

バイオ分子相互作用シミュレーター

ABINIT-MP/BioStation

ABINIT-MP ver. 6.0
BioStation Viewer ver. 15.00

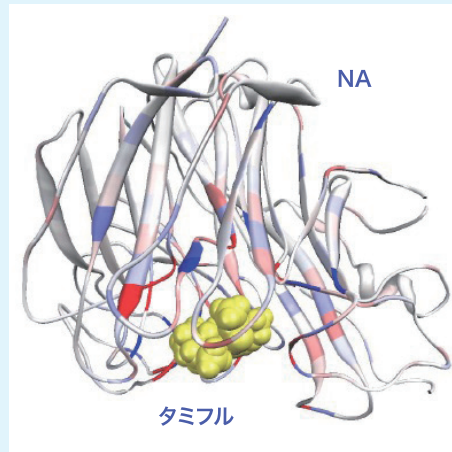
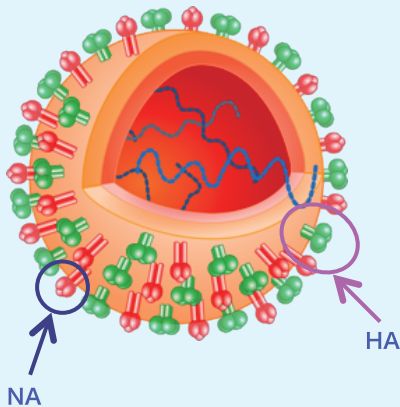
効率的な薬品分子設計や化合物探索を実現

フラグメント分子軌道(FMO)法に基づいて、タンパク質と化学物質との相互作用を解析
PCクラスタからスパコンまでをカバーし、先進性と実用性を兼ね備えた量子化学計算解析ソフトウェア

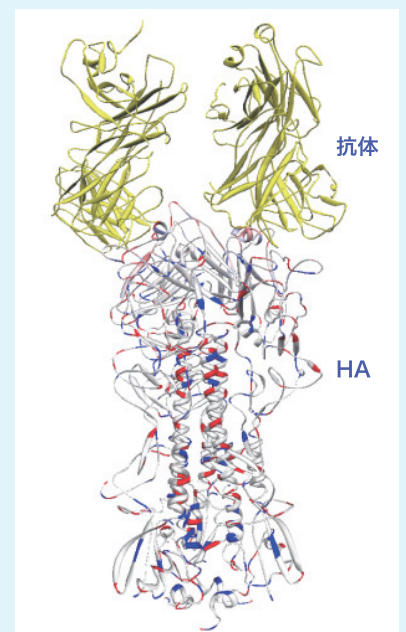
実証事例

抗インフルエンザ薬の開発

ヘマグルチニン (HA、ウイルスが吸着する過程に関わるタンパク質)と
ノイラミニダーゼ (NA、増殖したウイルスが脱離する過程に関わるタンパク質)の
大規模MP3計算を地球シミュレーターで実施



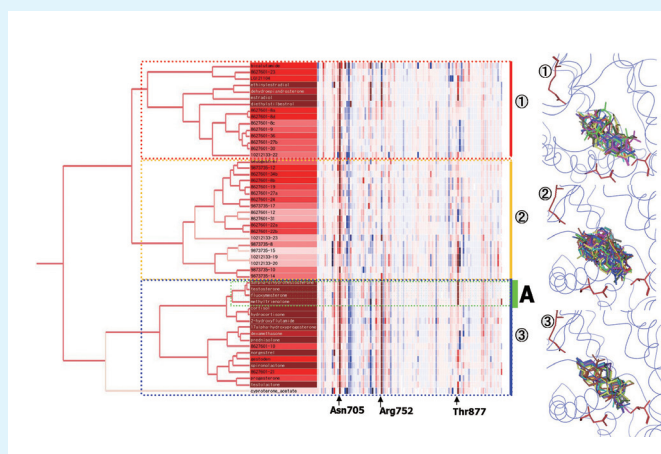
NAとタミフルとの相互作用解析が
抗インフルエンザ薬の開発に役立つ



HA3量体とFab抗体との相互作用解析が
ウイルスの変異予測、ワクチンの開発に役立つ

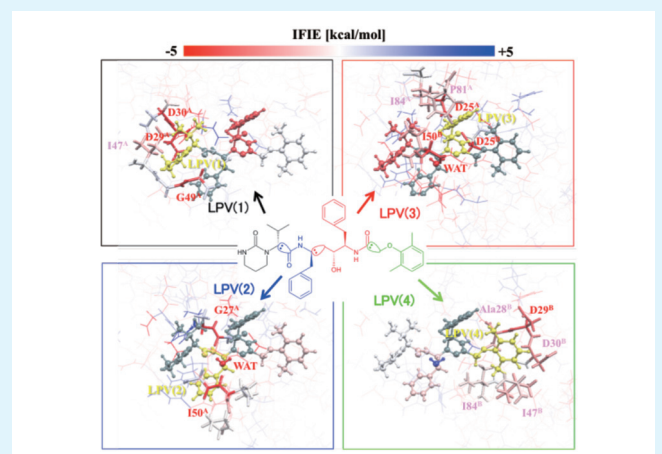
医薬品化合物の類似性探索

複数の医薬品化合物をタンパク質との相互作用の類似性
によりクラスタリング
⇒ 標的化合物 (図中A) に近い化合物を探索



FMO4法による官能基単位の詳細解析

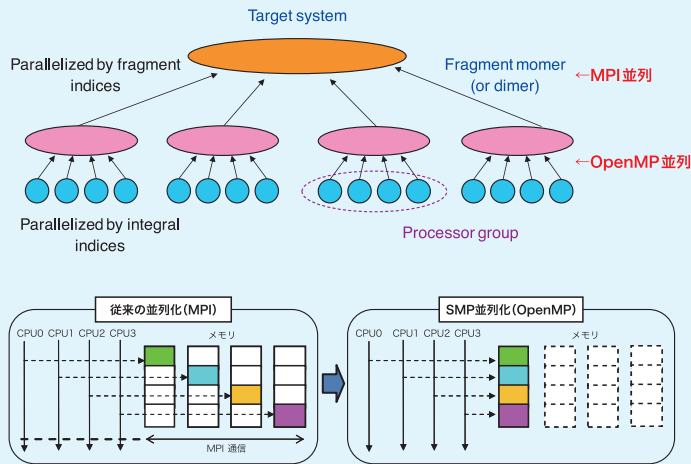
リガンドとタンパク質間の相互作用を
官能基単位・主鎖側鎖単位で詳細に解析することが可能



特徴的機能

FMO法による直截的な並列計算

フラグメント間をMPI、フラグメント内をOpenMPで並列化したハイブリッド並列化を実装



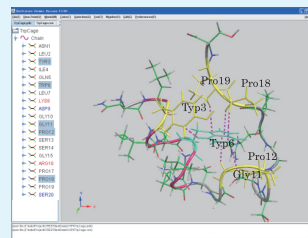
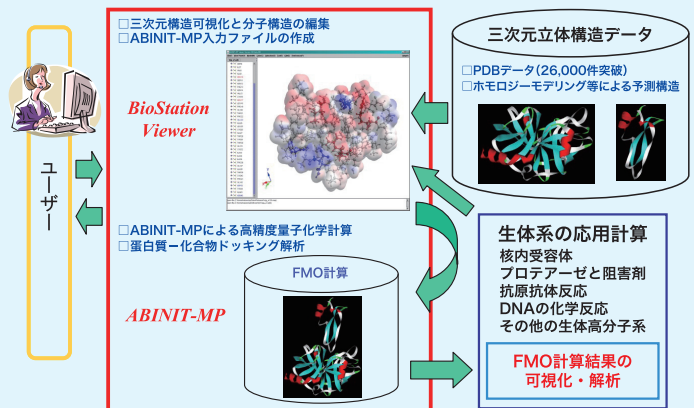
地球シミュレータ上の計算例

HA3量体：FMO-MP3/6-31Gが5.8時間(128ノード(1024コア))
 NA単量体：FMO-MP3/6-31Gが1.1時間(64ノード(512コア))
 FMO-MP3/6-31G*が4.4時間(64ノード(512コア))

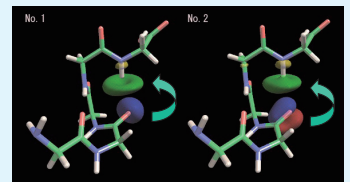
ABINIT-MPの実行効率はベクトル化という点でも非常に高く、2010年度の地球シミュレータの一般利用プログラムの中で最高性能を記録しています。

FMO法に特化したプリポストプログラム BioStation Viewer

分子構造の編集やABINIT-MP入力ファイルの作成、FMO法/ABINIT-MP独自の結果の可視化解析が可能



CH/ π 相互作用解析



軌道相互作用解析 (CAFI)

機能一覧

機能項目	サポート内容
FMO法	FMO2, FMO3, FMO4
エネルギー計算	HF法, MP2法, MP3法
エネルギー勾配	HF法, MP2法
構造最適化	BFGS法, CG法, PRCG法, 部分構造最適化
軌道相互作用解析	CAFI, FILM
Population解析	Mulliken電荷, NBO電荷, ESP電荷
BSSE補正	Counterpoise法
溶媒効果	Poisson-Boltzmann溶媒モデル

解析機能※	先進的特長
フラグメント間相互作用エネルギー (IFIE) 解析	フラグメント間の相互作用を定量的に解析
IFIE map	IFIEの2次元マップによる二体相互作用の網羅的解析
VISCANA	タンパク質-化学物質相互作用において、相互作用パターンの階層的クラスター解析によるリガンド類似性の抽出
CAFI	軌道レベルの電荷移動・分極相互作用解析
FILM	軌道レベルの分散相互作用解析 (CH/ π , π / π 相互作用等)
CHPI	CH/ π 相互作用を解析・可視化
GRID	電子密度・静電ポテンシャルの可視化

※本解析機能はすべてBioStation Viewerにより可視化できます。

動作環境

■ ABINIT-MP 使用言語：Fortran90, MPI, OpenMP
 OS：Linux (64bit)、実行バイナリ提供
 コンパイラ：intel Fortran, PGI Fortran
 スーパーコンピュータ：地球シミュレータ (ES2)、FOCUSスパコン、
 「京」(2014年度から予定)
 1プロセッサ (MPIなし) でも稼働します

■ BioStation Viewer 使用言語：Java, Java3D
 OS：Windows (XP/Vista/7/8)、
 インストーラを提供

ドキュメント/例題データ集

ユーザーマニュアル (和英) / サンプル例題 (BioStation Viewerはモデリング機能のチュートリアル付き)

ABINIT-MP/BioStationは、国家プロジェクト等において開発され、文部科学省「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高度化・整備を進めています。
 ABINIT-MPおよびBioStationは国立大学法人東京大学の登録商標です。その他の会社名、製品名等は、各社等の登録商標または商標です。



ABINIT-MP, BioStation導入、機能カスタマイズなどのコラボレーションが可能です。お気軽にお問い合わせ下さい。

<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/>
 e-mail: software@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp



2013年12月