

2024 年度年次報告書

次世代 AI を築く数理・情報科学の革新

2023 年度採択研究代表者

濱崎 甲資

理化学研究所 革新知能統合研究センター

基礎科学特別研究員

2 つのブラックボックス最適化手法を応用したコストを加味した育種計画の最適化

研究成果の概要

本研究課題では、育種計画(新品種開発)における意思決定の最適化を目指している。育種計画には、どの個体を選抜し、選抜した個体同士をどのように交配させ、各交配組に次世代個体を何個体ずつ割り当てるかなど、多岐にわたる意思決定が含まれる。これらの選抜・交配・割当戦略には限りなく無数に近い組合せが存在するため、本研究ではまず育種シミュレーションを用いて各戦略の評価を行う。具体的には、コンピュータ上の仮想的な育種家に各サイクルで最適な行動を選択させ、選抜強度や次世代個体の割当数に関わるパラメータを最適化することで、最終世代における遺伝的改良程度を最大化することを目指す。この育種過程は入力と出力のみが既知である確率的なブラックボックス関数として扱えるため、ブラックボックス最適化を応用することが可能である。前年度までの研究では、育種シミュレーションとブラックボックス最適化をうまく統合することで、割当戦略の最適化を実現した(原著論文 1)。これにより、専門性の高い育種家を頼らずとも、誰にでも交配戦略を自動的に決定するための基盤を整えることに成功してきた。しかし、計算時間や最適化可能なパラメータ数などの問題から同手法は未だ多くの課題を抱えていると言える。

本年度は、上記を念頭に置き、より柔軟で高速な最適化手法の開発に取り組んだ。具体的には、自動微分という技術を応用して育種シミュレータを微分可能な形で実装した。自動微分では、シミュレータの各操作を微分可能な形で実装することにより、シミュレータ全体の勾配情報を計算できる。本研究では、育種シミュレータを `PyTorch` で微分可能な形で実装し、新品種の遺伝的能力に関する交配戦略パラメータの勾配情報を計算可能にした。各交配組への次世代個体数の割り当てには不連続な操作が生じるが、`Gumbel-softmax` 関数を用いて育種過程を近似することでこの課題を解決した。さらに、得られた勾配情報を勾配法に応用することで、交配戦略の最適化を実現した。その結果、最適化した交配戦略が最適化を行わない場合と比較して優れた成果を示すことが明らかになった。これらの研究成果は国内学会で口頭発表を行い、現在は海外ジャーナルへ投稿中(原著論文 2)である。本研究は今後、深層学習などと組み合わせることでより柔軟な最適化が可能になると期待される。これにより、育種シミュレーションを用いた意思決定の現状を大きく変革できる可能性がある。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Hamazaki, K. Iwata, H. AI-assisted selection of mating pairs through simulation-based optimized progeny allocation strategies in plant breeding, *Frontiers in Plant Science*, **15**, 1361894, (2024).
- 2) Hamazaki, K. Iwata, H. Tsuda, K. Differentiable breeding: Automatic differentiation enables efficient gradient-based optimization of breeding strategies, *bioRxiv*, 2024.11.29.625951, (2024).