

タンパク質水和の深層学習モデルの改良に向けた大規模計算

東北大学 大学院工学研究科 吉留 崇

目的 タンパク質周囲の水和分布と水和自由エネルギー分布を高速に予測する深層学習モデル「gr Predictor」と「Deep GIST」を改良すること

内容

- Deep GISTのハイパーパラメータサーチを行った。
- gr PredictorとDeep GISTをリガンド複合体へと適用するために、1000個程度のタンパク質の3D-RISM計算と100個程度のタンパク質のGIST計算を行った。

結果

- Deep GISTは、既存の手法の約1/1000の計算時間（約1分）で、「リガンド結合に伴い移動する水分子の自由エネルギー」を約8kcal/molの誤差で計算出来た。
- リガンド複合体に拡張したgr Predictorの予測精度（R2スコア）は、0.9だった。

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間	11,000 時間