

令和 3 年 5 月 16 日現在

機関番号：12601

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2017～2020

課題番号：17K19961

研究課題名（和文）群分子ロボットによる学習

研究課題名（英文）Learning by Molecular Robot Swarm

研究代表者

萩谷 昌己（Hagiya, Masami）

東京大学・大学院情報理工学系研究科・教授

研究者番号：30156252

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,800,000円

研究成果の概要（和文）：本研究は、電子回路による高速な情報処理と、化学反応による低速な情報処理を融合した新たな情報処理モデルを構築することを動機とし、分子デバイスから構成される分子ロボットによって群知能を実現することを最終的な目的として、分子ロボットの群れ（群分子ロボット）をセルオートマトン（ゲルオートマトンと呼ぶ）としてモデル化し、群れの中で経路や全域木などの各種のパターンを形成する分散アルゴリズムを構成した。さらに、化学的な勾配を模倣した信号伝搬と、電子回路におけるような高速の信号伝達によって拡張されたセルオートマトンのもとで、入出力の教師データから論理回路を合成する分散アルゴリズムを構成した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

脳においては、アクソンが伸長することによりニューロン間のネットワークが形成されシナプスが変化することにより、長期的な情報処理である学習が行われる。パルスの伝達が一過性であるのに対して、アクソンの伸長やシナプスの変化においては、化学反応の影響が蓄積されネットワークの構造として定着する。このような学習の仕組みを倣って、将来的に人工的に同様の機能を分子で作られたデバイスによって実現するために、主としてセルオートマトンという数理モデルを用いて、ネットワーク形成の仕組みを構成した。

研究成果の概要（英文）：This research is intended to construct a new information processing model that combines high-speed information processing by electronic circuits and low-speed information processing by chemical reactions, and realize swarm intelligence by molecular robots composed of molecular devices. With that as the ultimate goal, a swarm of molecular robots (molecular robot swarm) was modeled as cellular automata (called a gellular automata), and distributed algorithms were constructed to form various patterns such as paths and spanning trees by a swarm of molecular robots. Furthermore, distributed algorithms that synthesize a logic circuit from input-output training data were constructed under cellular automata extended with signal propagation that imitates a chemical gradient and high-speed signal transmission as in an electronic circuit.

研究分野：自然計算

キーワード：DNAコンピュータ 分子ロボット 群ロボット 自己組織化 機械学習

1. 研究開始当初の背景

研究代表者は長年に亘って化学反応による情報処理(分子コンピューティング)に関する研究に携わって来た。化学反応による情報処理は、電子や光による情報処理に比べると極めて遅いが、その大きな特徴は、化学反応の結果として物質の物理化学的な変化が起こることである。

一方、脳においては、ニューロンの電気的なパルスがアクソンを伝わりシナプスを介して伝達されることによって短期的な情報処理が実現される。また、アクソンが伸長することによりニューロン間のネットワークが形成されシナプスが変化することにより、長期的な情報処理である学習が行われる。パルスの伝達に比べて、アクソンの伸長やシナプスの変化は非常に遅い。パルスの伝達が一過性であるのに対して、アクソンの伸長やシナプスの変化においては、化学反応の影響が蓄積されネットワークの構造として定着する。すなわち、学習が化学反応による物質の変化の定着によって実現される。

したがって、脳を参考にすれば、電子回路による高速な情報処理と、化学反応によって学習を行う情報処理を融合することにより、脳を凌駕する新たなコンピュータを構築できるのではないかと考えられる。

そこで本研究では、電子回路などの計算エージェントを媒介するメディアの中で化学反応によって空間的パターンが形成される情報処理モデルを構想した。化学反応によって形成される空間的パターンが電子回路をつなぐ通信ネットワークとなる。

現在広く利用されている人工ニューラルネットワークでは、ニューロンは階層に分類され、階層間の結線があらかじめ設定されている。学習はニューロン間の結合(シナプス)を調整することによって行われる。本研究では、分子ロボットの群れ(群分子ロボット)の中に、ニューロンに相当する計算エージェントが分散して存在し、群分子ロボットの中で形成される経路によって、計算エージェント間の通信ネットワークが実現される。したがって、計算エージェント間のネットワーク自体を自己組織化することを目指すことが、本研究の一つの特徴である。

しかしながら、以上の構想を実現するためには、化学反応による情報処理を空間的に展開することが必要となる。研究代表者は、新学術領域「分子ロボティクス」の代表として、分子ロボットの開発に取り組んで来た [1,2]。特に研究代表者たちは、スライム型ロボットと呼ぶ分子ロボットの開発を進めて来た。スライム型ロボットは、ゲルの中に分子デバイスを配置し統合することによって実現される分子ロボットである。さらに研究代表者たちは、微小なスライム型ロボットを空間的に整列させ、セルオートマトン(ゲルオートマトン)を実現する研究を進めて来た [3,4]。これはまさに群分子ロボットであり、上述した計算エージェントを媒介するメディアに相当する。

2. 研究の目的

本研究は、電子回路による高速な情報処理と、化学反応による低速な情報処理を融合した新たな情報処理モデルを構築することを動機とし、分子デバイスから構成される分子ロボットによって群知能を実現することを最終的な目的としている。そして本研究では、分子ロボットの群れ(群分子ロボット)を数理モデルとして定式化し、群れの中で経路や全域木などの各種のパターンを形成することによって学習問題を解くアルゴリズムを考案することを目指す。さらに、定式化した数理モデルを、実際に分子ロボットによって実装する方法について考察する。

3. 研究の方法

(1) ゲルオートマトンの計算能力

ゲルオートマトンは、分子ロボットの群れ(群分子ロボット)を定式化した数理モデルである。本研究では、分子ロボットによって群知能を実現するための基礎付けとして、ゲルオートマトンの計算能力を探求する。まず、ゲルオートマトンの計算万能性を示す。次に、ゲルオートマトンが分散アルゴリズムを表現する能力を確認するために、ポピュレーションプロトコルをゲルオートマトンによってシミュレートできることを示す。

(2) ゲルオートマトンによる自己安定分散アルゴリズム

(1)に引き続きゲルオートマトンを用いて、群れの中で経路や全域木などの各種のパターンを形成する分散アルゴリズムを実現する。特に、実現された分散アルゴリズムが自己安定性を満たすことを条件とする。自己安定性は、任意の初期状況から目的状況(解)に到達できることを意味しており、自己安定性が満たされれば、目的状況が外乱によって壊されても再び(別の)目的状況に到達することができる。

(3) 経路形成による論理回路の教師あり学習

3次元空間内に論理回路のパターンを形成することにより教師あり学習を行う分散アルゴリズムを定式化する。具体的には、3次元立方格子内に複数の入力ノードと複数の出力ノードが指定され、入力ノードに対する0か1の入力データと出力ノードに対する0か1の教師データの複数個の対が与えられたときに、入力ノードと出力ノードの間に、与えられた複数個の対を満たす

ような組み合わせ論理回路を形成する自己安定分散アルゴリズムを定式化する。

(4) セルオートマトンによる教師あり学習

(3)の分散アルゴリズムを3次元セルオートマトンによって実現する。そのために、化学的な勾配を模倣した信号伝搬と、電子回路におけるような高速な信号伝達をモデル化することにより、ゲルオートマトンを拡張する。

(5) 強化学習に関する考察

教師あり学習を発展させて強化学習に関して考察する。

4. 研究成果

(1) ゲルオートマトンの計算能力

(1-1) 計算万能性

(1)と(2)におけるゲルオートマトンは、非同期性、ブール総和性(状態遷移が指定された状態の隣接セルの有無のみに依存する)、非迷彩性(自分と同じ状態の隣接セルが見えない)の三つの条件を満たすセルオートマトンとして定義される。事前研究では、非同期性と通常の総和性(ブール総和性よりも弱い)を満たすセルオートマトンの計算万能性を示していたところ[4]、本研究では、三つの条件を満たすセルオートマトン、すなわちゲルオートマトンの計算万能性を示した。この成果は国際会議 Automata 2017 で発表するとともに、Automata 2017 の会議録の中で論文を出版した。さらに、会議録の論文を発展させた論文が、国際学術雑誌 Information and Computation の特集号にも採択され出版された。

(1-2) ポピュレーションプロトコルのシミュレーション

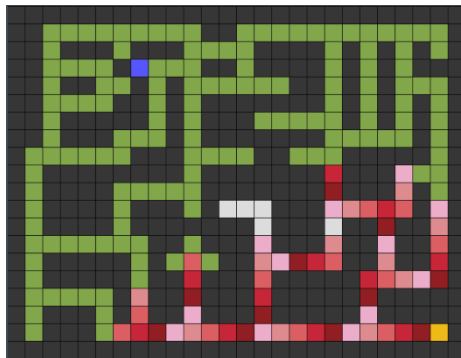
さらに、ゲルオートマトンによって、ポピュレーションプロトコルのシミュレーションを行う方法を考案した。ゲルオートマトンはスライム型ロボットを抽象化した計算モデルであり、ポピュレーションプロトコルは分散アルゴリズムの典型的なモデルである。この研究では、セルが格子ではなくグラフを構成するゲルオートマトンを用いて、ポピュレーションプロトコルのエージェントとインタラクショングラフを、セルのグラフによって実現する。インタラクショングラフが平面グラフである場合は、セルのグラフをさらに格子空間に埋め込むことができる。ポピュレーションプロトコルによって各種の分散アルゴリズムを実装することが可能であり、ゲルオートマトンも同様の計算能力を持つことがわかった。

(2) ゲルオートマトンによる自己安定分散アルゴリズム

(2-1) 迷路等の自己安定分散アルゴリズム

ゲルオートマトンによって経路や全域木などの、より具体的な各種のパターンを直接的に形成する方法について研究を進めた。そして、迷路の解である経路、距離2彩色のパターン、全域木、リーダー選択における唯一のリーダーを自己安定的に形成するゲルオートマトンを設計した。特に、極めて効率よく迷路の解を求めるゲルオートマトンを設計することができた。また、ゲルオートマトンの自己安定性の証明に関しても、厳密かつ見通し良い手法を確立させ、実際上記のゲルオートマトンの自己安定性を証明した。

自己安定ゲルオートマトンに関する以上の研究を取りまとめて、国際会議 Automata 2020 (オンライン開催)で発表するとともに、Automata 2020 の会議録の中で論文を出版した。さらに、会議録の論文を発展させた論文が、国際学術雑誌 Complex Systems の特集号にも採択され出版される予定である。こちらの論文では、距離2彩色と全域木に対するゲルオートマトンについても詳細に記述することができた。



(2-2) 自己安定性の形式的証明

自己安定性の証明に関連して、リーダー選択のアルゴリズムにおいて用いた同心波のアルゴリズムの形式的な証明を、定理証明系 Coq を用いて行った。一般的に、セルオートマトンによって実現された分散アルゴリズムの正当性は非自明であり、その正当性を形式的に証明することには意義があるが、実際に形式的な証明を実装することは容易ではない。この研究では、格子空間に関する適切な補題や格子空間の対称性に基づく証明戦略などを活用して、同心波という具体的な分散アルゴリズムの自己安定性(安全性と到達可能性)の形式的な証明に成功した。

(3) 経路形成による論理回路の教師あり学習

(3-1) 複数個の対を同時に処理する分散アルゴリズム

(3-2)に先立って、事前研究で考案した分散アルゴリズム[5]を、分子ロボットによって実装が可能になるように単純化することに注力した。事前研究で考案した分散アルゴリズムでは、入力データと教師データの複数個の対が入れ替わり与えられるようになっていたが、複数の対をベクトル化して与えることとした。また、辺の有効性を1ビットのメモリを持つプロセスによって管理することとした。以上の変更をもとに定式化した分散アルゴリズムは極めて見通しのよいものとなり、scheduler-luckによる安定性の証明も簡潔なものとなった。

なお、事前研究とこの研究では、論理回路は論理ゲートをノードとする有向グラフとして与えられており、空間的な制約は存在しない。(3-2)では3次元空間内に論理回路を構成することを試みる。

(3-2) 3次元立方格子における論理回路を学習

事前研究の分散アルゴリズムと(3-1)の分散アルゴリズムをゲルオートマトン上で実現することを目指し、これらの分散アルゴリズムを拡張して、3次元立方格子において論理回路を学習させることを試みた。3次元立方格子の各格子点に論理ゲートを配置する。論理ゲートはその状態によりANDゲートもしくはORゲートとして動作する。格子点を結ぶエッジは、結線、否定ゲートによる結線、非結線の三状態を取る。立方体の一つの頂点の近くの格子点に入力を配置し(立方体を斜めに切る)その反対に位置する頂点の近くの格子点に出力を配置する。論理回路上の信号は入力から出力に向かって流れ、学習のための信号は逆に流れる。以上の枠組みで、教師あり学習の分散アルゴリズムを定式化し、3次元立方格子内に回路が構成されることを確認した。さらに、シミュレーション実験により全加算器の学習に成功した。

上記の分散アルゴリズムでは、化学的な勾配を模倣することにより、信号の流れる方向を規定している。また、大域的な化学反応を想定して、すべての格子点に同時に情報をブロードキャストする仕組みも用いている。

(4) セルオートマトンによる教師あり学習

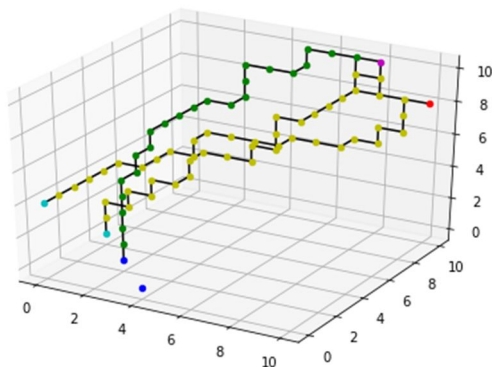
(4-1) 3次元セルオートマトンの定式化

分子ロボットの各種の物理化学的な性質(たとえば、電気伝導率、拡散係数、流路の太さなど)を活用することを想定して、ゲルオートマトンを拡張して(3)の分散アルゴリズムを実装した。なお、このようにゲルオートマトンを拡張して得られたセルオートマトンも、広い意味でゲルオートマトンと呼んでいる。

まず、化学的な勾配を模倣した信号伝搬と、電子回路におけるような高速の信号伝達を用いて、以下の方針にしたがって3次元立方格子において論理回路を学習するセルオートマトンを定式化した。

- (3-2)のモデルと同様に、入力から出力に向かう方向と出力から入力に向かう方向が区別される。すなわち、各セルは一般に入力方向の三つの隣接セルと出力方向の三つの隣接セルを持つ。
- (4)では、本研究の趣旨を保ちながらセルオートマトンを単純化するために、ORゲートのみからなる論理回路の学習を目標とした。したがって、各セルはORゲートとして動作する。
- 入力から出力への信号は電子回路におけるように瞬時に伝達すると仮定した。また、回路が構成されていなくとも、各セルは入力データ1が設定された入力セルの方向を検知できると仮定した。

以上の方針にしたがい、入力データと教師データの複数個の対が独立に一つずつ順番に繰り返し与えられたときに、出力セルが教師データと一致するOR回路を構成するセルオートマトンを構成した。



(4-2) 複数個の対を同時に処理するセルオートマトン

次に、(3-1)の分散アルゴリズムと同様に、複数の教師信号を同時に伝搬させることにより、極めて効率的に論理回路の学習を行うセルオートマトンを構成した。すなわち、入力データと教師データの複数個の対に別々のタグを与え、複数のタグを信号として同時に伝達させる。以上の想定のもとでは、セルオートマトンの状態遷移が複雑となり、(特に複数のタグを扱うため)物理化学的な実装はより難しくなるが、自己安定性を成立させることは容易になる。

(5) 強化学習に関する考察

教師あり学習から強化学習への展開については、特に上記の分散アルゴリズムに対して検討を進めた。具体的には、アクションごとに複数の出力セルを対応させ、得られた報酬によって発火する出力セルの数を調整するモデルを構想した。

< 引用文献 >

- [1] Satoshi Murata, Akihiko Konagaya, Satoshi Kobayashi, Hirohide Saito, and Masami Hagiya: Molecular Robotics: A New Paradigm for Artifacts, New Generation Computing, Vol.31, 2013, pp.27-45.
- [2] Masami Hagiya, Akihiko Konagaya, Satoshi Kobayashi, Hirohide Saito, and Satoshi Murata: Molecular Robots with Sensors and Intelligence, Accounts of Chemical Research, ACS, Vol.47, No.6, 2014, pp.1681-1690. DOI: 10.1021/ar400318d
- [3] Masami Hagiya, Shaoyu Wang, Ibuki Kawamata, Satoshi Murata, Tejiro Isokawa, Ferdinand Peper, and Katsunobu Imai: On DNA-Based Gellular Automata, Unconventional Computation and Natural Computation, 13th International Conference, UCNC 2014, Lecture Notes in Computer Science Vol.8553, 2014, pp.177-189. DOI: 10.1007/978-3-319-08123-6_15
- [4] Tejiro Isokawa, Ferdinand Peper, Ibuki Kawamata, Nobuyuki Matsui, Satoshi Murata, and Masami Hagiya: Universal Totalistic Asynchronous Cellular Automaton and Its Possible Implementation by DNA, Unconventional Computation and Natural Computation, 15th International Conference, UCNC 2016, Lecture Notes in Computer Science Vol.9726, 2016, pp.182-195. DOI: 10.1007/978-3-319-41312-9_15
- [5] 丸中愉太, 大下福仁, 萩谷昌己: 群知能を用いた経路探索による機械学習, 計測自動制御学会, 計測自動制御学会 システム・情報部門 学術講演会 2016.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7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 1件）

1. 著者名 Tatsuya Yamashita, Akira Yagawa, Masami Hagiya	4. 巻 11493
2. 論文標題 Self-stabilizing Gellular Automata	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 UCNC 2019: Unconventional Computation and Natural Computation, Lecture Notes in Computer Science	6. 最初と最後の頁 272-285
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-030-19311-9_21	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 Tatsuya Yamashita, Teijiro Isoka, Ferdinand Peper, Ibuki Kawamatad, Masami Hagiya	4. 巻 出版予定
2. 論文標題 Turing-Completeness of Asynchronous Non-Camouflage Cellular Automata	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Information and Computation	6. 最初と最後の頁 未定
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ic.2020.104539	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 Masami Hagiya and Katsunobu Imai	4. 巻 1
2. 論文標題 On the Persistency of Gellular Automata	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Reversibility and Universality	6. 最初と最後の頁 373-383
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-319-73216-9_18	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 Tatsuya Yamashita and Masami Hagiya	4. 巻 57
2. 論文標題 Simulating Population Protocols by Gellular Automata	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 2018 57th Annual Conference of the Society of Instrument and Control Engineers of Japan (SICE)	6. 最初と最後の頁 1579-1585
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.23919/SICE.2018.8492697	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 Tatsuya Yamashita, Teijiro Isokawa, Ferdinand Peper, Ibuki Kawamata, and Masami Hagiya	4. 巻 10248
2. 論文標題 Turing-Completeness of Asynchronous Non-camouflage Cellular Automata, AUTOMATA 2017	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Lecture Notes in Computer Science	6. 最初と最後の頁 187-199
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-319-58631-1_15	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 Nathanael Aubert-Kato, Charles Fosseprez, Guillaume Gines, Ibuki Kawamata, Quang Huy Dinh, Leo Cazenille, Andre Estevez-Torres, Masami Hagiya, Yannick Rondelez, Nicolas Bredeche	4. 巻 -
2. 論文標題 Evolutionary optimization of self-assembly in a swarm of bio-micro-robots	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Genetic and Evolutionary Computation Conference	6. 最初と最後の頁 59-66
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1145/3071178.3071289	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 該当する

1. 著者名 Masami Hagiya and Katsunobu Imai	4. 巻 30
2. 論文標題 On the Persistency of Gellular Automata, Andrew Adamatzky (eds) Reversibility and Universality	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Emergence, Complexity and Computation	6. 最初と最後の頁 373-383
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-319-73216-9_18	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6件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 4件)

1. 発表者名 Tatsuya Yamashita, Akira Yagawa, Masami Hagiya
2. 発表標題 Self-stabilizing Gellular Automata
3. 学会等名 International Conference on Unconventional Computation and Natural Computation (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 萩谷昌己, 矢川晃, 本宮泰河
2. 発表標題 自己安定ゲルオートマトンについて
3. 学会等名 人工知能学会合同研究会ナチュラルコンピューティング第33回研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masami Hagiya
2. 発表標題 From gellular automata to distributed algorithms
3. 学会等名 International Workshop on Natural Computing (IWNC 2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tatsuya Yamashita and Masami Hagiya
2. 発表標題 Simulating Population Protocols by Gellular Automata
3. 学会等名 2018 57th Annual Conference of the Society of Instrument and Control Engineers of Japan (SICE)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masami Hagiya, Akihiko Konagaya, Satoshi Kobayashi, Hirohide Saito and Satoshi Murata
2. 発表標題 Amoeba and Slime: Molecular Robots with Sensors and Intelligence
3. 学会等名 FOUNDATIONS OF NANOSCIENCE (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Masami Hagiya
2. 発表標題 Amoeba and Slime: Molecular Robots with Sensors and Intelligence
3. 学会等名 11th International Workshop on Natural Computing (国際学会)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔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
---------------------------	-----------------------	----

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
---------	---------