

抽象的化学反应モデルを用いた最適化手法*

いしわた りょうすけ†
石渡 龍輔†

芝浦工業大学システム工学部電子情報システム学科‡

1 はじめに

生物は循環的な化学反応によって生命活動を維持している。生物が生命活動を維持するには周りの様々な物質や環境に動的に適応しなければならない。これは、周りの環境に適応出来る化学反応のサイクルを持っている生物だけが生き残るということである。このような生物の適応システムは GA 等に代表される適応手法に近年利用されている。しかし GA 等の手法はパラメータ設定が困難であったり、問題によっては巡回セールスマン問題のように適用させる仕組みが非常に複雑になる [1]。そこで、これらの問題点を解消できるような手法が必要と思われる。

上で述べたような化学反応サイクルが物質や環境に適応するという仕組みを GA 等の問題点を解消できるような平衡化(最適化)手法に利用できないかと考えた。このような人工化学的な手法を最適化に初めて利用した例としては、CGA がある [2]。本研究では、抽象化学反応モデルを構築し、それを様々な問題に適応させることで問題の平衡値(最適値)を求めることを目的としている。

2 自己再生産性 (Autopoiesis)

自己再生産性 (Autopoiesis) とは、自己の構成要素とそれらの間の関係を再生産するような概念である。生物を形作っている化学反応から生み出される物質は恒常的に存在するのではなく、そのままでは劣化したり分解してしまうので生物は絶えず化学反応によって自己を再生産して存在し続けている [3]。

このような生物の再生産性は、化学反応がネットワークのように非常に複雑に絡み合って成り立っている。しかし、個々の化学反応は脱水素反応 $AH_2 + B \rightleftharpoons A + BH_2$ のように単純である。つまり、単純な分子同士の反応から成り立っている化学反応サイクルを作成する事が、生物が持つ自己再生産性を構成するには必要だと考えられる。このような単純な反応から生物を形作っている化学反応サイクルを生み出すような先行研究としては Fontana の Alchemy [4] が挙げられる。また、適応的な変化を狙った先行研究としては抽象化学と進化的手法を組み合わせたシステムを GP に応用した Suzuki-Tanaka の GACS がある [5]。

3 化学反応ネットワーク

化学反応ネットワークは、物質と化学反応の関係を表したものである。例として循環的な化学反応ネットワークの一部を取り出したものが図 1¹である。

循環的な化学反応ネットワークの中に存在する物質を図 2 のように関数の入力や出力として設定することで、関数の値を良くするような入力物質を生成するネットワーク構造だけが再構築されるようになる。ネットワークと問題は 1 対 1 関係になっており、1つのネットワークが問題に対して適応していく形になっている。このようにすることで1つのネットワークが平衡化し、関数を最適値に収束する仕組みを作成出来ると考えられる。

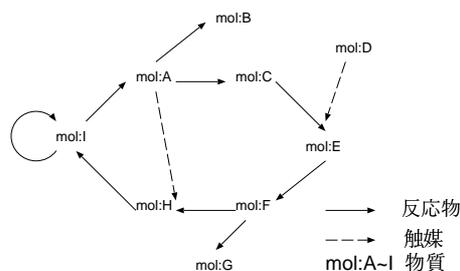


図 1: 反応ネットワーク

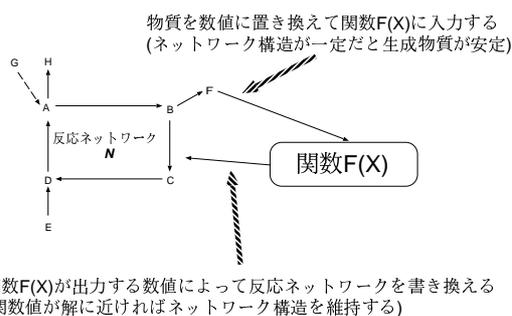


図 2: 化学反応ネットワークと問題の関係

4 問題適用方法

図 3 が具体的な処理サイクルである。処理ステップ時間 t において反応分割数が n のとき、与えられた反応規則と物質によって n 個の反応が行われる。 n 個の反応モデル中のそれぞれの入力物質を物質 \rightarrow 数値変換反応によって数値へと変換する。次に、変換された数字を $F(X)$ に代入し、 n 個分 $F(X)$ の値が出力される。 n 個の反応の中から最も良い $F(X)$ の値が出る X を選択する。その結果前回の X の値と比べ $F(X)$ の値が改善されている時は反応規則を書き換えず反応分割数も書き換えない。逆に改善されていないときは書き換え確率を高くし、反応分割数 n を増加させる。そして次ステップ $t+1$ へと進む。これは局所解に陥った際、探索範囲を広げる役割を果たす。

このように書き換え確率を変化させ、反応分割数を変化させることによって、 $F(X)$ の値をより早く最適状態に近づけることを狙った。

5 化学反応モデル

化学反応ネットワークを利用するためには、抽象化学反応モデルを作成しなければならない。先行研究で使われている反応モデルには、様々なものがあるが、それぞれ物質をモデルに導入したり、エネルギーを導入したもの等がある。今回は抽象化学を最適化に利用するため、動きの複雑性を必要としないようなシステムを構築した。

*Optimization by abstract chemical model

†Ryosuke Ishiwata

‡Department of Electronic Information Systems, Faculty of Systems Engineering, Shibaura Institute of Technology

¹ここでは物質をノード、反応をリンクで表している

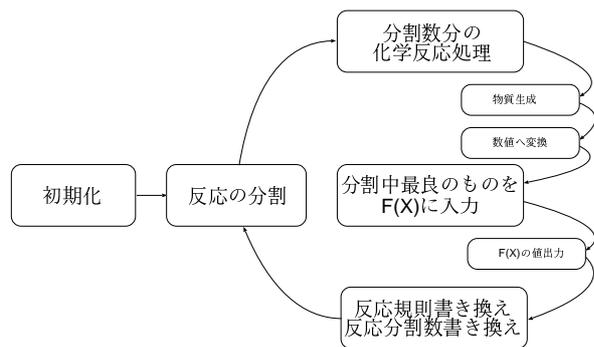


図 3: 処理サイクル

今回作成したシステムは以下のようなシステムである

- 要素
要素は、物質の組合せを直感的に表現したり、物質の組合せ順番を直接利用出来るようにした。
- 反応
反応は単純に左辺に組み合わせる要素を記述し、逆に右辺に出来る上がる物質を記述する形とした。また本システムでは左辺右辺の物質量を保存した反応を作成した。

6 最適化システム

6.1 物質 → 数値変換

最適化する問題が連続値問題の場合、こちらが設定した物質の物質量を問題へ入力する事とした。 $M = \{A, A, B, C, D, D, D, D\}$ という要素があるとする。今回物質 A を入力物質として選択した際、(A の物質量 $\times 3 \rightarrow$ 入力) という規則があった場合、問題への入力として利用される数値は 6 ということになる。

6.2 評価方法

最適化問題では、問題へ入力した値がどれだけ問題の解に近いかの評価が必要となる。しかし解が分からない問題に最適化手法を利用する場合、どれだけ解に近いか等ということでは分からない。そこで GA 等の手法がとてるように幾つか解候補を出力させ、解候補の中で最も最大(最小)となるものが解に近いものとするといった評価方法を選択した。

6.3 反応書き換え方法

本手法では書き換え方により振舞が大きく変わってくる。そのため書き換え確率は非常に重要なものだが、今回本手法では探索範囲を大きくしようと狙ったため、書き換え確率によってランダムに反応を書き換える事とした。

7 実験

7.1 実験問題

今回実験的に本手法を 2 変数の最適化問題へと利用した。実験問題は以下の様な設定とした。

- 問題設定
 $\min(5(x^2+y^2)-8xy-18(x-y)+6\sin(x+y)\sin(x-y))$
 x, y の分解能: 小数点第 5 位
 x, y の初期値: 17.0-21.0
- 反応システム設定
初期反応分割数: 20
書き換え確率: 1 パーセント (固定)
物質数値変換: $x = (A \text{ の物質量} / 100000) - 10, y = (B \text{ の物質量} / 100000) - 10$ (固定)

7.2 実験結果

このような x, y の値の最適値を求める問題を本手法で行った。図 4 は本手法を適用した際のステップ数と $F(x, y)$ の 500 回平均をとったグラフである。また手法としての振舞は、表 1 にあるように本手法の振舞は完全にランダムなものではなく、狙った最適化が可能であったと言える。ただし、準最適解に陥ってしまうケースも試行 500 回中 121 回となってしまった。

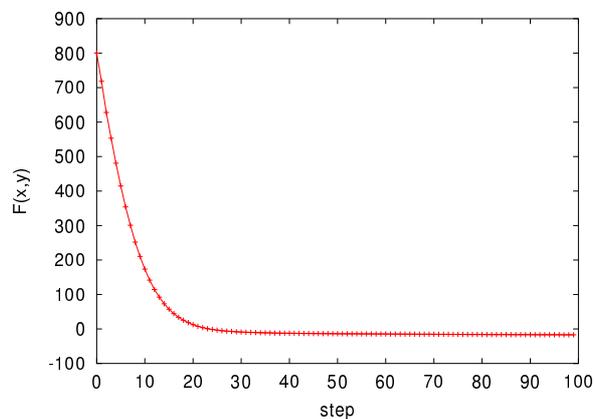


図 4: ステップ数: $F(x, y)$ の値の 500 回平均

$F(x, y)$ の傾きの平均	-8.744735
$F(x, y)$ の傾きの標準偏差	0.001190

表 1: 結果の平均と標準偏差

8 考察

実験データから解への近付き方が想定していたものより緩やかになってしまった。これは今回のシステム設定で実験を行った場合、化学反応モデルの反応 1 つ 1 つが単純な写像となってしまう、総合的な振る舞いが山登り法等の既存研究の最適化手法の組み合わせようになってしまった。この問題は、反応システム設定にある書き換え確率と物質数値変換を反応ネットワークと同様に適応的に変化させていくことで改善が出来るのでは無いかと考えられる。また作成したシステムを組み合わせ最適化に応用する事が難しいため、現在組み合わせ最適化手法に応用出来る反応システムの作成も行って

謝辞

指導教官の相場 亮教授には研究指導していただき、また(株)国際電気通信基礎技術研究所の鈴木 秀明氏と東京医科歯科大学の鈴木 泰博氏には研究の面で色々相談にのっていただいたことに謝辞を表します。

参考文献

- [1] 伊庭 斉志: "遺伝的アルゴリズムの基礎", オーム社, 1994
- [2] Suzuki, H., Sawai, H.: "Chemical genetic algorithms - Co-evolution between codes and code translation." In: Standish, R.K., Bedau, M.A., Abbass, H.A. (eds.): Proceedings of the Eighth International Conference on Artificial Life (Artificial Life VIII)(2002) 164-172
- [3] 田中 博: 生命と複雑系, 培風館, 2002
- [4] Fontana, W.L.W. Buss: "The arrival of the fittest: Toward a theory of biological organization", *Bull. Math. Biol.*, 56: 1-64, 1994
- [5] Suzuki, Y., H. Tanaka: "Chemical evolution among artificial proto-cells." In: Mark A. Bedau, John S. McCaskill, Norman H. Packard, Steen Rasmussen. (eds.): Proceedings of the Seventh International Conference on Artificial Life (Artificial Life VII)(2000) 54-63