

SA を用いたタンパク質の立体構造エネルギー最小化  
米田真純

## 1 前月からの課題

- SA を用いたタンパク質の立体構造エネルギー最小化

## 2 SA を用いたタンパク質のエネルギー最小化

### 2.1 対象タンパク質

本報告では, BPTI(16-36) および Protein-G を対象として数値実験を行った. 各タンパク質のアミノ残基数, 原子数および二面角数を Table 1 に示す.

Table 1 対象タンパク質の概要

	アミノ残基数	原子数	二面角数
BPTI(16-36)	21	348	97
Protein-G	56	859	275

X 線回折実験データから, BPTI(16-36) はフラグメント全体が  $\beta$ -シート, Protein-G は一本の  $\alpha$ -ヘリクスと四本のストランドからなる  $\beta$ -シートを持つことが知られている.

### 2.2 実験概要

逐次 SA を 2 つのタンパク質 BPTI(16-36), Protein-G に適用し, 性能検証を行った. 実験パラメータは Table 2 に示す, 岡本らが Met-enkephalin 等の実験において用いたものと同じとして実験を行った.

Table 2 パラメータ

	BPTI(16-36)	Protein-G
最高温度		2.0
最低温度		0.1
近傍	180 °	(180 × 0.3) °
総 MCsweep 数		100000
試行回数	30	10

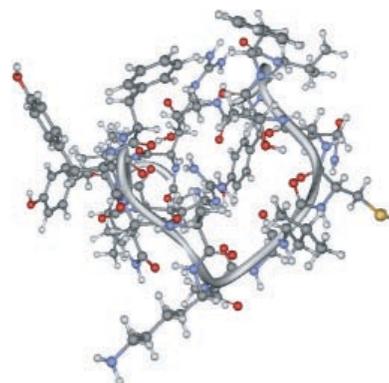
### 2.3 実験結果

2 つのタンパク質に逐次 SA を適用した結果を Table 3 に示す.

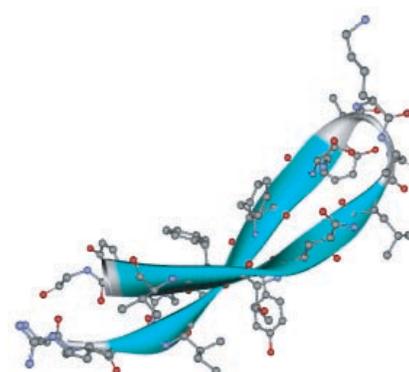
Table 3 実験結果

	BPTI(16-36)	Protein-G
最良値	-96.76	-402.38
中央値	-79.30	-353.50
最悪値	-69.46	-320.97

現在, BPTI(16-36)・Protein-G の最適解領域はわからないため, 最良値の試行の立体構造と X 線結晶回折実験によって得られた立体構造との比較を行う. Fig. 1 に BPTI(16-36) を対象としたときの立体構造を示す.



(a) 今回の数値実験



(b) X 線回折実験

Fig. 1 BPTI(16-36) の立体構造

Fig. 1 を見ると, 今回の数値実験で得られた構造は X 線回折実験の構造とは大きく異なり,  $\beta$ -シート構造が見られなかった. また, Protein-G を対象とした場合も, 同様の結果であった.

この原因としては, 設計変数の数が Met-enkephalin の 5 倍以上であるため, 総 MCsweep 数が少なく, エネルギー値が十分に低下しなかったということが挙げられる. また, 今までは  $\beta$ -シート構造を持つタンパク質を対象問題を扱っていなかった. そのため, 今後は SA などの最適化手法の性能検証を行う前に, BPTI(16-36) を対象とし, 総 MCsweep 数を多くした場合には  $\beta$ -シートを正しく求められるかということを確認する必要がある.

## 3 今後の課題

- C-peptide の転移温度に関する調査