

PSA/GAc における MCsweep 数と交叉の検討
青井 桂子

1 今月の課題

- PSA/GAc における MCsweep 数と交叉の検討
- PSA/GAc , 独立型 PSA , SSA のテスト関数における性能比較

2 PSA/GAc における MCsweep 数と交叉の検討

PSA/GAc における交叉の影響を調べるために、これまで、個体数と交叉が解探索に及ぼす影響などを検討してきた。しかし、PSA/GAc は SA をベースにしたアルゴリズムであり、個体数が多い場合でも、温度が高ければ、エネルギーも高く、交叉によってこれが解消されることはなかった。

PSA/GAc における、16 個体*6000MCsweep, 32 個体*3000MCsweep, 64 個体*1500MCsweep とし、各々 16MCsweep, 32MCsweep, 64MCsweep ごとに交叉を行ったもの及び交叉を行わない多並行 SA (完全独立型 SA) において、実験を行った。このとき、MCsweep 数と交叉が解探索に及ぼす影響を検討する。対象問題は、Met-enkephalin の立体構造予測とした。

Table 1 に、本実験で用いたパラメータを示す。

Table 1 パラメータ

target	Met-enkephalin
amino acids	5
atoms	75
deheadral angles	19
total evaluation	96000
trial	50
max temperature	2.0
min temperature	0.1
neighborhood range	180° → 54°

Table 2 に 64 個体 1500MCsweep, Table 3 に 16 個体 6000MCsweep の 50 試行の最小エネルギーの平均値, 最小値, 最大値, 中央値, 最適解発見率を示す。Fig. 1 に 64 個体 1500MCsweep の最適解発見率の推移, Fig. 2 に 16 個体 6000MCsweep の最適解発見率の推移を示す。

このとき、ECEPP/2 エネルギー関数に基づいた気相中において、Met-enkephalin は $E \leq -11\text{kcal/mol}$ の領域で最小エネルギー構造をとるため、この領域のエネルギーが得られた場合に最適解が発見できたものとする。

Table 2 64*1500MCsweep の結果

crossover cycle	16	32	64	SSA
average	-11.83	-11.68	-11.58	-11.25
maximum	-10.46	-10.20	-10.22	-9.77
minimum	-12.07	-12.01	-11.98	-11.92
median	-11.93	-11.79	-11.68	-11.38
success rate	0.96	0.94	0.92	0.78

Table 3 16*6000MCsweep の結果

crossover cycle	16	32	64	SSA
average	-11.31	-11.53	-11.72	-11.62
maximum	-7.92	-8.63	-8.88	-10.22
minimum	-12.12	-12.12	-12.13	-12.05
median	-12.03	-12.00	-11.99	-11.72
success rate	0.64	0.74	0.84	0.88

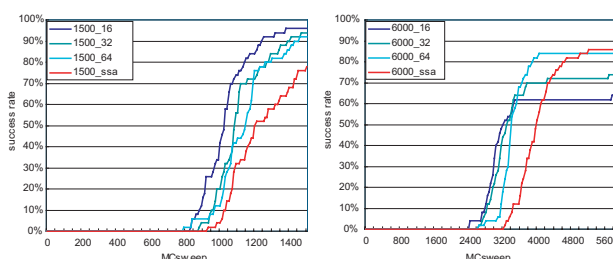


Fig. 1 1500MCsweep*64 success rate Fig. 2 6000MCsweep*16 success rate

Table 2, Table 3, Fig. 1, Fig. 2 の実験結果より、Met-enkephalin の立体構造予測においては、MCsweep 数が短くして、探索個体数を多くした場合 (1500MCsweep*64 個体) では、PSA/GAc における交叉を行うものの性能が最も良かった。

また、MCsweep 数を長くして、探索個体数を少なくした場合 (1500MCsweep*64 個体) では、独立型 PSA の性能が最も良かった。

3 今後の課題

- PSA/GAc 及び SA のプログラムの見直し
- PSA/GAc における交叉周期と対象問題の検討
- 理工研の執筆