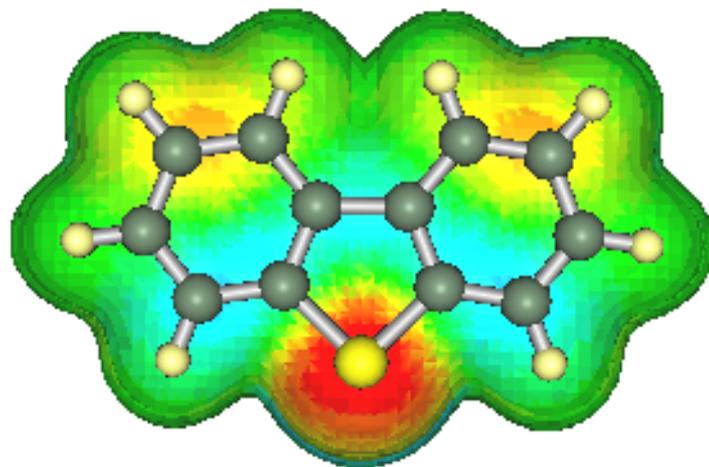


分子科学計算ソフトウェア (Winmostar)の開発

第22回 エンバカデロ・デベロッパーキャンプ東京

株式会社テンキューブ研究所 千田範夫



千田 = 1000 = 10^3 = テンキューブ



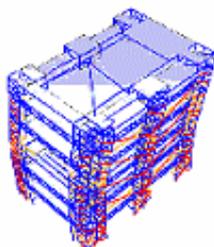
シミュレーション

・自動車の衝突シミュレーション

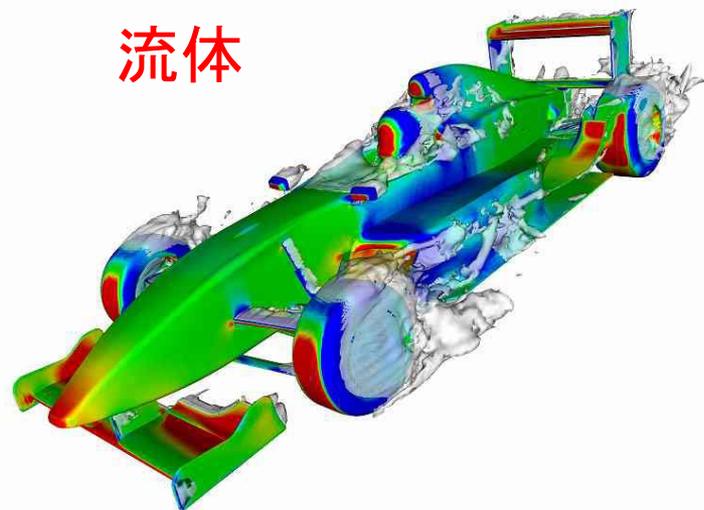


・ビルの地震応答解析

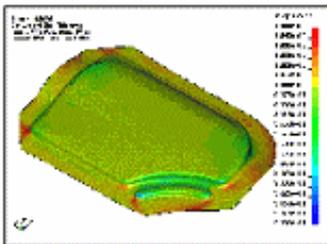
構造



流体



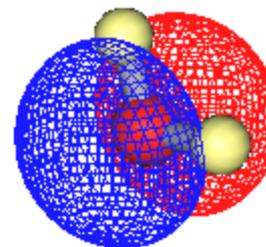
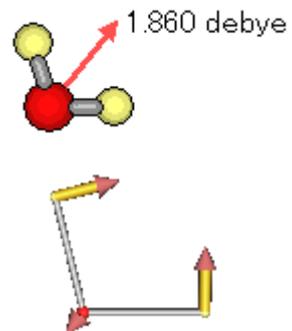
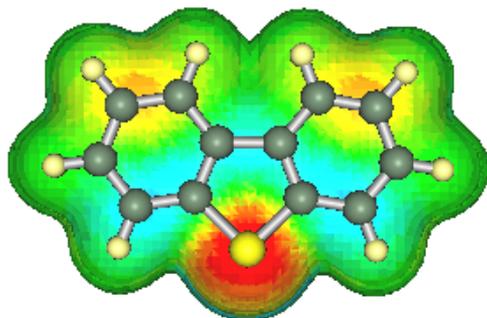
・ドアパネルのプレス成形(板厚分布)



・TVモニターの梱包落下



化学(計算化学)



分子設計とコンピュータ

もっと青く光る材料？

もっと効く薬？

経験と勘で

分子科学計算

物性の予測
合成方法の提案
分析データの解析
等

合成ターゲット

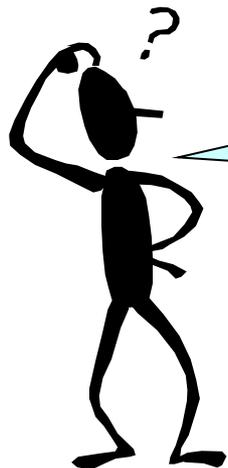
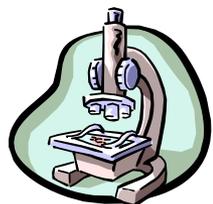
↓
合成

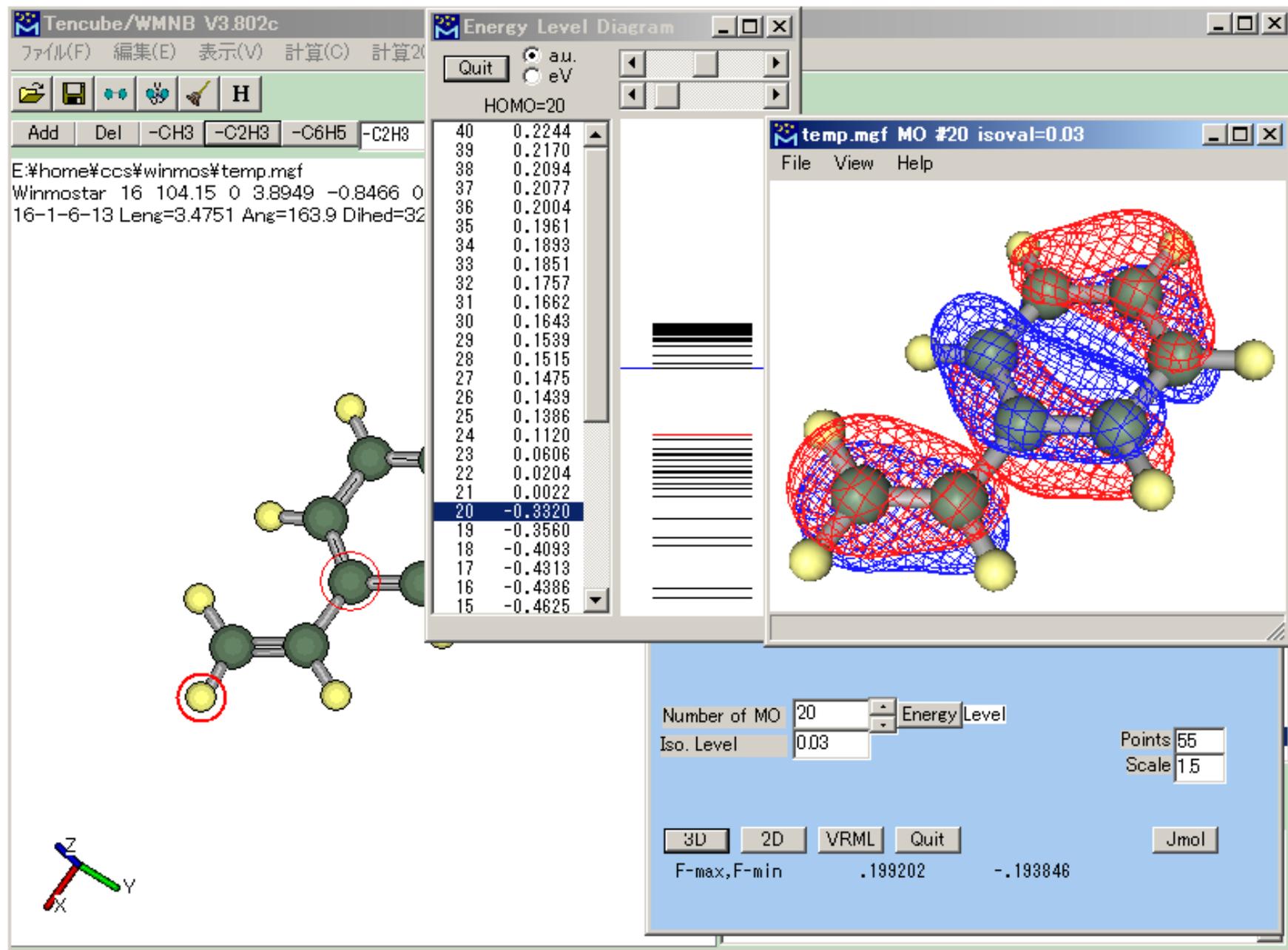
↓
分析

↓
測定

↓
製品化

回る回数を減らす
回るスピードを上げる



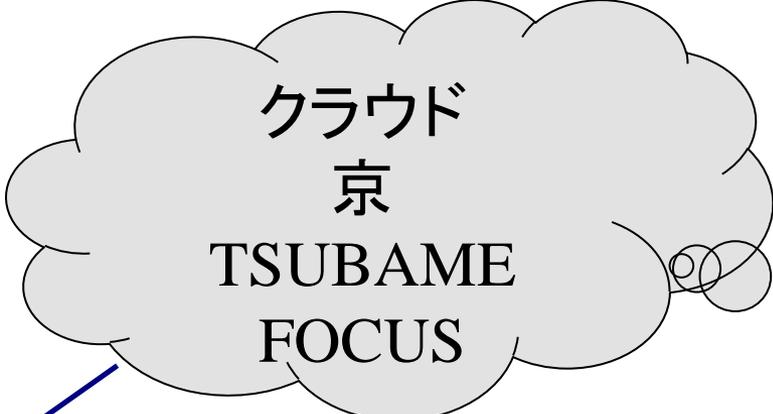


20年前



現在





並列クラスター計算機

SSH



Winmostarソースコード行数

Delphi

Winmostar

58254

Fortran

preplot. for 193
opencubegen. f90 6027
phi2. for 1104
phicon. for 666
phi2vr. for 1931
cube2phi. for 119
molsav. for 867
mmstar. for 5716
cndosw. for 3055
Mopac6. for 32780

CCL Home等

軌道係数からボリュームデータ

名古屋大

等値面

函館高専

分子表面積・体積

福山大

紫外・可視吸収スペクトル

Stewart

半経験的分子軌道法

56193

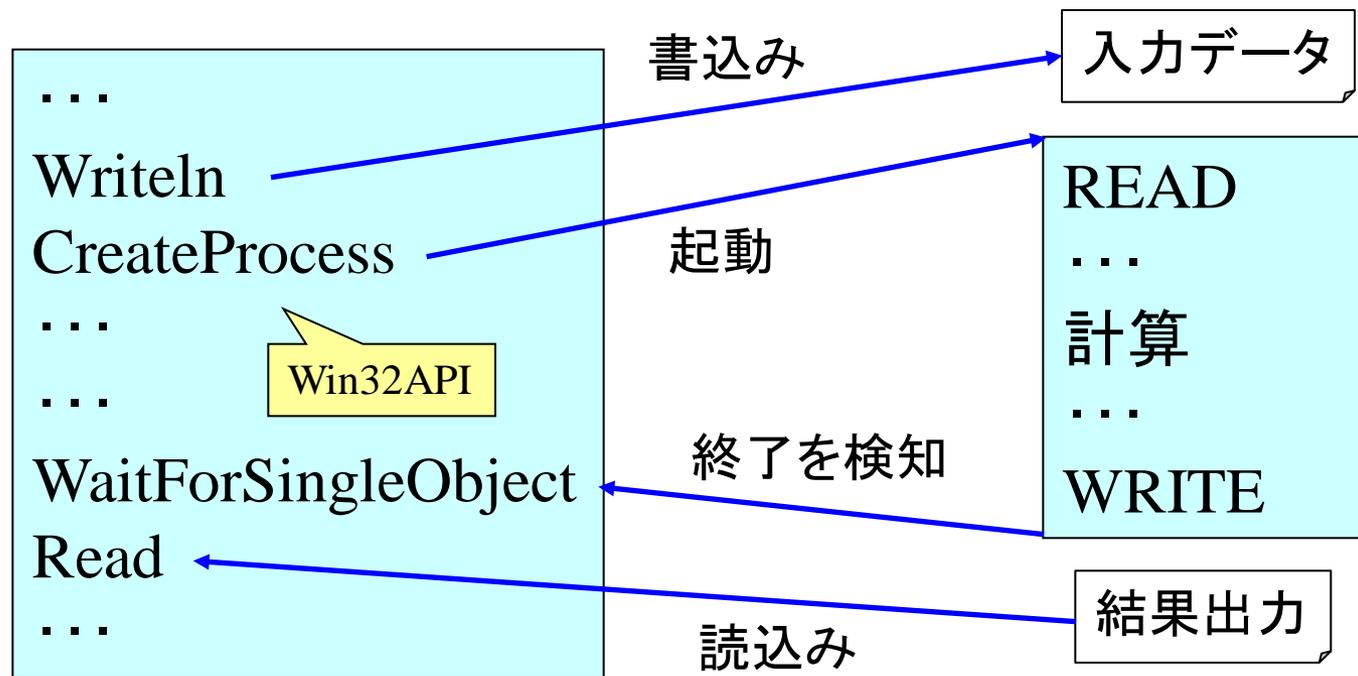
連携プログラム

Mopac2009, Gaussian, GAMESS等

Winmostar本体から外部プログラムの制御方式

Winmostar本体 (Delphi)

外部プログラム (*.exe)



Winmostar: 分子計算支援ソフトウェアの開発

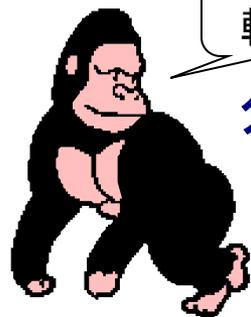
V2からV3へ

2004 IPA未踏ソフト創造事業
VisualBasicからDelphi7に書き換え

猿でも出来るMO計算

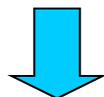
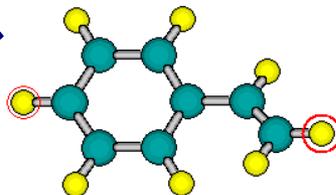
専門家も使うツールへ

簡単
軽い



分子モデリング

C:\Program Files\winmos\St1.dat
SenSoftStudio
16 104.1515 7.214418



分子計算 (分子軌道法、分子動力学法)

Z-Matrix

クリーン機能

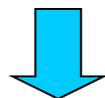
Linux対応

VRML,CIF

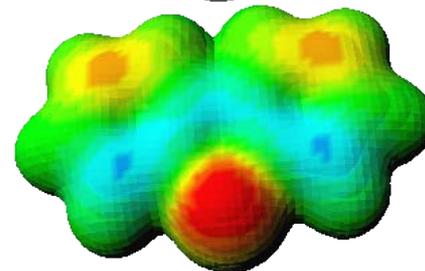
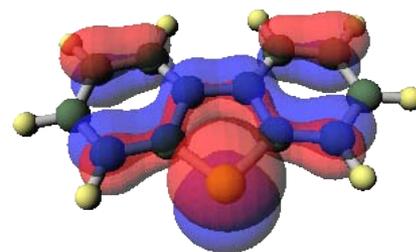
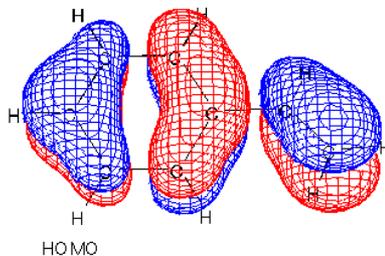
Gaussian,GAMESS

Molda,Facio連携

....



結果表示



天才プログラマー／スーパークリエイター 2005/10



スーパークリエイター認定式 2006/10



ぬいぐるみモデラーの開発

東大M2 森悠紀さん

社長表彰 2006/11



会社概要

社名	株式会社テンキューブ 研究所
所在地	〒290-0026 千葉県市原市諏訪1-6-1
役員	代表取締役社長 千田 範夫プロフィール
設立	2010年5月10日 (個人事業創業:2007年5月1日)
主な事業内容	計算化学ソリューションの提供
主要取扱品目	Winmostar , Tencube/WM Mopac , Gaussian , GAMESS , Nanobox プログラム開発、計算化学サービス、受託計算サービス コンサルティング、トレーニング

趣味から仕事



2010/2/8 ひまわりベンチャー助成金交付式

2012/5/18 日本コンピュータ化学会功労賞



アカデミックフリー

Winmostar

for WindowsXP/Vista/7

商用版（一般：99,750円、教育機関：49,350）

Tencube/WM システム最小構成

- Intel Pentium III 以上または AMD Athron
- Windows XP , Vista , 7
- Microsoft Internet Explorer 5.01 以降
- メモリー実装：256MB 以上
- 空きディスク容量：512MB 以上
- CD-ROMドライブ
- ディスプレイ解像度：1024*768 以上

次のキーワードの検索結果: winmostar

フィルタ ▾

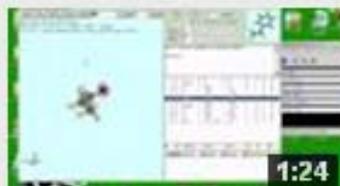


winmostar

分子計算支援ソフトの紹介 Winmostarの作者です。

FOCUSスパコンでGaussian09を利用するためのTencube/WM(Winmostar)講習会

チャンネル | チャンネル: winmostar | 11本の動画 | 登録者 17人



Winmostarによる分子モデリング、最初の一步

Winmostarの分子モデリングは簡単です。まず、最初はこれから。winmostar.com

チャンネル: winmostar | 2年前 | 再生回数 482回

1:24



FOCUSスパコンでGaussian09を利用するためのTencube/WM(...)

FOCUSスパコンでGaussian09を利用するためのTencube/WM(Winmostar)講習会資料,構造最適化,分子軌道表示,振動解析,NMR

NEW | チャンネル: winmostar | 5日前 | 再生回数 19回

6:56



C60 Fullerene construction with Winmostar

Winmostarによる、フラレーンのモデリング winmostar.com

チャンネル: winmostar | 2年前 | 再生回数 820回

4:39

Winmostarの将来？

Windows7では動作怪しい

Delphi7からXE2

マルチプラットフォーム

64bit

新機能

拡販

