

SA を用いたタンパク質の立体構造エネルギー最小化における第一段階の転移温度
米田真純

1 はじめに

本報告ではシミュレーテッドアニーリングを用いたタンパク質エネルギー最小化において、岡崎国立共同研究機構分子科学研究所の岡本らが定義している第一段階の転移温度について検討を行った。第一段階の転移温度とは、SA を用いたエネルギー最小化においてタンパク質がランダムコイル状態からコンパクトな状態に折り畳まれる際に経る段階に対応した温度である。この温度付近での探索において、タンパク質の構造が急激に変化すると考えられている。なお、本報告では岡本らの転移温度の定義に基づいて数値実験を行った。

2 数値実験

本実験では ISDL Report 20030617004 において述べた第一段階の転移温度 T_θ について、岡本らと同様の実験を行う。なお、対象問題は Met-enkephalin とした。

2.1 実験概要

転移温度 T_θ について検証するために、Fig. 1 に示すような異なる複数の一定温度での SA を行った。本実験では、最高温度と最低温度の間を等比的に配分し、探索を行う各温度を決定した。各温度では同じステップ数 (MCsweep 数) の探索を行った。なお、探索前半の 10000MCsweep は比熱の計算には用いていない。

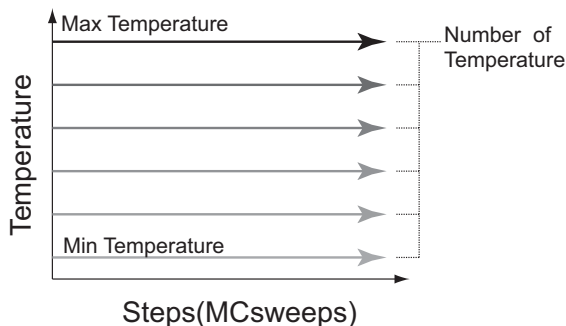


Fig. 1 一定温度 SA による転移温度の検証

また、近傍による影響を調べるために、近傍設定については以下に示す三種類のものを用いた。

- Type 1 ... すべての温度で探索開始時は最大近傍に設定し、探索とともに等差的に最小近傍に狭める
- Type 2 ... 最大近傍から最小近傍までの間を温度数で等比的に配分した一定近傍で探索を行う
- Type 3 ... 最大近傍から最小近傍までの間を温度数で等差的に配分した一定近傍で探索を行う

実験で用いたパラメータを Table 1 に示す。本実験では 32 温度の一定温度 SA の実行を 1 試行とする。

Table 1 実験に用いたパラメータ

パラメータ	値
最高温度	2.0
最低温度	0.1
温度数	32
総 MCsweep 数	100000
最大近傍	180 °
最小近傍	54 °
試行回数	50

2.2 実験結果

Met-enkephalin を対象とし、一定温度 SA を用いた比熱の実験結果を Fig. 2 に示す。Fig. 2 は 50 回試行の中央値を示している。凡例は近傍の設定方法である。なお、図の縦軸は比熱、横軸は温度を示している。

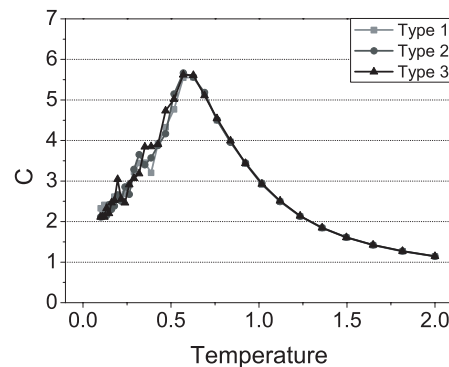


Fig. 2 実験結果

Fig. 2 より、近傍の設定方法による比熱の値に差がみられず、どの近傍設定においても、ほぼ同じ値が求められた。また、比熱の値は約 0.6 付近であり、岡本らの実験結果である 0.56 とほぼ同じ値を求めることができた。

2.3 考察

今回の実験では異なる三種類の近傍設定による実験を行った。その結果、近傍設定の変化に伴う有意な差がみられず、同じ位置に比熱の山を得た。このことより、比熱を求める際には、近傍・受理率の影響はそれほど考慮しなくてもよいと考えられる。

3 今後の課題

- 第二段階の転移温度に関する実験
- 第 46 回 MPS 研究会での研究発表の準備