



分類	量子化学計算
キーワード	タンパク質、量子化学計算、密度汎関数法
開発者	佐藤文俊、井原直樹、上野哲哉、田原才静、恒川直樹、西野典子、西村康幸、平野敏行、吉廣 保、稲葉 亨、小池 聡、長峰康雄、西村民男、新田 仁、西川宜孝、小池秀耀、柏木 浩
作成年月日	2005年6月
コード名	ProteinDF
使用言語	C++

◇ ProteinDF システム

当グループではアミノ酸残基とヘテロ分子で同程度の定量性を持ち、タンパク質をありのまま扱う量子化学計算による解析手段として密度汎関数 (DF) 法プログラム ProteinDF を開発した[1、2]。不可能といわれたタンパク質量子化学計算を達成し、次のステップであるコストが高い、シミュレーションが困難といった具体的な難点を克服する方法を確立しつつある。ProteinDF システムは ProteinDF と分子軌道 (MO) 計算の収束を大幅に改善する擬カノニカル局在化軌道 QCLO[3]をベースに、密度汎関数法によるタンパク質の全電子計算や分子動力学 (MD) 計算が行える統合ソフトウェアである。初めてタンパク質の全電子計算を行った当時は計算時間も桁違いでDF計算の収束も困難を極めたが[2]、3年の間にまったく実用的な時間で、それほど試行錯誤することなく達成できるまでに成長した。そこで、タンパク質のための量子化学計算 ProteinDF システムを公開する。

◇ プログラムの概要

ProteinDF システムは5つのサブシステムから構成されている。タンパク質波動関数データベースは別途公開する。**プロテイン・エディタ**：本システムの実行・制御・解析に渡る全機能を統括する環境を用意した。グラフィカルなエディタ機能を持つワークベンチ、各種の機能表現に必要なタンパク質のための大規模分子グラフィックス (OpenGL)、およびそのグラフィカル・ユーザ・インターフェース (GUI、Windows 対応) で構成されている。**自動計算法**：タンパク質の密度汎関数法による全電子波動関数の計算を達成するには、専門家が数々の試行錯誤をしなければならなかったが、前述の通り、当グループでは QCLO を使用して安全かつほぼ自動的にタンパク質の全電子計算が達成できる方法を発案し[3]、これを組み込んでいる。**構造最適化・*ab initio* MD**：新たに MD プログラム ProteinMD を開発した。

これまでの AMBER によるデータベース力場以外にも、電子状態の計算には ProteinDF を用いて力を解析的に計算し、核の運動には ProteinMD を用いてタンパク質の *ab initio* MD および *ab initio* 構造最適化を実行できる。大規模タンパク質計算：300 残基（5,000 原子、20,000 電子、30,000 軌道）規模の全電子計算が達成できる。1.3GHz Itanium2 の 64CPU（理論ピーク性能 333GFlops）を使用した実測では 1 ヶ月ほどで計算可能。100 残基（2,000 原子、7,000 電子、10,000 軌道）規模の計算ならば同システムを用いて 1 日。タンパク質波動関数データベース：タンパク質の代表的な構造や、同じタンパク質に対して一連の遺伝子工学的な操作がなされた構造をあわせて 20 種類程度の全電子計算を系統的に実行した。得られた結果を収集し、データベースを構築している。これらは CD で配布する予定である。

タンパク質の電子状態計算が実用化の域に突入しつつある。今後は生命現象の基礎過程解明といった研究のみならず、医薬品、触媒、遺伝子治療、遺伝子改変、環境有害物質の解析等に有用なツールを充実させていく予定である。

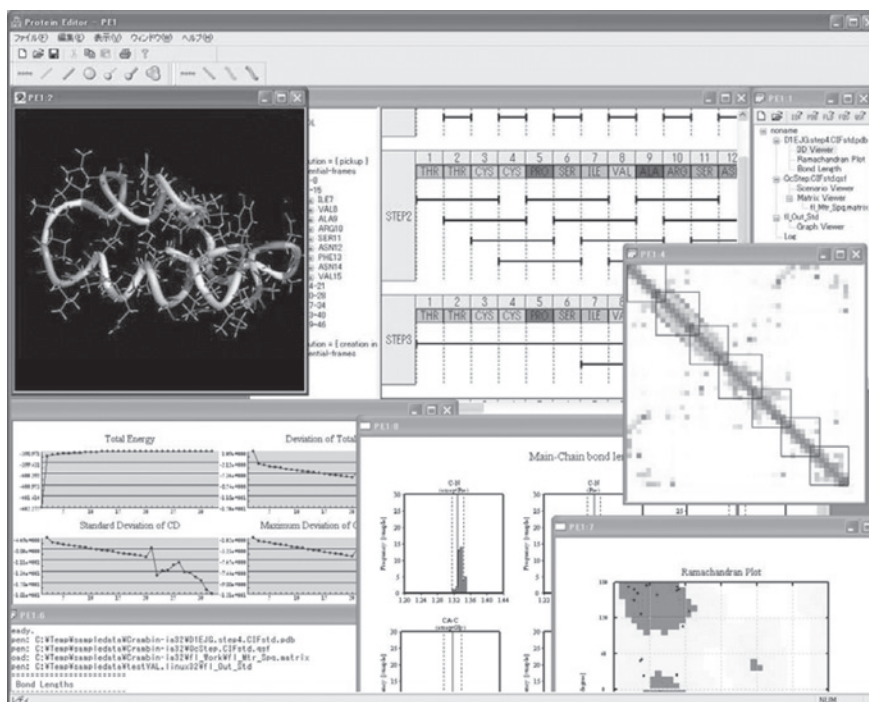


Fig.1 ProteinDF システムの GUI、ProteinEditor
(画面は開発中のもので、公開時には外見等が一部変更になる可能性があります)

◇参考文献

- (1) 柏木 浩、佐藤文俊、吉廣 保、稲葉 亨、西川宜孝、小池 聡；“タンパク質量子化学計算－ProteinDF の夢と実現－”、柏木 浩、佐藤文俊監修、アドバンスソフト(2004)、ISBN4-9902143-0-7.
- (2) F. Sato, T. Yoshihiro, M. Era, H. Kashiwagi, *Chem. Phys. Lett.*, 341 (2001) 645. (3) H. Kashiwagi, H. Iwai, K. Tokieda, M. Era, T. Sumita, T. Yoshihiro, F. Sato, *Mol. Phys.*, 101 (2003) 81.