九州大学学術情報リポジトリ
Kyushu University Institutional Repository

分子科学計算推進室からのお便り

南部, 伸孝
九州大学情報基盤研究開発センター学術情報メディア研究部門

https://doi.org/10.15017/1470153

出版情報：九州大学情報基盤研究開発センター全国共同利用システム広報. 1 (2), pp.50-53, 2007-12.
九州大学情報統括本部広報委員会
バージョン：
権利関係：

分子科学計算推進室からのお便り

南部　伸孝*

概要　分子科学推進室より分子科学計算に関連する平成 18～19年度における活動状況をお便りとして報告いたします.

1.　設置から 2 年間

平成 17 年 10 月末に分子科学計算推進室が設置され，約 2 年間が経過しました．様々な方々と知り合い，学ぶことが大きかったと感じております．今更ながらではありますが，設置において情報基盤研究開発センターの職員の方々から多大な助言とご理解を頂いたけたことに感謝いたします．今後もがんばりますので，よろしくお願いいたします.

さて，この 2 年間いろいろなサポートを行いましたが，特に大きな進歩を得ることができたものは，生物関連の分子動力学シミュレーションです．このサポートを行いながら自らも学び，一定の成果が得られました．次年度はこの成果を発展させ，生物関連の利用者の要望へも答えて行きたいと考えております．そこでここでは，このサポートに関わった方々の紹介等を含めて，少し報告させていただきます.

2.　Amber & Gaussian 講習会

平成 18 年 7 月 11，12 日の二日間，オーストラリア国立大学から Dr. Vladislav Vasiliev（Amber 担当）及び Dr. Ivan Rostov（Gaussian 担当）の 2 名の外国人講師をお招きし，開催いたしました．参加者は 12 名（学外 1 名）でした．ここに，Amber における講習会の概要を示します．（平成 19 年度も開催予定ですので，参考にしてください.）

Dr. Vasiliev & Dr. Rostov とサポートした薬学部の M2 有須田記成さん

Abstract for Amber-course

Dr. Vladislav Vasiliev, Australian National Univ.

I plan to cover a subject on all levels - from beginners up to very advanced (i.e. to start from the simple things and then to go to very complex ones).

1) Introduction to Amber: the theory and practice of biomolecular simulations using the Amber suite of programs.

Program modules, Amber force-field types, QM/MM approach, continuum solvation approach (General Born and Poisson-Boltzmann methods), replica exchange methods.

2) How to set-up calculations and what to do with non-standard residues.

* 九州大学情報基盤研究開発センター学術情報メディア研究部門 e-mail: nanbu@cc.kyushu-u.ac.jp

This tutorial will act as a basic introduction to LEaP, sander and ptraj, to build, solvate, run molecular dynamics and analyse trajectories. It will also cover visualising trajectories using the visualization software.

3) Running simple minimisations and MD simulations using the sander and pmemd modules.

4) Using dynamics simulations to estimate binding energetics.

The purpose of this tutorial is to begin thinking about how one might estimate energetics of binding.

5) A simple coupled potential QM/MM/MD simulation.

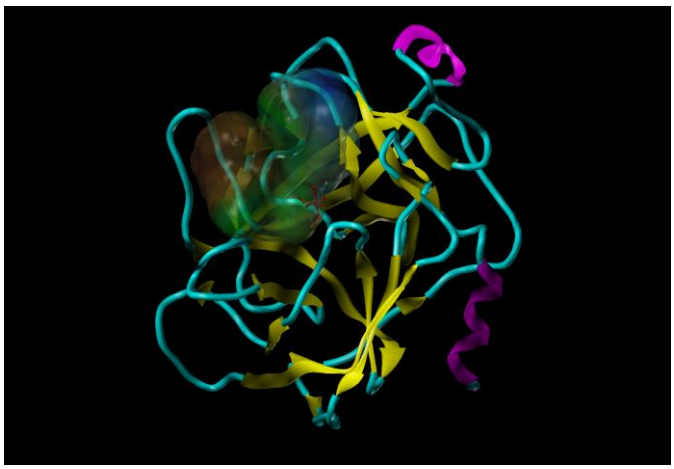
With the release of AMBER 9 comes the ability to do very fast advanced coupled potential QM/MM driven minimisation and MD. This tutorial will show how to set up a simple QM/MM/MD simulation of NMA in solution using AMBER 9.

6) Analyzing results.

この講習会の主な目的は，生物関連の研究をされる方が主に利用する分子動力学シミュレーションプログラム Amber の利用から解析方法の説明をみっちり行うとともに，Gaussian での溶液中の計算を行う際のパラメータ設定のコツを学ぶものでした．特に，この Amber の講習会をきっかけに九州大学薬学研究院 財津　潔教授グループの修士学生である有須田さんと薬のデザインを本当に可能か疑問でしたが，サポートを始めました．彼はもともと実験家ですので理論計算，計算化学，スーパーコンピュータの利用経験は皆無です．よく最終目標まで到達できたものだと感激した次第です．

3.　ヒトカテプシン阻害作用に関する基礎研究（サポート事例１）
ー合成・阻害活性測定と分子動力学シミュレーション

ここでは，その成果をサポート事例として簡単に紹介いたします．右の図が薬によって阻害する蛋白であるヒトカテプシンの構造です．見えにくいですが，中心にある赤い分子がセリン 195 の反応中心部となります．この付近に分子を付着させ，活性を阻害させる分子をデザインすることが，この研究の目的です．Gaussian を用いた量子化学計算を行い，分子をデザインし，真空中でドッキングさせてはその結合力を評価し，良いものはその初期構造を基に Amber を用いた水中での分子動力学シミュレーションを行い，結合エネルギーを求めてより正確な評価を行います．彼の修論では幾つかの分子に関し分子動力学シミュレーションを行い，実験で観測される分子に依存した阻害効果の強度の違いの説明にほぼ成功しました．今後の目標として酵素反応メカニズ

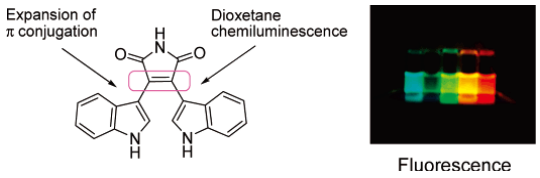


ヒトカテプシン　アミノ酸 224，分子量 約 23500，触媒残基 Ser195, His 57, Asp 102

ム解明を行いたいと思っております．一方，利用した計算機は九大所有の高性能演算サーバーIBM p5 モデル 595 です．Amber の MPI ライブラリを利用した並列計算バージョンを用い，16CPU 使用時に約 15 倍強の性能を発揮しました．初めて行った生物系関連のサポートはこのような形で始めることができ，大変うれしく思っております．今後はこれを発展させるとともに，利用者から求められる要求へ答えて行きたいと思っております．

4. Bisindolylmaleimide 誘導体の蛍光・化学発光（サポート事例２）

ここではつい最近成功した事例を報告いたします．本研究では，高選択的かつ高感度インドール蛍光及び化学発光試薬を開発することが目標です．結果として量子化学計算の実施をサポートし，観測された発光特性等が解明されました．計算環境はセンター所有の日立 SR11000 モデル K2 上で CPU は１６コア，メモリーは 89.6GByte，ディスクは 64.77GByte を使用し，並列計算を実施しました．かなり大がかりな計算となりましたが，今まで不明である実験事実が解明されました．該当分野にとってインパクトなある研究となることを願っております．また，本研究は中園 学[1]先生，柏原 学[1]先生，桑野良一[3]先生，財津 潔[1]先生（九大院薬[1]，九大理[3]）の方々と共同研究を行いました．（研究結果は，Organic letter Vol.9 No.18 3583-3586 (2007)に掲載されました．）



種々のインドール化合物の発光特性

5. 先駆的科学計算フォーラム 2007 －分子科学計算「研究報告及び紹介と新システム導入へ向けて」

2007 年 3 月 13 日（火）に，分子科学関連の利用者を中心に学外から 2 名の研究者を招待し，研究報告及び紹介による利用情報の交換の場を設けるとともに，新システムへ向けての利用者の要望などを伺う場として先駆的科学計算フォーラム 2007 を開催しました．参加者は合計 40 名です．（うち学外者は 12 名となりました．）本フォーラムには，利用者をはじめ，センター技術スタッフ，センター運用関係者，新システム導入に関連するベンダーの方々の他に，過去において九大大計センター時代には大口の利用者であった方々も出席され，活発な質疑応答がなされました．利用者同士の情報交換だけではなく，Q&A や今後の利用方法の改善の場になり得たものと考えています．

以下にプログラムを記載いたします．

先駆的科学計算に関するフォーラム 2007
分子科学計算「研究報告及び紹介と新システム導入へ向けて」
九州大学情報基盤センター主催
日時：2007 年 3 月 13 日（火）13 時 00 分～17 時 45 分
場所：九州大学情報基盤センター多目的講習室（3 階）

--- 13:00～13:05 開会の挨拶 ---

--- 13:05～13:10 新システムの説明 ---

- 13:10～13:30　吉澤 一成（九州大学先導物質化学研究所 教授）
  「量子化学計算による生物無機化学へのアプローチ」
- 13:30～13:50　池田 浩人（福岡大学薬学部生命薬学科 助手）
  「分子複合体形成における新規機能性発現に関する量子化学的研究」
- 13:50～14:10　濱洲 紘介（九州大学農学研究院 生物機能科学部門 松井研究室 B4）
  「非経験的分子軌道法に基づく N-ドメイン特異的 ACE 阻害ペプチドの理論的予測とその評価」

--- 14:10～14:20 休憩（10 分間）---

- 14:20～14:40　三好 永作（九州大学総合理工学研究院 融合創造理工学部門 教授）
  「モデル内殻ポテンシャル法による分子計算」
- 14:40～15:00　杉本 学（熊本大学大学院自然科学研究科 助教授）
  「電子状態シミュレーションによる分子形状解析とその応用」
- 15:00～15:20　真木 淳（九州大学情報基盤センター 青柳研究室 学術研究員）
  「3DRISM/SCF 連成におけるエネルギー微分」
- 15:20～15:40　大西 真一（九州大学総合理工学研究院 物質理工学専攻 青木研究室 D3）
  「GAMESS-Elongation 法による NLO 材料設計と Kyu-cc および Xeon 上での並列演算効率検証」

--- 15:40～16:00 休憩（20 分間）---

- 16:00～16:20　石田 俊正（京都大学福井謙一記念研究センター 助教授）
  「ポテンシャル生成と反応動力学計算」
- 16:20～16:40　関谷 博（九州大学理学研究院 化学部門 教授）
  「分光測定と量子化学計算によるクラスター構造とダイナミクスの研究」
- 16:40～17:00　中園 学（九州大学薬学研究院 生体分析化学分野 助手）
  「Bisindolylmaleimides の蛍光・化学発光及びその分子科学計算」
- 17:00～17:20　古屋 謙治（九州大学総合理工学研究院 物質科学部門 助教授）
  「CF_4プラズマ中で成長するパーフルオロカーボン陽イオンの構造と反応」
- 17:20～17:40　重松 幹二（福岡大学工学部化学システム工学科 教授）
  「九大センターへの希望」

--- 17:40～18:00 自由討論（新システムの説明と利用者の声）---

--- 18:00～18:05 閉会の挨拶---

6. まとめ

引き続き生物関連のサポートを中心に実施し致します．平成１８年度の分子科学計算関連の相談，サポート，支援回数は約 670 回になりました．期待をしている方々多いことを励みに，今年度も実施させていただきます．よろしくお願いいたします．