

ローカルサーチ後の自動クーリング手法の検討  
小椋 信弥

1 前月からの課題

1. ローカルサーチを用いた PSA/GAc の性能向上
2. 温度自動調節機構の考案

2 実際に行ったこと

2.1 ローカルサーチ後の温度調節機構

これまでの研究で、タンパク質立体構造予測において、ローカルサーチを適用することによりエネルギー値が下がることが確認できた。しかし、その後の探索で改悪が高い確率で受理されてしまうため、エネルギー値と共に SA のパラメータである温度を下げる必要がある。そこで本研究では、ローカルサーチによって減少したエネルギー値に応じて自動的にクーリングを行うメカニズムを考案し、これをローカルサーチを用いた PSA/GAc に導入する。

今月は、エネルギー履歴を考慮しないでクーリングを行う手法およびエネルギー履歴を考慮してクーリングを行う手法の両方を実装し、その性能の検証を行った。

2.2 エネルギー履歴を考慮しないクーリング

本手法では、ローカルサーチ間隔内のエネルギー履歴を考慮しないで、ローカルサーチ後の自動クーリングを行う。エネルギー値は常に一定の割合で減少していると仮定し、この仮定したエネルギー履歴の傾向と、ローカルサーチの適用によって減少したエネルギー値を用いてクーリングを行う。

2.2.1 性能検証

エネルギー値の減少の傾向を様々な値に設定し、(Ala)<sub>10</sub> の立体構造予測に本手法を適用した。パラメータを Table 1 に示す。

パラメータ

Table 1 パラメータ

パラメータ	値
エネルギー値の傾向の割合	-0.02, -0.007, -0.004, -0.001
初期温度	2.0
クーリング率	0.999
総 MCsweep 数	5000MCsweep
ローカルサーチ間隔	100MCsweep

実験結果

それぞれのパラメータについて 10 試行行った。エネルギー履歴の平均を Fig. 1 に、最適解への到達に要した MCsweep 数を Fig. 2 に、探索終了時の解精度を Fig. 3 に示す。

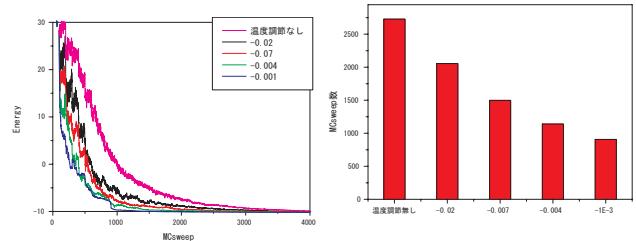


Fig. 1 エネルギー履歴 Fig. 2 最適解に到達した MCsweep 数

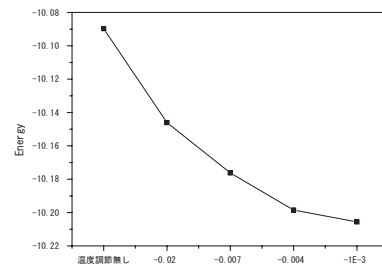


Fig. 3 解精度

実験結果より、エネルギー履歴を考慮しない温度調節を用いた手法は、従来の手法よりも高い性能を示していることが分かる。

2.3 エネルギー履歴を考慮したクーリング

本手法では、ローカルサーチ間隔内のエネルギー履歴の傾向を考慮して、ローカルサーチ後の自動クーリングを行う。ローカルサーチ間隔内のエネルギー履歴から、エネルギー値の減少の傾向を抽出する方法として、現在は移動平均と最小二乗法を用いている。

現在は、最小二乗法の実装が完了した段階である。今後この手法を (Ala)<sub>10</sub> の立体構造予測に適用し、その性能検証を行う予定である。

3 今後の予定

1. ローカルサーチ後の自動クーリング手法の性能検証
2. 文献調査