

AMBER 10

Mechanics Simulation of Biomolecules

コンフレックス株式会社

〒141-0021

東京都品川区上大崎2-15-19

アイオス目黒駅前ビル6F

TEL : 03-6380-8290

FAX : 03-6380-8299

Email : info@conflex.co.jp

<http://www.conflex.co.jp/>

Conflex USA

12526 High Bluff Drive,

Suite 300, San Diego, CA

92130 USA

TEL : +1-760-930-9277

USA : 1-800-298-0054

FAX : +1-509-692-4541

Email : info@conflex.us

<http://www.conflex.us/>

AMBER は、カリフォルニア大学のコールマン教授らのグループによって生体分子のために開発された、モデリングおよびモレキュラーメカニクスとダイナミクス計算シミュレーションのパッケージです。



AMBERプログラム概要

Amberは、Amber 10とAmberToolsから構成されており、それらを統合して使用します。主なプログラムは、下記の通りです。

sander : sanderは、分子動力学計算を行うためのメインプログラムです。NMRスペクトルより得られるエネルギー拘束条件を利用し、焼き鈍し法 (simulated annealing) 計算を行えます。これにより、NOE測定から得られる距離拘束、ねじれ角拘束、そして化学シフトとNOESY量から得られるペナルティ関数を基にした、NMR構造の精密化が可能になります。また、レプリカ交換法、熱力学積分法、PMF (Potential of mean force) 計算などもできます。

以前のバージョンでRoarプログラムに含まれていたQM/MM計算機能がsanderに導入されました。

pmemd : sanderプログラムを大幅に修正したバージョンです。機能は、周期系でのPMEシミュレーションに限定されます。sanderに比べ速く計算でき、並列マシンでの効率も向上しています。そのため通常、このプログラムがサポートしていない機能が必要ない周期系のシミュレーションでは、“標準の”プログラムとなります。

nmode : 1次と2次微分を使用して、ノーマルモード解析を行うプログラムです。これを使用して、局所構造の探索、振動解析、遷移状態探索等を行います。

モデリングではparm96 やOPLSなどの構造データベースをもち、溶媒水分子の配置やチャージのフィッティングを行うなどのビルダーモジュールが多数用意されています。またダイナミクス計算の解析ツールでトラジェクトリ解析、NMRのリファインメントなどができます。AMBERには独自の有用性の高いパラメーターがあり、近年このプログラムを用いた論文が多数報告されています。



LEaP : LEaPは、X-windowベースのプログラムで、基本的なモデルの構築と Amber計算用の座標およびパラメーター/トポロジーのインプットファイルを作成する機能を持ちます。分子エディターを内蔵し、残基を構築したり分子を操作したりできます。

antechamber : 有機分子の力場記述子の作成プロセスを自動化します。通常PDBフォーマットの構造から始めて、LEaPで読み込めるファイルを作成します。LEaPで読み込み、分子のモデリングに使用できるようになります。出力される力場記述子は、タンパク質や核酸用のAmber力場に準拠するようにデザインされています。

ptraj : MDトラジェクトリーを解析し、様々な計算を行います。基準とした構造からのRMS偏差の計算、水素結合の解析、時間相関関数、拡散挙動などの解析が行えます。

mm_pbsa : MDトラジェクトリーの後処理を自動化するスクリプトで、連続体溶媒でのエネルギー論を解析します。別々の残基からのエネルギーの断片にエネルギーを分解し、コンフォメーション間の自由エネルギー差を見積もれます。

裏面

AMBER10新機能

AMBER 10 新機能

【力場】

- 新しい、多くのタイプのカ場が利用できるようになりました。
- 新しい、水やイオンのモデルが利用可能です。
- 核酸と糖のパラメーターがアップデートされました。
- RenとPonderによる分極性ポテンシャルAMOEBAの並列化がサポートされました。
- 経験的原子価結合 (Empirical Valence Bond, EVB) モデルが改良され、化学反応の近似ポテンシャルの構築に使用できるようになりました。

【QM/MM シミュレーション】

- Amber 10 では、DFTB計算を周期溶媒ボックスあるいは一般化ボルン溶媒モデルを使用して行えるようになりました。
- 計算がより速くなり、一部並列化もされています。

【適応バイアスシミュレーション】

- サンプリングと自由エネルギーの収束を加速するために、適応バイアスシミュレーションを行うことができるようになりました。

【経路積分分子動力学】

- 原子核の動きを、ニュートンの力学方程式ではなく、量子動力学法を使用して平衡カノニカル分布をサンプリングできます。
- 平衡と動的な同位体効果の両方を、原子量を考慮した熱動力学積分法で予測できます。
- 速度定数を、量子インスタントンモデルで見積ることができます。
- 近似量子時間相関関数を、Ring Polymer MDあるいはCentroid MDにより利用できます。

【クラスター解析】

- 新規の配座クラスター解析ツールが、ptrajにより利用できます。

【自由エネルギー】

- 新規の自由エネルギーツールでは、1つと2つのトポロジー両方を使用する事により、タンパク質の変異変化の設定が簡略化されました。
- ソフトコアポテンシャルの機能により、原子が現れたり消滅したりする系のサンプリングができるようになりました。その際、人為的なダミー原子を設定する必要はありません。

【レプリカ交換法】

- レプリカ交換法の改良が行われています。
- 標準のレプリカ交換法の改良に加え、非ボルツマン溶媒を用いた交換法をサポートしました。
- 実溶媒中での大きな系に必要なレプリカの数減らすために、混成溶媒モデルを使用できます。

【拡張された pmemd】

- 速度と並列化効率の大幅な改良を行いました。
- 一般化ボルン法を大幅に改良しました。
- 非中心電荷 (TIP4PやTIP5Pなど) をサポートしました。

【LMOD】

- 低振動基準モードに基づいた、低モード (LMOD) 探索ツールが完全統合されました。

【AmberTools 1.0】

新しくリリースされたAmberToolsには、前バージョンのAmberの一部であったLEaP, antechamber, ptrajプログラムが含まれています。加えて、NAB (Nucleic Acid Builder) もパッケージの一部としてリリースされています。このNABを使用して、完全な分力学計算を行えます。ただし今回のバージョンでは、気相あるいは一般化ボルン溶媒モデルに限定されています。

AmberToolsは現在、以下に挙げたプログラムから成っています：

- nucleic acid builder (NAB)
- antechamber
- ptraj
- tleapおよびxleap
- sleap (tleapを置き換え拡張するために新たに開発)

これらのプログラムは、GNU General Public License (GPL)で配布されています。含まれているいくつかのコンポーネントは、パブリック・ドメインあるいはほかのオープンソースライセンスになっています。

AmberToolsはソースコードで配布されますので、CおよびC++コンパイラでコンパイルして使用します。また、g77あるいはgfortranを使用してMopacプログラムをコンパイルして使用することもできます。

