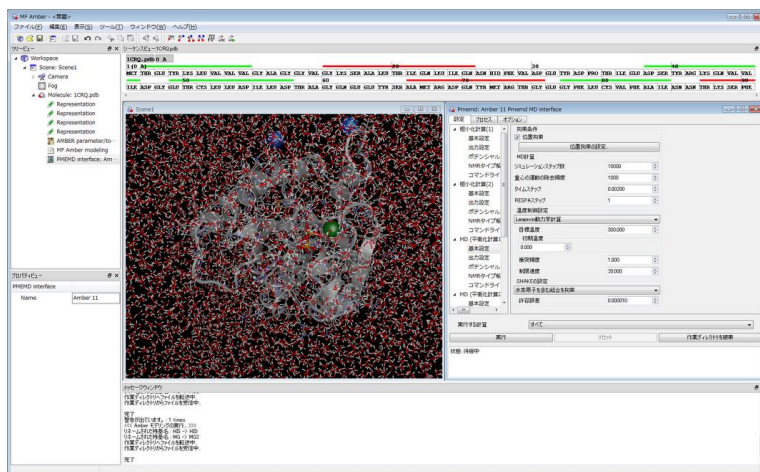


MF Amber

MF Amber は、世界的に有名な分子動力学(MD)計算エンジン Amber のインターフェイスソフトです。一切のコマンドライン操作を必要とせず簡単な操作で MD 計算を実行できます。

計算はバックグラウンドで実行可能で、長時間に及び計算をおこなう際でも、本ソフトウェアを介していつでもその状態を確認できます。計算によって得られたトラジェクトリデータに対して、距離解析や RMSD 解析などをすぐに実行できます。また、座標、エネルギー、トラジェクトリデータ、解析結果は主要なファイル形式でエクスポートできるため、他の外部ツールを使って結果をすぐに活用できます。Microsoft Excel や gnuplot を使ったエネルギーグラフの作成、他の MD パッケージソフトに付属しているより有用な解析ツールなどの活用が可能です。



特長

- コマンド操作が不要

UNIX のコマンドを知らなくてもグラフィカルなユーザインタフェースを介して簡単な操作で MD 計算を実行できます。MD 計算のパラメータ設定のためにテキストエディターなどを使う必要もありません。

- 煩雑なモデリング操作不要

MD 計算のためのトポロジーデータの生成、溶媒の付加、カウンターイオンの挿入などの操作は、コマンドライン上でおこなう場合、非常に煩雑な操作が必要となります。MF Amber を使うと、モデリング操作の手順などを一切気にすることなく必要な設定をおこなった後、実行ボタンを押すだけで、簡単に MD 計算のためのデータが作成できます。

- デスクトップ PC、並列計算機上での MD 実行

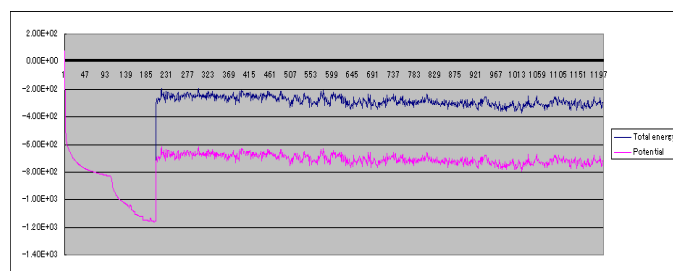
MF Amber は、MD 計算をローカル PC 上(MF Amber) を実行している PC、または SSH を介して外部の計算機上で実行できます。SSH を介した計算では、MPI を使った並列計算が可能です。(ただし、現在ジョブ管理システムには対応しておりません。)

- MD 実行中の状態確認

MD 実行中の原子座標、総エネルギーなど系の状態は、MF Amber 上に定期的に表示されるため、計算が正常に進んでいるかがすぐに確認できます。また、数週間もの長時間の計算をおこなう場合でも、MF Amber を起動することで好きなときにその状態を確認できます。

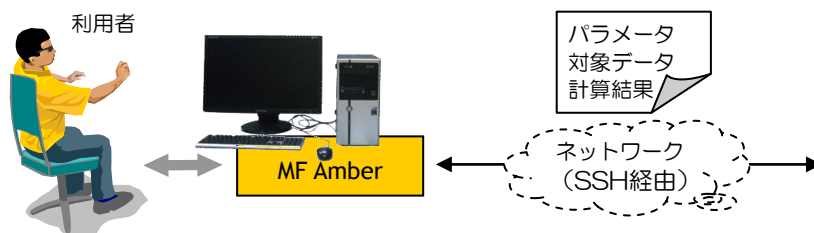
- 解析機能

MD 計算結果のトラジェクトリデータのために、座標、距離、角度、トーション、RMSD 解析ツールが利用できます。また、DCD 形式などの主要なファイルフォーマットでトラジェクトリデータを書き出すことができ、他の有用な解析ツールとの連携も容易です。



- より本格的な MD 計算のための準備ツールとして

モデリングデータや MD 計算設定内容はすべて 1 つのワーキングディレクトリにファイルとして出力されます。コマンドラインに精通している人であれば、設定ファイルを直接編集してより細かな操作ができます。



並列計算機 (Amber)



機能

● モデリング

- 元となる構造データ
PDB / MOL2
- フォースフィールド
ff99SB、ff99bsc0、ff02.pol.r1、ff02.polEP.r1、
ff03.r1、ff03ua、ff10、ffAM1、ffPM3、gaff、
その他 AMBER フォースフィールド
- 溶媒付加
タイプ — 直方体、切頂八面体、球、シェル
溶媒モデル — TIP3P、TIP3P/F、TIP4P、TIP4P/Ew
TIP5P、POL3、SPC/E、SPC/Fw、qSPC/Fw、Methanol、
Chloroform、N-methylacetamide、8M urea-water
- カウンターイオン配置
直接指定、中和のための自動計算
- タンパク、核酸、リガンド(MOL2形式)複合データのモデリング

● エネルギー極小化計算

- 方法
最急降下法、共役勾配法、最急降下法に続けて共役勾配法、
XMIN 法、LMOD 法
- 拘束条件
原子位置拘束、結合項拘束
モデリングされた構造から初期設定を自動生成
シーケンスビューまたは、シーンウィンドウ上でのマウス操作
による拘束箇所の指定
- 周期境界条件
周期境界なし 球、シェル、GB 法、GB/SA 法
周期境界条件 PME 法
- ポアソン-ボルツマン計算
- 等方性周期和
- 分極ポテンシャル

● MD 計算

- 拘束条件
(エネルギー極小化計算と同じ)
- 周期境界条件
(エネルギー極小化計算と同じ)

- アンサンブル
Micro-canonical(NVE)、Canonical(NVT)、NPT
- 温度制御方法 (NVT)
Berendsen 法、
Andersen の温度カップリング法、
Langevin 動力学計算
- SHAKE 法
- Self-Guided Langevin dynamics 法
- ポアソン-ボルツマン計算
- 等方性周期和
- 分極ポテンシャル
- 変動条件設定
- シミュレーションのリスタート
- シミュレーション実行中の構造の3次元的可視化

● MPIによる並列計算

- Open MPI、MPICH2
- SSHを介した並列計算機上でのエネルギー極小化計算、
MD計算のジョブ投入と状態の監視

● 解析機能

- トラジェクトリデータ解析
原子間距離、角度、トーション角、RMSD、座標解析
- トラジェクトリフレームの削除
- トラジェクトリデータから選択分子の抽出
- トラジェクトリプレーヤー
3次元ウィンドウ上でのアニメーション再生

● ファイル入出力

- インポート
PDB、MOL2、AMBER trajectory、AMBER restart、
Cosgene trajectory、DCD trajectory、GROMACS trajectory
- エクスポート
PDB、MOL2、AMBER trajectory、DCD trajectory、
GROMACS trajectory、gnuplot (energy)、csv (energy)

動作環境

OS	Windows XP / Vista / 7 (32bit/64bit) Mac OSX 10.5 以降 Cent OS 5 以降 (64bit) Red Hat Enterprise Linux 5 以降 (64bit)
対応バージョン	Amber 10,11,12
CPU	Intel Core2 2.0GHz 同等以上
メモリ	2GB 以上
ハードディスク	500GB 以上
ネットワーク	Gigabit ether net

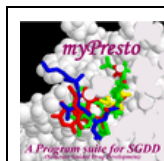
※ 現在 MF Amber は、ジョブ管理システムには対応しておりませんのでご注意ください。

価格 (年間ライセンス)

アカデミック	¥120,000/年(税別)
官公庁・研究機関	¥240,000/年(税別)
企業	¥360,000/年(税別)

その他の MolFeat 計算化学支援ソフトウェアシリーズ

お客様のご要望が多い計算化学ソフトウェア/エンジンにつきましては順次対応してまいります。お気軽にご相談ください。また、並列計算用のPCクラスタの作成、販売もおこなっております。お気軽にお問い合わせください。



MF myPresto (販売中)

myPresto のインターフェースです。



MF Namd (開発中)

Namd 2.6、2.7b2 用インターフェースです。

※myPresto について

Copyright (C) 2006-2015 独立行政法人産業技術総合研究所 National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)
Copyright (C) 2006-2015 一般社団法人バイオ産業情報化コンソーシアム Japan Biological Informatics Consortium (JBIC)