

ローカルサーチアルゴリズムの検討
小 椋 信 弥

1 前月からの課題

- 1. ローカルサーチアルゴリズムの検証
- 2. 逐次 SA の検証

2 実際に行ったこと

2.1 逐次 SA の性能検証

逐次 SA の性能検証を行うために、逐次 SA を Rastrigin, Rosenbrock の 2 種類のテスト関数に適用した。パラメータは SA 班のものを参考にし、総評価計算回数が同等となるように設定した。

パラメータ

Table 1 Parameters

	Rastrigin			Rosenbrock		
次元数	2	5	10	2	5	10
最高温度	10.0			10.0		
最低温度	0.01			0.01		
クーリング率	0.800025			0.800025		
近傍幅	5.12			2.048		
試行回数	50			50		

実験結果

Table 1 のパラメータを用いて実験を行った結果を Table 2 に示す。

Table 2 Results of Rastrigin and Rosenbrock

	Best	Worst	Median	Average
Rastrigin(2D)	4.6E-08	1.2E-04	2.1E-05	1.5E-05
Rastrigin(5D)	4.7E-04	5.1E-03	2.4E-03	2.2E-03
Rastrigin(10D)	4.6E-03	2.3E-02	1.5E-02	1.5E-02
Rosenbrock(2D)	2.3E-07	8.8E-04	1.0E-04	2.7E-05
Rosenbrock(5D)	1.0E-03	0.51	4.8E-02	1.9E-02
Rosenbrock(10D)	8.7E-03	4.41	0.36	0.14

この結果を他のメンバーの実験結果と比較したところ、ほぼ同様の値を示していることが確認できた。

2.2 ローカルサーチアルゴリズムの検討

以前から検討を行っているローカルサーチアルゴリズムの追加実験を行っている。今月は、ローカルサーチアルゴリズムに若干の変更を加えた。

ローカルサーチを用いた PSA/GAc, 自動温度調節を行うローカルサーチを用いた PSA/GAc, およびの従来の PSA/GAc 性能比較を行うために、それぞれを (Ala)₁₀ の立体構造予測に適用した。Fig. 1, Fig. 2 はエネルギー履歴の平均と最小値を、Fig. 3, Fig. 4 は温度履歴の平均と最小値を示している。また、それぞれの手法において、最適解に到達するまでに要した MCsweep 数を Fig. 5 に示す。

均と最小値を示している。また、それぞれの手法において、最適解に到達するまでに要した MCsweep 数を Fig. 5 に示す。

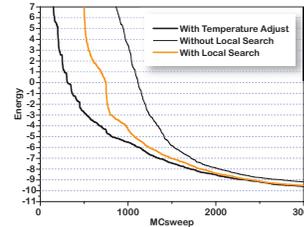


Fig. 1 History of Energy (Average)

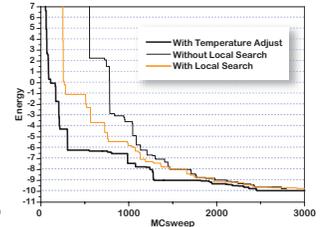


Fig. 2 History of Energy (Best)

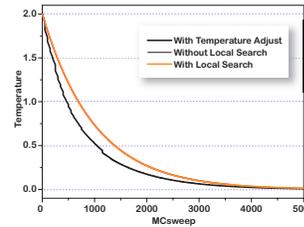


Fig. 3 History of Temperature (Average)

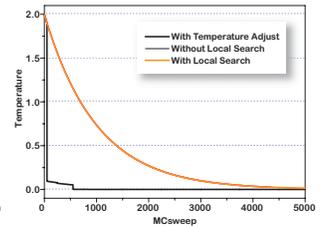


Fig. 4 History of Temperature (Best)

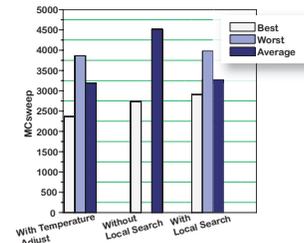


Fig. 5 Number of MCsweeps needed to reach the optimum

実験結果より、ローカルサーチを行う 2 つの手法は、ローカルサーチを行わない PSA/GAc よりも少ない MCsweep で最適解が求まっているが、自動温度調節を行う場合と温度調節を行わない場合の性能差が見られないことが分かった。

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. タンパク質立体構造表示システムの作成