

○ 吉住 亮、後藤 仁志、吉野 智、川合 渉、各務 世志子、大田 一男  
豊橋技術科学大学、コンフレックス株式会社

## 1. はじめに

当研究室で開発している CONFLEX は、並列技術や Grid 技術の導入により、生体高分子を含む巨大有機化合物の配座探索も実現可能になりつつある。そこで、CONFLEX の利便性や、CONFLEX の結果から生成される配座データベースの再利用性を向上させるために、ネットワーク上で配座創出サービスを実現するためのサーバシステムを開発し、CONFLEX.net として公開した。ここでは、本システムで用いている配座データベースシステム及びその概要について述べる。

## 2. システム構成

本システムは、図 1 のように構成されている。メインとなる配座創出システム、解析支援システムである 3D 分子表示システム、配座データベースシステムがあり、それぞれが図に示すような細かいシステム、ルーチンを持つ。3D 分子表示システムは、基本的な描画方法 (wire frame、stick、ball、ball&stick 等) での描画を行い、さらに簡易解析 (原子間距離、結合角、ねじれ角の導出) を行う。また、配座データベースシステムは、創出された膨大な配座情報を XML/CML 化し、各配座の分子構造ファイル及び配座情報を管理する。

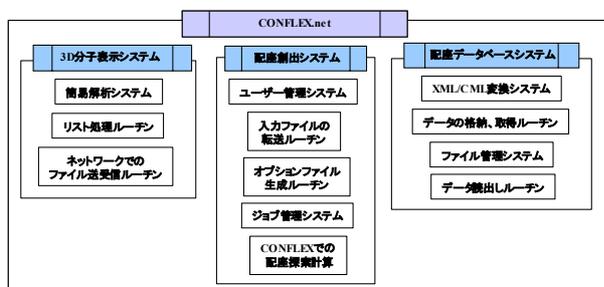


図1. システム構成

## 3. 配座創出システムの概要

本システムの主な処理の流れを図2に示した。まず、クライアントが配座創出を依頼したい分子の分子構造ファイルをアップロードする。すると、受付サーバから計算サーバへ依頼が転送され、使用するスレーブマシン数が計算サーバによって決定され、CONFLEX による配座創出が行われる。既に計算中で空いているマシンがなかった場合、依頼は待機スタックへと追加される。計算が終了すると、創出された配座データがデータベースサーバへと転送され、データベースに格納される。計算の完了はクライアントに電子メールで通知され、クライアントは受付サーバを介してデータベースサーバにアクセスし、依頼した配座創出の結果を受け取ることとなる。

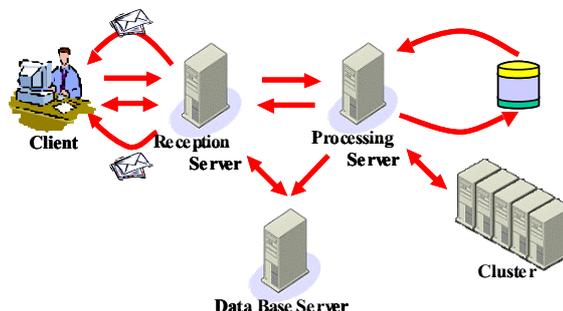


図2. システムの処理の流れ

従来はすべてのサーバがインターネット上にあり、SSL でセキュリティを確保していたが、昨今のセキュリティ事情から考えると非常にセキュリティ的に脆弱である。そこで、イントラネット内で利用することを前提とし、さらに受付サーバがルータとなって LAN を形成する、といった形に現在設計を変更中である。

## 4. Conflex-ML

本システムで使用しているデータベースシステムは、基本的に XML/CML を採用しているが、配座情報を扱うための要素を拡張した。又、CONFLEX の出力ファイルの情報を扱うために、Conflex-ML を規格化し、前述の拡張 CML を含めて使用した。Conflex-ML で定義する主な要素を、表1に示す。

表1. Conflex-ML の要素

要素名	説明
comparison	配座チェックの基準値を記述する。子ノードとして、method、thresholdを持つ。
conflex	ルートノード。全てのConflex-MLドキュメントはこのノードの中に含まれる。
conformationList	全ての配座の座標情報が含まれる。
conformation	1つの配座異性体の座標を表す。子ノードとして、atomArray、bondArrayを持つ。
ConformationSpaceSearch	配座創出のオプションのリスト。最適化条件、最適化手法などが取られる。
elapsedTime	各計算に要した時間が取られる。
method	手法及び付随するデータが取られる。
molecularInformation	計算結果、オプション以外の付随する情報を記述するためのリスト。
molecularMechanics	分子力学法による構造最適化パラメータを記述する。子ノードとしてoptimization、analysisを持つ。
optimization	最適化の条件を設定する。
perturbation	初期構造に加えた局所的微小変形を記述する。
temperature	温度を定義する要素。
threshold	閾値を定義する要素。

## 5. まとめ

ネットワークを利用し、配座創出を行うことのできるサーバシステムを開発した。また、自動で創出した配座をデータベースに登録することが可能となった。

## 6. 謝辞

本研究は文部科学省「産官学連携イノベーション創出事業費補助金」の援助を受けて行われました。又、本研究の一部は、本研究は科学技術振興事業団「計算科学技術活用型特定研究開発事業」の援助を受けて行われました。