

TPSA によるタンパク質の構造予測
米田真純

1 前月からの課題

1. 離散問題を解く TPSA の実装
2. TPSA を用いたタンパク質の立体構造予測

2 課題の達成状況および研究成果

2.1 TPSA の実装

2.1.1 TPSA の基本アルゴリズム

逐次 SA のアルゴリズムでは、クーリング周期になるとある温度 T を T' に冷却するのに対し、TPSA では解交換周期ごとに温度 T のプロセスと温度 T' のプロセスが解を交換する。このときの解交換は確率的に行う。TPSA のアルゴリズムを Fig. 1 に示す。

逐次 SA において温度スケジュールを設定することは、TPSA においてはプロセス間の解交換を行うタイミングを設定することに相当する。TPSA では、プロセス間の解交換を確率的に行うことによって温度スケジュールを自動化している。TPSA のクーリングスケジュールを Fig. 2 に示す。TPSA では各プロセスに異なる温度と初期解を与え、プロセスごとに同時並列にアニーリングを行う。解交換周期に達したときに交換条件を満たしていればプロセス間で解を交換する。探索終了時に最も低い温度 T_5 のプロセスが持つ解を最終的な解として出力する。

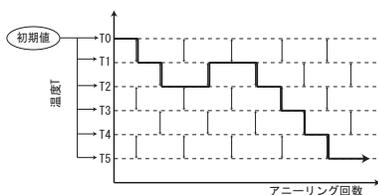
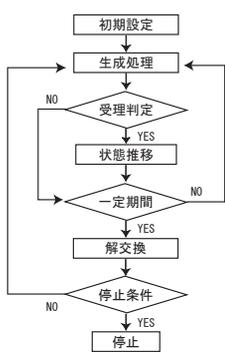


Fig. 2 TPSA のクーリングスケジュール

Fig. 1 TPSA のアルゴリズム

2.1.2 作成したプログラム

作成したプログラムでは、最も低い温度のプロセスが持つ解を最終的な解とするのではなく、すべての温度における最良解を最終的な解として出力する。

2.2 離散問題を解く TPSA の実装

対象問題を離散問題である TSP の eil51・eil101・kroA100・lin105・a280 とし、数値実験を行った。近傍として 2-change を用い、それぞれ 30 試行を行った。パラメータについては紙面の都合により省略する。Table 1 に実行結果を示す。

Table 1 実行結果

対象問題	最適解	最良値	中央値
eil51	426	426	427
eil101	629	631	640.5
kroA100	21282	21308	21427
lin105	14379	14379	14519
a280	2579	2651	2718

2.3 Met-enkephalin の立体構造予測

作成した TPSA を Met-enkephalin の立体構造予測に適用した。近傍幅は以下の 2 種類を用いた。

1. 180 ° で一定
2. 180 ° (180 × 0.3) ° へと等比的に小さくする

それぞれ 30 回試行を行った。パラメータについては紙面の都合により省略する。Table 2 に実行結果を示し、Fig. 3 に得られた Met-enkephalin の立体構造を示す。なお、Met-enkephalin の最適解は -11kcal/mol 以下である。

Table 2 実行結果

近傍幅	最良値	中央値	平均値	成功率
1	-12.1688	-11.4194	-11.3584	0.73 (22/30)
2	-12.1816	-11.3063	-11.2342	0.57 (17/30)

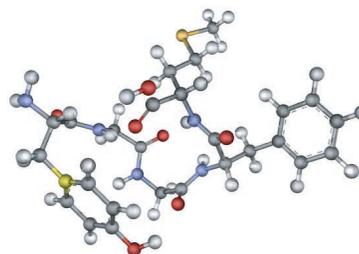


Fig. 3 Met-enkephalin の立体構造

3 今後の課題

1. PSA/GAc の実装
2. 文献調査