

タンパク質の全電子計算のための QCL0 法プログラムの開発

(富士総合研究所 計算科学技術研究センター¹、東京大学 生産技術研究所²)

西川 宜孝¹、村松 伸哉¹、佐藤 文俊²、柏木 浩²

【序】

密度汎関数法に基づく分子軌道法を用いてタンパク質の全電子計算を行うためには、適当な初期データを作成する必要がある。計算対象のタンパク質をフラグメント分割し、各フラグメントの擬カノニカル局在軌道 (QCL0) を結合することにより、分子軌道計算のよい初期値になる。擬カノニカル局在軌道法 (QCL0 法) は、小規模なタンパク質の計算結果から、段階的に擬カノニカル局在軌道 (QCL0) を結合させながら、大規模なタンパク質全電子計算のための初期データを作成していく手法である。密度汎関数法に基づく分子軌道法プログラム ProteinDF を用いたタンパク質の全電子自動計算の実現を目的として、QCL0 法に基づく QCL0 法プログラムを開発した。

【QCL0 法プログラムの概要】

QCL0 法プログラムは、計算対象のタンパク質を小規模なタンパク質 (計算フレーム分子) に分割し、各計算フレーム分子の電子計算結果から、段階的により規模の大きいタンパク質の全電子計算を行う。QCL0 法プログラムの処理概要を以下に示す。

STEP1: 1 残基ごとの計算フレーム分子に分割し、1 残基ごとの全電子計算を行う。

STEP2: 3 残基ごとの計算フレーム分子に分割し、1 残基の計算結果から近似電子密度法を用いて初期データを作成し、3 残基ごとの全電子計算を行う。3 残基の計算フレーム分子に対しフラグメント分割し、フラグメントごとの QCL0 を計算する。

STEP3 以降: QCL0 を用いて計算フレーム分子の初期データを作成し、全電子計算を行う。次のステップの初期データのためのフラグメントにおける QCL0 を作成する。STEP3 以降は、最終的なタンパク質まで、同様な処理を段階的に繰り返す。

QCL0 法プログラムの主な機能は、①計算フレーム分割機能、②計算フレームのフラグメント分割機能、③各フラグメントの QCL0 作成機能、④初期データ作成機能、⑤電子計算実行機能 (ProteinDF 実行機能) である。QCL0 法プログラムはヘテロ分子を含むタンパク質にも対応しており、ユーザの指定に基づいて、ヘテロ分子の計算フレーム分割、フラグメント分割を行う。

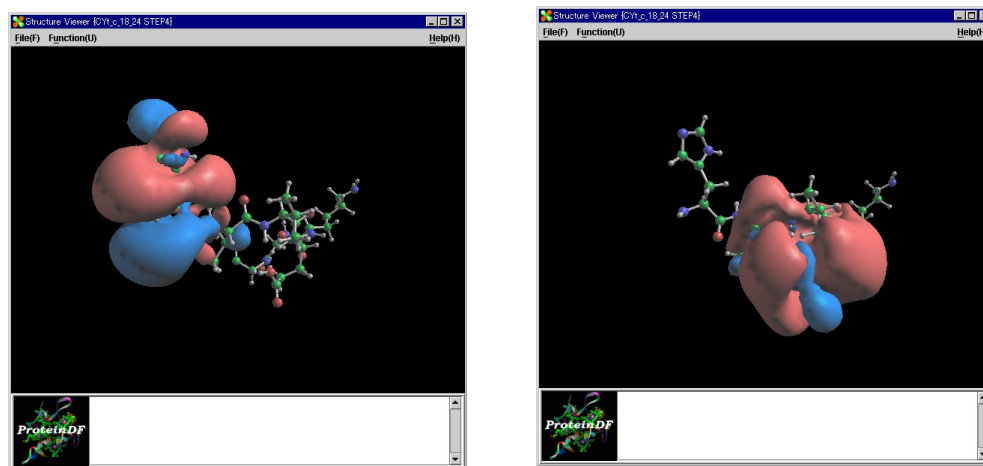
QCL0 法プログラムを用いることにより、ユーザが定義した計算シナリオに基づき、一連の計算処理を自動的に実行することが可能であり、大規模なタンパク質の全電子計算が可能となる。

【QCL0 法プログラムの並列分散処理】

QCL0 法プログラムを用いた全電子自動計算において、各ステップで複数の計算フレームを全電子計算を行っている。QCL0 法プログラムは高速化のため MPI を用いて並列化されており、計算フレーム分子の全電子計算の並列分散処理が可能である。STEP1 では、1 残基の電子計算を 1PE 単位に割り当て、各計算フレームの計算を同時に並行計算を行う。STEP2 以降では、計算フレームの計算サイズ (軌道数) に応じて使用 PE 数を選択し、ProteinDF の並列計算、計算フレームの平行計算を行う。

【計算結果】

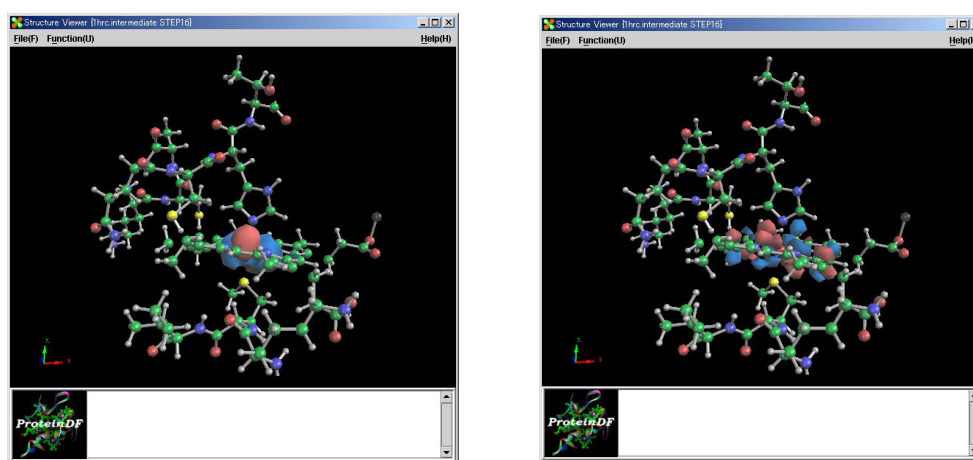
QCL0 法プログラムを用いて、シトクロム c のペプチド鎖 7 残基（18 番残基-24 番残基）、活性中心近傍モデルの全電子計算を行った。QCL0 法プログラムを用いることにより、計算シナリオに基づき一連の計算処理を自動的に実行することが可能となり、QCL0 法プログラムの有効性を確認した。シトクロム c のペプチド鎖 7 残基（18 番残基-24 番残基）、活性中心近傍モデルの全電子計算計算結果を図 1、図 2 に示す。



(a) 分子軌道 HOMO（等値面 ± 0.01 ）

(b) 分子軌道 LUMO 等値面 ± 0.01

図 1 シトクロム c のペプチド鎖 7 残基の全電子計算



(a) 分子軌道 HOMO（等値面 ± 0.05 ）

(b) 分子軌道 LUMO 等値面 ± 0.05

図 2 シトクロム c の活性中心近傍モデルの全電子計算