GAUS 80, GAUS 82 の実行用カタログドプロシジャを変更しました。PIO を使うため, 1 MB 弱メモリサイズが増えますので注意してください。

JCL の例を以下に示します。

```
FOR S-810,
  //USERIDXX JOB PASSWORD,CLASS=A
  //*MAIN SYSTEM=S810,REGION=(,500K,12M),PRL=YES,ESTORAGE=81M
  // EXEC GAUS82VC
  //SYSIN DD *

FOR M-680H,
  //USERIDXX JOB PASSWORD,CLASS=A
  //*MAIN SYSTEM=M680,REGION=(6000K,0M),PRL=YES
  // EXEC GAUS82SC
  //SYSIN DD *
```

7.3 第14回電子計算機センター運営委員会議事報告 (No. 52)

第14回電子計算機センター運営委員会が昭和62年9月9日(水)に開催されました。

以下にその議事の要約をお知らせします。

1. センターからの報告

(1) 62年度, 計算機稼働および利用状況, 電力使用状況

M-680H, S-810/10 システムの電力使用状況, 稼働状況, ジョブ件数, CPU 時間が資料に基づいて報告された。

4~8月の計算機稼働時間は昨年と比べてほとんど同じであるが, CPU 稼働時間は M-680H で 28% 増, S-810 で 53% 増となっており, 結果的に混んでいることを示していること, ベクトル化率は昨年と比べ 0.30 → 0.35 と増えていることが説明された。

次に、分野区分別の使用状況、電話回線によるTSSの利用状況が示された。

(2) 62年度、予算と使途予定

(3) 62年度前期、計算機時間配当状況、追加状況

CPU時間の月別、利用区分別割り当て状況が一覧表によって示された。9月7日現在で187プロジェクト、608名、申請時間総計8322時間に対して許可6682時間となっている。

続いて、前回（第13回）委員会で問題となり、センター長より手紙を出すことになっていた三プロジェクトに対する手紙の文面が資料として示され、説明された。

次に追加申請の状況が表として示され、9月7日現在での10件のプロジェクトについて処理状況が説明された。追加申請時間合計は280時間で内228時間が許可された。この中で、特に大口の追加申請の4件に対して評価の見直しを行った結果、評点通りで承認された。

また、前回委員会後にまとめた資料として、61年度のCPU時間追加状況一覧表が示された。

(4) 62年度前期、施設利用旅費割り当て状況

施設利用旅費の割り当ては、今回から前回委員会決定に基づき、旅費希望の申請に基づいて割り当てを行ったことが説明された。申請が提出された17プロジェクトの中から4件のプロジェクトを選択した理由が一覧表によって説明された。割り当て総額は208,700円であった。今後もこの方法で割り当てを行ってよいことが了承された。

(5) ライブラリプログラム開発状況

分子科学プログラムパッケージ、QCPEプログラム、NUMPACライブラリの登録、サービス状況が報告された。

(6) データベース開発・サービス状況

登録、サービスを行っている6件のデータベース（QCLDB, CMQCA, CHEMICS, IR2, STERIC, QCBDB）について現状の報告があった。また、今年度開発計画について説明があった。今年度はQCLDB, IR2の2件に絞って開発を行う。QCLDBは年々増え続けて1000件/年→1500件/年になってきたため費用が増額された。IR2は引き続き第2期の新しいデータを追加することになっている。STERICとQCBDBが扱ったのは、著作権保持あるいは基礎データを外国に依存しているためなどの理由で提供者が辞退したためである旨の説明があった。続いて、新たに文部省から出されたデータベースに関する通知が資料に基づいて説明された。

(7) 62年度、ライブラリプログラム開発計画およびセンター業務補佐謝金割り当て状況

分子研ライブラリプログラム開発計画（計15件）と個々の旅費、謝金の割り当て状況が資料に基づいて報告された。

次に、応用プログラム相談員およびセンター業務補佐に対する謝金の支払い状況が資料に基づいて示された。この中で、現在プログラム相談員が不足していて公式に対応できていないところがあ

り、困っているとの報告があった。

2. 62年度後期および63年度、計算機運用方針案

(1) スーパーコンピュータのレベルアップと新端末導入

スーパーコンピュータレベルアップに関し、7月5日の次期システム検討委員会の答申に基づいて、S-820/80と2020 Eを導入するよう契約更改が行われた旨、資料に基づき説明があり、承認された。

S-820/80の導入時期と期間、機器構成、性能について詳しい説明があった。

ワークステーション2020 Eの導入について前回議事のA案をもとにセンターで検討を行った経緯および性能、機能の説明があった。

(2) 利用点数の改訂

S-820/80の導入に伴う利用課金点数の計算式の改正案が示された。これはS-820/80の課金比重を少し大きめに設定し、ジョブの偏りを軽減しようとするものである。このために課金係数を $b = c = 0.15 \sim 0.20$ 点/秒の範囲で決める案であるが、最終的には62/12頃に実測テストを行うことによってセンター側で決めること、来年度については改めて次回委員会で決めることが了承された。

(3) 計算機システムの機密保護

最近問題になっているハッカー対策としてセンターでもいくつかの対応処置を講じたいとして、ユーザ課題番号/パスワードの保護とユーザデータセットの保護の二点に関して対策案が提出され各委員から意見が出された。この結果、ユーザの便宜と安全を考えてこの程度の対応は適当であるということになり、具体的実行方法の選択はセンターに一任された。

3. 62年度後期、計算機時間配分案

61年度後期CPU時間配分案が資料に基づいて説明された。その結果、後期(9月～3月)配当目標は合計1828時間(所外 1223時間, 所内 605時間), 所外の内訳は協力研究後期330時間, 施設利用B後期103時間, 追加申請および施設利用A 780時間となった。

4. 62年度後期、利用申請審査

各委員によってあらかじめ評価、採点された施設利用(B)2件, 協力研究(後期)11件の審査が資料に基づいて行われた。審査は主に重複申請の可能性のあるもの, 各委員間の評点の巾の大きなもの, 評価の低いものに重点をおいて議論された。

7.4 登録済みライブラリプログラムについて

(1) —— CI計算プログラムの比較 —— (No.53)

CI計算のためのプログラムがいくつかライブラリプログラムとして登録されています。これらのプログラムにはそれぞれ特徴がありますが、H₂O分子の4電子励起CI計算を行ってみました。結果を紹介しておきます。このCI計算はF. Brown et al., Chem. Phys. Lett., 105 (1984) 363.と同じ計算で、基底関数はHuzinaga-Dunningの(9s5p)を[4s2p]に短縮したものをを用いています。平衡構造でのRHFのMOを用いた計算です。C_{2v}対称性でCIの次元数は17678です。4電子励起CI計算ができるプログラムは現在、GAMESS, MELD, KAMUY, JASON 2の四者があり、M-680H上でのCPU時間を比較しました。軌道数は14と小さいので、積分変換に要するCPU時間は僅かです(～1秒)。

Hamiltonianの生成部分と対角化に分けてCPU時間を比較しています。

(文責 山本茂義)

Table, CPU time (sec) for CI (SDTQ) calculation on H₂O.

Step	Program			
	MELD	GAMESS	KAMUY	JASON 2
Hamiltonian generation	87	76	138	78
Diagonalization	31	190	112	144
No. of iteration	6	14	11	7
CPU/I ter.	5	13	9	18
Total	218 3'38"	276 4'36"	250 4'10"	224 3'44"

(2) CCP5 (No.54)

- ・分野コード : AS30, CR30, AS3V, CR3V
- ・作成者 : W. Smith 他 (Daresbury Laboratory in U. K.)
- ・登録 : 片岡洋介 (京大理)
- ・タイトル : CCP5 simulation programs
- ・使用目的 : 液体, 溶液のシミュレーション

◆液体・溶液シミュレーションのためのCCP5プログラム・ライブラリ

京大学理学部・片岡洋右

1. はじめに

CCP5プログラム・ライブラリの本センターへの移植作業とプログラムのベクトル化を行

った。今回は、多原子分子液体・溶液の分子動力学プログラムMDMPOL, MDMULP, MDMMANY, MDMIXTなどを登録したので簡単に説明する。詳しくはセンターにあるオリジナルプログラムの開発者W. Smith と D. Finchamによるドキュメント¹⁾と改訂に付いてのメモ²⁾を参照のこと。プログラムの一覧表は別に挙げた。³⁾

2. プログラムの機能

例としてMDMPOLを挙げる。非変形非線形多原子分子液体及び溶液の分子動力学シミュレーションを行う。

- ・積 分 法 : Verlet のカエル飛びの方法を並進・回転運動に使う。
- ・相 互 作 用 : サイト・サイト12-6レナード・ジョーンズ型ポテンシャル+部分静電荷による。
- ・計 算 量 : 位置エネルギー, 運動エネルギー, ビリアル, 圧力, 温度など。分子配置や速度の時間発展を記録して, それから各種物理量を求める部分はユーザーに委ねられている。

3. テストランの方法

これからのプログラムでは、データの入力にNAMELIST文を使っている。バッチジョブ用にJCLを作る時、ファイルをNONUMにしておくこと。

TSSにより一度走らせて見るのが良い。CH₂CL₂の例がデータとしてプログラムに入っている。走り出すと、データの入力を催促してくる。

バッチジョブでのテストランの為には、JCLの例がガイドの中に用意されている。

4. プロダクション

自分の問題に使うには、各分子種における原子の位置をNAMELIST文によるデータとして、あるいはサブルーチンの形で用意しなければならない。ソースプログラムも公開されているので、CH₂CL₂の例に習ってそれを作る。分子種の数値はPARAMETER文で与える。また分子間の相互作用パラメータを文献等を参考にして与える必要がある。最後に、動径分布関数や速度相関関数などの計算には、そのための処理プログラムを作る。

5. 書き換えの方法と所用CPU時間

これらのオリジナルプログラムはCRAY-1のために書かれている。CRAY-1固有のサブルーチンは、京都大学大型計算機センターにおいて、FORT 77標準に直した。⁴⁾更にHITACS-810用に最低限のオプション文を入れた。

殆どが分子動力学計算の本体のみであるので、スーパー・コンピュータの効果は大変大きい。108個のCH₂CL₂分子で1ステップにM-680Hで1.4秒, S-810/10で0.27秒かかる。

— 文 献 —

- 1) W. Smith and D. Fincham, CCP5 プログラムライブラリ・ドキュメント
(Daresbury Laboratory, UK)
- 2) 片岡洋右, MDMPOL, MDMULP, MDMANY, MDMIXT, ADMIXT,
MDATMVEC, DENCOR, CURDENの書き換えに付いてのメモ (1987)。
- 3) 片岡洋右, 京都大学大型計算機センター広報, 19, 26 (1986)。
- 4) STREAM 77 による書き換えについては, 片岡洋右, 京都大学大型計算機センター広報,
18, 334 (1985)。

7.5 分子研データベースについて

(1) QCLDB (量子化学文献データベース) (No.51)

簡易検索システムをV2.0よりV2.1にバージョンアップしました。検索結果をプリンタに出力することができるようになりました。入力した検索条件の履歴を出力するためのコマンドREMINO, 索引の表示コマンドLOOKを追加しました。

(2) QCLDB (量子化学文献データベース) (No.52)

簡易検索システムがバージョン2.1にレベルアップされました。検索結果を画面だけでなく直接プリンタあるいはファイルに出力できるようになっています。(出力先の選択はQCLDBコマンドを入力した際にシステムが問い合わせてきます)。この機能はDISPLAYコマンドのキーイン時に“TO DATASET”というオペランドを追加することにより起動されます。

(3) QCBDB (量子化学基底関数データベース) (No.53)

・変 更 点

CGTOデータが大幅に追加されました。検索速度も大幅に向上しました。現在収録されている基底関数は以下の3部から成っています。

- (a) Gaussian 70 プログラムに内蔵されている, Pople グループ開発のSTO-nG, n-31G シリーズ。
- (b) Huzinaga, Tatewaki, Sakai らにより作成された基底関数。
MINI, MIDI シリーズはこれに含まれる。
- (c) Poirier らが収集した基底関数。

Huzinaga-Dunning の(9s5p)等, van Duijneveldt の基底関数, Roos らの(7s3p)等, Wachters の遷移金属原子のための基底関数等。

H原子からRn原子まで含まれており, 分子の計算でよく使われるGaussian型基底関数のほとんどが収録されています。上記(b)の全ての基底関数には原子のHartree-Fock 計算の結果も

データとして収録されています。他の相当数の基底関数についても原子のHartree-Fock計算を行い、その結果を収録してあります。ただし、一部には若干のエラーも含まれている可能性がありますのでご注意ください。

・使用方法

コマンドQCBDBにより検索プログラムが起動されます。

FINDで検索し、PUTで検索結果を画面に出力します。

LISTBコマンドで収録基底関数の一覧が出ます。

以下に使用例を示します。

```
READY
QCBDB
----- WELCOME TO QCBDB (VER. 2.1) -----
THE DATA BASE CONTAINS 1944 RECORDS
/ 1
LISTB
ATOM  BSNAME          FUNCSPEC  TENERGY      CONTRACTION      BSID
H     STO-2G          STANDARD  -.45439740    <2>              GA000001
H     STO-3G          STANDARD  -.46658184    <3>              GA000018
H     STO-4G          STANDARD  -.46980646    <4>              GA000035
)))) PRESS RETRUN-KEY(C/R) TO CONTINUE, OR INPUT 'STOP' TO STOP
STOP
/ 1
FIND ATOM=RN
-----) 4 HIT(S)
/ 2
PUT
# 1
>BS
BSID          HU000429
BSNAME        VALENCE-OPTIMIZED(VO)-<333333/33333/333/3>
ATOM          RN
STATE         1S
/ 2
FIND ATOM=FE AND AUTHOR=ROOS*
-----) 3 HIT(S)
/ 3
PUT
# 1
>BS
BSID          0C001148
ATOM          FE
SOURCE        THEORET.CHIM.ACTA(BERL.),20,1(1971)@P
*             THEORET.CHIM.ACTA(BERL.),20,1(1971)@C
AUTHOR        ROOS B.@P
*             VEILLARD A.@P
```

```

/ 3
FIND ATOM=C AND BSNAME=STO-3G
-----) 1 HIT(S)
/ 4
PUT
# 1
>BS
BSID GA000022
BSNAME STO-3G
ATOM C
STATE 3P
SOURCE J.CHEM.PHYS.,52,5001(1970)
~~~~~
/ 4
END
----- END OF RETRIEVAL OF QCBDB -----
----- SEE YOU AGAIN -----
READY

```

7.6 第15回電子計算機センター運営委員会議事報告 (No.54)

第15回電子計算機センター運営委員会が昭和63年3月10日(木)に開催されました。以下にその議事の要約をお知らせします。

1. センターからの報告

(1) 62年度計算機稼働および利用状況, 電力使用状況

M-680H, S-810/10, S-820/80システムの電力使用状況, 稼働状況, ジョブ件数, CPU時間が資料に基づいて報告された。

電力使用量は約400kWであること, 全体的には61年度と大差がないこと, S-820/80に置き変わっても電力的には差はなさそうであるとの見通し, ベクトル化率はよくなってきてはいるが0.40には達していないことが報告された。次に, 分野区分別のCPU使用状況, 電話回線によるTSSの利用状況が示された。

(2) 62年度計算機時間配当状況, 追加状況

CPU時間の月別, 利用区分別割り当て状況が一覧表によって示された。3月7日現在で, 212プロジェクト, 662名, 申請時間総計9830時間に対して許可7933時間となっている。

続いて前回(第14回)委員会で問題となり, センター長から書信を発することになっていた五プロジェクトに対する手紙の文面が資料として示され説明された。

次に追加申請の状況が表として示された。それによると3月7日現在で43件のプロジェクトが追加申請を行っており, 追加申請時間合計は987時間で内847時間が許可された。この中で, 前回委員会後の追加申請にたいする郵便審査の結果17件に対して評価の見直しを行った結果, 評点通りで承認された。

(3) 62年度施設利用旅費割り当て状況

施設利用旅費の割り当ては、62年度より利用者の申請方式を変更し、この申請の中から近い過去に採択されたプロジェクトを避け、小規模・遠方のプロジェクトを優先して行ってきた旨が説明され、前後期の割当一覧が示された。後期は12プロジェクトから旅費希望が出され7プロジェクトを採択したことが報告された。割当額は前期170,850円、後期258,000円であった。

(4) ライブラリプログラム開発状況

分子科学プログラムパッケージ、QCPEプログラム、NUMPACライブラリの登録、サービス状況が報告された。

(5) データベース開発・サービス状況

登録、サービスを行っている6件のデータベース(QCLDB, CMQCA, CHEMICS, IR2, STERIC, QCBDB)について現状の報告があった。また、今年度開発計画についてはQCLDB, IR2の2件に絞って開発を援助したとの報告があった。これに関連して文部省の著作権保護の法律が改訂されたことによる考え方の基本、岡崎国立共同研究機構におけるデータベース等取扱規則の制定、データベース等委員会の設置などが説明された。

(6) 62年度ライブラリプログラム開発計画およびセンター業務補佐謝金割り当て状況

分子研ライブラリプログラム開発計画(計17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。ライブラリの実験数は減少方向にあり相対的に予算に余裕ができるため、いままではぎりぎりの旅費相当分のみしか割当てできなかったのを改め、今後は少数の実験計画にややまとまった旅費、謝金の配当を行うようにしたいとの方針が了承された。

次に、応用プログラム相談員およびセンター業務補佐に対する謝金の支払い状況が資料に基づいて示された。このなかで現在プログラム相談員が不足していて4月からは一人もいなくなるとの報告があった。

2. 63年度予算と定員について

63年度予算については光熱水料の単価減に伴う減額以外62年度と比べて変更ないとの説明が行われた。

また、長年の希望であった技官1名が63年度に配当になり、4月から採用の予定であることが報告された。

3. 63年度計算機運用方針案

(1) FORTRANコンパイラ

新FORTRANのこれまでの運用状況、問題点、センターの対応について資料に基づいて説明が

なされた。新FORTRANによるセンターの用意したプログラムでの実測結果は旧FORTRANの場合に比べてほとんど速くなっていない上、逆に2倍程度遅くなるケースも報告された。この原因としてはI/Oまわりの障害を含む二つ以上の原因が推測され、調査中との報告があった。

(2) 利用点数の改訂

S-820/80の2月～3月までの利用課金点数の計算式と4月以降の改正案が検討された。案としては(a) $b = c = 0.15$, (b) $b = c = 0.20$ の二つが示された。(b)案はESや大きなリジョンが使えてメリットの大きいS-820/80の課金比重を少し大きめに設定しこれまでよりジョブの偏りを軽減しようとするものである。この二案をもとに議論が行われ今後変更する可能性があるとの前提で(b)案を採用することになった。

(3) グラフィックワークステーション (GWS) の導入

今年度末に導入することになったGWSの機種選定経過と性能の説明がなされた。

(4) CVCF電源の状況と今後の方針

CVCF電源の現在の問題点が報告され、その対策案が示された。また瞬停対策装置を導入した場合のメリットとデメリットが説明された。これに対して瞬停装置でも止むを得ないとする意見が多数をしめた。

(5) 計算機システムの機密保護

ハッカー対策のためユーザidの保護とユーザデータセットの保護の二点に関して対応が必要であり、このために必要な機能をメーカーに要求している。これに対するメーカー側の回答状況が示された。この結果関連機能が提供されるのは63・12頃となり実際の運用は再来年度あたりになりそうだと報告があった。

4. 63年度計算機時間配分案

63年度CPU時間配分案が資料に基づいて説明された。その結果、今年度予想申請時間は合計11182時間(所外7532時間, 所内3650時間), 許可目標時間は合計9311時間(所外6026時間, 所内3285時間)とし所外平均許可率80%, 所内許可率90%, 許可時間の所内外比35.3 : 64.7とすることで了承された。

5. 63年度前期利用申請審査

まず施設利用(A)39件および所内26件の申請と許可状況が一覧表で示された。

次に各委員によってあらかじめ評価, 採点された施設利用(B)69件, 協力研究19件の審査が資料に基づいて行われた。審査は主に重複申請の可能性のあるもの, 各委員間の評点の中の大きなもの, 評価の低いものに重点をおいて議論された。

(協力研究後期)

議論の結果評点は評価通りに認められたが、申請書に計算機の使い方に関してははっきり書いてないプロジェクトがいくつかあったため何らかの方法で警告を行うことになった。方法についてはセンターに一任された。

(施設利用B)

A……E氏のプロジェクトと重複しており1/4くらいの重複度がお互いにあるとみなされるので25%の点数減を行うこととし、手紙で通知することになった。

B……許可点数が低くなった理由は80時間を申請した根拠が不明瞭であるためであるのでその旨を手紙で通知することとなった。

C……B氏と同じく50時間を申請した根拠が不明瞭であるため許可点数が低くなったので手紙で通知することとなった。

D……研究分野が本当に分子科学かどうかが問題となった。このため今回は許可を認めるが、次回以降も申請するならば参考文献を添付することという条件をつけることを手紙で知らせることとなった。

討論の結果、各課題とも採点通りの許可が認められた。

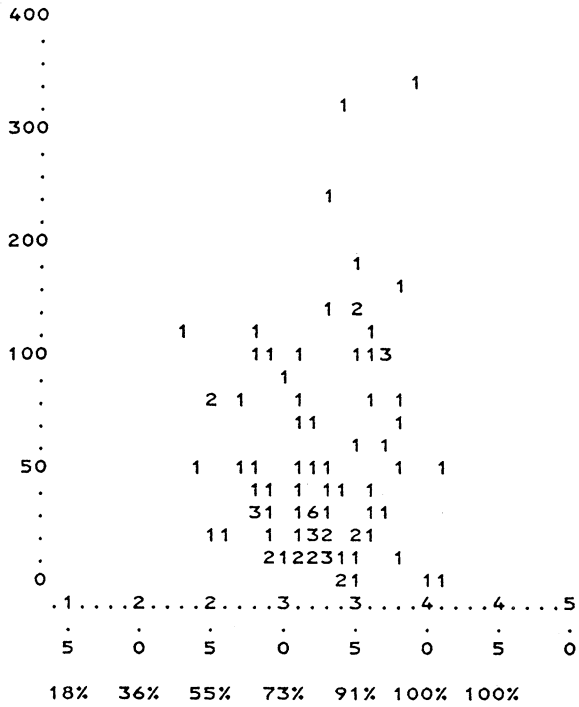
7.7 昭和63年度利用申請の審査について (No. 54)

第15回電子計算機センター運営委員会における審査の結果、各プロジェクトの評価および許可時間が決まりました。評点は運営委員の個別の採点(0～5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および前年度使用率から算出されます。許可時間は申請時間に許可率をかけたものです。今年度の平均許可率は80%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みます。

研究内容が高く、計画のしっかりした申請時間の妥当な提案をするように努めてください。次図に見られるように評点は2.30から4.10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47%から100%にわたっています。

申請時間



評点の分布図

評点

グラフの中の数字はプロジェクトの数

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規則

(昭和 56 年 4 月 14 日)
(分子研規則 第 4 号)

最終改正 昭和 62 年 3 月 30 日

岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則

(目 的)

第 1 条 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター（以下「センター」という）は、センターの大型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 分子科学研究所に、センターの管理運営に関する重要事項を審議し、分子科学研究所長の諮問に応じるため、分子科学研究所電子計算機センター運営委員会（以下「運営委員会」という）を置く。

2 運営委員会の組織及び運営に関し必要な事項は、分子科学研究所長が定める。

この規則は、昭和 56 年 4 月 14 日から施行する。

(昭和 62 年分子研規則第 1 号)

この規則は、昭和 62 年 4 月 1 日から施行する。

8.3 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター運営委員会規則

(昭和56年4月14日)
(分子研規則 第9号)

最終改正 昭和62年3月30日

岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター運営委員会規則

(目 的)

第1条 この規則は、岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則（昭和56年分子研規則第4号）第4条第2項の規定に基づき、分子科学研究所電子計算機センター（以下「センター」という）の運営委員会の組織及び運営に関し必要な事項を定めることを目的とする。

(組 織)

第2条 運営委員会は、次の各号に掲げる委員をもって組織する。

- 一 センター長
- 二 センターの助教授
- 三 分子科学研究所の教授又は助教授2名
- 四 基礎生物学研究所及び生理学研究所の教授又は助教授各1名
- 五 岡崎国立共同研究機構の職員以外の分子科学に関する学識経験者4名

2 前項第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、再任を防げない。

ただし、補欠の委員の任期は、前任者の残任期間とする。

(委 員 長)

第4条 運営委員会に委員長を置き、センター長をもって充てる。

2 委員長は、運営委員会を招集し、その議長となる。

3 委員長に事故あるときは、あらかじめ委員長が指名する委員がその職務を代行する。

(議 事)

第5条 運営委員会は、委員の3分の2以上の出席がなければ、議事を開き、議決することができない。

(委員以外の者の出席)

第6条 運営委員会は、必要に応じて委員以外の者に出席を求め、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

- 1 この規則は、昭和56年4月14日から施行する。
- 2 昭和60年6月1日任命に係る委員の任期は、第3条の規定にかかわらず、昭和62年3月31日までとする。

附則 (昭和60年分子研規則第3号)

この規則は、昭和60年4月1日から施行する。

附則 (昭和62年分子研規則第2号)

この規則は、昭和62年4月1日から施行する。

8.4 電子計算機センター運営委員会委員

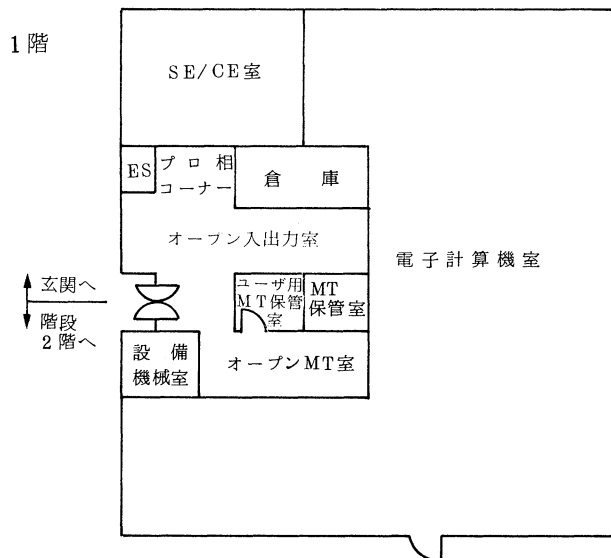
(昭和62～63年度)

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
西 信 之	分子研電子状態動力学部門助教授	〃
今 村 詮	広大理教授	分子研所外委員
中 西 浩一郎	京大工教授	〃
岩 田 末 廣	慶大理工教授	〃
塚 田 捷	東大理助教授	〃
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

8.5 電子計算機センター職員(昭和63年7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
手 島 史 綱	技 官(昭和63年4月採用)
加 藤 景 子	事務補佐員
安 達 奈 美	事務補佐員

8.6 建物図



(1) プログラム相談コーナー

プログラムとシステムに関する相談指導を行う。

(2) オープン入出力室

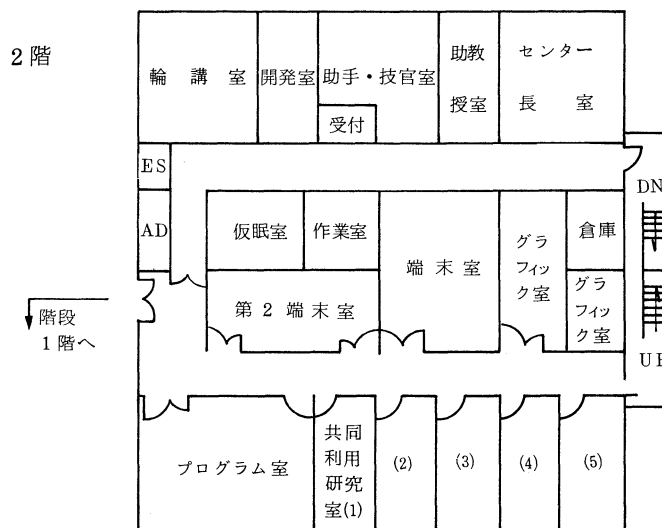
カードの入出力, レーザプリンタ出力, XYプロッタ出力, ジョブ状態表示のためのオープン利用室。

(3) オープンMT室

オープンMTシステムの利用を行う。

(4) 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。



(1) プログラム室

ユーザの卓上作業のための室、ジョブ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 端末が置われ、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。

8.7 応用プログラム相談員一覧

関 谷 雅 弘 分子研受託大学院生 昭和 62 年 4 月 - 昭和 63 年 3 月

8.8 端末設置状況（昭和 63 年 7 月現在）

(1) リモートステーション

(分子研)	所内	実験棟	MT 1 台, LBP 1 台, TSS 端末 5 台, XYプロッタ 2 台, グラフィック端末 2 台, ファイル管理装置
		研究棟	MT 1 台, LBP 1 台, TSS 端末 4 台
		UVSOR	MT 1 台, LBP 1 台, TSS 端末 5 台, XYプロッタ 1 台, グラフィック端末 1 台

(生理研) HITAC M-150

(機構情報図書館) HITAC L-330

(2) 構内回線（ポートセレクト経由）

1200 BPS 12 ポート

9600 BPS 12 ポート

接続端末数 76 端末

(3) 電話回線

300 BPS 2 回線

1200 BPS (V22) 2 回線

1200 BPS (VADIC) 3 回線

設置端局数 103 端末

(4) DDXパケット網

9600 BPS 1回線 (論理多重度 15回線)

設置端局数 65 端末

8.9 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。

センターでは端末室などに置いてあるが、個人で購入を希望する時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)

電話 03-811-7786

FORTRAN 77 関係 (HAP を含む)

最適化FORTRAN 77 言語	8090 - 3 - 761
最適化FORTRAN 77 使用の手引	8090 - 3 - 765
FORTRAN 開発支援システム	8090 - 3 - 230

T S S

TSS コマンド	8091 - 3 - 037
TSS 操作	8091 - 9 - 034
TSS メッセージ	8091 - 9 - 035
TSS 解説	8091 - 3 - 032
TMP4 E2	8091 - 3 - 074
TSDUT E2	8091 - 3 - 069
TSLOG	8090 - 3 - 135
ファイル伝送プログラム IFIT-TSS	8090 - 3 - 323

ASPEN. MODE

ASPEN-E2 使用の手引	8090 - 3 - 370
MODE1 解説	8090 - 3 - 333
KGRAF E2 解説	8090 - 3 - 369
BGRAF 解説	8090 - 3 - 360

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 8091 - 9 - 010

サービスプログラムメッセージ 8091 - 9 - 063

MSL2, MATRIX/HAP

MSL2機能編第1分冊 8080 - 7 - 120

MSL2機能編第2分冊 8080 - 7 - 121

MSL2機能編第3分冊 8080 - 7 - 141

MSL2操作編 8080 - 7 - 122

MATRIX/HAP 8090 - 7 - 035

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 8080 - 3 - 303

数学関係

数学関数 8080 - 3 - 218

TRUST

TRUST利用者エンドユーザー向け使用の手引 8090 - 3 - 352

GPSL, PREVIEW

GPSL機能編第1分冊基本・機能ルーチン	8080 - 7 - 096
プレビュープログラムPREVIEW	8080 - 7 - 130

文書処理

日本語文書エディタDEDIT	8090 - 7 - 020
日本語清書プログラム	8090 - 7 - 027
RUNOFF	8090 - 3 - 312