Global Area Search(GLAS)アルゴリズムの修正とペプチド系への適用

(阪大院理[1],筑波大院工[2])○橘川武知[1].山中秀介[1],庄司光男[2],奥村光隆[1]

Improvement of GLobal Area Search (GLAS) algorithm and Application of GLAS approach to peptide system([1]*Graduate School of Science, Osaka University,* [2]*Graduate School of Science and Technology, University of Tsukuba*) ○Takechika Kikkawa[1],Syusuke Yamanaka[1],Mitsuo Shoji[2],Mitsutaka Okumura[1]

Exploration of Chemical Reaction Pathways is the key to design highly efficient reactions in solvents and catalysts, and so it is essential in the study of chemical reaction systems. However, current exploration methods of chemical reaction pathways require either manual search of transition states one by one or automatic full search of all chemical reaction pathways at once using a rich parallel computing resources. Thus, a method that automatically searches reaction pathways within the appropriate energy range at reasonable computational costs (a middle ranged PC cluster in laboratory) is required.

The Global Area Search (GLAS) method, which was developed by Shoji, is an effective uphill-walking technique due to repulsions among several walkers on potential surfaces. Walkers explore reaction pathways in potential surface within specified energy range. This original GLAS method is designed for massively parallel computing environment. In this study, we propose a modified version of the GLAS method towards a general-purpose method that is suited to small-to-middle scale parallel computer systems in laboratories. We examined this new version of the GLAS method to several peptide systems and demonstrated that it reduces the whole computational steps significantly compared with the original version.

Keywords : exploration of chemical reaction pathways, quantum chemical calculation, isomerization reaction

反応経路の探索は，溶媒・触媒などの反応を高効率化する反応設計の要であり，化学反応系の研究に欠くべからざるものである。しかしながら既存の反応経路探索法は手作業で一つ一つ遷移状態を探索するか,潤沢な並列計算環境を用いて反応経路を一括して自動全探索する必要があり,リーズナブルな計算コスト(研究室の PC クラスター程度)で適切なエネルギー範囲を自動探索する理論が求められている。

庄司によって開発された Global Area Search (GLAS)法[1]は，ポテンシャル曲面上の複数ウォーカー間の反発によって,指定したエネルギーレンジ内のポテンシャル曲面を効率的に探索する方法である。オリジナルの GLAS 法は巨大並列環境用に設計されている。本研究では,小～中規模の計算環境用の方法として修正版を提案する。我々はこの新しいバージョンをいくつかのペプチド系に適用し,計算ステップを大幅に減少させることを実証した(表 1)。

表1 アラニンジペプチドの構造探索に要した計算回数

	force	opt	freq
オリジナル	27900	279	1
修正版	5370	31	14

[1] M. Shoji, M. Kayanuma, Y. Shigeta Bull. Chem. Soc. Jpn. 2018, 91, 1465–1473.

© The Chemical Society of Japan