

Winmostar: 分子計算支援ソフトウェアの開発

初心者から専門家まで、計算化学の標準ソフト

1. 背景

計算化学は、今日の様々な産業を支える最先端の基盤技術として重要性を増している。分子・材料設計、解析のツールとして、計算化学は専門家、理論家のみならず実験家にも広く使われるようになってきている。

しかし、今日の大学・高専の化学教育現場や、中小企業の多くの研究者は、まずどんなプログラムを使用していいかわからず、わかったとしても高価なプログラムには手が出ない場合が多い。

2. 目的

既開発済の WinmostarV2 をベースにして改良し、より高機能でユーザーフレンドリーな分子計算支援 GUI ソフト WinmostarV3 を開発することを目的とした。

3. 開発の内容

3.1 概要

開発言語は Delphi をメインにして、一部は Fortran を用いて、Windows ネーティブで動作する GUI アプリケーションを開発した。

ユーザーフレンドリーで使い易い特長を活かしたままで、新機能の実装によって、実際の研究開発用としても広範囲に利用可能なプログラムを開発することができた。

3.2 動作環境

適応機種: PC/AT 互換機

CPU: Pentium® III 500MHz 以上を推奨

OS: Windows98, Me, NT4.0, 2000, XP

メモリー: 64MB 以上

ハードディスク容量: 10MB 以上の空き容量(インストール時)

3.3 開発項目

(1) 表示機能の改善

Winmostar の標準の分子表示は、2D 表示を基本にした疑似 3D の立体棒球表示である。陰面消去は Z ソート法を用い、球では 3 階調、棒では 2 階調で立体感を表わしている。棒が球の手前で接する輪郭は半楕円であるべきところを、半円で代用してプログラムの簡易化と表示の高速化を図っている(図1)。

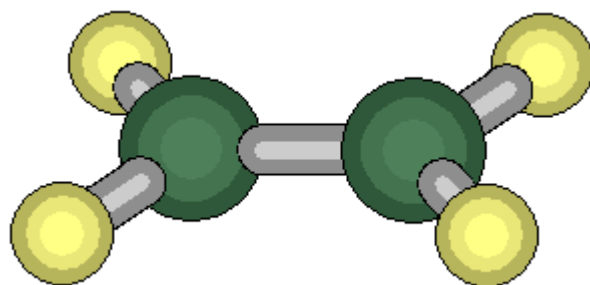


図1 疑似 3D の棒球表示

(2) 簡易分子力場法を用いたクリーン(構造緩和)機能

分子軌道計算の初期構造として、簡易的な分子力場法を用いて構造の歪みを最小化しておくことで、構造最適化の安定化と高速化が図れる。既に開発済の分子力場プログラムの修正と、原子種毎の結合距離、結合角、二面角のパラメータの追加・調整を行った。

(3) VRML出力機能

2D表示で困難なところはVRMLで出力し、VRMLビューワを利用するようにした。分子構造と分子軌道、電子密度、静電ポテンシャル等のVRML出力に対応し、透明表示を可能にした。さらに、等値面でのMOや静電ポテンシャルのマッピング表示を実装した(図2)。

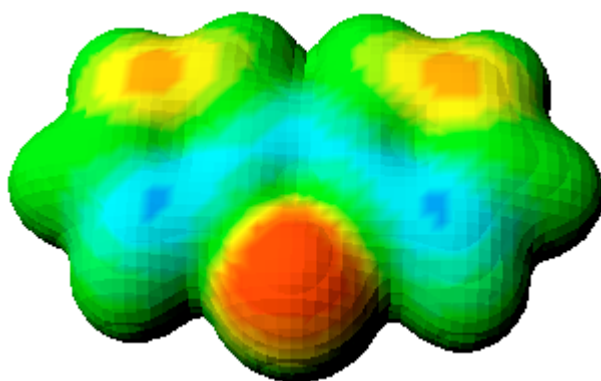


図2 シェンゾチオフェンの電子密度等値面にHOMOマッピング(VRML)

(4) CIF形式データに対応

X線結晶構造データで用いられるCIF形式データに対応することで、X線結晶構造データを分子軌道法の初期構造データとして利用可能にした。分子内対照性を用いたデータ形式には、Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) のMercuryにデータを渡して起動するようにした。

(5) Z-Matrixの原子指定順序の最適化

Z-Matrixでの最適化では、原子指定順序が適切でないと構造最適化に時間がかかったり、発散したりすることがある。新規に開発した方法で原子指定順序の最適化することで、構造最適化を安定化させることが出来た。

(6) 10万原子に対応

2000原子の制限を10万原子まで拡張し、合成高分子の分子動力学シミュレーションの表示や生体高分子の表示も可能にした。分子座標の配列に動的配列を用い、読み込む分子の大きさによって自動的に配列を拡張するようにした。

(7) Gaussian03のインターフェイス改善

Gaussian03(世界で最も広く利用されている非経験的分子軌道法ソルバー)のデータ作成、計算結果表示機能を改善した。VRML機能を利用して、等電子密度面に静電ポテンシャルや分子軌道のマッピングを可能にした。図2は、Gaussian03の計算結果である。

(8) GAMESSとのインターフェイス改善

最新版のPC-GAMESSとWinGAMESSの起動が出来るようにし、分子軌道表示にも対応した。VRML機能を用いて表示したスチレンのHOMO軌道を図3に示す。

Gaussian と MOPAC (世界で最も広く利用されている半経験的分子軌道法ソルバー) についても、同様な表示が可能である。また、構造最適化の構造変化をアニメーション表示することも出来る。これは、表示機能の改善 (ダブルバッファリング) によって可能になった。

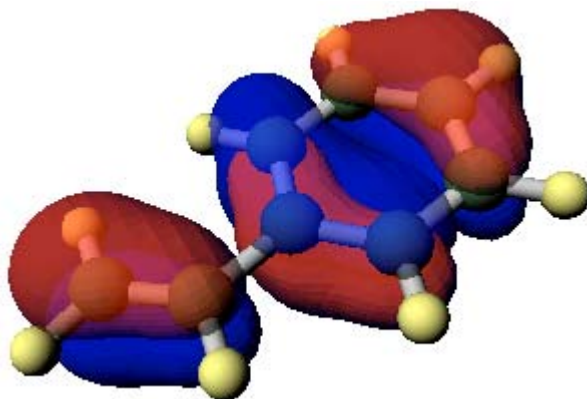


図3 スチレンの HOMO 軌道 (VRML)

(9) 水素自動付加

当初の予定には入っていなかったが、水素のデータが不足している PDB 形式データに水素を自動付加する機能を実装した。結合長等の構造情報を用いて、適切な付加水素の数と位置を推定している。この機能は、生体分子の分子軌道法計算に広く応用できる。

(10) 紫外・可視吸収スペクトル計算

これも当初の予定には入ってなかったが、日本コンピュータ化学会に登録されているプログラム P083 (CNDO/S 法: Fortran) を改良してコンパイルし、実行形式を同梱した。計算結果のスペクトル表示機能も実装した(図4)。

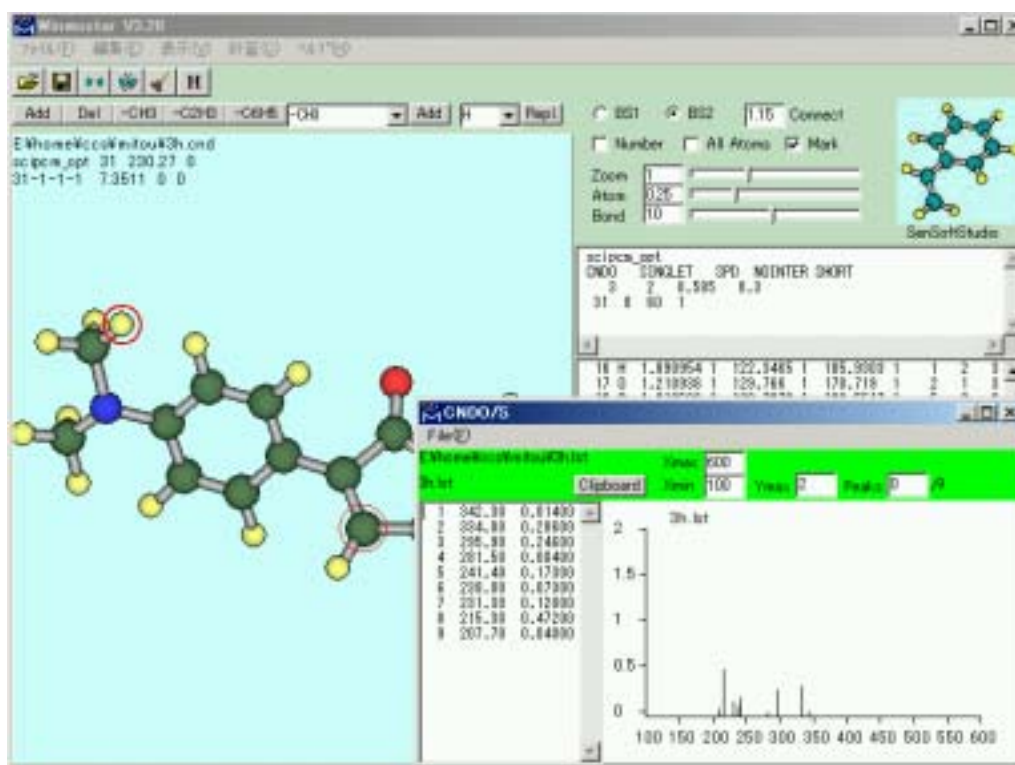


図4 紫外・可視吸収スペクトル表示

(11) 国産ソルバーのGUI作成

分子軌道法 ABINIT-MP (平成13年度末踏ソフトウェア創造事業「フラグメント分割法に基づいた並列分子計算プログラムの開発」と、分子動力学法のGUI機能に対応した。分子動力学法の対応として、10万原子表示とアニメーション表示機能を開発した。

(12) Linux 対応

Windows の GUI から Linux 計算サーバーの分子計算プログラムを起動する、リモートジョブ制御方式を実装した。計算プログラムとして Gaussian98/03 に対応した。ジョブ管理ツール (LSF) にも対応し、計算サーバーの負荷状況の確認、ジョブの投入、実行状況の確認、ジョブのキャンセル等が、図5の画面で制御できる。

また、wine を用いることで、Linux 上で GUI が稼動することも確認した。

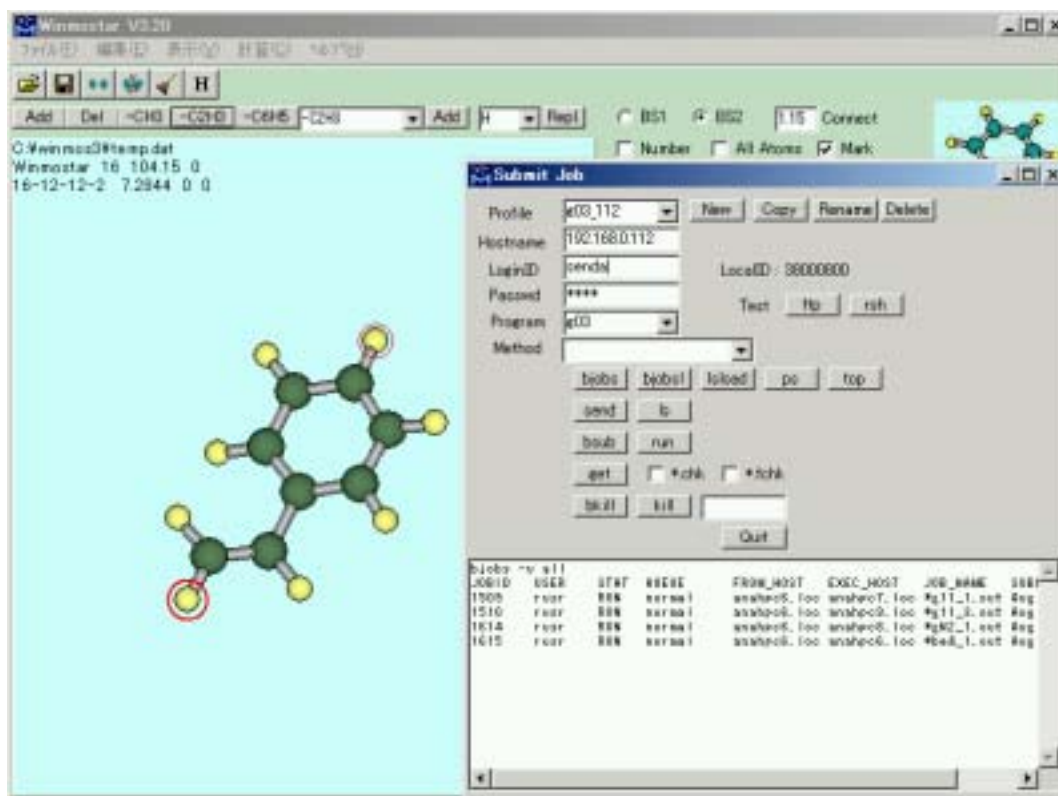


図5 リモートジョブ制御画面

(13) 他 GUI ソフトとの親和性を向上

他の国産フリーソフトとの親和性を高めるように、座標形式の追加と Winmostar の起動オプションを追加した (Facio, MolWorks, Molda)。

4. 従来の技術(または機能)との相違

Winmostar の特長は、「簡単」「軽い」「きれい」の3Kである。

操作方法は単純で、直感的に操作でき、初心者でも「簡単」な操作性を実現している。

多くの分子モデリングソフトは OpenGL 等の3D ソフトを基本にすることが多いが、Winmostar では、2D で Windows ネーティブコードで動作するので、非常に「軽い」。

「きれい」は表示は当然であるが、レジストリへの書込みを行わないことである。インストールは単にファイルをコピーすることであり、MO や USB メモリーの中に入れておいて実行することが可能である。

5. 期待される効果

同種のソフトウェアは高価なものが多い。フリーで提供することで、大学等での計算化学の教育用ツールとして広く利用できる。公的機関や企業の研究用途としても充分利用できる機能を有しており、計算化学分野における標準ソフトとして広く普及することが期待される。

6. 普及(または活用)の見通し

すでに広く使われている実績がある。Winmostar 公式ページだけでなく、Vector からのダウンロードもある。大学等での教育用には再配布も禁止していないので、実数の把握は困難。大学や公的研究機関から、講義用に使用したという連絡を受けることもある。

既に数万件の利用実績があると推定できるが、計算化学の標準ソフトとして、さらに広く利用される可能性がある。

7. 開発者名(所属)

千田範夫(出光興産株式会社 中央研究所)

(参考)Winmostar 公式ページ(開発者URL)

<http://winmostar.com/>