

SciMAPS -スクリプト機能のご紹介-

SciMAPSは量子化学計算からメソスケール計算まで、時間的にも空間的にもスケールの異なる様々な計算科学手法に対応した材料設計支援プラットフォームです。このプラットフォーム上では、使いやすいモデル構築機能、データ解析機能が標準装備され、LAMMPSやTURBOMOLEなど、大学や研究機関で開発された世界的に定評のある先進の計算プログラムを統一されたGUI操作で利用できます。本稿では、SciMAPSの特長の一つであるスクリプト編集・実行機能についてご紹介します。

同一設定による計算実行

SciMAPSでは、プログラミング言語であるPythonで記述したスクリプトを実行することで、ほとんど全てのGUI機能を利用できます。スクリプトを使用した例として「複数モデルへの同一設定による計算実行」が挙げられます。非常に多くの分子モデルに対して同一条件の計算を行い、結果を比較するような場合、入力設定の間違いによる誤計算を回避でき、非常に便利です。ここでは、その実行方法について紹介します。

1. 計算を行いたい複数の分子モデルを画面上に読み込みます。
2. 1つのモデルに対して実行したい計算設定を行い、ジョブを入力のみ作成します。
3. スクリプト実行用のコンソールを開き、作成されたディレクトリに移動してジョブ名.py というファイルを選択して、実行（再生ボタンをクリック）します（図1参照）。すると、画面上にある分子モデル全てに対し、同じ設定の入力が保存され、1つ1つの構造に対しジョブが実行されます。

このとき、計算が1つ終わるごとにGUI上に計算結果が読み込まれ、読み込みが終了してから、次のジョブが実行されます。

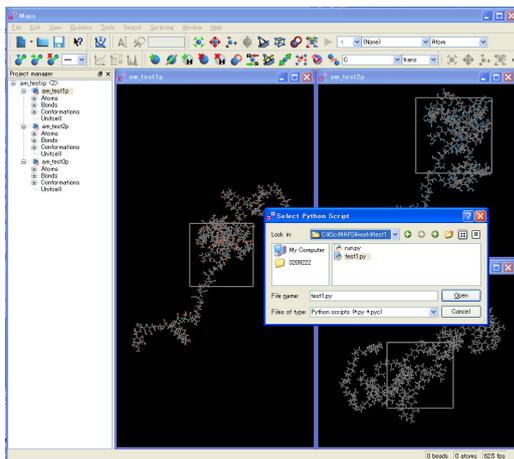


図1 複数モデルへのスクリプト実行の様子

スクリプト編集機能

SciMAPSには、より実用的なスクリプトの作成を支援するスクリプト編集機能も搭載しています。スクリプト編集機能は、Scripting|Scripting editorコマンドで起動できます。スクリプトファイルを選択するとコメント部分、スクリプト部分を自動的に認識し色分けを行います。また、if や def 等の予約語は自動的に認識され、ブロック化されます。このブロックは非表示にすることができ、編集の際、非常に役立ちます。図2の赤線の囲み内では、AmorphousBuilderProtocolのブロックが非表示になっていますが、Optimization Protocolは表示されています。テスト的に実行するにはメニュー上の再生マークをクリックして実行することができますが、エラーが発生するとコンソール上にそのメッセージとスクリプトの問題箇所を表示します。

スクリプトの事例

スクリプトのサンプルはインストールディレクトリ下に20個以上用意されています。これらと実行時に得られる設定スクリプトを組み合わせ、編集することでユーザオリジナルの機能を作成することが可能です。

```

47 class AmorphousBuilderProtocol():
95 class OptimizationProtocol:
96     """ The protocol used to optimize the system.
97     """
98     plugin=MapsLAMMPS.LAMMPSPlugin(app)
99     molecule=None
100     jobName=""
101     projectName=""
102
103 def setup(self):
138 def checkStatus(self):
139     file=open("status", "r")
140     line=file.readline()
141     file.close()
142     if line == "Completed":
143         return(1)
144     else:
145         return(0)
    
```

図2 スクリプト編集画面