



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、平野敏行、阿部敏彦、上村典子、 下向智美、恒川直樹、西村康幸、松田潤一
作成年月日	2010年6月
コード名	ProteinDF
使用言語	C++

#### ◇ ProteinDF System 2010 概要

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、ProteinDF システムを開発している[1、2]。密度汎関数法による全電子カノニカル波動関数計算を行う汎用性から、タンパク質のみならず機能性高分子も取り扱える計算能力があり、ナノスケールものづくりに貢献できると思われる。本公開ソフトウェアは、実用的なプリ・ポスト処理機能を追加しつつ、本システムをバイオ・ナノ分子特性シミュレーションシステムとして発展させたβバージョンである。具体的には、大規模クラスタ分子において、量子化学計算の標準であるB3LYPとvdW相互作用を組み込んだDFT+D計算が高速に行えるようになった。また、芳香族化合物の励起状態計算も高精度に求めることができるGrimmeのDFT-CIS法のプロトタイプ版をつけた。さらに、本システムの統合グラフィカル・ユーザー・インターフェース(GUI)も機能強化し、オリジナルの分子モデリング機能とそれに伴うCTFileのサポート、ならびにIRC計算機能として先行してGaussianの入出力をサポートした。なお、ソフトウェアは随時アップデートしており、ダウンロードして無料で利用することができる[3]。

#### ◇注目すべき新機能・開発項目

**大規模タンパク質のためのB3LYP基底状態計算用エンジン**：ProteinDFはタンパク質の全電子計算を遂行するために、全ノードから参照できる共有ファイルシステムを有効利用するように構築されている。大規模分子の量子化学計算を行う場合、行列要素の計算ならびに行列演算に大量のメモリ領域を必要とする。このため、同時に計算する行列を最低限に絞り、その時点で必要ではない行列はディスク領域に退避させる方法を採用した。ディスク領域を使用することは非効率的であるが、計算ノードの搭載メモリ量が限られている現在において、大規模分子の量子化学計算を行う一つの策である。ディスク領域に退避させるもう一つのメリットとして、リスタートが可能である点も挙げられる。また、MPI/

OpenMP のハイブリッド並列により、マルチコア並列計算機にも対応している。実際これにより、一般的な PC クラスタでも世界最大規模の B3LYP 全電子量子化学計算を達成できる。

**分子モデリング** : ProteinEditor は本システムの統括 GUI である。タンパク質の基底状態全電子計算達成をサポートする機能をほぼ全て装備している。これまでも、分子モデリング機能として、水素付加、アミノ酸残基置換、原子間衝突や水素結合、塩橋の判定、原子の追加・削除、原子間の結合、構造の幾何変換などが装備されていた。本バージョンでは、構造編集機能と操作を向上させるために、新たにモデリング用 GUI、ProteinModeler を開発した。ProteinEditor のインターフェース (I/F) の仕様は、ポスト処理を中心に考えられている。タンパク質構造モデリング機能が混在した環境において、この仕様ではメインウィンドウ内に全ての操作画面 (ウィンドウ) が子ウィンドウとして表示されるなど、操作が煩雑になることが多い。また操作も基本的にメニューから選択されるため、状態遷移のパスが多く直観的でないケースがある。モデリングでは機能の分かり易さや対話的な編集における操作性が重要である。また、タンパク質、特に金属を含むタンパク質のシミュレーションにおいては、複雑なモデリング操作が必要になるため、このような構造モデリングに適した操作パスを用意する必要がある。ProteinModeler は簡易版 I/F と詳細版 I/F を持ち、2つの側面から操作できる機能を持たせた。簡易版 I/F では、一般的な分子モデリングを難しい設定を必要とせずに直感的に操作することができる。詳細版 I/F は、簡易版 I/F では登録されていない様々な機能を利用できるようになっている。さらにモデリング操作の手順をフローチャート形式で設定 (ネットワークを作成) することにより独自のモデリング操作を作成することができる。

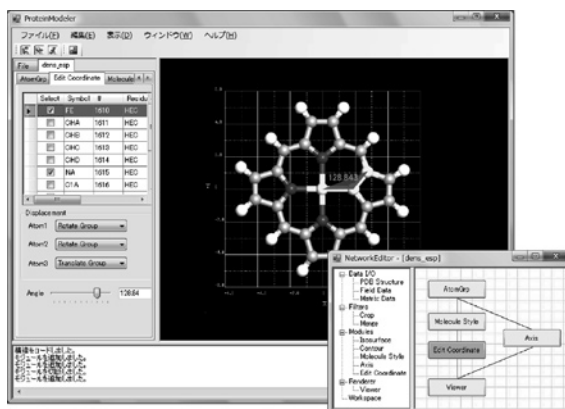


Figure 1. ProteinModeler  $\beta$  版のスナップショット

#### ◇参考文献

- [1] 佐藤文俊、恒川直樹、吉廣 保、平野敏行、井原直樹、柏木 浩：“タンパク質密度汎関数法”、柏木浩監修、森北出版 (2008)
- [2] 上村(西野)典子、佐藤文俊、恒川直樹、西村康幸、平野敏行、吉廣 保、甘利真司、加藤昭史、小林将人、田中成典、中野達也、福澤 薫、望月祐志：“プログラムで実践する 生体分子量子化学計算-ProteinDF/ABINIT-MP の基礎と応用”、佐藤文俊、中野達也、望月祐志編、森北出版 (2008)
- [3] <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/> (執筆責任者：佐藤文俊)