



Title	X線結晶解析のための最小二乗法プログラムHBLS-Vの改訂について
Author(s)	三木, 邦夫
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1987, 66, p. 101-112
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/65750
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

X線結晶解析のための最小二乗法

プログラムHBL S-Vの改訂について

大阪大学工学部応用精密化学科

三 木 邦 夫

1. はじめに

大阪大学大型計算機センターにライブラリープログラムとして登録されているX線結晶解析のためのユニバーサルプログラムシステム（通称UNICS-Osaka）は、主として大阪大学の結晶学の研究者によって書かれた一連のプログラムが、1973年7月にまとめられたものである。^{*}その後、センターの計算機がACOSシリーズのものに更新されたのに伴い、プログラムの移行と一部の改訂が行われた。^{**}このライブラリープログラムは現在も学内外の多くの研究者に利用されているが、なかでも名古屋大学工学部の芦田玉一教授（当時阪大蛋白研）の書かれた結晶構造の精密化を行うHBL S-V（ブロック対角近似最小二乗法及びフーリエ合成）は、最もよく使われてきたものの一つといえよう。広く用いられるプログラムだけに、その入力データ等の簡略化が望まれ、数年前からこれに手を加え使いやすくした改訂版を作り、利用に供してきた。この度、上記のライブラリープログラムの機能拡張として、この改訂版のプログラムを追加登録することとした。もちろん、FORTRAN77への書き換え、フリーコマンド形式の入力の採用など、改善すべき点が多く見うけられるが、このライブラリー全体の改訂ということを含めて、今後の問題としたい。上述のとおり、原作者は芦田教授であり、以下に示す使用法も大部分その原マニュアルを転用した。また、この改訂にあたって、入力データを簡略化するためには大阪大学蛋白質研究所の田中信夫博士のまとめられたサブルーチン集を、空間群に依存しないフーリエ合成を行うためには大阪大学工学部（当時蛋白研）の原田繁春博士の書かれたプログラムを使わせていただいている。以上の方々のご努力とご助力に謝意を表したい。また、このプログラムは大阪大学蛋白質研究所結晶解析研究センターにおいても使用できるので、ここでは両センターにおける使用法を示している。

2. プログラムの内容

HBL S-Vはブロック対角近似を使って、結晶構造の最小二乗法による精密化を行うもので、引き続きフーリエ合成をすることができる。従来のライブラリープログラムに収められていたものに比べて、フリーフォーマット形式で入力データが作れること、等価点、原子散乱因子、異常分

* 「結晶解析」ユニバーサルプログラムシステム、大阪大学大型計算機センター、1973年7月。

** 同上、第2版、1979年12月。

散項などの入力が必要なくなったことなどが、主な改良点である。以下にプログラムの特徴を示す。

1. 極小にする量は $\sum w (|F_o| - k|F_c|)^2$ である。
2. 全空間群に適用できる。ただし正方晶系より対称の高い結晶では二つのダミーサブルーチンを修正して用いなければならない場合もある。
3. 原子のパラメータは等方性温度因子をもつ原子では 4×4 の、また異方性のものでは 9×9 のマトリックスを割当てて精密化される。
4. 尺度因子はダミーの overall 温度因子と組にして 2×2 のマトリックスで精密される。overall 温度因子はこの 2×2 マトリックスによる修正量 ΔB_{22} と独自の 1×1 マトリックスによる修正量 B_{11} を組合せて、 $\Delta B = \Delta B_{22} - \Delta B_{11}$ を最終の修正量とし、この ΔB を全原子の B_i に上積みする。overall 温度因子は常に 0 で、この精密化だけのために導入したものである。
5. 異常分散効果も修正できる。
6. 三角関数は $2\pi/400$ 間隔の、また指数関数は 0.01 間隔の表をつくり、内挿法で計算する。
7. 最後の段階で分子内原子間距離と原子価角を自動的に計算し、結果の検討を容易にしている。これは入力された原子についてのみ行なわれ、他の非対称単位との間は考慮されない。標準偏差も計算される。
8. F_o と F_c の表はそのまま論文に使える形式で印刷される。印刷されるのは $|F_o|$ 、 $|F_c|$ (または $|\Delta F|$ も) と指数だけである。
9. 電子密度図と差の電子密度図を計算することができる。
10. weighting scheme は 5 種の方法が組みこまれている。またその方法の適・不適を検討するために $|F_o|$ の subset に対して $(\Delta F)^2$ と $w (\Delta F)^2$ の部分的平均値が印刷される。
11. 計算に必要な時間は反射数、原子数、等価点数に大体比例すると考えてよい。また等方性温度因子と異方性温度因子の場合では後者はほぼ 2 倍の CPU 時間が必要である。
対称心の有無も大きな差を与えく。なお複合格子の場合には底心、面心あるいは体心の原子は計算に含めず、得られた F_c を 2 倍あるいは 4 倍する。消滅則で消える反射を含めなければ正しい結果が得られる。

3. 入力データ

入力データは基本的にはフリーフォーマットで入力される。但し、一部のデータにはフォーマット付のものがあり、これは下に示す入力変数のあとに [...] で示されている。

1. LAST, ILST, IPUN, NTPA, NTPB, INCARD, IFSIG, NPOTP
2. TITLE [A80]
3. SPACEG

4. CELLA, CELLB, CELLC, ALPHA, BETA, GAMMA
5. NSF, NLS, NAN, NLH, NTBL, NITER, NWGT, NNON, NANOM, XRAY
6. SFOBS, SCALE, FMAX, FMIN, FWT, SLMX
7. FACTSC, FACTOB, FACXYZ, FACTBB, FACXYH, FACTBH
8. F-data sequence [6I1, A3, A1]
9. (JATOM(I), I=1, NTBL)
- 10.* (WWTG(I), I=1, 20)
- 11.+ atomic parameters [2X, A4, I6, 5F12.6]
[6F12.6]
12. INOT, IMOVE
- 13.* (NOT(I), I=1, 9)
- 14.* NOMOVE, (NFIX(I), I=1, 3)
- 15.+ F-data [5I3, 11F5.2]
[15X, 11F5.2]
16. FSCAL, DSCAL
17. NSX, NNX, NX, NSY, NNY, NY, NSZ, NNZ, NZ, IX, IY, IZ
18. ANG, MINUS, LEVEN, BIN, BCD

1 ~ 15 は最小二乗法のための、16 ~ 18 はフーリエ合成のための入力データである。

+印のデータ(11、15)は1の INCARD の指定により5番以外の機番に割り当て、独立に入力することもできる。

*印のデータ(10、13、14)は、それまでに入力されたデータで指定されたときのみ必要である。

4. データ内容

番号が○で囲まれているものは、必ずしも要するとはかぎらないデータを示す。

1. LAST, ILST, IPUN, NTPA, NTPB, INCARD, IFSIG, NPOTP

LAST 計算を続けて行うときに1とし、他は0 (通常0にする)

ILST $F_0 - F_c$ 表の印刷形式を指定する。

= 1 ΔF を印刷する。

= 0 1 頁に55列×8行の反射の $F_0 - F_c$ が印刷される。

< 0 全反射をほぼ等分して P 頁の表にするとき $-P$ 。

また、たとえば -5505 とすれば55列×5行(ほぼA4サイズ)になる。

IPUN 機番07にファイル出力する原子パラメータのサイクル数。たとえば、

IPUN = 3 ならば3サイクル後のものが出力される。0ならば出力しない。

NTPA 通常のフーリエ合成(電子密度計算)を行うとき1、不要なら0。

NTPB 差フーリエ合成(D合成)を行うとき1、不要なら0。

- INCARD = 0 すべての入力データが機番 05 より入力される。
 = 1 以下のように機番 (ファイル参照番号) が割りあてられる。
 05: 下記の 11 番、12 番以外を入力データ
 11: F -data (入力データ(15))
 12: 原子パラメータ (入力データ(11))
 13: R値、重価関数、スケール因子などがファイルに出力される。
- IFSIG = 0 入力データ(11)の F -data が $\sigma(F)$ を含まない。
 = 1 $\sigma(F)$ を含む。このとき、2行のデータで1組になる。
- NPOTP = 1 POTPプログラム*)を行うための、原子パラメータに対する標準偏差が機番 14 に出力される。
 = 2 最小二乗法の各サイクル間での原子パラメータの修正量が機番 15 に出力される。上記の標準偏差と合わせて、論文で記述が要求される Δ/σ の計算に用いることができる。
 = 3 上記のNPOTD=1および2の両方を出力する。

注) ここで説明した機番 (ファイルの割りあて参照番号) の種類については、8.プログラム使用法の項を参照されたい。

2. TITLE [A 8 0]
物質名などのタイトル (覚え書き)。
3. SPACEG
空間群 (たとえば、P 1, P - 1, P 2 1 / C, P B C A, R - 3, I - 4 3 D など)
4. CELLA, CELLB, CELLC, ALPHA, BETA, GAMMA
格子定数 $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$
5. NSF, NLS, NAN, NLH, NTBL, NITER, NWGT, NNON, NANOM, XRAY
NSF 構造因子計算に含める原子数。
NLS 精密化する原子数。
NAN NLSの中で異方性温度因子で精密化する原子数。
NLH 原子パラメータの shiftに4種類の修正因子 (damping factor)を使用するが、最初のNLH個の原子には入力データ(7)のFACXYZ、FACTBBが用いられる。残りにはFACXYH、FACTBHが割当てられる。重原子や水素を含む際に有効である。

*) 前述のユニバーサルプログラムシステム「結晶解析」第2版、P. 88 参照

NTBL 原子種の数 (原子散乱因子の種類)。

NITER サイクル数。

NWGT weighting scheme を指定する。入力データ(6)の FMAX、FMIN、FWTと(10)の(WWTG(I), I = 1, 20)もここで説明する。FWTはつねに $F_0 = 0$ の反射の w である。

= 1 $|F_0|$ の最大値を FMAX とし、 $|F_0|/FMAX$ の 0 から 1 までを 20 等分し、各段階の w を WWTG として、 $|F_0|/FMAX$ の小さい方から順にパンチする。他の方法が適切でない場合に有効である。

= 2 $|F_0| > 0 \quad w = 1$

$F_0 = 0 \quad w = FWT。$

= 3 $|F_0| > 0 \quad w = (\sigma_{cs}^2 + a|F_0| + b|F_0|^2)^{-1}$

$F_0 = 0 \quad w = FWT$

ただし $a = FMAX$ 、 $b = FMIN$ で、 σ_{cs} は回折計による測定で得られた計数の統計によるもので、(15)の F -data の入力データで与えられる。

(15)の説明を見よ。なおこの場合だけ σ_{cs} 、 $(\Delta F)^2$ などの統計から最小二乗法で FMAX、FMIN、FWT の最適値が印刷されるので、最初は例えば 0, 0, 0.2 とでもしておき、2 回目以後は印刷された値を用いればよい。

= 4 $F_0 = 0 \quad w = FWT$

$|F_0| \leq F_m \quad w = 1$

$|F_0| > F_m \quad w = \{1 + a(|F_0| - F_m)\}^{-1}$

ただし $F_m = \text{AINT}(FMAX)$ 、 $a = FMIN / \{100(FMAX - F_m)\}$ 、

$FWT = \delta / \delta_0$ 、 $FMIN = \delta / (F_m - F_n)$ 、 $FMAX = \text{INT}(F_m) + 0.01\delta$

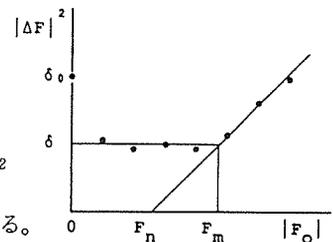
F_m 、 F_n 、 δ 、 δ_0 は右図を参照。

= 5 $F_0 = 0 \quad w = FWT$

$|F_0| \leq FMAX \quad w = 1$

$|F_0| > FMAX \quad w = (FMAX / |F_0|)^{-2}$

これは Hughes の方法で $FMAX = 4 F_{min}$ である。



(注意) ここで説明した値はすべて計算に使っている F_0

のスケールでの値である。

NNON $F_0 = 0$ の反射を計算から除くときに 1、含めるときは 0 とする。また 2 あるいは 3 にすると、それぞれ $F_0 < 2\sigma(F)$ 、 $F_0 < 3\sigma(F)$ の反射を計算から除く。

- NANOM 異常分散項 ($\Delta f'$ 、 $\Delta f''$)を考慮して精密化するとき1、しないとき0。
- XRAY 使用したX線の対陰極名。CUあるいはMO。現在、これ以外は使用できない。
6. SFOBS, SCALE, FMAX, FMIN, FWT, SLMX
- SFOBS F_0 を絶対尺度にするスケール因子。
- SCALE F_0 にかけるスケール因子で通常は1。複合格子で底心、体心では2、面心では4とする。
- FMAX }
 FMIN } (5)を見よ。
 FWT }
- SLMX 計算に含める反射の $\sin \theta / \lambda$ の最大値。
7. FACTSC, FACTOB, FACXYZ, FACTBB, FACXYH, FACTBH
 パラメータの shift に対する修正因子 (damping factor)
- FACTSC 尺度因子に対するもの。0を使うと尺度因子が固定される。
- FACTOB overall の温度因子に対するもの。
- FACXYZ 始めのNLHケの原子の座標値に適用する。
- FACTBB 始めのNLHケの原子の温度因子に適用される。
- FACXYH 残りの原子の座標値に適用する。
- FACTBH 上記の原子の温度因子に適用する。
8. F - data sequence [6 I 1, A 3, A 1]
 N1, N2, N3, N4, N5, N6, NKL, HIND
 F - data の配列の順を示すもので、次の6種類だけがある。適当なものを選んで第1~10カラムに次のとおり与える。
- 3 2 1 4 5 6 H, KL ①
- 2 3 1 4 5 6 H, KL ②
- 3 1 2 4 6 5 H, LK ③
- 2 1 3 4 6 5 H, LK ④
- 1 3 2 6 4 5 K, LH ⑤
- 1 2 3 6 4 5 K, LH ⑥
- 最初の3個の数字だけに着目してもっとも速く変る指数を1、おそいのを3とする。例えば②は1がもっとも速く、次がんで、もっともおそいのがんである。
9. (JATOM(I), I = 1, NTBL)
- 原子の種類 (元素記号)。NTBL個入力する。たとえば、NTBL = 5でPd、P、F、C

は $-1 \square 0 \square 0 \square 0$) つけておくとよい。この方法は他の何らかの理由でパラメータを固定したい場合にも応用できて、対応するマトリックスの行と列を 0 とする。

⑭. NOMOVE, (NFIX(I), I = 1, 3)

(12) の IMOVE = 1 のときのみ必要である。

P_1, P_2, P_m のようにある軸の原点に任意性があり、特定の 1 つの原子の座標を入力したパラメータのままに固定しようとするときに用いる。この場合は (13) と違って修正後全原子を平行移動する。

NOMOVE 基準に用いる原子の番号。

NFIX(I) I = 1, 2, 3 が x, y, z に対応し、固定するとき 1 にする。

例えば NOMOVE = 2, NFIX(I) = 1, 1, 0

であれば 2 番目の原子の x, y 座標が固定されることを示す。

15. F-data

(注意) (1) の INCARD = 1 のとき機番 11 から入力される。

JR, KR, LR, INDEX, INC, (OBS(I), I = 1, 11) (5 I 3, 11 F 5.2)

(SIG(I), I = 1, 11) (15X, 11 F 5.2)

JR, KR, LR そのカードの OBS(1) の h, k, l を示す。

INDEX, INC 一行のデータの中では 1 つの指数だけが一定値 (INC) だけ増加していく。

INDEX は変化する指数が h ならば 1、 k, l はそれぞれ 2、3 で示す。

INC は任意であるが、0 ならば 1 と設定される。

OBS(I) 11 個またはそれ以下の観測値 F_0 を順に入力する。OBS(J) の指数は INDEX = 2 ならば、JR, KR + INC × (J - 1), LR である。1 行の中のデータの終りは 999 で示す。ただし、もし OBS が 11 まであれば当然不要である。

F-data 全体の最後は JR = 100 で示す。

SIG(I) 上記の OBS(I) に対応する $\sigma(F)$ のデータで、(1) の IFSIG = 1 の場合にも必要である。すなわち、この場合には OBS(I) のデータとは常に 2 行で対になって用いられる。ただし、JR = 100 のデータは最後に 1 行あればよい。

16. FSCAL, DSCAL

FSCAL フーリエ合成のためのスケール因子 (1) の NTPA = 1 のとき有効)

DSCAL 差フーリエ合成のためのスケール因子(1)のNTPB=1のとき有効)

17. NSX, NNX, NX, NSY, NNY, NY, NSZ, NNZ, NZ, IX, IY, IZ

NSX, NNX, NX, NSY, NNY, NY, NSZ, NNZ, NZ

フーリエ合成の領域を示す。NSX, NNX, NXは α 軸についての計算すべき領域を示す。NXが分割数、NSX, NNXは計算の開始点と終了点を示す。例えば15, 30, 60ならば60等分して15/60から30/60までを計算する。他の軸についても同じである。

IX, IY, IZ

IX(よこ)、IY(セクション)、IZ(たて)で1……X、2……Y、3……Zに対応。分割数は19までの素数の積で表わされ、偶数でなければならない。

18. ANG, MINUS, LEVEN, BIN, BCD

ANG フーリエ合成図を出力するときの斜交角。

ANG = 90.0のときは直交の図となり、ANGの最大は140°まで。

MINUS \leq MINUSの値はフーリエ図上でブランクに置かれる。

D合成などで何もしないときは、-10とするとよい。

LEVEN フーリエ図を斜交に打ち出すとき、ブランク数を偶数にしたいときは0、計算どりのブランク数でよいときには1にする。

フーリエ図上に10以上の値が多くあるときには0、そうでないときには1にするるとよい。

BIN 計算したフーリエ図をファイルに書き込むための機番を指定する。

書き出さないとき(通常)は0とする。

BCD LP用紙にフーリエ図を打ち出すときは6(通常)、LP用紙への出力を行わないときには0。

5. 主な出力データ

1. ほとんどの入力データ。また、入力データから導かれた等価点、原子散乱因子など。

2. パラメータの標準偏差。

3. パラメータの修正量。

4. $\Sigma k|F_0|$, $\Sigma|F_C|$, $\Sigma|DF|$, R , $\Sigma w(kF_0)^2$, $\Sigma w(kF_0 - F_C)^2$, R_2 .

5. $(DF)^2$, $w(DF)^2$ の部分的平均値、およびNWGT = 3ならFMAX, FMIN, FWTの最適値。

6. $F_0 - F_C$ の表。100 $\leq F_0$, $F_C < 1000$ の F_0 と F_C も印刷できるようにした。なおSFOBS $\times F_0$ とSCALE $\times F_C$ の10倍が印刷される。

7. 分子内原子間距離、原子価角およびその標準偏差。
8. 新しいパラメータ、異方性温度因子を用いている場合、それが positive definite であるかどうかの判定。なお、positive definite でない原子が出現した場合、精密化はそのサイクルで中断される。
9. 指定されれば原子パラメータのファイル出力。
10. 指定されれば R 値、スケール因子などの情報、パラメータの標準偏差およびパラメータの修正量のファイル出力。
11. 電子密度図および差フーリエ合成による図。指定されればこれらの図のファイル出力。

6. 制限・注意

1. 反射数 15,000
 原子数 (NSF) 150
 原子種 (NTBL) 10
 等価点の数 48 (現在、これは入力の必要はない)
2. 正方晶系以上の対称をもつ場合には、現在ダミーの XADJS、XDUMM のサブルーチンを修正して必要とする場合がある。
3. 精密化の進展に伴って、weighting scheme を変えたり、FMAX などの数値を変える必要が生じるので注意を要する。
4. d/σ 等を計算するとき用いられる原子パラメータの標準偏差および修正量のファイル ((1) の NPOTP $\neq 0$ のときに出力される) のフォーマット形式は次のとおりである。
 - a. 原子パラメータの標準偏差 (B(I))機番 14
 (B(I), I = 1, NQ) (NLS 行出力される) [9 F 8.6]
 NQ は等方性温度因子の場合に 4、異方性温度因子の場合 9
 - b. 原子パラメータの修正量 (AA(I))機番 15
 CELLA, CELLB, CELLC, ALPHA, BETA, GAMMA (格子定数)
 ... [4 X, 6 F 9.4]
 ATNAME, (AA(I), I = 1, NQ) (NLS 行出力される) [A 4, 9 F 9.6]

7. 入力データの例

以下に示す例では (1) の INCARD = 1 の場合で、入力データは 3 つのファイルに分けられて読み込まれる (機番 05、11 および 12)

1. (1)、(15) 以外の入力データ機番 05

```

          10          20          30          40
.....
(1)  0 0 1 1 1 1 1 3
(2)  *** REFINEMENT OF PALLADIUM COMPLEX ***
(3)  PBCA
(4)  18.046 21.189 21.643 90.00 90.00 90.00
(5)  91 91 61 61 5 1 3 3 0 MO
(6)  0.71906 0.1 0.00653 0.00009 0.0 0.60
(7)  1.0 1.0 1.0 1.0 0.1 0.1
(8)  213465H,LK
(9)  PD P F C H
(12) 0 0
(16) 50.0 200.0
(17) 0 30 60 0 30 60 0 30 60 1 2 3
(18) 90.0 1 1 0 6

```

上の例では入力データ(10)、(13)、(14)は必要がないため省略されている。

2. 入力データ(11).....機番 12

```

          10          20          30          40          50          60          70
.....
PD      1      1.000000      0.185931      0.113452      0.091447      0.
0.002442      0.001687      0.001780      -0.000122      0.000017      -0.000153
P1      2      1.000000      0.248218      0.070930      0.176847      0.
0.002154      0.001964      0.001500      -0.000370      -0.000193      -0.000269
      :
      :
H65     5      1.000000      0.271490      -0.145153      0.087855      3.796653
H66     5      1.000000      0.215733      -0.054003      0.065521      2.068322

```

機番 07 から出力される新しい原子パラメータのファイルもこのフォーマットに従っている。

3. 入力データ(15).....機番 11

```

          10          20          30          40          50          60          70
.....
0 2 0 2 2 2106 3667 4763 2481 3779 1775 1739 2101 2854 626 1575
0 2 0 2 2 28 49 63 35 50 29 31 36 44 40 36
0 24 0 2 0 41499999
0 24 0 2 0 63999999
2 0 0 2 1 5318 5373 3948 102 2934 662 2562 2634 1987 1820 1165
2 0 0 2 1 71 71 52 57 39 19 35 36 30 28 24
      :
      :
4 1 25 2 1 569 346 257 116 53999999
4 1 25 2 1 45 64 85 161 46999999
5 1 25 2 1 125 186 099999
5 1 25 2 1 171 99 099999
100

```

8. プログラム使用法

このプログラムは大型計算機センターのほか、蛋白質研究所結晶解析研究センターにおいても使用できる。以下、両センターでの使用法を示す。プログラムはCARDINサブシステムを用いたリモートバッチジョブで使用することができる。

1. 大型計算機センターでの使用法

JCLの例を下に示す。ジョブクラスはE、A、B、Cのいずれでも可能であるので、演算時間によって0010行の\$JOB文のジョブクラスを指定し（例ではAクラス）、Aクラスより長いCPU時間を必要とする計算では、0020行の\$CPROC文でCPU時間の指定を行う（Bクラスの場合、\$:CPROC:UNICS/HBLS,,25）。デフォルトはAクラス用の5/100hrである。

```
0010$:JOB:A60000;A$PASSWORD,A
0020$:CPROC:UNICS/HBLS
0030$:PRMFL:05,R,S,LIBSOURCE/UNICS/HBLS/HBLSDATA
0040$:PRMFL:11,R,S,LIBSOURCE/UNICS/HBLS/FDATA
0050$:PRMFL:12,R,S,LIBSOURCE/UNICS/HBLS/APIINPUT
0060$:PRMFL:07,W,S,A60000/TEST/AOUTPUT
0070$:PRMFL:13,W,S,A60000/TEST/RWP
0080$:PRMFL:14,W,S,A60000/TEST/ESD
0090$:PRMFL:15,W,S,A60000/TEST/DELTA
0100$:ENDJOB
```

上の例では入力データ(1)のINCARD=1の場合で、機番05、07、11~15の合計7つのファイルが入出力に用いられている。

テスト用入力データが“LIBSOURCE/UNICS/HBLS”のカタログの下に登録されている。

2. 蛋白質研究所結晶解析研究センターでの使用法。

ジョブクラスは190K必要であるため、E、B、Cクラスで使用できる。以下に示すJCL例はBクラスの場合だが、ジョブクラスによって0030行の\$LIMITS文のCPU時間の指定を変えることが必要である。

```
0010$:JOB:6092000000$PASSWORD,B
0020$:PROGRAM:RLHS,NAME/HBLS
0030$:LIMITS:25,190K,,12000
0040$:PRMFL:H*,R,R,CRYST/LS/HBLSRUNF
0050$:FILE:08,F1S,30L
0060$:FILE:09,F2S,30L
0070$:PRMFL:05,R,S,6092000000/TEST/HBLSDATA
0080$:PRMFL:07,W,S,6092000000/TEST/AOUTPUT
0090$:PRMFL:11,R,S,6092000000/TEST/FDATA
0100$:PRMFL:12,R,S,6092000000/TEST/APIINPUT
0110$:PRMFL:13,W,S,6092000000/TEST/RWP
0120$:PRMFL:14,W,S,6092000000/TEST/ESD
0130$:PRMFL:15,W,S,6092000000/TEST/DELTA
0140$:ENDJOB
```