

2P05

簡便な生体分子化学計算システムを目指して ～連成分子化学計算プラットフォーム Hybrid QM/MD Platform の開発～

○森 義裕、渡邊啓正¹、英 憲悦¹、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）

¹HPC システムズ株式会社（〒135 - 8073 東京都江東区青海 2 - 4 - 32）

【緒言】

近年、コンピュータの計算能力の飛躍的な向上、低価格化と、革新的な計算化学ソフトウェアの開発、普及により、有機化合物などの低分子は言うに及ばず、タンパク質などの生体高分子や実験系の巨大分子の高精度計算化学シミュレーションが現実のものとなっている。¹⁾ これにより、計算化学は研究室の枠を超え、医薬品や機能性材料などの実際の製品開発の現場において合成実験研究と同等の重要性を持つに至っている。

しかし、計算化学を専門としない実験化学者が分子化学計算ソフトを用いて計算シミュレーションを行う際には、計算ソフトの操作、特に複数のソフト間の連携に起因する操作の煩雑さなどの困難な問題を克服しなければならない。

そこで、HPC システムズ株式会社と岡山理科大学直島研究室の共同研究により、直島研究室で用いている生体・基質分子計算フロー²⁻⁴⁾をシステム化し、“誰でも”、“簡単に”計算化学シミュレーションが行えるシステムである『連成分子化学計算プラットフォーム Hybrid QM/MD Platform』(以下、プラットフォーム)の開発を試みた。⁵⁾ 本春季年会では、その進捗状況について報告する。

【従来の計算システムの問題点】

上述のように、計算化学を専門としない研究者が、従来の計算化学ソフトを用いる際の問題点として主に以下の点が挙げられる。

1. 対象 OS のほとんどが Linux であり、計算命令を入力するためのインターフェイスがマウス操作主体の GUI (Graphical User Interface) ではなく、キーボードによるコマンド入力主体の CUI (Character-based User Interface) である。
2. Amber、Gaussian といった複数の計算プログラムを使用する際、使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。
3. PDB などからの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ための複雑なファイル修正が必要。

【連成分子化学計算プラットフォーム Hybrid QM/MD Platform の概要】

前述の問題点を解決するために、本プラットフォームでは、次の機能を実現した。

- a. Web ブラウザ上での『マウス操作』と『最小限のインプット指定』だけで行える操作体系の開発 (図 1)

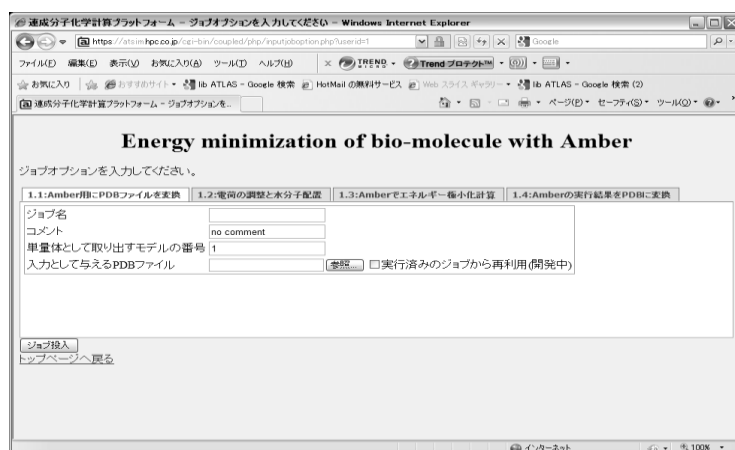


図 1. 「連成分子化学計算プラットフォーム Hybrid QM/MD Platform」のジョブオプション入力画面

Web ブラウザ上でのフォーム入力だけで実行出来る、OS に依存しないシステムの開発により、従来の「コマンド入力の煩雑さ」という問題を解決した。(→ 問題 1, 2)

b. Amber へ読み込める形へのファイル自動修正

分子（動）力学計算のソフトウェアとして Amber が多用されているが、Amber 上でタンパク質などの生体分子を扱うためには、独特の「方言」に合わせて PDB ファイルの修正が必要である。これは複雑なルールに基づいた数百行もの修正を要するため、煩雑であり、従来では数日もの作業時間を要していた。本プラットフォームでは、この過程をソフトウェアにより全自動化し、1 秒未満で自動修正されるようになった。(→ 問題 3)

[まとめ・連成分子化学計算プラットフォーム Hybrid QM/MD Platform の現状]

現在、本プラットフォームは、タンパク質（生体分子）や基質有機分子、およびそれらの複合体についてエネルギー極小化計算が行え、さらに、Amber 用に PDB ファイルを修正する機能が実装されている。これにより、Amber 使用時に直面する、支援ツールのない問題が解決された。また、2009 年秋季年会発表における意見をもとに、計算実行時ログを表示する機能と、PDB ファイル修正機能のみを使用可能とするフローを実装した。加えて、Web での公開 (<https://www.keisankagaku.com/engineer/>) を通して、モニターの様々な意見をフィードバックすることで、その完成度と使いやすさを向上させていきたいと考えている。

[参考文献]

- 1) 直島好伸、“はじめての分子化学計算 実験化学者や実験生化学者がコンピュータで有機分子や生体分子をつくり計算する” *Infomatic World*、No.20, 2 - 7 (2010).
- 2) 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.
- 3) 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).
- 4) 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).
- 5) 渡邊啓正、森 義裕、英 憲悦、直島好伸、日本コンピュータ化学会 2009 年秋季年会講演要旨集、75 - 76 (2009).