

Surrogate assisted artificial immune system for the evolution of molecular robots in a reaction diffusion setting

阪中裕子 (指導教員：オベル加藤ナタナエル)

1 はじめに

分子ロボットとは DNA や RNA を持ったタンパク質などによってマイクロなサイズでのロボットを作成する手法である。本研究で扱う分子ロボットは自己集合によりミクロスケールで指定した形を試験管内に作成することができる。分子ロボットにより自在な形状を作成することができれば、分子デバイスの作成や、自己修復機能を持つスマートマテリアルの技術に大きく貢献する。特定の形状を持つ分子ロボットの設計は試作を繰り返すことによって最適な設計の獲得を試みるが試験管での分子ロボットの作成は時間とコストを費やし何度も試行することは現実的ではない。計算機によってあらかじめ分子ロボットの設計を最適化し、実際に作成する候補を選出しておくことは分子ロボット作成技術の促進となる。本研究で扱う DNA 鎖付きアガロースビーズによる反応拡散系分子ロボットは非線形かつ高次元であり計算機上の最適化に非常に多くの計算量を必要とする。先行研究において BioNEAT や MAP-Elites などのアルゴリズムがこの分子ロボット最適化に用いられてきたが、本研究では新たに人工免疫アルゴリズム Opt-IA[1] による最適化を試みた。また、Opt-IA を用いるにあたって、さらなる計算量削減のため複数のモデルを提案した。

2 人工免疫アルゴリズム Opt-IA

人工免疫アルゴリズムは脊椎動物の免疫細胞における機構をモデルとした Bio-inspired アルゴリズムである。Opt-IA は免疫細胞 B 細胞をモデルとしており、Cloning, Hypermutation, Aging, Selection といったプロセスを適用する問題への解候補である B 細胞の集団に繰り返し適用することで最適化された個体を得る。Opt-IA は進化最適化に類似したプロセスを使用するが、特徴として個体が年齢を持っており、老化した個体は集団から確率的に削除される。この Aging システムは集団から高い Fitness を獲得できない個体を削除し、多様性を維持し、局所解を避ける効果がある。

3 分子ロボットモデル

本研究で扱う Swarm 型分子ロボットは DNA 鎖を付着したマイクロサイズのアガロースビーズから構成され、個々のビーズはブラウン運動により試験管内を自由に動き回ることが可能である。このビーズは自己集合機能を持っており、また付着された DNA 鎖によって異なる信号を発する。信号はビーズの存在する環境から酵素の濃度などによる input を受け取って処理を行い新たな信号を出すものと、周囲の他のビーズに固着する信号の 2 種類である。この機能によってビーズは図 1 に示すような一定の場所に集合し塊を作ることが可能である。信号の生成、拡散、反応などは先行研究 [2] による (1) 式によってモデル化される。

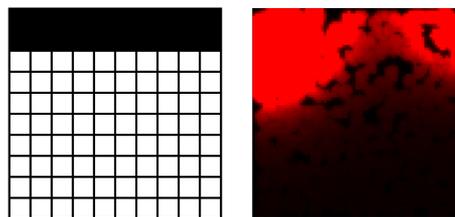


図 1: Top を目的とした分子ロボットの自己集合

$$\frac{\partial[S]}{\partial t}(t, x, y) = R_s(t, x, y) + D_s \cdot \Delta[S](t, x, y) \quad (1)$$

信号 S が与えられた時 (1) 式において、 $[S]$ は S の濃度、 R_s は反応からの寄与度、 D_s は信号の拡散係数、 Δ はラプラシアンである。

また最適化において、各最適解の評価をするため Cazenille らによる match-nomatch score 関数 [2] を評価関数として使用した。

4 Opt-IA-SA の提案

Opt-IA を分子ロボットの設計最適化に用いるにあたって計算量の検討と削減のためサロゲート型の Opt-IA-SA を提案し、COCO benchmark platform でのベンチマーク試験を行った。サロゲートとは計算量の大きい評価関数を代理の関数で置き換える手法のことで、本研究ではガウス過程により探索済みの解を教師データとすることで評価関数を近似したサロゲート関数を作成した。Algorithm 1 は Opt-IA-SA におけるサロゲート部の疑似コードである。 x は個体、 D は既探索個体の保存セット、 $iter$ は Opt-IA の iteration、 α, β, max_it はパラメータである。

Algorithm 1

Surrogate model($x, D, iter, \alpha, \beta, max_it$)

Predict $f_p(x)$ by Gaussian process

if $deviation(f_p(x)) < 1/(1+\alpha) * x^{age}$ **and** $f_p(x) < f(x^{best})$ **and** $iter < max_it$ **then**

$f(x) := f_p(x)$

else

Calculate $f(x)$ with the exact objective function and store the pairs of x with rounding to β and $f(x)$ into set D .

end if

また、Gaussian process による近似を助けるため初期個体の生成方法に Sobol 列を使用した Opt-IA-SB を提案した。図 2, 3 は COCO benchmark により 24 種類の関数について、1 関数につき 15 回の最小値探索実験を行った結果である。図 2 は全ての関数についての結果を目的関数に設定した次元別に示している。2 次

元, 3次元ともに全体的な比較では既存手法 Opt-IA からの計算量削減効果はみられないが, 2次元では縦軸に示す最適解との差 0.2 から 0.6, 3次元では 0.2 から 0.4 あたりまでの最適化において Opt-IA と比べ提案手法 Opt-IA-SA がより高い精度の探索解に到達していることが確認できる。また図 3 に示す Sphere 関数についての最適化では Opt-IA-SA が既存手法に比べ大きく計算量を削減し, Lunacek bi-Rastrigin 関数は最適化の難度の高い関数であるが同様の削減効果がみられた。また Lunacek bi-Rastrigin 関数の結果のように一部の関数では Opt-IA-SB による評価関数呼び出し回数削減効果が Opt-IA-SA よりも大きく確認できた。これらの結果により, 提案手法 Opt-IA-SA のサロゲートによる計算量削減効果が精度 0.2 ~ 0.6 の範囲や, 一部の関数について確認できた。

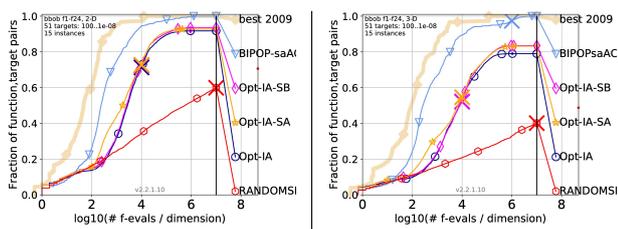


図 2: COCO benchmark platform による試験結果。左:2D, 右:3D

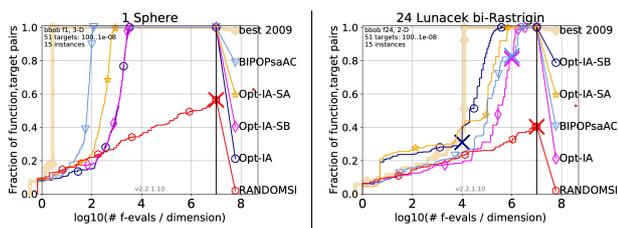


図 3: COCO benchmark platform による試験結果。左:Sphere 関数, 右:Lunacek bi-Rastrigin 関数

5 Opt-IA-Cl の提案

本研究で扱う分子ロボットは計算機上でグラフ構造として表現される。Opt-IA の Hypermutation において, 親個体とグラフの類似性が異なる個体の生成を促進することは, 最適解探索を促進すると仮定し, Hypermutation にクラスタリングによる個体分類を導入した Opt-IA-Cl を提案した。Opt-IA-Cl では Hypermutation において生成された新規個体をクラスタリングによって分類し, クラスタに分類された個体については再度変異を行う。分類される個体の個数が基準値以下となるか変異の試行回数が 100 回になるまでこの操作を 1 度の Hypermutation として行う。本研究では高次元なグラフ構造のクラスタリングに使用可能であり, Hyperparameter の調整にロバストな HDBSCAN を使用した。

6 Opt-IA による分子ロボット設計最適化実験結果

Opt-IA 及び提案手法 Opt-IA-SA による分子ロボット設計最適化実験を行った。各手法, 各 target ごとに 20 試行した。図 4 に target を Bottom, Top とした結果を示す。Bottom, Top 共に Opt-IA による最適化の fitness は 0.9 程度まで達しており十分な最適化が可能であることが確認できた。また Top における先行研究における MAP-Elites アルゴリズムとの比較でも少ない評価回数で高い fitness の解を獲得した。一方 Opt-IA-SA による評価関数の削減効果は, Bottom の budget1500 以降に Opt-IA を上回るのが局所的に確認できるが, 十分な差異は確認できなかった。Top では Opt-IA-SA による評価削減効果は確認できなかった。Bottom では Opt-IA-Cl が budget2000 程度まで評価回数の削減が見られるが最終的には Opt-IA の方が少ない評価回数で最適解に到達しており budget2000 までの削減も十分な差異とは認められない。Top では Opt-IA-Cl による評価回数削減は確認できなかった。

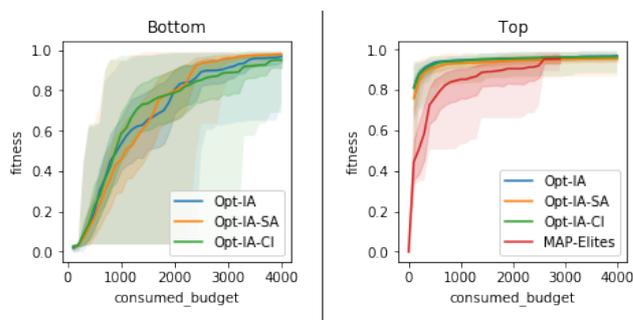


図 4: 分子ロボット設計最適化実験結果

7 まとめと今後の課題

人工免疫アルゴリズム Opt-IA と新たなモデルとしてサロゲート型の Opt-IA-SA, クラスタリングを使用した Opt-IA-Cl を提案し, 分子ロボットの設計最適化への適用を行った。分子ロボット設計最適化実験では Fitness0.9 程度に到達し MAP-Elites と比較しても Opt-IA による十分な最適化結果が確認できた。数値最適化におけるベンチマークでは Opt-IA-SA による評価回数削減を確認できたが, 分子ロボットの設計最適化では削減効果はみられなかった。より問題に特化したサロゲート関数の作成を行うなどさらなる改善が必要である。一方クラスタリングを使用した Opt-IA-Cl では最適化前半での微小な削減効果が確認できたが, 全体として顕著な削減効果は確認できなかった。しかし前半部分での削減効果が見られることから, Hyperparameter のチューニング, 別手法との併用などによってより適したモデルの検討を進めていきたい。

参考文献

- [1] Vincenzo et al Cutello. In *International Conference on Artificial Evolution*, 2005.
- [2] L.Cazenille and N.Aubert-Kato N.Bredeche. *IEEE ALIFE*, 2019.