

AI と質量分析はどのように関わることができるのか？

安藤 宏明

ナノコードシステムズ 代表

1. はじめに

近年 AI（人工知能）という言葉が頻繁に耳にするようになり、将棋や囲碁など、その処理の複雑さゆえにしばらくは人間の方が有利だと思われたが、あっという間に追い抜かされたり、翻訳、カメラによる顔認証、車の自動運転など身近なものにも使われるようになってきている。

しかしながら内部でどのような処理が行われているかは全く知られておらず、あたかもすべての分野が人工知能によって置き換わるかのような表現が多く人工知能という魔法の言葉が独り歩きしているようにも思える。

人工知能の中で行われていることを今一度理解し、質量分析への応用を考察した。

2. なぜ人工知能が急に話題になってきたのか？

実際のところ何が人工知能なのかという明確な定義はなく、人工知能は広義の意味で使われている。また人工知能の考えは1950年代から存在し、現在は1960年代、1980年代に続く第3次目のブームである。人工知能に使われるニューラルネットワークやボルツマン機械学習の原理は1980年代には存在していた。

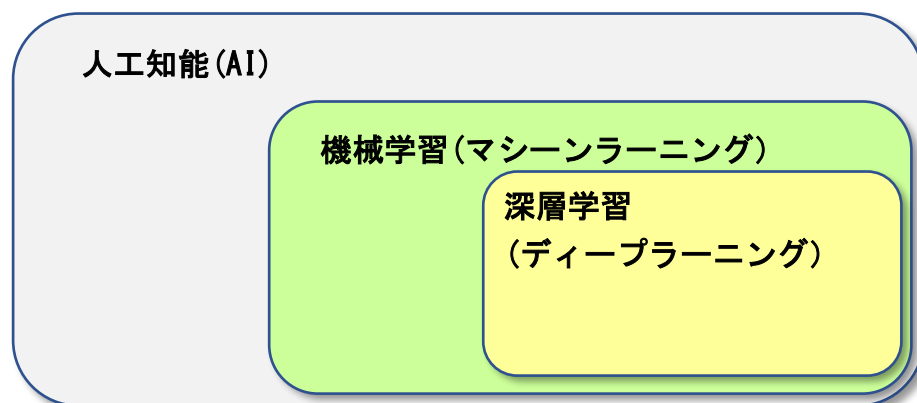


図 1. 人工知能と機械学習、深層学習の関係

では、なぜ最近になって急に騒がれるようになったのか？その理由は「速い・安い・多い」だ。

速い	CPU の速度が速くなった (20 年前 200MHz、現在 4GHz 約 20 倍)
安い	ワークステーションの価格が安くなり、Linux といったオープンソースの登場で高性能の環境がだれでも使えるようになった
多い	インターネットの登場で大量の情報が手に入るようになった。また通信速度も向上し、ハードディスクやメモリといった記憶媒体が大容量かつ安価に入れられるため、データ量に制限がなくなった。

図 2. 人工知能発展の要因

つまり人工知能の盛り上がりは新しい理論の発見によるものではなく、ハードウェアや通信環境の向上によるものである。また現時点では汎用性のある人工知能のアルゴリズムやロジックがあるわけではなく、それぞれの目的にあったアルゴリズムが必要になる。さらに言えばアルゴリズム (=プログラム) を考えるのは人間で、大量のデータ使って「機械学習」を用いて最適に近い計算方法を導きだしている。最適な解が何であるかは人間が決めていて、人工知能はその計算方法に従って計算しているだけなので、「知能」という言葉には抵抗がある。

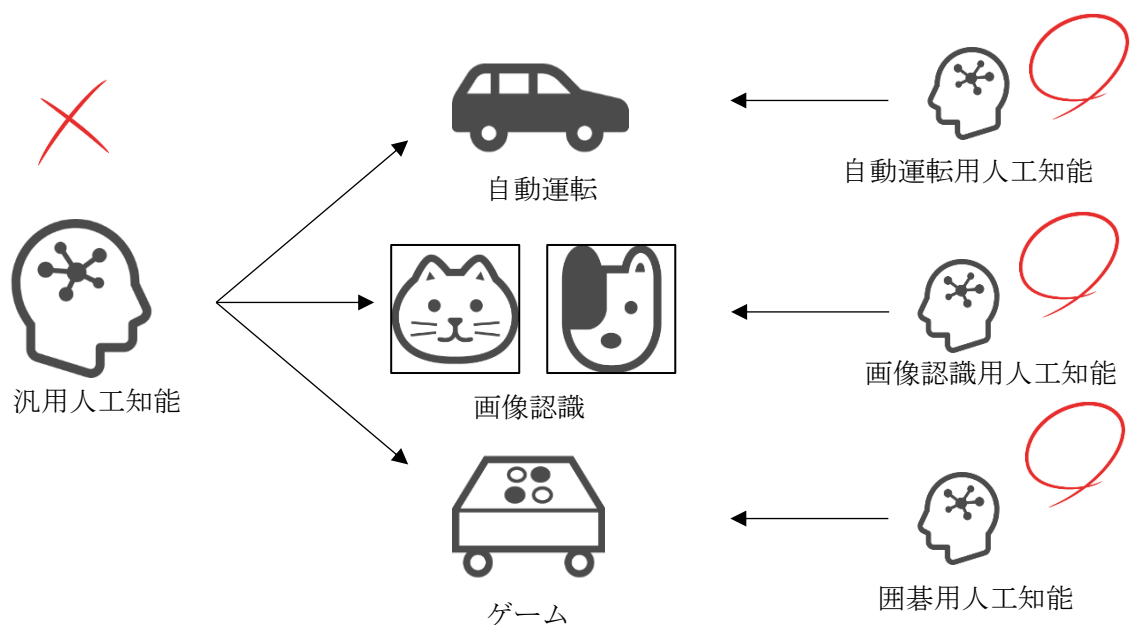


図 3. 人工知能の汎用性

3. 人工知能を作成するには

ここからは人工知能という表現ではなく、機械学習として何が必要でどのようにアルゴリズムを組み立てるのか説明したい。必要なものは、

①「何がしたいのか」という目的

自動運転がしたい、囲碁で勝ちたい、翻訳がしたいなど。目的は結果が 01 (ゼロイチ) で分けられて、人間が結論を知っていないと作ることが難しい。「将来役立つものを教えて欲しい」とか、「便利なものを作って欲しい」などは、答え

がなく方向性もないため、作ることはできない。

②大量の過去データ

機械学習はゼロから作るのではなく、インターネットなどにある過去のデータを参考にしているので、データがないものは作ることができない。

例えば「人を感動させる絵を描く」というのは、データからある程度予測がつきそうだが、「今まで見たこともない感度的な絵を描く」というのは不可能である。

例として猫の写真の画像認識を考える。この場合猫の写真を見分けるというのが①「何がしたいのかという目的」となる。次に②「大量の過去データ」として画像が必要となる。写真には猫が写っているよ！という情報が必要になる。この方式を「教師あり学習」という。

人間の赤ちゃんと同様にコンピュータにも「これは猫だよ」と教えてあげなければ全く何も進まない。「これは猫だよ」という情報がないところから、写真を分類する方法を探し、後から「これは猫の写真が多く含まれているよ！」と決める方法もある。この方式を「教師なし学習」という。

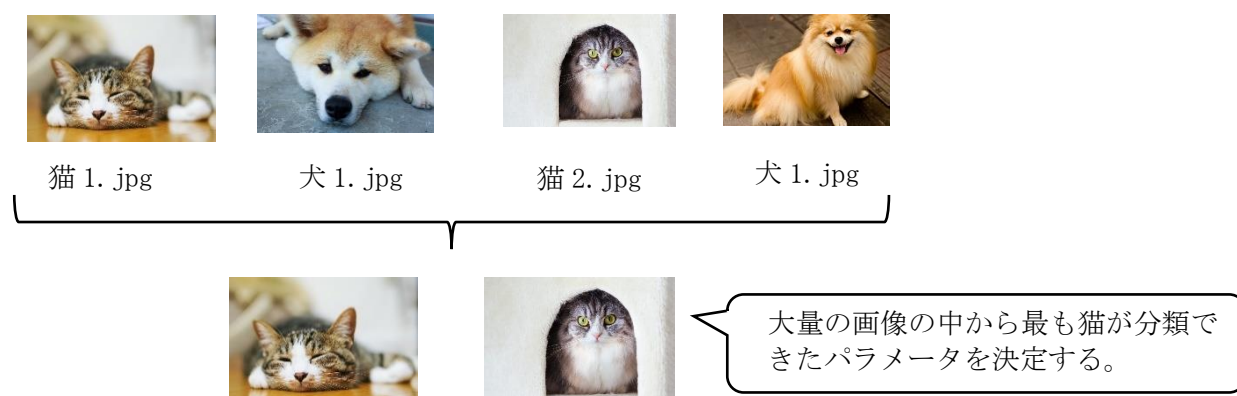


図 4. 教師あり学習による猫の画像の抽出

猫の写真の各パーツ（目、鼻、耳、毛のタイプ）をどのようにして認識してパラメータ化するかは省略するとして、おおよその機械学習の方法は下記のようなになる。

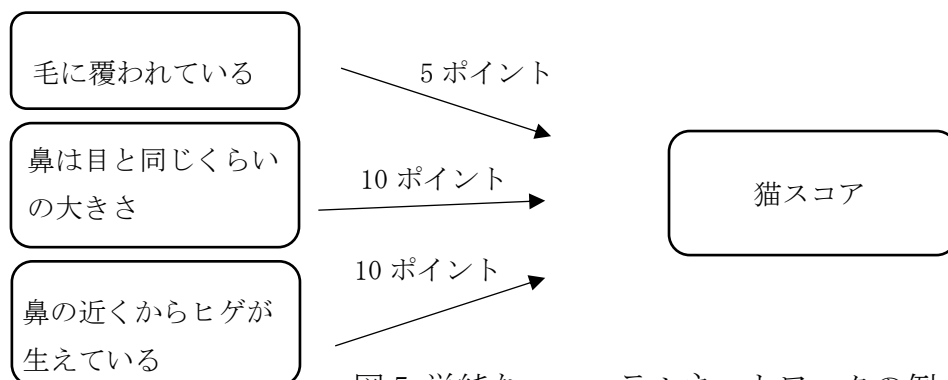


図 5. 単純なニューラルネットワークの例

実際にプログラムするときには鼻や目など「猫の特徴って何だろう？」と考えながらパラメータを作ることでもできるし、まったくヒントもなしに画像の画素情報に何らかの式で数値を変えて、それを足したり引いたりして「猫スコア」を出こともできる。これをすべてのデータで行い最終的に最も猫の画像を分けることができた数式と係数を見つけ出している。これが機械学習である。画像が多いほどその精度が上がるので大量の画像が必要となる。

式が単純すぎるとうまく猫の画像を分類することができないため、猫スコアを出すための計算方法を複雑にしたり、層を増やしている。これがニューラルネットワークでニューラルネットワークは脳の神経回路を模しているためそのように呼ばれている。この層が複数あるものが多層ニューラルネットワークであり、多層ニューラルネットワークを使った機械学習が「深層学習（ディープラーニング）」と呼ばれている。

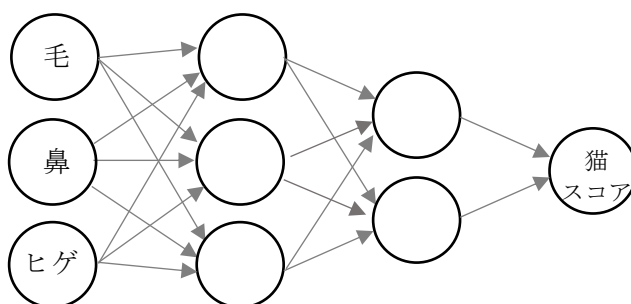


図 6. 多層ニューラルネットワークの例

4. 質量分析に応用すると

人工知能を検索すると翻訳や画像認識の例が非常に多い。なぜならインターネットには無数の画像や文章があふれており、機械学習に必要なデータが簡単に手に入る。また何が回答なのかも比較的単純で、テスト用のデータとして写真を集めてそこから猫の写真だけを抽出したり、文章であれば翻訳結果を読めば、どの程度期待した結果が得られたか判断が付きやすい。

ここから質量分析の応用の可能性を考えてみる。あくまで人工知能を応用するとしたら？という仮定のステップであるため、実際の分析に応用したものではなく、ステップも例として理解していただきたい。

質量分析は、大きく分けて定性と定量の 2 つの目的に分けられるが、定性を例として考えてみる。物質同定ではなく、もっとあいまいな目的として例えば「おいしい食べ物を判別する」人工知能を考えてみる。

次にデータが必要になるため、人がおいしいと判断したサンプルをひたすら Liquid Chromatography/Mass Spectrometry (LC/MS) や Gas Chromatography/Mass Spectrometry (GC/MS) で測定する。特定の物質を検出することを目的としていな

いので、まずは同じ条件でひたすらサンプル数を集めることになる。サンプルには、おいしいと感じた人の割合などをデータとして記録する。

ファイル名	おいしいと思った人の割合
file001_80	80%
file002_20	20%
...	...

図 7. ファイル名と割合の分類

次に元データを分解する。質量分析で得られるデータは m/z 、強度、RT の 3 つになるが、ここでは特定の物質に注目しておいしさを判断するわけではないので、例えば Retention Time (RT) と m/z ごとに分けて機械学習が読み込めるデータを作る。

得られたピークの数争先ほどの多層ニューラルネットワークの元の値として使い、スコアが実際においしいと感じた人の割合と近い値になる計算式をできるだけたくさんのデータを用いて導き出す。(この部分は機械化されているのでひたすらデータを測定して流し込むだけになる)

ファイル名:file001_80

No.	RT(min)	m/z の範囲	ピークの数
1	0-1.0	0-50	43
2		50-100	52
3		100-150	25
4		150-200	12

⋮

17	4.0-5.0	0-50	23
18		50-100	65
19		100-150	23
20		150-200	87

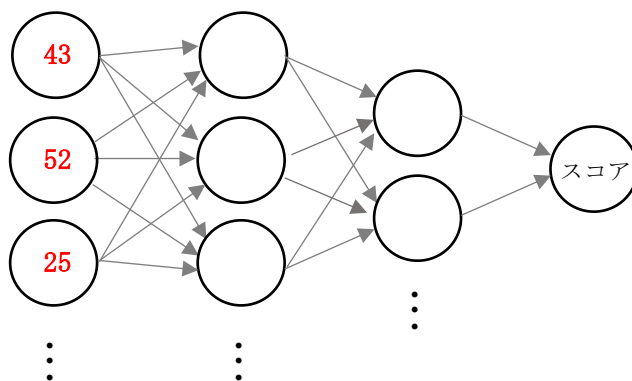


図 8. データの分類例とニューラルネットワーク

ピークの数からどのようにして「おいしいスコア」に変換するかは $y=ax$ や $y=ax^2$ のような関数ではうまく分類できないため、非線形関数が用いられている。

この計算をはじめから作ることもできるが、知識や経験を必要とするため既存のソフトウェアも存在する。例として Google のチームが開発した TensorFlow™(テンソルフロー) がある。TensorFlow™はオープンソフトウェアであるため無料で利用することができる。

<https://www.tensorflow.org/> (Apache 2.0 ライセンス)

5. まとめ

人工知能という言葉があまりに多用される中、多くの人々が過度の期待と不安を持たれていると思われる。どの分野においてもイメージと実際はかけ離れていることがあるが特に IT の分野は新しい言葉が短い期間で登場しては消え、とっつきにくいところが多い。正しい知識を持って冷静に判断し、利用できるところは利用していきたい。

参考資料)

1. 大関真之:機械学習入門 -ボルツマン機械学習から深層学習まで- . オーム社
ISBN 978-4-274-21998-6

2. 日経ソフトウェア 2018 年 1 月号 日経 BP 社 ISSN1347-4685