

複雑系の拡張アンサンブルアルゴリズム

Generalized-ensemble Algorithms for Complex Systems

光武亜代理

A. Mitsutake

慶應義塾大学理工学部物理学科

Department of Physics, Keio University, Kohoku-ku, Yokohama, Kanagawa 223-8522

分子シミュレーションをする際、強力なサンプリング手法が必要である。これまで生体分子系に、物性の分野で開発された拡張アンサンブル法であるシミュレーティッド・テンパリング法、レプリカ交換法、マルチカノニカル法を適用してきた。また、これらを組み合わせた手法の開発を行ってきた（総説[1]）。人工の重み因子を用いることにより、マルチカノニカル法はエネルギー空間上のランダムウォークを、シミュレーティッド・テンパリング法やレプリカ交換法は温度空間上のランダムウォークを実現して、系がエネルギー極小状態に留まるのを避ける。また、これらの手法は、系がエネルギー極小状態に留まるのを避けることができるだけでなく、**Rewighting** 法を用いることにより、幅広い条件での熱力学量を計算することができる。

最近、多変数での拡張アンサンブル法の定式化を行なった[2-4]。特に、多変数のシミュレーティッド・テンパリング法と多変数シミュレーティッド・テンパリングレプリカ交換法を開発した（総説[5,6]など）。これら2つの手法に用いる重み因子は短い多変数レプリカ交換シミュレーションと **multi-histogram reweighting techniques** から決定する。例として、モデル溶媒中のヘリカルペプチドを用い、2変数に関するシミュレーションを実行し、手法の有効性を調べた。ここでは、この多変数版について紹介する。また、近年、水クラスターなどの有限サイズ系に拡張アンサンブル法を適用したので、この結果についても紹介する[7,8]。

さらに、シミュレーション結果から生体分子のゆっくりとした動きを抜き出すために、近年、高分子系で開発された緩和モード解析を生体系に適用する研究を行っている。いくつかの準安定構造をもつ真空の5残基からなるエンケファリンの系を用いて主成分分析の結果と比較することにより、この手法の有効性を示したので、これについても紹介する[9]。

- [1] A. Mitsutake, Y. Sugita, and Y. Okamoto, *Biopolymers (Peptide Science)* **60**, pp.96-123 (2001).
- [2] A. Mitsutake and Y. Okamoto, *Phys. Rev. E* **79**, 047701 (2009).
- [3] A. Mitsutake and Y. Okamoto, *J. Chem. Phys.* **130**, 214105 (2009).
- [4] A. Mitsutake, *J. Chem. Phys.* **131**, 094105 (2009).
- [5] 光武亜代理、分子シミュレーション研究会会誌「アンサンブル」**12** (50), pp.29-53 (2010).
- [6] A. Mitsutake, Y. Mori, and Y. Okamoto, *Physics Procedia* **4**, pp. 89-105 (2010).
- [7] T. Kaneko, T. Akimoto, K. Yasuoka, A. Mitsutake, and C. Z. Xiao, *J. Chem. Theo. and Comput.* **7**, pp3083-3087 (2011).
- [8] T. Kaneko, A. Mitsutake, and K. Yasuoka, *J. Phys. Soc. Japan*, in press.
- [9] A. Mitsutake, H. Iijima, and H. Takano, *J. Chem. Phys.* **135**, 164102 (2011).