

多成分系の量子化学計算解析のための XML スキーマの検討

○小林 正人^{1,3}, 武次 徹也^{1,3}¹ 北大院理, ² JST さきがけ, ³ 京大 ESICB

k-masato@mail.sci.hokudai.ac.jp

近年では、多様な機能を持つ多くの量子化学計算プログラムや解析ソフトウェアが開発され、用途に応じて様々に組み合わせて用いられるようになった。しかし、多くのプログラムでは独自の入出力形式が用いられており、複数のプログラムによる連成計算や解析には、それに特化したデータ変換処理を必要とするケースがほとんどである。近年、さまざまな量子化学計算プログラムで得られた結果を一元的に解析したり、複数の計算プログラムの中で計算結果をやりとりしたりするために、EXtensible Markup Language (XML)形式のデータフォーマットの利用が検討されている[1-5]。これまでに提案されているデータフォーマットのスキーマは、主に単一の系の計算結果を格納することを目的としたものである。しかし、触媒反応系のような複数の成分から成る系に対して、量子化学計算の結果を蓄積することを考える場合、成分ごとに情報を保持するデータ形式が解析のために有効である。本研究では、現在発表者が既存のスキーマを参考にして開発を行っている多成分系の量子化学計算の結果を蓄積するための XML データベース MCQCResult のスキーマについて報告する。

図 1 に、XML データベース MCQCResult に対する XML スキーマの一部をノードツリー表現で表した。既存のスキーマでは、系に含まれている原子などの情報はルートの直下に置かれることが多いが、MCQCResult では構成要素の情報を持つ Component オブジェクトに原子の情報を保持する構造とした。構成する全ての要素は Components オブジェクトにより統合されている。これにより、原子の電荷など構成要素のローカルなプロパティを系ごとに比較する解析を容易に行うことができる。発表ではこのデータベース形式を利用した解析の一例を紹介する予定である。

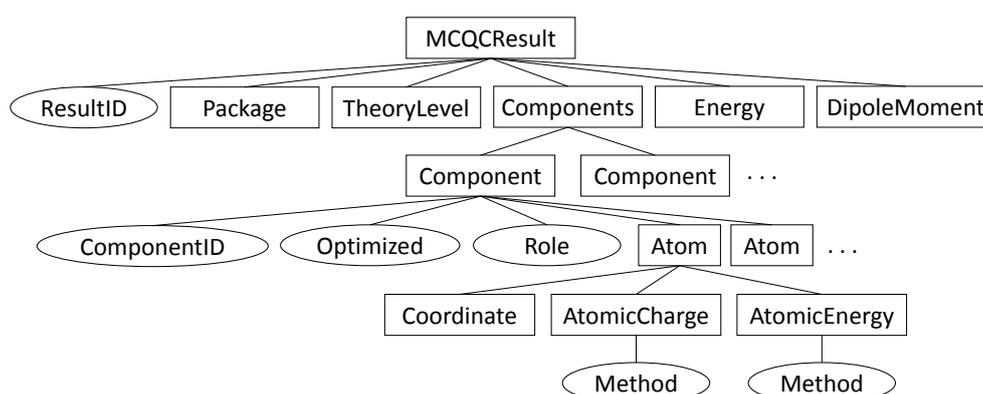


Figure 1. Node-tree description of MCQCResult object.

- [1] C. Angeli, G.L. Bendazzoli, S. Borini, R. Cimiraglia, A. Emerson, S. Evangelisti, D. Maynau, A. Monari, E. Rossi, J. Sanchez-Marin, P.G. Szalay, and A. Tajti, *Int. J. Quantum Chem.* **107**, 2082 (2007).
 [2] J. Díaz, S. Reyes, C. Muñoz-Caro, and A. Niño, *Lecture Notes in Computer Science* **5072**, 997 (2008).
 [3] F. Gygi, *IBM J. Res. Devel.* **52**, 137 (2008).
 [4] A. Walker, <https://github.com/andreww/CMLComp>.
 [5] 平野敏行, 佐藤文俊, 分子構造総合討論会 2005, 2P047, 東京 (2005).