

多目的最適化アルゴリズムを使用した Reservoir Computing の最適化

森川恵海 (指導教員: Aubert-Kato Nathanael)

1 はじめに

Reservoir Computing(RC)は再帰的ニューラルネットワーク(Recurrent Neural Network: RNN)の実装方法の一種であり、特徴として中間層と出力層間の重みのみ学習していくという特徴を持つ。従ってRCの学習の効率や精度などは使用する中間層によって変化する。本研究では化学反応ネットワーク(Cheical Reaction Network:CRN)ベースのRCについて考え、多目的最適化アルゴリズムを使用し、最適な中間層を探索する。

2 関連研究

2.1 Reservoir Computing

まず、RNNとは内部にReservoirと呼ばれる再帰的特性を持つニューラルネットワークの一種であり、再帰的特性を持つことによって動的メモリのようにインプットがない状態でも活性化状態を保つことができるという特徴を持つ。特に神経回路などの生物学的ニューラルネットワークは典型的な再帰的システムであり、このようなシステムを模倣し、人工RNNはターゲットシステムに近づくために学習することが可能である。

Reservoir Computing(RC)はRNNの実装方法の一種であり、Jaegerらの研究[1]により開発されてきた。RNNの通常の構造ではノードを完全に相互接続しすべての接続の重みを更新することで学習が行われるため、計算量が膨大なものとなる。一方、RCはまずネットワークに inputs を供給し、出力を取得する入力層と出力層が存在する(図1)。Reservoirのノードは疎に接続し、重みはランダムな値で初期化され学習によって変化することなく固定される。望む出力を得るために、Reservoirから出力層への接続の重みのみを計算し学習され、RNNよりも比較的少ない計算量で計算することが可能となる。

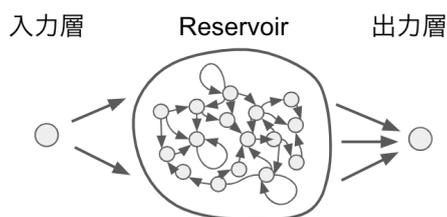


図1: Reservoir Computing のモデル図

また、本研究ではReservoirとして再帰的特性を持つCRNを用いる。ReservoirとしてCRNを用いる有用性はGoudarziら[2]によって示されている。また、CRNを使用することによって分子ロボティクス等への応用が容易となる。インプット、アウトプットとして化学物質の濃度変化パターンを用い、化学物質の濃度変化パターンから出力を判別する。

2.2 Pen DNA toolbox

DNA分子は予測可能な反応をするので、CRNを設計するのに適している。本研究ではPEN DNA toolbox[3]を用いてCRNの設計を行っていく。PEN DNA toolboxとはDNAと酵素の反応を基盤としたCRNのアセンブリツールである。PEN DNA toolboxは図2Aに示すように、DNAの産出・自己触媒・阻害の3種類の反応を規定する。それぞれ図2Bに示すような濃度の変化が起こり、グラフで表すと図2Cのようになる。これらの反応を組み合わせるとCRNを作成し、濃度変化パターンを作成していく。

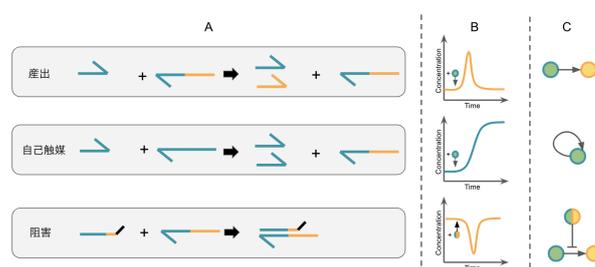


図2: PEN DNA toolbox A: DNAの反応, B: 濃度の変化, C: グラフで表示したもの

2.3 多目的最適化アルゴリズム

まず、多目的最適化問題を下記のように定める。¹:

$$\begin{aligned} \max F(x) &= (f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x))^T \\ \text{subject to } &x \in \Omega \end{aligned} \quad (1)$$

ここで Ω は変数域であり $F: \Omega \rightarrow R^m$ は実数 m 個の目的関数、目的空間 R^m で構成される。多くの場合(1)の各目的は互いにトレードオフの関係であるため、すべての目的を同時に最大化することはできず、どの目的を優先するかで解が変化する。

$x, y \in \Omega$ について $\forall i \in \{1, \dots, m\}, x_i \geq y_i$ と $\exists j \in \{1, \dots, m\}, x_j < y_j$ が成り立つ時に x は y を支配しているという事ができる。ここで、 $F(x)$ が他の点に支配されていない時、つまりある目的におけるパレート最適点のいかなる改善も、少なくとも1つの他の目的における悪化をもたらさなければならない時、 $F(x)$ をパレート最適ベクタと呼び、パレート最適ベクタの集合をパレートフロントという。

本研究ではNondominated Sorting Genetic Algorithm II(NSGA-II)[4]を用いて最適化を行う。NSGA-IIは遺伝的アルゴリズムの一種であり、支配されている数に応じてソートを行い次世代の個体を選んでいくというアルゴリズムである。

¹最小化問題の場合も同様に定義することが可能である。

3 実験

3.1 実験設定

PEN DNA toolbox を用いて CRN を作成し DNA 濃度のパターンをシミュレーションを行い、入力からベンチマークを使用して算出されるターゲットを比較して、より設定されたタスクに近い濃度パターンを吐き出す CRN を NSGA-II を使用して探索する実験を行う (図 3)。この時、ターゲットと濃度パターンのシミュレーション結果の差異が小さいものほど良く適応度が高くなるとする。先行研究 [5] では、単一タスクでの最適化を扱っている。

本研究では、複数の入力パターン、および CRN のグラフサイズを目的とし、最適化を行う。CRN は濃度を維持するのが得意なものもあるため、NSGA-II を使用し、パレートフロントを探索する。また、グラフサイズが小さいものほど *in vitro* での実験と計算機上のシミュレーション結果での差異が小さいため、グラフサイズが小さいものほど適応度が高くなるように設定する。比較のため、NSGA-II を用いたものと Random に突然変異を起こし次世代とする手法の 2 つを使用する。

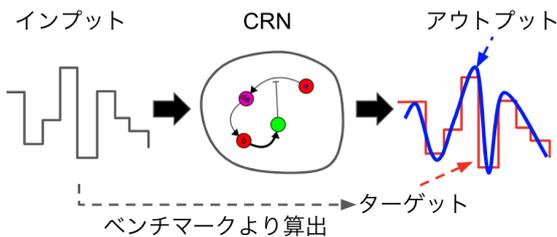


図 3: 実験設定

3.2 実験結果と考察

両手法とも個体数 世代数がおよそ 1600 となるように設定し、実験を行なった。図 4 が実際に作成できた CRN である。Random に作成したものに比べ NSGA-II を使用した CRN は小さく設計できていることがわかる。

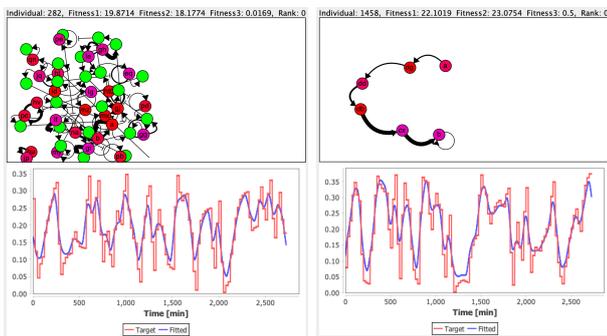


図 4: 作成した CRN 例 (左図)Random, (右図) NSGAII

実験を複数回行い、適応度とその中央値をプロットした (図 5)。およそ 25 世代まで行くと適応度の中央値が打ち止めになるが、その後も実験によっては良い個体ができていることがわかる。Random と NSGA-II の比較により多目的最適化アルゴリズムの有用性が確

認できる。

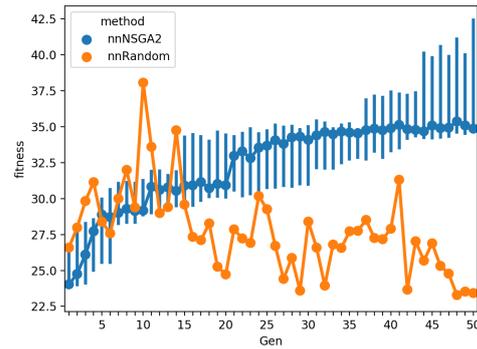


図 5: 世代ごとの各タスクの適応度を表したもの

Random なものは初期の方で適応度が NSGA-II を使用したものより上回っているが、CRN を確認すると図 4 (左図) のようにグラフサイズが大きくなることが確認できた。

先行研究 [5] で一つのタスクに対して最適な CRN を探索した際、グラフサイズが 5 付近のものを見てみると適応度は 24 付近を示している。本研究で使用した 2 つのタスクの適応度をそれぞれ確認すると、平均でおよそ 17 程度となる。これより複数のタスクに対して最適化した場合、最大の各適応度を得るのは難しいことがわかる。

4 まとめと今後の展望

多目的最適化アルゴリズムを使用して、確かに複数の性質を持つ CRN を得ることができた。多目的最適化アルゴリズムを使用することによって比較的小さいネットワークを得ることができている。ただ、複数のタスクに対して最大の適応度をだす CRN を得るのが難しいことがわかった。

今後の展望として、現在は計算機上でシミュレーションを行なっているが、*in vitro* な実験を行うことによって実際の挙動の確認を行いたい。また、現在はベンチマーク問題を使用しているが、実際の化学反応は濃度パターンがスムーズに変化するため、入力の改善を行いたい。また、他の多目的最適化アルゴリズムを用いてシミュレーションを行い、挙動を比べたい。

参考文献

- [1] H. Jaeger and H. Haas. Harnessing nonlinearity: Predicting chaotic systems and saving energy in wireless communication. *Science*, 304(5667):78–80, 2004.
- [2] A. Goudarzi, M. R Lakin, and D. Stefanovic. Dna reservoir computing: a novel molecular computing approach. In *International Workshop on DNA-Based Computers*, pages 76–89. Springer, 2013.
- [3] K. Montagne, R. Plasson, Y. Sakai, T. Fujii, and Y. Rondelez. Programming an *in vitro* dna oscillator using a molecular networking strategy. *Mol. Syst. Biol.*, 7(1):466, 2011.
- [4] K. Deb, A. Pratap, S. Agarwal, and T. Meyarivan. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: Nsga-ii. *IEEE Trans. Evo. Comp.*, 6(2):182–197, 2002.
- [5] W. Yahiro, N. Aubert-Kato, and M. Hagiya. A reservoir computing approach for molecular computing. In *ALIFE 2018*, pages 31–38. MIT Press, 2018.