

文献調査とローカルサーチの検討
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. 温度自動調節機構の考案
3. 文献調査

2 実際に行ったこと

2.1 文献調査

GA によるタンパク質の立体構造予測に関する文献調査を行った。今回調査した文献の概要を Table 1 に示す。

文献の概要

Table 1 文献の概要

題名	Protein Folding by A Hierarchical Genetic Algorithm
著者	Osamu Takahashi, Hajime Kita, and Shigenobu Kobayashi
出典	Proc. of The Fourth Int. Symp. on Artificial Life and Robotics
年	January, 1999

内容

本文献では、タンパク質立体構造予測のための、階層構造を持つ GA が提案されている。提案されている GA は 2 階層構造からなり、上位層で Trit-String GA を、下位層で実数値 GA を実行する。

● 上位層 GA

立体空間における二面角は、通常、最小エネルギー値をとる 3 つの角度 ($\pi, \pm\pi/3$) と、最大エネルギー値をとる 3 つの角度 ($0, \pm 2\pi/3$) を持つ。上位層の GA では、各二面角が持つ 360° の領域を 3 つのサブ領域 ($0, \pm 2\pi/3$) に分割するため、全体として 3^n 個 (n はアミノ残基数) のサブ領域が存在することになる。この二面角のサブ領域を表すために trinary-digit ($x_i \in \{1, 2, 3\}$) 遺伝子を用いる。GA 操作には、交叉には多点交叉を、世代交代モデルには MGG を用いている。この上位層の GA により、最適解が存在するであろうサブ領域を発見する。

● 下位層 GA

下位層では、上位層で発見されたサブ領域に対して実数値 GA を適用し、最適解を見つけ出す。GA 操作には、交叉には UNDX を、世代交代モデルには Distance Dependent Alternation (DDA) を用いている。

2.2 ローカルサーチの検討

現在、ローカルサーチ後の適用後に、自動的にクーリングを行うための手法の考案および検証を行っている。これまでに、エネルギー履歴を考慮しないでクーリングを行う手法を実装し、これを (Ala)₁₀ の立体構造予測に適用した。その結果、従来の PSA/GAc よりも良い性能を示すことを確認した。

今月は、エネルギー履歴の傾向を考慮してローカルサーチ後の自動クーリングを行うための手法を考案した。エネルギー履歴の傾向を抽出する方法としては、移動平均と最小二乗法を用いた。

エネルギー履歴に最小二乗法を適用することにより、エネルギー履歴の傾向を近似する直線が決定できると考えられる。しかし、エネルギー値は上下に大きく変動しているため、これに直接最小二乗法を適用しても、正確な傾向を示した近似直線が得られない可能性がある。そこで、より正確な近似直線を得るために、まずエネルギー履歴に対して移動平均を適用し、エネルギー履歴の突出した部分を緩和する。そしてこれに最小二乗法を適用し近似直線を得る。その様子を Fig. 1 に示す。

現在、本手法の実装が完了し、実験を行い始めた段階である。今後さらに実験を行い、性能の検証を行う。

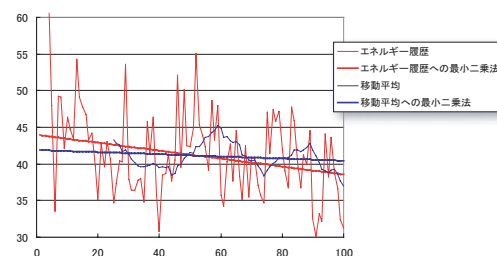


Fig. 1 エネルギー履歴への移動平均と最小二乗法の適用

3 今後の予定

1. ローカルサーチ後の自動クーリング手法の性能検証
2. 文献調査