

分析化学における人工知能



満 塩 勝

1 はじめに

近年、将棋や囲碁ではコンピュータが世界トップレベルの棋士に勝てるようになり、スピーカーや携帯電話が人語を認識して会話し、ペット型ロボットが人の顔を認識して行動し、自動車が周囲の状況を理解して自動でブレーキをかけるなど、人工知能 (artificial intelligence; AI) の発達がめざましく、急速に生活に浸透し始めている。AIにも様々な種類があるが、その中で中心となっているのが、1943年の研究に端を発するニューラルネットワークと呼ばれる神経回路モデルに基づいて構築されたシステムである¹⁾。

ニューラルネットワークは図1に示すように信号を入力する入力層 (input layer)、結果を出力する出力層 (output layer)、および学習において重要な役割を果たす隠れ層 (hidden layer) から構成され、各層はノード (ニューロンやユニットとも呼ばれる) の集合体で構成される¹⁾²⁾。一つのノードは、単純に言い換えれば一つの入力用変数となる。また、隠れ層は1層とは限らず、複数層用いる場合も多い。各ノードに入力された値は、それぞれのノード間に設定された荷重 w をかけて総和を取り、これにしきい値 θ を加えたものを変数とする出力関数 f の値として次層の各ノードに入力される¹⁾²⁾。出力関数は活性化関数とも呼ばれ、一つ以上の隠れ層を持つニューラルネットワークにおいては非線形関数が用いられる。この演算を1層ずつ伝搬させていき、最終的な計算値が出力層の各ノードに出力される。このとき、出力層のすべてのノードの値が望む値に近づくように荷重 w を調整することを学習とよび、特に2層以上の隠れ層を持つものに対する学習については深層学習 (ディープラーニング) と呼ばれる。AIの学習とは入力層と出力層の非線形マッピング²⁾と表現することもできる。本稿では、このニューラルネットワークの化学研究への応用について話題を提供する。

2 ニューラルネットワークの学習と化学分析への応用

光時間領域反射計測法 (optical time domain reflectometry; OTDR) は、光ファイバーの一端にパルス光を入射させ、後方散乱や急激な屈折率変化に起因するフレ

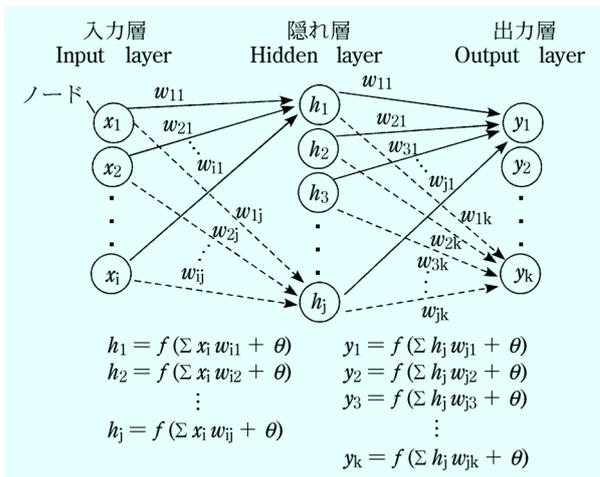


図1 ニューラルネットワークの概念図

ネル反射による戻り光の強度変化を時間分解し、光の伝達距離と光路の状態に関する知見を得る手法である³⁾。Kingらは、この手法を利用して図2のようなセンサー素子を複数持つ多点光ファイバーセンサーシステムを構築し、試料の種類とそれが接触しているセンサー番号について、ニューラルネットワークを用いた特定を試みた⁴⁾。学習の単純化のためか実験にはセンサー1と2のみが用いられ、センサー3は使用されていない。このセンサーシステムのセンサー1と2を空気、エタノール、水に接触させたときのOTDRトレースについて、出力層の六つのノードを三つずつ2組に分けてセンサー1, 2に対応させ、空気が001, エタノールが010, 水が100と出力するように、図1のような3層のニューラルネットワークを用いて学習させた。表1にセンサー1と2に接触させた試料と学習させた値、および実際の出力された値を示す。おそらく最終的な出力も非線形関数を通してため、厳密に0と1にはなっていないが、学習パターンと非常によく似た出力が得られ、試料とセンサー番号の特定に成功した。また、Kingらは後の論文においてセンサー数を五つに拡張し、同様の手法を用いてすべてのセンサーに対する屈折率の組み合わせを特定することにも成功しており、複雑な条件においてもニューラルネットワークが利用できることを示している⁵⁾。

また、Liらはアセチルチオコリンの酵素による呈色を伴う加水分解反応を有機リン系農薬が阻害することを利用して、有機リン系農薬であるジクロロボス (2,2-dichlorovinyl dimethyl phosphate) の検出を試みた⁶⁾。検出には比色分析を用い、始めに酵素反応溶液に濃度既知のジクロロボスを添加した場合の色をスキャナで撮影し、黄色成分の強度とジクロロボス濃度の関係をニューラルネットワークに学習させた。次にキャベツに散布したジクロロボスの残留濃度をニューラルネットワークを用いて推定し、ガスクロマトグラフィーによる分析とほぼ同じ結果が得られることを示した。

これらの研究では隠れ層のノード数と分析精度や学習効率に関する検討も行っており、必ずしもノードが多ければ良いというわけではなく、実験内容に即した最適な数が存在する可能性を示唆している。

3 現在のニューラルネットワークが持つ欠点

ニューラルネットワークは便利な分析の補助システム

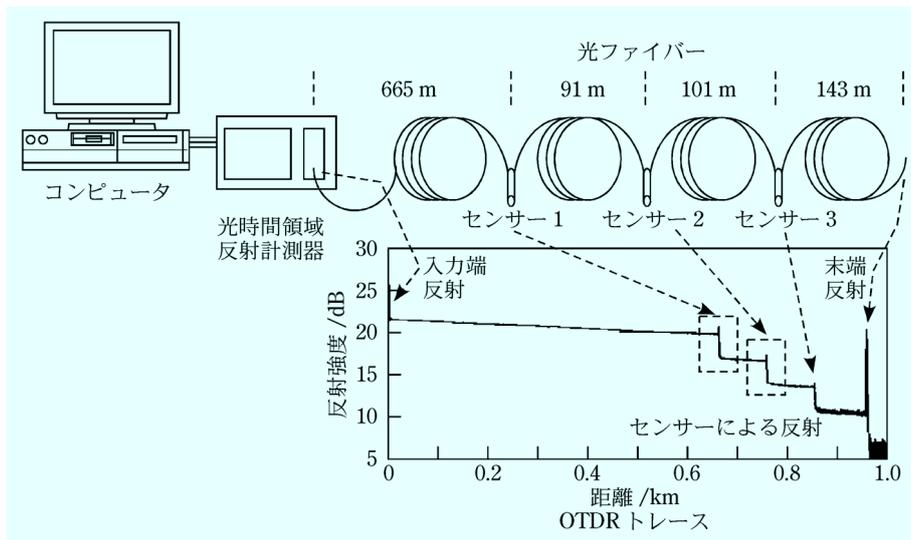


図2 Kingらの多点光ファイバーセンサーシステム

表1 各試料の組み合わせに対する学習値とニューラルネットワークによる出力

センサー1	センサー2	学習値	ニューラルネットワークによる出力
空気	空気	0 0 <u>1</u> 0 0 <u>1</u>	0.023 0.032 0.945 0.051 0.002 0.947
空気	エタノール	0 0 <u>1</u> 0 <u>1</u> <u>0</u>	0.023 0.032 0.945 0.031 0.956 0.013
空気	水	0 0 <u>1</u> <u>1</u> <u>0</u> <u>0</u>	0.023 0.032 0.945 0.931 0.061 0.008
エタノール	空気	0 <u>1</u> <u>0</u> 0 0 <u>1</u>	0.017 0.961 0.022 0.023 0.032 0.945
エタノール	エタノール	0 <u>1</u> <u>0</u> 0 <u>1</u> <u>0</u>	0.017 0.961 0.022 0.031 0.956 0.013
エタノール	水	0 <u>1</u> <u>0</u> <u>1</u> <u>0</u> <u>0</u>	0.017 0.961 0.022 0.931 0.061 0.008
水	空気	<u>1</u> <u>0</u> <u>0</u> 0 0 <u>1</u>	0.970 0.021 0.009 0.051 0.002 0.947
水	エタノール	<u>1</u> <u>0</u> <u>0</u> 0 <u>1</u> <u>0</u>	0.970 0.021 0.009 0.017 0.961 0.022
水	水	<u>1</u> <u>0</u> <u>0</u> <u>1</u> <u>0</u> <u>0</u>	0.931 0.061 0.008 0.970 0.021 0.009

*解説用に文献4の表をアレンジ

になり得るが、ある程度の分析精度を得るためには膨大な量の学習が必要である⁷⁾。また、学習の教材の質も極めて重要である。ニューラルネットワークを適切に学習させるには一つの研究における実験回数は決して十分とは言えないため、現在は「化学研究を行いついでに学習」とはいかず、「人工知能を学習させるための研究」のほうが大勢を占めている段階である。この「正しく学習させる教材」について、島津製作所と富士通、富士通研究所の共同研究グループは、質量分析計のピークピッキングにおける学習データ作成のための技術開発を行った⁸⁾。研究グループは、この技術で学習を行ったニューラルネットワークによる自動ピークピッキングの結果が熟練作業者の分析結果に遜色がない可能性があるとして高く評価しており、分析化学におけるニューラルネットワークの学習と利用について一石を投じている。

4 おわりに

本稿では、AIとしてニューラルネットワークを用い、さらにその中で分析化学的応用に絞った例を取り上げた。それ以外にもAIの利用に関する研究は非常に多いが、AIの学習効率の向上や使用法について模索している段階であり、本格的に化学分野で応用されるにはまだ時間がかかると感じている。しかし、AI自身がニューラルネットワークを構築できるようになりつつあるため⁹⁾、それほど遠くない将来に、高い思考能力を持ち我々の研究を高レベルでアシストし得るAIの登場が大いに期待できる。

文 献

- 1) 船橋賢一：計測と制御, **30**, 280 (1991).
- 2) Y. LeCun, Y. Bengio, G. Hinton : *Nature*, **521**, 436 (2015).
- 3) 日本電信電話株式会社：NTT 技術ジャーナル, **18**(10), 53 (2006).
- 4) D. King, W. B. Lyons, C. Flanagan, E. Lewis : *Sens. Actuators A*, **115**, 293 (2004).
- 5) D. King, W. B. Lyons, C. Flanagan, E. Lewis : *Sens. Actuators A*, **136**, 144 (2007).
- 6) Y. Li, C. Hou, J. Lei, B. Deng, J. Huang, M. Yang : *Anal. Sci.*, **32**, 719 (2016).
- 7) R. Rodriguez-Fernandez, F. B. Pereira, J. M. C. Marques, E. Martinez-Nunez, S. A. Vazquez : *Comput. Phys. Commun.*, **217**, 89 (2017).
- 8) 2017年11月13日プレスリリース, 島津製作所, (2017), <https://www.shimadzu.co.jp/news/press/n00kbc000000eb0f.html> (2018年4月20日, 最終確認)
- 9) The Official NVIDIA Blog, NVIDIA, (2018), <https://blogs.nvidia.com/blog/2018/01/12/an-ai-for-ai-new-algorithm-poised-to-fuel-scientific-discovery/> (2018年4月20日, 最終確認)



満塩 勝 (Masaru MITSUSHIO)

鹿児島大学学術研究院理工学域工学系 (〒890-0065 鹿児島県鹿児島市郡元1-21-40)。鹿児島大学大学院理工学研究科博士後期課程修了。博士 (工学)。《現在の研究テーマ》表面プラズモン共鳴現象を利用したセンサーシステムの開発。《趣味》パソコンをいじること、猫をかawaiiがること。E-mail : mitsushio@cb.kagoshima-u.ac.jp