

ローカルサーチアルゴリズムの大規模タンパク質への適用
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 ローカルサーチアルゴリズムの検討

ローカルサーチを用いた PSA/GAc, 自動温度調節を行うローカルサーチを用いた PSA/GAc, および従来の PSA/GAc 性能比較を行うために, それぞれを C-peptide およびヒト副甲状腺ホルモンのフラグメント (PTH) の立体構造予測に適用した. これらの対象問題の概要を Table 1 に示す.

Table 1 対象問題の概要

パラメータ	C-peptide	PTH
アミノ残基数	13	34
二面角数	64	178
最小エネルギー値	-42.0	-210.0

2.1 C-peptide の結果

今回の実験で比較の対象とする 3 種類の手法を用いて, C-peptide の立体構造予測をそれぞれ 30 試行を行った. Fig. 1 は得られたエネルギー履歴の中央値を示したものである.

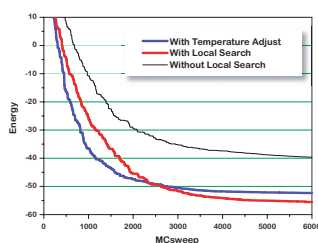


Fig. 1 エネルギー履歴の比較 (C-peptide)

ローカルサーチを用いた手法はエネルギー値が最終的には -50 [kcal/mol] 以下に達しているのに対し, 従来の PSA/GAc は -40 [kcal/mol] で探索が止まっている.

また, 温度調節を行う PSA/GAc は, 探索序盤で最もエネルギー値が早く収束している. しかし, 2000 MCsweep を超えたあたりで収束が遅くなり, 最終的にはローカルサーチのみを用いた PSA/GAc がより低いエネルギー値に達している.

Table 2 に, 全試行中, -42.0 [kcal/mol] 以下のエネルギー値が得られた回数を示す.

Table 2 立体構造予測の成功回数 (C-peptide)

手法	成功率
温度調節を行う PSA/GAc	28/30
ローカルサーチのみ行う PSA/GAc	30/30
従来の PSA/GAc	7/30

2.2 PTH の結果

PTH についても, 3 種類の手法を用い, 立体構造予測をそれぞれ 10 試行を行った. Fig. 2 は得られたエネルギー履歴の中央値を示したものである.

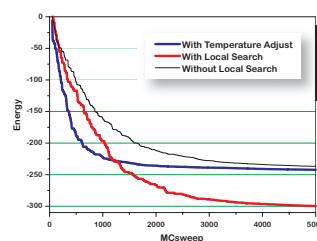


Fig. 2 エネルギー履歴の比較 (PTH)

温度調節を行う PSA/GAc は, 探索序盤で最も早く収束しているが, 1200 MCsweep を超えたあたりで探索がほぼ停止してしまう. それに対し, ローカルサーチのみを用いた PSA/GAc は, その後もエネルギー値が下がり続け, 最終的にエネルギー値が -300 [kcal/mol] にまで達している.

また PTH については, いずれの手法においても全ての試行で -210.0 [kcal/mol] 以下のエネルギー値を得た.

以上 2 種類のタンパク質の立体構造予測を行った結果, 両者の結果には類似している点が見られた. すなわち, ローカルサーチを用いた 2 つの手法は, 従来の PSA/GAc よりも収束の早さと解精度において勝っているという点, そして温度調節の効果が低いという点である.

現在, 得られるエネルギー値は十分低い, 立体構造が最適なものとは異なってしまうという問題が生じている. これについては分子研の岡本先生に相談する予定である.

3 今後の予定

1. Genetic Programming and Evolvable Machines への投稿論文執筆