



株式会社島津製作所 様

共同開発した人工知能技術を質量分析装置に適用 手作業が多かったピークピッキングを自動化

医薬品や食品・飲料、大気・水・土壌などを調べる質量分析装置を開発・販売する島津製作所は、質量分析装置から得られる測定結果の波形からピークピッキング^(注1)するデータ解析の精度向上に取り組んでいた。2016年11月に人工知能(AI)を活用した研究を富士通、富士通研究所と共同でスタート。3社は「不足する教師データを自動生成して深層学習技術をもつ技術」「測定データを画像に変換して波形の輪郭を調べる技術」を共同開発することにより、AIによるピークピッキング作業の自動化を実現。

「富士通と富士通研究所は、質量分析の背景を理解して特殊な要望も受け止めて真摯に対応していただきました。3社間で補完しあうことで熟練作業者のピークピッキング技術の自動化に向けて取り組んでいます。」

株式会社島津製作所
分析計測事業部
副事業部長 兼 技術部長
西本竜樹 様

複雑な成分サンプルの質量分析のデータ解析には 手動による調整が必須

株式会社島津製作所様(以下、島津製作所)は、計測機器・医用機器・航空機器・産業機器の各領域でグローバルに製品とサービスを提供している企業です。事業別の売上高では、計測機器部門が61%(2016年度)と最大です。同社の高性能な分析機器は、様々な産業で研究・技術開発・品質管理に使用されています。

そうした分析機器の一つに、モノに含まれる化合物分子の

種類と量を正確に測定できる高速液体クロマトグラフ質量分析装置があります。サンプルをイオン化して超高速でスキャンし、得られた波形データ内のピーク(とがった部分)の位置と高さを測るという装置です。測定の精度はピークをどれほど正確に把握できるかによって決まるため、雑然とした波形の中からピークをいかに正確かつ短時間に発見するかが課題になっていました。

「血液のような生体サンプルでは、混在している様々な物質の影響によって“ノイズ”が波形に乗ってしまいます」と語るのは、島津製作所 分析計測事業部 副事業部長 兼 技術部長 西本竜樹様。ノイズを抑えるためには数十にも及ぶパラメータを適切に設定する必要があり、分析装置や専用解析ソフトウェアの自動設定機能では対処できないことも多かったそうです。その結果、専用解析ソフトウェアの画面を見ながらピークの位置を熟練作業者が手作業で指定しなければならず、研究者や現場にとって大きな負担となっていました。

(注1) ピークピッキングとは、質量分析計で得られたデータ(グラフ)から波形(ピーク)の幅や高さを読み取る工程。

共に創りあげた深層学習用の教師データを自動生成で 増やし画像化することで波形の輪郭を解析

「波形データ処理の課題について、弊社の社長がPCの調達などで長いお付き合いがあった富士通に相談したことから話が始まり、AI技術を体系化したFUJITSU Human Centric AI Zinrai(ジンライ)を手がける方々が当社にお越しになったことからこの共同研究が始まりました」と西本様は振り返ります。AIを活用して、装置やソフトの改良では実現が難しかったピークピッキングや分析作業の全工程を自動化ができるのではないかと考えたのです。

ただし、「質量分析装置は絶対数が少ない特定の用途向けの製品なので、一般的なAIの導入だけでは簡単に解決しそうもないと思っていました」と西本様は振り返ります。そこで、島津製作所と富士通、富士通研究所で共同研究を行うことで質量分析手法と装置のノウハウとAIの深層学習(ディープラーニング)のノウハウを3社それぞれが持ち寄って検討を進めることになりました。

共同研究は2016年11月に始まりました。島津製作所側のチームリーダーを務めた基礎技術研究所 AIソリューションユニット 解析グループ 副主任 金澤慎司様は、「ディープラーニングに必要な教師データの条件やディープラーニングを化学分析に適用する条件などを議論しながら、互いに提供することで様々な技法を共に試しました」と語ります。

試行錯誤を繰り返し、AI活用の解決に至る光が見え始めたのは2017年6月。測定結果の数値を画像に変換して、データで波形の輪郭を調べると特定の精度が担保されることを富士通と富士通研究所のチームが突き止めました。また、島津製作所のチームも「不足する教師データを自動生成して深層学習で効果を高める技術」を開発。約3万数千件の画像データで深層学習を行った結果、ピークピッキングの精度を高めることに成功しました。

2017年11月時点でAIによる自動ピークピッキングは、熟練技術者が2時間程度かけていた作業を数秒で処理。精度は、10年以上の経験を持つ熟練作業者の作業結果を基にして誤検知率が7%、未検知率が9%という熟練作業者に比べて遜色ないレベルまで達しています。この深層学習を専用解析ソフトウェアに組み込むことによって熟練作業者と同等の精度で、ピークピッキングの自動化に成功しました。また、作業によって生じていた解析の確度の差も均一化することができました。



ピークピッキングの工数と時間を削減し ベテラン作業者の技を再現して品質向上

「富士通、富士通研究所の方々には、当社の特殊な要望を受け止めて、真摯に対応していただきました。」島津製作所と富士通、富士通研究所の共同研究が画期的な成果をあげられた主な要因を、西本様はこのように分析しています。

2018年6月には、島津製作所と大阪大学が設置している「大阪大学・島津分析イノベーション共同研究講座」でのトライアルが始まる予定です。共同研究講座からのフィードバックを反映して、早ければ2019年春にも専用解析ソフトウェアのオプション機能として製品化、様々なパターンで提供される見通しです。「製品化の工程でも富士通、富士通研究所と一緒に取り組んでいきたいと思っています」と西本様は締めくくります。

ピークピッキングを自動化することによって作業に要する工数と時間の削減が期待されます。研究者や現場の負担が軽減されると同時に、削減された時間を各自の研究開発に充てることができます。製薬メーカーの場合は、創薬プロセスに自動ピークピッキングを取り入れることによって新薬の研究をより効率的に行うことが可能に。質量分析装置と自動ピークピッキング機能の組み合わせは、人々の生活を豊かなものにするためにも役立つことでしょう。

お客様情報

株式会社島津製作所

所在地: 京都市中京区西ノ京桑原町1番地
設立: 1917年
従業員数: 11,528人(2017年3月31日現在)
ウェブサイト: <https://www.shimadzu.co.jp/>