

## 分子化学計算のための簡便な連成計算 プラットフォームの開発

○渡邊 啓正<sup>1</sup>、森 義裕、英 憲悦<sup>1</sup>、直島 好伸

岡山理科大学総合情報学部(〒700-0005 岡山県岡山市北区理大町 1-1)

<sup>1</sup>HPC システムズ株式会社(〒135-8073 東京都江東区青海 2-45)

### 【緒言】

実験化学者が分子計算を行う際直面する、計算ソフトの複雑な操作性や複数のソフト間の連携といった煩わしい問題を解決し、マウス操作主体の簡便なインターフェイスで容易に実行できる計算プラットフォームを開発した。すなわち、本研究は、HPC システムズ(株)と岡山理科大学 直島好伸研究室との共同研究の下、研究室の生体・基質分子計算フロー [1, 2, 3] をシステム化し、だれでも簡単に使える形にしたものである。

### 【従来の問題点】

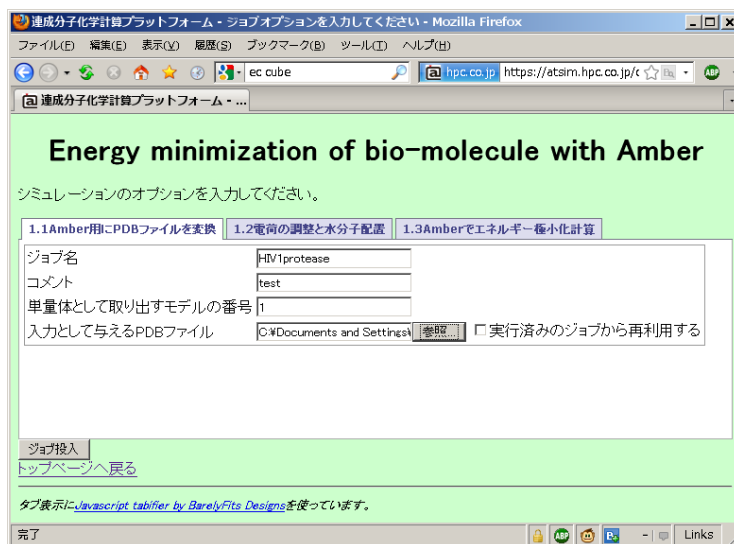
- 生体分子のデータファイルを Amber 分子化学計算プログラムに読み込ませるのに煩雑なファイル修正が必要であった。
- Amber・Gaussian といった多種の計算プログラムを利用する際、利用方法が大きく異なるため、それらを連成した計算が煩雑であった。

### 【システム概要】

本プラットフォームでは次の機能を実現した。

- 1) Amber が読み込める形へのファイル修正の自動実行
- 2) 計算プログラムに依存しない統一的なプログラム呼び出し機構

これらの機能は Apache ウェブサーバ上でウェブアプリケーションとして動作する。ユーザはウェブブラウザのみでこれらの機能を利用できる。



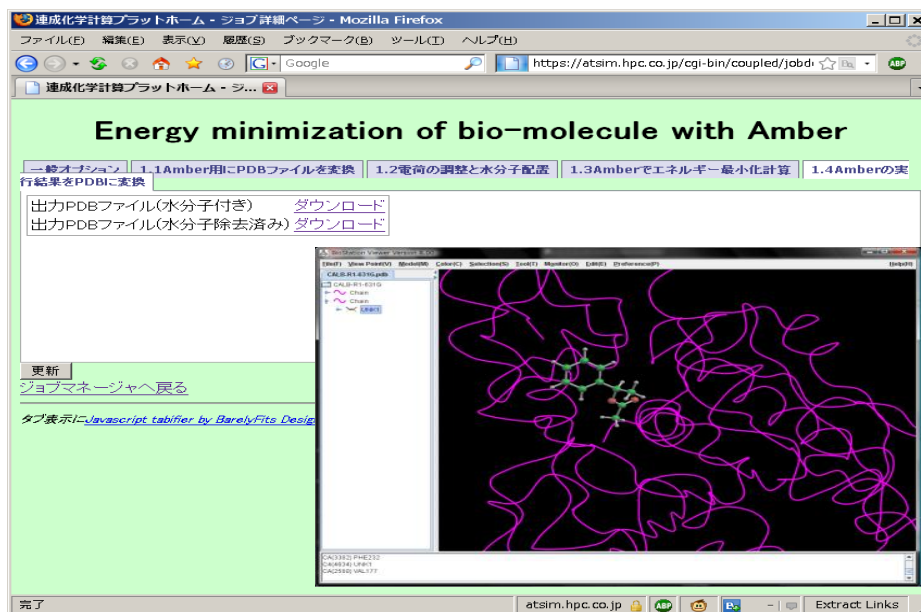
### ジョブオプション入力画面

### 【評価実験】

我々が実際に使用している、HIV-1 プロテアーゼタンパク分子のエネルギー極小化計算、トリフルオロアズレンアルコール分子のエネルギー極小化計算(Amber)・単一ポイントエネルギー計算(Gaussian)に対し、提案プラットフォームを適用した。その結果、機能1)、2)が正常動作し、上記問題点が解消され、提案プラットフォームの有効性を確認できた。

## 【まとめ・今後の課題】

本プラットフォームは、日本でユーザの多い Amber 分子化学計算プログラムにおいて使用時に直面する、支援ツールの無い問題が解決された点で意義深い。今後の課題には、入力ファイルのブラウザでの直接編集、可視化ソフトウェアの組み込みといった使い勝手の向上が挙げられる。



- ▶ コマンドインタフェースからの脱却  
計算コマンドを隠蔽し、見つけにくい入力間違いを防止します。
- ▶ ファイル修正の自動化  
数千行ものファイルを手作業で修正する手間を自動化により大幅に低減します。
- ▶ 計算データの一元管理  
実行した全ての入出力ファイルに迅速にアクセスできる一元管理インタフェースを提供します。
- ▶ 連成計算に対応  
分子（動）力学計算・量子化学計算を連結した計算を構成・自動実行できます。
- ▶ 計算機間の自動負荷分散  
バッチジョブシステム Torque に対応し、計算機の最大限の性能を引き出します。
- ▶ 計算機のクラウド化  
どこにいても Web ブラウザ経由でアクセスして化学計算を行えます。Windows/Mac/Linux 対応。

## 計算結果の可視化画面（上）とプラットフォームのコンセプト（下）

### 【参考文献】

- [1] 直島好伸、"生命情報科学と生命科学—コンピュータで生体分子を解析する—" 菊池慎太郎、青江誠一郎 編著、岡本威明、佐藤健三、直島好伸、長谷川 靖 著「はじめての生命科学」第4章、三共出版、2009.
- [2] 森 義裕、服部洋介、直島好伸、第 28 回日本シミュレーション学会大会発表論文集、155-158 (2009).
- [3] 田中孝尚、直島好伸、第 30 回情報化学討論会講演要旨集、59-60 (2007).