



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、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
作成年月	2013年3月
コード名	ABINIT-MP ver. 6、BioStation Viewer ver. 15.0
使用言語	Fortran90、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 6

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。本ソフトウェアは、文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトのもとで整備・開発が進められた。本バージョンでは、アミノ酸残基の主鎖と側鎖を分離し、応じて薬品分子 (リガンド) 側も機能部位単位に分割して相互作用を詳細解析出来る4体補正 FMO 計算が3次摂動レベルで可能となった他、PB 誘電体モデルによる水和エネルギー算定や部分構造の最適化などもサポートされ、特に創薬分野での利便性を大幅に向上させている。

◇コードの主な特徴

- エネルギー：4体補正 (FMO4) が可能。計算レベルは Hartree-Fock (HF)、2次および3次の Møller-Plesset 摂動 (MP2、MP3) に対応
- 構造最適化：HF と MP2 で部分構造 (フラグメント指定) の最適化が可能
- 解析機能：フラグメント間相互エネルギー解析 (IFIE)、自然密度 (NBO) 電荷、電子分布および軌道の可視化、水素結合ネットワーク解析 (CAFI)、Poisson-Boltzmann (PB) 水和モデル
- 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、ベクトル並列機
- その他：コレスキー分解型高速 MP2 (図1)、基底関数重ね合わせ誤差 (BSSE) 補正、有ギャップ固体系への適応 (FMO4)、HF 収束性の改良

◇ ABINIT-MP 専用可視化プログラム BioStation Viewer Version 15.0

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の前処理や入力ファイルの作成を支援するとともに、膨大な計算結果データから効果的に分子内・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2)。特に、フラグメント間相互作用エネルギー (IFIE) や軌道相互作用エネルギー (CAFI、FILM) の可視化が特徴である。

◇ 主な機能

- 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エネルギー (IFIE) 解析の可視化機能
三次元立体構造表示、網羅的な二次元マップ表示 (IFIE map) などが可能
- 多体項表示： FMO3 および FMO4 計算によるエネルギー多体項の可視化
- 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
- CHPI 解析： 分子座標データから CH/ π 相互作用を抽出・可視化[3]
- グリッドデータ解析： 電子密度、静電ポテンシャル、分子軌道、電場ベクトル
- 対応環境： Windows

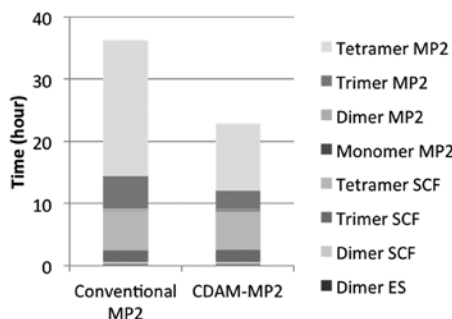


図1：コレスキー分解型高速MP2法によるFMO4計算の高速化

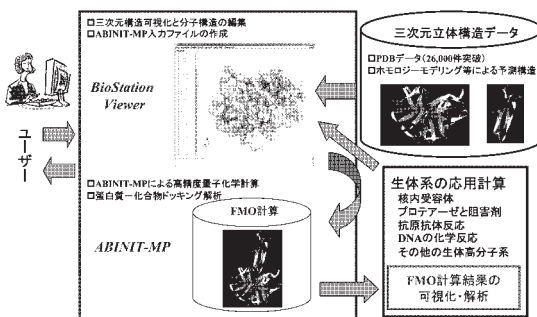


図2：BioStation システム利用のイメージ

◇ 参考文献

- [1] 佐藤、中野、望月編「プログラムで実践する生体分子量子化学計算」森北出版 2008
- [2] "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)
- [3] 西尾元宏「新版 有機化学のための分子間力入門」講談社 2008

(執筆責任者：望月祐志)