

SA を用いたタンパク質の立体構造予測における重要温度領域
米田真純

1 前月からの課題

1. (Ala)₁₀ の立体構造予測における重要温度領域の検証
2. 逐次 SA を用いたタンパク質の立体構造予測における最高温度の検討

2 課題の達成状況および研究成果

2.1 (Ala)₁₀ における重要温度領域の検証

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 (Ala)₁₀ の立体構造予測に適用した。パラメータを Table 1 に示す。

Table 1 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 に各温度で一定温度 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、最悪値を示す。横軸は温度、縦軸はエネルギー値を示している。

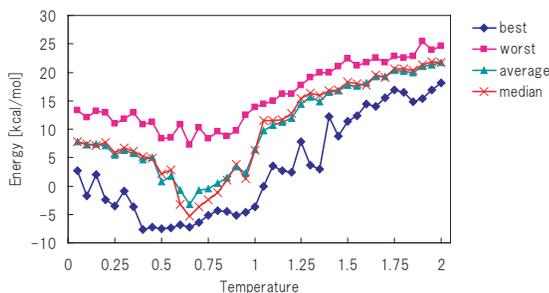


Fig. 1 (Ala)₁₀ における重要温度領域

Fig. 1 より、(Ala)₁₀ の立体構造予測では 0.7 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。

2.2 逐次 SA における最高温度の検討

タンパク質の立体構造予測に関して、最高温度の違いによる逐次 SA の性能を検証するために、逐次 SA を Met-enkephalin と (Ala)₁₀ の立体構造予測に適用した。

パラメータを Table 2 に示す。ここで設定した最高温度は、従来から用いていた温度である 2.0 と、実験的に求めた重要温度より少し高い温度 (Met-enkephalin においては 0.9 と 0.7, (Ala)₁₀ においては 1.0 と 0.8) を用いた。なお、評価計算回数は岡本らと同一にして実験を行った。

Table 2 パラメータ

	Met-enkephalin	(Ala) ₁₀
最高温度	2.0, 0.9, 0.7	2.0, 1.0, 0.8
最低温度	0.1	
近傍	180 °	54 °
総 MCSweep 数	100000	110000
試行回数	50	

実験結果を Table 3 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)₁₀ 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 3 実験結果

	Met-enkephalin			(Ala) ₁₀		
	2.0	0.9	0.7	2.0	1.0	0.8
最高温度	2.0	0.9	0.7	2.0	1.0	0.8
最良値	-12.06	-12.08	-12.11	-9.85	-9.83	-9.86
平均値	-10.30	-10.90	-10.76	-8.66	-9.45	-9.27
中央値	-10.53	-10.89	-10.90	-9.56	-9.60	-9.63
最悪値	-8.01	-8.49	-8.34	2.48	-2.48	0.88
発見率	24 %	46 %	46 %	10 %	16 %	28 %

Table 3 に示した結果より、Met-enkephalin と (Ala)₁₀ の立体構造予測において、従来の最高温度である 2.0 を用いるよりも重要温度より少し高い温度を最高温度とした方が高い解精度を持っていることを確認した。この理由として、重要温度より少し高い温度を最高温度とした場合は探索前半から局所解に陥ることなく有効な解探索を行っているということが挙げられる。

3 今後の課題

1. PSA/AT(GA) の実装
2. 近傍による解精度の違いについての追加実験
3. (Val)₁₀, C-peptide における重要温度領域の検証および最高温度の検討