

第7回先進科学技術活用力養成講座 FMO 計算法：創薬への応用 開催報告書

開催日時	平成 27 年 12 月 7 日（月） 13：00～17：30
開催場所	公益財団法人 計算科学振興財団 高度計算科学研究支援センター 計算科学センタービル 2 階 実習室
参加人数	9 名
参加機関等	6 機関 【内訳】 大学関係 2 機関 民間企業 4 社

実施内容

医薬品候補化合物と標的タンパク質の相互作用を解析するフラグメント分子軌道法 (FMO 法) のプログラムである ABINIT-MP とその専用ビューアー兼プレポストである BioStation Viewer の使い方について、特に、よくあるエラー、トラブルへの対処法を中心とした、実践的な内容の講習会を行った。

プログラム

13:00	はじめに (講師 神戸大学計算科学教育センター 渡邊博文)
13:05	理論編 <ul style="list-style-type: none">・ FMO 計算の特徴・ 計算レベル (電子相関・基底関数) の選び方
13:20	ABINIT-MP よくあるエラー、トラブルへの対処 (座学と演習) <ul style="list-style-type: none">・ 計算が収束しない・ 電子数が不正と表示される・ フラグメント中の原子数が不正だと表示される・ 意図したものと異なる元素と認識されてしまう・ フラグメントの数が少ない・ 出力ファイル(out ファイル)の読み方
15:20	休憩
15:30	リガンドのフラグメント分割 (座学と演習) <ul style="list-style-type: none">・ BioStation Viewer を用いたフラグメント分割・ リガンドに電荷がある場合の注意事項
16:30	フリータイム (個別トライアル、個別 Q&A 対応)
17:30	終了

詳細

本講習会では ABINIT-MP と BioStation Viewer について、初心者から中級者を対象とした実践的な内容の講習会を行った。(参加者：会場 7 名、遠隔 (静岡) 2 名)

初心者向けの、とりあえず計算流し始める部分を対象としたセミナーはこれまでもあったが、実際に計算を流してみた際には、エラーがでて、計算が最後まで流れなかったり、計算が収束しなかったりするなどが問題となってくる。しかし、その対処について扱ったセミナーや文献などのリソースはあまりなかった。また、計算法 (量子化学計算のレベル) についても論文や学会発表での使用例などは書かれているものの、どのように選ばれているか解説したものはあまりなかった。以上の点に配慮して、現場で実際に役に立つことを目標とした題材を取り上げて講習会を行った。

また、手動フラグメント分割は、医薬候補化合物の相互作用を、化合物の部分構造の寄与にわけて解析できる有用な機能であるが、若干、操作が煩雑である。この機能の理論的な説明と、BioStation Viewer での実際の操作についての解説を行った。

講義内容の理解を深めるための実習では、エラーへの対処については 3 つの課題、手動フラグメント分割については 1 つの課題を取り上げた。エラーへの対処実習では、FOCUS スパコンの一部を利用してデバッグキューで流し、東大版 ABINIT-MP の計算がすぐに止まらずに (自動フラグメント分割でエラーがでないことを確認)、FMO 計算が問題なく流れ始めるところまでを取り扱った。手動フラグメント分割の実習では、実習室の Windows 端末の東大版 BioStation Viewer を使用した。

遠隔配信には、神戸大学で利用している WebEx を FOCUS では初めて使用させて頂いた。遠隔地の受講者からの評価も高く、人材育成プログラムの効果的実施のために、遠隔配信の利用拡大を今後検討する予定である。