

タンパク質水和熱力学量分布を高速に予測する 深層学習モデルの研究

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自由エネルギー分布を高速に予測する深層学習モデル「Deep GIST」を完成させること

内容

- Deep GISTのハイパーパラメータサーチ（特に水和エネルギー分布と水和エントロピー分布の深層学習モデル）を行った。

結果

- Deep GISTは、数十秒で水和熱力学量分布を予測することに成功した（従来法は数時間から数十時間）。
- Deep GISTを9つのタンパク質に適用し、決定係数を計算したところ、水和自由エネルギー分布については、従来法の結果に対して0.76-0.84という高い値を示した。一方で残りの分布については、この値よりも低かった。
- リガンド結合部位の水分子をタンパク質外に移動するのに必要な自由エネルギー変化を計算したところ、従来法と良好な相関を示した。

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