

分類	非経験的分子軌道法プログラム、ドッキング・プログラム、分子モデリング、データベース
キーワード	ab initio FMO 法、XUFF、タンパク質、3D 分子構造表示、データベース、リガンド、結合実験
開発者	中野達也、望月祐志、田中 皓、小林将人、長谷川浩司、小川哲司 (ABINIT-MP) 愛澤昌宏、張 軍衛、甘利真司、岩澤義郎、中田琴子 (KiBank) 加藤昭史、福澤 薫、佐藤智之 (BioStation Viewer) 谷森奏一郎、雨宮克樹 (BioStation Launcher)
作成年月	2007 年 6 月
コード名	ABINIT-MP, KiBank, BioStation Viewer, BioStation Launcher
使用言語	Fortran90, MPI (ABINIT-MP) PostgreSQL, Jakarta Tomcat, Java, JavaScript (KiBank) Java, Java3D (BioStation Viewer, BioStation Launcher)

タンパク質-化学物質相互作用解析システム BioStation

タンパク質-化学物質相互作用解析システム BioStation は、タンパク質と化学物質との相互作用を量子化学計算に基づいて解析し、効率的な化合物探索や分子設計を可能にすることを目標に開発を行っているシステムである。非経験的フラグメント分子軌道 (ab initio Fragment Molecular Orbital) 法を実装した ABINIT-MP[1]、その計算結果を可視化し解析する BioStation Viewer (以下 Viewer) を中心に、医薬品などの開発の標的となるタンパク質や低分子化合物のデータを収集したデータベース KiBank、これらを統合する BioStation Launcher (以下 Launcher) から構成される。最新版の ABINIT-MP、BioStation Viewer と Launcher についてソースコード、技術資料、計算用サンプルデータを公開する。KiBank については、利用者が自由に検索することができるように web データベースとして公開している。このソフトウェアベースでは、2006 年度に行われた開発を中心に紹介する。

コード配布元及び KiBank の URL

<http://www.rss21.iis.u-tokyo.ac.jp/result/download/index.php>
<http://kibank.iis.u-tokyo.ac.jp/>

ソフトウェアの概要

○ Ab initio FMO 法に基づいた分子間相互作用解析プログラム ABINIT-MP

ABINIT-MP は ab initio FMO 法に基づいて、タンパク質、DNA、低分子化合物及びそれらの複合体の相互作用をフラグメント単位で解析するプログラムであり、数百残基のタンパク質の電子状態計算が、比較的小規模 (数十 CPU 程度) の PC クラスタで可能となっている。また、ベクトル化されているため、地球シミュレータ (512 ノード (4096 プロセッサ) で、ベクトル化率 97.68%、並列化率 99.98%) の利用も可能である。

生体系を構成する分子間の相互作用において重要な水素結合や van der Waals 相互作用を精度よく計算するためには、電子相関を考慮することが必須であり、そのため ABINIT-MP には望月により開発された高速な並列化 MP2 計算エンジンが組み込まれている。また、対象とする分子を複数領域 (layer) に分割し、layer 毎に異なるレベルの計算を行なう多層化 FMO (MLFMO) 法も組み込まれており、layer 2 については MP2 計算を行ない、layer 1 については HF 計算を行なうといったことが可能である (図 1)。このような MLFMO 計算を行うと、layer 2 内のフラグメント間相互作用エネルギーは、分子全体で FMO-MP2 計算を行った場合と同じ値になるので、低い計算コストで関心領域のフラグメント間相互作用を MP2 レベルで見積もることができる。

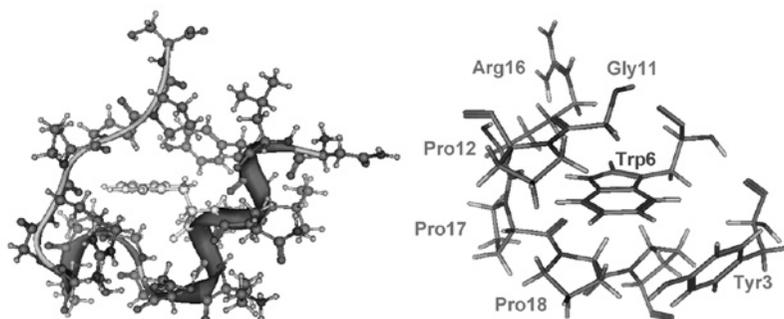


図 1 Trp-Cage の MLFMO-MP2 計算例。Trp6 と周辺残基 (Pro12、Pro17、Pro18) のみを MP2 レベルで計算

分子の構造最適化機能については、三次補間直線探索アルゴリズムを用いた Polak-Ribière 型共役勾配法の組込みを行い、収束性を改善した。また、部分構造最適化計算の際には、構造最適化領域と固定領域の間にバッファ領域を導入する新しいアルゴリズムを開発し、高速かつ高精度な部分構造最適化が可能となっている。

さらに、monomer self-consistent charge (SCC) の収束加速やロードバランスの改善が行われており、FMO エネルギー一点計算においても Ver. 3.0 と比較して数十%高速になっている。

参考文献

- [1] T. Nakano, Y. Mochizuki, K. Fukuzawa, S. Amari, S. Tanaka, in "Modern methods for theoretical physical chemistry of biopolymers", E.B. Starikov, J.P. Lewis, S. Tanaka, Eds., pp39-52, Elsevier, Amsterdam, 2006.