

逐次 SA によるタンパク質立体構造予測
小 椋 信 弥

1 前月からの課題

1. ローカルサーチアルゴリズムの検証
2. 逐次 SA の検証
3. 文献調査

2 実際に行ったこと

2.1 逐次 SA によるタンパク質立体構造予測

逐次 SA の性能検証を行うために、逐次 SA を Met-enkephalin, (Ala)₁₀, C-peptide の 3 種類のタンパク質の立体構造予測に適用した。実験は岡本と同一のパラメータを用いて行った。また、近傍幅として従来の変動近傍と、新しく固定近傍を用いた。パラメータを Table 1 に示す。

Table 1 パラメータ

	Met-enkephalin	(Ala) ₁₀	C-peptide
最高温度	2.0		
最低温度	0.1		
近傍幅	180° → 54°, 180°(Fixed)		
MCsweep	100000	110000	6000
試行回数	50		

Table 2 および Table 3 に実験結果を示す。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-11.0[kcal/mol], (Ala)₁₀ は-9.7[kcal/mol], C-peptide は-42.0[kcal/mol] 以下の領域で最小エネルギー構造をとることが報告されている。

Table 2 Met-enkephalin と (Ala)₁₀ の結果

	Met-enkephalin		(Ala) ₁₀	
	変動近傍	固定近傍	変動近傍	固定近傍
最良値	-12.24	-12.24	-10.21	-10.21
最悪値	-6.32	-7.08	2.34	1.92
平均値	-10.04	-9.94	-8.02	-8.49
中央値	-9.99	-9.975	-10.20	-10.21
成功率	11/50	18/50	38/0	39/50

Table 2 の Met-enkephalin の結果を見ると、変動近傍と固定近傍では各値には違いがほとんどないものの、最適解発見率は固定近傍の方が良い値を示した。Fig. 1 は Met-enkephalin における解探索終了時の個体が持つエネルギー値の分布を示す。Fig. 1 から、固定近傍の

Table 3 C-peptide の結果

	C-peptide	
	変動近傍	固定近傍
最良値	-37.59	-39.73
最悪値	-6.06	2.79
平均値	-23.80	-23.85
中央値	-23.28	-23.88
成功率	0/50	0/50

方が良い性能を示していることが分かる。(Ala)₁₀ においては、若干ではあるが固定近傍の方が良い値を得た。しかし、紙面の都合上省略したが、乱数の種を変えて追加実験を行ったところ、Table 2 とは全く異なる結果が得られた。乱数の種を変えると初期個体が変わるため、タンパク質は初期個体への依存性が高いということが考えられる。Table 3 の C-peptide については、最適解を発見することはできなかった。また、C-peptide については変動近傍と固定近傍の差がほとんど見られなかった。

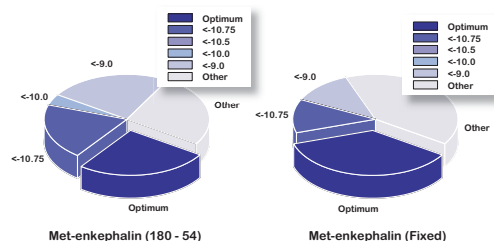


Fig. 1 (Ala)₁₀ の解分布

2.2 ローカルサーチアルゴリズムの検討

以前から検討を行っているローカルサーチアルゴリズムの追加実験を行っている。また、ローカルサーチ後に自動的に温度を下げるための手法についても、引き続き改良、検討を行っている。

現在のところ、ローカルサーチを用いた PSA/GAc は、従来の PSA/GAc よりは (Ala)₁₀ の立体構造予測において高い性能を示すことが確認できた。しかし、今後さらなる性能向上を図る必要があり、そのための手法を検討中である。

3 今後の予定

1. ローカルサーチ後の自動クーリング手法の性能検証
2. 逐次 SA の検討
3. タンパク質立体構造表示システムの作成