
GPEM への投稿論文の執筆
小椋 信弥

1 前月からの課題

1. ローカルサーチアルゴリズムの検証
2. GPEM への投稿論文の執筆

2 GPEM への投稿論文の執筆

2.1 GPEM とは

GPEM(Genetic Programming and Evolvable Machines) は、世界的出版社 Kluwer が扱っている遺伝子プログラミング、進化するハードウェア、ソフトウェア等に関する学術誌である。遺伝的・進化的計算 (GEC) の分野は、生物学から多大なるヒントを得ることによって大きな進歩を遂げている。さらに近年、タンパク質の立体構造予測などの生物学的な問題に対しても、GEC が有効であることが明らかとなってきている。すなわち借りを返すというわけである。

今回の GPEM は生物学への遺伝的・進化的計算の応用と題して発行される。そこで、進化的計算法を用いてタンパク質の立体構造予測を行っている我々の研究グループの研究成果を、論文にまとめて投稿することとなった。次節に今回投稿する論文の概要を示す。

2.2 論文の概要

これまでの研究で、遺伝的交叉を用いた並列シミュレーテッドアニーリング (PSA/GAc) が小規模なタンパク質である Met-enkephalin の立体構造予測において高い解探索能力を示すことが明らかになっている。PSA/GAc、並列に実行しているシミュレーテッドアニーリング間で、一定間隔のアニーリングごとに遺伝的アルゴリズムのオペレータである遺伝的交叉を用いて情報交換を行う手法である。本論文では、PSA/GAc を Met-enkephalin よりも大規模なタンパク質である C-peptide と PTH(1-34) の立体構造予測に適用する。まず、PSA/GAc と逐次 SA(SSA) の性能を比較するために、それぞれのタンパク質立体構造予測に適用し、得られた立体構造の比較を行う。次に、PSA/GAc と独立型並列 SA(PSA) を用いて同様の実験を行い、PSA/GAc の交叉オペレータの有効性を確認する。実験の結果から、PSA/GAc は SSA および PSA よりも高い回探索能力を示し、また交叉を行う頻度が高いほど、より高い精度の立体構造が得られた。このことより、PSA/GAc 大規模なタンパク質の立体構造予測に有効であることが明らかとなった。

2.3 内容

本論文では、大きく分けて 2 種類の実験を行っている。2 種類の実験の概要は以下のようになっている。

実験 1

一つ目の実験は、岡本先生らが用いている逐次 SA(SSA) と遺伝的交叉を用いた並列 SA(PSA/GAc) の性能比較である。本実験では、岡本先生らの実験と総 MCsweep 数を等しく設定し、C-peptide およびヒト副甲状腺ホルモン (PTH) のフラグメント (1-34) の立体構造予測を行った。

C-peptide の立体構造予測を行った結果、岡本先生らの実験よりも低いエネルギー値が得られた。また、そのときの立体構造は 4 から 9 残基までが、安定構造である α ヘリックスを形成した。これは、X 線結晶構造解析法などの実験的解析法で得られた構造とほぼ一致している。

PTH(1-34) は、NMR や岡本らの実験で 2 つの α ヘリックスを持つことが確認されている。本実験で得られた PTH(1-34) も、2 つの α ヘリックスを形成した。また、そのときのエネルギー値が岡本先生らの値よりも低かった。

実験 2

2 つ目の実験では、PSA/GAc の交叉オペレータの有効性を検証する。そのために、PSA/GAc と交叉を行わない独立型並列 SA(PSA) を C-peptide および PTH(1-34) の立体構造予測に適用する。実験において、個体数 \times MCsweep 数を等しくした 3 パターンのパラメータを用いた。また、PSA/GAc についてはそれぞれのパラメータでさらに 3 パターンの交叉間隔を用いて実験を行った。

いずれのパターンにおいても、交叉間隔が短い、すなわち交叉を行う頻度が高いほど、PSA よりも低いエネルギー値が得られることが確認された。

これらの結果より、C-peptide および PTH(1-34) の立体構造予測において、PSA/GAc の遺伝的交叉が有効に働いていることが明らかとなった。

3 今後の予定

現在、日本語版を書き上げ、廣安先生にチェックを頂いている段階である。それと並行して、英語に直す作業を開始している。論文の μ 切が 2 月 15 日であるため、年明けには英語版を廣安先生に提出する予定である。