

Gromacs のための計算支援ソフト GISP の開発(2)

○玉城 哲平^{1,2}, 樺島 智大³, 森 一樹^{1,4}, 源 聡⁵, 上田 一義¹

¹横浜国立大学工学研究院(〒240-8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台 79-5) ²ナビタスビジョンソリューション株式会社 (〒222-0034 神奈川県横浜市港北区根岸町 552) ³プロメテック・ソフトウェア株式会社 (〒113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1 3F) ⁴アドバンスソフト株式会社(〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台 4-3) ⁵伊藤忠テクノソリューションズ株式会社 (〒100-6080 東京都千代田区霞が関 3-2-5)

[緒言]

これまでに分子動力学計算(MD 計算)及び計算化学を簡単に使い習得コストを少なくすることを目的に、分子動力学ソフトウェア Gromacs [1]のための計算支援ソフト"GISP"を開発している[2]。最小限のボタン操作で計算が可能であるという特徴は残しつつも、機能の向上を目指し現在も改良が続けられている。今回の発表では、Windows®上での実行環境の整備や新しい教育向け機能などの改良について報告を行う。

[説明]

これまで GISP は分子動力学ソフトウェア Gromacs を簡単に導入するための教育用入力支援ソフトウェアとして開発を続けてきた。しかしながら、GISP を導入するためには Gromacs が動作する Linux 環境が必要であり、必ずしも手軽に使用することができない場合も多い。量子化学計算ソフトウェアでは主要なものでも Windows 版の使いやすい GUI が提供されているが、古典的な MD 計算ソフトウェアではあまり多くないことから、今回 GISP のバージョンアップに際して Windows 向けの GISP プログラム実行体や環境整備のための方法についてもユーザーに提供することとした。MD 計算を行うためにはモデリングや構造最適化といった前処理が伴うが、これらを Windows 上でシームレスに行うことができれば実際の研究活動の上でも有用であると考えている。

機能拡充としてはタンパク質の計算において、PDB ファイルの読み込み時のアミノ酸欠損の情報や複数ドメインの選択、複数候補の選択といったモデル作成のための構造の前処理機能を追加した。溶媒中のタンパク質を計算する際に必要な一連の手順を自動的にいき、MD 計算までの作業コストを減らすことができる。

さらに今後の展開のために、今回は大幅にインターフェースを変更している。左部のツリーコントロールによって複数のプロジェクトが並列して開けるようになるとともに、Gromacs から他の計算ソフトウェアへのデータ移行が可能となるようなプロジェクト単位に計算を管理する設計となった。

発表では GISP の使用デモや新機能についての解説を行う。ソフトウェアは <http://www.sk&soft.com/download/> より無償でダウンロードして利用することができる。

[参考文献]

[1] Gromacs, <http://www.gromacs.org/>

[2] K. Mori, T. Kabashima, S. Minamoto, T. Tamaki and K. Ueda, *J. Comput. Chem. Jpn.*, **11**, 98, (2012).

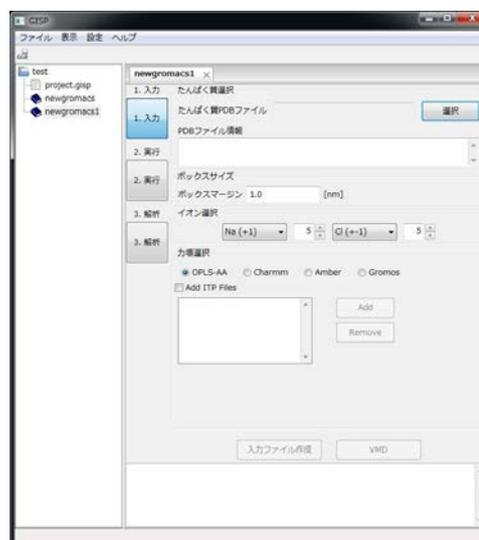


Figure. GISP のタンパク質計算操作画面