

計算化学統合環境 Facio の開発

末永 正彦

九州大学理学院化学部門 (〒812-8581 福岡市東区箱崎 6-10-1)

【緒言】

近年、商用の計算化学統合環境の価格が高くなってきたため、教育用としてあるまとまった数を揃えようとする場合や個人で購入しようとする場合、経済的な理由で困難なことがある。また、商用のソフトであっても操作に不合理な部分があったり、必要な機能がなかったり、グラフィックスの質がいま一つであったりする。そこで、このような問題を解決するためフリーの分子軌道法プログラムである PC GAMESS を中心にした計算化学統合環境 Facio を開発を始めた。開発にあたっては、「完全にフリーなソフトウェアで尚且つ商用のソフトを越えるもの」を目指し、これまでに、OpenGL による 3D グラフィックスを使った分子モデルの表示、対話的なモデルの構築、分子力学計算ソフトの TINKER と連携したペプチドや核酸のモデリングおよび MM3 計算の自動化、PC GAMESS の計算で得られる分子軌道、静電ポテンシャル、電子密度、赤外・ラマンスペクトルのシミュレーションなどの可視化や基準振動のアニメーション表示を行うことのできるソフトを作ることができた。

今回報告するのは、昨年の年会以降に実装した溶媒排除表面への静電ポテンシャルのマッピングや MCSCF 計算用の GUI、さらに WinGamess と Gaussian に対するインターフェイスの開発についてである。

【結果】

(1) 溶媒排除表面への静電ポテンシャルのマッピング

MSMS で求めた溶媒排除表面上での静電ポテンシャルの値を色分けメッシュ表示する機能で、Fig.1 のようなものになる。

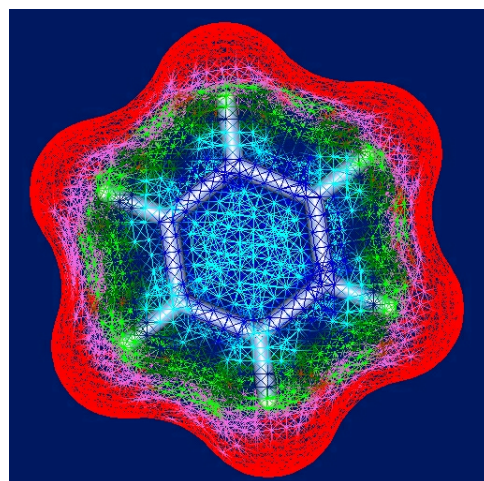


Fig. 1 ベンゼンの溶媒排除表面上にマッピングした静電ポテンシャル

(2) MCSCF 計算用の GUI

例えば DRT による MCSCF 計算に必要なパラメータの間には、 $2 \times (\text{NMCC} + \text{NDOC}) + \text{NAOS} + \text{NBOS} + \text{NALP}$ という関係があるため、これらのパラメータの値を電子数に応じて適切に設定しなければエラーになる。そこでこれらの値を自動的に設定したり、一つのパラメータを変化させたとき上の関係式を満たすように他のパラメータを自動的に変更する GUI を作成した。

(3) WinGamess に対するインターフェイス

WinGamess は、Windows で動くアプリケーションであるがその入力ファイルの改行コードは、Windows の CR/LF (Carriage Return/Line Feed) ではなく Unix 系の LF (Line Feed) になっている。また、起動に関しても環境変数等を設定する独自のスクリプトを実行して行うなど、PC GAMESS に比べてやや複雑である。このような改行コードや起動スクリプトの実行に関して、ユーザーが全く意識しなくても計算ができるようにインターフェイスを作成した。この他、同じ GAMESS でも PC GAMESS と WinGamess では出力フォーマットが微妙に異なる。いろいろな計算の出力を検討した結果、15ヶ所ほど異なることがわかったのでそれらに対応した。また、PC GAMESS と WinGamess では計算のデフォルト値が異なることがある。例えば MCSCF 計算の CISTEP が、PC GAMESS では GUGA であるのに対し、WinGamess では ALDET であるので、GAMESS の種類に応じ、CISTEP とこれに付随する他のパラメータが自動的に設定されるようにした。

(4) Gaussian に対するインターフェイス

以下に列挙するような機能を実装した。(e)と(f)の機能については、著者の知る限り、GaussViewを始めとする他の商用ソフトにもまだない。

- (a) Gaussian の入力ファイル作成と起動のための GUI (Fig.2)
- (b) 最適化構造の表示、CUBE データ (MO、静電ポテンシャル、電子密度)、IRC データの可視化
基準振動のアニメーション表示と赤外・ラマンスペクトルのシミュレーション
- (c) MO 準位のグラフィカルな表示
- (d) Gaussian Utilities (CubeGen, FormChk, FreqCheck)のための GUI (Fig.3)
- (e) Opt=QST2, QST3 に必要な反応物、生成物、遷移状態の座標を入力ファイルに設定する機能
- (f) SSH/SFTP クライアントを実装 (Fig.2)。これにより、リモートサーバーにある Gaussian にジョブを送り実行させたり、計算結果を受け取ることがネットワークを通して可能になった。バッチジョブシステムについては、LoadLeveler と NQS に対応している。(Fig.4)

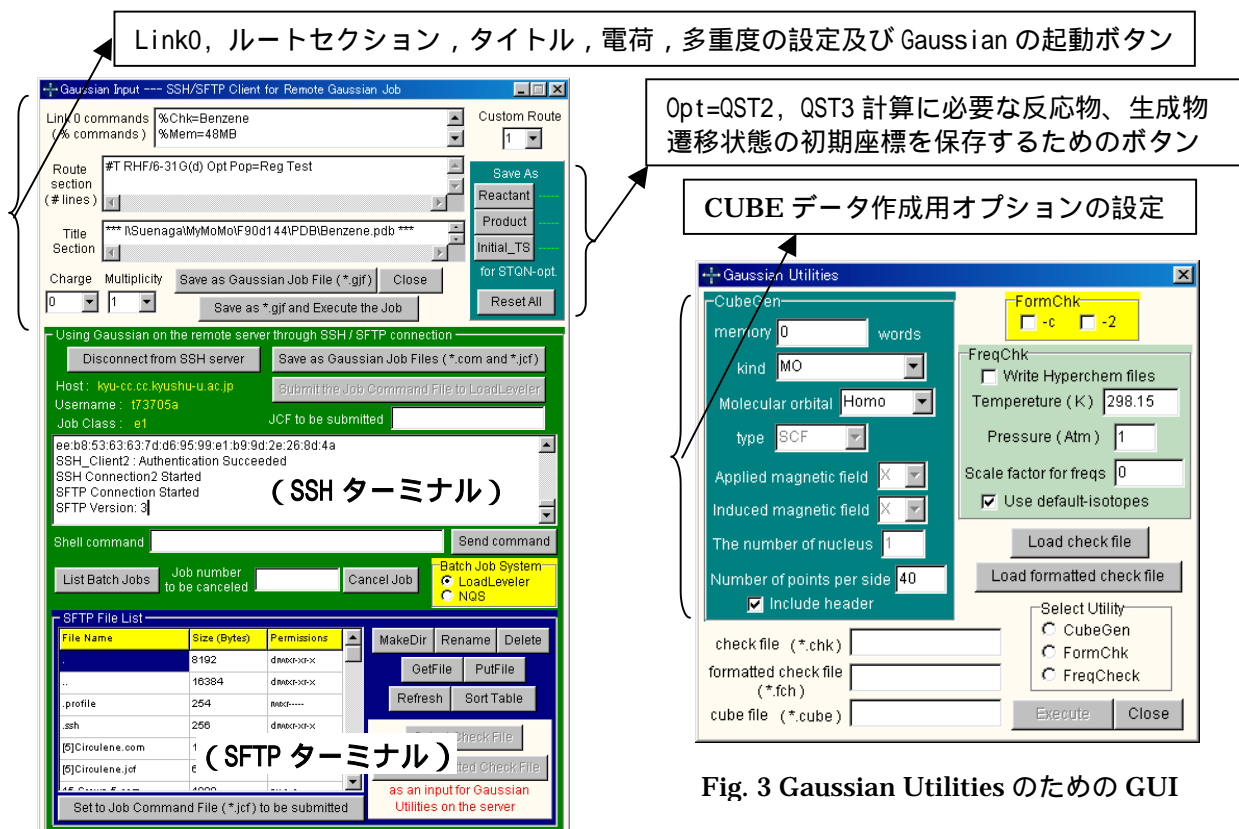
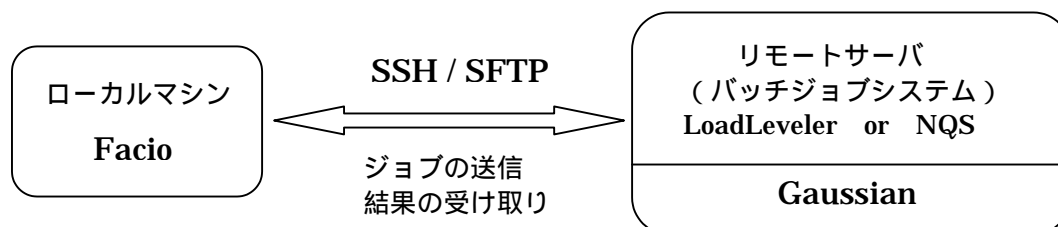


Fig. 2 Gaussian 用の GUI と SSH/SFTP クライアント

Fig. 3 Gaussian Utilities のための GUI



リモートサーバーとの接続は、これまで Telnet や FTP を利用することが多かったが、近年はセキュリティの観点からこれらのサービスは停止されるようになってきている。

Fig. 4 SSH/SFTP 接続によるリモートサーバー上の Gaussian の利用