

テスト関数における各手法の性能比較とタンパク質の 3D 表示アプリケーション
青井 桂

1 今月の課題

- テスト関数における各手法の性能比較
- タンパク質の 3D 表示アプリケーション

2 テスト関数における各手法の性能比較

これまでの研究から, PSA/GAc と独立型 PSA の二つの手法を, 小規模なタンパク質の立体構造予測 (Met-enkephalin, (Ala)₁₀) に適用し, 結果の比較を行ってきた.

本実験では, 3 種のテスト関数 (Rosenbrock, Rastrigin, Griewank) において, PSA/GAc と独立型 PSA, 逐次 SA を適用し, 各手法の性能の比較を行う.

なお, PSA/GAc と独立型 PSA における個体数を 16 とし, 個体数*MCsweep 数が逐次 SA の MCsweep 数と同等になるように調整した.

Table ?? に, 本実験で用いたパラメータを示す.

Table 1 パラメータ

対象問題	Rosenbrock	Rastrigin	Griewank
次元数	2, 5, 10		
総ステップ数	10240*32		
最高温度	10		
最低温度	0.1		
設計空間範囲	± 2.048	± 5.12	± 512
近傍幅	± 1		± 10
試行回数	50		

Table 2 テスト関数による各手法の評価

	SSA	PSA	PSA/GAc
2D Rosenbrock	1	1	1
5D Rosenbrock	1	3	2
10D Rosenbrock	1	2	3
2D Rastrigin	2	1	1
5D Rastrigin	1	2	2
10D Rastrigin	1	2	2
2D Griewank	3	2	1
5D Griewank	2	2	1
10D Griewank	1	2	2

Table ?? のパラメータを用いた実験の結果を Table ?? に示す. Table ?? はテスト関数による各手法の最小エネルギーの比較し, それぞれの関数においてランク付けを行ったものである.



Fig. 1 現在の探索結果の表示

Fig. ?? では, 現在計算中の個体における最優良個体の構造と, これまで経験的に最適解とされる構造を並べて表示している. 最優良個体は, タンパク質の立体構造予測においては, 得られたエネルギーが最も低かった個体を示している.

Fig. ?? の右側の表にはこのとき実験で用いたパラメータと探索過程で得られた履歴 (MCsweep とエネルギー値) が表示される.

また, Fig. ?? に示したような, 探索過程で得られた構造の履歴も見ることができる.

4 今後の課題

- MPS の原稿執筆

Spacefill Cartoon

energy = 6.7e+12.



Atom: C 56 Group: ALA 6

Fig. 2 一定 MCsweep 毎の立体構造の履歴