

適応的近傍を持つシミュレーテッドアニーリングを用いたタンパク質立体構造エネルギーの最小化
江上 透

1 前回からの課題

- SA/AAN のアルゴリズムの理解と、タンパク質問題への組み込み。

2 SA/AAN を用いたタンパク質立体構造エネルギーの最小化

2.1 SA/AAN のアルゴリズム

これまでに、Corana らによって受率率を 0.5 に保つように近傍幅を調節する手法 (SA/AN) が提案されている。しかし、受率率を 0.5 に保つと良い結果が得られるという根拠はなく、実験の結果、受率率をさらに下げることが良い結果が得られることが分かった。そこで、小さな受率率を実現することの出来る新しい適応的近傍 SA (Simulated Annealing with Advanced Adaptive Neighborhood: SA/AAN) を用いて、タンパク質立体構造エネルギーの最小化を行う。

このアルゴリズムは、式 (1) に示す階段関数を用いて受率率 P から近傍幅を決定する。すなわち、受率率が目標値の上限より大きい場合には近傍を H_0 倍し、目標値の下限より小さい場合は近傍を半分に減らす。この時、近傍幅を増加させる拡大率 H_0 を、式 (2) のように再帰的に定義し、受率率が下がりにくい時には、拡大率が十分に大きな値になるようにした。すなわち、拡大率の初期値を 2.0 とし受率率が目標値の上限より大きい場合は拡大率を 2 倍に増加させる。このメカニズムにより拡大率はいくらかでも大きな値をとれることになる。次の Fig. 1 に、近傍調節の倍率を調節するパラメータを示す。

$$\begin{cases} m' = m \times g(p) \\ g(p) = H_0, & \text{if } p > p_1 \\ g(p) = 0.5, & \text{if } p < p_2 \\ g(p) = 1.0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{cases} H_0 = H_0 \times H_1, \\ \quad (\text{初期設定: } H_0 = 2.0) \\ H_1 = 2.0, & \text{if } p' > p_1 \\ H_1 = 0.5, & \text{if } p' < p_2 \\ H_1 = 1.0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2)$$

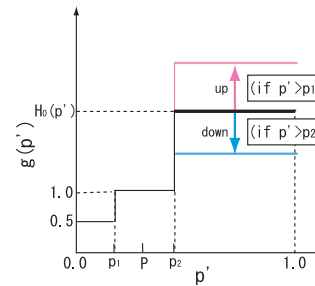


Fig. 1 近傍調節の倍率を調節するパラメータ

2.2 SA/AN を用いたタンパク質立体構造エネルギーの最小化

まず、SA/AN で目標受率率を 0.1 に設定する手法を組み込んだ。対象問題は、Met-enkephalin, (Ala)10, C-peptide の 3 つのタンパク質である。与えたパラメータを次の Table 1 に示す。

Table 1 与えたパラメータ

対象問題	設計変数	設定温度	MCsweep 数
Met-enkephalin	19	0.2 ~ 2.0	100000
(Ala)10	30	0.01 ~ 2.0	100000
C-peptide	64	0.1 ~ 2.0	50000

この値を用いて、1 回試行を行った結果、次の Table 2 のような結果が得られた。この SA/AN では、良好な結果が得られた。

Table 2 実験結果

対象問題	最適解領域 (kcal/mol)	実行結果 (kcal/mol)
Met-enkephalin	-11	-11.82
(Ala)10	-9.7	-9.93
C-peptide	-42	-45.86

3 翌月の課題

- SA/AAN を用いたタンパク質立体構造エネルギーの最小化における、拡大率と解探索性能の考察