

SGA と DGA の作成
岩橋 崇史

1 目標課題

SGA を作成し、動作確認のため ga2k との性能比較を行った。そして、自作 SGA によるタンパク質の構造解析を行った。次に DGA を作成し、SGA と同様に動作確認のために ga2k との性能比較を行った。

2 研究の進捗状況

2.1 SGA プログラミング

2.1.1 自作 SGA と ga2k との性能比較

SGA を作成し、Table 1 の設定で、ga2k との性能比較を行った。

Table 1 設定

個体数	100	交叉率	0.6
設計変数	10	突然変異率	0.01
ビット数/設計変数	10	エリート保存	1
終了世代数	1000	試行回数	300

いくつかの関数を対象問題としたが、その中で Ridge 関数を解いたときの 300 回試行平均の解探索推移を Fig. 1 に示す。

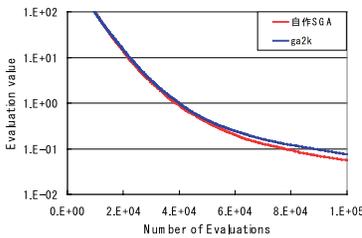


Fig. 1 Ridge 関数

Fig. 1 において、自作 SGA と ga2k の解探索に大きな差はないことがわかる。他の関数においても同様の結果を得たため、自作 SGA が正常に動作していることが確認できた。

2.1.2 自作 SGA によるタンパク質の構造解析

構造解析を行うタンパク質は Met-enkephalin を用いた。存在する 19 個の二面角が設計変数にあたる。二面角の値から求まるエネルギー値が -11kcal/mol 以下になれば最適解とみなす。

Table 2 の設定で、Met-enkephalin の構造解析を行った。

Table 2 設定

個体数	100	交叉率	0.8
設計変数	19	突然変異率	0.007
ビット数/設計変数	9	エリート保存	1
終了世代	1000	試行回数	300

Table 3 に 300 回試行における実行結果を示す。Table 3 に示す平均値、中央値および最良値は終了世代 (1000 世代) の値である。300 回試行のうち 4 回しか最適解を得ることができなかった。その原因としては、ビットストリングを用いてコーディングを行っているため、設計空間上で連続性が反映されないことが考えられる。

Table 3 実行結果

平均値	-5.11429
中央値	-5.32752
最良値	-11.8108
最適解発見率	4/300

2.2 DGA プログラミング

2.2.1 自作 DGA と ga2k との性能比較

DGA を作成し、Table 4 の設定で、ga2k との性能比較を行った。試行回数は 300 回である。

Table 4 設定

島	4	設計変数	10
個体数/島	100	ビット数/設計変数	10
移住個体数/島	50	交叉率	1.0
移住間隔	5	突然変異率	0.01
エリート保存/島	1	終了世代	1000

いくつかの関数を対象問題としたが、その中で Ridge 関数を解いたときの 300 回試行平均の解探索推移を Fig. 2 に示す。

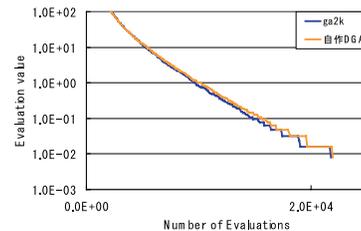


Fig. 2 Ridge 関数

Fig. 2 において自作 DGA と ga2k において、解探索に大きな差はないことがわかる。他の関数においても同様の結果を得たので、自作 DGA が正常に動作していることが確認できた。

3 今後の課題

自作 DGA を用いて、タンパク質の構造解析を行う。そして、MPI を用いた DGA を構築する。