

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。

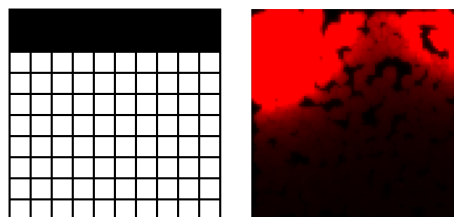


図 1: Top を目的とした分子ロボットの自己集合

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

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  $\beta$  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

