

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 14 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2020～2022

課題番号：20H04253

研究課題名(和文)ディープニューロ進化の機能創発のためのモチーフ構造に関する研究

研究課題名(英文)Research on motif structures for functional emergence in deep neuroevolution

研究代表者

伊庭 斉志 (Iba, Hitoshi)

東京大学・大学院情報理工学系研究科・教授

研究者番号：40302773

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 12,600,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、ディープニューロ進化のモチーフ構造に基づく機能創発を目的とした。ここでのモチーフ構造とは、生物学用語のDNAにおける単純な類似性ではなく、共通の祖先に由来して同じ機能を生じる要因となる構造を意味し、より深い情報論的特徴を示唆している。本研究では、ディープニューロ進化の時間的発達過程を非線形力学系と情報統計力学の手法を用いて解析することを試みた。その結果に基づいてネットワークモチーフの時間発展を制御することで、的確なネットワーク発現と機能創発を実現した。提案する手法の有効性を、ロボティクスや創造支援と工学的最適化などの多岐にわたる分野で検証した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

実世界応用として、ロボティクスやX線データによる危険物検出や医療用画像の解析を試みた。例えば医療応用では、X線動画からFBP法による再構築をした。医師の評価を踏まえ、X線動画からCT画像を生成する手法として有用であり得ることが確認された。具体的には、大学病院での定量的な評価が研究成果につながった。またロボティクス応用では、ソフトロボットに有用な構造と制御を同時に最適化する手法であるco-designというフレームワークを構築した。

研究成果の概要(英文)：In this study, we aimed at function emergence based on motif structures in deep neuroevolution. Motif structures here are not simply similarities in the biological term DNA, but rather structures that originate from a common ancestor and cause the same functions, implying deeper information-theoretic features. In this study, we attempted to analyze the temporal developmental process of deep neuroevolution using nonlinear dynamical systems and information statistical mechanics methods. Based on the results, we controlled the temporal evolution of network motifs to achieve precise network expression and function emergence. The effectiveness of the proposed method is verified in a wide range of fields such as robotics, creative support and engineering optimization.

研究分野：進化計算

キーワード：進化計算 遺伝的アルゴリズム 遺伝的プログラミング 人工生命 群知能

1. 研究開始当初の背景

近年ディープラーニングは盛んに利用されている一方で、学習のフレームワークはほとんどブラックボックス化され、より深い理解をせず使用されていることが多い。そのため学習が成功しない場合にも、どのように対処すればよいのかが分からなくなっている。とくに、ディープラーニングを利用する際のハイパーパラメータ、ネットワーク構造、ノードの操作関数などについて、適切な設計をするのは極めて難しく、職人技的な試行錯誤を繰り返して適当なものを求めているのが現状である。

知能や機能の創発のために、脳神経細胞や遺伝子制御ネットワークにおける重要な特徴としてモチーフ構造（遺伝子発現に寄与する DNA の類似構造）が注目されている。このメカニズムは、遺伝子制御から生体の適合度に至るまで、生物組織のさまざまなレベルで観察される。たとえば、大脳において類似した性質の神経細胞が集まる円柱状の領域（皮質柱）が知られており、ネズミの感覚野ではヒゲの一本一本に対するコラム構造が存在する。さらに脳の神経網では、ギャップ・ジャンクション（双方向結合）による研究もなされている。また、Shen-Orr らは大腸菌の転写制御回路の構成要素となるモチーフを明らかにし、その機能をシミュレーションから推測して転写制御回路の中での位置づけを明らかにした。その後、生物学で種や遺伝子の分類単位として使われるスーパーファミリー（免疫グロブリンなどに見られる似通った構造や機能を持つ遺伝子の集合）のアナロジーで、多くの遺伝子構造や脳構造がモチーフの種類によって分類可能であり、いくつかのスーパーファミリーが存在することも明らかになっている。

機能を理解するには、構造を知らなければならない。生物学におけるこの格言は、システムの構造は機能の拘束条件になるため、機能だけを調べてもその創発の根拠となる構造を一意に決められないことを意味している。そのため、知的なシステムを理解するにはマクロレベルの研究では不十分であり、機能だけではなく構造も調べる必要がある。この考えに従って、ディープニューロ進化における機能創発を構造に基いて理解する。これが本研究課題の核心をなす学術的「問い」である。

2. 研究の目的

この問いに迫るため、本研究ではモチーフ構造に基づくディープニューロ進化の機能創発の実現を目的とする。なお本研究でのモチーフ構造とは、生物学で用いられる DNA の単純な類似性ではなく、共通の祖先から進化して同じ機能を持つ要因となった構造を含意する。つまり、ニューロ進化の遺伝子型において入れ子式に組み合わせさせた情報の流れや集合形成などに寄与する情報論的により深い特徴を意味する。

進化論的手法とニューラル・ネットワークを統合するアプローチがニューロ進化であり、最適なネットワークを遺伝的に探索することで、試行錯誤によるネットワークの構築を可能にする。ニューロ進化ではタスクに応じて適切なネットワーク構造やサイズ（ノードの数）を適応的に学習することが可能であり、時間発展に応じて動的にネットワークが変化する。最近ではニューロ進化をディープラーニングに適用し、CNN（畳み込みニューラル・ネットワーク）、RNN（再帰型ニューラル・ネットワーク）および LSTM（長・短期記憶ユニット）などのアーキテクチャを探索するディープニューロ進化(Deep Neural Evolution)の研究もいくつかなされている。しかしながらディープニューロ進化による機能創発を、ハードウェアや人工遺伝子回路を含む実際的な応用領域で検証した研究はこれまでにほとんどない。

機能創発のための重要な特徴はモチーフ性などの構造的な特徴である。モチーフが適切に作用することで、環境内の物理的・化学的変化から遺伝的変容などのランダムな変異に対して機能を維持しつつ、部分解から新奇の機能を獲得して新しい環境にも適応する。

ニューロ進化で得られたネットワーク構造は発生系における特定の現象のモデル化と考えられる。たとえば、左右対称性、周期性、変形を伴う繰り返しなどのモチーフ構造が自然界で見られる幾何学的に重要な特徴と共通している。具体的な例として、視覚皮質のニューロンは網膜の光受容器と同じ位相的な二次元パターンで配置され、隣接したニューロンと単純な繰り返しで規則的につながることによって、局所性を得ている。また、あるグループの魚類では、網膜の曲面上に各種の錐体細胞が規則的に配列している。

以上の背景をもとにして、本研究では、ディープニューロ進化の時間的発達過程を非線形力学系と情報統計力学に基づいて解析し推定する。その結果に基づいて、ニューラル・ネットワークの発現に寄与するネットワークモチーフの時間発展を制御することで、的確な機能創発を実現する。すなわち、ディープニューロ進化における機能創発の過程を、構造発展の力学系からアプローチするという点で学術的独自性と創造性がある。

3. 研究の方法

本研究では、モチーフ構造に基づくディープニューロ進化という枠組みを提案する。研究の目標は、ネットワークの進化に寄与するモチーフ構造を解析し、より頑強な機能創発を実現することである。この研究においては有用なネットワークモチーフ、たとえば繰り返し構造、左右対称構造、再帰構造などを抽出し、的確に構造生成を制御する必要がある。そのために、ネットワーク構造発現の時間発展を非線形力学系と情報統計力学の手法を用いて分析し、モチーフを生成するための変数の依存関係を推定する。さらに構造推定したモチーフをもとに進化的探索を導いて、(1) 探索の効率性、(2) スケーラビリティ、(3) ロバストネスの3つの点で優れたディープニューロ進化の枠組を構築する。具体的には、ディープラーニングを利用する際のハイパーパラメータ、ネットワーク構造、ノードの操作関数などの適格性を、機能創発の的確性に基づいて評価する。

この研究計画では、提案するディープニューロ進化の有用性を多岐にわたる分野で検証する。それは進化型計算などの近似アルゴリズムの重要性は実領域で確認されることが多いとされるからである。本研究で扱う主な応用は、(1) X線データによる危険物検出や楽曲の生成、(2) 遺伝子制御回路の合成、(3) ヒューマノイド・ロボットの動作生成などの分野である。これらはそれぞれ(1) 創造支援と工学的最適化、(2) 合成生物学、および(3) ロボット工学に対応し、異なる実領域の代表と考えられる。これまでこのように広範な実領域でディープニューロ進化の検証を行った研究はほとんどない。そのため、本研究により工学的・理論的な観点からのモチーフ構造のアプローチを実証的に検証するという学術的に有意義な展開が期待される。

4. 研究成果

本研究では、スケーラビリティを考慮しながら、ディープニューロ進化におけるモチーフ構造（遺伝子型）と機能（表現型）の因果関係を導出する推定法の実現を試みた。近年、確率伝搬法やディリクレ過程混合分布を用いてグラフ構造をクラスタリングする方法が提案され、研究代表者らは進化計算にも応用している。この手法を応用することで、ネットワーク内の変数と部分構造に関する因果関係モデルに基づいて、入れ子式に組み合わさった構造のモチーフ性を推定した。この手法を用いて、遺伝子型（構造）とアナログ的な表現型（ネットワークが発現する機能）の因果関係の推論法の構築を試みた。

さらに、構築したディープニューロ進化の枠組を、より実際的な問題領域であるロボティクスに応用し、モチーフ構造が効果的構成にされているかを検証した。具体的には、複数・異種のロボット間の協調動作設計や行動計画に応用した。その結果、汎化能力、リアルタイム性、頑強性などにおいて従来手法よりも優れた性能を確認した。

具体的な実世界応用例として、提案した手法をさまざまな実際的な応用に適用した。とくにX線データによる危険物検出の技術を応用して、医療応用の分野に適用した。具体的には、医療応用ではX線動画からFBP法による再構築をした。深層学習を用いて実際のCT画像に近づけるといふ手法により、X線動画からCT画像を再構成するという手法を提案した。医師の評価を踏まえ、X線動画からCT画像を生成する手法として有用であり得ることが確認された。有用性の検証においては、東京大学附属病院の医師にも定量的な評価をしていただいた。

別の実際の応用として、ニューロ進化における拡散モデルの課題を解決するために、拡散モデルと対話型進化計算を併用した画像生成支援システムを提案した。生成される画像の遺伝子型を対話的に進化させていくことにより、ユーザが対話的かつ直感的に生成過程を制御することができることを検証した。また、拡散モデルと対話型計算の組み合わせにより、画像空間を効率的に探索し、高品質な画像を生成することができた。

ロボティクスにおいてはco-designの枠組を提唱した。ロボットデザインにおけるco-designとは、ロボットの構造と制御を同時に最適化させる手法のことであり、特にソフトロボットの自動設計に有効である。中でも構造の最適化に遺伝的アルゴリズムを、制御の最適化に深層強化学習を用いたco-design手法は、複雑な環境にも適応できるソフトロボットを得る上で有効である。しかし従来手法では、ロボットの間でセンサーとアクチュエータの数や種類が異なるためにロボット間で学習結果を共有することは難しく、全てのロボットが一から学習を行う必要があるという問題点を持っている。そこで本研究では、深層強化学習の学習結果を転移学習によって親から子へと遺伝させるラマルク型のco-designアルゴリズムを構築した。Evolution Gymというソフトロボットのベンチマーク環境を用いて行われた実験では、コントローラの継承により全体の最適化に向上させることができた。さらに、コントローラの継承と遺伝子の交叉を組み合わせることで、いくつかのタスクで更なるアルゴリズムの改良が可能であることも確認された。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Mao Kaneyasu and Yoshihiko Hasegawa	4. 巻 107
2. 論文標題 Quantum Otto Cycle under Strong Coupling	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 44127
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoshihiko Hasegawa	4. 巻 107
2. 論文標題 Relativistic Entropy Production for a Quantum Field in a Cavity	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review D	6. 最初と最後の頁 65014
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kevin Richard G. Operiano, Wanchalerm Pora, Hitoshi Iba, Hiroshi Kera	4. 巻 9
2. 論文標題 Evolving Architectures With Gradient Misalignment Toward Low Adversarial Transferability	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 IEEE Access	6. 最初と最後の頁 164379-164393
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

1. 著者名 Tan Van Vu and Yoshihiko Hasegawa	4. 巻 3
2. 論文標題 Toward Relaxation Asymmetry: Heating is Faster than Cooling	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 43160
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Van Tuan Vo, Tan Van Vu, and Yoshihiko Hasegawa	4. 巻 55
2. 論文標題 Unified Thermodynamic Kinetic Uncertainty Relation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics A	6. 最初と最後の頁 405004
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Vo Van Tuan, Van Vu Tan, Hasegawa Yoshihiko	4. 巻 102
2. 論文標題 Unified approach to classical speed limit and thermodynamic uncertainty relation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 62132
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.102.062132	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hasegawa Yoshihiko	4. 巻 125
2. 論文標題 Quantum Thermodynamic Uncertainty Relation for Continuous Measurement	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 50601
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.125.050601	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Van Vu Tan, Hasegawa Yoshihiko	4. 巻 2
2. 論文標題 Thermodynamic uncertainty relations under arbitrary control protocols	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 13060
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.2.013060	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計9件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 9件）

1. 発表者名 Haruka Kobayashi, Adam Kotaro Pindur, Suryanarayanan Nagar AntheI Venkatesh, Hitoshi Iba
2. 発表標題 Image Generation with Diffusion Model by Interactive Evolutionary Computation
3. 学会等名 IEEE SMC 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Jinglue Xu, Suryanarayanan N. A. V., Hitoshi Iba
2. 発表標題 MPENAS: Multi-fidelity Predictor-guided Evolutionary Neural Architecture Search with Zero-cost Proxies
3. 学会等名 GECCO 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Masayuki Fujita, Hitoshi Iba
2. 発表標題 CT Reconstruction from X-ray Videos with Conditional GAN Image Translation
3. 学会等名 IIAI-AAI 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Lushen Liao, Adam Kotaro Pindur, Hitoshi Iba
2. 発表標題 Genetic Programming with Random Binary Decomposition for Multi-Class Classification Problems
3. 学会等名 IEEE CEC 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Edgar Ademir Morales-Perez, Hitoshi Iba
2. 発表標題 LSTM Neural Network-based Predictive Control for a Robotic Manipulator
3. 学会等名 ISEEIE 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Adam Kotaro Pindur, Hitoshi Iba
2. 発表標題 Behavioral Locality in Genetic Programming
3. 学会等名 12th International Joint Conference on Computational Intelligence, IJCCI 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Edgar Ademir Morales-Perez, Hitoshi Iba
2. 発表標題 Inverse Model Optimization by Differential Evolution to improve Neural Predictive Control
3. 学会等名 Joint 11th International Conference on Soft Computing and Intelligent Systems and 21st International Symposium on Advanced Intelligent Systems, SCIS/ISIS 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Adam Kotaro Pindur, Takahiro Horiba, Hitoshi Iba
2. 発表標題 Parametric Genetic Programming
3. 学会等名 Joint 11th International Conference on Soft Computing and Intelligent Systems and 21st International Symposium on Advanced Intelligent Systems, SCIS/ISIS 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kevin Richard G. Operiano, Hitoshi Iba, Wanchalerm Pora
2. 発表標題 Neuroevolution Architecture Backbone for X-ray Object Detection
3. 学会等名 2020 IEEE Symposium Series on Computational Intelligence, SSCI 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計3件

1. 著者名 Hitoshi Iba	4. 発行年 2022年
2. 出版社 CRC press	5. 総ページ数 277
3. 書名 Swarm intelligence and deep evolution	

1. 著者名 伊庭育志	4. 発行年 2022年
2. 出版社 オーム社	5. 総ページ数 227
3. 書名 Unityシミュレーションで学ぶ人工知能と人工生命	

1. 著者名 Hitoshi Iba and Noman Nasimul (eds.)	4. 発行年 2020年
2. 出版社 Springer	5. 総ページ数 450
3. 書名 Deep Neural Evolution: Deep Learning with Evolutionary Computation	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分 担 者	長谷川 禎彦 (Hasegawa Yoshihiko) (20512354)	東京大学・大学院情報理工学系研究科・准教授 (12601)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関