



## 株式会社岛津制作所

# 利用人工智能技术分析质谱仪数据 让高度劳动密集型流程实现自动化

作为一家从事专业分析测试仪器开发与销售的公司，岛津制作所面向医药品、食品·饮料、大气·水·土壤等领域提供了专用的质谱仪产品，并致力于提高质谱仪测量波形峰值提取<sup>(注1)</sup>数据的解析精度。2016年11月，岛津制作所联手富士通、富士通研究所共同启动了人工智能(AI)活用方面的研究。3家公司共同开发了“自动生成训练数据，提高深度学习水平的技术”与“将测量数据转换为图像，对波形轮廓进行识别的技术”，并由此通过AI实现了峰值提取作业的自动化。

“富士通与富士通研究所在掌握质谱分析的背景基础上，结合了我们特殊需求，并给予了认真的对应。3家公司紧密协作，让此前由熟练操作人员执行的峰值提取工作实现自动化。

株式会社岛津制作所  
分析测量事业部  
副事业部长兼技术部长  
西本龙树

样品离子化并进行超高速扫描、对获得的波形数据峰值(尖端部分)的位置及高度进行测量的专业仪器。由于测量的精度取决于准确掌握峰值的程度，因此如何在短时间内从杂乱的波形中准确地找到峰值是一大挑战。

“血液等生物样本受混在一起的各种物质影响，会有‘噪音’附着在波形上。”岛津制作所分析测量事业部副业务部长兼技术部长西本龙树先生说道。而为了减少噪音，需要恰当地设定数十个参数，而仅靠分析装置及专用解析软件的自动设定功能，往往会出现无法进行处理的情况。结果只能由熟练的操作人员边查看专用解析软件的画面，边通过手动识别峰值位置，这给研究人员及现场工作人员造成了巨大的负担。

## 复杂成分样本的质谱分析数据解析 必须通过手动进行调整

株式会社岛津制作所(以下简称“岛津制作所”)是一家全球性企业，为测量仪器、医疗设备、航空设备、工业设备等各个领域提供产品及服务。在按业务划分的销售额中，测量仪器部门以61%(2016年度)位居首位。岛津制作所的高性能分析仪器广泛应用于各类产业的研究、技术开发及品质管理。

高效液相色谱质谱联用仪作为分析仪器之一，可以准确地测量物质中所包含的化合物分子的种类和数量，是一种可以将

## 自动生成深度学习专用训练数据 通过数据图像化对波形轮廓进行解析

“针对波形数据处理的问题，我们与在PC采购等方面有长期合作的富士通进行了讨论，并邀请人工智能平台FUJITSU Human Centric AI Zinrai的团队前来公司，开始推进共同研究。”西本先生回忆道。我们都认为，也许可以通过AI的灵活应用，来实现峰值提取及分析作业全部工序的自动化，而这难以通过仪器及

(注1) 峰值提取是指从质谱仪所获得的数据(图表)中读取波形(峰值)的宽度及高度的工序。

软件的改良来实现。

但是, "由于质谱仪是一种使用者较少的特定用途产品, 我们认为如果仅仅是导入一般的AI, 根本无法简单地解决问题。" 西本先生回顾道。因此, 岛津制作所采用了与富士通、富士通研究所进行合作研究的方式, 将3家公司各自擅长的质谱分析手法、质谱仪技术及AI深度学习技术(Deep Learning)结合在一起进行探讨。

合作研究始于2016年11月。时任岛津制作所团队负责人的基础技术研究所AI解决方案部门解析组团队副主任金泽慎司先生表示:"在对深度学习所需训练数据的条件及将深度学习应用于化学分析的条件等进行讨论的同时, 双方互相提供建议, 共同尝试了各种方法。"

经过反复试错, 针对AI的应用课题于2017年6月迎来了曙光。富士通及富士通研究所的团队发现, 将测量结果的数值转化为图像, 利用数据测量波形轮廓能够实现指定的精度。此外, 岛津制作所的团队也开发出了"自动生成训练数据, 通过深度学习提高效率的技术。"通过利用约3万多份图像数据进行深度学习, 成功提高了峰值提取精度。

截至2017年11月, AI自动峰值提取技术已经可在数秒内完成熟练技术人员需耗费2小时左右才能完成的操作。若以拥有10年以上经验的熟练操作人员的操作结果为准, 已经达到了误检率7%、漏检率9%的精度, 完全不逊于熟练操作人员的水平。通过将深度学习植入专用解析软件, 成功地以操作人员同等的精度, 实现了峰值提取自动化。此外, 还消除了不同操作人员带来的分析精度差异。

### **削减峰值提取所需工作量及时间, 复制熟练操作人员技术实现品质提升**

"富士通及富士通研究所的各位专家听取了我们公司的特殊需求, 并给予了认真的对应。"针对双方合作研究所取得的划时代成果, 西本先生给出了积极的评价。

该技术计划于2018年6月率先应用于由岛津制作所与大阪大学合作开办的"大阪大学·岛津分析创新联合实验室", 并将对应用过程中的反馈做出相应调整, 最快可在2019年春作为专用解析软件产品实现商品化, 并计划以多种模式对外提供。"商品化过程, 我们仍将与富士通、富士通研究所共同完成。" 西本先生总结道。

峰值提取自动化将有望减少操作所需的工作量及时间。在减少研究人员和现场工作人员负担的同时, 可将节省的时间用于各自领域的研究开发。制药公司可以通过将自动峰值提取纳



入药物开发过程, 从而更有效地开展新药研究。将质谱仪和自动峰值提取功能相结合, 也将有望丰富人们的生活。

#### 客户档案

#### 株式会社岛津制作所

地址: 京都市中京区西京桑原町1番地  
成立时间: 1917年  
员工人数: 11,528人(截至2017年3月31日)  
官方网站: <https://www.shimadzu.co.jp/>