

## タンパク質の基礎学習および逐次 SA におけるパラメータの検討

昌山 智

## 1 前回からの課題

1. タンパク質の基礎学習
2. 逐次 SA におけるパラメータの検討

## 2 課題の達成状況および研究成果

## 2.1 タンパク質の基礎

## 2.1.1 タンパク質とは

タンパク質は、アミノ酸がペプチド結合によって多数連なった鎖状の生体高分子である。タンパク質を形成するアミノ酸の並び方は膨大な数であり、その鎖の長さも様々である。タンパク質は、ポリペプチド鎖（アミノ酸が多数つながったもの）が折りたたまれて立体構造を形成している。またタンパク質は多種類存在し、それぞれが固有のアミノ酸配列と立体構造をしているため特異的な動きをしている。

タンパク質は様々な生命現象に関わっている物質であり、その機能は立体構造によって決定される。そのため、タンパク質の立体構造を解析・予測することにより誤った折り畳み構造を持つタンパク質に起因する病気であるアルツハイマーや狂牛病の治療や新薬の開発につながる。

## 2.1.2 タンパク質の階層構造

タンパク質は、4つの階層に分けることができる。アミノ酸配列は一次構造、タンパク質の立体構造は三次構造にあたる。そして二次構造は、三次構造の部分構造であり代表的なものとしてヘリックスとシートがある。タンパク質の中には、ポリペプチド鎖が複数寄り集まった構造をしているものがあり、この集合しているポリペプチド鎖の一つ一つはサブユニット構造と呼ばれ、タンパク質の四次構造となる。

## 2.2 逐次 SA のパラメータの検討

## 2.2.1 数値実験

SA のパラメータである温度および近傍が解探索性能にどのような影響を与えるかについて検討を行った。対象問題は2次元の Rastrigin 関数、Rosenbrock 関数とした。パラメータの初期値を Table 1 に示す。検討を行ったパラメータ以外は Table 1 の値を用いた。

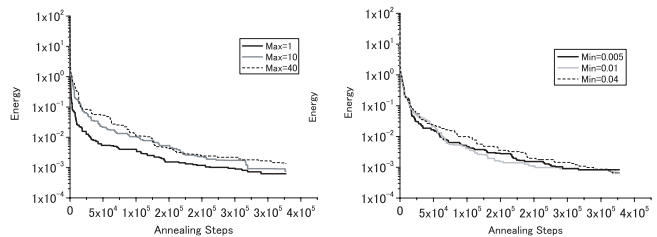
## 2.2.2 実験結果

温度パラメータに関する検討結果を Fig. 1、近傍パラメータに関する検討結果を Fig. 2 に示す。図は30回試行における中央値を示しており、縦軸はエネルギー値、

Table 1 パラメータの初期値

パラメータ	値
最高温度	10.0
最低温度	0.01
近傍	1.0
クーリング周期	10240
総アニーリング数	327680

横軸はアニーリング数である。なお、Fig. 1、Fig. 2 はともに Rastrigin 関数の実験結果である。



(a) 最高温度

(b) 最低温度

Fig. 1 温度による影響

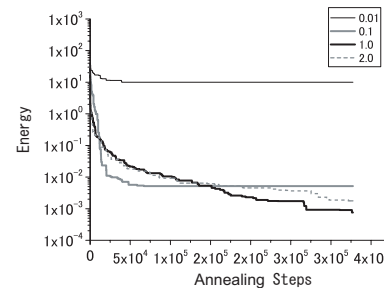


Fig. 2 近傍の影響

Fig. 1 と Fig. 2 より、最高温度、最低温度を変化させた場合、どちらも解探索性能に影響しないが、近傍の幅を変えた場合は、解探索性能に大きな影響を与えていることが確認できる。また、Rosenbrock 関数を対象とした場合も同様の結果であった。このことから、Rastrigin 関数および Rosenbrock 関数の2つの連続最適化問題に対しては、温度パラメータよりも近傍パラメータが解探索性能に影響を与えることを確認した。

## 3 翌月へ向けての課題

- 逐次 SA のプログラムの実装