

I 部

目 次

寄 語	京都工芸繊維大学長 福井 謙一	1
1. 電子計算機センターの経過と成果発表会		2
1.1 センターの経過		2
1.2 大型計算成果発表会		4
1.3 センター関連組織		4
2. スーパーコンピュータの導入計画とスーパーコンピュータ・ワークショップ		6
2.1 導入計画について		6
2.2 スーパーコンピュータの特徴		6
2.3 次期システムの目標		7
2.4 スーパーコンピュータ・ワークショップとレポートの発刊について		8
3. 計算機システムと運用について		13
3.1 計算機システムの特徴		13
3.2 ジョブクラスの構成		14
3.3 運用時間		14
3.4 利用点数		14
3.5 センターの主なサービス		15
3.6 新年度（昭和 58 年度）からの運用について		15
4. 研究開発レポート		18
4.1 M T M の機能拡充	技官 西本 史雄，助教授 柏木 浩 …	18
	ファコム・ハイタック(株) 近藤 久人，相浦 勝市	
4.2 所内研究室のパソコン端末活用法	技官 西本 史雄	25

5. 一般報告	30
5.1 分子研ライブラリ・プログラムの収集と開発	30
5.2 講習会・プログラム相談	49
5.3 研究会・学会報告	49
6. 昭和 57 年度稼働状況および利用者数	52
6.1 利用申請プロジェクトおよび延べ利用者数	52
6.2 システム稼働状況	52
6.3 ジョブ件数	53
6.4 CPU 時間	53
6.5 無人運転システムの稼働状況	53
6.6 ジョブ処理状況の推移	53
7. センターより ————— 速報 (No. 20 ～No. 25) から再録 —————	57
8. 昭和 57 年度システム新機能 ——— 速報 (No. 20 ～No. 25) から再録 ———	72
9. 資 料	78
9.1 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則	78
9.2 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター運営委員会規則	79
9.3 電子計算機センター運営委員会委員	80
9.4 電子計算機センター職員 (昭和 58 年 6 月現在)	80
9.5 建 物 図	81
9.6 応用プログラム相談員一覧	82
9.7 端末設置状況 (昭和 58 年 5 月現在)	82
9.8 マニュアルの紹介と購入方法	82

コンピュータによる高度の非経験化

京都工芸繊維大学長 福 井 謙 一

地球・人類をとりまく環境，とくに資源・エネルギーの現状を考えると，科学技術文明をこのままストップさせてしまうことができればどれほど気楽だろうと思う。そうもいっておれないので，化学や物理学は今後，資源・エネルギーの節約・回収・創造に寄与する役目を荷わざるを得なくなるであろう。

化学や物理学がこの役目を果そうとするとき，自然の中に秘められた自然の持つ智慧を今後ますます精密に解き明し，その智慧を真似ていく必要があるのはいうまでもないが，それだけでは間に合いそうにない。

化学や物理学が決して容易でないこの役目を果たするためには，自然の中にお手本のないようなしくみをも，頭の中で考え出さねばならない。全く新しい原理に基づく物質を案出しその性質を予想するといったことには，よほどの非経験性が要求されるであろう。自然の中にお手本のない現象を頭の中で予想することがどれほど難かしいかは，金属の超伝導の現象が発見される前にそれを予想するのがいかに難しかったことであろうか，と考えてみれば直ちに分る。

要求されるとてつもない高度の非経験性は，創造的な理論と，超高性能のコンピュータの助けによらないと，到底実現されそうにない。

夢を夢のままで抱いておくことが許されればむしろ幸いであるが，恐らくそうはいくまい。分子科学や物性学は，この困難で気の重い仕事に今から取り組んでかからねばなるまい。我儘で楽天的な人類にとって手遅れにならないうちに。

(SUPERCOMPUTER WORKSHOP レポート 2 からの転載)

1. 電子計算機センターの経過と成果発表会

1.1 センターの経過

分子研電子計算機センターは昭和52年5月に設立され、昭和54年1月よりHITAC M-180マルチプロセサシステムの運転を開始した。センターの主な利用目的は分子科学、生物科学の大規模科学計算におかれ、全国の関連分野の研究者が利用者の対象に設定された。このような大きな目標に答えるため、昭和54年9月から全国初の夜間、休祭日の完全無人運転の実施、表1.1.1のようなレベルアップにより急速に処理能力を増加させてきた。ソフトウェアについては、ライブラリ管理システムFLIB、出力編集システムSOM、磁気テープ管理システムMTM、カラーグラフィックシステムCANVAS、レーザープリンタ出力システムLAMなどの開発を行ってきた。

分子科学プログラムライブラリについては これまでに約1,100本の分子科学関連プログラムを収集または開発した。分子研センターが開発したライブラリ管理システムはソースプログラム、実行形式プログラム、マニュアル、テストデータなどを一括管理し、これらの資源を検索する機能を持っている。表1.1.1に示した699本のプログラムはディスク上に置かれ、いつでも使える状態にある。最新の分子科学プログラムが充実している点で、このライブラリは世界的にも類がない。

データベースについても、量子化学データベースグループとの共同研究により、量子化学文献データベースのサービスが昭和54年度から開始され、年々データの蓄積が進行している。57年度からセンター運営費の中にデータベース開発費が認められ、上記データベースの他に赤外線スペクトルデータベース、有機化合物自動解析のためのデータベースなども57年度末からサービスを開始した（表1.1.1）。

分子研電子計算機センターは利用開始以来4年余りの間、高度の利用状況を実現し、我が国の分子科学研究に大きなインパクトを与えた。例えば、センター開設以前には、二三数える程度であった *ab initio* 分子軌道計算を行うグループがおよそ100グループに増大した。また、センターの計算機を利用したとして昭和54年度～57年度にセンターに提出された論文の別刷数は表1.1.1の通りであり、出版済みだが未提出のもの、投稿中、印刷中のものを加えると相当な数に上ると思われる。これらの研究成果は使用統計などとともに「センターレポート」№1（昭和53,54年度）、№2（55年度）、№3（56年度）、№4（本号）にまとめられている。

表1.1.1に示すように利用者数は昭和57年度に500名を越え、申請CPU時間は急激に増大している。1日24時間運転を前提とした最大限使用可能CPU時間も急速に増加させてきたが、申請の増加率は処理能力の上昇をはるかに上まわっている。無人運転システムではジョブ数が一定数

以下になるとシステムは自動的にジョブを凍結し、電源を止めて停止することによって効率のよい運転を実現しているが、実際に使用したCPU時間は限度に近づきつつある。このためジョブ処理待ち時間（ターンアラウンドタイム）がしばしば長時間になり、遠隔地からわざわざ来所した利用者が十分な結果を得ることなしに帰ることも起きている。大容量ディスクの競合も頻発し本来の目的である大規模計算ができないこともある。なるべく早期に計算機システムの根本的なレベルアップが必要である。

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
計算機システム	M-180×2	M-180×2	M-200H M-180	M-200H M-180 疎結合システム	M-200H×2 疎結合システム
運 転 方 式	1～3月有人	9月から無人	200H無人 180 有人	無 人	無 人
利 用 者 数					
所 内	48	84	101	128	146
所 外	107	254	325	330	375
合 計	155	338	426	458	521
CPU時間 (200H標準) ^a					
申 請	929	4,666	11,033	10,230	11,938
許 可	816	3,171	7,427	8,306	10,141
使 用	509	2,405	5,405	6,320	8,205
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 ^b 論 文 数	0	24	93	118	190

a：申請・許可分にはライブラリ開発使用分も含む。

使用実績はライブラリ開発，センター業務使用分などをすべて含む。

b：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 大型計算成果発表会

昭和58年3月、昨年に引き続き「大型計算成果発表会 ― 使用プログラムの特徴と研究成果の報告 ―」をセンター主催で開催した。当センターは大学の計算機センターではできないような分子科学の大規模計算を一つの旗印にしているので、長時間の利用が認められているいくつかのプロジェクトの代表者に研究成果の公表を依頼した。これは今後のセンター運営、利用申請審査、プログラム開発の参考とするためのものであり、公開の研究発表会の形式をとった。発表会は下記のプログラムの内容で電子計算機センター運営委員会をはじめ多数の聴講者が出席し熱心な討論が行われた。この発表会は昭和58年度以降も継続して開催する予定である。

「大型計算成果発表会 ― 使用プログラムの特徴と研究成果の報告 ―」

日 時： 昭和58年3月1日（火） 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 寺倉清之，浜田典昭（東大 物性研）
固体表面と遷移金属の電子状態

10:05 中西浩一郎（京大 工）
非電解質水溶液の計算機実験

10:35 郷 信広（九大 理）
蛋白質と生体膜の動的立体構造の理論的研究

11:05 山高 博（阪大 産業科学研）
反応性－選択性関係則への分子軌道法によるアプローチ

11:35 今城文雄，安井 潤，竹腰清乃理，岩井正博，雑賀亜幌（京大 理）
分子の動的構造と電子相関

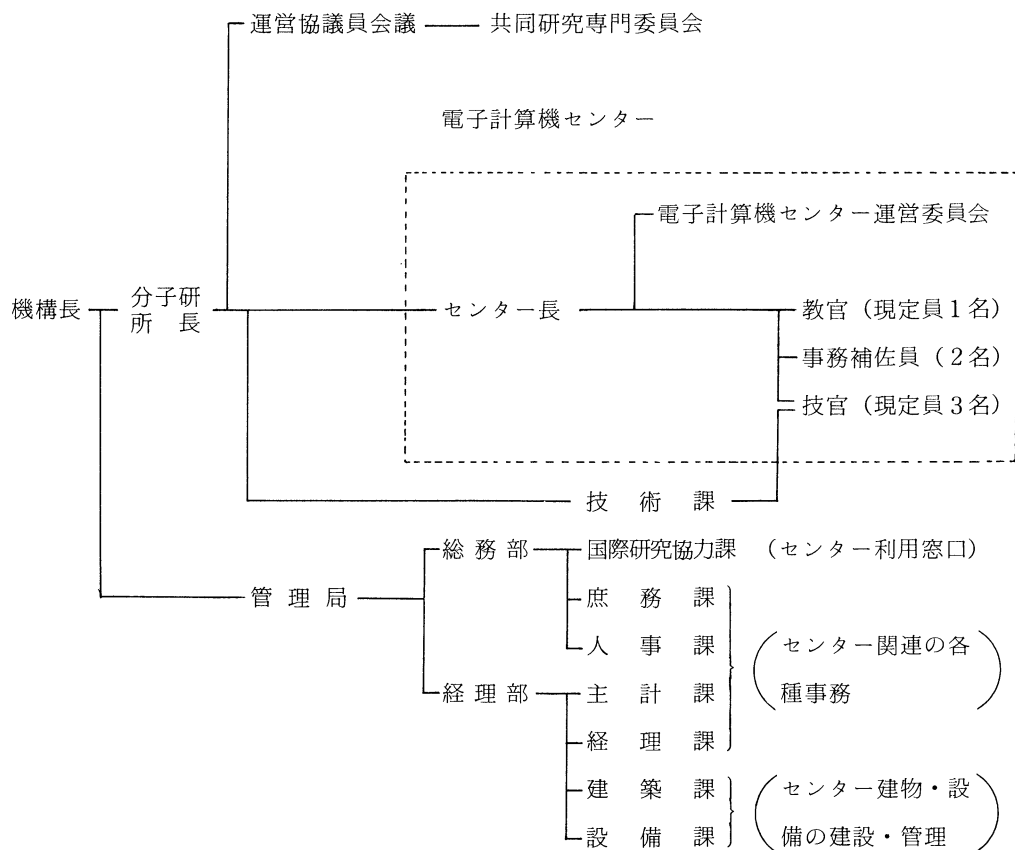
12:05 加藤博史（名大 教養）
不安定なイオン，金属クラスターの安定性と構造に関する理論的研究

1.3 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。

共同・協力研究の運営は運営協議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 9.1， 9.2， 9.3 を参照されたい。



2. スーパーコンピュータの導入計画と スーパーコンピュータ・ワークショップ

2.1 導入計画について

スーパーコンピュータと呼ばれる新しいベクトルプロセッサが最近開発され、従来の汎用計算機の10－100倍という計算の高速化が実現されようとしている。スーパーコンピュータによって、従来全く不可能であった計算が可能になり、化学反応の制御と設計、溶液化学の分子論と溶媒設計、新物質および触媒設計、生体物質の動的挙動とその機能の解明などの研究において大きな発展が期待される。このような“計算化学”の研究は世界的にも新しい潮流となりつつあり、今、わが国がこの分野でイニシアティブをとることは世界の分子化学の将来に重大な鍵をにぎることになると予測される。

また、1.1で述べたように、当センターの計算機システムの処理能力は飽和状態に近づきつつあり、システム構成も設計以来既に5年を経過し旧式なものになりつつある。この事態からでもできるかぎり早期に根本的なシステムの再構成が必要である。

当センターは昨年スーパーコンピュータの導入を計画し、58年度に向けて概算要求を行ったが認められなかった。現在、59年度に向け再度の概算要求を行っている。次期システムは最新型のスーパーコンピュータと大型汎用計算機を中心に構成し、周辺装置も増強する。この計画は分子研評議員会議と分子研教授会議の支持を受け、電子計算機センター運営委員会でも分子科学の将来にとってきわめて重要な計画であるので強く推進することが決められた。要求が認められれば59年度後半に利用が開始される。

2.2 スーパーコンピュータの特徴

一般には同時代のコンピュータ群の中で抜きん出て高速なものがスーパーコンピュータと呼ばれている。現在では一応の目安として最高速度が50 MFLOPS（浮動小数点演算を毎秒 10^6 回）以上の計算機をスーパーコンピュータと言う。なかでもCRAY-1は代表的なものであり、アメリカのローレンス・リヴァモア研究所、NASAエームズ研究所、イギリスのダースベリ研究所、西ドイツのマックス・プランク研究所などで分子科学研究者に利用されており、スーパーコンピュータは今や世界の主流になりつつある。

今年発売される新しいベクトルプロセッサ、日立のS-810、富士通のVP-200、日電のSX-2などは、普通のスカラ演算の速度もM-200Hの約2倍であるが、図2.2.1に示すように汎用計算機のCPUに相当するスカラ処理ユニットの他に大きなベクトル処理ユニットを持ち、一番内側のDO

ループ（繰り返し計算の指定文）の中の演算を超高速に行うことができる。一連の演算を連続した流れ作業として実行するので、結果として一組のデータに対する一連の演算が1サイクルタイム（ $\sim 10^{-8}$ 秒）で行われる。

これらの計算機では条件文や間接指標を含むDOループもベクトル化され、ほとんどのDOループの高速演算が可能になるので、普通のプロセッサの100倍の最高速度と10倍程度の平均速度が得られるものと期待される。この他に複数のディスクから並行してデータの入出力を行う機能や半導体の高速拡張メモリも用意されているので大量データの高速処理も可能になっている。

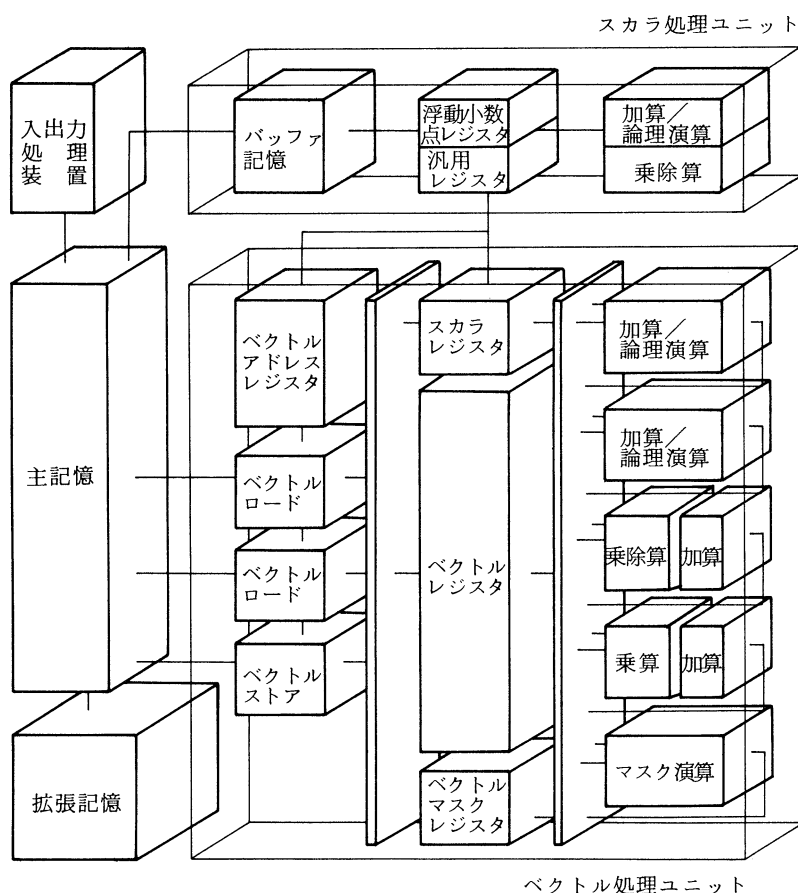


図 2.2.1 HITAC S-810 のCPUの構成

2.3 次期システムの目標

1) 総合処理能力の増強

今後数年の計算需要を満すため、次期システムはスーパーコンピュータ1台と汎用大型計算

機 1 台からなる疎結合システムとし、外部記憶装置と通信制御装置を強化する。現在の主力機 M-200H の演算処理速度を 1 とすると次期システムの汎用大型機は 2、スーパーコンピュータは低目に見て平均 10 と見積ることができるので、

$$\frac{2+10}{1+1} = 6 \text{ (倍)}$$

処理能力は現在の M-200H 2 台からなるシステムの約 6 倍になる。ディスクの増強または大容量記憶装置（検討中）の導入により、データの記憶容量を 2 倍増強する。このために必要な経費の増加は、およそ 1.4 倍である。約 40% の経費の増加により 6 倍以上の計算能力が得られるのは、上の式からも分かるように、スーパーコンピュータの経済性によっている。

2) 超高速演算による研究者の“夢”の実現

スーパーコンピュータの最大の特徴は何といっても、その超高速演算能力である。M-200H を規準として約 100 倍の演算速度が実現できるので、1 年間 M-200H を占有しなければできないような計算（もちろんこんなことは不可能である）を数日間で実行することができる。これにより研究者の“夢”にとどまっていた多くの重要問題を解決できるようになる。詳細については SUPERCOMPUTER・WORKSHOP のレポートを参照されたい。

3) 使い易さの追求

計算機はまず使い易くなければならない。また、分子研のように研究補助員の少いところでは、計算機を研究補助員として位置づける必要があろう。ジョブの投入の他に、研究データの転送・記憶・取出し・分析とグラフ作成、論文作成などのために計算機を自由自在に使いこなせるよう次の強化を行う。

a) 通信制御装置を現在の最高 10 K ボーから最高 1 M ボーに強化

b) T S S 用ソフトウェアの強化

c) 図形処理の強化

この他に光ファイバーローカルネットワークによる実験用ミニコンとの接続と全国ネットワークへの接続を検討している。

使い易さの実現のためには、上記のような強化の他、主記憶と外部記憶の増強とソフトウェアシステム全般の見直しが必要であるため、システム全体のレベルアップの中で初めて実現できる機能である。

2.4 スーパーコンピュータ・ワークショップとレポートの発刊について

スーパーコンピュータを分子科学の分野で活用するために、知識の収集、新しい可能性の検討、テストプログラムの開発整備などを行うワークショップが発足した。現在のワークショップのメンバーは次の通りである（世話役 柏木 浩）。各メンバーを通じてそれぞれの分野の問題点と要望が集め

られ対策を検討することが期待されている。

- ・電子状態関係

野呂武司（北大 理），岩田末廣（慶大 理工），小杉信博（東大 理），
太田勝久（分子研），平尾公彦（名大 教養），寺前裕之（京大 工），
波田雅彦（京大 工），小原 繁（京大 理），長村吉洋（慶大 理工）

- ・固体関係

寺倉清之（東大 物性研）

- ・シミュレーション関係

片岡洋右（京大 理），郷 信広（九大 理），武富 敬（九大 大型センター）

- ・スペクトロスコーピー関係

遠藤泰樹（分子研）

- ・X線回析関係

大場 茂（慶大 理工）

- ・衝突論関係

小池文博（北里大 医）

- ・センター関係

唐木幸比古（東大 大型センター），土方克法（電通大 情報処理センター），
阿部芳彦（名大 プラ研センター），柏木 浩・山本茂義（分子研 センター）

第1回の集まりが昭和58年3月28～29日の両日にわたって開かれ，28日には次のような公開講演会が開催された。

日 時 1月28日（金） 13:30～17:30

場 所 分子研研究棟301号室

プログラム ・HITAC S-810のハードウェア 小高俊彦（日立製作所）
・HITAC S-810のソフトウェア 青山明夫（日立製作所）
・東大センターにおけるスーパーコンピュータの利用とベクトル化のための
プログラミング 唐木幸比古（東大大型センター）
・プラズマ研究所におけるスーパーコンピュータの利用計画
阿部芳彦（プラズマ研電算センター）

29日にはワークショップメンバーにより今後の活動方針とコンピュータへの要望について討論を行い，今後次のような活動を行っていくことになった。

- 1) 昭和58年度には3回前後のワークショップを開催する。
- 2) ワークショップ報告集を発行する。

3) メンバー各人はスーパーコンピュータに関連したテーマを持ち、スーパーコンピュータについての知識を深めそれぞれの分野での利用方法を検討する。

活動の手始めとして、ワークショップのメンバーは分子科学のそれぞれの分野におけるスーパーコンピュータの適用と可能性について紙上討論ができるような原稿を執筆した。また、国内国外の高速計算に関心の深い分子科学関連の研究者に、それぞれの立場での御意見や、夢を書いて投稿して下さるよう依頼した。その結果、予想を越えて数百頁の原稿が寄せられ、これらの原稿を元に SUPERCOMPUTER・WORKSHOP のレポート 1, 2 を発刊した。

スーパーコンピュータに寄せる分子科学者の期待と熱意はレポートの内容に見られる通りである。超高速計算の夢を実現させる上での困難は数々存在するであろうが、ワークショップのメンバーや老若を問わぬ分子科学者の努力で克服されて行くであろう。SUPERCOMPUTER・WORKSHOP REPORT が燈台のような役割をはたせば幸いである。

【SUPERCOMPUTER WORKSHOP REPORT 1】 目 次

（分子科学における大規模計算とスーパーコンピュータの動向）

- はじめに 諸熊 奎治（分子研センター）
- スーパーコンピュータ・ワークショップは鳳雛の塾 柏木 浩（分子研センター）

§ 1 海外の動向

- アメリカにおける分子科学用計算機の展望 諸熊 奎治（分子研センター）
- Daresbury Laboratory 滞在記
— CRAY-1S を使って — 岩田 末廣（慶大 理工）

§ 2 スーパーコンピュータの現況

- スーパーコンピュータと大型計算の動向
—— 東大大型センターにおける導入計画などを中心に —— 唐木幸比古（東大大型センター）
- スーパーコンピュータ HITAC S-810 のシステムとハードウェアについて
小高 俊彦・河辺 峻（日立製作所神奈川工場）
青山 智夫（日立コンピュータエンジニアリング）
- S-810 のソフトウェアについて
青山 明夫・旭 寛治（日立製作所ソフトウェア工場）
安村 通晃（日立中央研究所）

- スーパーコンピュータ FACOM VP システム

内田啓一郎（富士通本体事業部）

§ 3 分子科学各分野における大規模計算

- 分子科学において，まだスーパーコンピュータなのか

—分子軌道法，特にMCSCF法におけるベクトル化の可能性について—

長村 吉洋（慶大 理工）

- スーパーコンピュータ向け基底関数系 小杉 信博（東大 理）

- 大型電子計算機を用いた固体電子状態の計算

寺倉 清之（東大 物性研）

- 溶液化学における計算機実験 片岡 洋右（京大 理）

- 生体高分子の立体構造研究におけるスーパーコンピュータ利用

郷 信広（九大 理）

- 分子分光学におけるコンピュータ利用 遠藤 泰樹（分子研）

- 分子の経験的ポテンシャルエネルギー計算法（Molecular mechanics）

に関する最近の動向と展望

—大規模計算のメリット— 大沢 映二（北大 理）

§ 4 ワークショップ記事

- スーパーコンピュータの導入計画について

- スーパーコンピュータ・ワークショップ公開講演会の開催

- スーパーコンピュータ・ワークショップについて

【SUPERCOMPUTER WORKSHOP REPORT 2】目次

（スーパーコンピュータへの夢と期待）

- はじめに 諸熊 奎治（分子研センター）

§ 1 スーパーコンピュータにいだく夢

- コンピュータによる高度の非経験化 福井 謙一（京都工芸繊維大学長）

- スーパーコンピュータにいだく夢 小谷 正雄（東大名誉教授）

- スーパーコンピュータにたくする小さな夢と大きな夢

大野 公男（北大理 分子研客員）

- “十倍”の意味するもの 細谷 治夫（お茶大 理）

- スーパーコンピュータ導入について 高柳 和夫（宇宙科学研）

- 原子分子の動的過程と化学反応動力学 中村 宏樹（分子研）

- 分子と固体のはざま 菅野 暁（物性研）

- 高速度計算の夢 桂 重俊（東北大 工）
- 蛋白質三次構造予測に関する大型計算 長野 晃三（東大 薬）
- 分子の形とその変化の計算 鈴木 英雄（早大 理工）

§ 2 超高速計算への期待

- スーパーコンピュータの導入について思うこと
平尾 公彦 (名大 教養)
- スーパーコンピュータに対する期待
— 定量的な理論計算の対象を拡げるために —
太田 勝久 (分子研)
- ポスト S C F 計算とスーパーコンピュータ
山本 茂義 (分子研センター)
- “スーパー” コンピュータと非経験的計算
野呂 武司 (北大 理)
- 有機金属化学におけるスーパーコンピュータの必要性
小原 繁 (京大 理)
- 金属クラスターの非経験的計算とスーパーコンピュータ
寺前 裕之 (京大 工)
- X線結晶構造解析と完全自動洗濯機
大場 茂 (慶大 理工)
- 蛋白質分子の立体構造転移現象のシミュレーション
武富 敬 (九大センター)

§ 3 分子研センターへの海外の反響

- From Prof. H.F. Schaefer III (University of California, USA)
- From Prof. S.D. Peyerimhoff (Universität Bonn, Germany)
- From Prof. I.G. Csizmadia (University of Tront, Canada)
- From Prof. W.A. Lester, Jr. (University of California, USA)
- From Prof. P. Lykos (Illinois Institute of Technology, USA)
- From Prof. S. Huzinaga (University of Alberta, Canada)
- From Prof. W.H. Miller (University of California, USA)
- From Dr. F.H. Stillinger (Bell Laboratories, USA)
- From Prof. M. Karplus (Harvard University, USA)

§ 4 概算要求說明資料

- スーパーコンピュータの導入により期待される研究成果

分子科学研究所電子計算機センター

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 57 年 4 月～ 58 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 12MB で合計 24MB 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。ディスク容量はシステムディスクが 1,600MB，共用ディスクが 10,160MB である。周辺機器としてはカードリーダ（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（1 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。

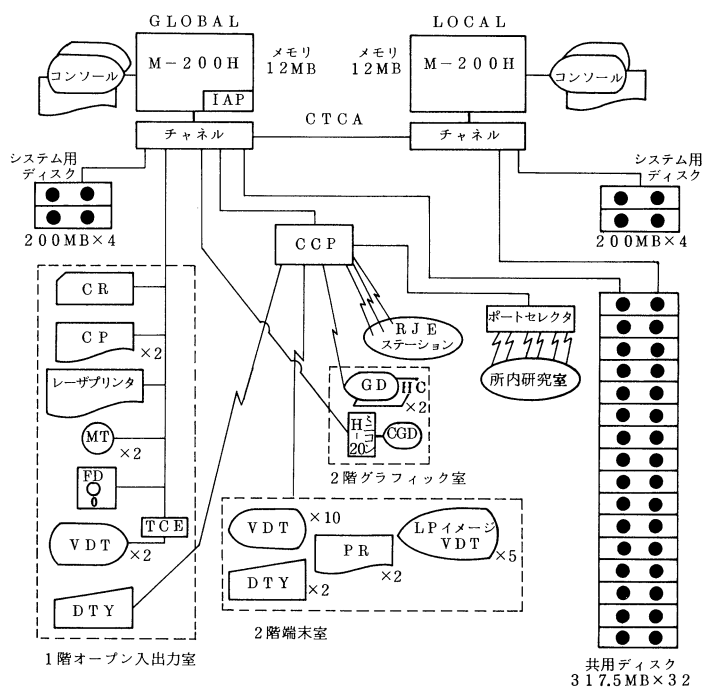


図 3.1.1 機器構成（昭和 57 年度）

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	CPU タイム (分)		REGION (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	1,430	2,048	7,000
T S S	2	2	1,024	2,048

ここで 1, 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

このうち通常は M-200 H 2 台で運用を行い、節電のため比較的混雑の少ないとみられる月曜日と土曜日に関しては混雑状況によって 1 台（グローバルプロセサのみ）でサービスを行う方法をとった。

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。

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

a = 0.1 点/秒 b = 0.1 点/頁 c = 0.03 点/枚 d = 0.000006 点/KB・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。カードリーダー、各種 T S S 端末、ラインプリンタ、オンラインカードパンチ、オープン磁気テープ装置、オープンフロッピー入出力装置などが自由に利用できる。ジョブの入力、実行、出力状況は専用のディスプレイによって逐次表示される。

- ・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。

- ・量子化学文献データベース（QCLDB）

QCLDB は非経験的分子軌道法に関する文献データベースである。データの収集作業は全国 10 ケ所の理論化学研究室の大学院生、教官によって行われ、データの再チェック、データベースへの登録を当センターが担当している。一般利用者へのサービスは昭和 54 年 6 月から開始しており既に 1977 年～1982 年の文献 4,957 件を収容している。

- ・プログラムライブラリ

分子科学および生物科学のための高度のプログラムライブラリの開発・整備・提供を行っている。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 2 種類である。

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

3.6 新年度（昭和 58 年度）からの運用について

3.6.1 システム構成と運用

システム構成は原則として昭和 57 年度と比べて大きな変更はない。しかし 7 月末において記憶装置と周辺機器の小規模な増設、変更が行われる。これにより利用者の使い勝手の上で若干の向上が期待できる。内容は次の通りである。

- (1) グローバルプロセサ（I A P 付 M-200 H）のメモリ増設（12 MB→16 MB）

- (2) 磁気ディスクの増設 (1240 MB)
- (3) DESP エディタの使える端末との入れ替え (3 台)
- (4) ユーザ用磁気テープ装置の移行設置 (オペレータ室→オープン入出力室)
- (5) NEC パソコン PC 8801 + 8 インチ / 5 インチフロッピーディスク装置の設置
- (6) フロッピーディスク入出力装置の入れ替え (片面単密 / 両面倍密度兼用)
- (7) 通信制御装置 (CCP) の増設 (1 台) 当面 10 回線分

3.6.2 IMS データベースのサービス

現在分子研センターで一般公開しているデータベースは以下の 4 件がある。

- (1) QCLDB (量子化学データベース)
- (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 (IRDC スペクトルデータベース)

このうち(3), (4)は 57 年度末よりサービスを開始したもので、それらについて紹介する。

① CHEMICS (有機化合物自動構造解析システム)

- ・作成者代表：佐々木慎一 (豊橋技科大)
- ・内 容：ある未知物の物性値 (^1H -NMR, ^{13}C -NMR, MS, IR など) を入力すれば、それらが部分構造に変換され、さらに得られた部分構造から全構造が創出されるプログラム・データベース・システム。
- ・使用 方法：マニュアルがセンターにある。TSS コマンド **▼CHEMICS▼** によって本システムが起動される。

② IR2 (IRDC スペクトルデータベース)

- ・作成者代表：鈴木 功 (筑波大)
- ・内 容：IRDC (日本赤外データ委員会) から赤外スペクトルデータカード (IRDC カード) が刊行されているが、本システムはこれをコンピュータシステムとしてデータベース化したもので、現在 6,200 種の化合物のデータが含まれている。
- ・使用 方法：ガイドを FLIB コマンドで検索できる。TSS コマンド **▼IR2▼** によって本システムが起動される。

3.6.3 MTM の機能強化

MTM の機能が強化され使いやすくなった。

M T Mは磁気テープも含めた利用者のデータセットを総合的に管理できるシステムで次の機能を持っている。

(1) ディスク上のデータセットを一括して磁気テープにコピーする。

コピーしたデータセットの情報はM T M情報として利用者のデータセットに保存，蓄積される。

(2) 磁気テープ上のデータセットをディスクに一括してリストアする。

リストアするときの磁気テープのデータセットの情報は，M T M情報からラベルより得る。

(3) M T M情報を常に最新の状態に保つために再編集，再構成する。

(4) M T M情報を効率良く検索して必要な部分を抽出する。

詳細については 4.1 を参照のこと。

3.6.4 T S S 電話回線の構成変更

58／5月末からT S S 電話回線の構成を次のように変更してサービスしている。

速 度	～ 58 / 5 月	58 / 5 月～
300 BPS	3 回線	2 回線
1200 BPS	4	5

電話番号は次の通りである。

1200 BPS 53-6114 (代) (6115, 6116, 6117, 6113)

300 BPS 53-6111 (代) (6112)

これは 1200 BPS の需要増，300 BPS の需要減に伴う変更である。

4. 研究開発レポート

4.1 M T Mの機能拡充

分子科学研究所 技 官 西本 史雄
助教授 柏木 浩
ファコム・ 近藤 久人
ハイタック（株） 相浦 勝市

はじめに

分子科学研究所電子計算機センターは、利用者が自分のデータセット（ディスクおよび磁気テープ）を管理するためのM T M（M T Manager）を開発し、昭和56年4月より一般公開した。今回さらに機能を拡充し操作性を向上させ、新バージョンを昭和58年4月より正式公開している。

4.1.1 M T Mの考え方と特徴

M T M（M T Manager）はディスク上のデータセットを磁気テープにコピーしたり、磁気テープ上のデータセットをディスクに戻したり、かつデータセットの情報を管理することを目的としている。M T Mは、データセットがディスク上にあるか磁気テープ上にあるかにかかわらずに、データセットのデータとデータセットの情報を一括して管理する。ディスクと磁気テープの間でデータセットの移動があっても、データセット情報がシステムから失われないように保持し、蓄積する。従ってM T Mの下では、データセットのデータの移動は、どのデータセットを処理の対象とするかの判断が必要となるのみで、ほかのことはすべてM T Mが面倒をみる。利用者は任意にデータセットのグループを選択でき、連続的に磁気テープに保存および磁気テープからリストアすると同時にディスク上でのデータセット情報（データセット名、種類、形式、レコード長、ブロック長、スペース量、メンバ数、メンバー名など）と磁気テープ上でのデータセット情報（データセット名、ポジション、使用ユーティリティなど）をボリューム情報とともに指定されたデータセットに記録蓄積する。これをM T M情報と呼ぶ。

分子研でM T Mが必要となる背景は、(1)大型計算のジョブ実行により大量のデータが生成されるが、短期データセットの保存期間が1週間であること、容量に限りがあることなどから、磁気テープへのバックアップが必要なこと。(2)データセットの個数が磁気テープの分を含めて膨大になるが、磁気テープのデータセットもディスク上のものと同じように管理することが必要なこと。(3) オープンM Tのようにデータセットの情報を外からその都度与えることなく効率よく磁気テ

ブを扱え、研究者の負担を軽減させる必要があること、などである。

MTMは、次のような特徴を持っている。

- (1) TSS端末での会話的な処理の進行
- (2) メニュー方式の処理選択
- (3) メニュー上のパラメータの標準値の表示
- (4) メニュー上の情報の保存
- (5) MTM情報の保存・編集・検索機能
- (6) TSSコマンドの実行

4.1.2 MTMの機能拡充

今回のMTMの機能拡充の中心は、磁気テープ上のデータセットをディスクに戻す(リストア)ことがあったが、図4.1.1に示されるようにMTM情報に関連してかなり大規模に機能が追加された。MTMへの指示はメニュー化によりわかりやすくなり、ほとんどの入力情報はMTM情報などMTMシステムから得られるので、利用者はデータセットの処理についての判断のみすばよいようになっている。磁気テープを取り扱う機能の場合には端末は固定されるが、それ以外の機能の場合にはメニュー化を制約としないで、すべての端末より使用可能にしている。

4.1.3 MTMの機能

MTMは、以下のような機能を持っている。

- (1) 一括バックアップ (DISK TO MT)
指定したデータセット (グループ) を選択して、ディスクからMT上にコピーする。
コピーを行ったデータセットの情報は、MTM情報としてデータセットに保存される。
- (2) 一括リストア機能 (MT TO DISK)
指定したデータセット (グループ) を選択して、MTからディスク上にコピーする。
コピーを行うデータセットの情報源としてMTM情報またはMTラベルを使用する。
- (3) 磁気テープイニシャライズ機能 (MT INITIALIZE)
使用するMTの初期設定を行う。
- (4) 磁気テープラベルプリント機能 (MT-LABEL PRINT)
磁気テープラベルの内容を端末に表示する。磁気テープラベルからMTM情報を作成する。
- (5) データセット名リスト作成機能 (LISTUP)
一括バックアップを行う時、あらかじめどのデータセットをバックアップするかを指定しておくリストを作成する。

(6) M T M情報編集機能 (MTMEDIT)

M T M情報はM T Mデータセットに追加出力されるため一括バックアップを再度実行すると情報が重複する。編集機能はこれらの重複部分を取り除き、M T M情報を最新の状態にする。

(7) M T M情報検索機能 (SEARCH)

一括リストアを実行しようとする時、用意すべきM Tが判らない場合がある。検索機能はボリューム (グループ) またはデータセット (グループ) を検索キーとしてM T M情報を検索する。このとき検索結果をデータセットに保存することができ、他のM T Mの機能で使用する事ができる。

(8) T S S コマンド実行機能

一般のT S S コマンドのほかにMTMEDIT/SEARCH/LISTUP も実行できる。(この機能は 9415 - 29 Sタイプなどの端末でも実行できる。)

図 4.1.1 は各機能の関連を示しており、それぞれの機能にM T M情報とデータセット名リストがかかわっているのがわかる。M T M情報は図 4.1.2 の形式でデータセットに格納されており、M T Mの検索機能を使わない場合でもエディタで表示・検索が可能なのでわかりやすく、コンパクトにまとめられている。

図 4.1.3 はデータセット名リスト作成機能で作られたデータセット名リストの内容である。カードイメージで先頭のblankのあと完全データセット名で書かれている。

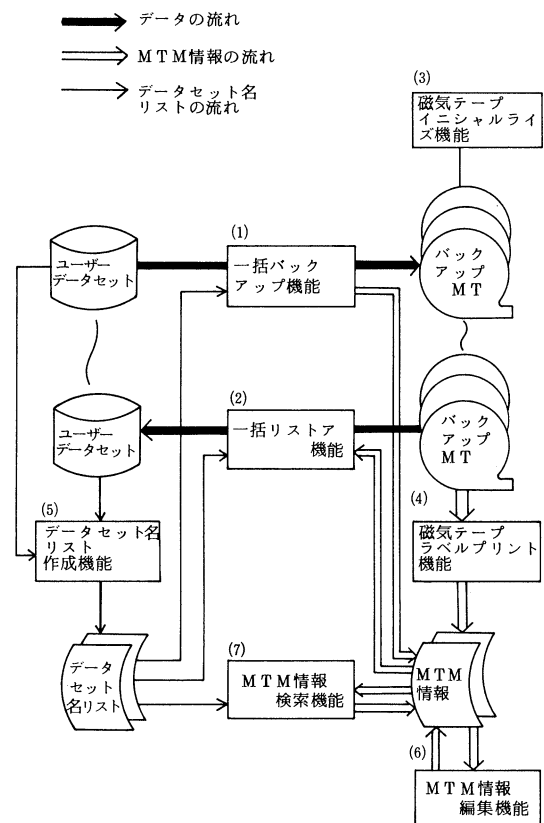


図 4.1.1 M T M情報と機能関連

```

VOL=BACKUP DEN=6250 LABEL=SL TIME=83-06-07.15:03:41 UID=AB1CD2
VGR=BACKUP VNO=001
DST=CNTRL.DATA          POS=001 UTILITY=JSDPCPY
DSN=AB1CD2.CNTRL.DATA
DSORG=PO RECFM=FB LRECL=00080 BLKSIZE=03120 DATE=83-02-03
ALLOC=000013TR UNUSE=000000TR DIR=005 MEMBER=00011 VOLUME=IMS015
MEM=ADASVC CDLPEDIT COMP DADA DAYEDIT DISKSP
MEM=DPRT DPUT EDITCNTL FORTQC FORTOCL
DST=PROC.CLIST          POS=002 UTILITY=JSDPCPY
DSN=AB1CD2.PROC.CLIST
DSORG=PO RECFM=VB LRECL=00255 BLKSIZE=03120 DATE=82-01-11
ALLOC=000030TR UNUSE=000020TR DIR=008 MEMBER=00018 VOLUME=IMS015
MEM=#DEL A AAAA ADDRHEX ADHEDSLP ADHELP
MEM=AS ASMC ASMCL AT B B2
MEM=CALENDAR CAN CBLCLG CD CENTPW CGDGO
DST=SSS.OUTLIST        POS=003 UTILITY=JSDPCPY
DSN=AB1CD2.SSS.OUTLIST
DSORG=PO RECFM=FB LRECL=00080 BLKSIZE=03120 DATE=83-03-28
ALLOC=000013TR UNUSE=000000TR DIR=001 MEMBER=00003 VOLUME=IMS015
MEM=NEW NOW OLD
DST=SYSPROF            POS=004 UTILITY=JSDPCPY
DSN=AB1CD2.SYSPROF
DSORG=PS RECFM=VB LRECL=03116 BLKSIZE=03120 DATE=82-10-04
ALLOC=000030TR UNUSE=000029TR DIR= MEMBER= VOLUME=IMS015
DST=ABCD.LOAD          POS=005 UTILITY=JSDPCPY
DSN=AB1CD2.ABCD.LOAD
DSORG=PO RECFM=U LRECL=13030 BLKSIZE=13030 DATE=83-04-20
ALLOC=000020TR UNUSE=000018TR DIR=001 MEMBER=00001 VOLUME=IMS015
MEM=MAIN

```

図 4.1.2 M T M情報 (例)

```

AB1CD2.CNTRL.DATA
AB1CD2.PROC.CLIST
AB1CD2.SSS.OUTLIST
AB1CD2.SYSPROF
AB1CD2.ABCD.LOAD

```

図 4.1.3 データセット
名リスト (例)

4.1.4 M T Mの運用とメニュー化

M T MはオープンM TのようにT S Sの下で1台の磁気テープ装置に1台の端末を対応させてコマンドで起動するようになっている。全面的にメニュー方式を採用しており、M T Mコマンドを入力すると、図 4.1.4 の処理選択画面のメニューが表示される。ここでは一括バックアップ機能や一括リストア機能など、それぞれの機能に対応する番号を入力する。たとえば1を入力すると一括バックアップ機能が選択され図 4.1.5 のパラメータ入力画面のメニューが表示される。こ

のメニューで必ず指定しなければならないパラメータはVOL（磁気テープのボリューム名）のみである。他は標準値が設定されているので、変更したいパラメータのみ入力すればよいようになっている。

バックアップの対象とするデータセット群を選択するパラメータ（PARM）などもあり、きめ細かな処理の要求に応えられるようになっている。

図 4.1.6 は一括リストア機能を選択した場合表示されるパラメータ入力画面のメニューである。一括リストア機能では引き続き図 4.1.7 のデータセット作成画面のメニューが表示され、個々のデータセットのリストアを判断する。一括バックアップ機能を使ったときのMTM情報があれば各パラメータはMTM情報のデータが設定されるので、パラメータを入力することはほとんど不要である。

4.1.5 今後のMTMのゆくえ

今回の機能の拡充はMTM全体におよび、現在考えられる必要な機能はすべて取り込んである。今後、当面はエラー処理の強化、操作のやさしさ・わかりやすさを進めながら、データセットの総合管理システムとして利用者の声を反映させて、MTMをさらに充実させてゆく予定である。

```
MT-MANAGER  SERVICE (SELECTION)                83-06-24  16:38:14   UID = ZA1A00

*****  SELECTION OF PROCESS  *****

1 ... DISK TO MT                                6 ... MTMDATA EDIT
2 ... MT TO DISK                                7 ... MTMDATA SEARCH
3 ... MT INITIALIZE                             8 ... TSS COMMAND
                                                (MTMEDIT,SEARCH IN DIFFERENT MODE)
4 ... LABEL PRINT                               E ... MTM PROCESS END
5 ... LISTUP
      (LIST UP OF USER DSN)

PROCESS ... _

*-(FUNCTION KEY)-----*
!   PA1 .. DISK TO MT   !
!   PA2 .. MT TO DISK   !
!   PA3 .. MT INITIALIZE !
*-----*
```

図 4.1.4 処理選択画面


```

MT-MANAGER  SERVICE (DISK TO MT)                83-06-24  16:38:45  UID = ZA1A00

ID-NAME      (IDN)      ----- <USER-ID/PROJECT-ID>
SELECTION OF DATASETS      <ALL/SAVE/SHRT/?XX/?XX/XXX/?.XX/XX/*XX>
(PARM)      -----
DATASET NAME OF MTMDATA    <DATASET NAME/*:TSS/*LP>
(MTMDSN)    -----
MT VOLUME INFORMATION
(VOL)      -----
(POS)      ---
(LABEL)    ---- <SL/NL/NONE:INFORMATION ONLY>
(DEN)      ---- <6250/1600/4/3>
LIMIT OF INQUIRY FOR COMMENTS
(VCM)      - <VOLUME COMMENT>
(DCM)      - <DATASET COMMENT>
(MCM)      - <MEMBER COMMENT>
UTILITY
(INQUIRY)  - <N:NOT INQUIRE/Y:INQUIRE>
(UTILITY)  - <S:JSDSCPY/D:JSFDCDP> CASE OF <NOT INQUIRE>
*-(FUNCTION KEY)-----*
!   PA1 .. GO BACK TO PREVIOUS MENU           !
!   PA2 .. GO BACK TO PREVIOUS MENU           !
!   PA3 .. GO BACK TO PREVIOUS MENU           !
*-----*

```

図 4.1.5 DISK TO MT パラメータ入力画面

```

MT-MANAGER  SERVICE (MT TO DISK)                83-06-24  16:39:09  UID = ZA1A00

INFORMATION SOURCE FOR MT-TO-DISK
<DSN/*MT/*SL/*KB>
DSN          : DATASET NAME OF MTMDATA
*MT OR *SL   : MT (STANDARD LABEL)
*KB          : KEY-BOARD (NO LABEL)
(SOURCE)    -----

SELECTION OF MT VOLUMES
<VOLUME NAME/*VOL>
*VOL          : DISPLAY OF MENU FOR VOLUME SELECTION
(VOLUME)     -----

SELECTION OF DATASETS
<ALL/SAVE/SHRT/?XX/?XX/XXX/?.XX/XX/*XX>
(PARM)      -----

*-(FUNCTION KEY)-----*
!   PA1 .. GO BACK TO PREVIOUS MENU           !
!   PA2 .. GO BACK TO PREVIOUS MENU           !
!   PA3 .. GO BACK TO PREVIOUS MENU           !
*-----*

```

図 4.1.6 MT TO DISK パラメータ入力画面

MT-MANAGER SERVICE (DATASET)

83-06-24 16:39:55 UID = ZA1A00

DATASET COPY _ <Y: COPY/N: SKIP/E: STOP>

MT DATASET INFORMATION

(DSN) -----
(VOLUME) -----
(POS) ___ (LABEL) ___ (DEN) ----

DISK DATASET INFORMATION

(DSN) -----
TRK/CYL SPACE1 SPACE2 DIR UCOUNT
(SPACE) ___ - - - - -
(DSORG) -- <PS/PO/DA>

UTILITY

(UTILITY) _ <S: JSDSCPY/P: JSDPCPY/D: JSFDCDP>

ADDITIONAL INFORMATION

(RECFM) ---
(BLKSIZE) ----
(LRECL) ----

-(FUNCTION KEY)-----
! PA1 .. SKIP !
! PA2 .. STOP !
! PA3 .. STOP !

図 4.1.7 データセット作成画面 (MT TO DISK)

4.2 所内研究室のパソコン端末活用法

技 官 西 本 史 雄

はじめに

分子科学研究所では 20 台を超えるパーソナルコンピュータ(略してパソコン)が研究室に置かれ、T S S 端末として使用されている。近頃とくに T S S 端末としてパソコンが選ばれるようになっていのは、低価格、高性能、多機能と 3 拍子揃ったうえに、T S S 端末専用機さえしのご端末機能を標準装備しているからにはかならない。研究者にとって扱いやすい研究室用の端末がはたす役割は大きい。素朴な端末機能しか持たない頃からパソコンの機能を最大限生かして、研究室用パソコン端末をサポートしてきた経過をふまえて、現状を報告する。

4.2.1 端末制御プログラム

パソコンを T S S 端末として使用するには、端末制御プログラムというソフトウェアが必要であるが、ほとんどのパソコンは“TERM”コマンドとして端末機能を持っている。又、BASIC 言語には、端末制御プログラムを作成するのに必要ないいくつかの命令が用意されているので、研究者が自分で作成することも比較的簡単にできる。このほか、市販の端末制御プログラムを購入して使用方法もある。パソコンも初期の頃は素朴な端末機能しか持っていなかったし、独自に端末制御プログラムを作ろうにも BASIC の機能が少し貧弱であったことを思うと、今はノウハウの蓄積もあって恵まれた状況にあるといえる。現在、所内の研究室で使われているパソコン端末は大きく分けて次の 2 グループがある。

- a) センター開発の端末制御プログラム (tss29) を使用しているもの

NEC PC-8001, 日立ベーシックマスターレベル 3

- b) 標準装備の端末機能“TERM”にセンターで手を加えたものを使用しているもの

NEC PC-8801, PC-9801

a) の機種で使われている端末制御プログラム (tss 29) は、端末の操作性という面で最も重要な意味を持つ「スクリーンエディタ」をパソコン端末に組み込むことを簡単に実現する方法を示したモデルで、この後発表されている端末制御プログラムは、ほとんどこの tss 29 方式が用いられている。2 画面あるスクリーンを自由に切り換えて使うことができるように工夫がされている。

b) の機種は a) の機種と標準装備の端末機能について比較して、(1)スクロールアップ可能な複数の表示画面、(2)スクリーンエディタが可能、(3)ホストコンピュータからパソコンに対して BASIC の命令 (およびプログラム) を実行させることによるリモートコントロールが可能、など

はるかに強力であって、独自の端末制御プログラムを作成する必要がほとんどなく、ホストコンピュータのTSSシステムに合せた“TERM”の一部手直しと、TSSコマンドとユーティリティプログラムを強化することによって、いくらでも端末機能を追加して行くことができる。

4.2.2 スクリーンエディタとtss 29方式

スクリーンエディタは、画面編集行入力機能というもので、キーボードから文字を入力してスクリーンに表示させたり、表示されている文字を修正しながら最後に送信（リターン）キーを押すとその行が送信するデータとなる。スクリーンエディタの機能には、(1)直前の文字の修正、(2)カーソルを移動させて途中の文字の修正・消去、(3)文字の挿入、(4)カーソルのある行の消去、(5)カーソル以降から行末までの消去、(6)項目単位のカーソルの移動、(7)行の分割、(8)項目の消去、(9)画面のスクロールアップ／ダウン又は画面の切換などがあり、簡単なキー操作で使うことができる。

このスクリーンエディタは、パーソナルコンピュータが持っている機能の1つであるが、端末制御プログラムや標準装備の端末機能“TERM”で、スクリーンエディタが使えると、プログラムやデータをエディットする場合に、CHANGE コマンドなどを使わないで済むばかりでなく、コントロールキーやカーソルキーなどを使って、前に説明したようなきめ細かな機能を駆使できる。

例を示すと、

```
100 :      INTEGER*4  DATAX (1000)
```

のDATAXをDATAYに修正したい場合、

```
100 :      INTEGER*4  DATAY (1000)
```

と入力し直すか、CHANGE (サブ) コマンドで

```
C100 /X/Y/
```

と入力するかのどちらかを行う必要があるが、

スクリーンエディタの場合は、Xのところへカーソルを移動させYと入力して送信（リターン）キーを押すだけで、この行を修正できてしまう。

```
100      INTEGER*4  DATAX (1000)
```

 (カーソルをここに移動し、Yを入力する)

最近では、英論文の作成・編集をTSS端末を使って行なうようになっており、TSSの操作やコマンドにあまり慣れていない人でも、スクリーンエディタのためにやさしく使うことができる。もちろんTSSを使い慣れた人であれば、飛躍的な操作性の向上を期待できる。

tss 29方式というのは、このような便利なスクリーンエディタの機能をTSS端末制御プログ

ラムの入力部分に組み入れる方式として、従来の「キーボード1文字入力・1文字送信」を「キーボード行入力（スクリーンエディタ）・行送信」に転換し、ホストコンピュータからの受信とパソコン端末からの送信の動作を切り換えるのをベルコード受信時とするというもので、簡単なくみになっている。NEC PC-8801, PC-9801 では、ベルコードに依存しないで、キーボードから入力を始めた時点を送信の動作の切換えとする方式がとられている。

4.2.3 T S Sの下でのBASICコマンド実行機能

NECのPC-8801, PC-9801は前述の強力なスクリーンエディタに加えて、ホストコンピュータからパソコンに対してBASICの命令（およびプログラム）を実行させる機能があり、今後のパソコン端末の方向を示すものとして注目される。所内研究室のパソコン端末もこの2種類が主流であることから、次の“T S Sの下でのBASICコマンド実行機能”をサポートするT S Sコマンドを開発し、提供している。

N88 I } この親コマンド投入後、ENDサブコマンドが入力されるまでのコマンドをT S S コ
N98 I } マンドと見なさず、BASICのコマンドとしてパソコンに実行させる。

N88 M } あらかじめ定義されている区分データセットの、このコマンドで指定したメンバーの
N98 M } 内容（BASICコマンド群）をパソコンに実行させる。

N88 F } このコマンドで指定したデータセットの内容（BASICコマンド群）をパソコンに実
N98 F } 行させる。

¥ このコマンドのパラメータとしてBASICのコマンドを指定することにより、パソコンに実行させる。

これらのコマンドは単独で使えるだけでなく、組み合わせてコマンドプロシジャにすることもできるので、各研究者自身によって端末を使いやすくすることができる。

BASICコマンド実行機能は、ホストコンピュータからパソコンへ次の文字列を送ることで可能になっている。（“<”の文字の他“・”，“>”を使うこともある）

E S C	<	BASICのコマンド	C R	L F
-------------	---	------------	--------	--------

この文字列を送るためのプログラムはアセンブラで書かれており、特に¥コマンドはコマンド自身がデータである形態をとるときわめて強力なコマンドとして、EDITの中でも使用することができる。

例えば¥コマンドは次のような目的に使うことができる。

¥ KEY 1, “GOTO” — F・1キーにFORTRANの“GOTO”を定義する。

¥ KEY 2, “LIST*, 22” + CHR\$(13) — F・2キーにEDITのLISTコマンドを定義する。

¥KEY 3, "1, ¥P" + CHR \$ (13) — F・3キーにHQEDのコマンド"1, ¥P"を定義する。

¥COLOR 6 — 表示色を黄色に変更する。

* ファンクションキーは F・1～F・5 まであり、文字列を定義しておくでワンタッチで入力することができる。

パソコンには、日本語表示、カラーグラフィックスなどの機能もあるが、ホストコンピュータ側のソフトウェアを充実させていくことで"TERM"の変更なしに安定したサポートが可能になっている。ファイル転送も"TERM"で次のコマンドを入力することで実行できる。

NHTOM データセット名 — ホストコンピュータのディスクの内容をパソコンのフロッピーディスクへ転送。

NM88TOH } — パソコンのフロッピーディスクの内容をホストコンピュータに転送する。(EDITの中で実行するので、データセット名の指定は必要ない。
NM98TOH }

ファイル転送のための特別なプログラムを必要としないで、BASICのコマンドの組み合わせで高度な処理が可能となっている。

4.2.4 "TERM"を手直しする patch.n88, patch.n98 プログラム

"TERM"がいくら強力であっても、ホストコンピュータとの相性がよくないと端末機能を十分生かせないことになってしまう。日立のVOS3TSS用に"TERM"を変更するパッチプログラム(patch.n88 - PC-8801用, patch.n98 - PC-9801用)を日本電気と共同で開発した。プログラムはZ80アセンブラ, Intel 8086アセンブラで作成しており、次の4つの機能がある。

(1) 自動改行(オートラインフィード)の抑止

端末で送信キーを入力すると、端末側は復帰(キャリッジリターン)のみ行い、改行はホストコンピュータの指示で行われるが、"TERM"の場合は無条件に復帰改行してしまい改行が2度になるので、これを抑止する。

(2) 重ね表示の回避

スクリーンへの表示は、最下行からのスクロールでない限り、新たな行への出力に対して行消去を行なわないので、前の表示が残っていると一部分表示が重なることがある。これを回避するため、復帰改行の直前にカーソル位置から行末までの行消去を行ない、重ならないように処理する。

(3) 改行復帰の除去と修正

日立のVOS3TSSの場合、復帰・改行コードを復帰改行の順に送ってくる場合と、改行復帰の順の場合がある。スクリーンエディタやフロッピーへの書き込みには、必ず復帰改行の順

でないとうまく行かないので、改行復帰は除去し、復帰改行に修正する。

(4) コード変換の余地

受信の時点でコード変換ができるようになっており、特定のコードを特殊な役割に使うことができるようにする。

4.2.5 多様化するパソコン端末とその対応

ここ1, 2年のうちに分子研においては、研究者の1人にパソコン（端末）1台という状況が十分予想される。実用に耐えうる本格的なソフトウェアを装備した多機能パソコンと英文ワード処理のできる極めて低価格なハンドヘルドパソコンが、研究者の便利な道具としての役割を果たせるようになるからである。そのような状況のもとでは、それぞれのパソコンがセンターのTSS端末として専用あるいは電話回線でつながることになるが、機種が異なっても端末としての使い方が基本的には同じになるように、端末機能の標準化と関連するTSSコマンドの整備をすすめていきたい。

5. 一 般 報 告

5.1 分子研ライブラリ・プログラムの収集と開発

分子科学・生物科学関連のプログラム収集・開発については、センター発足以来その充実に努めており、現在分子研ライブラリ・プログラムのうち、分子科学プログラムパッケージとして登録されているプログラムの総件数は96件にも達している。昭和57年度のプログラム・ライブラリ開発計画を表5.1.1に示すが、ライブラリの充実がこれらプログラム提供・開発者その他の方々の協力の賜物であることは言うまでもない。現在昭和58年度の開発計画を推進中であり、ライブラリのいっそうの充実を図っている。

表 5.1.1 昭和57年度 分子研ライブラリプログラム開発作業一覧

1	野村 興雄 小林 久芳 宮崎 栄三	理研 京都府大生活科学部 東工大理	研究員 助 手 助教授	触媒作用計算プログラム CATABSの開発
2	鈴木 博子	京大理	研修員	星間分子の分子線検索システム JPLINEの開発整備
3	北浦 和夫	阪市大理	助 手	有効内殻ポテンシャル法のプログラム LPINTDの開発
4	岩田 末廣	慶大理工	助教授	配置間相互作用のプログラム EFCIの開発整備
5	小杉 信博	東大理	助 手	ab initio SCF プログラムGSCF3 及びアレイプロセッサのためのアルゴリズムの開発
6	竹下 幸一	北大理	研究生	大型分子のGradient Method のプログラムGRAMOLの開発整備
7	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QDDの開発整備
8	堀 憲次 寺 前 裕之 山下 晃一	京大工・石油化学 " " "	研究生 大学院学生 研究生	分子軌道計算のプログラム GAUSSIAN80の整備
9	二宮 市三 泰野 甯世	名大工情報工学 名大大型計算機センター	教 授 助 手	汎用数値計算プログラムの整備・提供
10	三好 永作	福岡歯科大	助 手	原子核まわりの電子数計算プログラムの開発
11	中辻 博 牛尾 二郎 波田 雅彦	京大工 " "	助 手 大学院学生 大学院学生	クラスター展開法によるSACプログラムの開発整備
12	山口 敏男	東工大総合理工	助 手	液体・非晶質X線回折データの解析プログラムKURVLRとNLPLSQの開発整備
13	鈴木 勇	東京都臨床研	主 事	分子の図形表示プログラムMDPの開発整備

57年度新規登録した分子科学プログラムパッケージは以下の13件である。全プログラムの一覧は表5.1.2に示す。

GAMESS	GENERAL ATOMIC AND MOLECULAR ELECTRONIC STRUCTURE SYSTEM
GAUS80	GAUSSIAN 80 : AB INITIO MO CALCULATION (HITAC VERSION)
OUTFIT	UTILITY PROGRAM PACKAGE WRITTEN IN PL/I TO HANDLE DATASET
ISLINE	ATOMIC AND MOLECULAR SPECTRAL LINE DATA RETRIEVAL SYSTEM
ALCHEM	ALCHEMY:AB INITIO ELECTRONIC STRUCTURE CALCULATION PACKAGE
PKIT	PROGRAMMER'S KIT : TSS COMMAND PROCEDURES FOR CODING AID
GPQDD	GRAPHIC PROGRAM FOR QUANTITATIVE DRUG DESIGN
PPP	SCF-CI-PI-MO PROGRAM WITH PPP APPROXIMATION
EHTB	EXTENDED HUCKEL METHOD FOR TWO DIMENSIONAL PERIODIC SYSTEMS
CHEMIC	CHEMICS :AUTOMATED ORGANIC CHEMICAL STRUCTURE ELUCIDATION
MDP	MOLECULAR DISPLAY PROGRAM
NLPLSQ	LEAST-SQUARES PROGRAM FOR REFINING LIQUID STRUCTURE MODELS
IR2	INFRARED SPECTRAL RETRIEVAL SYSTEM

ライブラリの使用頻度統計情報を55年度より収集しているが、56年度通年のライブラリの使用頻度（コンプリート・プログラムのみの統計）は10,961回、57年度は10,698回に昇っている。これは平均すると1日29回余り、ライブラリが使用されていることを意味する。

米国インディアナ大学より毎年QCP E (Quantum Chemistry Program Exchange) プログラムを購入しているが、57年度は以下に示す10件のプログラムを新規登録した（昭和57年9月22日付）。これでQCP E プログラムの総件数は397件に達した。ユーザー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。

QC0432	DIAGG:PSEUDODIAGONALIZATION PROGRAM FOR SCF CALCULATIONS
QC0433	DELTA H VS K**-1:REACTION CONSTANTS BETWEEN ACID AND BASE
QC0434	HPSI:SOLUTION OF THE 1-DIMENSIONAL RADIAL SCHROEDINGER EQ.
QC0435	CDIST:CENTRIFUGAL DISTORTION CONSTANTS (DIATOMIC MOLECULES)
QC0436	G70DATA AND LAOIM:GAUSSIAN 70 DATA AND LOCALIZED AO
QC0438	MND0C:CORRELATED SEMIEMPIRICAL CALCULATION WITH GEOM.OPT.
QC0439	RH01:FIRST ORDER DENSITY MATRICES AND NATURAL ORBITALS
QC0440	LAOCOR:REVISED VERSION OF LAC00N 3 PROGRAM
QC0441	NMRCINDO-80:NMR SHIELDING CONSTANTS BY SEMIEMPIRICAL CALC.
QC0442	ANVPDA:ANALYSIS OF N VERTEX POLYHEDRAL DIHEDRAL ANGLES

以上の他に57年度は新たに、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NUMPAC計603件を新規登録した。これは二宮市三教授その他の方々の製作によるもので、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、線形計画法等を扱うことができる。NUMPACライブラリの一覧は表5.1.3の通りである。

分子研プログラムライブラリは、以上の分子科学プログラムパッケージ、QCP Eプログラムライブラリ、NUMPACライブラリの3本立てで構成されることになる。

表 5.1.2 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 : 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

FIELD CODE : MI10

FIELD TITLE : MOLECULAR INTEGRALS.

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

FIELD CODE : WF10

FIELD TITLE : WAVEFUNCTIONS BY AB INITIO METHODS.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	QCLDB	QUANTUM CHEMISTRY LITERATURE DATA BASE SYSTEM
002	JAMOL3	AB INITIO LCAO MO SCF CALCULATION
003	ATOMHF	AB INITIO LCAO SCF OF ATOMS. GAUSSIAN ORBITALS ARE USED.
004	HONDOG	AB INITIO LCAO-SCF-MO METHOD AND GRADIENT METHOD
005	HONDO	AB INITIO LCAO-SCF-MO METHOD
006	SCEP	SELF-CONSISTENT ELECTRON PAIRS METHOD
007	IMSPAC	AB INITIO SCF MO CALCULATIONS
008	RKNGAU	RIKEN GAUSSIAN70
009	IMSPAK	GEOMETRY OPTIMIZATION BY AB INITIO SCF-MO CALCULATIONS
010	COMICA	A PROGRAM SYSTEM FOR CONFIGURATION MIXING CALCULATION<CI>
011	IPCREF	EFFECTIVE HAMILTONIAN MATRIX CONFIGURATION INTERACTION<EFCI>
012	PA200	LIST OF ONE- AND TWO-ELECTRON INTEGRAL LABELLS
013	PA300	EVALUATE ONE- AND TWO-ELECTRON INTEGRALS
014	PA409	CLOSED-SHELL SCF AND POPULATION ANALYSIS PACKAGE
015	PA600	ONE-ELECTRON PROPERTIES PACKAGE
016	INTCPY	INTEGRAL COPY ROUTINE OF POLYATOM SYSTEM
017	GAUS76	AB INITIO MO CALCULATION. GAUSSIAN 76 M-VERSION.
018	ALIS	AB INITIO MCSCF PROGRAM FOR ATOMS AND MOLECULES
019	JAPIC1	PLOTTER WRITING OF MO AND DENSITY BY AB INITIO METHODS
020	JAPIC2	PLOTTER AND GRAPHIC DISPLAY WRITING OF MO AND DENSITY
021	GUGACI	GRAPHICAL UNITARY GROUP APPROACH CI BY ISAIAH SHAVITT
022	DRAWDG	DIAGRAM: GENERATION OF GOLDSTONE AND BLOCH-BRANDOW DIAGRAMS
023	GSCF2	PROGRAM GSCF2 WITH ONE-HAMILTONIAN AND PARTIAL SCF METHOD
024	GAMESS	GENERAL ATOMIC AND MOLECULAR ELECTRONIC STRUCTURE SYSTEM
025	GAUS80	GAUSSIAN 80 : AB INITIO MO CALCULATION (HITAC VERSION)
026	ALCHEM	ALCHEMY: AB INITIO ELECTRONIC STRUCTURE CALCULATION PACKAGE
027	CMQCA	CARNEGIE-MELLON QUANTUM CHEMISTRY ARCHIVE

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

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

FIELD CODE : SC10
FIELD TITLE : SCATTERING AND TRAJECTORY.

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

FIELD CODE : SC20
FIELD TITLE : CRYSTALLOGRAPHY.

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	NASH	SEARCH FOR NEAR ATOMS IN A PROTEIN
002	STEREO	STEREO DRAWING OF SKELETAL MODEL OF PROTEINS.
003	CONVRT	CONVERSION OF BNL DATA FORMATS TO PSPCS FORMAT
004	DISMAP	TRIANGULAR DISTANCE MAP OF A PROTEIN
005	ASA	ACCESSIBLE SURFACE AREA OF A PROTEIN
006	BENDER	PARAMETER CALCULATION FOR BYRON'S BENDER MODEL
007	SUPPOS	SUPERPOSITION OF TWO SIMILAR CONFORMATION OF PROTEIN(S)
008	PGCCMB	CONFORMATIONAL ANALYSIS BY BOYD'S METHOD.
009	UNICS3	UIVERSAL 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

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	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

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MM2	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION BY MM2 FORCE FIELD MODEL
002	MMIP11	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 100-ATOM MOLECULES
003	MMIP13	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION OF UP TO 300-ATOM MOLECULES
004	MMIY3	MOLECULAR MECHANICS CALCULATION FOR 6-COORDINATED COMPOUNDS
005	MDAN03	MOLECULAR DYNAMICS FOR ALKALI NITRATE
006	CLAMPS	CLAMPS: CLASSICAL MANY PARTICLE SIMULATOR

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

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	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 : AS30
FIELD TITLE : LIQUID AND SOLUTION.

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

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

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

FIELD CODE : SL10
FIELD TITLE : SPECIAL LANGUAGES.

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

**** TOTAL NUMBER OF UNIQUE PROGRAMS ****
100

**** SORTED UNIQUE PROGRAMS ****

ALCHEM	ALIS	ASA	ASSIGN	ATOMHF	BCRES3	BC3
BENDER	BSIP	CGTOFD	CGTORL	CHEMIC	CLAMPS	CMQCA
CNINDO	COMICA	CONVRT	COUNTF	CVOA	DISMAP	DISPL3
DNMR3	DRAWDG	DVSCAT	EHTB	ENVLOP	FCBSD	FCMP
FLOW	FORDAP	GAMESS	GAUS76	GAUS80	GPQDD	GSCF2
GUGACI	HLISP	HMO	HONDO	HONDOG	IMSPAC	IMSPAK
INTCPY	IPCREF	IR2	ISLINE	JAMOL3	JAPIC1	JAPIC2
KURVLR	LAOCN3	LIBE	LSRES3	LSVR3	MDANO3	MDP
MDSALT	MINDO3	MMIPI1	MMIPI3	MMIY3	MM2	MNDO
MNDOM	MOLSCT	MULTAN	NASH	NCTB	NICER	NLPLSQ
ORTEP	OTHELO	OUTFIT	PA200	PA300	PA409	PA600
PDB	PFORTV	PGCCMB	PKIT	POTOPS	PPP	PROFIL
PRTXYZ	PSPART	PSTOPO	QCHECK	QCLDB	REDUCE	REPORT
RKNGAU	SALS	SCEP	SFORT	STEREO	STINGY	SUPPOS
TASP	UNICS3					

IMS COMPUTER CENTER: LAST UPDATE = 83-05-12

表5.1.3 NUMPACライブラリー一覧

==== NUMPAC LIBRARY =====

```

***** LIST OF PROGRAMS IN THE GIVEN FIELD *****
FIELD CODE   : F01N
FIELD TITLE  : MATRIX CALCULATION(NORMALIZATION AND INVERSION)

NO. PROGRAM ID      PROGRAM TITLE
001  MNORMS  NORMALIZATION OF A REAL MATRIX
002  MNORMD  NORMALIZATION OF A REAL MATRIX
003  MNORMB  NORMALIZATION OF A COMPLEX MATRIX
004  MNRSPS  NORMALIZATION OF A SYMMETRIC POSITIVE DEFINITE MATRIX
005  MNRSPD  NORMALIZATION OF A SYMMETRIC POSITIVE DEFINITE MATRIX
006  MNRMBB  NORMALIZATION OF A REAL BAND MATRIX
007  MNRMBD  NORMALIZATION OF A REAL BAND MATRIX
008  MNRMBQ  NORMALIZATION OF A REAL BAND MATRIX
009  MNRMBB  NORMALIZATION OF A REAL BAND MATRIX
010  MNRMBB  NORMALIZATION OF A REAL BAND MATRIX
011  MNMBSS  NORMALIZATION OF A REAL SYM. POS. DEF. BAND MATRIX
012  MNMBSD  NORMALIZATION OF A REAL SYM. POS. DEF. BAND MATRIX
013  MNMBSS  NORMALIZATION OF A REAL SYM. POS. DEF. BAND MATRIX
014  LAPLBS  SOLUTION OF 2-DIMENSIONAL LAPLACIAN EQUATION
015  LAPLVS  SOLUTION OF 2-DIMENSIONAL LAPLACIAN EQUATION
016  LAPLSS  SOLUTION OF 2-DIMENSIONAL LAPLACIAN EQUATION
017  LAPLCS  SOLUTION OF 2-DIMENSIONAL LAPLACIAN EQUATION
018  MINVS   INVERSION OF REAL MATRICES
019  MINVD   INVERSION OF REAL MATRICES
020  MINVQ   INVERSION OF REAL MATRICES
021  MINVC   INVERSION OF COMPLEX MATRICES
022  MINVB   INVERSION OF COMPLEX MATRICES
023  MINVSP  INVERSION OF SYM. POS. DEF. MATRICES(REAL)
024  MINVDP  INVERSION OF SYM. POS. DEF. MATRICES(DOUBLE)
025  MINVQP  INVERSION OF SYM. POS. DEF. MATRICES(QUADRUPLE)
026  GINVS   GENERALIZED INVERSES (PSEUDO-INVERSE) BY SVD
027  GINVD   GENERALIZED INVERSES (PSEUDO-INVERSE) BY SVD
028  MNORMQ  NORMALIZATION OF A REAL MATRIX
029  MNORMC  NORMALIZATION OF A COMPLEX MATRIX

```

```

FIELD CODE   : F03N
FIELD TITLE  : DETERMINANTS

```

```

NO. PROGRAM ID      PROGRAM TITLE
001  MDETS    CALCULATION OF DETERMINANTS(REAL MATRIX)
002  MDETD    CALCULATION OF DETERMINANTS(REAL MATRIX)
003  MDETD    CALCULATION OF DETERMINANTS(REAL MATRIX)
004  MDETD    CALCULATION OF DETERMINANTS(REAL MATRIX)
005  MDETD    CALCULATION OF DETERMINANTS(REAL MATRIX)
006  MDETD    CALCULATION OF DETERMINANTS(REAL MATRIX)
007  MDETD    CALCULATION OF DETERMINANTS(REAL MATRIX)
008  MDETD    CALCULATION OF DETERMINANTS(REAL MATRIX)
009  MDETD    CALCULATION OF DETERMINANTS(REAL MATRIX)
010  MDETD    CALCULATION OF DETERMINANTS(REAL MATRIX)
011  MDETD    CALCULATION OF DETERMINANTS(REAL MATRIX)
012  MDETD    CALCULATION OF DETERMINANTS(REAL MATRIX)
013  MDETD    CALCULATION OF DETERMINANTS(REAL MATRIX)
014  MDETD    CALCULATION OF DETERMINANTS(REAL MATRIX)
015  MDETD    CALCULATION OF DETERMINANTS(REAL MATRIX)

```

```

FIELD CODE   : F04N
FIELD TITLE  : LINEAR EQUATION

```

```

NO. PROGRAM ID      PROGRAM TITLE
001  LEQLUS  LINEAR EQ. BY LU-DECOMP.
002  LEQLUD  LINEAR EQ. BY LU-DECOMP.
003  LEQLUQ  LINEAR EQ. BY LU-DECOMP.
004  LEQLUC  LINEAR EQ. BY LU-DECOMP.
005  LEQLUB  LINEAR EQ. BY LU-DECOMP.
006  GAUELS  LINEAR EQ. BY LU-DECOMP.
007  GAUELD  LINEAR EQ. BY LU-DECOMP.
008  GAUELQ  LINEAR EQ. BY LU-DECOMP.
009  GAUELC  LINEAR EQ. BY LU-DECOMP.
010  GAUELB  LINEAR EQ. BY LU-DECOMP.
011  LEQBDS  LINEAR EQ. WITH BAND MATRIX OF COEF. BY GAUSSIAN ELIM.
012  LEQBDD  LINEAR EQ. WITH BAND MATRIX OF COEF. BY GAUSSIAN ELIM.
013  LEQBDQ  LINEAR EQ. WITH BAND MATRIX OF COEF. BY GAUSSIAN ELIM.
014  LEQBDC  LINEAR EQ. WITH BAND MATRIX OF COEF. BY GAUSSIAN ELIM.
015  LEQBDB  LINEAR EQ. WITH BAND MATRIX OF COEF. BY GAUSSIAN ELIM.

```

016	BUNCHS	LINEAR EQ. WITH SYM. MATRIX OF COEF. BY BUNCH'S
017	BUNCHD	LINEAR EQ. WITH SYM. MATRIX OF COEF. BY BUNCH'S
018	BUNCBS	LINEAR EQ. WITH SYM. BAND MATRIX OF COEF. BY BUNCH'S
019	BUNCBD	LINEAR EQ. WITH SYM. BAND MATRIX OF COEF. BY BUNCH'S
020	CHOLFS	SYM. POS. DEF. LINEAR EQ. BY CHOLESKY'S (FULL)
021	CHOLFD	SYM. POS. DEF. LINEAR EQ. BY CHOLESKY'S (FULL)
022	CHOLFQ	SYM. POS. DEF. LINEAR EQ. BY CHOLESKY'S (FULL)
023	CHOLFC	SYM. POS. DEF. LINEAR EQ. BY CHOLESKY'S (FULL)
024	CHOLFB	SYM. POS. DEF. LINEAR EQ. BY CHOLESKY'S (FULL)
025	MCHLFS	SYM. POS. DEF. LINEAR EQ. BY MODIFIED CHOLESKY
026	MCHLFD	SYM. POS. DEF. LINEAR EQ. BY MODIFIED CHOLESKY
027	MCHLFQ	SYM. POS. DEF. LINEAR EQ. BY MODIFIED CHOLESKY
028	CHOLCS	SYM. POS. DEF. LINEAR EQ. BY CHOLESKY(COMPACT MODE)
029	CHOLCD	SYM. POS. DEF. LINEAR EQ. BY CHOLESKY(COMPACT MODE)
030	CHOLCQ	SYM. POS. DEF. LINEAR EQ. BY CHOLESKY(COMPACT MODE)
031	MCHLCS	SYM. POS. DEF. LIN. EQ. BY MODIFIED CHOLESKY(COMPACT)
032	MCHLCD	SYM. POS. DEF. LIN. EQ. BY MODIFIED CHOLESKY(COMPACT)
033	MCHLCQ	SYM. POS. DEF. LIN. EQ. BY MODIFIED CHOLESKY(COMPACT)
034	CHOLSK	SYM. POS. DEF. LINEAR EQ. BY CHOLESKY'S
035	CHOLSD	SYM. POS. DEF. LINEAR EQ. BY CHOLESKY'S
036	CHLBDS	SYM. POS. DEF. BAND LIN. EQ. BY CHOLESKY'S
037	CHLBDD	SYM. POS. DEF. BAND LIN. EQ. BY CHOLESKY'S
038	CHLBQ	SYM. POS. DEF. BAND LIN. EQ. BY CHOLESKY'S
039	MCHLBS	SYM. POS. DEF. BAND LIN. EQ. BY MODIFIED CHOLESKY
040	MCHLBD	SYM. POS. DEF. BAND LIN. EQ. BY MODIFIED CHOLESKY
041	MCHLBQ	SYM. POS. DEF. BAND LIN. EQ. BY MODIFIED CHOLESKY
042	CHLVBS	LINEAR EQ. REAL SYM.POS.VARIABLE BANDWIDTH BY CHOLESKY
043	CHLVBD	LINEAR EQ. REAL SYM.POS.VARIABLE BANDWIDTH BY CHOLESKY
044	PRCGFS	LIN. EQ. WITH POS. SYM. MATRIX BY PCG-METHOD
045	PRCGFD	LIN. EQ. WITH POS. SYM. MATRIX BY PCG-METHOD
046	CGHTCS	LIN. EQ. WITH POS. SYM. MATRIX BY CG (COMPACT)
047	CGHTCD	LIN. EQ. WITH POS. SYM. MATRIX BY CG (COMPACT)
048	GSORSS	LINEAR EQ. FOR SPARSE MATRICES BY SOR - (COMPACT MODE)
049	GSORSD	LINEAR EQ. FOR SPARSE MATRICES BY SOR - (COMPACT MODE)
050	PRCGSS	LIN. EQ. WITH SPARSE POS. SYM. MATRIX BY PCG-METHOD
051	PRCGSD	LIN. EQ. WITH SPARSE POS. SYM. MATRIX BY PCG-METHOD
052	TRIDGS	SOLUTION OF TRIDIAGONAL EQUATION
053	TRIDGD	SOLUTION OF TRIDIAGONAL EQUATION
054	TRDSPS	SYM. POS. DEF. TRIDIAGONAL EQ.
055	TRDSPD	SYM. POS. DEF. TRIDIAGONAL EQ.
056	TDSPCS	SYM. POS. DEF. TRIDIAGONAL EQ.
057	TDSPCD	SYM. POS. DEF. TRIDIAGONAL EQ.
058	LEQLSS	LEAST SQUARE AND MINIMUM NORM SOL. BY HOUSEHOLDER
059	LEQLSD	LEAST SQUARE AND MINIMUM NORM SOL. BY HOUSEHOLDER
060	LSMNS	LEAST SQUARE AND MINIMUM NORM SOL. BY SVD
061	LSMND	LEAST SQUARE AND MINIMUM NORM SOL. BY SVD

FIELD CODE : F02N

FIELD TITLE : EIGENVALUE PROBLEM

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	HEQRVS	EIGEN ANAL. FOR REAL NONSYM. MATRICES BY DOUBLE QR
002	HEQRVD	EIGEN ANAL. FOR REAL NONSYM. MATRICES BY DOUBLE QR
003	HOQRVS	EIGEN ANAL. FOR REAL SYM. MATRICES BY HOUSEHOLDER-QR
004	HOQRVD	EIGEN ANAL. FOR REAL SYM. MATRICES BY HOUSEHOLDER-QR
005	HOQRUS	EIGEN ANAL. FOR REAL SYM. MATRICES BY HOUSEHOLDER-QR
006	HOQRUD	EIGEN ANAL. FOR REAL SYM. MATRICES BY HOUSEHOLDER-QR
007	HQRIIS	EIGEN ANAL. OF SYM. MATRICES BY HOUSEHOLDER-QR-INVERSE
008	HQRIID	EIGEN ANAL. OF SYM. MATRICES BY HOUSEHOLDER-QR-INVERSE
009	HOBSVS	EIGEN ANAL. FOR REAL SYMM BY HOUSEHOLDER-BISECTION
010	HOBSVD	EIGEN ANAL. FOR REAL SYMM BY HOUSEHOLDER-BISECTION
011	JACOBS	EIGEN ANAL. FOR REAL SYM. MATRIX BY THRESHOLD JACOBI
012	JACOBQ	EIGEN ANAL. FOR REAL SYM. MATRIX BY THRESHOLD JACOBI
013	RHQRVS	EIGEN ANAL. FOR SYM. BAND BY RUTISHAUSER-QR
014	RHQRVD	EIGEN ANAL. FOR SYM. BAND BY RUTISHAUSER-QR
015	RHBSVS	EIGEN ANAL. FOR SYM. BAND BY RUTISHAUSER-BISECTION
016	RHBSVD	EIGEN ANAL. FOR SYM. BAND BY RUTISHAUSER-BISECTION
017	GHQRVS	EIGENVALUE ANALYSIS AX=SBX BY HOUSEHOLDER-QR METHOD
018	GHQRVD	EIGENVALUE ANALYSIS AX=SBX BY HOUSEHOLDER-QR METHOD
019	GHQRUS	EIGENVALUE ANALYSIS AX=SBX BY HOUSEHOLDER-QR METHOD
020	GHQRUD	EIGENVALUE ANALYSIS AX=SBX BY HOUSEHOLDER-QR METHOD

021	GHQRIS	EIGEN ANAL. AX=SBX BY HOUSEHOLDER-QR-INVERSE ITERATION
022	GHQRID	EIGEN ANAL. AX=SBX BY HOUSEHOLDER-QR-INVERSE ITERATION
023	GHBSYS	EIGEN ANAL. AX=SBX BY HOUSEHOLDER-BISECTION
024	GHBSVD	EIGEN ANAL. AX=SBX BY HOUSEHOLDER-BISECTION
025	JENNFS	EIGEN ANAL. FOR REAL SYM.MATRICES BY JENNINGS'
026	JENNFD	EIGEN ANAL. FOR REAL SYM.MATRICES BY JENNINGS'
027	JENNBS	EIGEN ANAL. FOR REAL SYM.MATRICES BY JENNINGS'
028	JENNBD	EIGEN ANAL. FOR REAL SYM.MATRICES BY JENNINGS'
029	GJENBS	EIGEN ANAL. FOR REAL SYM.MATRICES BY JENNINGS'
030	GJENBD	EIGEN ANAL. FOR REAL SYM.MATRICES BY JENNINGS'
031	SVDS	SINGULAR VALUE DECOMPOSITION
032	SVDD	SINGULAR VALUE DECOMPOSITION
033	NSHOUS	NICER FOR STANDARD EIGEN PROBLEM BY HOUSEHOLDER
034	NSHOUD	NICER FOR STANDARD EIGEN PROBLEM BY HOUSEHOLDER
035	NGHOUS	NICER FOR GENERALIZED EIGEN PROBLEM BY HOUSEHOLDER
036	NGHOUD	NICER FOR GENERALIZED EIGEN PROBLEM BY HOUSEHOLDER
037	NSJENS	NICER FOR STANDARD EIGEN PROBLEM BY JENNINGS
038	NSJEND	NICER FOR STANDARD EIGEN PROBLEM BY JENNINGS
039	NGJENS	NICER FOR GENERALIZED EIGEN PROBLEM BY JENNINGS
040	NGJEND	NICER FOR GENERALIZED EIGEN PROBLEM BY JENNINGS

FIELD CODE : C02N
FIELD TITLE : POLYNOMIAL EQUATION

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	QUADRS	QUADRATIC EQ. WITH REAL COEF.
002	QUADRD	QUADRATIC EQ. WITH REAL COEF.
003	QUADRQ	QUADRATIC EQ. WITH REAL COEF.
004	CUBICS	SOLUTION OF CUBIC EQUATIONS WITH REAL COEFFICIENTS
005	CUBICD	SOLUTION OF CUBIC EQUATIONS WITH REAL COEFFICIENTS
006	CUBICQ	SOLUTION OF CUBIC EQUATIONS WITH REAL COEFFICIENTS
007	QUARTS	SOLUTION OF QUARTIC EQUATIONS WITH REAL COEFFICIENTS
008	QUARTD	SOLUTION OF QUARTIC EQUATIONS WITH REAL COEFFICIENTS
009	QUARTQ	SOLUTION OF QUARTIC EQUATIONS WITH REAL COEFFICIENTS
010	GJMNKS	REAL COEF. POLYNOMIAL EQ. BY GARSIDE-JARRAT-MACK
011	GJMNKD	REAL COEF. POLYNOMIAL EQ. BY GARSIDE-JARRAT-MACK
012	GJMNKQ	REAL COEF. POLYNOMIAL EQ. BY GARSIDE-JARRAT-MACK

FIELD CODE : C04N
FIELD TITLE : NON-LINEAR EQUATION

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	BRENTS	SOLUTION OF NON-LINEAR EQUATIONS BY BRENT'S METHOD
002	BRENTD	SOLUTION OF NON-LINEAR EQUATIONS BY BRENT'S METHOD
003	BROYDS	SYSTEM OF NON-LINEAR EQ. BY BROYDEN'S
004	BROYDD	SYSTEM OF NON-LINEAR EQ. BY BROYDEN'S

FIELD CODE : C07N
FIELD TITLE : MINIMIZATION OF FUNCTION

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	MINSXS	MINIMIZATION OF FUNCTION BY SIMPLEX METHOD
002	MINSXD	MINIMIZATION OF FUNCTION BY SIMPLEX METHOD
003	FLPOWS	MINIMIZATION OF FUNCTION BY DAVIDON-FLETCHER-POWELL
004	FLPOWD	MINIMIZATION OF FUNCTION BY DAVIDON-FLETCHER-POWELL

FIELD CODE : E05N
FIELD TITLE : INTERPOLATION

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	DSCI1A	INTERPOLATING SPLINES (1-VARIABLE, TYPE-1)
002	DSFI1A	INTERPOLATING SPLINES (1-VARIABLE, TYPE-1)
003	DSCI2A	INTERPOLATING SPLINES (1-VARIABLE, TYPE-2)
004	DSFI2A	INTERPOLATING SPLINES (1-VARIABLE, TYPE-2)
005	DSCI3A	INTERPOLATING SPLINES (1-VARIABLE, TYPE-3)
006	DSFI3A	INTERPOLATING SPLINES (1-VARIABLE, TYPE-3)
007	DSCI4A	INTERPOLATING SPLINES (1-VARIABLE, PERIODIC)
008	DSFI4A	INTERPOLATING SPLINES (1-VARIABLE, PERIODIC)

009	DSCI1D	INTERPOLATING SPLINES (2-VARIABLES, TYPE-1*1)
010	DSFI1D	INTERPOLATING SPLINES (2-VARIABLES, TYPE-1*1)
011	DSCI2D	INTERPOLATING SPLINES (2-VARIABLES, TYPE-2*2)
012	DSFI2D	INTERPOLATING SPLINES (2-VARIABLES, TYPE-2*2)
013	DSCI3D	INTERPOLATING SPLINES (2-VARIABLES, TYPE-3*3)
014	DSFI3D	INTERPOLATING SPLINES (2-VARIABLES, TYPE-3*3)
015	DSCI4D	INTERPOLATING SPLINES (2-VARIABLES, TYPE-4*4)
016	DSFI4D	INTERPOLATING SPLINES (2-VARIABLES, TYPE-4*4)
017	DSCI5D	INTERPOLATING SPLINES (2-VARIABLES, TYPE-1*4)
018	DSFI5D	INTERPOLATING SPLINES (2-VARIABLES, TYPE-1*4)
019	DSCI6D	INTERPOLATING SPLINES (2-VARIABLES, TYPE-2*4)
020	DSFI6D	INTERPOLATING SPLINES (2-VARIABLES, TYPE-2*4)
021	DSCI7D	INTERPOLATING SPLINES (2-VARIABLES, TYPE-3*4)
022	DSFI7D	INTERPOLATING SPLINES (2-VARIABLES, TYPE-3*4)
023	TRIPCK	2-DIMENSIONAL C-K INTERPOLATION FOR IRREGULAR DATA
024	TETPCK	3-DIMENSIONAL C-K INTERPOLATION FOR IRREGULAR DATA

FIELD CODE : E02N
FIELD TITLE : DATA FITTING

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	HERM31	CURVE FITTING BY HERMITE INTERPOLATION (ORDER 3)
002	HERM51	CURVE FITTING BY HERMITE INTERPOLATION (ORDER 5)
003	HERM32	SURFACE FITTING BY HERMITE INTERPOLATION(ORDER 3)
004	HERM52	SURFACE FITTING BY HERMITE INTERPOLATION(ORDER 5)
005	CFS1A	CURVE FITTING BY SPLINES
006	SFC1A	CURVE FITTING BY SPLINES
007	CFS2A	SURFACE FITTING BY SPLINES
008	SFS1A	SURFACE FITTING BY SPLINES
009	DCOMD1	CURVE FITTING BY COMPOSITE POLINOMIALS
010	LSAICS	LEAST SQUARE APPROXIMATION BY ORTHOGONAL POLYNOMIALS
011	LSAICD	LEAST SQUARE APPROXIMATION BY ORTHOGONAL POLYNOMIALS
012	LSANLS	LEAST SQUARE APPROXIMATION WITH NONLINEAR PARAMETERS
013	LSANLD	LEAST SQUARE APPROXIMATION WITH NONLINEAR PARAMETERS

FIELD CODE : D06N
FIELD TITLE : FOURIER ANALYSIS

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	FFTC	COMPLEX FAST FOURIER ANALYSIS
002	FFTB	COMPLEX FAST FOURIER ANALYSIS
003	FFTS	COMPLEX FOURIER TRANSFORM AND INVERSE TRANSFORM
004	FFTD	COMPLEX FOURIER TRANSFORM AND INVERSE TRANSFORM
005	FFTR	REAL FAST FOURIER ANALYSIS
006	FFTRD	REAL FAST FOURIER ANALYSIS
007	FFTRI	REAL FAST FOURIER SYNTHESIS
008	FFTRID	REAL FAST FOURIER SYNTHESIS
009	FT235C	COMPLEX FFT OF SAMPLE NUMBER 2**K*3**L*5**M
010	FT235R	REAL FFT OF SAMPLE NUMBER 2**K*3**L*5**M
011	FFT2DC	2- DIMENSIONAL COMPLEX FAST FOURIER TRANSFORM
012	FFT3DC	3-DIMENSIONAL COMPLEX FAST FOURIER TRANSFORM
013	FFT2DR	2-DIMENSIONAL REAL FAST FOURIER TRANSFORM
014	FFT3DR	3-DIMENSIONAL REAL FAST FOURIER TRANSFORM
015	BITREV	REARRANGEMENT OF DATA BY BIT REVERSAL(SINGLE)
016	BITRVD	REARRANGEMENT OF DATA BY BIT REVERSAL(DOUBLE)
017	BITRVB	REARRANGEMENT OF DATA BY BIT REVERSAL(QUADRUPLE)
018	FCOSMS	FAST FOURIER COSINE TRANSFORM BY THE MIDPOINT RULE
019	FCOSMD	FAST FOURIER COSINE TRANSFORM BY THE MIDPOINT RULE
020	FSINMS	FAST FOURIER SINE TRANSFORM BY THE MIDPOINT RULE
021	FSINMD	FAST FOURIER SINE TRANSFORM BY THE MIDPOINT RULE
022	TRIGQP	TABLE OF TRIGONOMETRIC FUNC. ARRANGED IN BIT REVERSE
023	TRIGQD	TABLE OF TRIGONOMETRIC FUNC. ARRANGED IN BIT REVERSE
024	FCOSTS	FAST FOURIER COSINE TRANSFORM BY THE TRAPEZOIDAL RULE
025	FCOSTD	FAST FOURIER COSINE TRANSFORM BY THE TRAPEZOIDAL RULE
026	FSINTS	FAST FOURIER SINE TRANSFORM BY THE TRAPEZOIDAL RULE
027	FSINTD	FAST FOURIER SINE TRANSFORM BY THE TRAPEZOIDAL RULE
028	FCOSCS	FOURIER COSINE SERIES OF EVEN FUNC. DEFINED ON <0,PI>
029	FCOSCD	FOURIER COSINE SERIES OF EVEN FUNC. DEFINED ON <0,PI>
030	FCOSOS	FOURIER COSINE SERIES OF EVEN FUNC. DEFINED ON <0,PI>
031	FCOSOD	FOURIER COSINE SERIES OF EVEN FUNC. DEFINED ON <0,PI>

032	FSINOS	FOURIER SINE SERIES OF ODD FUNC. DEFINED ON (0,PI)
033	FSINOD	FOURIER SINE SERIES OF ODD FUNC. DEFINED ON (0,PI)
034	FCHB1S	FOURIER EXPANSION BY CHEBYSHEV POLYNOM. OF 1ST KIND
035	FCHB1D	FOURIER EXPANSION BY CHEBYSHEV POLYNOM. OF 1ST KIND
036	FCHB2S	FOURIER EXPANSION BY CHEBYSHEV POLYNOM. OF 2ND KIND
037	FCHB2D	FOURIER EXPANSION BY CHEBYSHEV POLYNOM. OF 2ND KIND
038	FCHB3S	FOURIER EXPANSION BY SHIFTED CHEBYSHEV POLYNOMIALS
039	FCHB3D	FOURIER EXPANSION BY SHIFTED CHEBYSHEV POLYNOMIALS
040	FCHBOS	FOURIER EXPANSION ON THE OPEN INTERVAL BY 1ST C.P.
041	FCHBOD	FOURIER EXPANSION ON THE OPEN INTERVAL BY 1ST C.P.
042	VCOS	VALUE OF COSINE SERIES
043	VCOSD	VALUE OF COSINE SERIES
044	VSIN	VALUE OF SINE SERIES
045	VSIND	VALUE OF SINE SERIES
046	VCHB1S	VALUE OF CHEBYSHEV SERIES
047	VCHB1D	VALUE OF CHEBYSHEV SERIES
048	DCHB1S	DIFFERENTIAL COEFFICIENT OF CHEBYSHEV SERIES
049	DCHB1D	DIFFERENTIAL COEFFICIENT OF CHEBYSHEV SERIES
050	ICHB1S	VALUE OF INDEFINITE INTEGRAL BY CHEBYSHEV SERIES
051	ICHB1D	VALUE OF INDEFINITE INTEGRAL BY CHEBYSHEV SERIES
052	VCHB3S	VALUE OF SHIFTED CHEBYSHEV SERIES
053	VCHB3D	VALUE OF SHIFTED CHEBYSHEV SERIES
054	DCHB3S	DIFFERENTIAL COEFFICIENT OF SHIFTED CHEBYSHEV
055	DCHB3D	DIFFERENTIAL COEFFICIENT OF SHIFTED CHEBYSHEV
056	ICHB3S	VALUE OF INDEFINITE INTEGRAL BY SHEFTED CHEBYSHEV
057	ICHB3D	VALUE OF INDEFINITE INTEGRAL BY SHEFTED CHEBYSHEV
058	VCHB2S	VALUE OF SECOND KIND CHEBYSHEV SERIES
059	VCHB2D	VALUE OF SECOND KIND CHEBYSHEV SERIES
060	ICHB2S	VALUE OF INDEFINITE INTEGRAL BY SECOND KIND CHEBYSHEV
061	ICHB2D	VALUE OF INDEFINITE INTEGRAL BY SECOND KIND CHEBYSHEV
062	DRCH1S	DERIVATIVE OF FIRST KIND CHEBYSHEV SERIES
063	DRCH1D	DERIVATIVE OF FIRST KIND CHEBYSHEV SERIES
064	DRCH3S	DERIVATIVE OF SHIFTED CHEBYSHEV SERIES
065	DRCH3D	DERIVATIVE OF SHIFTED CHEBYSHEV SERIES
066	IICH1S	INDEFINITE INTEGRAL OF FIRST KIND CHEBYSHEV SERIES
067	IICH1D	INDEFINITE INTEGRAL OF FIRST KIND CHEBYSHEV SERIES
068	IICH3S	INDEFINITE INTEGRAL OF SHIFTED CHEBYSHEV SERIES
069	IICH3D	INDEFINITE INTEGRAL OF SHIFTED CHEBYSHEV SERIES

FIELD CODE : D01N

FIELD TITLE : NUMERICAL QUADRATURE

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	GASNS	GAUSSIAN QUADRATURE(FINITE INTERVAL)
002	GASND	GAUSSIAN QUADRATURE(FINITE INTERVAL)
003	GSLNS	GAUSSIAN QUADRATURE(SEMI-INFINITE INTERVAL)
004	GSLND	GAUSSIAN QUADRATURE(SEMI-INFINITE INTERVAL)
005	GSHNS	GAUSSIAN QUADRATURE(INFINITE INTERVAL)
006	GSHND	GAUSSIAN QUADRATURE(INFINITE INTERVAL)
007	TGLEGS	TABLE FOR LEGENDRE-GAUSSIAN QUADRATURE(FINITE INT.)
008	TGLEGD	TABLE FOR LEGENDRE-GAUSSIAN QUADRATURE(FINITE INT.)
009	TGLEGQ	TABLE FOR LEGENDRE-GAUSSIAN QUADRATURE(FINITE INT.)
010	TGLAGS	TABLE FOR LAGUERRE-GAUSSIAN QUADRATURE(SEMI-INFINITE)
011	TGLAGD	TABLE FOR LAGUERRE-GAUSSIAN QUADRATURE(SEMI-INFINITE)
012	TGLAGQ	TABLE FOR LAGUERRE-GAUSSIAN QUADRATURE(SEMI-INFINITE)
013	TGHERS	TABLE FOR HERMITE-GAUSSIAN QUADRATURE(INFINITE)
014	TGHERD	TABLE FOR HERMITE-GAUSSIAN QUADRATURE(INFINITE)
015	TGHERQ	TABLE FOR HERMITE-GAUSSIAN QUADRATURE(INFINITE)
016	TGLOB	TABLE FOR LOBATTO-GAUSSIAN QUADRATURE(FINITE)
017	TGLOBD	TABLE FOR LOBATTO-GAUSSIAN QUADRATURE(FINITE)
018	AQNN5S	ADAPTIVE QUADRATURE BY NEWTON-COTES 5 POINT RULE
019	AQNN5D	ADAPTIVE QUADRATURE BY NEWTON-COTES 5 POINT RULE
020	AQNN7S	ADAPTIVE QUADRATURE BY NEWTON-COTES 7 POINT RULE
021	AQNN7D	ADAPTIVE QUADRATURE BY NEWTON-COTES 7 POINT RULE
022	AQNN9S	ADAPTIVE QUADRATURE BY NEWTON-COTES 9 POINT RULE
023	AQNN9D	ADAPTIVE QUADRATURE BY NEWTON-COTES 9 POINT RULE
024	QDAPBS	QUADRATURE BY IMPROVED CLENSHAW-CURTIS RULE
025	QDAPBD	QUADRATURE BY IMPROVED CLENSHAW-CURTIS RULE
026	DEFINS	DOUBLE EXPONENTIAL QUADRATURE-FINITE INTERVAL-
027	DEFIND	DOUBLE EXPONENTIAL QUADRATURE-FINITE INTERVAL-
028	IMTDES	DOUBLE EXPONENTIAL QUADRATURE(IMT)-FINITE INTERVAL-

```

029 IMTDED DOUBLE EXPONENTIAL QUADRATURE<IMT>-FINITE INTERVAL-
030 HINFAS DOUBLE EXPONENTIAL QUADRATURE-SEMI INFINITE-
031 HINFAD DOUBLE EXPONENTIAL QUADRATURE-SEMI INFINITE-
032 HINFAQ DOUBLE EXPONENTIAL QUADRATURE-SEMI INFINITE-
033 HINFES DOUBLE EXPONENTIAL QUADRATURE F(X)=EXP(-X)*G(X)
034 HINFED DOUBLE EXPONENTIAL QUADRATURE F(X)=EXP(-X)*G(X)
035 INFINS DOUBLE EXPONENTIAL QUADRATURE-INFINITE-
036 INFIND DOUBLE EXPONENTIAL QUADRATURE-INFINITE-
037 AQNN5C AUTOMATIC QUADURATURE FOR COMPLEX VALUED FUNCTIONS
038 AQNN5B AUTOMATIC QUADURATURE FOR COMPLEX VALUED FUNCTIONS
039 AQNN7C AUTOMATIC QUADURATURE FOR COMPLEX VALUED FUNCTIONS
040 AQNN7B AUTOMATIC QUADURATURE FOR COMPLEX VALUED FUNCTIONS
041 AQNN9C AUTOMATIC QUADURATURE FOR COMPLEX VALUED FUNCTIONS
042 AQNN9B AUTOMATIC QUADURATURE FOR COMPLEX VALUED FUNCTIONS
043 DEFINC AUTOMATIC QUADURATURE FOR COMPLEX VALUED FUNCTIONS
044 DEFINB AUTOMATIC QUADURATURE FOR COMPLEX VALUED FUNCTIONS
045 QDAPBC AUTOMATIC QUADURATURE FOR COMPLEX VALUED FUNCTIONS
046 QDAPBB AUTOMATIC QUADURATURE FOR COMPLEX VALUED FUNCTIONS
047 HINFAC AUTOMATIC QUADURATURE FOR COMPLEX VALUED FUNCTIONS
048 HINFAB AUTOMATIC QUADURATURE FOR COMPLEX VALUED FUNCTIONS
049 INFINC AUTOMATIC QUADURATURE FOR COMPLEX VALUED FUNCTIONS
050 INFINB AUTOMATIC QUADURATURE FOR COMPLEX VALUED FUNCTIONS
051 AQMDC AUTOMATIC QUADURATURE FOR COMPLEX VALUED FUNCTIONS
052 AQMDB AUTOMATIC QUADURATURE FOR COMPLEX VALUED FUNCTIONS
053 AQNDC AUTOMATIC QUADURATURE FOR COMPLEX VALUED FUNCTIONS
054 AQNDB AUTOMATIC QUADURATURE FOR COMPLEX VALUED FUNCTIONS
055 TRAPZS QUADRATURE BY TRAPEZOIDAL RULE -INFINITE INTERVAL-
056 TRAPZD QUADRATURE BY TRAPEZOIDAL RULE -INFINITE INTERVAL-
057 AQDCCS AUTOMATIC QUADRATURE OF CLOSED TYPE BY CLENSHAW-CURTIS
058 AQDCCD AUTOMATIC QUADRATURE OF CLOSED TYPE BY CLENSHAW-CURTIS
059 AQDCOS AUTOMATIC QUADRATURE OF OPEN TYPE BY CLENSHAW-CURTIS
060 AQDCOD AUTOMATIC QUADRATURE OF OPEN TYPE BY CLENSHAW-CURTIS
061 AQCOSS QUADRATURE OF SEMI-INFINITE OSCILLATORY FUNCTION
062 AQCOSD QUADRATURE OF SEMI-INFINITE OSCILLATORY FUNCTION
063 AQSINS QUADRATURE OF SEMI-INFINITE OSCILLATORY FUNCTION
064 AQSIND QUADRATURE OF SEMI-INFINITE OSCILLATORY FUNCTION
065 ROMBGS ROMBERG QUADRATURE
066 ROMBGD ROMBERG QUADRATURE
067 MQPRRS MULTIPLE QUADRATURE BY PRODUCT RULES
068 MQPRRD MULTIPLE QUADRATURE BY PRODUCT RULES
069 MQNCDS MULTIPLE QUADRATURE FOR DATA INPUT
070 MQNCDD MULTIPLE QUADRATURE FOR DATA INPUT
071 AQNDS MULTIPLE QUADRATURE BY AUTOMATIC METHODS
072 AQNDD MULTIPLE QUADRATURE BY AUTOMATIC METHODS
073 AQ1DS MULTIPLE QUADRATURE BY AUTOMATIC METHODS
074 AQ1DD MULTIPLE QUADRATURE BY AUTOMATIC METHODS
075 AQ2DS MULTIPLE QUADRATURE BY AUTOMATIC METHODS
076 AQ2DD MULTIPLE QUADRATURE BY AUTOMATIC METHODS
077 AQ3DS MULTIPLE QUADRATURE BY AUTOMATIC METHODS
078 AQ3DD MULTIPLE QUADRATURE BY AUTOMATIC METHODS
079 AQMDS AUTOMATIC MULTIPLE QUADRATURE BY CLENSHAW-CURTIS
080 AQMDD AUTOMATIC MULTIPLE QUADRATURE BY CLENSHAW-CURTIS
081 MQFSRS MULTIPLE QUADRATURE BY FULLY SYMMETRIC RULES
082 MQFSRD MULTIPLE QUADRATURE BY FULLY SYMMETRIC RULES

```

```

FIELD CODE : D02N
FIELD TITLE : ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATION

```

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	RK4S	INITIAL VALUE PROB. OF ODE BY THE CLASSICAL RK
002	RK4D	INITIAL VALUE PROB. OF ODE BY THE CLASSICAL RK
003	RK4Q	INITIAL VALUE PROB. OF ODE BY THE CLASSICAL RK
004	RK4C	INITIAL VALUE PROB. OF ODE BY CLASSICAL RK <COMP
005	RK4B	INITIAL VALUE PROB. OF ODE BY CLASSICAL RK <COMP
006	RKF4AS	INITIAL VALUE PROB. OF ODE BY THE RK -FEHLBERG
007	RKF4AD	INITIAL VALUE PROB. OF ODE BY THE RK -FEHLBERG
008	RKM4AS	INITIAL VALUE PROB. OF ODE BY THE RK -MERLUZZI
009	RKM4AD	INITIAL VALUE PROB. OF ODE BY THE RK -MERLUZZI
010	ODEBSS	INITIAL VALUE PROB. OF ODE BY RAT. EXTRAPOL.
011	ODEBSD	INITIAL VALUE PROB. OF ODE BY RAT. EXTRAPOL.

FIELD CODE : B01N
FIELD TITLE : TRIGONOMETRIC FUNCTION

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	SINHP	SINE FUNCTION FOR THE ARGUMENT $X \cdot \pi/2$
002	DSINHP	SINE FUNCTION FOR THE ARGUMENT $X \cdot \pi/2$
003	QSINHP	SINE FUNCTION FOR THE ARGUMENT $X \cdot \pi/2$
004	COSHP	COSINE FUNCTION FOR THE ARGUMENT $X \cdot \pi/2$
005	DCOSHP	COSINE FUNCTION FOR THE ARGUMENT $X \cdot \pi/2$
006	QCOSHP	COSINE FUNCTION FOR THE ARGUMENT $X \cdot \pi/2$
007	TANHP	TANGENT FUNCTION FOR THE ARGUMENT $X \cdot \pi/2$
008	DTANHP	TANGENT FUNCTION FOR THE ARGUMENT $X \cdot \pi/2$
009	QTANHP	TANGENT FUNCTION FOR THE ARGUMENT $X \cdot \pi/2$
010	COTHP	COTANGENT FUNCTION FOR THE ARGUMENT $X \cdot \pi/2$
011	DCOTHP	COTANGENT FUNCTION FOR THE ARGUMENT $X \cdot \pi/2$
012	QCOTHP	COTANGENT FUNCTION FOR THE ARGUMENT $X \cdot \pi/2$

FIELD CODE : C03N
FIELD TITLE : SPECIAL FUNCTION

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	ASINH	INVERSE HYPERBOLIC SINE FUNCTION
002	DASINH	INVERSE HYPERBOLIC SINE FUNCTION
003	QASINH	INVERSE HYPERBOLIC SINE FUNCTION
004	ACOSH	INVERSE HYPERBOLIC COSINE FUNCTION
005	DACOSH	INVERSE HYPERBOLIC COSINE FUNCTION
006	QACOSH	INVERSE HYPERBOLIC COSINE FUNCTION
007	ATANH	INVERSE HYPERBOLIC TANGENT FUNCTION
008	DATANH	INVERSE HYPERBOLIC TANGENT FUNCTION
009	QATANH	INVERSE HYPERBOLIC TANGENT FUNCTION
010	ALOG1	NATURAL LOGARITHM FOR THE ARGUMENT $1+x$
011	DLOG1	NATURAL LOGARITHM FOR THE ARGUMENT $1+x$
012	QLOG1	NATURAL LOGARITHM FOR THE ARGUMENT $1+x$
013	EXP1	EXPONENTIAL FUNCTION MINUS 1 ... $\exp(x)-1.0$
014	DEXP1	EXPONENTIAL FUNCTION MINUS 1 ... $\exp(x)-1.0$
015	QEXP1	EXPONENTIAL FUNCTION MINUS 1 ... $\exp(x)-1.0$
016	FASTPI	HIGH SPEED,HIGH PRECISION CALCULATION OF π
017	FASTE	HIGH SPEED,HIGH PRECISION CALCULATION OF e
018	ALANGV	LANGEVIN FUNCTION
019	DLANGV	LANGEVIN FUNCTION
020	CQABS1	1-NORM OF A COMPLEX NUMBER $ z = x+iy $
021	CDABS1	1-NORM OF A COMPLEX NUMBER $ z = x+iy $
022	CABS1	1-NORM OF A COMPLEX NUMBER $ z = x+iy $
023	FCTRL	FACTORIAL FUNCTION $N!$
024	DFCTRL	FACTORIAL FUNCTION $N!$
025	QFCTRL	FACTORIAL FUNCTION $N!$
026	FFCTR	DOUBLE FACTORIAL FUNCTION $N!!$
027	DFFCTR	DOUBLE FACTORIAL FUNCTION $N!!$
028	QFFCTR	DOUBLE FACTORIAL FUNCTION $N!!$
029	COMB	BINOMIAL COEFFICIENT
030	DCOMB	BINOMIAL COEFFICIENT
031	ZETNO	RIEMANN ZETA FUNCTION
032	DZETNO	RIEMANN ZETA FUNCTION
033	QZETNO	RIEMANN ZETA FUNCTION
034	BERNO	BERNOULLI NUMBERS
035	DBERNO	BERNOULLI NUMBERS
036	QBERNO	BERNOULLI NUMBERS
037	GAMCO	COEFFICIENTS OF TAYLOR SERIES FOR $1/\Gamma(x)$
038	DGAMCO	COEFFICIENTS OF TAYLOR SERIES FOR $1/\Gamma(x)$
039	QGAMCO	COEFFICIENTS OF TAYLOR SERIES FOR $1/\Gamma(x)$
040	RGAMA	RECIPROCAL OF GAMMA FUNCTION
041	DRGAMA	RECIPROCAL OF GAMMA FUNCTION
042	CDGAMA	GAMMA FUNCTION FOR COMPLEX ARGUMENTS
043	CGAMMA	GAMMA FUNCTION FOR COMPLEX ARGUMENTS
044	DIGAM	DIGAMMA FUNCTION
045	DDIGAM	DIGAMMA FUNCTION
046	EI	EXPONENTIAL INTEGRAL
047	DEI	EXPONENTIAL INTEGRAL
048	SI	SINE INTEGRAL
049	DSI	SINE INTEGRAL
050	CI	COSINE INTEGRAL

051	DCI	COSINE INTEGRAL
052	FRESS	FRESNEL SINE INTEGRAL
053	DFRESS	FRESNEL SINE INTEGRAL
054	FRESC	FRESNEL COSINE INTEGRAL
055	DFRESC	FRESNEL COSINE INTEGRAL
056	CELI1	COMPLETE ELLIPTIC INTEGRAL OF 1ST KIND
057	DCELI1	COMPLETE ELLIPTIC INTEGRAL OF 1ST KIND
058	CELI2	COMPLETE ELLIPTIC INTEGRAL OF 2ND KIND
059	DCELI2	COMPLETE ELLIPTIC INTEGRAL OF 2ND KIND
060	ICEILS	INCOMPLETE ELLIPTIC INTEGRAL OF 1ST KIND AND 2ND KIND
061	ICEILD	INCOMPLETE ELLIPTIC INTEGRAL OF 1ST KIND AND 2ND KIND
062	PN	LEGENDRE POLYNOMIAL
063	DPN	LEGENDRE POLYNOMIAL
064	PNM	ADJOINT LEGENDRE POLYNOMIAL
065	DPNM	ADJOINT LEGENDRE POLYNOMIAL
066	QNAME	THE NOME OF ELLIPTIC THETA FUNCTIONS
067	DQNAME	THE NOME OF ELLIPTIC THETA FUNCTIONS
068	CND	CUMULATIVE NORMAL DISTRIBUTION FUNCTION
069	DCND	CUMULATIVE NORMAL DISTRIBUTION FUNCTION
070	CNDC	CUMULATIVE NORMAL DISTRIBUTION FUNCTION (COMPLEMENT)
071	DCNDC	CUMULATIVE NORMAL DISTRIBUTION FUNCTION (COMPLEMENT)
072	ACND	INVERSE CUMULATIVE NORMAL DISTRIBUTION FUNCTION
073	DACND	INVERSE CUMULATIVE NORMAL DISTRIBUTION FUNCTION
074	ACNDC	INVERSE CUMULATIVE NORMAL DISTRIB. FUNC. (COMPLEMENT)
075	DACNDC	INVERSE CUMULATIVE NORMAL DISTRIB. FUNC. (COMPLEMENT)
076	AERF	INVERSE ERROR FUNCTION
077	DAERF	INVERSE ERROR FUNCTION
078	AERFC	INVERSE ERROR FUNCTION (COMPLEMENT)
079	DAERFC	INVERSE ERROR FUNCTION (COMPLEMENT)
080	JACELS	JACOBIAN ELLIPTIC FUNCTION
081	JACELD	JACOBIAN ELLIPTIC FUNCTION

FIELD CODE : C06N
FIELD TITLE : BESSEL FUNCTION

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	BJ0	BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND,ORDER 0
002	DJ0	BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND,ORDER 0
003	BJ1	BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND,ORDER 1
004	DJ1	BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND,ORDER 1
005	BJN	BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND,ORDER N
006	DJN	BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND,ORDER N
007	BY0	BESSEL FUNCTION OF 2ND KIND,ORDER 0
008	DY0	BESSEL FUNCTION OF 2ND KIND,ORDER 0
009	BY1	BESSEL FUNCTION OF 2ND KIND,ORDER 1
010	DY1	BESSEL FUNCTION OF 2ND KIND,ORDER 1
011	BYN	BESSEL FUNCTION OF 2ND KIND,ORDER N
012	DYN	BESSEL FUNCTION OF 2ND KIND,ORDER N
013	BIO	MODIFIED BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND,ORDER 0
014	DIO	MODIFIED BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND,ORDER 0
015	BI1	MODIFIED BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND,ORDER 1
016	DI1	MODIFIED BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND,ORDER 1
017	BIN	MODIFIED BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND,ORDER N
018	DIN	MODIFIED BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND,ORDER N
019	BK0	MODIFIED BESSEL FUNCTION OF 2ND KIND,ORDER 0
020	DK0	MODIFIED BESSEL FUNCTION OF 2ND KIND,ORDER 0
021	BK1	MODIFIED BESSEL FUNCTION OF 2ND KIND,ORDER 1
022	DK1	MODIFIED BESSEL FUNCTION OF 2ND KIND,ORDER 1
023	BKN	MODIFIED BESSEL FUNCTION OF 2ND KIND,ORDER N
024	DKN	MODIFIED BESSEL FUNCTION OF 2ND KIND,ORDER N
025	SJ0	SPHERICAL BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND,ORDER 0
026	DSJ0	SPHERICAL BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND,ORDER 0
027	SJ1	SPHERICAL BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND,ORDER 1
028	DSJ1	SPHERICAL BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND,ORDER 1
029	SJN	SPHERICAL BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND,ORDER N
030	DSY1	SPHERICAL BESSEL FUNCTION OF 2ND KIND,ORDER 1
031	SYN	SPHERICAL BESSEL FUNCTION OF 2ND KIND,ORDER N
032	DSYN	SPHERICAL BESSEL FUNCTION OF 2ND KIND,ORDER N
033	SIO	MODIFIED SPHERICAL BESSEL FUNC. OF 1ST KIND,ORDER 0
034	DSIO	MODIFIED SPHERICAL BESSEL FUNC. OF 1ST KIND,ORDER 0
035	SI1	MODIFIED SPHERICAL BESSEL FUNC. OF 1ST KIND,ORDER 1

036	DSI1	MODIFIED SPHERICAL BESSEL FUNC. OF 1ST KIND,ORDER 1
037	SIK	MODIFIED SPHERICAL BESSEL FUNC. OF 1ST KIND,ORDER N
038	DSIK	MODIFIED SPHERICAL BESSEL FUNC. OF 1ST KIND,ORDER N
039	SK0	MODIFIED SPHERICAL BESSEL FUNC. OF 2ND KIND,ORDER 0
040	DSK0	MODIFIED SPHERICAL BESSEL FUNC. OF 2ND KIND,ORDER 0
041	SK1	MODIFIED SPHERICAL BESSEL FUNC. OF 2ND KIND,ORDER 1
042	DSK1	MODIFIED SPHERICAL BESSEL FUNC. OF 2ND KIND,ORDER 1
043	SKN	MODIFIED SPHERICAL BESSEL FUNC. OF 2ND KIND,ORDER N
044	DSKN	MODIFIED SPHERICAL BESSEL FUNC. OF 2ND KIND,ORDER N
045	BJOIO	INTEGRAL OF BJO(X)
046	DJOIO	INTEGRAL OF BJO(X)
047	BJOI1	INTEGRAL OF BJO(X)/X
048	DJOI1	INTEGRAL OF BJO(X)/X
049	BYOIO	INTEGRAL OF BYO(X)
050	DYOIO	INTEGRAL OF BYO(X)
051	BYOI1	INTEGRAL OF BYO(X)/X
052	DYOI1	INTEGRAL OF BYO(X)/X
053	BIOIO	INTEGRAL OF BIO(X)
054	DIOIO	INTEGRAL OF BIO(X)
055	BIOI1	INTEGRAL OF (BIO(X)-1)/X
056	DIOI1	INTEGRAL OF (BIO(X)-1)/X
057	BKOIO	INTEGRAL OF BKO(X)
058	DKOIO	INTEGRAL OF BKO(X)
059	BKOI1	INTEGRAL OF BKO(X)/X
060	DKOI1	INTEGRAL OF BKO(X)/X
061	BJF	BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND OF FRACTIONAL ORDER
062	DJF	BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND OF FRACTIONAL ORDER
063	BIF	MODIFIED BESSEL FUNC. OF 1ST KIND OF FRACTIONAL ORDER
064	DIF	MODIFIED BESSEL FUNC. OF 1ST KIND OF FRACTIONAL ORDER
065	BESJNC	BESSEL FUNCTION WITH COMPLEX ARGUMENT OF 1ST KIND
066	BESJNB	BESSEL FUNCTION WITH COMPLEX ARGUMENT OF 1ST KIND
067	BESINC	MODIFIED BESSEL FUNC. WITH COMPLEX ARG. OF 1ST KIND
068	BESINB	MODIFIED BESSEL FUNC. WITH COMPLEX ARG. OF 1ST KIND
069	AIP	AIRY FUNCTIONS'S DERIVATIVE
070	DAIP	AIRY FUNCTIONS'S DERIVATIVE
071	AI	AIRY FUNCTIONS
072	DAI	AIRY FUNCTIONS
073	BI	AIRY FUNCTIONS
074	DBI	AIRY FUNCTIONS
075	BIP	AIRY FUNCTIONS' DERIVATIVES
076	DBIP	AIRY FUNCTIONS' DERIVATIVES
077	DSJN	SPHERICAL BESSEL FUNCTION OF 1ST KIND,ORDER N
078	SYO	SPHERICAL BESSEL FUNCTION OF 2ND KIND,ORDER 0
079	DSYO	SPHERICAL BESSEL FUNCTION OF 2ND KIND,ORDER 0
080	SY1	SPHERICAL BESSEL FUNCTION OF 2ND KIND,ORDER 1

FIELD CODE : H01N
FIELD TITLE : LINEAR PROGRAMMING

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	LIPS	LINEAR PROGRAMMING BY CRISS-CROSS METHOD
002	LIPD	LINEAR PROGRAMMING BY CRISS-CROSS METHOD
003	SIMPLX	LINEAR PROGRAMMING BY SIMPLEX METHOD
004	SIMPLD	LINEAR PROGRAMMING BY SIMPLEX METHOD

FIELD CODE : A01N
FIELD TITLE : ARITHMETIC OPERATION

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	ROUND	ROUND OFF FROM DOUBLE PRECISION VALUE TO SINGLE
002	DROUND	ROUND OFF FROM QUADRUPLE PRECISION VALUE TO DOUBLE

FIELD CODE : M02N
FIELD TITLE : SORTING

NO.	PROGRAM ID	PROGRAM TITLE
001	IBITCT	BIT COUNT OF 4 BYTE DATA
002	IBITRV	BIT REVERSAL OF 4 BYTE DATA
003	SORTCK	INTERNAL SORTING OF SCALAR OR VECTOR DATA

004	SORTDK	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
005	SORTIK	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
006	SORTSK	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
007	SORTCC	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
008	SORTDC	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
009	SORTIC	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
010	SORTSC	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
011	SORTCD	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
012	SORTDD	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
013	SORTID	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
014	SORTSD	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
015	SORTCI	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
016	SORTDI	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
017	SORTII	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
018	SORTSI	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
019	SORTCQ	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
020	SORTDQ	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
021	SORTIQ	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
022	SORTSQ	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
023	SORTCS	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
024	SORTDS	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
025	SORTIS	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
026	SORTSS	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
027	SRTVCI	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
028	SRTVDI	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
029	SRTVII	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
030	SRTVSI	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
031	SRTVCQ	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
032	SRTVDQ	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
033	SRTVIQ	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
034	SRTVSQ	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
035	SRTVCC	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
036	SRTVDC	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
037	SRTVIC	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
038	SRTVSC	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
039	SRTVCD	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
040	SRTVDD	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
041	SRTVID	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
042	SRTVSD	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
043	SRTVCS	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
044	SRTVDS	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
045	SRTVIS	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
046	SRTVSS	INTERNAL	SORTING	OF	SCALAR	OR	VECTOR	DATA
047	MINS	SET	OPERATION	PACKAGE				
048	MINI	SET	OPERATION	PACKAGE				
049	MIND	SET	OPERATION	PACKAGE				
050	MAXS	SET	OPERATION	PACKAGE				
051	MAXI	SET	OPERATION	PACKAGE				
052	MAXD	SET	OPERATION	PACKAGE				
053	MINCOS	SET	OPERATION	PACKAGE				
054	MINCOI	SET	OPERATION	PACKAGE				
055	MINCOD	SET	OPERATION	PACKAGE				
056	MINSOS	SET	OPERATION	PACKAGE				
057	MINSOI	SET	OPERATION	PACKAGE				
058	MINSOD	SET	OPERATION	PACKAGE				
059	MAXCOS	SET	OPERATION	PACKAGE				
060	MAXCOI	SET	OPERATION	PACKAGE				
061	MAXCOD	SET	OPERATION	PACKAGE				
062	SUMSOS	SET	OPERATION	PACKAGE				
063	SUMSOI	SET	OPERATION	PACKAGE				
064	SUMSOD	SET	OPERATION	PACKAGE				
065	SUBSOS	SET	OPERATION	PACKAGE				
066	SUBSOI	SET	OPERATION	PACKAGE				
067	SUBSOD	SET	OPERATION	PACKAGE				
068	PRODUS	SET	OPERATION	PACKAGE				
069	PRODUI	SET	OPERATION	PACKAGE				
070	PRODUD	SET	OPERATION	PACKAGE				

**** TOTAL NUMBER OF UNIQUE PROGRAMS ****
603

**** SORTED UNIQUE PROGRAMS ****

ACND	ACNDC	ACOSH	AERF	AERFC	AI	AIP
ALANGV	ALOG1	AQCOSD	AQCOSS	AQDCCD	AQDCCS	AQDCOD
AQDCOS	AQMDB	AQMDC	AQMDD	AQMDS	AQNDB	AQNDC
AQNDD	AQND5	AQNN5B	AQNN5C	AQNN5D	AQNN5S	AQNN7B
AQNN7C	AQNN7D	AQNN7S	AQNN9B	AQNN9C	AQNN9D	AQNN9S
AQSIND	AQSINS	AQ1DD	AQ1DS	AQ2DD	AQ2DS	AQ3DD
AQ3DS	ASINH	ATANH	BERNO	BESINB	BESINC	BESJNB
BESJNC	BI	BIF	BIN	BIP	BITREV	BITRVB
BITRVD	BIO	BIOIO	BIOI1	BI1	BJF	BJN
BJO	BJOIO	BJOI1	BJ1	BKN	BKO	BKOIO
BKOI1	BK1	BRENTD	BRENTS	BROYDD	BROYDS	BUNCBD
BUNCBS	BUNCHD	BUNCHS	BYN	BYO	BYOIO	BYOI1
BY1	CABS1	CDABS1	CDGAMA	CELI1	CELI2	CFS1A
CFS2A	CGAMMA	CGHTCD	CGHTCS	CHLBDD	CHLBDDQ	CHLBDS
CHLVBD	CHLVBS	CHOLCD	CHOLCQ	CHOLCS	CHOLFB	CHOLFC
CHOLFD	CHOLFQ	CHOLFS	CHOLSD	CHOLSK	CI	CND
CNDC	COMB	COSHP	COTHP	CQABS1	CUBICD	CUBICQ
CUBICS	DACND	DACNDC	DACOSH	DAERF	DAERFC	DAI
DAIP	DASINH	DATANH	DBERNO	DBI	DBIP	DCELI1
DCELI2	DCHB1D	DCHB1S	DCHB3D	DCHB3S	DCI	DCND
DCNDC	DCOMB	DCOMD1	DCOSHP	DCOTHP	DDIGAM	DEFINB
DEFINC	DEFIND	DEFINS	DEI	DEXP1	DFCTRL	DFFCTR
DFRESC	DFRESS	DGAMCO	DIF	DIGAM	DIN	DIO
DIOIO	DIOI1	DI1	DJF	DJN	DJO	DJOIO
DJOI1	DJ1	DKN	DKO	DKOIO	DKOI1	DK1
DLANGV	DLOG1	DPN	DPNM	DQNONE	DRCH1D	DRCH1S
DRCH3D	DRCH3S	DRGAMA	DROUND	DSCI1A	DSCI1D	DSCI2A
DSCI2D	DSCI3A	DSCI3D	DSCI4A	DSCI4D	DSCI5D	DSCI6D
DSCI7D	DSFI1A	DSFI1D	DSFI2A	DSFI2D	DSFI3A	DSFI3D
DSFI4A	DSFI4D	DSFI5D	DSFI6D	DSFI7D	DSI	DSIK
DSINH	DSIO	DSI1	DSJN	DSJO	DSJ1	DSKN
DSK0	DSK1	DSYN	DSYO	DSY1	DTANHP	DYN
DYO	DYOIO	DYOI1	DY1	DZETNO	EI	EXP1
FASTEE	FASTPI	FCHB0D	FCHB0S	FCHB1D	FCHB1S	FCHB2D
FCHB2S	FCHB3D	FCHB3S	FCOSCD	FCOSCS	FCOSMD	FCOSMS
FCOSOD	FCOSOS	FCOSTD	FCOSTS	FCTRL	FFCTR	FFTB
FFTC	FFTD	FFTR	FFTRD	FFTRI	FFTRID	FFTS
FFT2DC	FFT2DR	FFT3DC	FFT3DR	FLPOWD	FLPOWS	FRESC
FRESS	FSINMD	FSINMS	FSINOD	FSINOS	FSINTD	FSINTS
FT235C	FT235R	GAMCO	GASND	GASNS	GAUELB	GAUELC
GAUELD	GAUELQ	GAUELS	GHBSVD	GHBSVS	GHQRID	GHQRIS
GHQRUD	GHQRUS	GHQRVD	GHQRVS	GINVD	GINVS	GJENBD
GJENBS	GJMNKD	GJMNKS	GSHND	GSHNS	GSHNS	GSLND
GSLNS	GSORSO	HEQRVS	HEQRVD	HERM31	HERM31	HERM32
HERM51	HERM52	HINFAB	HINFAC	HINFAD	HINFQA	HINFAS
HINFED	HINFES	HOBSVD	HOBSVS	HOQRUD	HOQRUS	HOQRVD
HOQRVS	HQRIID	HQRIIS	IBITCT	IBITRV	ICEILD	ICEILS
ICHB1D	ICHB1S	ICHB2D	ICHB2S	ICHB3D	ICHB3S	IICH1D
IICH1S	IICH3D	IICH3S	IMTDED	IMTDES	INFINB	INFINC
INFIND	INFINS	JACELD	JACELS	JACOB0D	JACOBS	JENNB0D
JENNBS	JENNFD	JENNFS	LAPLBS	LAPLCS	LAPLSS	LAPLVS
LEQBD0B	LEQBDC	LEQBDD	LEQBDDQ	LEQBDS	LEQLSD	LEQLSS
LEQLUB	LEQLUC	LEQLUD	LEQLUQ	LEQLUS	LIPD	LIPS
LSAICD	LSAICS	LSANLD	LSANLS	LSMND	LSMNS	MAXCOD
MAXCOI	MAXCOS	MAXD	MAXI	MAXS	MCHLBD	MCHLBQ
MCHLBS	MCHLCD	MCHLCQ	MCHLCS	MCHLFD	MCHLFQ	MCHLFS
MDET0B	MDETC	MDETD	MDETQ	MDETS	MINCOD	MINCOI
MINCOS	MIND	MINI	MINS	MINSOD	MINSOI	MINSOS
MINSX0	MINXSX	MINVB	MINVC	MINVD	MINVDP	MINVQ
MINVQP	MINVS	MINVSP	MNMBSD	MNMBSSQ	MNMBSS	MNORMB
MNORMC	MNORMD	MNORMQ	MNORMS	MNRMBB	MNRMBC	MNRMBD
MNRMBQ	MNRMB5	MNRSPD	MNRSPS	MQFSRD	MQFSRS	MQNCDD
MQNCDS	MQPRRD	MQPRRS	NGHOUD	NGHOUS	NGJEND	NGJENS
NSHOUD	NSHOUS	NSJEND	NSJENS	ODEBSD	ODEBSS	PN
PNM	PRCGFD	PRCGFS	PRCGSD	PRCGSS	PRODUD	PRODUI
PRODUS	QACOSH	QASINH	QATANH	QBERNO	QCOSHP	QCOTHP
QDAPBB	QDAPBC	QDAPBD	QDAPBS	QEXP1	QFCTRL	QFFCTR
QGAMCO	QLOG1	QNONE	QSINH	QATANHP	QUADR0D	QUADRQ
QUADR0S	QUARTD	QUARTQ	QUARTS	QZETNO	RGAMA	RHBSVD
RHBSVS	RHQRVD	RHQRVS	RKF4AD	RKF4AS	RKM4AD	RKM4AS
RK4B	RK4C	RK4D	RK4Q	RK4S	ROMBGD	ROMBGS

ROUND	SFC1A	SFS1A	SI	SIK	SIMPLD	SIMPLX
SINHP	SIO	SI1	SJN	SJO	SJ1	SKN
SKO	SK1	SORTCC	SORTCD	SORTCI	SORTCK	SORTCQ
SORTCS	SORTDC	SORTDD	SORTDI	SORTDK	SORTDQ	SORTDS
SORTIC	SORTID	SORTII	SORTIK	SORTIQ	SORTIS	SORTSC
SORTSD	SORTSI	SORTSK	SORTSQ	SORTSS	SRTVCC	SRTVCD
SRTVCI	SRTVCQ	SRTVCS	SRTVDC	SRTVDD	SRTVDI	SRTVDQ
SRTVDS	SRTVIC	SRTVID	SRTVII	SRTVIQ	SRTVIS	SRTVSC
SRTVSD	SRTVSI	SRTVSQ	SRTVSS	SUBSOD	SUBSOI	SUBSOS
SUMSOD	SUMSOI	SUMSOS	SVDD	SVDS	SYN	SYO
SY1	TANHP	TDSPCD	TDSPCS	TETPCK	TGHERD	TGHERQ
TGHERS	TGLAGD	TGLAGQ	TGLAGS	TGLEGD	TGLEGQ	TGLEGS
TGLOBD	TGLOBS	TRAPZD	TRAPZS	TRDSPD	TRDSPS	TRIDGD
TRIDGS	TRIGQD	TRIGQP	TRIPCK	VCHB1D	VCHB1S	VCHB2D
VCHB2S	VCHB3D	VCHB3S	VCOSD	VCOS	VSIND	VSINS
ZETNO						

IMS COMPUTER CENTER: LAST UPDATE = 83-03-02

5.2 講習会・プログラム相談

5.2.1 講習会開催

MTMを中心にセンター活用法についての講習会

昭和58年1月27日

5.2.2 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。

5.3 研究会・学会報告

5.3.1 第5回情報化学討論会

昭和57年11月24～25日 豊橋

○SYSOUT Manager とMT Manager — 科学計算とデータベースを結ぶツール —

●発表者 柏木 浩，西本 史雄

（内 容） 科学計算における多量の出力データを処理し管理するためのソフトウェアについて，データベースとの関連に言及しながら，このようなツールの重要性を強調した。

5.3.2 第4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57年11月26日(金) 東北大学大型計算機センター

○分子研電子計算機センターにおけるカラーグラフィックシステムと適用事例

●発表者 伊奈 諭, 柏木 浩

(内 容) カラーグラフィックシステムとCANVASの概要を紹介し、さらにそれらを使って行った分子科学分野での適用例とその手法について述べた。

5.3.3 データベースとスーパーコンピュータに関する研究講演会

昭和58年3月7日 東北大学大型計算機センター

○分子科学におけるスーパーコンピュータへの期待

●発表者 柏木 浩

(内 容) 分子科学における大規模計算の概要の紹介、新しく開発されつつあるスーパーコンピュータの機能の紹介を行い、分子科学の将来においてスーパーコンピュータはどのような役割をはたし得るか予測を行った。

5.3.4 スーパーコンピュータと数値シミュレーション・シンポジウム

昭和58年3月17～18日 東京大学大型計算機センター

○分子科学における計算スキームとスーパーコンピュータへの期待

●発表者 柏木 浩

(内 容) 分子科学における計算スキームの概容を紹介し、近い将来のスーパーコンピュータの満すべき条件を指摘した。

5.3.5 計算スキーム／アルゴリズム・ワークショップ

昭和58年3月23～24日 工業技術院筑波研究センター

○分子科学における計算スキームとスーパーコンピュータへの期待

●発表者 柏木 浩

(内 容) このシンポジウムは、通産省の大型プロジェクト「科学技術用高速計算システム」の並列処理ワーキンググループ等の主催で開かれた。分子科学における計算スキームと大規模計算の重要性を示し、将来のスーパーコンピュータの満すべき条件を指摘した。

5.3.6 第1回技術研究会

昭和58年3月17日(木), 18日(金) 高エネルギー物理学研究所

○分子研における研究室端末システムの紹介

●発表者 西本 史雄

(内 容) 分子研における研究室端末システムの概要を紹介し, 特にパーソナルコンピュータのT S S端末としての新しい活用方法について述べた。

6. 昭和57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

利用分野	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	121	319	6,638	5,055	3,988	1,920,900	1,515,448
	協力研究	37	37	1,287	1,087	906	413,060	344,405
	所内	31	92	1,394	1,394	958	529,720	364,043
		アイドル ^②	13	53	2,535	2,535	1,870	710,587
生理学	施設利用	3	8	29	24	12	9,120	4,387
基礎生物学	施設利用	3	10	30	24	8	9,120	2,889
	協力研究	1	1	5	4	0	1,520	0
	所内	2	2	20	18	0	6,840	0
合計		211	522	11,938	10,141	7,742	3,853,580	2,941,759

② ① アイドルとはコンピュータの空き時間を利用して実行されるバックグラウンドジョブ専用の利用区分であり、コンピュータの有効利用のために所内でのみ利用可能とした。

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

6.2 システム稼働状況

表 6.2.1 M-200H×2 システム稼働状況

年 月	稼 動 時 間		保 守 時 間	システム障害
	グ ロー バ ル	ロ ー カ ル		
57 / 4	554 : 37	431 : 37	46 : 20	2 : 03
5	486 : 00	339 : 00	18 : 00	0 : 00
6	474 : 30	348 : 00	18 : 00	0 : 00
7	555 : 30	468 : 00	18 : 00	0 : 00
8	458 : 30	377 : 30	14 : 30	0 : 12
9	445 : 00	341 : 30	18 : 00	0 : 00
10	459 : 00	377 : 00	20 : 00	0 : 26
11	516 : 00	408 : 00	20 : 00	0 : 00
12	477 : 00	405 : 00	20 : 00	0 : 00
58 / 1	503 : 00	422 : 00	20 : 00	0 : 00
2	543 : 00	490 : 00	18 : 00	10 : 30
3	568 : 00	560 : 00	20 : 00	1 : 00

6.3 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 6.3.1，図 6.3.1 に示す。

6.4 C P U 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 6.4.1，図 6.4.1 に示す。

6.5 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 6.5.1 に示す。

6.6 ジョブ処理状況の推移

当センターはサービス開始以来第 6 年度を迎えている。この間に無人運転システムによる利用者のニーズに応じた運転時間の延長，M-180×2 から M-200 H×2 への段階的レベルアップ，LCMP システムの実現などにより表 6.6.1 のようにジョブ処理状況の急速な拡大を実現してきた。

表 6.6.1 ジョブ処理状況の推移

	ジョブ処理件数	C P U 時間	シ ス テ ム
53 年度（3 ケ月）	41, 521 件	509 H	M-180×2
54 年度	155, 980	2, 405	M-180×2
55 年度	183, 840	5, 405	M-180, M-200H 独立システム
56 年度	214, 847	6, 320	M-180+M-200 H LCMP
57 年度	239, 771	8, 205	M-200 H×2 LCMP

但し，CPU 時間は M-200 H の処理速度を基準としている。

（M-200 H：M-180 = 2.7：1 として換算）

表6.3.1 システムジョブ件数

***** システムジョブ *****												
< システムジョブ >												
(ユニ)	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(I)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(TOTAL)
04	2,984	1,380	1,460	289	105	236	5	11,120	0	868	18	18,465
05	2,440	1,449	1,326	203	61	383	0	9,482	0	721	0	16,065
06	4,243	2,330	1,785	263	112	348	0	13,140	0	453	0	22,674
07	4,038	1,599	1,467	237	98	316	0	11,402	1	618	0	19,776
08	3,754	3,012	1,436	221	117	497	0	11,168	0	779	0	20,984
09	3,703	2,598	1,459	167	85	536	0	11,271	23	926	10	20,778
10	3,104	1,803	1,232	256	108	609	0	9,335	15	491	1	16,954
11	3,423	2,201	1,548	246	56	558	0	10,977	38	403	11	19,461
12	3,165	2,176	1,258	287	52	549	0	11,072	76	425	2	19,062
01	3,715	2,420	1,077	269	67	488	0	10,237	30	425	22	18,750
02	4,915	2,395	1,259	258	201	525	1	11,848	15	525	8	21,950
03	4,910	2,643	1,443	296	226	514	0	14,192	66	548	14	24,852
(TOTAL)	44,394	26,006	16,750	2,992	1,288	5,559	6	135,244	264	7,182	86	239,771

表6.4.1 システムCPU時間

***** システムCPU *****												
< システムCPU >												
(ユニ)	(A)	(B)	(C)	(D)	(E)	(I)	(S)	(T)	(X)	(Y)	(Z)	(TOTAL)
04	10:35:10	39:34:44	268:43:44	146:48:58	85:00:29	79:25:46	00:18:18	21:38:07	00:00:00	03:39:53	04:50:35	660:35:44
05	06:50:12	41:23:26	212:56:06	91:27:31	54:23:49	149:32:02	00:00:00	19:46:55	00:00:00	05:52:46	00:00:00	582:12:47
06	15:50:36	65:41:25	313:08:45	100:23:43	88:10:16	109:06:11	00:00:00	31:22:05	00:00:00	04:49:51	00:00:00	728:32:52
07	12:57:10	51:32:39	238:55:28	110:48:23	77:19:45	128:56:49	00:00:00	28:17:06	00:00:00	03:13:02	00:00:00	652:00:22
08	12:42:55	71:04:40	207:55:36	99:28:26	82:23:17	82:58:32	00:00:00	27:55:37	00:00:00	03:36:58	00:00:00	588:06:01
09	14:09:24	65:04:38	240:18:05	66:14:58	67:17:49	85:01:16	00:00:00	28:15:13	02:59:45	07:24:35	00:00:50	576:46:33
10	09:17:47	45:56:07	185:55:23	125:39:14	94:55:47	162:47:39	00:00:00	20:32:12	00:18:47	02:43:32	00:00:49	648:03:17
11	11:12:36	48:28:42	239:17:10	98:35:17	50:29:22	199:33:20	00:00:00	23:36:58	00:22:25	01:19:57	11:12:35	684:08:02
12	09:37:27	63:28:26	200:58:39	166:09:16	62:21:01	150:03:13	00:00:00	23:01:28	01:18:38	10:35:41	00:01:48	687:35:37
01	11:54:22	52:16:47	164:47:14	145:00:08	74:08:38	203:23:01	00:00:00	21:34:40	00:33:39	01:16:15	00:22:05	675:16:49
02	14:29:56	58:48:22	196:00:44	134:36:53	165:11:05	200:02:46	00:00:00	27:52:43	00:12:06	01:03:44	00:09:54	798:30:13
03	14:58:43	69:14:24	264:33:54	110:16:49	212:41:36	207:11:57	00:00:00	33:59:56	04:02:56	05:29:35	00:04:28	922:14:18
(TOTAL)	144:16:18	672:32:20	2733:30:48	1395:29:36	1114:22:54	1758:02:32	00:18:18	307:52:40	09:48:16	51:07:49	16:43:04	8204:04:35

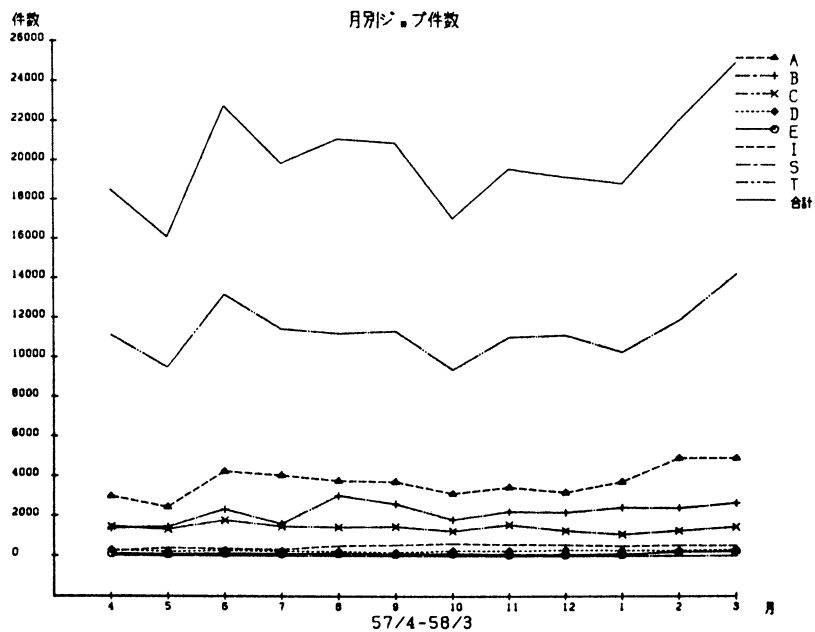


図 6.3.1 システムジョブ件数

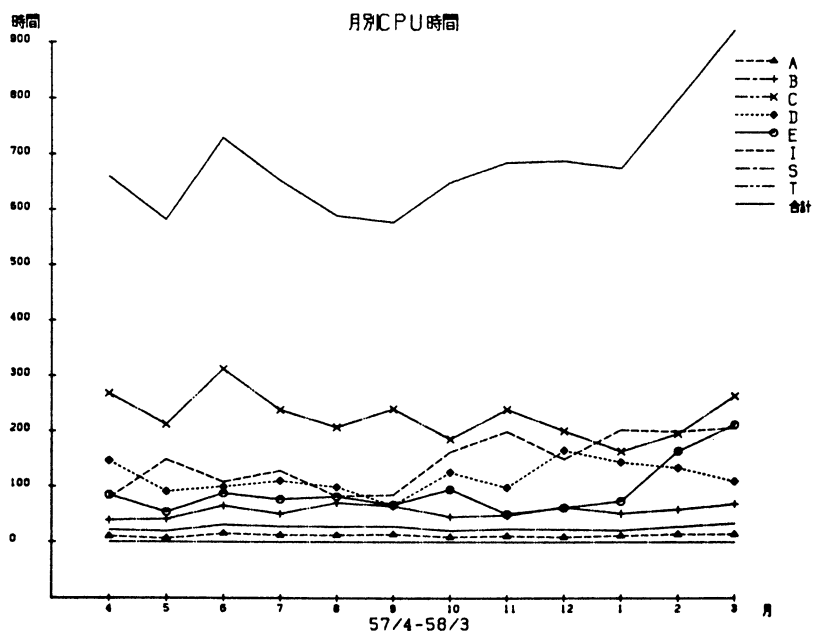


図 6.4.1 システム CPU 時間

表 6. 5. 1 無人運転システムの稼動状況

(82 ネットワーク)

 フリーパス、ケイカク タイシ ショウキヨウ トウケイ ヒヨウ

DATE 83-05-27

PAGE 1

ネット	フリーパス タイシ		ケイカク タイシ		ネットワーク	
	カイ入	シカン	カイ入	シカン	カイ入	シカン
82-04	13	75:58	5	107:57	18	183:55
82-05	16	96:11	5	131:31	21	227:42
82-06	20	123:13	4	131:48	24	255:01
82-07	13	76:52	4	65:23	17	142:15
82-08	17	126:27	5	170:40	22	297:07
82-09	18	117:29	5	109:40	23	227:09
82-10	17	100:27	5	189:40	22	290:07
82-11	19	116:40	4	86:30	23	203:10
82-12	13	64:03	4	114:20	17	178:23
83-01	13	73:26	4	97:20	17	170:46
83-02	12	44:26	2	53:00	14	97:26
83-03	3	10:49	7	154:45	10	165:34
トウケイ	174	1026:01	54	1412:34	228	2438:35

7. センターより—速報 (No. 20 ~ No. 25) から再録—

7.1 チェックポイントリスタート機能のすすめ (No. 20)

1. チェックポイントリスタート機能について

プログラムを長時間にわたって実行するとき、なんらかの理由で処理が中断されることがあります。あるいは、ジョブクラスのCPU上限より長いプログラムを処理したいことがあります。このような場合に、ジョブの中断点からリスタートさせることができます。これは、チェックポイントリスタートと呼ばれています。

分子研の電子計算機センターでは、デファードチェックポイントリスタートをサポートします。デファードリスタートは、ジョブの中断後、再度ジョブを投入することにより、チェックポイントから、処理を再開します。チェックポイントは、利用者のプログラム中から任意の時点に何度でもとることができます。なお、ワークファイルは、すべて短期データセットとし、リスタートジョブで使用できるように保存する必要があります。

(例)

```
//FT11F001 DD DSN=@@WORK1, UNIT=SHRT,  
DISP=(NEW, CATLG, CATLG)
```

↑

異常終了の場合でも保存するため

チェックポイントを保存するためのデータセットは、DD名SYSCHKで定義します。リスタートジョブのJCLには、実行ステップのDD文の他、JOB文のあとにも必要です。

2. プログラム中でのチェックポイントのとりかた

FORTRAN プログラムであれば、チェックポイントをとりたい時点でCHKPTサブルーチンを呼び出します。

CHKPT

呼び出し形式

CALL CHKPT (IRTN)

引数

IRTN : チェックポイントが正常に処理されたかどうかの完了コードが返されます。リターンコード表についてはマニュアル (チェックポイントリスタート P 19~20) 参照。

CHKPTルーチンが呼ばれる毎に、新しいチェックポイントに対してSYSCHKの内容は更新され、最新データのみが残ります。

このCHKPTルーチンは当面、PL/Iのソースプログラムで提供されますので、PL/Iコンパイラでコンパイルして、利用者のプログラムとリンケージをとって使用します。

```
CHKPT: PROC(RTNCD)
      OPTIONS(FORTRAN);
      DCL DDNAME CHAR(8) INIT('SYSCHK '),
           CHKID  CHAR(8) INIT('PNT001 '),
           DSORG  CHAR(2) INIT('PS'),
           RTNCD  FIXED BIN(31, 0);
      CALL PLICKPT(DDNAME,CHKID,DSORG,RTNCD);
      END;
```

3. バッチジョブのJCLの指定のしかた

(始めのジョブ)

```
//AB1CD2X3 JOB PSWD,CLASS=C
// EXEC FORTOEX,PRIVLIB=MASTER.LOAD,PROG=MAIN

//EX.SYSCHK DD DSN=@@SYSCHK,DISP=(NEW,CATLG,CATLG),
              UNIT=SHRT,
//              SPACE=(CYL,(5))
//
```

チェックポイントをとるために必要となるデータセットの容量は、ジョブのREGIONにより異なります。1MB-3CYL, 2MB-5CYL, 3MB-7CYL, 4MB-9CYL, 5MB-11CYL, 6MB-13CYL, 7MB-16CYL

(リスタートジョブ)

```
//AB1CD2X4 JOB PSWD,CLASS=C,RESTART=(EX,PNT001)
//SYSCHK DD DSN=@@SYSCHK,DISP=OLD
// EXEC FORTOEX,PRIVLIB=MASTER.LOAD,PROG=MAIN

//EX.SYSCHK DD DSN=@@SYSCHK,DISP=OLD
//
```

JOB文のRESTARTオペランドで、ステップ名と、チェックポイントIDを指定します。
システムより発行されるメッセージ（詳しくはマニュアルシステムメッセージ／コード

6.チェックポイントリスタート参照)

JJC000I AB1CD2X3, SYSCCHK, K51, IMS051,CHKPT SUCCESSFUL PNT001

(チェックポイントが正常に行われた旨を知らせるメッセージ)

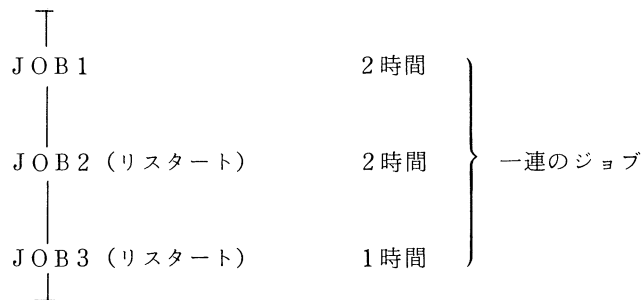
JJC101I AB1CD2X4 RESTARTED

(デファードリスタートが正常に行われた旨を知らせるメッセージ)

4. チェックポイントリスタート機能を使う上でのデータセットに関する注意事項

- (1) チェックポイントリスタートでは、チェックポイントをとったところまで全環境を戻して処理を開始します。しかし、データセットに関しては、回復処理を行わないので、チェックポイントをとったあとで、データセットを更新すると、不都合な場合が生ずることもあります。プログラムの処理に影響を与えるデータセットを更新したら、チェックポイントを直後にとるという対応が必要です。単なるデータの出力であれば、この問題はありません。
- (2) チェックポイントリスタートでは、チェックポイントデータを格納するデータセットをはじめとして、データセットはとても重要なのでCOPYにより、データセットの場所を変えたり、名称を変えたりとリスタートがうまくいかなくなります。

一連のジョブを終えるまでは手を加えないようにしてください。



- (3) チェックポイントデータセットは、他にCOPYしたり、MTにバックアップできませんので御注意ください。

7.2 プロジェクトの利用点数について (No.20)

プロジェクトの利用点数は、次のように代表利用者及び各メンバーに割り当てられます。

プロジェクトの利用点数：3800点（10時間相当）の場合

代表利用者 3800点（10時間相当）

メンバー（A） 760点（2時間相当） メンバー（C） 760点（2時間相当）

メンバー（B） 760点（2時間相当） メンバー（D） 760点（2時間相当）

代表利用者にはプロジェクトと同じ点数、各メンバーには5等分した点数が割り当てられている

ので、全員の点数を合計すると 6840 点（18 時間相当）になります。各利用者の点数は代表利用者の権限で変更できるので合計 19000 点（50 時間相当）までオーバーブックが可能です。その際、気をつけなければならないことは、自分の利用点数が残っていても、プロジェクトに点数が残っていないければその点数は使えないことです。

次に TSS セッション終了時に出力される情報をみてみましょう。

	<PROJECT>	<USER>		<PROJECT>	<USER>
	:	:		:	:
ACT TOTAL =	3700	10	REMAINING =	100	750 THIS JOB = 1

この例ではメンバーの利用点数は 750 点残っていますが、プロジェクトには 100 点しか残っていません。他のメンバーが全く使わなかったとして、あと 100 点しか使うことができません。残り点数はまず、プロジェクトの点数に気をつけてください。

7.3 メインメモリ使用の効率化と自主制限のお願い (No.21)

昭和 57 年度からすべてのバッチ JOB（A～E クラス）の REGION サイズ上限値が 7 MB まで引き上げられ、非常に使い易くなっておりますが、最近になって REGION サイズを大きく使って、しかも効率の悪い JOB が目立ち始めました。このため TSS をはじめとしたシステムの応答速度の劣化、ターンアラウンドタイムの増加といったような現象が時析現われることがあります。このままこの種の JOB が増えつづけますとサービスの悪化につながるため REGION サイズ上限値を再度縮小せざるを得ないことになりかねません。

したがって次の点に注意して大きなプログラムをできるだけ流さないようにお願いします。

- (1) データ領域（DIMENSION 宣言、COMMON 宣言）はできるだけ小さくする。
- (2) オーバーレイ構造を取る。
- (3) 配列の参照・書込みは効率のよい方法で行う。

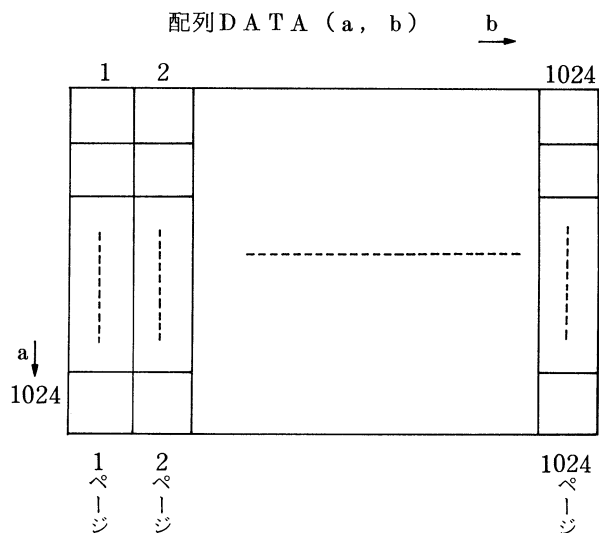
特に(3)の配列について効率の悪いプログラムを書くとき極端にページング処理などのオーバーヘッドが増えます。以下に例をあげて説明をしますので参考にしてください。

M-200HVOS3 では仮想記憶方式をとっています。プログラム及びデータは、メインメモリに置かれますが、メインメモリに余裕がない場合には一部がページ（4096 byte）単位に大記憶（ディスク）に置かれて、必要な時にメインメモリに持ってこられます。

それでもメモリが不足する場合はジョブ全体が実メモリ上から排除されるスワッピングが起ります。ページング、スワッピングの起きている程度は、システムメッセージの中の PAGING 回数とか実行時間／CPU 時間の比から判断して下さい。

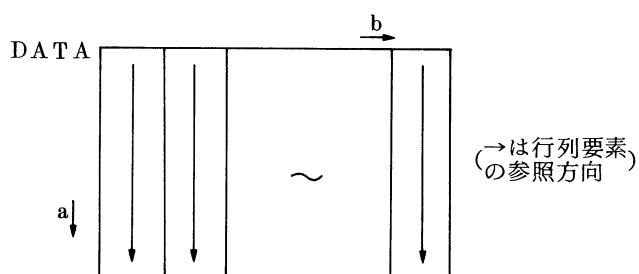
ページングやスワッピングの起き方はプログラムの書き方により大きく違ってきます。自分のジョブのみでなく他のジョブへの影響が大きいため、効率のよいプログラムを書くよう努めて下さい。

次の例では配列の1列が1ページになっています。



(良い例)

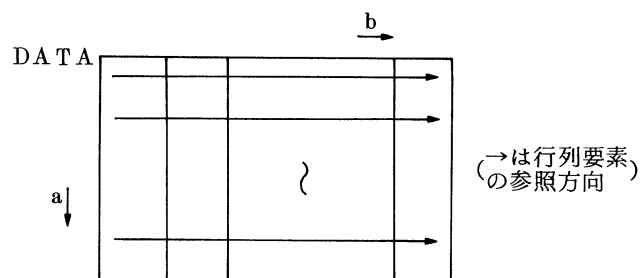
```
DO 10 I = 1, 1024
DO 10 J = 1, 1024
10 DATA (J, I) = 0.0
```



内側のDOループの計算に1ページの参照でよい。従って数十頁分の実メモリで効率よく実行されます。

(悪い例)

```
DO 10 I = 1, 1024
DO 10 J = 1, 1024
10 DATA (I, J) = 0.0
```



内側のDOループの計算に1024ページの参照が必要となります。従って最悪の場合には代入文を1回実行するごとにページングが起り、 $20\text{mSEC} \times 1024 \times 1024 = 6\text{時間}$ の実行時間を必要とし、システム全体の効率を落します。

反対の極端な場合にはユーザ領域の半分以上の4MBの実メモリを要求し、他のジョブの実行を妨害します。

7.4 FORTRAN77のすすめ (No.22)

分子研電子計算機センターでは、FORTRANコンパイラとして拡張型FORTRAN、最適化FORTRAN77が使用できるようになっていますが、いまのところ最適化FORTRANがよく使われています。

最適化FORTRAN77については安定度に対する疑問や未サポートの機能が多いなどの理由からあまり積極的には使用を薦めてきませんでした。

年末に予定されている最適化FORTRAN77コンパイラのバージョンアップ(03-01)によりANS77規格がほぼ満たされることになることおよび拡張型、最適化FORTRANは今後改善計画がないことからセンターとして利用者に最適化FORTRAN77の利用を積極的に薦めて行く予定です。

最適化FORTRAN77には次のような特徴があります。

A. 大幅に拡張された言語仕様

1. IF-THEN-ELSEなどで構造化プログラミングができる。
2. 文字型宣言ができ文字列操作が簡単にできる。また内部データセット入出力(従来のENCODE, DECODE)がREAD, WRITEの仕様でできる。
3. 配列宣言でA(0:100)というように下限の指定ができる。
4. データセットの取扱いがOPEN/CLOSE/INQUIREなどにより柔軟に行える。とりわけ直接アクセスデータセットを使用する場合、便利になっている。
5. VSAMデータセットを通常の入出力文で扱える。
6. DOループの繰り返し回数で条件式によっては1回も実行しないようになっている。

B. 強力なコンパイラの機能

1. 4レベル(0-3)の最適化機能を持ち、最高速のロードモジュールを作成できる。
2. DOループの処理を最適化FORTRAN(ANS66規格)と同じにするANS66オプションが用意されている。
3. *STARTC/INCLUDEにより任意のソースモジュールを容易に選択できる。
4. シンボリックデバッグ機能によりソースプログラムの変更を必要とせず、実行時にデバッグ情報を得ることができる。

5. プログラムの実行回数カウントマップを出力する動作特性解析機能により、プログラムの効率向上のための情報を得ることができる。
6. IAPのサポートを強化し、ベクトル命令の適用範囲を拡大している。

C. TSSでの操作性が向上

1. 主記憶を十分生かしてコンパイル時間を短縮している。
2. コンパイル&ゴーを行うGOFORT77コマンドを用意している。
3. TSSでのデバッグを効率よく行うために会話型のデバッグ機能を用意している。

D. FORTRAN77/SAF プリコンパイラによる仕様拡張

1. ソースプログラム解析機能によりプログラムの関連を掴むことができる。
2. FORTRAN77の仕様を超える構造化プログラミングができる。
3. 高速演算のためのサブルーチン、関数のインライン展開機能がある。

詳細は次のマニュアルを参照してください。

最適化FORTRAN77	使用の手引き	8080-3-258
最適化FORTRAN77	言語	8080-3-259
最適化FORTRAN77	端末使用の手引き	8080-3-222

◇ IAP 機能の強化拡張

M-200HのIAP機能が一部強化拡張されました。

コンパイルパラメータIAPのサブオペランドに次の二つが追加されました。

- i) IAP (BASIC) 従来通りのベクトル化を行う。
- ii) IAP (EXTENDED) 以下に述べる拡張機能によりベクトル化強化を行う。

① ループ分割機能

ベクトル化不能ループをベクトル化可能ループと可能ループに分割する。

```

┌ DO 10 I = 1, N
│   X = FLOAT (I)
│   A (I) = X * B (I)
└ 10 CONTINUE

```

(ベクトル化不能)



```

┌ DO 10 I = 1, N
└ 10 X (I) = FLOAT (I)

```

(ベクトル化不能)

```

┌ DO 20 I = 1, N
└ 20 A (I) = X (I) * B (I)

```

(ベクトル化可能)

② ループ不変条件式のベクトル化機能

IF文があってもループ内で条件が不変ならばベクトル化する。

```

┌ DO 10 I = 1, N
└ IF (X .GT. 0.0) C (I) = A (I) + B (I)
10 CONTINUE

```

(オブジェクトコード)

LE FR, X

CE FR, = '0.0'

```

┌ BC , #10
└ VEAE C, A, B
→ #10 NOOP

```

③ ループ展開機能 — インデックス条件式消去機能

IF文があってもループインデックスが最初か最後を除いて条件が一定ならベクトル化する。

```

┌ DO 10 I = 1, N
└ IF (I .EQ. 1) A (I) = B (I) + C (I)
10 D (I) = E (I) + F (I)

```



A (1) = B (1) + C (1)

D (1) = E (1) + F (1)

```

┌ DO 10 I = 2, N
└ 10 D (I) = E (I) + F (I)

```

(ベクトル化可能)

④ ループ展開機能 — 巡回型指標消去機能

DO ループ内のループインデックスが巡回型 (Nから始まって1, 2, …, N-1) の場

合でも最初 (N) を除いてベクトル化する。

```
      IM1 = N
      DO 10 I = 1, N
        A (IM1) = B (IM1) + C (IM1)
      10 IM1 = I
      →
      IM1 = N
      A (IM1) = B (IM1) + C (IM1)
      IM1 = 1
      DO 10 I = 2, N
        A (IM1) = B (IM1) + C (IM1)      (ベクトル化可能)
      10 IM1 = IM1 + 1
```

7.5 IAP利用者への緊急連絡 (No.22)

現在最適化FORTRAN77でIAPを使用したときに、次のような不良があることが分りましたのでご注意ください。

この障害は年末のバージョンアップにより取り除かれる予定です。

(1) エラー状況

総和形演算に対して次の様なプログラムでIAP指定をすると変数Sに正しい値が設定されない。

```
      DO 10 I = m, n
        :
      X=A (I)
      Y=B (I) .....①
      S=S + X - Y .....②
        :
      10 CONTINUE
```

<発生条件>

① 配列から変数に置き換えを行っている。

② $S = S + X - Y$ のように SUMMATION 演算において、右辺第3項以降に①で置き換えた変数を負の演算 $\langle -Y \rangle$ として使用している。

以上の①②を同時に行っているときのみ発生する。

(2) 例

(i) 正 常

```
DO 10 I = m, n  
S = S + A (I) - B (I)  
10 CONTINUE
```

} ① を行っていない

(ii) 正 常

```
DO 10 I = m, n  
X = A (I)  
Y = B (I)  
S = S - Y + X  
10 CONTINUE
```

} ② を行っていない

(iii) 異 常

```
DO 10 I = m, n  
X = A (I)  
Y = B (I)  
Z = C (I)  
S = S + X + Y - Z  
10 CONTINUE
```

} ① ② を行っている

7.6 処理結果を『MAIL』扱いにしている利用者へお願い (No.22)

処理結果の郵送依頼は、SOMコマンドシステムの中でPRINT サブコマンドの第2パラメータに「M」を指定することにより行います。

```
SOM  
S/  
:  
S/PRINT [dsn], M  
S/END
```

処理結果はすぐ取り出されずに利用者のTSSジョブとして保存されます。(STATUSコマンドでは次のように表示されます。)

```
AB1CD2 (T○○○○○)      IN OUTPUT QUEUE
```

したがってこのジョブをキャンセルされますと郵送できなくなりますのでご注意ください。

センターで出力を取るとジョブは自動的にキャンセルされます。

郵送は毎週月曜（または火曜）に一括して行っています。できるだけ編集を行って最小限の出力にしてください。

7.7 カラーグラフィックディスプレイ T4113（テクトロニクス製）の設置について（No.22）

ソニーテクトロニクス社の最新鋭カラーグラフィックディスプレイ T4113が10月から導入されて、センター2階のグラフィック室に設置されています。これに伴い従来2台あったT4014型ディスプレイは1台が撤去されて実験棟リモートステーションへ移設されました。

現在カラー機能を十分に生かすソフトウェアの導入を準備中ですので、もうしばらくお待ちください。また、SIGGRAPH CORE標準準拠のソフトウェアも検討中です。なおモノクロであれば従来のソフトウェア（GPSLなど）およびロードモジュールでそのまま動きます。ただし、現在はハードコピーを取ることができません。

T4113の特徴は次のとおりです。

- ・ 60Hz ノンインターレース・ラスタスキャンタイプ
- ・ 分解能 640 × 480
- ・ アドレスサブルポイント 4096 × 4096
- ・ カラー 4096 色中から 16 色選択同時表示
- ・ ローカルピクチャセグメントとして 544KB のメモリを内蔵し、最高 32767 個までのセグメント（図形要素集合）をローカルで高速に操作できる。
- ・ パネル機能により任意の領域内をカラーやパターンで塗りつぶすことができる。
- ・ ズーム／パン機能により、分解能は 640 × 480 であるがアドレスサブルポイントの 4096 × 4096 の精度までをフルに使える。
- ・ グラフィックタブレットにより一段と会話処理がスムーズに行える。

7.8 論文別刷の提出要領について（No.23）

毎年夏に発行する「センターレポート」には各プロジェクト別に発表論文が記載されます。記載論文はすべて各プロジェクトからの提出の有無によって決定されます。この提出時のコメントが不十分なためにセンター側でどのプロジェクトの成果か判定できない場合が非常に多くあります。

直接センター事務室へ提出するか、郵送するかどちらでも結構です。今後は論文対応に必ず次のフォーマットを添付してください。

年 月 日
センターレポートに掲載
分子研センターの利用の有無
プロジェクト名 代 表 者 名
発表誌名（省略形で），VOL，NO，（発表年）

（注）

- ・二つ以上のプロジェクトを使用した場合は各々のプロジェクト及び代表者名を列記すること。
- ・同一の代表者であっても二つ以上のプロジェクトを使用した場合はプロジェクト名を各々列記すること。
- ・提出は必ず別刷を2部，プレプリントやコピーは原則として認めません。
- ・毎年締切りは5月末とします。これ以後になりますと次年度号にまわします。

記入例

S. 58. 1. 30
センターレポートに掲載
分子研センターの利用に基づく
AB1CD2 山 田 一 郎 AB3CD4 分 子 太 郎
J. Chem. Phys. <u>73</u> (1980)

7.9 SOMコマンドPRINT出力時の注意事項（No.23）

バッチジョブなどの出力結果はTSS下でSOMコマンドシステムのPRINT コマンドを使って取り出しますが，最近「バッチジョブの結果が消えてしまった。」，「メールジョブが来ない。」などといったトラブルがたびたび発生しています。これらは大体同じ原因によっていますので，ここで改めて注意をいたします。

```

SOM
S/
:
S/PRINT  [dsn] [, M]    Mはメールジョブのときに指定
S/END

```

ここで処理結果はデマンド出力（トークンカードによるLP出力）されるまでは利用者のTSSジョブとして保存されます。この場合はSTATUS コマンドによって次のような表示が出ます。

```
AB1CD2 (T○○○○○)      IN OUTPUT QUEUE
```

デマンド出力前にこのジョブをキャンセルデリートすると出力は取り出せなくなります。デマンド出力以前にどうしてもこのTSSジョブを消去したい場合にはこれを自分のデータセットへ保存しておく必要があります。

7.10 変更願（利用点数追加申請）提出時の注意について（No.24）

— CPU時間の追加申請 —

利用点数の追加申請は利用点数の残りがなくなる前に早めに提出してください。利用点数の残りがなくなった場合に、追加申請が承認されるまで事前の利用点数の追加は行いません。これは所内のプロジェクトであっても同様です。

CPU時間の追加申請は随時受付ておりますが、人手不足のため次のように処理しています。

㉑ 大口のCPU時間追加申請

既許可時間と追加申請時間の和が10時間を超えるものの中、追加申請時間が10時間または既許可の50%を超えるものは、運営委員の評価が行われます。この場合、郵送による審査を行いますので1ヶ月程度の時間を要します。

毎月15日と30日（月末）に締め切ります。

㉒ 小口のCPU時間追加申請（大口に満たないCPU時間の追加申請）

あらかじめ運営委員会で定められた半年度毎の割り当て規則に基づきセンターが処理します。

2週間程度の時間を要します。

毎月10日と20日と30日（月末）に締め切ります。

代表利用者はプロジェクトの利用点数の使用状況を常に把握し、かけ込み申請を行わないようお願いします。

共同利用者でもプロジェクトの利用点数の使用状況及び保存／短期のデータセットの使用状況はSOMでジョブの処理結果を取り出す時にACCTサブコマンドで表示させることができます。

```
SOM
```

```
S/*X3 (JA00001)
```

```
⋮
```

```
S/ACCT
```

```

* ----- *
* CLASS=B   * PAGE=      9 * DISK I/O=18853 * VIO I/O= 0 * PAGING= 19
* IAP       <PROJECT> <USER>                <PROJECT> <USER> <PROJECT>
SHORT USE=  5985KB   5985KB  SAVE USE= 6992KB   6992KB  NUMBER= 40
SHORT LIM=100000KB 100000KB  SAVE LIM=12000KB 12000KB    <USER>
ACT  TOTAL=  1000    1000    REMAINING=  2800    2800    THIS JOB= 6
* ----- *

```

いままでの利用点数の使用合計
 短期データセットの現在使用量
 及び許可量

これから使用可能な利用点数
 保存データセットの現在使用
 量及び許可量

このジョブ
 の利用点数

表示される情報にはプロジェクトに関するものと利用者個人に関するものがあり、次のことに注意する必要があります。

プロジェクトに許可された利用点数は、プロジェクトの各メンバーへ配分するときオーバーブッキングしているので、利用者個人に配分された利用点数に残りがあっても、プロジェクトの利用点数の残りがなければ使うことはできません。

7.11 JOB投入に関する注意事項 (No.25)

3月、4月と大変混雑していますが、システムを効率よく利用する上で次の点に留意されるようお願いします。

1. プロセサの選択 (IAP, NOIAPの指定)

通常のジョブ (どちらのプロセサで実行してもよいジョブ) はシステムがそれぞれの空き状態に応じて理想的にバランスよくジョブを振り分けます。プロセサ指定 (JCLの//*MAIN文) が必要なのは普通 IAP (アレイプロセサ) を使用する場合に限られます。したがってそれ以外のジョブではプロセサ指定をしない (JCLの//*MAIN文を抜く) ようにしてください。
(ただし3で述べるワーキングセットサイズの大きなジョブに関してはこの例にもれます。)

2. REGIONサイズの指定

JOB文またはEXEC文でのREGIONサイズ指定は必要以上に大きくしないこと。それぞれのジョブの実質的な大きさに合った指定をするようにしてください。それは次の二つの理由によります。

① 同時に実行できるジョブの合計REGIONサイズは32MB

プロセサごとに同時に実行しているジョブのREGIONサイズ合計が32MBを超えると以

後のジョブはジョブクラスに空きがあっても実行に入れません。すべてのジョブで7MBのREGIONサイズが指定されると4本しか同時に流れないことになります。Aジョブが長時間実行されないことがあります、この理由によることがよくあります。

- ② 小さいREGIONサイズのジョブほど取り出されやすく、大きいREGIONサイズのジョブほど取り出されにくい。

①で述べたようにREGIONサイズ合計が32MBの上限で押えられているが、続いて実行に入るジョブの選択は残りREGIONサイズの空きと見比べて選択されるため、小さいものはジョブの投入が後でも先にどんどん追い越して実行されることになります。

3. 実質ジョブサイズ（ワーキングセットサイズ）の大きなジョブの制限

REGIONサイズではなく実メモリ上で実際に占める領域（ワーキングセットサイズ）の大きなジョブは他のジョブやTSSのターンアラウンドタイムに大きな悪影響を及ぼします。特にIAP側で流れると、TSSとバッチジョブの両方の負荷があるため、TSSの応答が非常に悪くなります。したがってできるだけジョブのワーキングセットサイズを小さくしてください。このためには次の方法が考えられます。

- ① 最適なオーバレイ構造をとる。
- ② DIMENSION宣言などで過大なデータ領域をとらないようにする。
- ③ 配列の参照・書き込みは効率のよい方法で行う。

詳細は7.3項を参照してください。

また止むを得ず大きなワーキングセットサイズのジョブを実行する場合には次のことに留意してください。

- ① 夜間、休日などの閑散時間帯に投入実行する。
- ② NOIAP側で実行するように指定する。（TSSの負荷がないので少しは効率がよい。）

8. 昭和57年度システム新機能

— 速報 (No. 20 ~ No. 25) から再録 —

8.1 システムのレベルアップについて (No. 20)

昭和57年7月27日より、オペレーティングシステムがVOS 3-08-02にレベルアップされます。今回のレベルアップでは数多くの新機能がサポートされますが、主なものを次に紹介します。

(1) TMP 4

TMP 4はより柔軟な端末操作を実現するためのソフトウェアで、次の機能を利用できます。

① Xコマンド

EDITコマンドのもとで、READYモードのコマンドを実行したり、実行中のコマンドをアテンション割り込みで中断させ保留したまま、親コマンドを実行させることができます。

EDIT

X LISTDS A. FORT

X DEL A. FORT

② 複数コマンドの同時入力

TSS端末コマンドを入力するとき、決められた区切り文字でコマンドを区切ることで、複数コマンドを同時に入力できます。

EDIT A. FORT;V;LIST * 10

③ データセット名の指定の簡略化

区分データセットの指定は、“:メンバ名”とすることができます。

EDIT B. FORT:MEM1

完全データセット名は、先頭に#を付けることにより指定します。

EDIT #AB1CD3. C. FORT

なお、従来の方法でも指定できます。

(2) TSDUT

TSDUTは、データセットの複写、比較、表示などのデータ操作や、データセットのスペース量などのデータセットの管理情報を表示するソフトウェアです。

① COPYコマンド

RECFMがVS及びVBSのデータセットをコピーできるようになりました。

キーなし直接データセットもコピーできます。

順データセットの場合は追加書き込みができます。オペランドに“ADD”を指定します。

(3) TSLOG

TSLOG (TSS 端末入出力ロギング機能) は, TSS 端末でのメッセージ及びデータのやりとりをログ情報としてデータセットに保存できる機能を持ったソフトウェアです。

HQEDでTSLOGがとれるようになります。

(4) TSS コマンド

① ATTR

ATTR コマンドに REUSE オペランドが追加されました。

今迄は ATTR の DCB 名を再使用する時は FREE コマンドが必要でしたが

ATTR DCB <DCBパラメータ> REUSE

とするだけで良くなります。

② KNOCKDS

KNOCKDS コマンドが使えるようになりました。

KNOCKDS コマンドは共同使用するファイルを DISP=OLD で占有している人のユーザー ID を端末に表示するためのコマンドです。

(5) SOM

SOM は研究効率の向上と LP 用紙の節約を目的としたコマンドシステムで計算結果の表示, 編集, 保存, 出力が簡単な操作でできるようになっています。今回新たに SEL サブコマンドが追加されました。

SEL サブコマンドにより指定したジョブの計算結果取り出しを行います。従来のジョブ名サブコマンドと機能は同じですが, ジョブ名に ALL を指定することにより, すべてのジョブの計算結果を一括して取り出すことができます。

<例>

SOM

S / SEL * X1 X1 のジョブを選択する。

S / SEL ALL すべてのジョブを選択する。

(6) MSL2

MSL2 は FORTRAN で書かれたプログラムのための数値計算副プログラムライブラリで, 行列計算, 関数計算, 統計計算に関する多くのソフトウェアが用意されています。今回 MSL2 がバージョンアップされます。

MSL2 は IAP でコンパイルしたモジュールも, 使うことができます。

データセット名は,

NOIAP: 'SYS1. MSL2'

IAP: 'SYS1. MSL2 IAP'

となります。

(7) 最適化 FORTRAN77 / S A F

最適化 FORTRAN77 / S A F が使用できるようになります。

FORTRAN77 ソース解析機能 FORTRAN77 / S A F は、プログラミング効率の向上、性能向上を目的とした多目的コンパイラで、次の特徴を持っています。

(a) ソースプログラム解析機能

プログラム単位で、変数や文番号に対するクロスリファレンスリストを出力したり、入力したすべてのプログラムの関連図、クロスリファレンスリストを出力します。

(b) 構造化プログラミング機能

FORTRAN77 言語に含まれる I F - T H E N - E L S E 構造のほかに D O 構造, C A S E 構造の構造化プログラミング機能をもっています。

(c) サブルーチン、関数のインライン展開機能

サブルーチン、関数を呼び出し位置に展開することにより呼び出しのオーバーヘッドを削減することができます。

次のカタログドプシジャが用意されています。

FORTS, FORTSC, FORTSCG, FORTSCL, FORTSCLG

関連マニュアル

詳しくは次のマニュアルを参照してください。

T M P 4

TSDUT

TSLOG

T S S コマンド

S O M (利用の手引 — センター T S S コマンド編)

M S L 2

最適化 FORTRAN77 / S A F

8.2 漢字入出力端末の導入と利用 (No. 20)

漢字入出力端末 (T-560/20) 1 台が端末室 (旧パンチ室) に設置されました。日本語文書作成ソフトウェアとして DEDIT (日本語文書エディタ: Document Editor), DRUNOFF (日本語清書プログラム: Document Runoff) の二つが用意されています。

DEDIT — T-560/20 のディスプレイ画面を利用した和文用のテキストエディタであり、

漢字・仮名を含んだテキストの作成・編集処理を行います。

DRUNOFF - DEDITが作成した和文テキストを所定の形式に割り付け、漢字端末に清書出力するためのプログラムです。

マニュアル - DEDIT / DRUNOFF解説書, 8090-7-020

8.3 HOSOSの改善について (No.22)

北海道大学大型計算機センターより導入したプログラム相談機械化のためのシステムHOSOSのバージョンアップを行いました。

P L / I のメッセージを追加したこと、及び検索速度を向上させたことが主要な修正点です。

8.4 最適化FORTRAN 77のバージョンアップについて (No.23)

前号でお知らせした最新FORTRAN 77のバージョンアップ(03-01)を1月10日に行いました。

なお、マニュアル(最適化FORTRAN 77使用の手引 8080-3-258-40)に記載されているファイルの動的割り当て機能(DYNALLOC オプション)は機能が不充分であるため当面使用できません。

8.5 HQEDエディタの機能強化について (No.23)

HQEDに次のような便利な機能が追加されました。

- ① HQEDサブコマンド群をコマンドプロシジャのデータセットに入れておくことにより呼び出して実行させることができます。HQEDのサブコマンドの他にコマンドプロシジャの制御文(CONTROLなど)や条件文(IFやDO)も入れられるが、TSSコマンドは入れられません。

使用例

) F1コマンドプロシジャのメンバーF 1に入っているHQEDサブコマンドを実行させる。

- ② TSSのコマンド群をコマンドプロシジャのデータセットに入れておくことにより実行させることができます。センターのコマンドプロシジャも実行できます。

例 "LISTC 1

- ③ W及びQ SサブコマンドでのREC指定で保存するデータセットの形式を決めることができます。

8.6 データベースCMQCAのサービス開始について (No.23)

J. A. Pople らによる分子の Optimize された Geometry を含んだ量子化学計算結果のデータベース CMQCA (Carnegie – Mellon Quantum Chemistry Archive) のサービスを開始しました。TSS コマンド “QCLDB” の投入により、QCLDB データベースと一括して ORION による on-line 検索が可能です。

8.7 M T M のすすめ (No.25)

M T M の機能が強化され使いやすくなりました。

M T M は磁気テープも含めた利用者のデータセットを総合的に管理できるシステムで次の機能もっています。

- (1) ディスク上のデータセットを一括して磁気テープにコピーする。
コピーしたデータセットの情報は M T M 情報として利用者のデータセットに保存、蓄積される。
- (2) 磁気テープ上のデータセットをディスクに一括してリストアする。
リストアするときの磁気テープのデータセットの情報は、M T M 情報からラベルより得る。
- (3) M T M 情報を常に最新の状態に保つために再編集、再構成する。
- (4) M T M 情報を効率良く検索して必要な部分を抽出する。
- (5) 利用者が持っているデータセット名リストをデータセットに作成する。(この情報は(1), (2)で対象とするデータセットを選択するのに使用できる。)
- (6) T S S コマンドを実行する。
(3), (4), (5)の機能も実行できる。

ほとんどメニュー化されているので、操作方法は画面からの指示を見ながら進めて行くことができます。

詳細は利用の手引「T S S コマンド編」を参照。

8.8 新規登録 T S S コマンドプロシジャ (No.25)

以下の T S S コマンドプロシジャが利用できます。

(1) N U M P A C L P

機 能 : 名古屋大学大型計算機センターより移植した数値計算プログラムライブラリ N U M P A C のプログラム一覧表の印刷、印刷出力先の標準値は D (デマンド, センター 1 階ラインプリンター) です。D 以外を指定したい場合は M S G C L A S S

オペランドを用いて下さい。

使用例 : (i) NUMPACLP

(ii) NUMPACLP MSGCLASS(1)

(2) I R 2

機 能 : 赤外線スペクトルデータベース検索システム I R 2 の起動

使用例 : I R 2

使用方法の詳細は I R 2 のガイドをご参照ください。

以上のコマンドはCHELP コマンドで説明を得ることができます。

9. 資 料

9.1 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター規則

分子研規則第4号

昭和56年4月14日制定

(目 的)

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

(職 員)

第2条 センターに、次の職員を置く。

- 一 センター長
- 二 助教授
- 三 助 手
- 四 その他必要な職員

(センター長)

第3条 センター長は、分子科学研究所の教授又は助教授をもって充てる。

2 センター長は、センターの業務を掌理する。

(運営委員会)

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

2 運営委員会の組織及び運営に関し必要な事項は、分子科学研究所長が定める。

附 則

この規則は、昭和56年4月14日から施行する。

9.2 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター運営委員会規則

分子研規則第9号

昭和56年4月14日制定

(目 的)

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

(組 織)

第2条 運営委員会は、次の各号に掲げる委員をもって組織する。

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

(任 期)

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

(委員長)

第4条 運営委員会に委員長を置き、委員の互選による。

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

(議 事)

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

(委員以外の者の出席)

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

(庶 務)

第7条 運営委員会の庶務は、総務部国際研究協力課において処理する。

附 則

この規則は、昭和56年4月14日から施行する。

9.3 電子計算機センター運営委員会委員

(昭和 56 ～ 57 年度)

諸 熊 奎 治	分子研教授，センター長	セ ン タ ー 委 員
柏 木 浩	分子研電子計算機センター助教授	〃
伊 藤 翼	分子研助教授	分子研所内委員
笛 野 高 之	阪大基礎工教授，分子研客員教授	〃
土 方 克 法	電通大教授	分子研所外委員
大 野 公 男	北大理教授	〃
佐々木 慎 一	豊橋技科大教授	〃
岩 田 末 広	慶大理工助教授	〃
亘 弘	生理研教授	生 理 研 委 員
中 研 一	基生研教授	基 生 研 委 員

(昭和 58 ～ 59 年度)

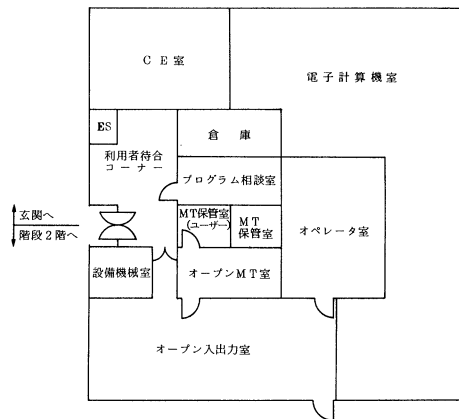
諸 熊 奎 治	分子研教授，センター長	セ ン タ ー 委 員
柏 木 浩	分子研電子計算機センター助教授	〃
大 野 公 男	北大理教授，分子研客員教授	分子研所内委員
正 畠 宏 祐	分子研助教授	〃
土 方 克 法	電通大教授	分子研所外委員
細 矢 治 夫	お茶大理助教授	〃
岩 田 末 広	慶大理工助教授	〃
平 尾 公 彦	名大教養講師	〃
亘 弘	生理研教授	生 理 研 委 員
中 研 一	基生研教授	基 生 研 委 員

9.4 電子計算機センター職員（昭和 58 年 6 月現在）

諸 熊 奎 治	センター長（併任）
柏 木 浩	助 教 授
伊 奈 諭	技 官（係長）
西 本 史 雄	技 官
山 本 茂 義	技 官
中 根 三 恵	事務補佐員
中 島 裕 紀	事務補佐員

9.5 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。

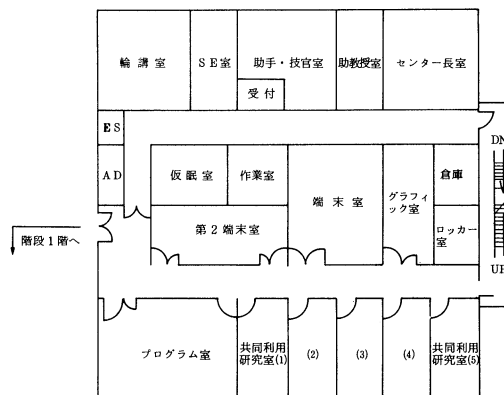
4) オープンMT室

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TSS端末が置かれ，自由に利用できる。

9.6 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57年4月～昭和58年3月
酒井 章吾	関西大工，研究生	昭和57年8月～昭和58年3月

9.7 端末設置状況（昭和58年5月現在）

(1) RJEステーション

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

(2) 電話回線

300ボー	2回線	設置端末数	57回線
1200ボー	5回線	〃	19回線

(3) 構内回線（専用線）……………ポートセレクター経由

1200ボー	40回線
--------	------

9.8 マニュアルの紹介と購入方法

よく利用されているマニュアルには以下のようなものがある。センターではプログラム室に常設しているが，個人で購入を希望するときの申し込み先は次の通り。

☎ 113 東京都文京区本郷7-3-1

東大構内財団法人 好仁会内

アカデミービジネスサービス株式会社 TEL 03-811-7786, 2090

FORTRAN77 関係 最適化FORTRAN77言語 …………… 8080-3-257

〃 〃 使用の手引 …………… 8080-3-258

FORTRAN77 関係	最適化 FORTRAN77 端末使用の手引.....	8090-3-222
	“ “ ソース解析機能	8080-3-272
HQED	HQED 文法	8090-3-309
	“ 使用の手引 (基礎編).....	8090-3-008
	“ “ (応用編).....	8090-3-009
	TSS 入門 (HQED 編)	8090-3-011
TSS	TSS コマンド	8090-3-120
	TSS 操作	8090-9-105
	TSS メッセージ	8090-9-106
	TSS 解説	8090-3-136
	TMP 4	8090-3-148
	TSDUT.....	8090-3-313
	TSLOG.....	8090-3-135
データベース	ORION 利用の手引	8090-6-502
メッセージ	システムメッセージコード.....	8090-9-103
	サービスプログラムメッセージ.....	8080-9-301
MSL II	MSL II 機能編第 1 分冊	8080-7-120
	“ “ 第 2 分冊	8080-7-121
	“ “ 第 3 分冊	8080-7-141
ジョブ管理	ジョブ制御言語.....	8090-3-102
	ジョブ管理解説.....	8090-3-101
	リンケージエディタ／ローダ.....	8080-3-301
データ管理	データ管理解説.....	8080-3-105
ユーティリティ	ユーティリティ第 2 分冊 (データセットユーティリティ)	
		8080-3-303
DESP	構造化プログラミング用画面エディタ DESP 操作.....	8090-3-308
	“ “ DESP	8090-3-307
	TSS 入門 (DESP 編)	8090-3-012
GPSL	汎用図形出力ルーチン集 GPSL 機能編	
	第 1 分冊 基本・機能ルーチン.....	8080-7-096
	第 2 分冊 幾何形状・製図ルーチン.....	8080-7-097
	第 3 分冊 ビジネスルーチン.....	8080-7-098

FORTRAN関係	FORTRAN言語	8080-3-205
	最適化FORTRAN使用の手引	8080-3-208
	“ “ 端末使用の手引	8090-3-215
数学関数	数学関数.....	8080-3-218
SAFE	SAFE使用の手引	8090-3-127
RUNOFF	RUNOFF	8090-3-312
PREVIEW	PREVIEW	8080-7-130
LINEPLOT	LINEPLOT.....	8080-7-129