

令和 3 年 6 月 17 日現在

機関番号：24506

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2020

課題番号：17K05143

研究課題名(和文) 一般化カットオフ法と合成系密度力学による多様な分子動力学シミュレーションの実現

研究課題名(英文) Realization of variable molecular dynamics simulations by generalized cutoff method and double density dynamics

研究代表者

福田 育夫 (Fukuda, Ikuo)

兵庫県立大学・シミュレーション学研究所・特任教授

研究者番号：40643185

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：分子動力学シミュレーションにおける、総電荷や周辺環境に関する仮定、及び、対象とする物理系と他の任意の環境系との統計学的厳密なカップルの安定かつ容易な実現の困難、という制約を解消し、多様なシミュレーションを容易に実現できるようにする計算手法を構築した。具体的には一般化カットオフ法の開発および合成系密度力学の安定化を行った。高い計算精度を保ちつつ、ボトルネックである計算コストの問題をも解消している。

研究成果の学術的意義や社会的意義

分子動力学シミュレーションは、生体系における種々のメカニズムの解明やそれに基づいた薬物の設計等を可能にし、我々の生活に大きく影響を与え得る技術の一つになってきている。しかし、技術的問題に起因したシミュレーション条件についての制約が、より多様なシミュレーションの容易な実現を阻んでいる。これらの制約を除く技術を開発することで、現状では不可能な多様な用途のシミュレーションを可能にし、物理・化学の基礎科学分野のみならず、材料工学、環境工学、或いは薬学等を対象にする幅広い分野で容易に用いられたための研究基盤の確立を目指すものである。

研究成果の概要(英文)：Molecular dynamics simulation involves two kinds of problems. The first one is that we must assume conditions on total charge of consisting atoms and on environment surrounding the target molecules. The second one is the difficulty in stable and easy realization of coupling between the target physical system and its arbitrary chosen environment system within a rigorous statistical physics approach. We have solved these problems to easily realize variable molecular dynamics simulations by developing a generalized cutoff method and by stabilizing double density dynamics. These methods ensure high accuracies and reduce the computational cost that is the bottleneck of the molecular dynamics simulation for a large system.

研究分野：計算科学

キーワード：分子動力学 相互作用計算 力学系 運動方程式 サンプリング 数値積分

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

分子動力学 (Molecular Dynamics; MD) 計算は、基礎運動方程式である常微分方程式を時間に関して数値積分する事であり、逐次得られた各粒子の座標・速度の時系列データから種々の熱力学諸量を求め、対象の物理系を解析する。この MD シミュレーションにおけるボトルネックは莫大な計算コストであり、次の2つの大きな要因がある。要因(I) - 相互作用計算の量が膨大である。運動方程式は各粒子間の相互作用エネルギー関数を用いて定義され、この相互作用計算に全体の9割程度の計算コストがかかる。このコストは自由度が増すほど大きく、 N 原子からなる古典系 (生体分子系では N は 10^6 程度にもなる) では、各原子ペアに相互作用が発生するので基本的に N^2 のオーダーとなる。要因(II) - 長いシミュレーション時間が必要である。微分方程式の数値積分の単位時間ステップは 10^{-15} 秒程度であるので、ミリ秒オーダーの物理現象を見る場合には、 10^{12} 回程の計算ステップが必要であり、この各ステップで上述(I)の計算コストがかかる。加えて、大規模系の MD 計算特有の問題として、系の軌道がエネルギー関数の極小点に捉えられる等、その時間発展がしばしば非常に緩慢になる事がある。この結果、本来観察したい大きな変化を伴った物理現象まで到達できない。

このような計算コストの問題に対し、代表者らはこれまで、計算精度を保ちつつ、かつ速く MD 計算を実行するための基盤技術の開発を行ってきた。要因(I)に対しては、高精度な取扱いが難しい静電相互作用計算を高速・高精度に実現する方法として、電気的局所中性条件という物理的仮定に基づいた Zero-multipole (ZM)法 (Fukuda et al. J. Chem. Phys. 2011; 2013; 2014; 2016) と呼ぶ新規手法を開発し、基本的バルク系や生体分子系等に適用し、その性能を吟味してきた。要因(II)に対しては、軌道のトラップから系のダイナミクスを開放して状態サンプリングを強化する手法として、物理系の温度を適当な確率測度の下で揺らぐ事ができる合成系密度力学 (double density dynamics; DDD) (Fukuda & Moritsugu J. Phys. A 2015; Phys. Rev. E 2016) を開発してきた。DDD 法では、対象となる物理系を取り囲む環境の温度を動的に変えつつ、各温度の実現確率を任意に定めることができ、この実現確率と、各温度が実現した際の物理系変数の実現する条件付き確率との積として、全系 (物理系と温度 (環境) 系) の実現確率を表す。DDD 法は全系のこの任意の確率密度に比例する不変測度を持つような常微分方程式で定義される運動方程式であり、これを解く事で物理状態の強化されたサンプリングを行う。

しかし、上記の方法を含めた現状の MD 計算法においては、技術的問題に起因したシミュレーション条件について、(1) 総電荷や周辺環境に関する仮定、そして、(2) 対象とする物理系と他の任意の環境系との統計力学的厳密なカップルを安定かつ容易に実現できない、といった制限がある。近年の物理・化学或いは生物学の発展を背景にした応用において、これらの制約を除くことにより、より多様なシミュレーションが容易に実現できることが期待される。

2. 研究の目的

MD 計算において発生するシミュレーション条件についての制約を解消し、多様なシミュレーションを容易に実現できるようにする。この際に、代表者らが進めてきた MD 計算の基盤技術の開発と適用結果の知見を展開して、高い計算精度を保ちつつ、ボトルネックである計算コストの問題をも解決する。これにより、近年の計算機の発展により計算可能になってきた大規模系に対し、現状では不可能な多様な用途のシミュレーションに対して MD 計算が適用できるようになる。

制約(1)については、系の総電荷が零でなければならない、或いは系が周期的でなければならない、という制限を対象にする。制約(2)については、その解決の理論的可能性に関しては、既に代表者らが発明した DDD 法により基礎付けられている。但し、十分安定なシミュレーションを実行するための技術的課題があり、それを段階的に解消していく必要がある。これにより、対象とする物理系に対する環境を容易に変えられるようにして多様なシミュレーションを精密かつ安定に実現する事が可能になる。

3. 研究の方法

制約(1)については、従来のカットオフ (相互作用の打ち切り) の考え方を一般化して行くことで解決する。このために、ZM 法を含めた幾つかのカットオフベースの方法が各々の物理的背景や仮定 (電気的 neutrality, 系の対称性, 周辺環境の記述等) が異なるにも関わらず、用いられる関数形が数学的共通性を持つ事に着目する。

制約(2)については、DDD 法において、物理系と環境系との合成系を任意の確率分布に従わせる安定で容易な手法を構築する。また、方程式を定義する新規なベクトル場構造も念頭に置き、研究協力者らとも密に連携して数値積分法にも注力する。

4. 研究成果

制約(1)について：

電気的 neutrality 条件を課さずとも、純粋な数学的操作により、電荷 neutrality 条件を課した場合のエネルギー表式を得ることに成功した。まず、この方法の方向性を吟味するために、関連手法であり、

我々が既に開発した Zero-multipole summation (ZM) 法についての詳細検証として、3次元境界条件に由来する誤差の定量的見積もりを行った。その結果、本来非周期的である系に、周期性を仮定した従来のエバルト法を用いて周期境界条件を課すと一定のアーティファクトが生じること、及び ZM 法ではそのような仮定が不要な分、誤差が小さくなることを明らかにした。その際には、3種類のサイズの MD ボックスの各々に陽に扱った水とペプチドを入れた系にて、ペプチドの構造に関する種々の量についての統計解析及び自由エネルギーの算出をし、また計算の収束についても注意深く解析した上で、結論付けた。さらにボックスサイズ依存性については Poisson-Boltzmann 計算の定量化により正当化できた。

また、精度とともに、ZM 法の計算速度性能の詳細な調査を行った。具体的には、世界最速とも言われる MD プログラム Gromacs へのインプリメントを行い、標準法として用いられている

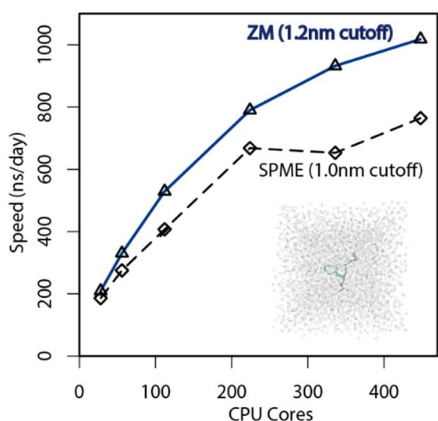


図1. MD計算の速度の比較：ZM法とSPME法

SPME 法（エバルト法の高速度版）との比較検証を行った。その結果、1.2nm のカットオフ長を用いた ZM 法は、パラメタを注意深く設定した SPME 法に比べ、水の系で 1.5 倍程度の高速度を実現した。さらに CPU コア数を増すと高速化がスケールする。加えて、系のサイズ依存性を調べるために、30000-240000 原子数の水の系を用い、また系の種類と MD ボックスの形状依存性を調べるために、三斜晶系 MD ボックスにいれた水中の trp-cage 系 (図 1)、そして十二面体 MD ボックスにいれた水中の $\gamma\delta$ TCR 蛋白質系を用い、各々において計算速度を実測して、同様の比較結果を得た。なお、論文化の時点では GROMACS-5.0.7 にインプリメントを行ったが、その後、GPU 版も含め、GROMACS-2016,2018,2019 にまで対応させ、GitHub (<https://github.com/shunsakuraba/gromacs>) にて公開している。

これらにより、予定していた連続近似を用いた相互作用関数を用いる方向性が正しい事が分かった。即ち、まず、粒子間相互作用を表すポテンシャル関数と連続近似を用いた電荷密度関数を使って、対象粒子に関する相互作用を積分形式で表し、その寄与を空間の有界で閉じた部分とそれ以外の部分へ分離して評価した。最初に 1 次元の積分表現を構築し、次に球積分を経ずに直接 3 次元化を試みた。この方法の確立により、従来法に比して、粒子間の相互作用をより一般的に取り扱うことが可能になるため、多様なシミュレーションが可能になることが期待される。一方、その数学的表式を吟味していく中で、遠方の寄与を繰り返す新しい方向性にも気づいたので、その可能性についての検討もを行い、将来の研究テーマとしての可能性を得た。

制約(2)について：

サンプリングをより強力にして安定なシミュレーションを実現するために、DDD 法において任意の逆温度確率分布関数を高精度で実現する手法を検討した。2つの方法を試みて、成功した方法について以下に述べる。まず、BG 分布におけるエネルギー期待値を使って定義される、分配関数の比率に関する厳密な積分表式を構築した。従来のシミュレーテッドテンパリング法で用いられる類似式はこの表式の近似であることも明らかになったインパクトは大きい。加えて、BG 分布以外の任意の分布についての表式を得ることに成功した。次に、実際の有限個の期待値データセットを用いて分配関数をスプライン補完にて近似した。そして、この近似の精度を上げるために、数回の MD イテレーションにより因子補正する方法を作った。また安定性をさらに向上させるために収束因子の導入を行った。

まずこれらの方法の理論的検証のために、低次元のテストモデル系に適用して、各独立変数の周辺分布関数が高精度で求まることを確認した。次に、水を陽に扱ったシニョリン分子の系にて、得られた逆温度確率分布関数が目的とする分布に対して十分な精度で実現できることを確認した。具体的には、初回のスプライン近似に対し、次のイテレーションで精度が大きく改善された。このように僅かな計算コストで容易に実現できる意義は応用上においても特筆される。実際、従来のサンプリングの手法の一つであるマルチカノニカル法では、非常に多数回のイテレーションが必要なために、その容易な取り扱いを阻んでいる。また、本手法の適用結果では、力学諸量の分布が高精度に得られ、エネルギーと熱浴温度間の力学的・統計的な関係性についても理論と一致した。

こうして、DDD 法においてパラメタを熱浴逆温度とすると、物理系は連続的な熱浴温度の変化を受けるという観点から、従来のレプリカ交換法と対比することができるが、後者では多数の物理系のレプリカが必要なのにに対し、DDD 法では物理系は一つのみで、少数自由度（典型的には一自由度）で記述される温度系をカップルさせるだけなので、必要な計算機資源の大幅な減少を達成できる。また理論的見地からも、従来の adaptive biasing 法とのアプローチとの比較も行い、類似点と差異を明らかにすることで、本手法の位置づけを明確した。

このようにして得られる分布は、予め設定した不変測度をダイナミクスが長時間で実現して得られるのであるが、ダイナミクス自体は微小時間後の発展を定義するため、上記のようなサンプリングの力学的機構を明らかにすることは理論的に興味深く、今後の技術発展のためにも重要であるため、この解析を行った。具体的には、温度系（環境系）のポテンシャルエネルギーの

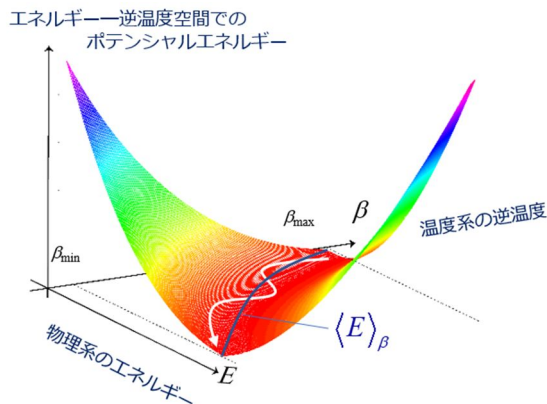


図2. エネルギー期待値という物理的に意味のあるパスに平均的に沿った広い領域のサンプリングが可能

形状及びその上でのダイナミクスの特徴を明らかにした。まず、物理的にごく自然な条件下で、エネルギー-逆温度空間で記述される温度系ポテンシャルエネルギーが正ヘッシアンの安定な形状であることが分かった(図2)。そして、その最小点からなるパスの近傍でダイナミクスが展開されることが分かり、これによって、熱浴温度-物理系エネルギー、あるいは一般的には、環境パラメータ-エネルギー類似量、のパスが定義されることで、幅広い温度領域のサンプリングの可能性がまず示される。そして、このようなサンプリングを現実化しているのが、微分方程式に内包されている、物理系エネルギーと熱浴温度との相互強化の機構によることが明らかになった。つまり互いに平衡を保つのでは

なく、互いが他を加速するという従来の方法にはなかった機構により実際のサンプリングが強化されていることが明らかになった。BG 分布以外の分布を対象にした際でも同様の機構が存在することも分かった。

このような力学的機構の詳細が明らかになったことで、研究開発当初には思い至らなかった、サンプリングをより頑強にする新しい知見にもつながった。新しいアイデアとしては、パラメータ空間の次元を上げ、系の自由度を増やすことでサンプリング強化に接続する。この場合、パラメータ一つ一つは、元々対象にしていたパラメータ(温度など)とは異なるが、これを適切に纏めたものが対象にしていたものとなる。このアイデアは、予想される有用性に比して、技術的な困難もあったが、詳細な分析により構築できた。さらに全く新しい知見として、近似分配関数の誤差が与える影響は対象空間の安定集合と固定点の存在に支配されることを明らかにした。

実用系を用いた最終的検証として、パラメータを熱浴温度として、これを揺らぐ DDD としての coupled Nosé-Hoover (cNH) 法を、溶媒分子を露わに扱ったペプチド系に適用した。具体的には主鎖が共通した2種類の環状ペプチドを選択し、さらに環境の影響を調べるために、溶媒として水及び DMSO の2種類を選定し詳細な解析を行った。その結果、実用的なシミュレーション時間で十分な状態サンプリングを実現でき、熱力学諸量を高精度に求められる事を確認した。さらに、得られた構造アンサンブルの自由エネルギー解析、及び適切に定義した構造情報に関するクラスター分析、そして2ペプチドの正当な比較を可能にするために新たに構築した主成分解析により、環状ペプチドの細胞膜透過性について新たな知見を得ることに成功した。即ち、側鎖の原子成分の僅かの違いが構造アンサンブルに有意な差異をもたらし、膜透過性が変わってくることを明らかにした。しかも化学的アプリオリには透過しやすいと予測された方の環状ペプチドが、じつは透過しにくいことが明らかになり、実験研究者とも共同研究を行って NMR 実験結果と定量的な一致を見た。

なお、cNH 法のモデル系への検証の中で、予期せぬ特異な現象を発見した。モデル系を変えて回避することでこの現象を無視することは可能であったが、今後の検証作業に大きな影響を与える可能性も否定できないため、深い分析を試みることにした。その結果、物理系の対称性を起因とする、多数の MD 方程式に内在する非エルゴード的要因を明らかにすることができた。また数値誤差が疑似的なエルゴード性を与える可能性についても、論文の査読者とも大いに議論した上で、仮説を提唱できた。これらは、単純な問題回避では得られなかった新たな発見であった。

また、運動方程式に含まれるシステムパラメータの値を効率的に与える方法を開発した。これらの値は、理論的には任意値として許されるものも含まれるが、分布の収束時間にしばしば大きく影響するため、方法の確立は実用上重要である。これをモデル系およびいくつかの水中のペプチドの系にて実証し、効率的な割り当てが実現できることを確認した。加えて、実用上重要な技術として再重法があり、これにより他の分布への変換が可能になることで実験との比較が行える。このための安定な方法として、射影の技法を用いる方法を新たに考案し、数値誤差減少に関する有用性を見出した。

さらに、逐次積分の数値的安定性を高めるために、常微分方程式の数値積分法の開発を行った。これは DDD を表す常微分方程式には、ある未定定数が含まれていて、その値が非零のときには、従来の数値積分法が使えないという問題があったためである。この解決のために、陽的・対称な新しい数値積分法を開発し、まずモデル系で有効性を検証した。また、汎用的形式を有する解法であるため、DDD 法以外にも適用可能であり、実際に MD の他方法に応用して、従来法より優れていることを実証した。

DDD 法の今後の展望として、同じ物理系を詳細な自由度と、粗く表現した自由度の各々で、それらが独立のように表しておき、確率密度で「相互作用」させてマルチスケールを表現することで、確率的に整合性のとれた高精度な連成スキームの実現する可能性にも期待したい。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 8件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 I. Fukuda, S. Queyroy S, and H. Nakamura	4. 巻 89
2. 論文標題 A Robust, Symmetric Operator-Composition Integrator for the Berendsen Temperature-Control Molecular Dynamics Equation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 64004
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.064004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Ikuo Fukuda	4. 巻 60
2. 論文標題 Symmetric, Explicit Numerical Integrator for Molecular Dynamics Equations of Motion with a Generalized Friction	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Math. Phys.	6. 最初と最後の頁 42903
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5012871	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kasahara Kota, Sakuraba Shun, Fukuda Ikuo	4. 巻 122
2. 論文標題 Enhanced Sampling of Molecular Dynamics Simulations of a Polyalanine Octapeptide: Effects of the Periodic Boundary Conditions on Peptide Conformation	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 2495 ~ 2503
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.7b10830	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Shun Sakuraba and Ikuo Fukuda	4. 巻 39
2. 論文標題 Performance Evaluation of the Zero-Multipole Summation Method in Modern Molecular Dynamics	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 1551 ~ 1560
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.25228	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ikuo Fukuda and Kei Moritsugu	4. 巻 印刷中
2. 論文標題 Analysis of multiple data sequences with different distributions: defining common principal component axes by ergodic sequence generation and multiple reweighting composition	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 IOP SciNotes	6. 最初と最後の頁 印刷中
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/2633-1357/ac0ac2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ikuo Fukuda and Kei Moritsugu	4. 巻 53
2. 論文標題 Temperature--Energy-Space Sampling Molecular Dynamics: Deterministic and Single-Replica Method Utilizing Continuous Temperature System	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 J. Phys. A: Math. Theor.	6. 最初と最後の頁 375004
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1751-8121/aba027	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kei Moritsugu, Koh Takeuchi, Narutoshi Kamiya, Junichi Higo, Isao Yasumatsu, Yoshifumi Fukunishi and Ikuo Fukuda	4. 巻 61
2. 論文標題 Flexibility and Cell Permeability of Cyclic Ras-inhibitor Peptides Revealed by the Coupled Nose-- Hoover Equation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Chem. Inf. Model.	6. 最初と最後の頁 1921-1930
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jcim.0c01427	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ikuo Fukuda, Kei Moritsugu, and Yoshifumi Fukunishi	4. 巻 26
2. 論文標題 On Ergodicity for Multi-Dimensional Harmonic Oscillator Systems with Nose--Hoover Type Thermostat	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Regular and Chaotic Dynamics	6. 最初と最後の頁 183-204
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1134/S1560354721020064	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計14件（うち招待講演 2件 / うち国際学会 3件）

1. 発表者名 Kei Moritsugu, Koh Takeuchi, Yoshifumi Fukunishi, and Ikuo Fukuda
2. 発表標題 Enhanced conformational sampling of cyclic peptide cyclorasin by coupled Nose--Hoover equation
3. 学会等名 CBI学会2020大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 福田育夫, 森次圭, 福西快文
2. 発表標題 Coupled Nose-Hoover方程式による温度 エネルギー空間上の高効率サンプリングの実現
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Shinji Iida, Ikuo Fukuda, Junichi Higo, Kota Kasahara, Takashi Kurosawa, Tadaaki Mashimo, Kiyotaka Misoo, Yoshinori Wakabayasi, Ryuta Murakami, Chisato Kanai, Yusuke Sugihara, Mitsuhiro Wada, Hironori Nakamura, Yoshifumi Fukunishi
2. 発表標題 myPresto, computer-aided drug development software
3. 学会等名 第57回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 福田育夫
2. 発表標題 一般的な摩擦項をもつ運動方程式に対する拡張されたベルレ型積分法
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ikuo Fukuda, Kei Moritsugu, Yoshifumi Fukunishi
2. 発表標題 A nonlinear ordinary differential equation with a fully statistical description for a physical system and an environment system
3. 学会等名 8th International Nonlinear Science Conference 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ikuo Fukuda and Kei Moritsugu
2. 発表標題 Double density dynamics and coupled Nose-Hoover equations
3. 学会等名 The 2nd Global Conference on Applied Physics, Mathematics and Computing (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 福田育夫, 森次圭, 福西快文
2. 発表標題 温度制御方程式系の合成とその応用可能性
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ikuo Fukuda and Kei Moritsugu
2. 発表標題 A coupling of physical system and a temperature system: Coupled Nose-Hoover equations
3. 学会等名 第56回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kei Moritsugu, Tohru Terada, Ryuji Ishida, Akinori Kidera
2. 発表標題 Multicopy/multiscale simulations and their applications using massive computing
3. 学会等名 第56回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 森次圭
2. 発表標題 MSES 法によるタンパク質の網羅的構造探索
3. 学会等名 レア・イベントの計算科学 第2回ワークショップ
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Ikuo Fukuda, Narutoshi Kamiya, Kota Kasahara, Han Wang, Shun Sakuraba, Haruki Nakamura
2. 発表標題 Non-Ewald method for accurately and efficiently calculating electrostatic interactions in molecular simulations
3. 学会等名 "Conformational Ensembles from Experimental Data and Computer Simulations" meeting sponsored by the Biophysical Society (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 福田育夫, 森次圭
2. 発表標題 合成系密度力学の開発
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Ikuo Fukuda
2. 発表標題 Non-Ewald methods for simply and precisely calculating electrostatic interactions in molecular simulations
3. 学会等名 JCUP VIII (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Ikuo Fukuda
2. 発表標題 Zero-multipole summation method: non-Ewald method for simply and precisely calculating electrostatic interactions in molecular simulations
3. 学会等名 Seminar at Science for Life Laboratory, Stockholm University (招待講演)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 福田育夫	4. 発行年 2017年
2. 出版社 日本物理学会誌	5. 総ページ数 7
3. 書名 長距離力をいかに精度よく効率的に見積もるか 零多重極子和法による静電相互作用計算	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担者	森次 圭 (Moritsugu kei) (80599506)	横浜市立大学・生命医科学研究科・特任准教授 (22701)	

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	ケルア セベリン (Queyroy Severine)	Aix-Marseille Universite, CNRS, ICR UMR 7273	
連携研究者	中村 春木 (Nakamura Haruki) (80134485)	大阪大学・たんぱく質研究所・教授 (14401)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関