

課題名 (タイトル) :

長時間分子動力学シミュレーションのデータ解析プログラムの開発と応用

利用者氏名 : 小山洋平

所属 : 生命システム研究センター 計算分子設計研究グループ

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

所属研究室で開発されている MDGRAPE-4 では長時間の分子動力学 (MD) シミュレーションが可能になる予定である。この結果得られる大量の構造データを処理するためのプログラムの開発を行っている。現在、MD シミュレーションのフォーマットである Amber 形式の構造データとトポロジーデータを読み込むことが可能である。一方で、MDGRAPE-4 はこれとは別の Gromacs 形式のフォーマットになるため、この対応を行った。

2. 具体的な利用内容、計算方法

Gromacs の座標ファイルのうち xtc, trr フォーマットの読み込みに対応した。現在、Gromacs のトポロジーファイルを直接読み込むことはできないが、対応する Amber 形式のトポロジーファイルを読み込むことで Gromacs で実行した結果を解析できるようにした。

利用内容としては所属研究室で実施された Gromacs による小型タンパク質の MD シミュレーションの解析を行った。計算方法としては開発したプログラムを用いてポテンシャルエネルギーの主成分分析を行った。

3. 結果

Gromacs の MD シミュレーションの結果得られた 10,000 構造データのポテンシャルエネルギー主成分分析を実行するのに 8 コア並列で 37 分で終了した。

4. まとめ

MDGRAPE-4 で得られる予定の大量の構造データを解析するために、Gromacs の座標フォーマットである xtr, trr フォーマットの入力対応を行った。また、Gromacs のトポロジーファイルに相当する Amber 形式のトポロジーファイルを用いることで、

Gromacs によって得られる構造データの解析を行えるようにした。Gromacs が出力するエネルギーと開発したプログラムの結果得られるエネルギーとの比較が不十分であるが、ポテンシャルエネルギー主成分分析の結果得られた構造状態や各構造の差異を生み出している相互作用は妥当であることが確認できた。