

温度調節機構を持つローカルサーチを用いた PSA/GAc の作成
小椋 信弥

1 前月からの課題

1. ローカルサーチを用いた PSA/GAc の性能向上
2. CASP5 へのエントリー

2 実際に行ったこと

2.1 (Ala)₁₀ の立体構造予測

昨年度に引き続き、タンパク質の立体構造の部分構造である α -ヘリックスの探索効率化アルゴリズムの作成を行っている。昨年度の研究では、タンパク質エネルギー関数の特徴を持ったテスト関数を対象に実験を行い、ローカルサーチを用いた PSA/GAc が良い性能を示すことが分かった。

そこで今年度からは、実際のタンパク質を対象に実験を行う。今回対象とするタンパク質は、(Ala)₁₀ と呼ばれる 10 個のアミノ残基からなるものである。(Ala)₁₀ は、2 から 9 残基が α -ヘリックス構造を持つため、本手法の性能検証を行う対象として適していると考えられる。

2.2 ローカルサーチを用いた PSA/GAc への自動温度調節機構の導入

ローカルサーチを行うとエネルギー値が減少することが確認されたが、SA のパラメータである温度はそのままの値が維持されるためにその後の探索で改悪が高い確率で受理されてしまうことが問題となっていた。そこで、本研究では、ローカルサーチ後に減少したエネルギー値に応じて温度を自動的に下げるメカニズムを考案し、これをローカルサーチを用いた PSA/GAc に導入する。温度調節機構の概要を Fig. 1 に示す。

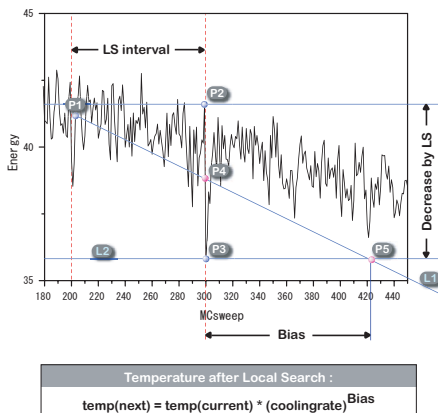


Fig. 1 An Outline of Temperature Adjustment

2.3 実験結果

今回作成した温度調節機構を持つローカルサーチを用いた PSA/GAc を (Ala)₁₀ に適用した。

パラメータ

今回用いたパラメータを Table 1 に示す。

パラメータ	値
初期温度	10.0
個体数	12
交叉周期	30
ローカルサーチ間隔	200

実験結果

実験結果を Fig. 2 および Fig. 3 に示す。Fig. 2 はエネルギー値の履歴を、Fig. 3 は温度履歴を表している。

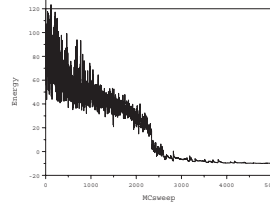


Fig. 2 Energy

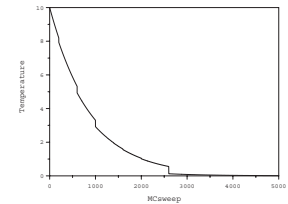


Fig. 3 Temperature

Fig. 3 より、探索途中の複数点において、温度が急に下がっていることが確認できた。今後はこの手法を用いてさらなる実験を行う。

3 その他の作業

データベースサーバの構築を行った。具体的な作業は次の通り。

- Debian をインストール
- DBMS として PostgreSQL をインストール
- Web サーバとして Apache をインストール
- PHP をインストール

4 今後の課題

1. α -ヘリックスを拡張するアルゴリズムの改良。
2. CASP5 の調査