

75周年記念行事 役割分担

1. 5/18, 19 当日

説明要員(228室)

ホスター説明(新棟01-)

本間、丸山、工藤(交互に)

林、高橋、伊藤(〃)

井口版改定

コンピューター

システム

構成図 ⑪⑩

2. パネル作成

Post Script → 拡大

⑪① 材料設計 : テーカベース

⑪② シミュレーション : 沢村、水間、井口、丸山、川添
MD計算結果⑪①, 結果

大野

3. 分子模型

高橋、伊藤、⑪③ C₆₀ - 神山

⑪③ 説明パネル 林 ③ diamond と graphite

4. 6090 グラフックス

real time

志田、池田

胡

ホスター用パネル⑪④

ビデオ

目時、工藤

5. S/4 - 富士通(月)

6. 光デススク - 日立(金) (512室) 本間

川添

*

Car-Parrinello 法によるマイクロクラスタの計算機シミュレーション

作業内容とグループ分け:

$$-\nabla_i^2 - \sum_j \frac{1}{|r_i - R_j|} + \int \frac{\rho(r)}{|r_i - r|} dr + g(r_i) \frac{1}{2} \dot{r}_i^2$$

1. MDの基本ルールの構成

林さん 井口さん
沢村さん

$$\mu \ddot{\Psi}_i = - \frac{\delta E}{\delta \Psi_i^*} = \underbrace{F \Psi_i}_{\text{from } -\nabla_i^2} + \sum_j \underbrace{A_{ij} \Psi_j}_{\text{from } -\sum_j \frac{1}{|r_i - R_j|}}$$

$$M_I \ddot{R}_I = - \underbrace{\nabla_{R_I} E}_{\text{from } \int \frac{\rho(r)}{|r_i - r|} dr}$$

2. ラグランジの未定乗数 A_{ij} の決定

石原さん 水谷さん

$$\int |\Psi_i(t+\Delta t)|^2 d\vec{r} = 1$$

佐々木: 解説

3. 特異関数の数値積分

井口さん

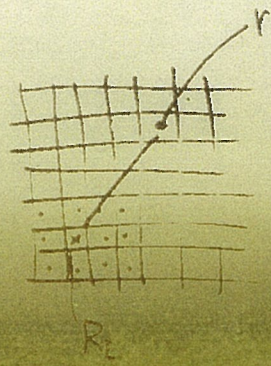
$$\int \frac{\rho(r)}{|r - R_i|^3} d\vec{r}$$

4. グラフィックス表示

池田 目時

5. 入力画面

和沢さん 志田さん 高橋さん 伊藤さん



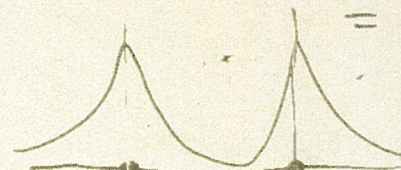
他
日

仮定: t での $\psi_i(t, \vec{x})$ がわかっている.

問題: $t+\Delta t$ での $\psi_i(t+\Delta t, \vec{x})$ を決める.

$$\frac{50 \times 50 \times 50}{2500} = 125000$$

$$125 \text{ KWord} \times 8 \text{ bits} = 1 \text{ MB}$$



$$\begin{aligned} \lambda \text{ 方向} \left\{ \begin{aligned} \psi_1 &= \phi + \phi \\ \psi_2 &= \phi - \phi \end{aligned} \right. \end{aligned}$$

$$\mu \ddot{\psi}_i = F \psi_i + \sum_j \Lambda_{ij} \psi_j$$

$$\star \mu \ddot{\tilde{\psi}}_i = F \tilde{\psi}_i$$

$$\mu \frac{\tilde{\psi}_i(t+\Delta t) - 2\tilde{\psi}_i(t) + \psi_i(t-\Delta t)}{(\Delta t)^2} = F \tilde{\psi}_i(t)$$

$$\sum_{i=1}^4 |\psi_i(r)|^2 = \rho(r)$$

$$\int |\psi_i(t+\Delta t)|^2 d\vec{r} = C_i$$

$\uparrow$
 $-D^2$
 $\searrow$
 Λ_{ij}

目録検索結果の処理

PBX

① カールで文献番号へ移動 → PF(M)
(1文献毎出力)

② 検索結果全文取出力 → PF(N)

③ 1文献1ページ出力 → PF(O)
(ページ指定出力)

④ 部数指定

⑤ 出力先指定(FAX, TEL NO)

⑥ 1-2ル/精細出力指定

① 出力文庫
指定
(任意数)

② 出力様式
指定

9. 部数
6. ページ
(始. 終)

③ 出力文庫
指定

④ 出力部
指定

SQL DB 検討会 (91.1.11)

1. SQL DATA 形式 (Ver 0.5)

- ① 項目名
- 1) DAB NAME:
- 2) DATA NO:
- 3) COPY Y/N:
- 4) Authors:
- 5) Journals:
- 6) Title:
- 7) Keyword:
- 8) PROPERTY FILED:
- 9) LABORATORY:
- 10) Years

0年: 検索可項目名

2. 業務分担 確認

SQL 設計: 12月~1月
コーディング: 2月~3月
テスト: 4月~5月

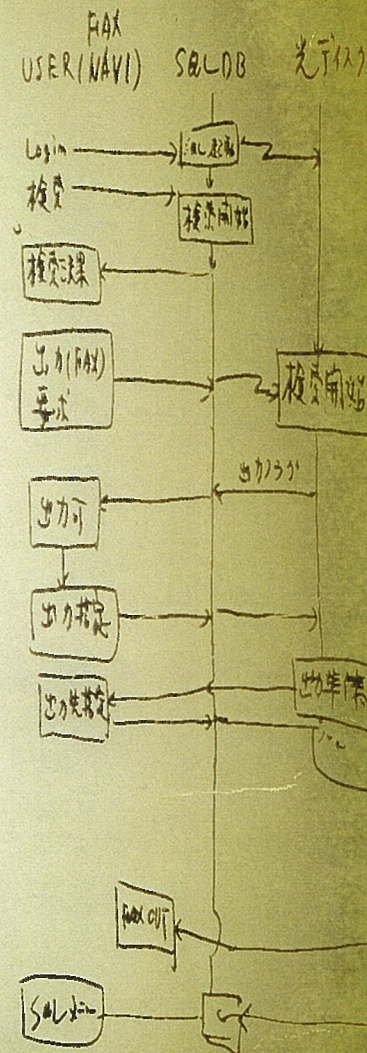
3. 費用見積

所要時間 = 32h

4. その他

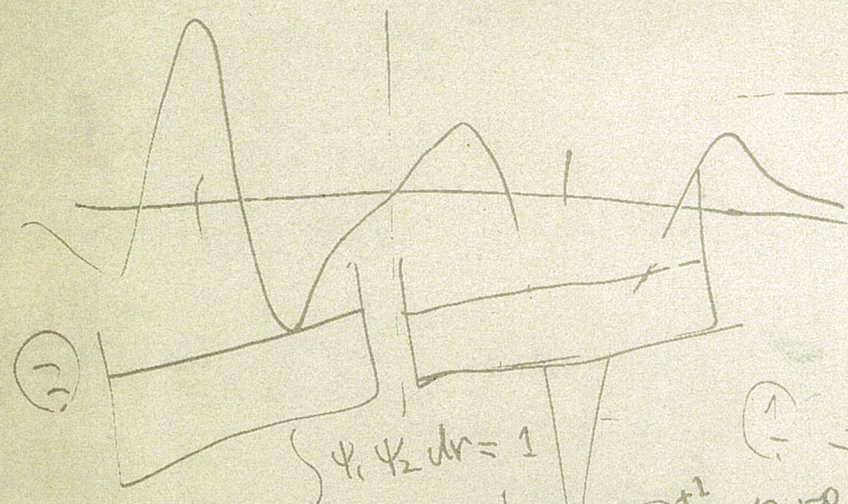
① 全研図書情報

9/14 4h ~ 10/1

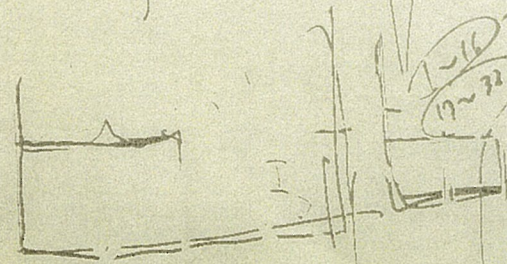


IBM/C のマニピュレータ
 文法編を見つけた方は
 本棚においておいて
 下さい 石原

27



$$\int \psi_1 \psi_2 dr = 1$$



$$\begin{matrix} 1 \sim 16 \\ 17 \sim 22 \end{matrix} \begin{matrix} +2 \\ -1 \end{matrix}$$

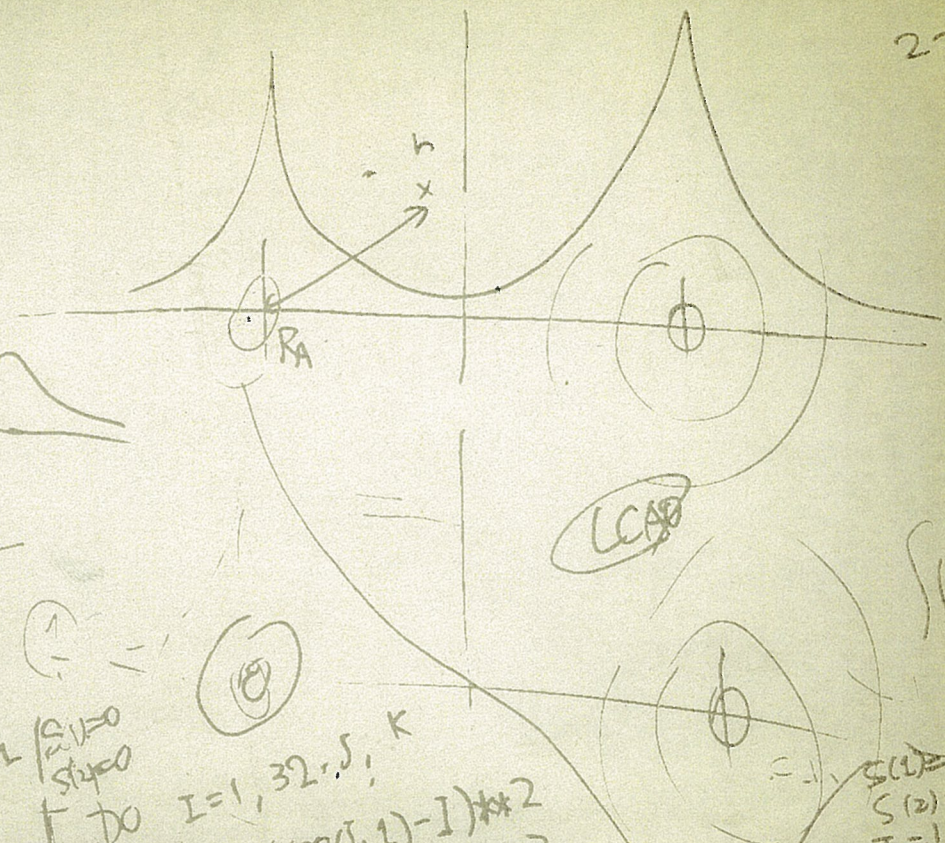
$$\begin{matrix} R=0 \\ S=0 \end{matrix}$$

DO I=1, 32, J, K
 L=1, 2
 $S(I) = \text{SORT}((AR(I,1)-I)**2 + (AR(I,2)-J)**2 + (AR(I,3)-K)**2)$
 ← is $R/P_1/P_2$

$$A(I) = \exp(-RA(I))$$

$$WF(I, J, K) = A(1) + A(2) / S(I) = S(I) + WF(1, I, J, K) * 2$$

$$WF(I, J, K) = A(1) - A(2) / S(I) = S(I) + WF(2, I, J, K) * 2$$



$$\int (\psi)^2 dr$$

$$S(I) = \text{SORT}(S(I))$$

DO I=1, 32, J, K
 DO L=1, 2
 $WF(I, J, K) = WF(I, J, K)$

$$S(I)$$

$$K$$

動かない

11→12 13

GDDM FVFS

終WF (E10.3, 1X)

RHO

全ENER(I) : ? I3, AR, F10.7

FORT.10

PHIGS

FORT.全

STEP. NOI
IS I3

林 #0

至急

FORT.終

(初 AR NA, ND, NOI)

動<

終WF

(E10.3, 1X)

FORT.10

計算後WF

"

" 13

全AR

F10.7

" 11

全ENER(I) :

定期

DR → FORT.16

GDDM
PHIGS

PLOTGR:

?

P.S → GDDM (10 → 16)

3.1) 2.1)

32 WF

(E10.3, 1X)

FORT.11

16

"

15

→ FVFS*