

Grid 環境における PSA/GAc モデル  
青井 桂子

1 今月の課題

- 個体数を増やした場合の解探索への影響
- 個体数を増やした場合の交叉の影響の検討
- NetSolve の通信時間と Server での実行時間

2 解探索個体数と解探索性能の検討

Grid 環境では、一度に多くの計算資源が利用できる。このため、PSA/GAc の個体数を 400 個体、100 個体、16 個体として実験を行い、個体数が解探索にどのような影響を与えるかを考察する。各探索個体中、最小値の履歴を 10 試行とり、平均の履歴を Fig. 1 に示す。

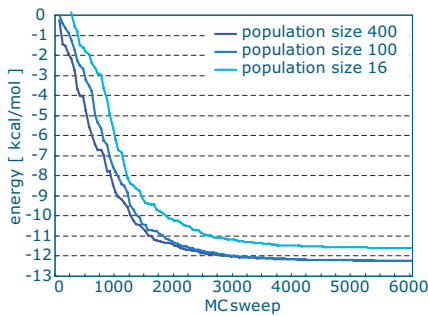


Fig. 1 Met-enkephalin の最小エネルギー値の平均履歴

実験の結果、現在のアルゴリズムでは、個体数を増やしてもエネルギーの値が初期段階で大幅に減少することはなかった。しかし、最小エネルギー値を得られる成功率は高くなった。

3 PSA/GAc における、交叉の影響の検討

Grid 環境で実験を行う際に、効率良く探索を進めるために、通信回数を減らすことや、Server での計算時間を長くすることが必要となる。

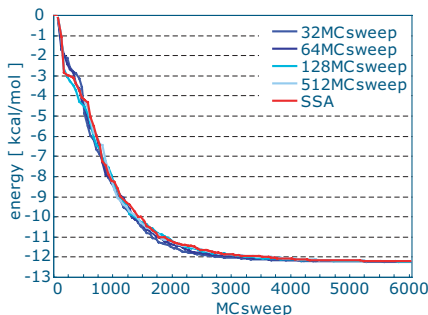


Fig. 2 Met-enkephalin の最小エネルギー値の平均履歴

Grid 環境に実装した PSA/GAc では、交叉周期毎に通信が行われる。交叉回数を減らすことで、通信回数を減らすことができる。個体数が多い場合に交叉がどの程度解探索に影響を及ぼすかの実験を行った。

実験では、400 個体を用いた場合に各個体数で PSA/GAc で Met-enkephalin の立体構造予測を行う。最小エネルギー値の 10 試行平均を Fig. 2 に示す。

実験の結果、並行に複数の逐次 SA を行ったものは、PSA/GAc と変わらない性能が得られた。

現在の PSA/GAc のモデルであれば並行に複数の逐次 SA を行うことと変わらないため、Grid 環境に適用した場合に交叉回数を減らしても問題ない。

4 通信時間と Server での実行時間

NetSolve システムの通信時間と Server での実行時間を検討する。対象問題を Met-enkephalin, HPTH(1-34) としたとき、32, 64, 128MCsweep で各々 Server 側での実行に要した時間と NetSolve における通信時間の比較、検討を行う。Met-enkephalin の通信時間と実行時間を Fig. 3 に、HPTH(1-34) の通信時間と実行時間を Fig. 4 に示す。

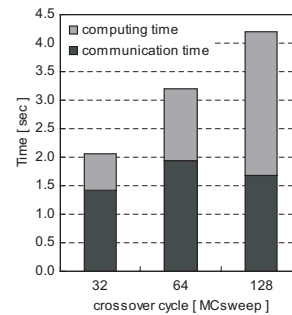


Fig. 3 Met-enkephalin の通信時間と実行時間

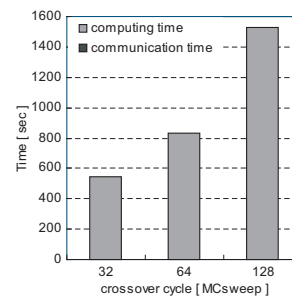


Fig. 4 HPTH(1-34) の通信時間と実行時間

Met-enkephalin では、交叉周期を 128MCsweep とし、オーバーヘッドのほうが大きくなる。HPTH(1-34) では、Server での計算を 32MCsweep 毎に行っても、十分に Server での計算時間のほうが長い。

5 今後の課題

- NetSolve システムのエラー処理
- 理工件の執筆