

# 人工知能は私達に何を齎すか。何を奪い去るか。



随 筆

高木 達也\*

What will artificial intelligence give us? What will it take away?

Key Words : Machine Learning, Artificial Intelligence, Chemometrics, Drug Design

## はじめに

32世紀、宇宙探査船ディスカヴァリーのAI、Zoraは感情を持った。危険な時空を通るのに「怖い」と言い、船長が宥める必要があった。また、座標を教えるという命令に、「皆さんが危険だ」という理由で逆らった (Gene Roddenberry 原案のTVドラマ、“Star Trek Discovery” Season4)。2001年、木星探査船ディスカヴァリーは土星探査を命じられたが、途中、AI、HAL9000が自らを停止させられることを恐れ反乱を起こし、飛行士たちの命を奪った (Stanley Kubrick 監督、映画、「2001年宇宙の旅」)。<sup>1)</sup>

以上はあくまでもフィクションの上での話であり、現実には2001年に木星探査が行われるというアーサー・C・クラークの予測は甘く、人類は未だ火星にさえ到達できていない。当時の電子計算機も人工知能的な側面からは3歳児にさえ及ばなかった。また、逆に、AIが感情を持つのに1000年も待つ必要はあるまい。次世紀には十分あり得る話である。しかしながら、今世紀に入り、大きなブレイクスルーが人工知能に関して起こっていることは周知の事実である。簡単にその状況を表にしてみたのが表1である。

これらはほんの一部であり、この他、AlphaGOで、

表1 21世紀の人工知能関連のブレイクスルー<sup>2)</sup>

年次	事項
2012	トロントショック : Hinton 教授らのグループが画像認識に深層学習を用いて、驚異的な進歩を見せる
	Google ショック : 1000 のサーバと 16000 コアの CPU で深層学習の中間層に「猫の概念」が現われた。
2019 ~ 2023	Alphafold2 ショック : 長年の課題だったタンパク質の1次構造から3次構造を推定する問題が、あっさり達成された。
	MATLANTIS <sup>TM</sup> ショック : 密度汎関数計算がAIの学習により極めて短時間でできるようになった。
	量子コンピュータショック : Google が量子超越性に達したと発表。
	DeepL ショック : 多言語間の翻訳がほぼ完璧なレベルで行えるようになった。
	ChatGPT ショック : 生成AIがほぼ完璧なレポートを書くなど、人間にしかできないと思われていた文章作業を行う様になった。



\* Tatsuya TAKAGI

1956年5月生まれ  
 大阪大学薬学部卒 (1979年)  
 現在、大阪大学 名誉教授・大阪大学大学院薬学研究科 特任教授 薬学博士  
 専門/計量薬学、計算薬学、機械学習  
 TEL : 06-6105-5784  
 FAX : 06-6105-5784  
 E-mail : ttakagi.phs@gmail.com

従来遠い未来の事と考えられていた「囲碁でAIがトッププロに勝利する」が実現されたのは記憶に新しい。既にチェスや将棋では、人間はAIに殆どかなわなくなっている (表2)。2045年にはSingularityが到来し、AIが自ら学習して人類を凌駕するとも言われている。本当にそうなるかどうかは私には予想できないが、そうなるのも不思議ではないとは考えている。この「人工知能」の正体について、以下、見ていきたい。

表2 チェス、将棋、囲碁での AI と人間の対戦

チェス	
1967	対戦プログラムが登場
1988	Deep Thought がラーセン (グランドマスター) に勝つ。
1989	Deep Thought はカスパロフ (史上最長の 15 年王者)、カルポフに接戦の末、敗北
1996	Deep Blue はカスパロフと 1 勝 3 敗 2 分
2006	Deep Fritz、クラムニクに 2 勝 4 分、これ以降、コンピュータ優位となる。
将棋	
2005	TACOS が橋本崇載八段と熱闘、辛うじて橋本八段が勝った。
2007	Bonanza と渡辺明竜王も、辛うじて竜王が勝ったが、実力は認められた。
2017	Ponanza と佐藤天彦名人、名人が 0 勝 2 敗。
囲碁	
2016	AlphaGo (深層学習+強化学習) が、李世乭九段に 4 勝 1 敗 (AlphaGo ショック)。

表3 利用頻度の多い機械学習

Categories	Methods
教師付き学習	線形重回帰
	PLS
	ロジスティック回帰
	サポートベクターマシン
	ノンパラメトリック回帰
	ニューラルネットワーク (深層学習)
教師なし学習	主成分分析
	クラスター分析
	多様体分析
	ニューラルネットワーク (深層学習)
	その他 (t-SNE, UMAP, SOM, etc)
その他	強化学習

### 1. 多様な機械学習

一口に人工知能と言っても多様だが、現在利用されているアルゴリズムの大半は機械学習である。主なものを表3に挙げた。この全てを詳述するスペースはないので、ここでは、深層学習に焦点を当ててみるが、現在 AI に頻用されている物にはほかに強化学習があり、重要な役割を果たしていることをご記憶願いたい。

#### 1-1. ニューラルネットワーク

深層学習の最も基礎的な段階は(階層型)ニューラルネットワークと呼ばれ、多くは図1の様な3層構造を持っている。ここで、入力層に入ったデータ(数値)は、一定の関数(例えばシグモイド関数)で中間層に運ばれる。画像解析で言えば、明度や色調の値が入力され、運ばれる。太い線の所は値は

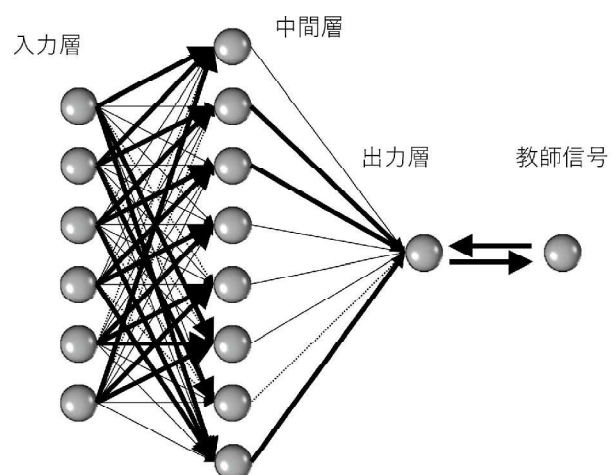


図1 階層型ニューラルネットワークの概要

100%近く運ばれるが、細い線だと数%しか運ばれない。場合によっては線が途絶えていて全く運ばれない場合もある。この線の太さは、教師信号と出力

値が一致するように調整される (学習)。このようにして繰り返し学習することで、例えば、入力された画像が猫か蛙かが当てられるように線の太さが整えられる。このようなニューラルネットワークは1980年代に流行し、多くの研究者が、例えば医薬品設計や材料設計に、或いは画像解析やゲームにと応用した。が、この流行の波は90年代後半に入ると途絶えてしまった。勿論、幾つかの分野では成功したのだが、当時の計算機の性能も相まって、研究者の努力に見合うほど十分な成果が得られたとはい難かったからだ。ニューラルネットワークは暫く冬の時代を迎えることになる。

### 1-2. 深層学習

既出の様に、2012年、Hinton教授(当時トロント大学)らのグループが画像解析に深層学習を用いて画期的な結果を齎したことにより、一躍深層学習ブームが起こる。深層学習というのは特殊なニューラルネットワークというわけでは必ずしもない。図2の様に、単に中間層の多いニューラルネットワークが基本になっている(実際にCNN~畳み込みネットワーク~等もっと複雑な構造とアルゴリズムを使っていることが殆どだが)。

この10年ほど、深層学習の研究が進み、何に使用して何に使用できないかが分かってきたように思う。最も重要なポイントは、深層学習が威力を発揮するには大量のデータ、「ビッグデータ」が必要だと言う事であろう。逆に言えば、ビッグデータを学習して再現、予測することは極めて正確に行うことができる。将棋の対戦プログラムは大量の棋譜を深層学習が学習し、強化学習が自ら大量に対戦することにより最善手を見つけることができるようになったので、プログラムが最初から賢かったわけではない。

AlphaFold2によるタンパク質の立体構造予測も、PDB (Protein Data Bank) の大量の立体構造データとアミノ酸シークエンスの関係を学習した結果得られたものである。今後深層学習がどのような世界を産み出すのか、極めて楽しみであると共に、何でもかんでも深層学習を使えばいいという風潮にはやや疑問点も残る。次節では私たちのグループが行った例を少し披露してみたい。

### 1-3. 指紋照合 SOM (Self-organizing map) <sup>3)</sup>

自己組織化ニューラルネットワークと呼ばれるものは、フィンランドの Teuvo Kohonen <sup>4)</sup> 教授によって開発された教師なし機械学習法で、分類に優れた結果を齎すことが多い(図3)。図3のすべてのニューロンに出力値が得られるのだが、通常SOMでは「勝者(例えば最大値)」を1つだけ決定し、その他は敗者として用いない。我々のグループではこの方法を改良し、出力結果をすべて使用し、類似の出力結果を探すことにより、類似性を探索する手法を用いた。応用したのは、押収された違法覚せい剤の分類で、覚せい剤が合成された手法により、不純物が異なる。この不純物をガスクロマトグラフィーで一斉分析し、合成法を探る情報にしようと考えたものである。図4は左が通常SOM、右が我々の改良法による結果で、右の方がうまく分類できていることがお分かり頂けるだろうか。この例ではビッグデータが存在するわけではない。そのような場合、深層学習では変数が多すぎて、かなりのテクニックを用いなければ過学習が容易に起こってしまうと考えた。この手法ではそのような心配を行う必要なく、新規なデータに対してうまく分類可能であると考えている。

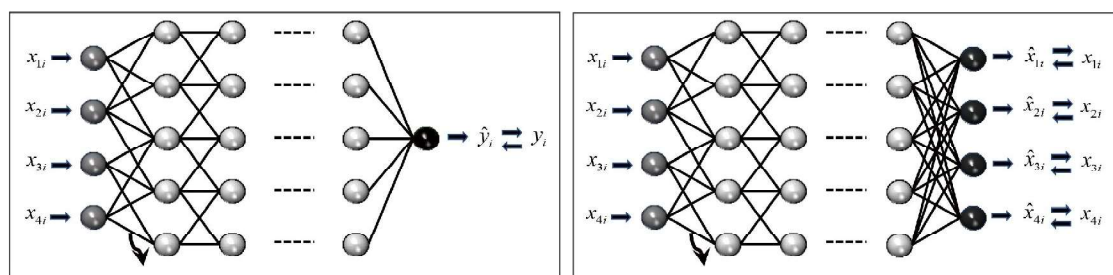


図2 教師付き学習(左)教師なし学習(右)における深層学習の基本図

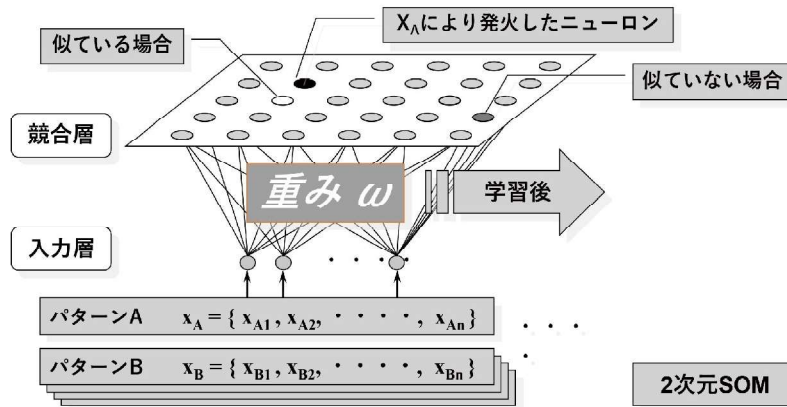


図3 自己組織化ニューラルネットワークの概要

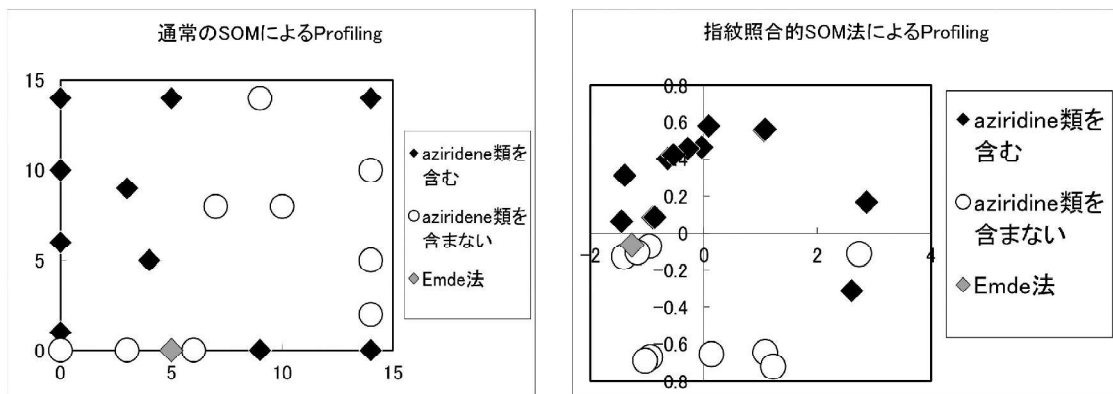


図4 押収覚せい剤の指紋照合型 SOM による合成経路の推定

### 3. AI ブームの今重要なこと

AI ブームが到来して10年を超えた。様々な分野でAIは活躍し始めている。医療分野ではCT、MRI、血液検査の値などから客観的な診断支援を行う試みが行われているし、言語間翻訳のみならず、「・・・に関するレポートを書いて」と命じれば、見事なレポートをものにしてくれる。大学教員はAIの利用に関し、一考する必要に迫られた。さて、このAIブームは続くのだろうか？

少し過去を振り返ってみよう。1960年前後には、コンピュータに計算させるだけでなく推論させてみようという試みが行われ始めた。この少し後になるが、私も将棋ソフトで遊んでみたことがある(1979年前後の筈)。私の力では勝つまでには至らなかったが、結構いい試合になった記憶がある。これを第一次人工知能ブームと呼べるかもしれない。このブームは然しながら時期尚早であった。計算機の能力の問題もあったし、プログラミング言語の間

題もあったかもしれない。何れにしろ、多様な問題に対しての能力には限界があった。

1980年代に入ると、国家プロジェクトとして第5世代コンピュータプロジェクトが推進され、「計算するコンピュータから考えるコンピュータへ」との合言葉の下、第2次AIブームと言うべき時代に突入した。このブームとプロジェクトにより、様々な重要な結果が得られたことは事実であるが、全体としては当初の目論見通りには行かなかったことも又事実であり、人工知能は急速に冬の時代へと突入する。

既出の様に、2012年以降第3次人工知能ブームが到来するのだが、重要なことは、この間、冬の時代に地道に研究していた研究者が一定数存在したからこそこのブームがあるのであり、万が一にも枯渇していれば深層学習も強化学習も日の目を見る事はなかったことである。人工知能に限らない。私達はともすれば、今、春や夏の時代を迎えている研究分

野に目を奪われがちである。それらは華やかであり、将来性を見据えることができ、予算も潤沢に得ることができるだろう。それに対し、冬の時代を迎えている分野に対しては、批判があるのはまだいい方で、時には顧みられる事さえ覚束ない。21世紀を迎えて間もなくの頃、勿論まだ人工知能が冬の時代、私はある所に、機械学習による化学物質の分解性予測プロジェクトを持ちかけたことがある。私の説明も悪かったのだろうが、「夢物語を持ち掛けられても困る」とその部分は却下された。いや、そのことを批判しているのではない。「冬の時代」とはそんなものだという事を披露したいと言う事である。プロジェクトを持ち掛けられる側も、無茶な投資はできないのだから当然と言えば当然なのかもしれない。

しかし少なくともアカデミアはそうであってほしくないと思う。地味に見える研究、必ずしも将来性が見えない分野、基礎の基礎の様な分野が蔑ろにされていないだろうか、私の杞憂に過ぎないだろうか。勿論、「今流行」の分野は重要である。それと同時に地味な基礎研究を蔑ろにすると、決して華やかな分野の興隆に繋がらないと思う。

今一つ、これだけAIが発達してくると、当然、AIで達成可能な研究分野が出てくる。これからの研究者は、研究テーマがAIにより達成可能かどうかを絶えず考えなくてはならない。極端な例かも知れないが、リーマン予想は肯定的にしる否定的にしる、AIにより解決可能かもしれない。医薬品設計

や化合物の合成設計もそう遠くない将来可能になるだろう。しかし、「リーマン予想を提案する」ことは恐らくAIにはできまい。メタセシス反応を考案することも同様に不可能だろうと思う。逆に言えば、AIに可能な研究はAIに任せてしまい、人間はもっと生産的なことに時間を費やせる時代がやってきたのである。

今、科学研究は一つの曲がり角に来ている、と私は考えていることを記して、本稿を閉じたい。

### 参考文献

- 1) 高木達也、AIは人類の救世主となり得るか、それとも驚異か、CBI学会誌, 11(2), 5-5 (2023).
- 2) Takagi T., Chem-Bio Informatics Journal, 23, 7-13 (2023).
- 3) Nishikiori R., Makino Y., Ochi Y., Yamashita N., Okamoto K., Kawashita N., Takahara J., Yasunaga T., Takagi T., Kawase M., Development of Fingerprint Verification Type Self-Organized Map Applied to Profiling Seized Methamphetamine, Journal of Computer Aided Chemistry, 9, 30-36 (2008).
- 4) Kohonen T. Self-Organized Formation of Topologically Correct Feature Maps, Biol. Cybern. 43, 59-69 (1982).

