

タンパク質における重要温度領域
吉田 武史

1 研究活動報告

今月行った研究活動を示す .

- GECCO2002 への参加
- タンパク質への SA の適用
- タンパク質における重要温度領域の調査

2 GECCO2002 への参加

7 月 9~13 日に NY で開催された GECCO(Genetic and Evolutionary Computation Conference) に参加した . その中で私が参加したセッションは , バイオインフォマティクスに進化計算を用いる研究が主題であるワークショップである . 発表時の様子を Fig. 1 に示す .



Fig. 1 GECCO での発表風景

発表内容は一年先輩の小椋さんのテーマである「遺伝的交叉を用いた並列 SA によるタンパク質の立体構造予測」である . GA およびバイオに関して研究熱心な聴講者が多くおり , 活発な質疑応答が行えたことがよかったと思う . またバイオインフォマティクスへ GA を適用する研究にふれたことは有意義であった .

3 タンパク質における重要温度領域の調査

タンパク質の立体構造予測を SA を用いて行う際に , 温度の推移は解の精度に密接に関係する . 一方 , 他の対象問題で一定温度による逐次 SA の解探索で良好な結果が得られたことが報告されている¹⁾ (重要温度領域と呼ぶ) .

そこで本研究では , タンパク質の立体構造予測に関して , SA における重要温度領域が存在するか検証する .

数値実験

一定温度の SA を様々な温度で実行し , それぞれの温度で得られた最良値を比較することで , 重要温度領域の存在を確認する . この方法を Met-enkephalin に適用した結果を Fig. 2 に示す . 実験では , 最高温度と最低温度を通常の逐次 SA で用いた値に設定し , その温度間を等比的に 32 分割した値を各温度とした . また , Fig. 2 では横軸に各温度 , 縦軸にそれぞれの温度で得られたエネルギー値を示している . なお , この結果は各試行における最良値の 30 試行平均である .

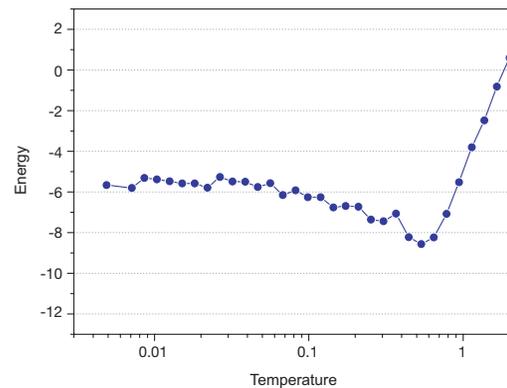


Fig. 2 実験結果

この結果を見てわかるように , 一部の温度による解探索で良好な解を得ることができ , 解探索に有効な温度が存在することが確認できた . しかし , その温度による解探索で met-enkephalin の最適解に到達する確率は低く , 今後さらなる実験・考察が必要である .

4 今後の予定

- タンパク質の重要温度領域に関する調査
- 適応的 TPSA の論文投稿
- iSIGHT の並列化について

参考文献

- 1) Mark Fielding. Simulated annealing with an optimal fixed temperature. *SIAM J.*, Vol. 11, No. 2, pp. 289-307, 2000.