

詳細釣り合いを課さないレプリカ置換法の提案

(分子研, 総研大) ○伊藤暁, 奥村久士

Replica-permutation method without the detailed balance condition

(IMS, Sokendai) ○Satoru G. Itoh, Hisashi Okumura

【序】 タンパク質の構造や機能を計算機シミュレーションを用いて調べるためには、タンパク質に対する効率的な構造空間の探索が不可欠である。そのための手法として近年広くレプリカ交換法 [1,2] が用いられるようになってきた。レプリカ交換法ではレプリカが温度空間をランダムウォークすることにより、シミュレーションが自由エネルギー極小状態に捕らわれることなく効率的な構造空間のサンプリングを実現する。最近我々はより効率的な構造空間のサンプリングを実現する手法としてレプリカ置換法を開発した [3]。

通常のレプリカ交換法ではレプリカ間の温度交換にメトロポリス法を用いるが、レプリカ置換法ではレプリカ間の温度置換に諏訪・藤堂法 [4] を用いる。諏訪・藤堂法はメトロポリス法とは異なり詳細釣り合いの条件を満足せずに状態遷移を行うモンテカルロ法であり、状態遷移のリジェクト率を最小化することができる。この方法をレプリカ置換に用いることで、従来のレプリカ交換法と比較してレプリカの温度空間の効率的サンプリングを実現することが可能となった。

【シミュレーション手法】 諏訪・藤堂法を用いて 2 個のレプリカ間で温度の置換を行うこととメトロポリス法を用いて 2 個のレプリカ間で温度の交換を行うことは等価なので、諏訪・藤堂法の利点を生かすためには 3 個以上のレプリカ間で温度の置換を行う必要がある。そこで、レプリカ置換法では 2 個のレプリカ間での温度交換だけではなく、全てのレプリカ間での温度置換を考える。つまり、この方法では図 1 に示したように従来のレプリカ交換法では起こり得ないようなレプリカの温度遷移を実現することが可能となる。

一般に、 M 個のレプリカに対するレプリカ置換法を実行することを考える。このとき、レプリカ置換法における状態は $X_\alpha = \{x_1^{[i(1)]}, \dots, x_m^{[i(m)]}, \dots, x_M^{[i(M)]}\}$ で表わされる。ここで、上付きの添え字 $i(m)$ は下付きの添え字 m に対する置換操作を行う関数であり、上付き・下付きの添え字はそれぞれレプリカと温度を示す。また、 $x_m^{[i]} \equiv (q^{[i]}, p^{[i]})_m$ で、 q, p は座標と運動量を表わす。さらに、 α は M 個のレプリカと M 個の温度の全ての組み合わせに対するラベルで、 $\alpha = 1, \dots, M!$ である。例えば、レプリカが 3 個の場合は図 2 に示したように $3! = 6$ 個のレプリカと温度の組み合わせが考えられる。状態 X_α に対する重みは

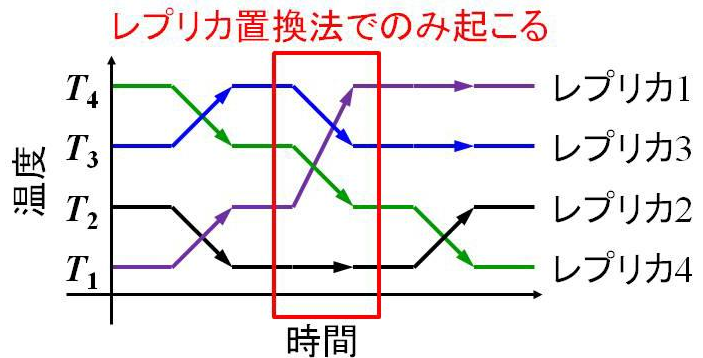


図1 レプリカ置換法の概略図。各レプリカが占有する温度の時間発展を示す。

$w(X_\alpha) = \prod_{m=1}^M \exp\{-\beta_m H(x_m^{[i(m)]})\}$ で与えられる。ここで、 $\beta_m = 1/k_B T_m$ で k_B はボルツマン定数、 T_m は温度、 H はハミルトニアンを表す。

レプリカ置換法では、従来のレプリカ交換法と同様に、シミュレーション中にレプリカ置換トライアルを行う。このレプリカ置換トライアルによってレプリカと温度の組み合わせが α から β へ遷移する確率 $P(X_\alpha \rightarrow X_\beta)$ は

$$P(X_\alpha \rightarrow X_\beta) = \frac{v(X_\alpha \rightarrow X_\beta)}{w(X_\alpha)}$$

で与えられる。 $v(X_\alpha \rightarrow X_\beta)$ は組み合わせ α から β への総確率流であり、諏訪・藤堂法では

$$v(X_\alpha \rightarrow X_\beta) = \max\left[0, \min\left[\Delta_{\alpha\beta}, w(X_\alpha) + w(X_\beta) - \Delta_{\alpha\beta}, w(X_\alpha), w(X_\beta)\right]\right],$$

$$\Delta_{\alpha\beta} \equiv S_\alpha - S_{\beta-1} + w(X_1), \quad S_\alpha \equiv \sum_{\gamma=1}^{\alpha} w(X_\gamma), \quad S_0 \equiv S_M!$$

と計算される。ただし、ここで状態 X_1 に対する重み $w(X_1)$ が全での重みの中で最大であるとしている。一般に、 $w(X_\gamma)$ が最大の重みとなる場合については文献[3]を参照のこと。

【結果】 新しく開発したレプリカ置換法と従来のレプリカ交換法を二重井戸型ポテンシャル、真空中の Met-enkephalin、水中の C-peptide の 3 つの系にそれぞれ応用し、その効率を比較した結果を紹介する。図はレプリカがある温度から別の温度への遷移する確率を示す。図3から、レプリカ置換法では従来のレプリカ交換法と比較してレプリカが頻繁に温度遷移をしていることが分かる。

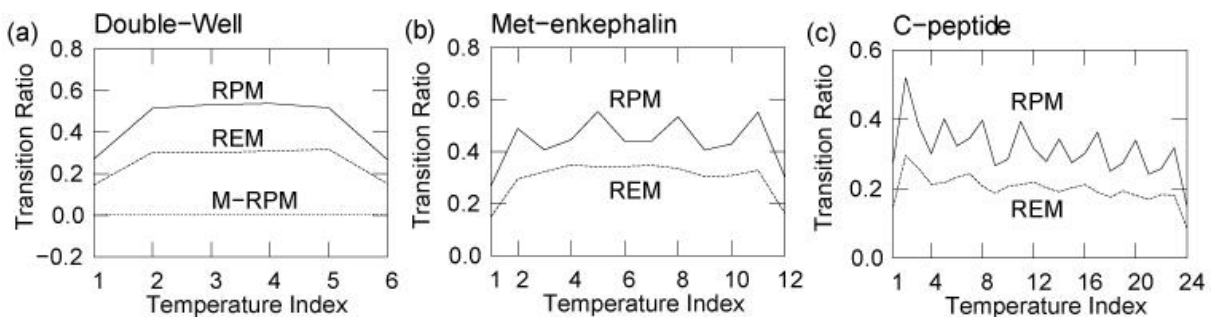


図3 レプリカの温度遷移の確率。RPM, M-RPM ではそれぞれレプリカ置換トライアルに対して諏訪・藤堂法、メトロポリス法を用いた。REM は従来のレプリカ交換を表す。

【参考文献】

[1] K. Hukushima and K. Nemoto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 1604 (1996).
 [2] Y. Sugita and Y. Okamoto, *Chem. Phys. Lett.* **314**, 141 (1999).
 [3] S. G. Itoh and H. Okumura., *J. Chem. Theory Comput.* **9**, 570 (2013).
 [4] H. Suwa and S. Todo, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 120603 (2010).