

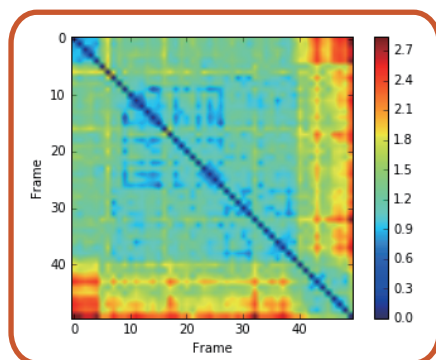
# Amber 24

## Mechanics Simulation of Biomolecules

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。

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構造の精細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。

コンフレックス株式会社  
〒108-0074  
東京都港区高輪3-23-17  
品川センタービルディング6F  
TEL : 03-6380-8290  
FAX : 03-6380-8299  
Email : info@conflex.co.jp  
<https://www.conflex.co.jp/>



Amberは、Amber24とAmberTools24から構成されており、これらを組み合わせて使用します。

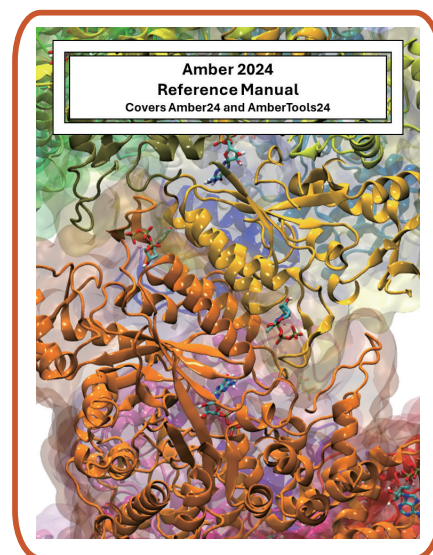
### プログラム概要

主なプログラムは、下記のとおりです。

**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機能なども導入されており、これら新機能を研究するための役割を担っています。

**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および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。NVIDIA GPU, Intel Xeon Phiによる高速化も可能です。sanderで頻繁に使用されテストされたコードを高速化して実装しており、本番のMD計算で使用されます。

**antechamber, MCPB.py:** 一般有機分子の力場パラメータセットの作成プロセスを自動化します。通常、PDB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。出力されるパラメータは、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、それらを組み合わせたシミュレーションが可能になります。MCPB.pyは、金属中心を含む力場を作成するために利用できます。



**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・操作できます。

**MMPBSA.py:** 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たり、コンフォメーション間の自由エネルギー差を見積もれたりします。

**mdout\_analyzer.py:** MD計算の出力ファイルに記録されたエネルギー成分を解析・分析するためのpythonスクリプトです。numpy, matplotlib, scipyパッケージ等を利用します。

**cpptraj:** 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。

**pytraj:** トラジェクトリー解析プログラムcpptrajへのPython言語バインディングです。Jupyter電子ノートブックと組み合わせて、対話型データ解析を実現します。また、解析結果のグラフィック表示も可能です。ノートブックはWebアプリケーションなので、文書の共有も可能になります。

**fe-toolkit:** 錬金術的自由エネルギー・シミュレーション解析ツールキットです。