

ACS および CEC の原稿の執筆

小椋 信弥

1 先月からの課題

先月からの課題として、以下の項目が挙げられる。

- ACS カメラレディ原稿の作成
- CEC の原稿の執筆
- 実践バイオインフォマティクスの文献調査

2 今月行ったこと

2.1 ACS カメラレディ原稿の作成

今月はまず、採録となった情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS3) へ提出するカメラレディ原稿の作成を行った。採録とはなっていたものの、さらなる改訂が望まれていたため、原稿の修正を行った。具体的には、対象とした各タンパク質のエネルギー最小化における交叉間隔の影響を明確にするために、横軸に交叉間隔を、縦軸に得られたエネルギー値の平均を示した図を追加した。参考のために、最終稿で追加した図を Fig. 1 に示す。

最終稿については、提出済である。

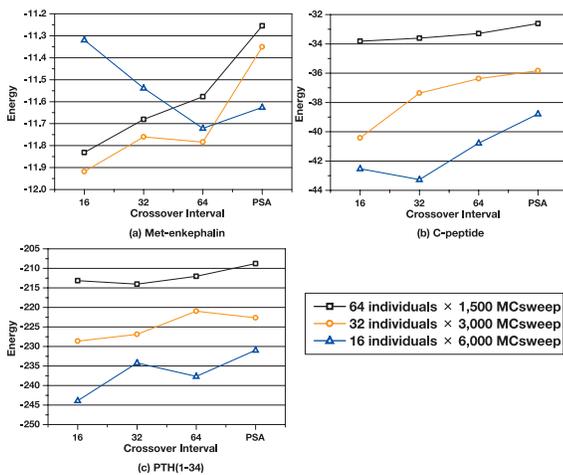


Fig. 1 各タンパク質における交叉間隔と得られたエネルギー値

2.2 CEC の講演論文の執筆

12 月にオーストリアで開催される CEC2003(2003 Congress on Evolutionary Computation) に登校する論文の執筆を行った。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。

タンパク質のエネルギー最小化においては計算量が非常に多くなるため、計算に膨大な時間を要する。し

たがって、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。そこで本研究では、非常に特徴的な構造を持つタンパク質の 2 次構造である α ヘリックスに着目した。本研究では、 α ヘリックス構造が持つ特徴を利用したローカルサーチアルゴリズムを考案し、その検討を行う。ローカルサーチの詳細については、ISDL Report No.20020508013¹を参照されたい。

このローカルサーチアルゴリズムを $(Val)_{10}$, C-peptide, および PTH(1-34) のエネルギー最小化に適用した結果、2 つの効果が確認された。1 つ目の効果は解精度についてである。エネルギー履歴のグラフは割愛するが、実験の結果、いずれのタンパク質においてもローカルサーチを用いた PSA/GAc は、従来の PSA/GAc よりも探索終了時に得られるエネルギー値が低いことが確認できた。

2 つ目の効果は、最適解領域に到達するまでに要する計算量についてである。Fig. 2 は、従来の PSA/GAc による探索で最適解領域に到達するのに要した総評価計算回数を 1 としたときに、それに対してローカルサーチを行う場合に要した総評価計算回数を割合として示した図である。

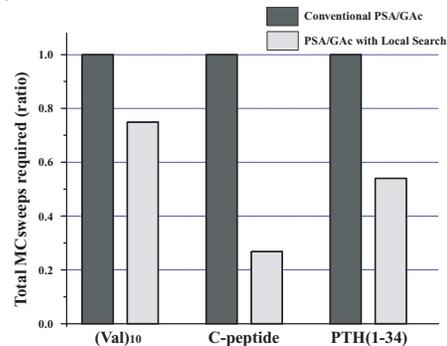


Fig. 2 総評価計算回数の比較

以上 2 つの効果の考察を通じて、本論文では α ヘリックスに着目したローカルサーチアルゴリズムがタンパク質のエネルギー最小化において有効な可能性がある、と結論づけた。

3 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

¹<http://mikilab.doshisha.ac.jp/dia/research/report/2002/0508/013/rep>