

## FMOによる有効パラメータを用いたタンパク質の格子モデル畳み込み

### Protein lattice folding model using effective parameters evaluated by FMO

立教大理<sup>1</sup>, ビネット&クラリティ<sup>2</sup>, 科学大院情報<sup>3</sup>, JSOL<sup>4</sup>, blueqat<sup>5</sup>,

慶應大理工<sup>6</sup>, CQuERE TCG-Crest<sup>7</sup>, 東大生研<sup>8</sup>

豊田信太郎<sup>1</sup>, 安田翔也<sup>2,3</sup>, 土居英男<sup>1</sup>, 奥脇弘次<sup>1,4</sup>, 太刀野雄介<sup>1</sup>, 湊雄一郎<sup>5</sup>,

杉崎研司<sup>6,7</sup>, 望月祐志<sup>1,8</sup>

Rikkyo Univ.<sup>1</sup>, Vignette&Clarity<sup>2</sup>, Inst. Sci. Tokyo<sup>3</sup>, JSOL<sup>4</sup>, blueqat<sup>5</sup>,

Keio Univ.<sup>6</sup>, CQuERE TCG-Crest<sup>7</sup>, Univ. Tokyo<sup>8</sup>

Shintaro Toyoda<sup>1</sup>, Shoya Yasuda<sup>2,3</sup>, Hideo Doi<sup>1</sup>, Koji Okuwaki<sup>1,4</sup>, Yusuke Tachino<sup>1</sup>,

Yuichiro Minato<sup>5</sup>, Kenji Sugisaki<sup>6,7</sup>, Yuji Mochizuki<sup>1,8</sup>

E-mail: fullmoon@rikkyo.ac.jp

**【序】** 立教大とJSOLのグループでは、FMO計算によってDPDの粒子間の有効相互作用パラメータを決めるプロトコル[1]をFCEWSとしてシステム化[2]し、様々な問題に適用してきました(FMO-DPD法)。今回、量子アニーリング系の格子モデルでのタンパク質の畳み込みモデル[3,4,5]に、実験ベースのMJパラメータ[6]に加え、FMO由来の値を使った結果をご紹介します。

**【量子シミュレーション】** 量子計算による格子の畳み込みでは、2次制約無し2値最適化(QUBO)[7]でイジングモデル的なエネルギー関数が使われます。前の報告[8,9]では、先行研究[3,4,5]のPSVKMAペプチドを扱いました(パラメータはMJ)。今回もPVSCKMAを例に取り、QUBOのシミュレータとしてTYTAN[10]を用いました。通常、QUBOでは量子ビットの3次以上の積の項は制約条件下で扱われ、ビット数が増えると複雑化します。これに対し、高次2値最適化(HOBO)[11]では直截に扱えますので、これを実装したHOBOTAN[12]も併用して比較しました。シミュレーションで試行した格子モデルは、2次元で5パターン、3次元で1パターンです。

**【有効パラメータ算定】** FMO-DPDでChignolinの畳み込みを行った際のパラメータ[13]と共に、ポアソン・ボルツマン(PB)法で水和条件を課して算定し直した値を用いました(「富岳」を利用)。

**【結果】** 紙数の制約から詳細な記述は控えますが、ポイントを以下に記します。(1) HOBOの方がQUBOより最適畳み込み解の確率が高い。(2) FMO由来パラメータの方が、準最適解を複数与える(PB水和は重要)。(3) 準最適解とエネルギーの深さの相関は必ずしも明確ではない。

**【謝辞】** 「富岳」での計算はhp240013課題で行いました。また、立教SFRから支援を得ました。

**【文献】** [1] K. Okuwaki et al., *J. Phys. Chem. B* **122**, (2018) 338. [2] K. Okuwaki et al., *J. Comp. Chem. Jpn* **17**, (2018) 102. [3] A. Perdomo et al., *Phys. Rev. A* **78** (2008) 012320. [4] A. Perdomo-Ortiz et al., *Sci. Rep.* **2** (2012) 571. [5] R. Babbush et al., *Adv. Chem. Phys.* **155** (2014) 201. [6] S. Miyazawa et al., *J. Mol. Biol.* **256** (1986) 623. [7] F. Glover et al., *arXiv:1811.11538 [cs.DS]* (2018). [8] R. Saito et al., *J. Comp. Chem. Jpn.* **21** (2022) 39. [9] R. Saito et al., *J. Comp. Chem. Int. Ed.* **9** (2023) ID:2022-0036. [10] <<https://github.com/tytansdk/tytan>>. [11] Y. Minato, *arXiv:2407.16106 [quant-ph]* (2024). [12] <<https://github.com/ShoyaYasuda/hobotan>>. [13] K. Okuwaki et al., *Appl. Phys. Expr.* **13** (2020) 017002.