

TPSA を用いたタンパク質の立体構造予測
米田真純

1 前月からの課題

1. 文献調査
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 文献調査

GA によるタンパク質の構造解析に関する文献を調査した。調べた文献およびその概要を以下に示す。

- GA による非線形最適化 (喜多一)

非線形最適化問題の重要性や GA を非線形最適化へ応用するときの問題点が述べられている。その問題の解決策として実数値 GA が有効であると述べている。また、喜多らが提唱した実数値 GA の連続性を考慮した交叉の設計指針が紹介されている。

2.2 TPSA を用いたタンパク質の立体構造予測

2.2.1 Met-enkephalin の立体構造予測

自作 TPSA を Met-enkephalin の立体構造予測に適用した。近傍は以下の 3 種類を用いた。

1. 180° (180×0.3) $^\circ$ へと等比的に小さくする
2. 180° (180×0.3) $^\circ$ へと等差的に小さくする
3. 180° 1° へと等差的に小さくする

パラメータについては紙面の都合により省略する。実行結果を Table 1 に示す。なお、Met-enkephalin の最適解は -11.0kcal/mol 以下である。

Table 1 実行結果

近傍	最良値	中央値	平均値	最適解発見率
1	-12.1435	-10.77445	-10.83465	0.4
2	-12.1895	-11.58228	-11.31360	0.65
3	-12.2183	-11.72530	-11.38843	0.6

2.2.2 (Ala)₁₀ の立体構造予測

自作 TPSA を (Ala)₁₀ の立体構造予測に適用した。

- パラメータ

パラメータを Table 2 に示す。また、状態の生成は $-180.0 \sim 180.0$ の間でランダムに二面角の値を与えた。

Table 2 パラメータ設定

パラメータ	値
最高温度	2.0
最低温度	0.003
総ステップ数 (MCsweep)	5000
解交換周期	10MCsweep 毎
温度数	16

- 実験結果

実行結果を Table 3 に示す。また、Fig. 1 に得られた (Ala)₁₀ の立体構造を示す。なお、(Ala)₁₀ の最適解は -9.7kcal/mol 以下である。

Table 3 実行結果

最良値	中央値	平均値	最適解発見率
-9.96619	-5.66981	-5.31178	0.05

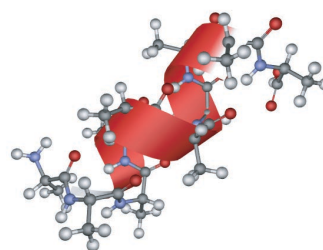


Fig. 1 (Ala)₁₀ の立体構造

2.2.3 考察

Met-enkephalin の立体構造予測において、近傍を等比的に小さくするか等差的に小さくするかで実行結果に差が見られた。この原因として、等比的に行う場合は前半部分で急激に近傍を小さくしてしまうため局所解に陥っている可能性が挙げられる。

また、Met-enkephalin と (Ala)₁₀ の立体構造予測を比べたとき、最適解発見率に大きな差がある。この原因として、設計変数の数が増加したことにより問題が複雑化していることが考えられる。しかし、パラメータの変更、近傍の設定などの検討が必要である。

3 今後の課題

1. SA の再検討
2. PSA/GAc の実装