

AMBER 11

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、モデリングおよび分子力学と動力学計算シミュレーションのパッケージです。



AMBERは、AMBER 11とAmberToolsから構成されており、これらを組み合わせて使用します。

AMBER 11の主なプログラムは、下記のとおりです。

AMBERプログラム概要

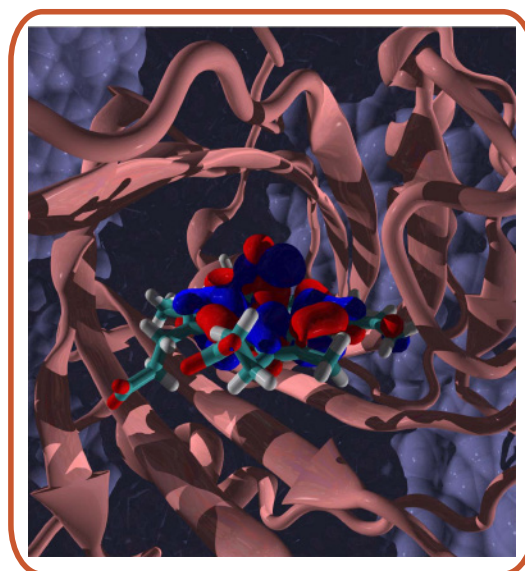
sander: 分子動力学計算を行うための最新機能が導入された、メインプログラムです。NMRのNOE測定から得られる距離拘束、ねじれ角拘束、化学シフトとNOESY強度などから得られるペナルティ関数を基にしたNMR構造の精密化が可能です。また、レプリカ交換法、熱力学積分法、PMF (Potential of Mean Force) 計算などが使用できます。さらに、QM/MM機能も導入されています。

pmemd: sanderプログラムを、機能を限定して大幅に修正したバージョンです。周期系、PMEシミュレーション、GBシミュレーションに最適化されています。sanderに比べ、計算速度が速く並列化効率も向上しています。今回のバージョン1.1では、NVIDIA GPUによる高速化も可能になっています。pmemdでサポートされていない機能が必要であれば、動力学計算を行う際の"標準の"プログラムとなります。

nmode: 1次および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。局所構造の探索、振動解析、遷移状態探索を行うことが可能です。

LEaP: 基本的なモデルを構築し動力学計算用の座標およびトポロジー入力ファイルを作成する機能を持ちます。簡単な分子エディターを内蔵し、新しい残基を作成したり操作したりできます。

モデリングでは、核酸やアミノ酸のデータを用い構造を構築したり、溶媒水分子の配置や系の中和などを行うためのモジュールが多数用意されています。実験データを用い、NMR構造の精密化を行うこともできます。また、動力学計算のトラジェクトリーを解析するツールも用意されています。



antechamber: 一般有機分子の力場パラメーターセットの作成プロセスを自動化します。通常、Mol2形式の構造ファイルから始めて、LEaPで読み込めるファイルを作成します。これにより、一般有機分子をLEaPで読み込み、分子モデリングに使用できるようになります。出力されるパラメーターは、タンパク質や核酸用のものと同時に使用できるようにデザインされていますので、タンパク質や核酸と一般有機分子を組み合わせたシミュレーションが可能になります。

ptraj: MDトラジェクトリーを解析し、様々な計算を行えます。基準構造からのRMS偏差の計算、水素結合の解析、時間相関関数、動径分布解析など多数の解析が行えます。

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、連続体溶媒モデルでのエネルギー解析を行えます。エネルギーを、別々の残基からのエネルギー断片に分解し、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。

AMBER11新機能

【力場】

- CMAPねじれポテンシャルを含む、CHARMMの電荷固定力場がサポートされました。
- 有機分子用のgeneral Amber 力場 (GAFF) がアップデートされました。

【溶媒モデル】

- 一般化ボルン溶媒モデルパラメーターが、新たにペプチドとタンパク質用に最適化されました。
- 数値的なPoisson-Boltzmann溶媒計算のオプションが拡張されました。
- Kovalenko-HirataらのClosure近似による3D-RISM積分方程式モデルを利用出来るようになりました。

【自由エネルギー計算】

- ハミルトニアンモデルを変更する方法や、出現及び消滅する原子群を扱うより良い手法を含む自由エネルギー計算の簡易化法が利用できます。
- 配座遷移の低エネルギー経路を見つけ出すNudged Elastic Bandモデルの新しい手法が実装されました。これにより、系の一部だけや実溶媒シミュレーションなどに適用できるようになります。
- 定pHシミュレーションとMMPB/SA自由エネルギー計算のスク립トが改良されました。

【計算手法】

- 極性系に対応したIsotropic Periodic Sum (IPS: 等方性周期和) モデル、及びそれに加えてIPS-DFFT (IPS-離散高速フーリエ変換) が実装されました。
- pmemdを使用したMDシミュレーションにおいて、NVIDIA GPUカードを利用できるようになりました。これにより、通常のCPUに比べ大幅なスピードアップが図れます。

【他ソフトとの連携】

- 可視化プログラムChimeraとの連携が強化されました。
- UCSF DOCKとの連携が強化されました。



AmberTools

AmberToolsには、生体分子のシミュレーションと解析を行うプログラム群が含まれています。これらはお互いに、またAMBER本体のプログラムとも、うまく連携して使用できるように作成されています。

これらのプログラムは主に、GNU General Public License (GPL)で配布されています。いくつかのプログラムは、パブリック・ドメインあるいは他のライセンスとなっています。

【AmberTools 1.4】

AmberToolsの主なプログラムは、以下の7つです。

NAB: 分子の構築; generalized Born, Poisson-Boltzmann、3D-RISMの仮想溶媒を使用した動力学計算やdistance geometry計算

antechamber: 一般の有機分子を計算する力場パラメーターの作成。作成したパラメーターは、従来のアミノ酸や核酸のパラメーターと同時に使用できます。

ptraj: AMBERのトラジェクトリーの解析。対象構造に対するRMS計算、水素結合解析などを行うことができます。

tleap, xleap: AMBERシミュレーションを行うための、基本的な座標およびトポロジーファイルの作成を行えます。前者がテキストベースで、後者はX-Windowベースのプログラムです。

sleap: 上記tleapの拡張版。将来的には、こちらに置き換わる予定です。

sqm: 半経験的およびDFTB量子化学計算プログラム

pbsa: Poisson-Boltzmannモデルを数値的に計算

