

分子設計支援システム(Winmostar)開発秘話

千田範夫

(株)テンキューブ研究所(〒290-0026 千葉県市原市諏訪 1-6-1)

Winmostar[1]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。グラフィカルに分子を構築し、分子軌道法プログラムにデータを渡して計算を行わせ、出力(最適化構造、分子軌道等)を可視化することができる。

Winmostar の開発のきっかけはウイルスである。2001 年7月末に、会社(出光興産)の同僚(女性)の自宅パソコンにウイルスが感染し、その対処を手伝ったことがあった。まず、トレンドマイクロのページからダウンロードしたツールで駆除し、一件落着と思われた。これで解決していたら、Winmostar の誕生はなかったかもしれないが、たちの悪いウイルスは完全には駆除できず、OS を再インストールすることで、やっとウイルスを消滅することができた。その再インストールに必要なリカバリー用の CD を調べた中に何故か VisualBasic(VB) という開発言語の CD を発見した。この VB の機能を調べたところ、RS232C 通信のサンプルプログラムを見つけ、試験機→RS232C データ受信→依頼試験管理 DB を行うラボラトリオートメーションシステム(LAS)の構築のヒントを得た。こうして開発がスタートしたLASで、数十台の分析試験データの自動収集システムを構築した。

VB を使ってみると、メニューやボタンを使う Windows の GUI ソフトが簡単に作成できることに魅了されて LAS 開発ではもの足りなくなり、分子表示ソフトを趣味で作り始めることにした。作り初めてみると、意外に使えそうなものができたので、個人のホームページ上からダウンロードできるようにした。部品追加等の機能を加えて行くと徐々に反響がでてきて、Winmostar の紹介サイトが現れるようになってきた。その頃、学会でお会いしたのが広島大学の故・吉田弘助教授(吉田賞の!)である。吉田先生は Molda の作者で、IPA の未踏ソフト事業(2002 年度)に採択されていた。学会の懇親会場で Molda プロジェクトのアルバイトプログラマーとして声をかけて頂いたのが、未踏ソフト事業に関わるきっかけとなった。2年半後に、著者自身が未踏ソフト事業に採択されたことを、吉田先生に報告できなかったことが心残りである。

未踏ソフトでは、言語を VB から Delphi に変更して開発した。その結果、優秀な開発者の中から選ばれる「スーパークリエイター」に認定された。これに自信を得て、2007 年に 出光興産を定年退職後に個人事業を立ち上げ、2008 年には Winmostar の商用版(Teucube/WM)を販売開始した。2010 年には、千葉県のひまわりベンチャー助成金を獲得した勢いで、株式会社を設立してしまった。

冒頭で述べたように、Winmostar 開発のきっかけは偶然である。この世界にまだ存在しないような、優れたソフトを開発するというような大それた考えは、全くなかった。ただ、応援してくれるユーザの存在を力にして、特に目標もなく、自分の趣味の赴くままに、コーディングを続けてきた。当初は MOPAC だけに対応していたが、現在では GAMESS と Gaussian に対応し、FMO や PIO 解析のようなユニークな機能も実装している。最近では、Linux(UNIX)機の計算サーバーへ、ジョブをサブミットする機能を強化している。これによって、パソコンからスパコンまでシームレスな利用が可能となり、計算機システムに不慣れな実験研究者でも、簡単に大規模分子科学計算を実行できるようになった。

Winmostar だけで分子設計を行うことは困難かもしれないが、弱小計算化学ベンダー間のコミュニティを強化することで、有効なソリューションを提供できれば、この分野の発展に貢献できると考えている。

[1]Winmostar web site: <http://winmostar.com/>

