



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
作成年月日	2015年4月
コード名	ProteinDF、QCLObot
使用言語	C++, Python

◇ProteinDF 2015 概要

我々は、密度汎関数法に基づき、タンパク質分子全体の全電子カノニカル波動関数を計算する ProteinDF システムを開発している[1、2]。計算法の汎用性から、タンパク質に限らず様々な巨大分子の電子状態を解析できるため、ナノスケールものづくり設計に貢献できる。本研究により開発されたソフトウェアはインターネット上に公開している[3]。

◇ProteinDF 2015 の主な特徴

ProteinDF は MPI/OpenMP ハイブリッド並列化された大規模分子用電子状態計算プログラムである。分散メモリ型並列計算機でも効率良く大規模分子のカノニカル分子軌道計算が実行できるように、第3世代密度汎関数計算法[4]を実装している。本計算法はコレスキー分解法とグリッドフリー法に基づき、SCF 繰り返し計算前に1度だけ分子積分（2電子反発積分・重なり積分）計算を行い、SCF 繰り返し計算中は行列演算のみを行う計算方法である。ScaLAPACK などの並列計算機に最適化された線形演算ライブラリを利用することで高速に計算できるだけでなく、タスク分散が容易になり並列化効率の向上が期待できる。コレスキー分解法により計算精度を数学的に制御可能であることも利点の一つである。

本バージョンではいくつかの改良が行われている。SCF 繰り返し計算前のコレスキー分解における並列処理を見直し、MPI 通信時間の削減によって高速化を行った。また、クーロン項・Fock 交換項の行列演算方法を見直し、SCF 繰り返し計算の計算時間短縮を果たした。本バージョンはインターネット上から入手可能である。

◇QCLO 法の改良

大規模分子のカノニカル分子軌道計算を達成させるためには、できるだけ収束解に近い、良質の SCF 初期値が必要である。QCLO 法[5]は、大規模分子のサブユニット（フレーム分子）の電子状態計算結果から擬カノニカル局在化軌道（QCLO）を作成し、大規模分子の分子軌道を高精度に組み上げる

ことのできる初期値作成法である。これまで開発された QCLO 法プログラムでは、局在化軌道 (LO) の振り分けが明瞭となる単結合を QCLO 作成単位 (フラグメント) の境界として設定してきた。アミノ酸残基の場合、 $C\alpha$ 炭素の 4 つの結合は全て単結合であることから、 $C\alpha$ 炭素でフラグメント分割することで分割に起因する誤差を軽減することが期待された。実際、これまでに行った幾つかのタンパク質カノニカル分子軌道計算はこの分割法で達成された [6]。 $C\alpha$ 炭素によるフラグメント分割は、ペプチド結合でアミノ酸残基を区分する生化学的な方法と異なるため、そのままではアミノ酸残基間の相互作用エネルギーの算出は難しかった。また、QCLO 法ではタンパク質の 2 次・3 次構造に基づく計算シナリオが重要である [7] が、そのためには結合様式に囚われない、自由なフラグメントの取り扱い方法を実現する必要があった。ポリペプチドのような規則性のある結合パターンだけでなく、任意のサブユニットから効率良く QCLO を作成し、初期値を構築する方法を研究した。また、大規模分子の初期値を作成する一連の計算シナリオを自動的に処理するプログラム QCLObot を開発した。

QCLObot は Python によるオブジェクト指向プログラミングで実装されており、ユーザーが QCLO クラスを利用したスクリプトを用意することで、煩雑な QCLO 計算処理を記述することなく、自由な計算シナリオを実行することができる。見読性に優れた YAML ファイルによる入力方法もサポートしているので、プログラミングせずとも複雑な分子の計算シナリオを簡単に行うことができる。QCLObot プログラムの特徴の 1 つは冪等性であり、同じ操作を複数回行っても同じ結果が得られることである。したがって、計算シナリオ (YAML 形式の入力ファイル) の作成にあたり、フラグメントを構築する“状態”を記述することで、計算手順を気にすること無く対象フラグメントの相互作用を考慮することに専念できるようになった。本プログラムは GPL ライセンスのもとインターネットから入手可能である。

◇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実施したものである。

◇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://proteindf.github.io/>
- [4] T. Hirano, F. Sato, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2014. DOI: 10.1039/C3CP55514C
- [5] H. Kashiwagi, *Mol. Phys.*, 101, 81 (2003)
- [6] K. Chiba, T. Hirano, F. Sato, *Int. J. Quant. Chem.*, 113, 2345 (2013) など
- [7] N. Nishino-Uemura, T. Hirano, F. Sato, *J. Chem. Phys.*, 127, 184106 (2007)

(執筆責任者：平野敏行)