

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 を用いたタンパク質立体構造エネルギー最小化における、解探索性能の考察

2 はじめに

岡本らは、探索開始時の近傍を 180° 、探索終了時の近傍を 54° とし、一定の割合で減少させた。しかしながら、この近傍幅の調節に関して詳細な検討は行われていない。そこで、SA/AAN を用いて受理率から近傍を決定する適応的近傍を用いることにより、岡本らの従来の SA との探索の比較を行う。

3 数値実験

3.1 実験概要

Met-enkephalin, (Ala)10 の 2 つのタンパク質を対象問題とし実験を行った。

Table 1 に、これらのタンパク質の二面角数（設計変数の数）、および最適解領域を示す。

Table 1 対象問題

	Dehedral angles	Optimum region
Met-enkephalin	19	-11kcal/mol or less
(Ala)10	30	-9.7kcal/mol or less

また、Table 2 に示すパラメータを用いて実験を行った。なお、近傍の適応的調節を行うための近傍拡大率の初期値を 2.0 とし、目標受理率を 0.1 とした。

Table 2 parameter of SA

パラメータ	Met-enkephalin	(Ala)10
最高温度	2.0	2.0
最低温度	0.2	0.1
H(0) (初期拡大率)	2.0	2.0
H(0)' (拡大率)	2.0	2.0
目標受理率	0.1	0.1
総 MCsweep 数	100000	100000
拡大率変化の間隔	1	1
H(0) の変化の間隔	10	10
試行回数	30	30

3.2 実験結果

Table 3 に、Met-enkephalin において得られた結果と最適解到達率を示す。

Table 3 Met-enkephalin の実験結果

	SA	SA/AAN
Best	-11.85	-11.79
Average	-9.99	-10.80
Median	-9.63	-10.64
Worst	-7.71	-8.88
Success Rate	26.7%(8/30)	40.0%(12/30)

Table 3 に示すように、Met-enkephalin において、従来の SA よりも SA/AAN のほうが良好な結果を示していることが分かる。

また、Table 4 に、(Ala)10 において得られた結果と最適解到達率を示す。

Table 4 (Ala)10 の実験結果

	SA	SA/AAN
Best	-9.80	-10.17
Average	-9.06	-9.47
Median	-9.61	-10.15
Worst	-2.21	2.13
Success Rate	20.0%(6/30)	93.3%(28/30)

Table 4 に示すように、(Ala)10 において、従来の SA よりも SA/AAN のほうが良好な結果を示していることが分かる。

4 考察

(Ala)10 では従来の SA よりも非常に良好な結果を示した。しかし、Met-enkephalin では従来の SA よりも良好な結果を示したものの、最適解到達率は 40.0% となりさほどよい結果ではない。これは、拡大率を変化させる間隔が短いため、また初期拡大率が大きすぎるためだと考えられる。

5 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、パラメータの検討