

## 2E16

### ABINIT-MP(X)による FMO 計算の最近の展開

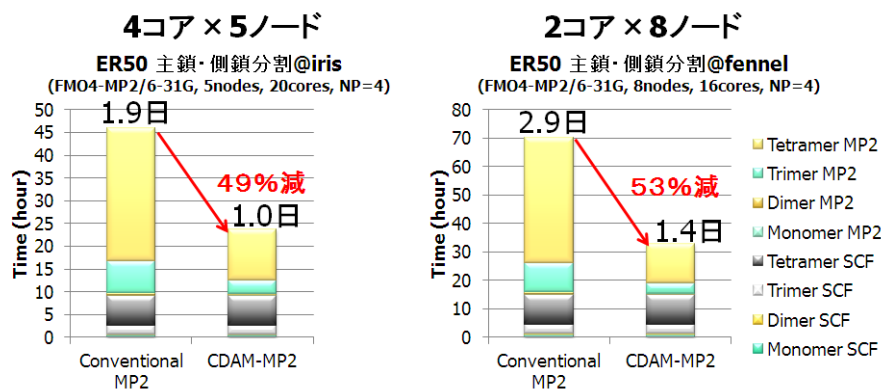
(立教大<sup>1</sup>, 東大-生産研<sup>2</sup>, みずほ情報総研<sup>3</sup>, 産総研<sup>4</sup>, 国立衛研<sup>5</sup>, お茶大<sup>6</sup>, 神戸大<sup>7</sup>) ○望月祐志<sup>1,2</sup>, 福澤薫<sup>2,3</sup>, 沖山佳生<sup>2</sup>, 古明地勇人<sup>4</sup>, 渡邊千鶴<sup>2</sup>, 塚本貴志<sup>3</sup>, 中野達也<sup>2,5</sup>, 森寛敏<sup>6</sup>, 松田彩<sup>6</sup>, 田中成典<sup>7</sup>

### Recent FMO works with ABINIT-MP(X)

(Rikkyo Univ.<sup>1</sup>, Univ. Tokyo IIS<sup>2</sup>, Mizuho-IR<sup>3</sup>, AIST<sup>4</sup>, NIHS<sup>5</sup>, Ochanomizu Univ.<sup>6</sup>, Kobe Univ.<sup>7</sup>) Y.Mochizuki<sup>1,2\*</sup>, K.Fukuzawa<sup>2,3</sup>, Y.Okiyama<sup>2</sup>, Y.Komeiji<sup>4</sup>, C.Watanabe<sup>2</sup>, T.Tsukamoto<sup>3</sup>, T.Nakano<sup>2,5</sup>, H.Mori<sup>6</sup>, A.Matsuda<sup>6</sup>, S.Tanaka<sup>7</sup>

**【序】** ABINIT-MP(X)は私たちが自主開発してきた FMO 計算のためのプログラムであり、高次相関法までカバーする並列計算を数百残基のタンパク質に対しても実用的に適用することが出来る[1-3]。また、PEACH との連携で FMO-MD シミュレーションも可能である[4,5]。こうした成果はこれまでも本討論会で発表してきているが、今回の講演ではこのところ強化・拡張された機能についてショーケース的に紹介させていただく。

**【FMO4】** 4体補正まで考慮した FMO4 法[6]では、タンパク質のフラグメント化でアミノ酸の主鎖と側鎖の分離、ならびにリガンドの官能基部位毎の断片化が精度を担保しつつ可能となり、創薬分野で重用される相互作用エネルギー解析の空間解像度が高められている；実応用の事例紹介については **2E17** と **4P106** をご参考。FMO4 ジョブでは4体計算のコストが支配的となるため、コレスキー分解 (CDAM)[7]を導入して高速化を試みている。下図は、2種の小規模 PC クラスタで女性ホルモン受容体(ER)の 50 残基モデルを計算したタイミング例である。CDAM によって、特に 4体 MP2 の計算コストが低減され、実行時間はほぼ半分になることが分かる。一方で、HF のコストが顕在化しており、差分 Fock 行列法の導入や収束性の改良による加速が必要と考えている。



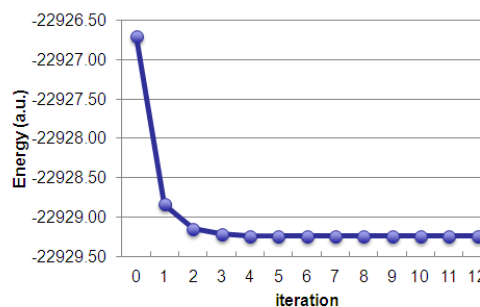
ナノ・バイオの境界領域も FMO 計算の今後の展開が期待される一分野であり[8]、有バンドギャップの固体に限られるが、表面への吸着のモデリングは試金石として重要であろう。下表は、6-31G 基

		Complex	SiO <sub>2</sub> cluster	Amino acid	B.E.	ΔB.E.	
Alanine	Conv. HF	-11189.67963	-10867.98174	-321.69167	-3.91	-	底を用いたシリカ表面のモデル (Si <sub>22</sub> O <sub>60</sub> H <sub>32</sub> )と 2
	FMO4-HF	-11189.68929	-10867.99096	-321.69167	-4.18	-0.27	
	Conv. MP2	-11198.46267	-10876.12667	-322.32409	-7.48	-	種のアミノ酸の相互作用評価の例である；全エ
	FMO4-MP2	-11198.47215	-10876.13644	-322.32409	-7.29	0.19	
Phenylalanine	Conv. HF	-11419.16561	-10867.99294	-551.15664	-10.06	-	種のアミノ酸の相互作用評価の例である；全エ
	FMO4-HF	-11419.17458	-10868.00216	-551.15664	-9.90	0.16	
	Conv. MP2	-11428.46764	-10876.13656	-552.30783	-14.58	-	
	FMO4-MP2	-11428.47684	-10876.14630	-552.30783	-14.25	0.33	

ネルギーは au、結合エネルギーは kcal/mol。数値的には、通常の MO 計算の場合と比べても問題ないことが確認出来る。ペプチドの結合モデルについては、計算の準備を進めているところである。

**【FMO-PB】** ポワソン・ボルツマン法は水を誘電体として近似する簡易水和手法の一種であり、FMO

計算の電荷を用いて自己無撞着場(SCF)的に解く必要がある。文献[9]の段階では外部プログラム DelPhi を利用して SCF の繰返し過程を回していたが、PB ソルバーの内製化がほぼ完了した。右図は、前出 ER50 モデルに対して行った FMO-HF-PB/6-31G\* の計算のエネルギー収束状況である。収束後に MP2 レベルでフラグメント間の相互作用エネルギーを評価したところ、水和無し(非 PB)に比して 5-10kcal/mol 程度の差が出る場合があることが確認された。



**【CAFI】** CAFI[10]は電荷移動に注目してフラグメント間の相互作用(とりわけ水素結合)を解析するツールである。最初の実装では BDA で結合を共有する場合には計算出来なかったが、今回は軌道の直交化を改良することによって、この問題を解消した。下表はグリシン 5 量体の 6-31G\*\*基底での解析例である；値は au。

	TO		1	2	3	4	5
期待通りに隣接の非	FROM	1	-0.005854	-0.094354	-0.000217	-0.000012	0.000001
対角の寄与は大きく、	FROM	2	-0.057290	-0.020373	-0.082572	-0.004702	-0.000033
それより離れた場合	FROM	3	-0.000259	-0.064973	-0.026207	-0.081818	-0.004573
	FROM	4	-0.000021	-0.000555	-0.066589	-0.024393	-0.083840
	FROM	5	-0.000006	-0.000051	-0.000575	-0.065323	-0.019819

は小さい。なお、主たる水素結合としては 3→5 が相当する。

**【FMO-MD】** これまでも様々な応用例を報告[5]しているが、ここでは FMO3-HF/MCP による Ra(II) と Ba(II)の水和シミュレーションの新しい結果を挙げておく；詳細は **1P135** をご参照。前者の第一水和圏に対する Ra-O 動径分布関数のピークは 2.85Å で Ba(II)の対応値 2.86Å に近く、相対論効果による収縮と考えられる。Ra のような放射性物質を扱う実験は種々の困難が伴うため、こうした計算化学手法が知見を得る上で重要な役割を占めず好例と言えるだろう。

もう一つの発展は、PEACH 機能の ABINIT-MP(X)への“移植”で、従来のスクリプト・システムコール依存の実装と違って安定動作が確保し易い。併せて、Blue Moon 拘束力学[4]や動的フラグメント定義の改良・汎用化も進展している。**4P105** で示すが、京(神戸)や FX10(東大)を使った計算も試みつつあり、来年には MP2 レベルで水の MD シミュレーションを行う計画である。

**【その他】** UHF 微分に基づく FMO-MD シミュレーション[11]や UMP2 計算も可能となっている。また、MP2 微分を使った部分構造最適化[12]によって、FMO4 スキームで向上した解像度に応じた信頼性を持つようにファーマコフォアの構造リファインも出来る。細かな改良では ESP 計算の高速化と精度向上なども行っているが、これらはまた別の機会に述べる。

**【謝辞】** 本研究は、東大生産研 CISS プロジェクトならびに立教大学 SFR からの支援を受けている。また、JAMSTEC/地球シミュレータセンターと NEC から技術協力をいただいている。

**【文献】** [1] Mochizuki et al., *Chem. Phys. Lett.* **457** (2008) 396. [2] Mochizuki et al., *Chem. Phys. Lett.* **493** (2010) 346. [3] Mochizuki et al., *Theor. Chem. Acc.* **130** (2011) 515. [4] Komeiji et al., *J. Comp. Chem.* **30** (2009) 40. [5] Komeiji et al., *InTech Open Access Review Journal* <<http://bit.ly/HkefpI>>. [6] Nakano et al., *Chem. Phys. Lett.* **523** (2012) 128. [7] Okiyama et al., *Chem. Phys. Lett.* **490** (2010) 84. [8] "計算科学ロードマップ白書" - エクサ計算機実現に向けて - FMO に関する記述, <<http://bit.ly/Ncbsz8>>. [9] Watanabe et al., *Chem. Phys. Lett.* **500** (2010) 116. [10] Mochizuki et al., *Chem. Phys. Lett.* **410** (2005) 247. [11] Kato et al., to be published. [12] Tsukamoto et al., *Chem. Phys. Lett.* **535** (2012) 157.