

タンパク質立体構造予測への逐次 SA について
吉田 武史

1 研究活動報告

今月行った研究活動を示す .

- タンパク質の立体構造予測に用いる逐次 SA の検証
- タンパク質における重要温度領域の調査
- SMC チュニジアへの準備

2 タンパク質への逐次 SA の検証

2.1 実験概要

タンパク質立体構造予測研究グループの各人が作成した逐次 SA を同じタンパク質に適用し、性能比較を行った . 逐次 SA を 2 つのタンパク質 Met-enkephalin , (Ala)10 に適用する . 用いたパラメータは岡本先生らが用いたものと同一とし、近傍として用いる二面角を一定に固定する場合と減少させる場合の比較を行った . 用いたパラメータを Table 1 に示す .

Table 1 パラメータと対象タンパク質

	Met-enkephalin	(Ala)10
Mcsweep	100000	110000
最高温度	2.0	
最低温度	0.1	
最適解 (kcal/mol)	-11.0	-9.7
設計変数	19	30
試行回数	50	

2.2 実験結果

3 つのタンパク質に逐次 SA を適用した結果を Table 2 と Fig. 1 に示す . Fig. 2 では固定近傍、変動近傍の解探索履歴と受理率履歴を示す . 左図ではそれぞれの平均値と最良値の解探索履歴、右図は平均の受理率履歴を示す .

Table 2 実験結果

	Met-enkephalin		Ala10	
	54 °減少	固定	54 °減少	固定
近傍				
最良値	-12.06	-12.04	-9.80	-9.83
平均値	-10.51	-10.93	-9.25	-9.32
中央値	-10.89	-10.97	-9.59	-9.61
最悪値	-8.24	-7.69	0.10	-2.64
最適解発見率	42%	48%	18%	22%

この実験結果より、両タンパク質において固定近傍の性能が変動近傍に比べ勝っていることがわかる . また

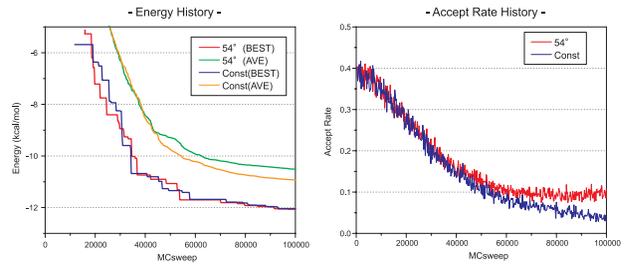


Fig. 1 変動近傍と固定近傍の比較

Fig. 1 の右図より、解探索終盤での受理率履歴が両近傍で異なることがわかった .

3 タンパク質における重要温度領域

3.1 実験概要

一定温度で実行する逐次 SA を様々な温度で実行し、それぞれで得られたタンパク質の性能比較を行うことでタンパク質における重要温度領域を確認する . 実験では対象タンパク質を Met-enkephalin とし、Table 1 に示す最高温度と最低温度 0.01 の間を 32 等分割した .

3.2 実験結果

それぞれの温度で一定温度の逐次 SA を実行した際に、得られたタンパク質の最良値、平均値、中央値、最悪値を Fig. 2 に示す .

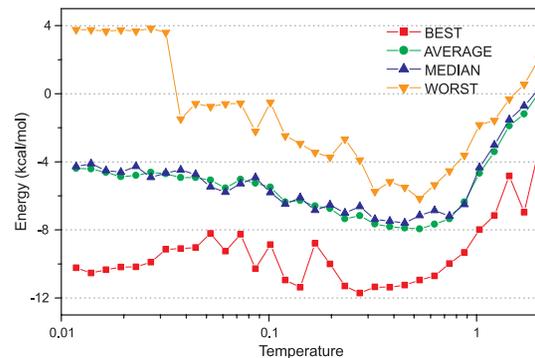


Fig. 2 Met-enkephalin における重要温度領域

Fig. 2 より各温度によって得られる解の大きさが異なることがわかる . 低温部では初期解の品質により最良値と最悪値の差が大きいものに対して、一部の温度 (0.3 ~ 0.5) では全ての試行で良好な精度を示している . つまり、Met-enkephalin では、この周辺の温度が重要温度領域に近いと考えられる .