

SA による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. 逐次 SA によるタンパク質の立体構造予測
2. Met-enkephalin の立体構造予測における重要温度領域の検証

2 課題の達成状況および研究成果

2.1 逐次 SA によるタンパク質の立体構造予測

タンパク質の立体構造予測における逐次 SA の性能を検証するために、逐次 SA を Met-enkephalin と (Ala)<sub>10</sub> の立体構造予測に適用した。Table 1 に示す、岡本らと同一のパラメータを用いて実験を行い、逐次 SA の比較を行った。

Table 1 パラメータ

	Met-enkephalin	(Ala) <sub>10</sub>
最高温度	2.0	
最低温度	0.1	
近傍	180 ° 54 °, 180 °固定	
総 MCsweep 数	100000	110000
試行回数	50	

実験結果を Table 2 に示す。なお、ECEPP/2 エネルギー関数に基づいた気相中において、Met-enkephalin は -11.0kcal/mol 以下、(Ala)<sub>10</sub> は -9.7kcal/mol 以下の領域で最小エネルギー構造をとることが確認されている。

Table 2 実験結果

	Met-enkephalin		(Ala) <sub>10</sub>	
	変動近傍	固定近傍	変動近傍	固定近傍
最良値	-12.0681	-12.0169	-9.7895	-9.8268
平均値	-10.4424	-10.8017	-8.3649	-9.2055
中央値	-10.4831	-10.6773	-9.5854	-9.6330
最悪値	-8.2542	-8.0641	4.6062	-1.9679
発見率	30 %	38 %	12 %	14 %

Table 2 に示した結果より、Met-enkephalin と (Ala)<sub>10</sub> の立体構造予測においては固定近傍の方が変動近傍よりも高い解探索能力であった。固定近傍の方が変動近傍よりも高い解探索能力を持っている理由として、固定近傍は変動近傍に比べて近傍が広いこと、局所解に陥ったとしても変動近傍よりも容易に局所解から抜け出せるということが考えられる。

2.2 Met-enkephalin の立体構造予測における重要温度領域

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の検証を行った。

タンパク質における重要温度領域を確認するために、複数の異なる温度での一定温度 SA を Met-enkephalin の立体構造予測に適用した。パラメータを Table 3 に示す。

Table 3 パラメータ

パラメータ	値
最高温度	2.0
最低温度	0.05
温度数	40
近傍	180 ° 54 °
総 MCsweep 数	6000
試行回数	30

なお、解探索に用いた温度は最高温度と最低温度の間を温度数で等差的に分割した値を与えた。

Fig. 1 に各温度ごとの結果を示す (左図は最良値、右図は平均値を示している)。横軸は温度、縦軸はエネルギー値を示している。Table 4 に試行ごとの結果を示す。40 温度の最良値をその試行の解としている。

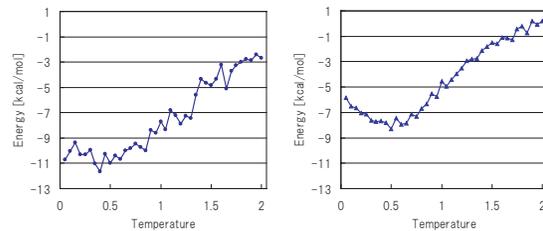


Fig. 1 実験結果 (温度)

Table 4 実験結果 (試行)

	エネルギー値	解を得た温度
最良値	-11.6394	0.4
平均値	-10.1272	-
中央値	-10.2417	0.5, 0.6
最悪値	-8.2284	0.3
発見率	10 %	-

Fig. 1 より、Met-enkephalin の立体構造予測では 0.5 付近の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を確認した。また、0.5 付近の一定温度での探索で最適解を発見することもできたが、Table 4 に示すように、最適解発見率が 10 % であったため、さらなる検討が必要である。

3 今後の課題

1. 逐次 SA の再検討
2. 他のタンパク質における重要温度領域の検証
3. PSA/ATGA の実装