

GA によるタンパク質立体構造のエネルギー最小化の文献調査
岩橋 崇史

1 前回からの課題

今現在抱えている課題を以下に示す.

- GA によるタンパク質立体構造のエネルギー最小化に関する文献調査
- SICE2003 の最終原稿の執筆
- DPMBGA によるタンパク質立体構造のエネルギー最小化

2 GA によるタンパク質立体構造のエネルギー最小化に関する文献調査

「2 個体分散遺伝的アルゴリズム (Dual Individual Distributed Genetic Algorithm: Dual DGA)¹⁾ によるタンパク質立体構造のエネルギー最小化」というテーマで SICE Annual Conference 2003 (計測自動制御学会学術講演会) にて発表を行う. その際に提出する最終原稿には, 今まで行われてきた GA によるタンパク質立体構造のエネルギー最小化の研究を調査し, それを論文に反映することが必修である. そこで, 今月は GA によるタンパク質立体構造のエネルギー最小化に関する文献調査を行い, SICE2003 の最終原稿の執筆を行った.

2.1 タンパク質モデル

GA をはじめ, 他の最適化手法によりタンパク質立体構造のエネルギー最小化のために用いられるタンパク質のモデルは, Fig. 1 で示すように, 大きく分けて格子型と全原子型の 2 つのモデルがある. 以下, それら 2 つのモデルについて述べる.

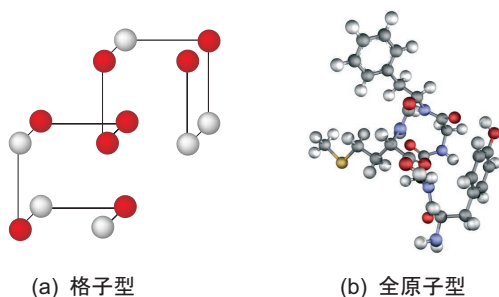


Fig. 1 タンパク質モデル

- 格子型

20 種類のアミノ酸を親水基と疎水基の二つに分け, 設計変数としている. そのため, 立体構造が簡略化されており, 精度の良い立体構造を予測することができない.

- 全原子型

タンパク質を構成する全原子間のエネルギーを考慮している. このモデルでは, 膨大な計算時間を必要とする欠点がある. しかし, 設計変数である原子間の二面角の組み合わせを最適化することによって, 精度の良い立体構造を予測することができる.

本研究室のタンパク質構造同定プロジェクトが使用しているタンパク質モデルは全原子型である.

2.2 各タンパク質モデルにおける研究

一般的に, GA によるエネルギー最小化は困難であると報告されている. 格子型モデルにおける研究は, Unger と Moulton によるモンテカルロ法を取り入れた GA が代表的であり, N.Krasnogor により多ミーム型アルゴリズムによる研究が行われている. また, 全原子型モデルにおける研究は, 局所探索に注目した岡本らのシミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing: SA) による研究や設計変数の依存関係に着目した小林らの実数値 GA による研究, ビットストリング型の GA の実数値 GA を階層的に組み合わせたハイブリッド GA による研究が行われている.

3 今後の課題

SICE2003 での発表のため, DualDGA によるタンパク質立体構造のエネルギー最小化の予備実験を行う. また, それと並行して DPMBGA によるタンパク質立体構造のエネルギー最小化の実験を行い, DPMBGA の有効性の検討を行う.

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