

演 題	Windows版PEACH (3) : 最新バージョンの移植	
発 表 者 (所 属)	○中田 吉郎 (群馬大学工学部)	
連 絡 先	〒371-8510 前橋市荒牧町4-2 群馬大学工学部工学基礎II生物物理研究室 電話 027-220-7563 ファックス 027-220-7566 E-Mail nakata@aramaki.gunma-u.ac.jp	
キーワード	分子動力学、PEACH、並列計算、MPICH、生体高分子	
開発意図 適用分野 期待効果 特徴など	分子動力学計算 PEACH システムの最新版(Ver3.8)を Windows 環境に移植した。 これによって使用方法が改善され、クーロン力的高速計算法も利用可能になった。	
環 境	適 応 機 種 名	PC/AT 互換機
	O S 名	MS-Windows
	ソース言語	F o r t r a n
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 (右のいずれかに○をつけてください)	<ul style="list-style-type: none"> ・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする ・<u>独自に頒布する</u> ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 ・未定 	具 体 的 方 法

1. はじめに

生体高分子の研究分野で広く用いられている分子動力学計算法をパソコン環境で利用するために、古明地らによって開発された PEACH システム[1,2,3]のバージョン 3.3 を Windows 環境に移植してきた[4,5,6]。今回はさらに機能が付加され、使いよくなった最新バージョンを Windows 環境に移植した。

また対象とする系が複雑になると計算時間が非常にかかるようになる。そこで計算能力を上げるために並列計算という何台かの計算機をつなぎ協調作業させ、一台のときよりも速く計算させる方法を用いるプログラムを標準にした。

このバージョンでは、新しい機能としてクーロン力的高速計算のために PPPC 法が取り入れられた。この方法は、始め重力多体問題の高速計算法として開発され、斉藤 [7] により生体分子系の計算用に改良されたものである。この方法は生体分子系におけるノーカットオフ MD 計算法として成功を収めている。また今回のバージョンから量子分子動力学シミュレーションが可能となったが、今回は除外した。

2. 計算例

グルカゴンのX線解析構造（29アミノ酸残基）を用いて、水中での分子動力学計算によるシミュレーションを行った。設定温度を300°Kと350°Kと400°Kとして温度による構造の変化を検討した。溶媒は水（2197分子）とし、周期境界条件、NTVの箱型モデル、クーロン力の計算にはエワルド法を用いた。市販のWindowsパソコンを使用し並列計算法を用いた。計算速度は4台のパソコン（2.4MHz）を用いた場合10ピコ秒当たり4時間であった。

図1に、分子全体の初期構造からの構造の変位（根平均二乗変位、RMSD）の時間変化を示す。このデータから見ると、300Kにおいては、水中に入れた結晶構造が始めの100psぐらいまでの間で緩んで大きく変位し、さらに熱運動により若干の変動が生じている。1000ps以降はほぼ一定値を保っている。350K, 400Kに温度を高くしてシミュレートした場合には、400psあたりからさらに別の構造変位が起こり、400Kでは3000psでまた別の構造変位を起こしている。350Kでは2000psのあたりでもとの構造（300Kでの平衡構造）に戻っているように見える。次に1GCNの時間に対する二次構造の変化を図2に示す。グラフの縦軸は1GCNのアミノ酸番号、塗りつぶし部分（水色）が α ヘリックス構造を表している。分子量の小さなホルモタンパク質であるグルカゴンを用いたシミュレーションでは、高温にした場合数ナノ秒の時間でヘリックスコイル転位が起きていることが判った。

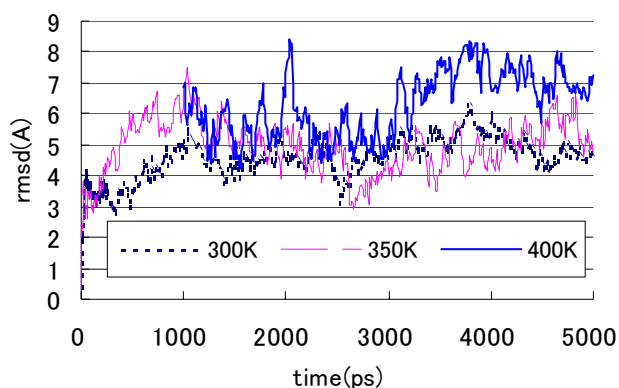


図1. 初期構造からの構造の変位の時間変化

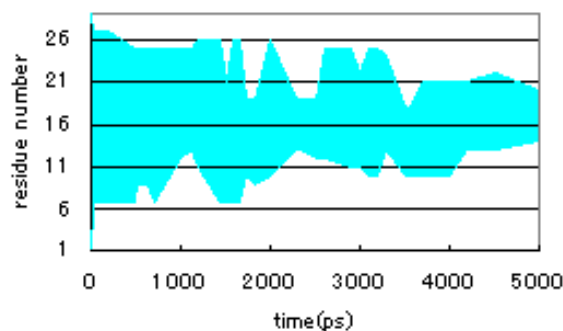


図2. 二次構造（ α ヘリックス）の時間変化

3. 参考文献

- 1) Y. Komeiji et al., *J. Comp. Chem.*, **18**, 1546-1563(1997).
- 2) Y. Komeiji et al., *Parallel Computing*, **27**, 977-987(2000).
- 3) <http://staff.aist.go.jp/y-komeiji/peach/peach.html>
- 4) 中田吉郎、滝沢俊治、Windows版PEACHとそのシミュレーション表示、化学ソフトウェア学会年会2001研究討論会、埼玉、2001年9月。
- 5) 中田吉郎、荻野峰正、Windows版PEACH（2）：並列計算によるシミュレーション、日本コンピュータ化学会2002秋季年会、山形、2002年11月。
- 6) <http://www3.nibh.go.jp/~nakata/peach/peachw.html>
- 7) M.Saito, *Mol. Simul.*, **8**, 321-333(1992).