

分子計算支援システム Winmostar の開発 (3)

Delphi への移植

千田 範夫

出光興産 (株) 中央研究所、解析技術室(〒299-0293 千葉県袖ヶ浦市上泉 1280)

【緒言】

Winmostar は、分子のモデリングから分子軌道計算、計算結果の表示までを Windows 上で実現するソフトウェアである [1] [2]。これまでの開発言語は VB(VisualBasic)であったが、全面的に Delphi への書換えを行った。これによって、実行速度の向上等の効果が得られた。

【方法】

VB は、Windows プログラミングの面倒な部分を隠蔽して、イベントドリブン型のプログラムを簡単に作成できるので、極めて生産性の高い開発ツールである。しかし、実行速度が遅いことや、実行時に DLL や OCX を必要とし、バージョン同士の互換性が無いという問題がある。

Delphi は、すべてのコンポーネントを静的にリンクして、単体で実行可能な exe ファイルを生成するので、実行時にランタイムは不要である。Java への書換えも検討したが、Java ランタイムを必要とすること、実行速度がやや遅い点、VB からの書換えの容易さ、の点から Delphi を選択した。

Delphi の開発環境は VB と良く似ており、ObjectPascal の厳格な文法に慣れさえすれば、移行は容易である。VB から Delphi への書換えを行うには、インターネット上に参考になるページが多い [3]。

Delphi の最大の欠点はマイナーなことで、解説書は少なく入手困難である。しかし、その欠点を克服した VB からの転向者が、Delphi のすばらしさを賞賛している個人のホームページが多く、VB を書き換えるためのノウハウが数多く公開されている。

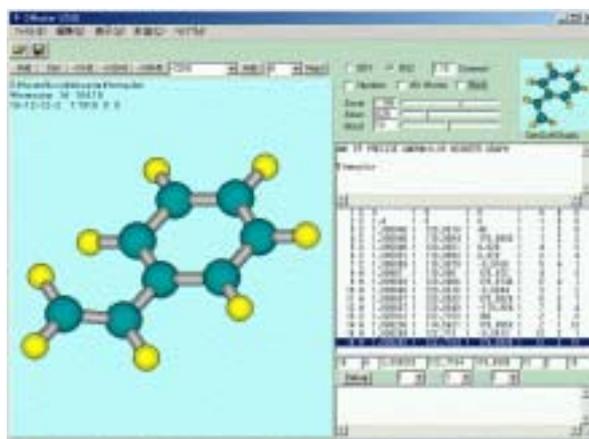
【結果】

VB 版とほぼ同様な機能の Delphi 版を作成することができた。

VB 版と Delphi 版での実行速度の比較を Celeron1.2GHz のマシンで行った。8400 原子の分子構造データ入力、Z-Matrix 変換、棒球モデル表示に、VB 版では 200 秒を要したが、Delphi 版では 18 秒で終了した。

Delphi 版ではランタイムが不要な単体実行 exe となり、これこそフリーソフト、と呼ぶにふさわしいものになった。インストールは単にファイルのコピーであり、レジストリへの書込みを行わないので、MO や USB メモリーから実行することも可能である。

OS は Windows95,98,Me,NT,2000,XP に対応し、<http://winmostar.com/>で公開中。



参考文献

[1] 千田 範夫、分子計算支援システム Winmostar の開発、日本コンピュータ化学会 2002 秋季年会、2002 年 11 月

[2] 千田 範夫、分子計算支援システム Winmostar の開発 (2)、日本コンピュータ化学会 2003 秋季年会、2003 年 10 月

[3] Delphi Acid Floor(<http://www.wvlnk.com/boheme/>)等