



分類	バイオシミュレーション、量子化学計算
キーワード	ab initio FMO 法、タンパク質、リガンド、分子動力学、可視化 GUI
開発者	中野達也、望月祐志、沖山佳生、渡邊千鶴、福澤 薫、加藤昭史、 渡辺尚貴、塚本貴志、坂倉耕太、山本純一、古明地勇人
作成年月	2014年6月
コード名	ABINIT-MP ver. 7.0、BioStation Viewer ver. 16.0
使用言語	Fortran、MPI (ABINIT-MP)、Java、Java3D (BioStation Viewer)

◇フラグメント分子軌道法プログラム ABINIT-MP Version 7.0

ABINIT-MP は、フラグメント分子軌道 (FMO) 法 [1、2] に基づいてタンパク質などの巨大分子系の電子状態計算を並列処理を駆使して高速に行うことが出来る。本バージョンでは、既存機能の改良や高速化を進めて利便性を高めている。新たな機能として、電子密度の on the fly 評価と X 線データとの比較、分子動力学 (FMO-MD) シミュレーションが可能となった (古明地の PEACH MD コードの内包による)。

◇コードの主な特徴

- エネルギー： 4体補正 (FMO4) まで可能
計算レベルは Hartree-Fock (HF)、2次と3次の Møller-Plesset 摂動 (MP2、MP3)
コレスキー分解 (CD) による加速、HF-SCF の収束性改良 (各種 DIIS、2次収束)
cc-pVDZ 基底のサポート
- エネルギー微分： HF と MP2 レベル (CD 対応)、2体 HF 解析微分 (SCZV)
- 構造最適化： ファーマコフォアなど重要領域のフラグメント指定による部分構造最適化
- 解析機能： フラグメント間相互作用エネルギー解析 (IFIE と SCIFIE)、自然密度 (NBO) 電荷
水素結合ネットワーク解析 (CAFI)、Poisson-Boltzmann (PB) 水和モデル
MP2 電子密度の評価と X 線データとの可視化比較
- 分子動力学： 定エネルギーMD、定温 MD、FMO4 まで可、動的フラグメント定義
- 並列化： フラット MPI および OpenMP/MPI 複合
- 対応環境： PC クラスタ、超並列スカラー機 (京を含む)、ベクトル並列機 (ES2)

◇ABINIT-MP 専用可視化プログラム BioStation Viewer Version 16.0

BioStation Viewer は、ABINIT-MP の入力データの作成や計算結果の可視化解析のための GUI プログラムである。FMO 計算の特徴であるフラグメント分割などの前処理を支援するとともに、計算結果からエネルギー指標や分子軌道によって効果的に分子内・分子間の相互作用を解析するための可視化機能を豊富にサポートしている (図1)。また、FMO による電子密度計算結果を X 線結晶構造解析による電子密度と比較する機能のプロトタイプを搭載した (図2)。

◇主な機能 (Windows 系)

- 入力データ作成： ABINIT-MP の入力ファイルの作成、自動/手動フラグメント分割
アミノ酸残基、DNA の自動分割、リガンド分割、結晶系の分割など
- IFIE 解析： フラグメント間相互作用エネルギー (IFIE) 解析の可視化機能
3次元立体構造表示、網羅的な2次元マップ表示 (IFIE map) などが可能
- VISCANA： タンパク質-リガンド相互作用パターン解析によるリガンドのクラスタリング
- 軌道相互作用： 水素結合ネットワーク解析 (CAFI)、分散相互作用 (CH/ π 、 π / π) 解析 (FILM)
- CHPI 解析： 分子座標データから CH/ π 相互作用を抽出・可視化
- グリッドデータ解析： 電子密度 (CNS 形式) の表示および実験値との比較、静電ポテンシャル、分子軌道、電場ベクトル

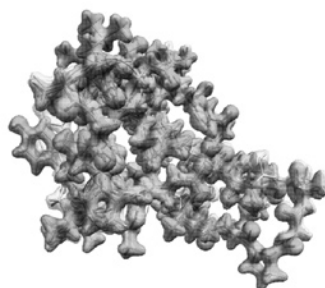
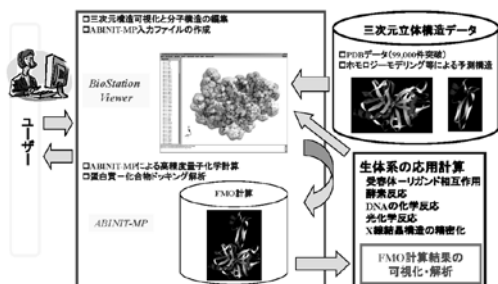


図1 BioStation システムの利用イメージ

図2 MP2 による crambin の電子密度の可視化

謝辞

本研究 (の一部) は、文部科学省高性能汎用計算機高度利用事業「HPCI 戦略プログラム」分野4次世代ものづくりの補助を受けて実施したものである。

参考文献

- [1] “The Fragment Molecular Orbital Method: Practical Applications to Large Molecular Systems” edited by D.G. Fedorov and K. Kitaura (Taylor & Francis/CRC Press, Boca Raton, FL, 2009).
- [2] “Electron-correlated fragment-molecular-orbital calculations for biomolecular and nano systems”, S. Tanaka, Y. Mochizuki, Y. Komeiji, Y. Okiyama, K. Fukuzawa, Phys. Chem. Chem. Phys. 16 (2014) 10310-10344.

(執筆責任者：望月祐志)