

分子計算のためのポータルサイトの開発

○中村 雄貴, 黒澤 隼人, 後藤 仁志

豊橋技術科学大学 (〒441-8580 愛知県豊橋市天伯町雲雀ヶ丘1-1)

【背景】

近年, コンピュータの性能の向上と並列分散処理技術の発達により, これまで以上に大きな分子の高精度分子計算が行えるようになってきた. 例えば, 当研究室で開発している配座探索プログラム CONFLEX は, 並列分散技術やグリッド技術を導入することによって比較的小きなペプチド (数十残基) の配座異性体を徹底的に創出できるようになっている. また, この程度の分子サイズであれば, 分子軌道計算プログラム Gaussian を利用することによって高精度理論計算に基づく様々な物性予測も可能になってきた. 特に最近では, 『CONFLEX により創出した複数の配座異性体に対して Gaussian を用いて物性評価を行う』といった高精度多配座解析を実施する例も増えてきている. ところが, こうした利用方法を望む, 主に医薬・農薬や機能性有機材料などの開発に携わる研究者にとって, 並列・分散環境を構築した上で正しい入力ファイルを準備することは, 大きな負担となっている.

一方, 2000 年から開発運用を開始した CONLEX.net は, こうした実験研究者の負担を軽減することを目的の一つとして, 小規模イントラネット上で利用するための分子計算ポータルサイト・システムとして改良を続けている. 特に CONFLEX.net は, 多配座解析に主眼を置いた統合的ポータルを目指しており, この点において Gaussian の利用に特化した QCGrid/Gaussian Portal や WebMO などの Web ベース・インターフェイスとは異なっている. ここでは, CONFLEX.net に Gaussian を実装し, CONFLEX から Gaussian の実行までをシームレスに実施するためのユーザ・フレンドリーな操作環境の実現方法について報告する.

【CONFLEX.net への Gaussian の実装】

CONFLEX.net では, 各サーバ間でやり取りする分子座標データのフォーマットを MDL-MOL 形式に統一し, サーバ内で各分子計算プログラム用のフォーマットに変換することによって, ユーザの負担を軽減している. また, 各分子計算プログラムをシームレスに利用するため, 分子表示 Java アプレットや Java Script などを使ったナビゲーション・インターフェイスを提供する. これによって, CONFLEX による配座探索から Gaussian による分子軌道計算までの手順は僅か4ステップで実現可能である (図1). また, 新たな分子計算プログラムを導入する際に管理者の作業負担を軽減するため, CONFLEX.net では次の4つの処理スクリプトを記述するだけでよい: (1) 計算オプションを指定するためのスクリプト, (2) 入力分子構造データの変換スクリプト, (3) 分子計算プログラムの実行スクリプト, (4) 出力ファイルの解析スクリプト.

これら4つの処理スクリプトを配置すると, システムは自動的に新しいプログラムを認識し, 他のプログラムと連携して利用することができる.

秋季年会では, 並列分散環境下において計算ジョブを適切に制御するための環境非依存のプロトコル設計について議論する.

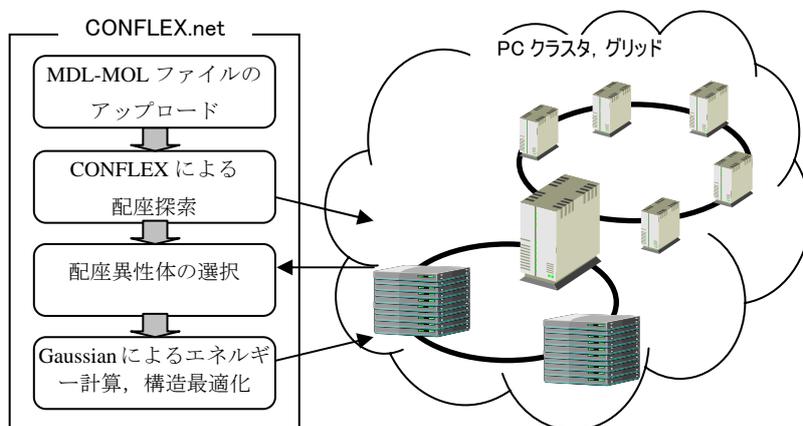


図1 CONFLEX と Gaussian のシームレスな利用