

目 次	
1. FAXコマンドの公開について .....	1
2. ライブラリプログラム「GSCF3 (SCF部分)」の公開について .....	2
3. INSネットでのパケット通信によるUTSの利用について .....	7
4. 電話回線による学術情報ネットワークの利用について .....	8

### 1. FAXコマンドの公開について

11月19日(月)から標記コマンドを公開します。このコマンドによりデータセットの内容やジョブの出力リストを箱崎地区の内線に接続されたファクシミリに出力することができます。

なお、コマンド入力の前にファクシミリの電源を投入しておくこと、および内線番号に間違いがないかを確認して実行してください。コマンドの入力形式を以下に示します。

(入力形式)

コマンド名	オペランド
FAX	{データセット名   JOB (ジョブ名)} TEL (内線番号)

(オペランドの説明)

- ・データセット名  
出力するデータセット名を指定する。
- ・JOB (ジョブ名)  
出力するジョブのジョブ名を指定する。
- ・TEL (内線番号)  
ファクシミリの内線番号を指定する。

(使用例)

下線部分が利用者の入力です。

READY

FAX TEST.FORT77 TEL(9999) ... データセット TEST.FORT77 の内容を出力する

READY

FAX JOB(A79999AA) TEL(9999) ... ジョブ名 A79999AA を出力する

READY

FAX JOB(A79999A1(J1234)) TEL(9999) ... 同じジョブ名のものがある場合には、ジョブ番号も指定する

最近、ファックス・アダプタ（価格：5～11万円程度）と呼ばれる製品が販売されています。これをパソコンに接続して利用すれば、FAXコマンドの出力をパソコンに取り込んだり（イメージデータ）、パソコン付属のプリンターに出力することが可能になります。

(システム管理掛 内線2518)

## 2. ライブラリプログラム「GSCF3 (SCF部分)」の公開について

標記プログラムを11月26日(月)から公開します。GSCF3は、各種分子の電子状態をガウス型基底 ab initio分子軌道法により計算するシステムです。現在東京大学大型計算機センターで公開中のものを九州大学大型計算機センターに移植し、電子間反発積分計算部分については、ベクトル計算機用に最適化されたプログラムが追加されています。(平成元年度プログラムライブラリ開発課題「分子計算プログラムシステムGSCF3の移植と電子積分計算へのベクトルマシナルゴリズムの導入」開発番号19.1;八尋秀一,権藤恭彦)

ライブラリプログラム名 : GSCF3  
形 式 : コンプリートプログラム (FORTRAN77)  
作 成 者 : 小杉 信博 (京都大学工学部分子工学教室)  
利用者の義務 : 本プログラムを利用して研究結果を印刷・公表する際は、プログラム名と作者名を明記して下さい。

### 使用法

TSS上及びバッチジョブでの実行が可能です。

#### 1) TSSコマンド

コマンド	オペランド
GSCF3	[ {VP   NOV P   VINT} ] [ {FILE   NOFILE} ] [ DSNAME ( <u>\$X</u> ) ] [ SHR ] [ SPACE ( <u>68</u> ) ]

	[ {CYL   TRACK} ]
	[ DATA (入力データセット名) ]
	[ JOBID (1) ]
	[ CLASS (B) ]
	[ CPU (CPU時間) ]
	[ VREGION (' 5, 25' ) ]

[ {VP | NOVP | VINT} ]

- 無指定 : M-780上でTSS処理. GSCF3の実行.  
 VP : VP-200上でバッチ処理. GSCF3の実行.  
 NOVP : M-780上でバッチ処理. GSCF3の実行.  
 VINT : VP-200上でバッチ処理. VINT+GSCF3の実行.

[ {FILE | NOFILE} ]

- 無指定 : GSCF3の実行に必要なファイルを割当て, かつ, 実行を行う.  
 FILE : GSCF3の実行に必要なファイルの割当てを行う. この指定がなされると, GSCF3の実行はなされない.  
 NOFILE : GSCF3の実行に必要なファイルを割当てないで, GSCF3の実行を行う. この指定がなされている場合, 必ず前もってGSCF3コマンド(FILE指定)か又はTSSコマンドで必要ファイルを確認しておかなければならない.

注) バッチ処理の場合は意味を持たない.

[ DSNNAME (\$X) ]

- : ファイル名を指定する. 省略又は\$X指定の場合は, 実行に必要なファイルは一時ファイルに自動作成される. それ以外の場合は, ユーザーファイルに割り付けられる. 例えば, DS (@A) とすると@A10, @A11, @A12, @A13, @A91がユーザーファイル上に作成され, 各ファイル機番に割当てられる.

[ SHR ] : DSNNAMEで指定したファイルが既存のとき指定する.

[ SPACE (68) ]

- : 2電子積分のためのファイルスペース量を指定する. 例えばSP(68)の場合(省略値), FT12, FT13, FT92, FT93, のスペース量(初期値, 増分量)はそれぞれ(68, 7), (35, 4), (14, 7), (7, 4)となる. 単位は無指定ではCYLである. FT92, FT93は2電子積分を求めるときの作業ファイルであり, スペース量の目安はそれぞれFT12, FT13の1/5である. FT13はFT12の1/2で, FT12はCGTF基底数(分子軌道係数行列の次元)をNとしたとき,  $N^4/4000$ KB程度である.

[ {CYL | TRACK} ]

- : SPACEの単位. 省略時はCYLとなる.

[ DATA (入力データセット名) ]

- : 入力データセット名を書く. 無指定の場合, 前もって入力データセ

ットをFT05機番に割り付けてなければならない。ただし、バッチ処理の場合は必ず指定する。

[JOBID (1)]

: ジョブ名の最後の1文字を指定する。1と指定した場合、課題番号がA79999AならばA79999A1となる。

[CLASS (B)]

: ジョブクラスを指定する。NOVPの場合は常にFである。VP, VINTのときは既定値はBになっているが、大規模計算でBジョブを超える場合はより以上のクラスを指定する必要がある。

[CPU (CPU時間)]

: ジョブのCPU時間(分)を指定する。無指定の場合はジョブクラスの制限値。CLASS=Fのとき2以下を指定すると優先処理される。

[VREGION ('5, 25')]

: VP, VINTのときの基本リージョンサイズ, 拡張リージョンサイズを指定する。

(注) M780上でTSS処理を行う場合、拡張リージョンを要求する必要があります。以下のように、LOGON時にS(9999)を指定して下さい。

LOGON TSS 課題番号 S(9999)

2) バッチ処理

カタログド プロシジャ	オペランド
GSCF3	[, PROG = {VP   NOVP   VINT}] [, SPACE = {スペース量   68}] [, UN = {TRK   CYL}] [, VREGION = '基本リージョン, 拡張リージョン'] [, DATA = '入力データセット名'] [, DSNAME = 'ファイル名'] [, DISP = {NEW   SHR}]

[, PROG = {VP | NOVP | VINT}]

: 起動するプログラム名を指定する。省略時はVP。

[, SPACE = {スペース量 | 68}]

: 2電子積分のためのファイルスペース量を指定する。省略時は68。

[, UN = {TRK | CYL}]

: SPACEの単位を指定する。省略時はTRK。

- [, VREGION='基本リージョン, 拡張リージョン']  
 : PROGにVP又はVINTを指定したときに有効となるオペランドで、  
 プログラム実行時のリージョンサイズを指定する。省略時は'5, 25'.
- [, DATA='入力データセット名']  
 : 論理機番5から入力するデータセット名を指定する。
- [, DSNNAME='ファイル名']  
 : ファイル名を指定する。省略すると実行時に必要なファイルは一時ファイル  
 に自動作成される。ファイル名を指定するとユーザファイルが割当てられる。  
 例えば、ファイル名に'A79999A.@A'を指定すると'A79999A.@A10', 'A7999  
 9A.@A11', 'A79999A.@A12', 'A79999A.@A13', 'A79999A.@A91'がユーザフ  
 ァイル上に作成され、各ファイル機番に割当てられる。
- [, DISP={NEW|SHR}]  
 : DSNNAMEで指定したファイルが既存の時はSHRを指定する。  
 NOV Pの場合は常にFジョブにして下さい。VP及びVINTの場合はBジョブ  
 でも動きますが、FジョブでTIME=2設定の優先処理でも、結構いろいろな分子  
 の計算が行えます。

### 3) 実行例

(例1) TSSコマンドの例

```
LOGON TSS A79999A S(9999)
.....
READY
GSCF3 DATA(GSCF3.DATA(C2H4)) SPACE(2) CYL
.....
..... 実行結果.....
.....
LOGON TSS A79999A S(9999)
.....,
READY
GSCF3 FILE
READY
ALLOC F(FT10F001) DA(GSCF3.FT10) REU
READY
ALLOC F(FT11F001) DA(GSCF3.FT11) REU
READY
ALLOC F(FT05F001) DA(GSCF3.DATA(C2H4)) REU
READY
ALLOC F(FT06F001) SYSOUT(U) REU
READY
GSCF3 NOFILE
```

```
.....  
READY  
GSCF3 VINT DATA(GSCF3.DATA(C2H4V)) CLASS(F) CPU(2)
```

(例2) バッチジョブの例

```
//A79999A1 JOB CLASS=B  
// EXEC GSCF3, DATA='A79999A.GSCF3.DATA(C2H4)'  
//
```

```
//A79999A2 JOB CLASS=F, TIME=2  
// EXEC GSCF3, PROG=NOVP,  
// DATA='A79999A.GSCF3.DATA(C2H4)'  
//
```

```
//A79999A3 JOB CLASS=B  
// EXEC GSCF3, PROG=VP  
//FT05F001 DD *  
 入力データ  
  .....  
//
```

```
//A79999A4 JOB CLASS=F, TIME=2  
// EXEC GSCF3, PROG=NOVP, SPACE=2, UN=CYL,  
// DATA='A79999A.GSCF3.DATA(C2H4)'  
//FT12F001 DD DSN=A79999A.GSCF3.FT12, DISP=(NEW, CATLG),  
// SPACE=(CYL, (5, 2), RLSE), UNIT=PUB  
//FT13F001 DD DSN=A79999A.GSCF3.FT13, DISP=(NEW, CATLG),  
// SPACE=(CYL, (3, 1), RLSE), UNIT=PUB  
//
```

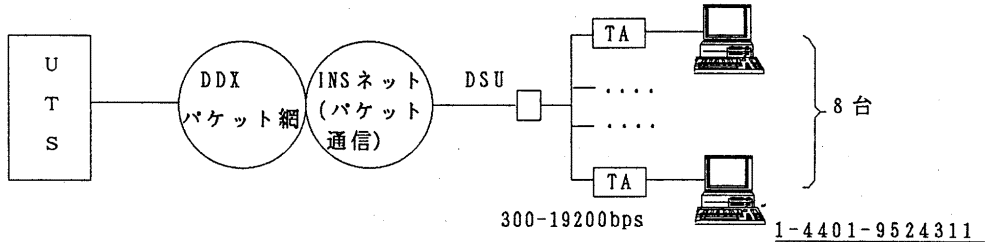
#### 4) 文献

- [1] GSCF3 利用の手引き (SCF 部分), 東京大学大型計算機センター (1986年12月)
- [2] 八尋他 分子軌道計算システム GSCF3 (SCF 部分) の利用法とベクトルマシ  
アルゴリズムの導入について 九州大学大型計算機センター 広報 Vol. 23, No. 6, 1990

(ライブラリ室 内線 2508)

### 3. INSネットでのパケット通信によるUTSの利用について

平成2年11月5日(月)から、INSネット(パケット通信モード)からDDXパケット交換網経由でMSPに加えてUTSの利用ができるようになりました。



#### 1. 電話番号

144019524311

#### 2. 使用例 (TA:富士通 ISPT-APSの場合)

ここでは、パソコンからTA(ターミナルアダプタ)のPAD機能及びパケット通信モードを利用して、UTSを利用する例を示します。

ATMENU ..... TAの初期設定を行う

1>PORT:1

PORT1 CONFIGURATION

SERVICE :ASYN-DPS

SPEED :9.6Kbps

PARITY :NON

STOP BIT :1.0

COMMAND :X28

ER/RS OP. :NON

CALL TYPE :VC

LGN :0

LCN :1

PS :128Byte

WS :2

SUB ADDR :NON

1>ENDS

<<PAD>>

144019524311 ..... 九大センター DDX-P(9524311) への発呼

COM ..... 'COM' 出力を確認

kyu-cc

Welcome to FUJITSU UTS

login:                   ..... U T S へのログインが可能となる

I N S ネット (パケット通信) や T A (ターミナルアダプタ) については、前号のセンターニュース (NO. 428) を参照して下さい。

(ネットワーク掛 内線 2 5 4 2)

#### 4. 電話回線による学術情報ネットワークの利用について

学術情報センターでは、学術情報システムの基盤整備計画の一環として、平成 2 年 1 1 月 1 日 (木) から、電話回線から学術情報ネットワークの利用 (N T T の D D X - T P の学情版) を可能とするネットワークの機能拡張を行いました。これに伴い、本センターでも標記サービスを提供するため、ホスト側の環境を用意いたしましたのでご利用下さい。

現在、電話回線から学術情報ネットワークを利用するためのアクセスポイントは、全国 7 か所に設けられています。利用者は最寄りのアクセスポイントに電話をすれば、学術情報ネットワーク経由で本センターが利用できます。この利用形態は、最寄りの大型計算機センター等を経由しないため、N - 1 ネットワーク経由で課金される最寄りの大型計算機センターの利用料金は不要となります。

以下は、学術情報センターニュースの抜粋 (一部転載) です。

##### 学術情報ネットワークへのアクセス

電話回線からのアクセスポイントを身近 (全国 7 か所) に設置

————— 平成 2 年 1 1 月 1 日 (木) サービス開始 —————

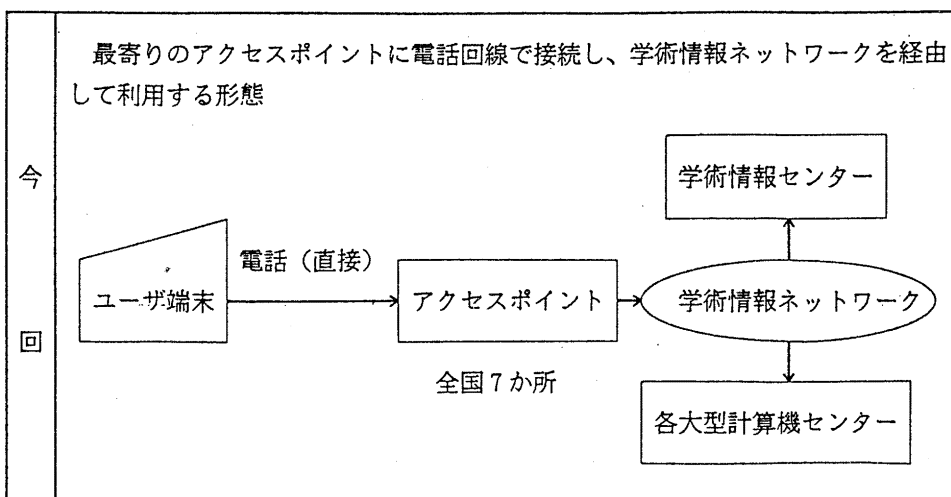
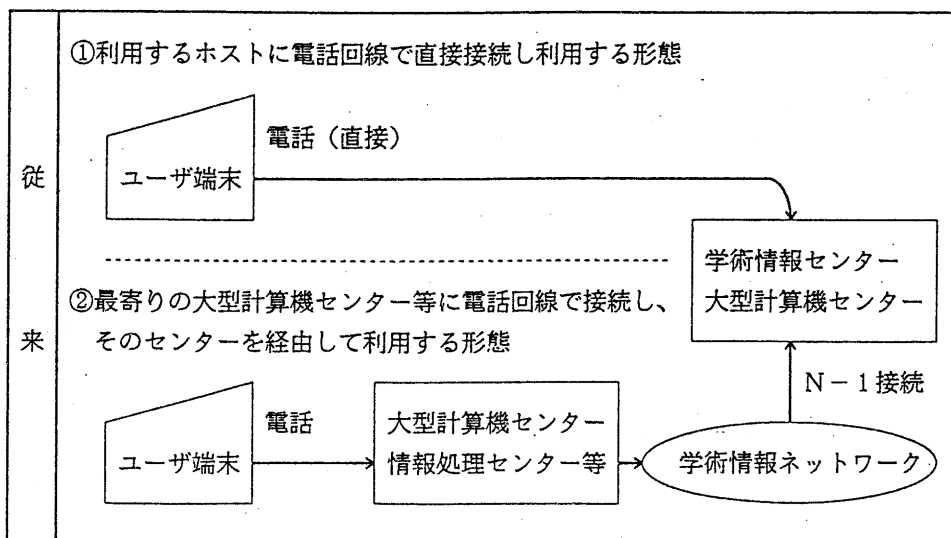
学術情報ネットワークは、全国の研究者、図書館等が学術情報センターの各種サービスや、大型計算機センター等のサーバホストを利用するためのインフラストラクチャーである幹線網として機能しているほか、医療情報 (国立大学附属病院)、高エネルギー物理学研究、宇宙理学等の特定研究グループによる情報交換にも利用されています。

このたび、この学術情報ネットワークへの電話回線からのアクセスポイントを全国 7 か所に設置しましたので紹介いたします。

電話回線を利用する場合の従来の利用形態と今回の利用形態の比較を下図に示します。

この新しい接続方式を利用することにより、学術情報ネットワークのアクセスポイントを利用した場合には、①の電話回線で直接接続する場合よりも通話料金が低廉となり、また、②の経由する大型計算機センター等の利用料金は不要となります。





このサービスは、今回が初めてであることから、当分は、利用の動向等を勘案して今後の整備について検討したいと考えています。また、技術動向等を踏まえてさらに多様なアクセス方法を整備していきたいと考えていますので、御要望等をお寄せください。

以下、利用するための準備や接続方法等について説明します。

## I. 利用準備

接続するための利用者側（端末側）のモデムとして、＜表1＞の通信規格のものが利用できます。この場合、端末側の通信パラメータを、＜表2＞のとおり設定してください。

<表1>モデムの通信規格

通信速度	通信規格	エラーフリープロトコル
300bps	CCITT V. 21	①なし
1200bps	CCITT V. 22	②MNPクラス5
2400bps	CCITT V. 22bis	③CCITT V. 42
4800bps 9600bps	CCITT V. 32	の選択が可能

<表2>端末の通信パラメータ

項目	設定値
データビット	7
ストップビット	1
パリティ	偶数

## II. 接続方法

- ①最寄りのアクセスポイント（<表3>アクセスポイント一覧 参照）に、端末側から電話をかけます。
- ②電話回線がアクセスポイントに接続されれば、「\*\*NACISIS-NET\*\*」が端末画面に表示されます。
- ③「\*\*NACISIS-NET\*\*」の表示後、利用するサーバホストの加入者番号（<表4>利用可能なサーバホスト一覧 参照）を入力します。
- ④利用するサーバホストとパケット交換網の接続が完了すると、「COM」が端末画面に表示されます。  
 （注）  
 「COM」以外に次の表示をする場合があります。  
 「CLR NP 67」：これは、加入者番号の間違いですから、番号を確認して再入力してください。 ⇒③へ  
 「CLR OCC 0」：これは、相手ホストが話中で接続ができない状態です。しばらくして、電話をかけなおしてください。 ⇒①へ
- ⑤「COM」表示後、サーバホスト用のTSS接続コマンドを入力してください。  
 ※サーバホスト用TSS接続コマンドは、ホストごとに異なりますので、各ホストの「利用の手引き」等でご確認ください。

<表3>アクセスポイント一覧

地区	設置場所	電話番号	回線数
福岡市	九州大学	092-632-5057	2回線
東広島市	広島大学	0824-22-9353	2回線
大阪市	大阪大学	06-878-9864	2回線
名古屋市	名古屋大学	052-781-5995	2回線
東京都	学術情報センター	03-5395-1285	2回線
仙台市	東北大学	022-268-7706	2回線
札幌市	北海道大学	011-746-0608	2回線

<表4>利用可能サーバホスト一覧

機関名	システム	加入者番号	備考
九州大学大型計算機センター	MSP	9816100	
大阪大学大型計算機センター	MVX2	9626500	
京都大学大型計算機センター	MSP UTS	7010004 7010003	
名古屋大学大型計算機センター	MSP	9515000	
東京大学大型計算機センター	VOS3	9311600	準備中
東北大学大型計算機センター	MVX2	9136200	
北海道大学大型計算機センター	VOS3	9115200	準備中
学術情報センター	情報検索 電子メール	9415300 9415200	

### Ⅲ. 切断方法

サーバホストのセッション切断コマンドを入力することにより、電話回線も含めて自動的に解放されます。

### Ⅳ. 接続例

以下の接続例は、①端末側の利用するモデムで、電話回線の接続にATコマンドが利用でき、②電話回線はダイヤル式で③単独回線（内線式の電話でない）の場合を想定しています。この条件が異なる場合は、発信コマンドやメッセージが異なります。

北海道地区から九州大学大型計算機センターを利用する場合の例

<u>ATDP0117460608</u>	札幌市のアクセスポイントに電話
CONNECT	モデム接続のメッセージ
***NACSIS-NET***	アクセスポイント接続のメッセージ
<u>9816100</u>	九州大学大型計算機センターの加入者番号入力
COM	ホスト接続のメッセージ
_____	ブレーク信号送出キー押下
_____	空リターン
JCET005 SYSTEM READY	ログオン要求メッセージ
<u>LOGON TSS ユーザ ID/パスワード</u>	
:	
:	
READY	
:	
:	
READY	
<u>LOGOFF</u>	セッション切断コマンド入力
CLR DTE 0	アクセスポイント解放のメッセージ

(ネットワーク掛 内線 2 5 4 2)