

2010
06/28



アドバンスソフト技術セミナー
生体分子量子化学計算ソフトウェアAdvance/BioStation(ADBS)

フラグメント分子軌道(FMO)法計算ソフトウェアADBSについて

アドバンスソフト株式会社
技術第2部 主事研究員
日野 理

1.

発表内容

- フラグメント分子軌道(FMO)法とは何か
- FMO法計算ソフトウェアADBSについて
- ADBS Ver.3.2で新規開発された機能とその特徴
- ADBSにおけるFMO法計算の独自性
- ADBSの動作環境、評価版のご提供



フラグメント分子軌道(FMO)法とは何か

量子力学による分子の理論

E. Schrödinger



Emilio Segre Visual Archives

◆ 分子のシュレディンガー方程式

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \sum_{A=1}^M \frac{Z_A e^2}{|\mathbf{R}_A - \mathbf{r}_i|} \right) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N) = E\Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N)$$

化学に関する自然法則は、これによってほとんど尽くされている
残されているのは計算技術の問題である

P.A.M Dirac



Emilio Segre Visual Archives

Hartree-Fock法 最も基本的な近似法

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \sum_{A=1}^M \frac{Z_A e^2}{|\mathbf{R}_A - \mathbf{r}|} \right) \varphi_p(\mathbf{r}) + \sum_{i=1}^N \int \varphi_i(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi_i(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \varphi_p(\mathbf{r}) - \sum_{i=1}^N \int \varphi_i(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi_p(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \varphi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_p \varphi_p(\mathbf{r})$$

小さな分子 (~100原子程度) は計算
できるが...



Scanned at the American Institute of Physics

D. R. Hartree



V. A. Fock

Emilio Segre Visual Archives

3



フラグメント分子軌道(FMO)法とは何か

- 量子化学計算にかかるコスト(時間) vs. 分子サイズ
- 実験的計算: 水分子クラスター-6-31G基底

H₂O × 1



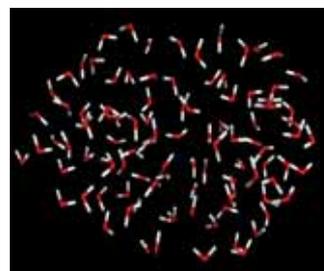
HF 0.16 sec
MP2 0.07 sec

H₂O × 10



HF 59.8 sec
MP2 33.8 sec

H₂O × 100



HF 48201.3 sec
MP2 3.7 days

- ◆ 量子化学計算のスケールリングは非常に大きい
- ◆ 生体分子を量子化学で扱うのは**非現実的**



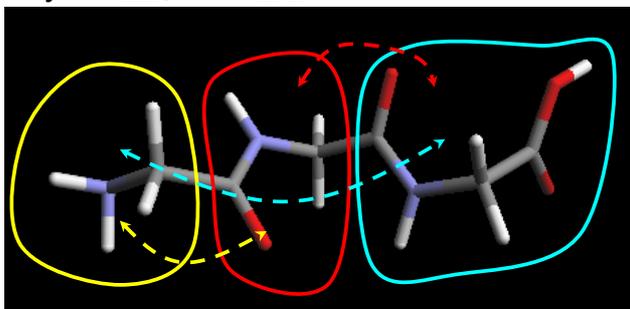
4

フラグメント分子軌道(FMO)法とは何か

フラグメント分子軌道(FMO)法 北浦和夫博士(1998)

- 巨大分子を分割して個々に量子化学計算を行う
- フラグメントペア(ダイマー)計算による補正

Glycine3量体のFMO計算



- ◆フラグメント計算の手順はほぼ同じ。
- ◆フラグメントペアについて量子化学計算を行い、各フラグメントとフラグメントペアの電子密度から全電子密度を再構成する。

HF	-696076.054mEh
FMO-HF	-696075.026mEh
MP2	-697442.951mEh
FMO-MP2	-697441.407mEh

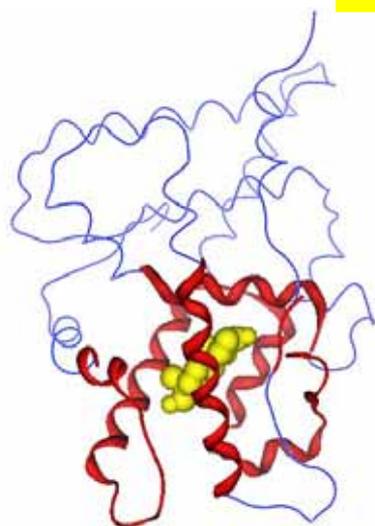
~ 200残基程度のタンパク質の量子化学計算が1日程度で計算可能



5

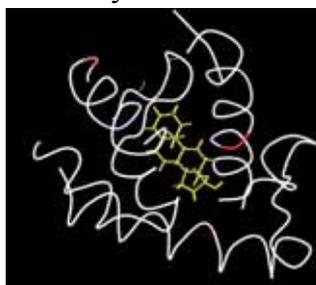
フラグメント分子軌道(FMO)法とは何か

FMO計算結果による相互作用解析



アンドロゲン受容体
PDB ID: 1T7T+リガンド

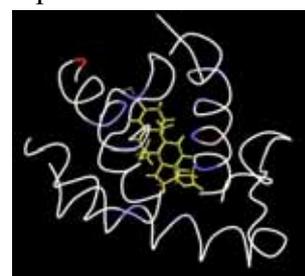
5 α -dihydrotestosterone



prednisolone



spironolactone



6

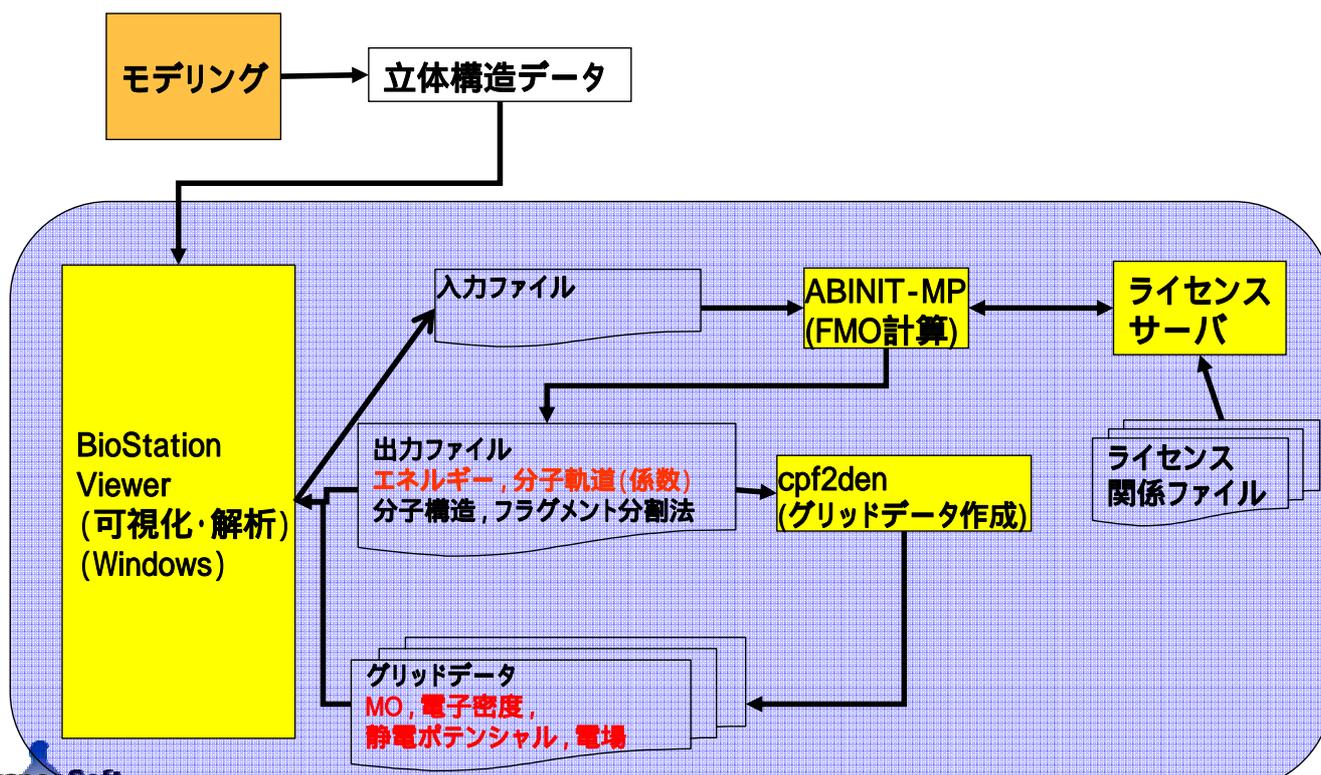
FMO法計算ソフトウェアADBSについて

- FMO法を基礎とした巨大分子の量子化学計算ソフトウェア
 - 200アミノ酸残基レベルの生体分子量子計算が1日程度で可能
 - 摂動理論、密度汎関数理論などの高精度計算
 - 汎用分子力場 (XUFF) + 可変電荷を組み合わせた分子力学計算
 - QM / MM計算
 - **ファーマコフォア周辺の第一原理による相互作用解析**
- 並列計算
 - ベンチマーク計算で99.95%の並列化率
 - 1ライセンスで任意のプロセス数による並列計算 (c.f. ガウシアン)
- GUI
 - 計算エンジンを起動させるための複雑な入力ファイル生成
 - 計算結果に基づく種々の解析
 - 計算結果の可視化



7

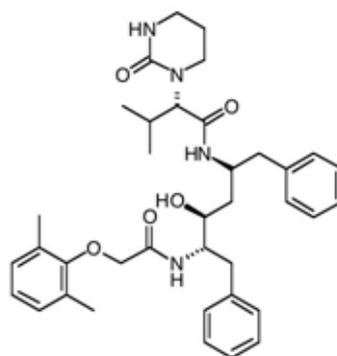
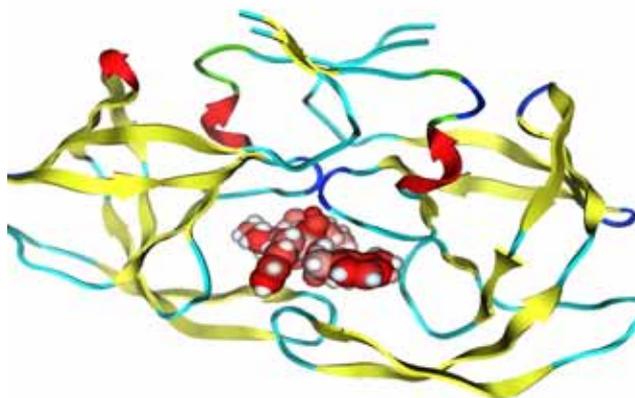
FMO法計算ソフトウェアADBSについて



8

FMO法計算ソフトウェアADBSについて

PDBID:1MUI 198アミノ酸残基+1リガンド
Human immunodeficiency virus
(ヒトエイズウィルスプロテアーゼ+ロピナビル)



Intel Xeon, MPICH2

FMO-MP2 / 6-31G / 8並列計算: **23.5時間**

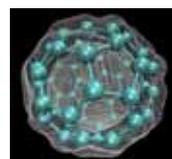
FMO-DFT / 6-31G / 8並列計算: **22.3時間**



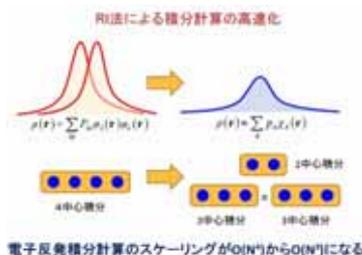
9

ADBS Ver.3.2で新規開発された機能とその特徴

- 密度汎関数理論 (DFT)
 - 少ないコストで高精度の計算が可能
 - 量子化学計算で最も使用される方法



- RIMP2 (RI-2次摂動理論)
 - MP2の高速計算アルゴリズム
 - 数倍 ~ 10倍程度の高速化



- リスタート計算の強化
 - 複数のリガンドに対する計算の簡略化
 - 計算結果の再利用性の向上



10

ADBSにおけるFMO法計算の独自性

- モノマー計算における収束加速法の導入[高速化]
 - S.-I. Sugiki, N. Kurita, Y. Sengoku and H. Sekino, Chem. Phys. Lett. 382 (2003) 611
- 開殻系への対応[計算機能]
 - 巨大分子の高速開殻電子状態計算法 (特願2008 - 63118)
- 安定なFMO-DFT計算アルゴリズム(導入予定) [計算機能]
 - FMO-DFT計算における不安定性の改善 (分子科学討論会2009名古屋)



11

ADBSにおけるFMO法計算の独自性

- FMO-RIMP2法の導入[高速化]
 - Acceleration of MP2 calculation with fragment molecular orbital(FMO) scheme by resolution of identity(RI) approximation (理論化学討論会2009東京)
- RI法を用いた高速静電ポテンシャル計算[高速化]
 - フラグメント間静電相互作用へのRI法の適用 (分子科学討論会2009名古屋)
- フレキシブルなりスタート計算機能[計算機能]
- 開発者自身による日本語でのユーザーサポート



12

ADBSの動作環境 / 評価版

- Red Hat Linux Enterprise Ver.3 以上、Windows 2000/XP(32ビット)
- 1ジョブの並列プロセス数に制限なし
- 評価版のご提供を行っております。下記E-mailアドレスか、弊社ホームページ<http://www.advancesoft.jp/>からお問い合わせください。

