

4P-095

中性条件に基づく新規静電ポテンシャルの開発

(近畿大学、先端技術総合研究所 高圧力タンパク質研究センター) 米澤 康滋

A long range electrostatic Potential relied on charge neutrality

(*High Pressure Protein Research Center, Institute of Advanced Technology, Kinki University*)

Yasushige Yonezawa

【序】

分子シミュレーションにおいて長距離静電クーロン相互作用の寄与は大変大きくシミュレーション結果を左右することが知られている。すなわち分子シミュレーションにおけるクーロン相互作用の取り扱いが極めて重要である。クーロン相互作用の有効作用領域は無限大であるが実際の分子シミュレーションで無限遠からの寄与を取り扱うことは不可能であり、その効果の適切な評価に関しては現在まで様々な手法が開発されて来た。比較的小さな孤立系ではすべての対象原子及び分子を考慮することが可能であるが、大きな孤立系では **cutoff** 法やマルチポール展開法等が使われている。また周期系では無限に続く周期系の影響を考慮し得る **Ewald** 法やその高速フーリエ変換を用いた高速計算版である **Particle Mesh Ewald (PME)** 法が標準法として頻用されている。

近年、計算機性能の向上に伴って蛋白質などの大規模分子シミュレーションが行われるようになって来た。これらの大規模分子シミュレーションは顕な溶媒分子を含むことが多くこれらの系の原子数は数百万以上に及ぶこともある。このような大規模系の周期的境界条件下での計算は通常、並列計算機を用いて計算される。ところが **PME** 法で用いられている高速フーリエ変換法は、大規模な並列計算には対応が難しいという困難を抱えている。また **cutoff** 方は対象原子に相互作用する原子を球対称な有限範囲内に制限して計算する方法で大規模並列計算に大変適している手法であるが、この方法を単純に分子シミュレーションの長距離クーロン相互作用に適応すると深刻なアーティファクトを生じて信頼性のある分子シミュレーションを遂行できないことが良く知られている。

Wolf とその共同研究者は、1999 年に新規なクーロン相互作用計算法を提案した。彼らの方法は、**cutoff** 法計算時に **cutoff** 半径内の電荷がゼロとなる時にそのエラーが大変小さく抑制される観測事実を基に考案された。**Wolf** 等は、中心となる対象原子に関して **cutoff** 半径内でクーロン相互作用する電荷の延長線上の **cutoff** 球上に反対電荷を持つカウンター点電荷を置いて **cutoff** 半径内の電荷を見かけ上無くす事でこの電荷中性条件を満たす方法を考案した。

さらに彼らは電荷中性条件だけでは消せない cutoff 長に依存するポテンシャル振動を、補誤差関数でポテンシャルダンピングすることで抑制した。彼らのポテンシャル（以下、Wolf ポテンシャル）は孤立系や周期系に適用可能で、生体高分子系を含むクーロン相互作用する様々な系で Ewald 法や PME 法の結果を安定して再現できることが検証されている。

本発表では、Wolf の中性電荷条件のみに基づく新規なクーロン相互作用計算方法について報告する。この新規クーロン相互作用法は Wolf ポテンシャルで使われた補誤差関数によるポテンシャルダンピングを必要としないので、従来の Wolf ポテンシャルによる計算法よりも高速な計算が可能である。

【理論・計算実験】

Wolf ポテンシャルと本報告の新規ポテンシャルを以下に示す。

$$E_{Wolf} = \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j(>i) \\ r_{ij} < R_c}} q_i q_j \left[\frac{erfc(\alpha r_{ij})}{r_{ij}} - \lim_{r_{ij} \rightarrow R_c} \left\{ \frac{erfc(\alpha r_{ij})}{r_{ij}} \right\} \right] - \left(\frac{erfc(\alpha R_c)}{2R_c} + \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \right) \sum_{i=1}^N q_i^2$$

$$E_{Total} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j \neq i \\ r_{ij} < R_c}} q_i q_j \left\{ \frac{1}{r_{ij}} - \frac{erf(\alpha R_c)}{R_c} - \frac{1}{R_c^2} (R_c - r_{ij}) \right\} - \sum_{i=1}^N q_i^2 \frac{erf(\alpha R_c)}{R_c}$$

E_{Wolf} は Wolf ポテンシャルの、 E_{Total} は本報告の新規ポテンシャルで計算される全エネルギーである。 N は電荷を持つ全原子数を示す。 $erfc$ は補誤差関数、 erf は誤差関数である。 R_c は cutoff 長を表す、 α はポテンシャルのパラメーターで Wolf 法に於いてはポテンシャルのダンピングファクターを示し、本報告の新規ポテンシャルではカウンター電荷の分布度合いを表している。本報告ポテンシャルの誤差関数項は、Wolf の電荷中性条件の物理的意味を深く考慮することで Wolf 等が使用したカウンター補正点電荷を、広がりのあるガウス型電荷に変更した結果得られたものである。本報告の新規ポテンシャルでは、計算負荷の高い誤差関数（補誤差関数も同様）を計算の初めに一回のみ計算して保持しておくだけで良い、一方、Wolf ポテンシャルではポテンシャル計算毎にその負荷の高い補誤差関数の計算を繰り返す必要がある。

【結果と考察】

本新規ポテンシャルを様々な系に適用して、PME 法と比較することでその評価を行った。その結果、本新規ポテンシャルは安定な分子シミュレーションを実現しかつ、PME 法の結果を大変よく再現できることを示すことができた。計算結果の詳細と考察については当日詳しく報告を行う。