

2 個体分散遺伝的アルゴリズムによるタンパク質の立体構造予測
岩橋 崇史

1 目標課題

2 個体分散遺伝的アルゴリズム (Dual Individual Distributed Genetic Algorithm: Dual DGA)¹⁾ によるタンパク質の立体構造予測を行う。また、卒業論文の執筆にあたり、Met-enkephalin の予備実験を行う。

2 研究の進捗状況

C-peptide を対象問題とし、Dual DGA による構造予測を行った。C-peptide は、13 残基からなるものである。最小エネルギー構造をとるときのエネルギー値は約 $-42kcal/mol$ である。なお、設計変数は C-peptide の主鎖における 26 個の二面角と、側鎖における 38 個の二面角である。つまりこのタンパク質は 64 個の設計変数を持っている。実験で用いたパラメータを Table 1 に示す。移住間隔は 5 つのパターンを用意し、実験を行った。また、交叉法において、1 点交叉と 2 点交叉を用いて、実験を行った。試行回数は 30 回である。

Table 1 パラメータ

個体数/島	2	設計変数	64
島数	3200	ビット数/設計変数	9
移住個体数/島	1	交叉率	1.0
移住間隔	1,2,3,4,5	評価計算回数	6400000

Fig. 1 に 1 点交叉を用いた実験結果を示す。Fig. 1 は 30 回試行における探索終了世代の median (中央値), average (平均値), best (最良値), worst (最悪値) を示したものである。Fig. 1 より、すべての移住間隔での best は、最適値 ($-42kcal/mol$ 以下) を満たしていない。これより、すべての移住間隔において最適解に到達しないことを確認した。

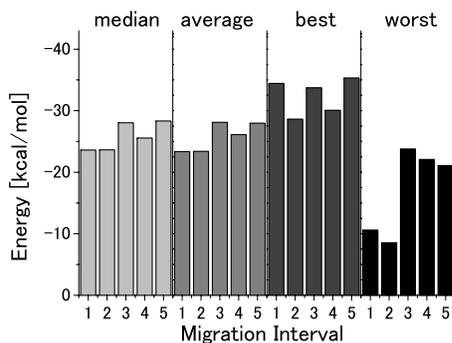


Fig. 1 実行結果 (1 点交叉)

同様に、Fig. 2 に 2 点交叉を用いた実験結果を示す。Fig. 2 より、移住間隔の違いによる解探索への影響が見られなかった。また、bset と worst に差が生じなかったことから、試行において解探索の違いがないと分かった。以上より、交叉法としては 2 点交叉より 1 点交叉を用いた方が有効な解探索を行うと考えられる。

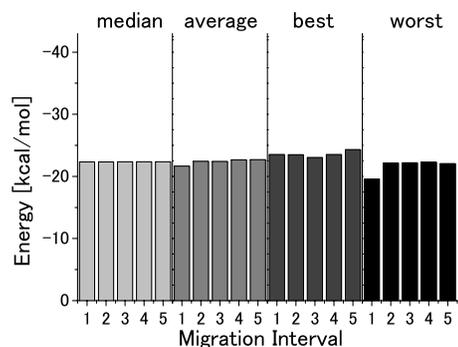


Fig. 2 実験結果 (2 点交叉)

Met-nekephalin, Ala10 の立体構造予測においては、Dual DGA は有効な最適化手法だと言えたが、C-peptide に関して言えば最適解を得ることができなかったために、有効な最適化手法だとは言えない。よって、複雑なタンパク質の立体構造予測においては、パラメータチューニングだけでは、有効な解探索を行うことができないと考えられる。

3 今後の課題

卒業論文の執筆を行うために、引き続き Met-enkephalin の予備実験を行う。そして、Dual DGA による複雑なタンパク質の立体構造予測を行うために、タンパク質の構造予測に適応した遺伝的操作の改良が必要であると考えられる。

参考文献

1) Tomoyuki HIROYASU, Mitsunori MIKI, Masahiro HAMASAKI, Yusuke TANIMURA. A New Model of Distributed Genetic Algorithm for Cluster Systems: Dual Individual DGA. Proceedings of the International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications, Vol.1 (2000), pp.477-483