
CEC の講演論文の執筆
小 椋 信 弥

1 昨年度行ったこと

- α ヘリックスに着目したローカルサーチアルゴリズムの考案およびその検討
- ACS 論文誌への投稿
- SACSIS'03 への講演論文の投稿
- 就職活動

2 今年度行うこと

今年度は、まず昨年度まで検討を行っていたローカルサーチアルゴリズムについての研究を発表すべく、論文にまとめる予定である。現在このテーマを発表する場として、12 月にオーストラリアで開催される CEC を検討している。その後、タンパク質の β シートを探索するためのデータベースを用いた手法に取り組む予定である。また今年度は、タンパク質構造同定プロジェクトと並行して、GA によるゲノムデータのマッチングプロジェクトにも参加する予定でいる。

3 今月行ったこと

- ACS 論文の投稿
- SACSIS'03 の準備
- 標準的な SA の作成
- CEC の講演論文の執筆

今月はまず、条件付採録となっていた ACS 論文の改訂をおこなった。主に結果の考察が曖昧であるとの指摘であったため、定量的な考察を含め、大幅な改訂をほどこした。査読の結果、採録となったがまだ改訂の余地があるため、掲載稿の締切りまでにさらなる改訂を加える予定でいる。

次に、5 月 30 日に講演を予定している SACSIS'03(Symposium on Advanced Computing Systems and Infrastructures) の準備を行った。講演に用いる PowerPoint については、青井さんに作成して頂いた。講演の内容は、遺伝的交叉を用いた並列 SA(PSA/GAc) によるタンパク質のエネルギー最小化である。特に、PSA/GAc のパラメータである交叉間隔および個体あたりの MCSweep 数に関する検討を行っている。

またそれとは別に、タンパク質構造同定プロジェクトに配属された 4 回生にはまず SA を実装してもらうこと

になるが、そのとき比較の対象となる標準的な SA が必要と考えられるため、これの作成を行った。

3.1 CEC の講演論文の執筆

現在、2 節で述べたように 12 月にオーストラリアで開催される CEC2003(2003 Congress on Evolutionary Computation) に参加すべく、講演論文を執筆中である。内容は、昨年度まで検討を行っていた α ヘリックスに着目したローカルサーチアルゴリズムについてである。執筆した論文のアブストラクトを以下に示す。

abstract

本研究では、タンパク質立体構造のエネルギー最小化における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) の解探索能力を向上させるためのローカルサーチアルゴリズムを考案する。これまで、PSA/GAc が小規模なタンパク質の立体構造予測に対して有効であることが報告されている。しかし、大規模なタンパク質の立体構造予測を行うには、最適構造を得るまでの計算量を減らすことが重要となる。本研究ではタンパク質の α ヘリックス構造の探索を効率化するためのローカルサーチアルゴリズムを考案し、これをタンパク質立体構造のエネルギー最小化に適用する。本論文では、まず PSA/GAc を対象とするタンパク質のエネルギー最小化に適用し、その性能およびエネルギーの評価計算に要する実行時間の検証を行う。次に考案したローカルサーチを用いた PSA/GAc を同様の問題に適用し、その性能の検証を行う。その結果、本論文で対象としたタンパク質においては、いずれもより精度の高い解を得ることができ、また最適解に到達するまでに要する総評価計算回数についても大幅に減ることが明らかとなった。これらのことより、考案したローカルサーチアルゴリズムは α ヘリックスを持つタンパク質のエネルギー最小化に有効であることが明らかとなった。

4 今後の予定

- 実践バイオインフォマティクスの文献調査
- データベースを用いた β シートの探索法の検討
- CEC の講演論文の執筆を引き続き