

A I 解析入門

渡辺英治（NIBB/TSBセンター A I 解析室）

2024年2月8日

講師自己紹介



渡辺 英治（わたなべ えいじ）

専門：視覚、神経科学

視覚をAIでモデル化して理解する
（構成論的アプローチ）

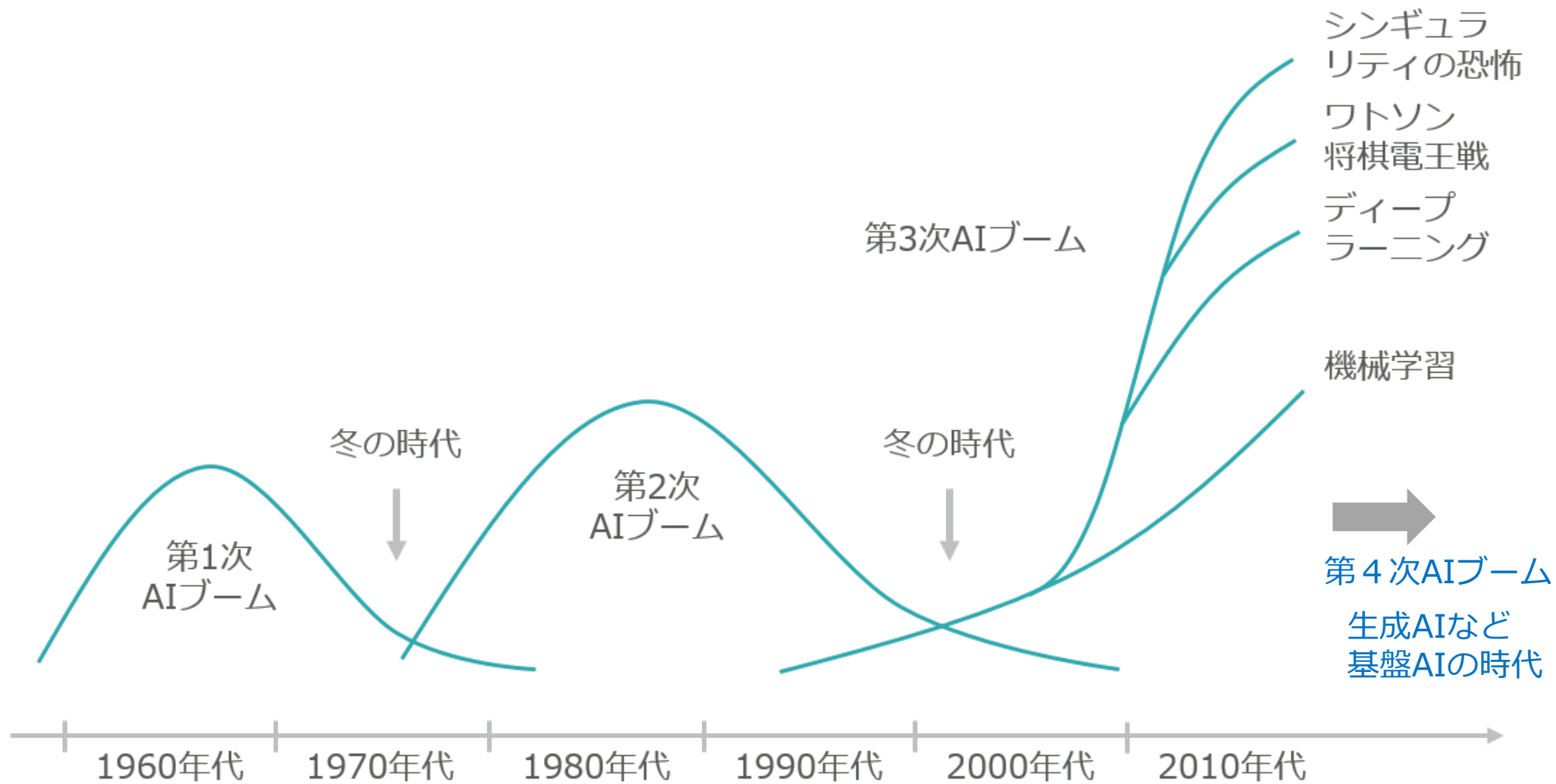
講義の概要

～A I に親しむ～

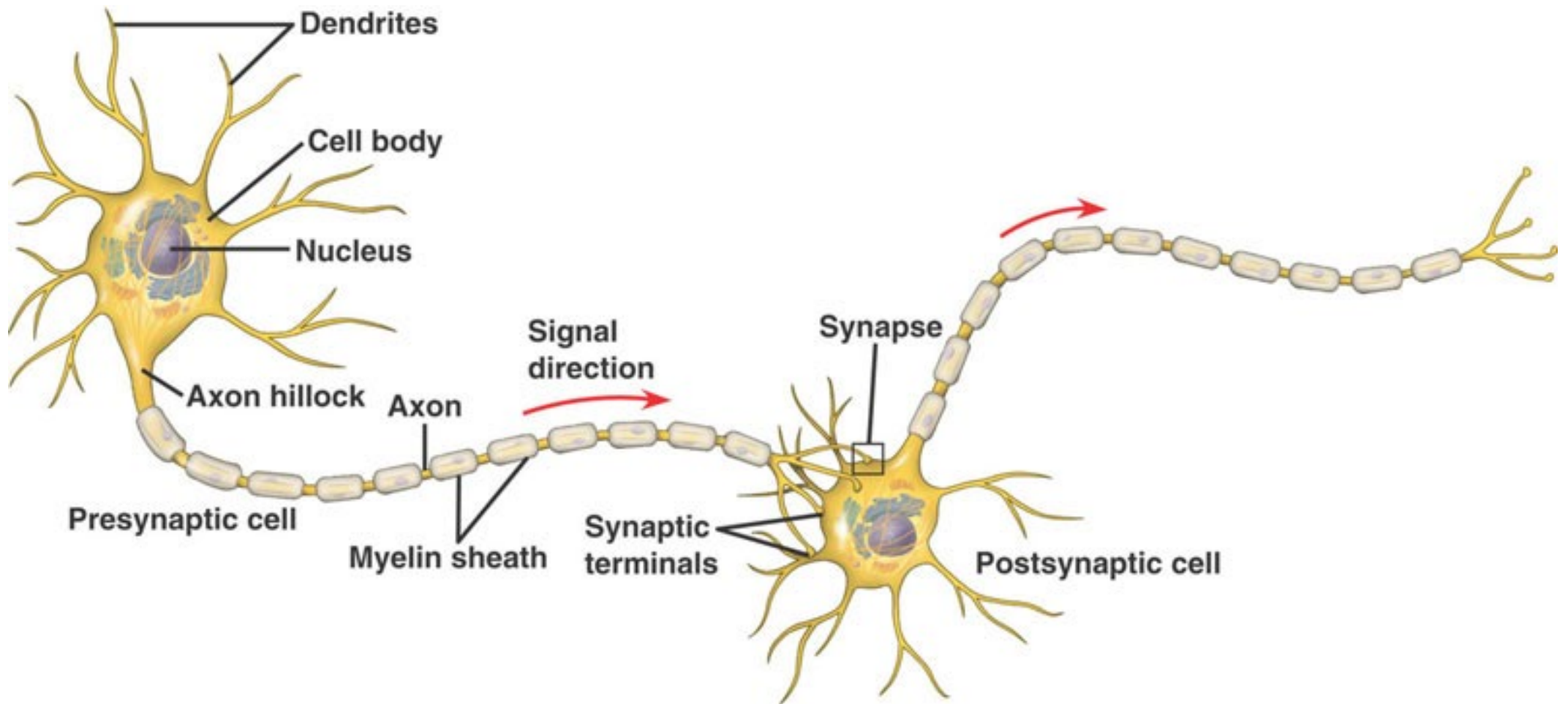
1. A I の歴史
2. 深層学習の要素解説
3. A I の種類概説
-  4. ChatGPT
-  5. シングルセル解析デモ
6. A I の動作環境概説
7. A I の勉強方法
8. A I の未来

～他の講義とは粒度やカラーが異なります。ある意味これがAIの粒度でありカラーです～
＝粒度とカラー：面倒なことはすべてAIに！人は創造的な仕事を！

A I の歴史



松尾豊 『人工知能は人間を超えるのか ディープラーニングの先にあるもの』 から引用



神経細胞（すべてはこの細胞のモデル化から）

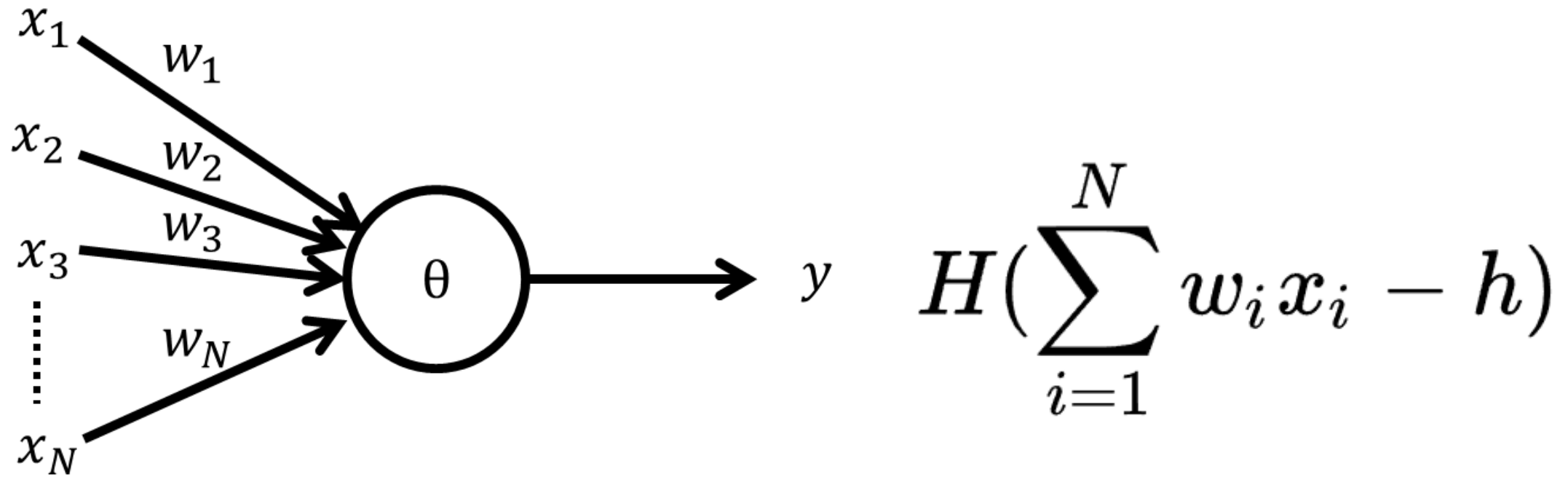
The frontiers who proposed the first artificial neurons



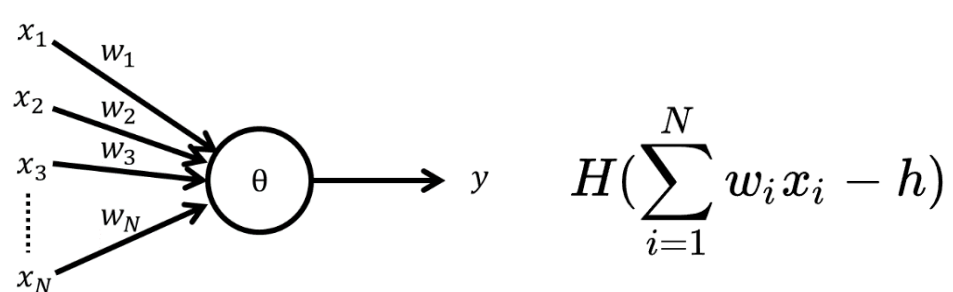
Warren S. McCulloch
Neurophysiologist

Walter Pitts
Logician

“Formal Neuron” 形式ニューロン



McCulloch, W. and Pitts, W. (1943). A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. Bulletin of Mathematical Biophysics, 7:115 - 133.



ニューロンのモデルは、以下の通り。入出力は 0 または 1 である。

- w : 重みづけ (実数)
- x : 入力信号 (0 または 1)
- h : しきい値 (実数)
- H : **ヘヴィサイドの階段関数** (出力は 0 または 1)

$$H\left(\sum_{i=1}^N w_i x_i - h\right)$$

実例としては、以下の通り。XOR は3層、他は2層である。

AND

$$H(x_1 + x_2 - 1.5)$$

OR

$$H(x_1 + x_2 - 0.5)$$

NOT

$$H(-x_1 + 0.5)$$

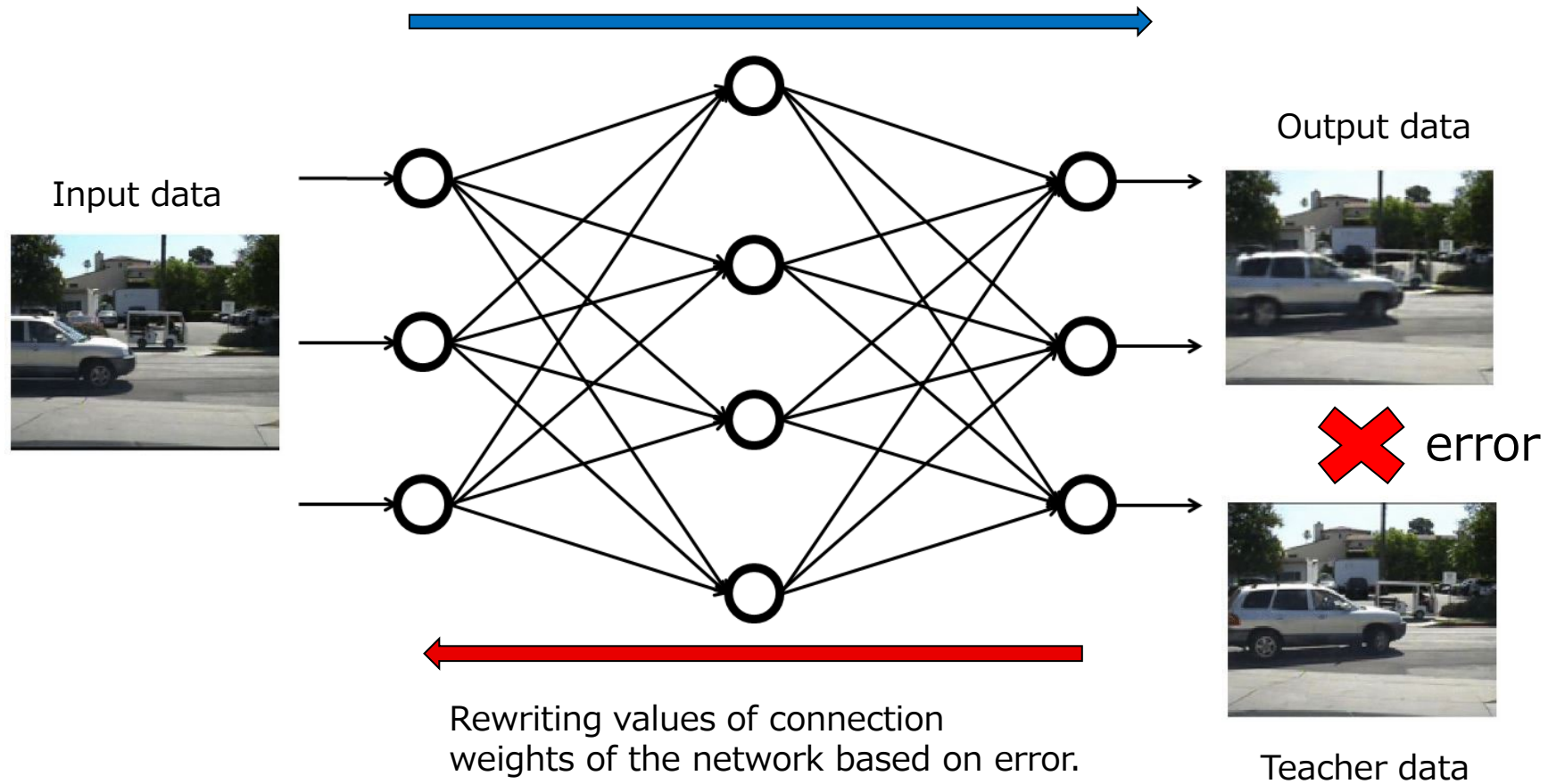
XOR

$$H(x_1 + x_2 - 2H(x_1 + x_2 - 1.5) - 0.5)$$

形式ニューロンはすべての論理演算ができる

逆誤差伝播法が発明される

The networks learn connection weights from teacher data.



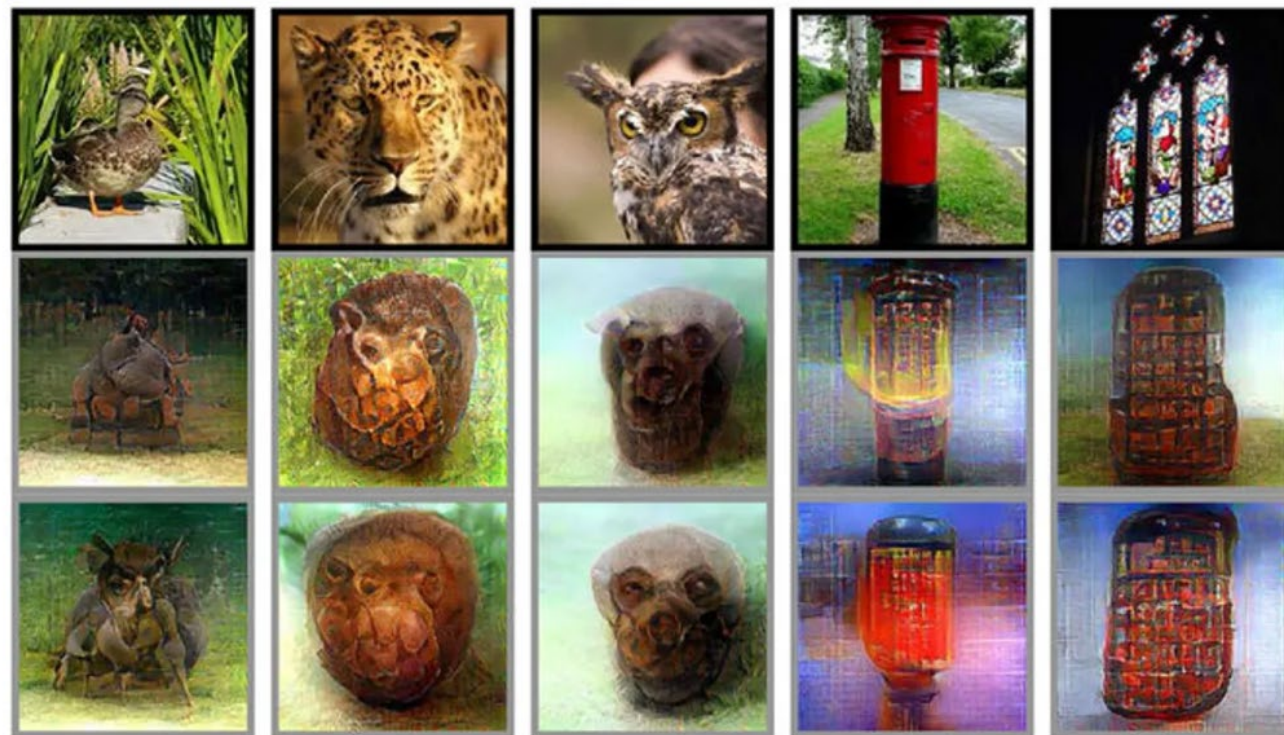
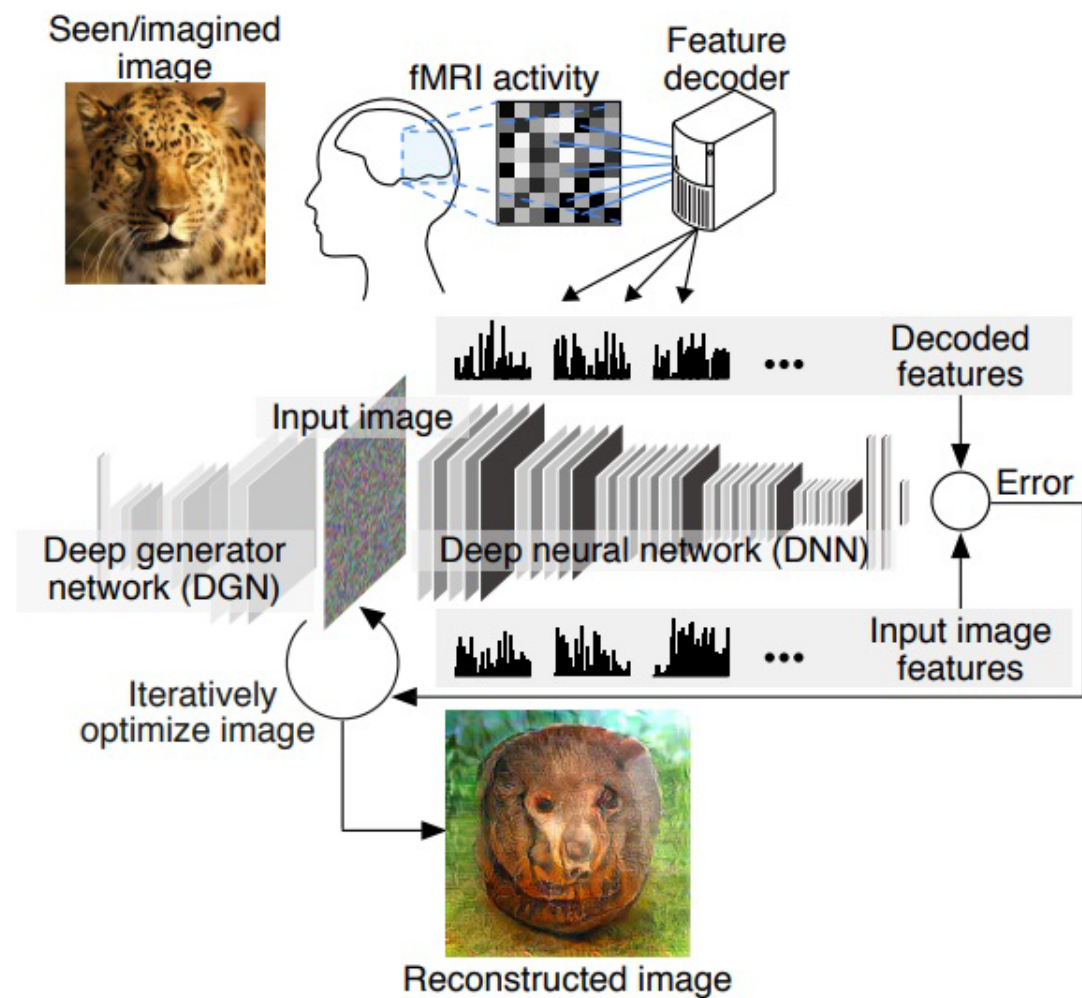
Backpropagation: Rumelhart, Hinton & Williams (1986)

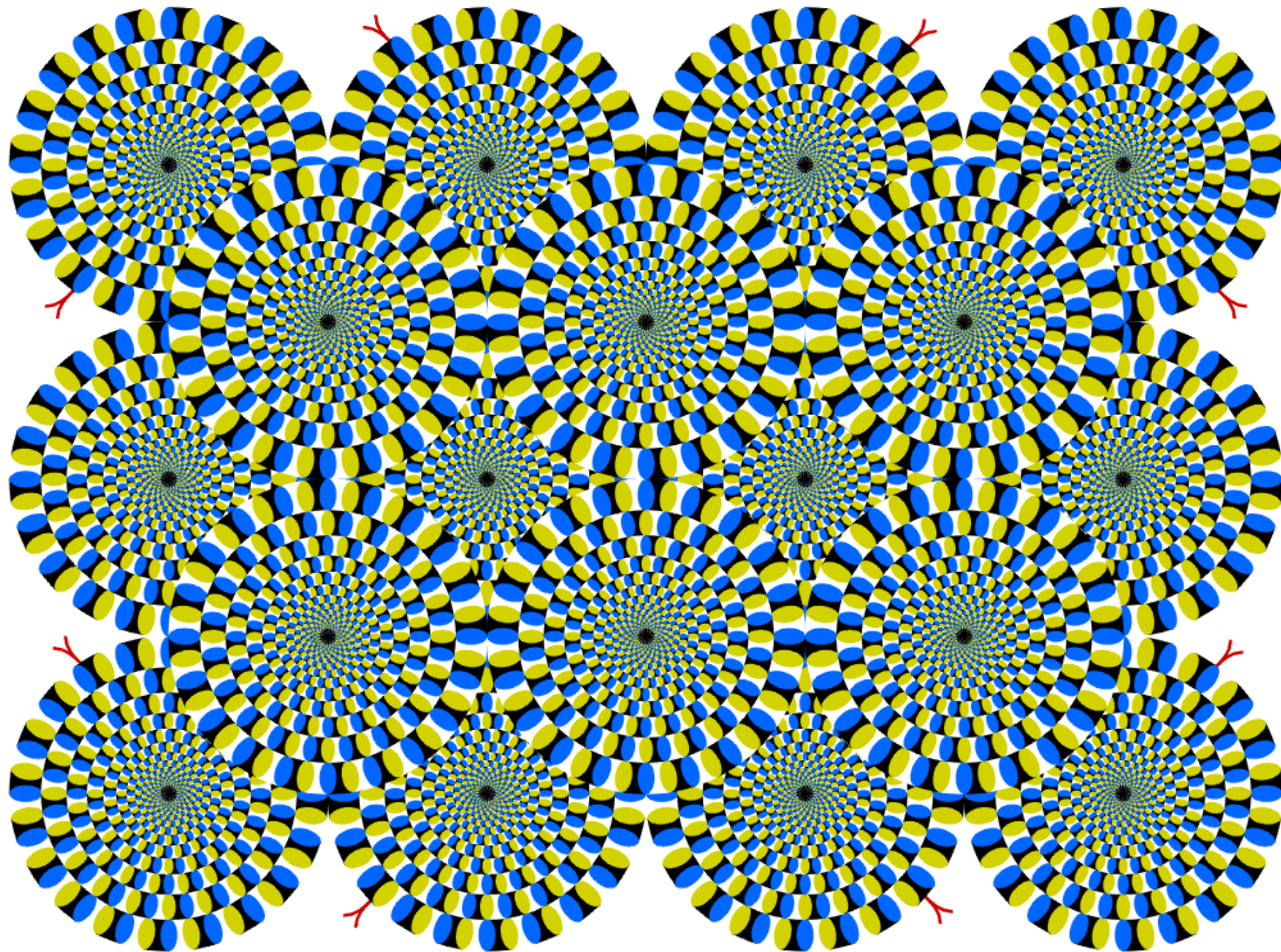
深層学習が発明される

2012年の物体の認識率を競うILSVRCにおける、GPU利用による大規模ディープラーニング(ジェフリー・ヒントン率いる研究チームがAlex-netで出場した)の大幅な躍進、同年のGoogleによるディープラーニングを用いたYouTube画像からの猫の認識成功の発表により、世界各国において再び人工知能研究に注目が集まり始めた。この社会現象は第3次人工知能ブームと呼ばれる。

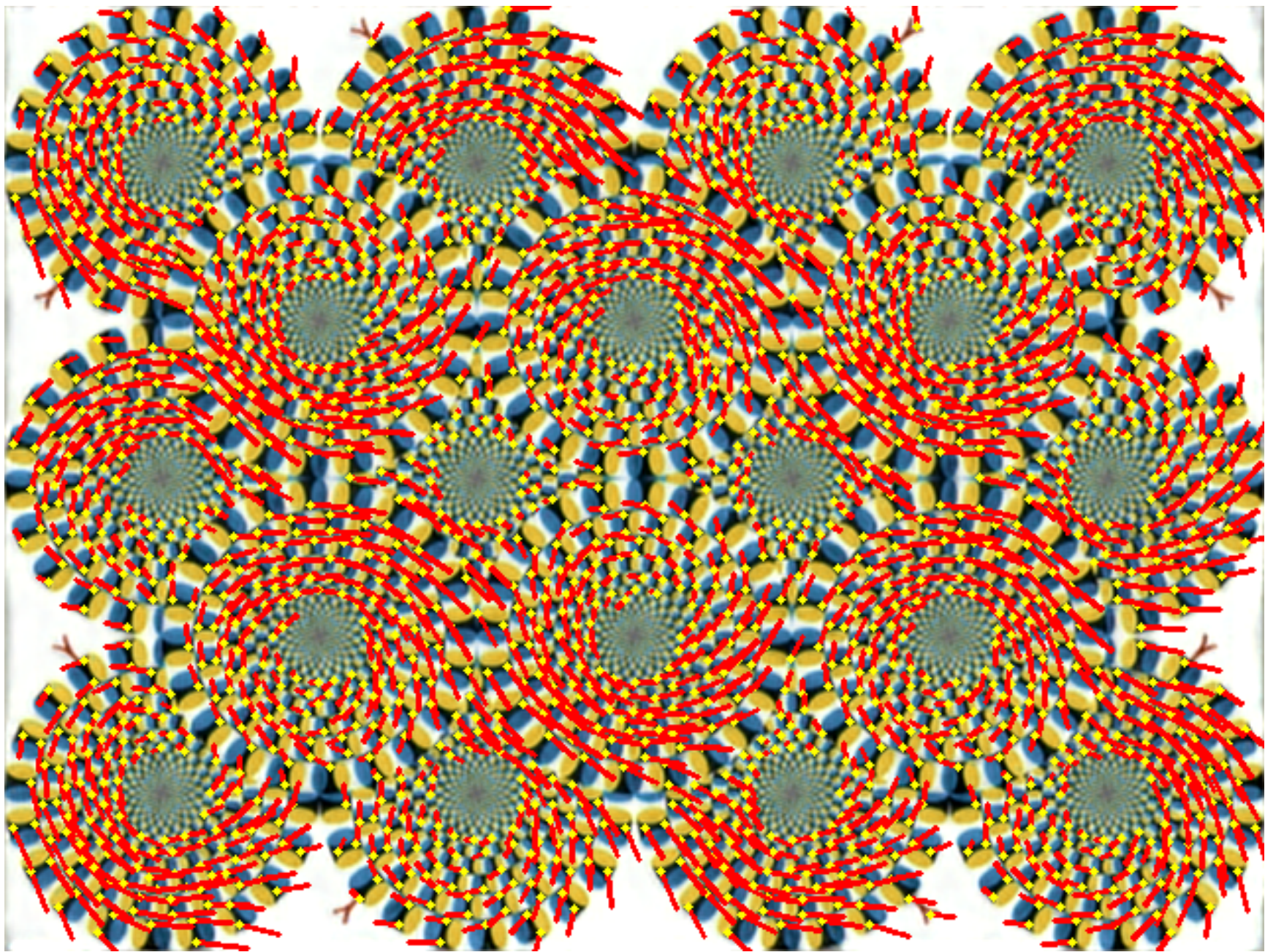


脳の解析ツールとして、モデルとして活用される





Rotating Snake Illusion by A.Kitaoka



渡辺研より

深層学習の要素解説

学習ルール

(どのように荷重を変えるか？ Backpropagationの一択状態)

目的関数

(どうなったら嬉しいか？)

構造

(情報を加工するためのアルゴリズムはどうか？)

(多くのAI研究者がしのぎを削っているテーマ)

(Transformerが大きな地位を占めている)

学習データ

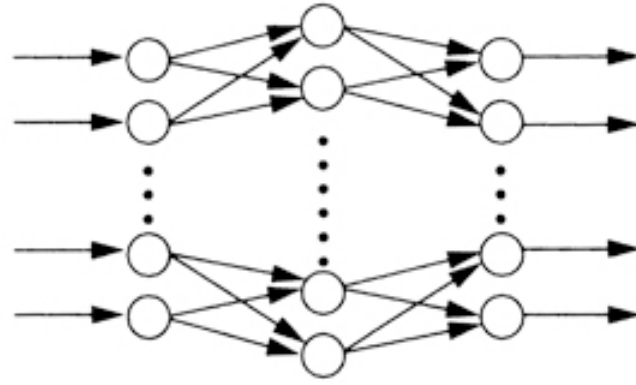
(何を学習するのか？ 画像？ 音声？ 遺伝子配列？)

A I の種類概要

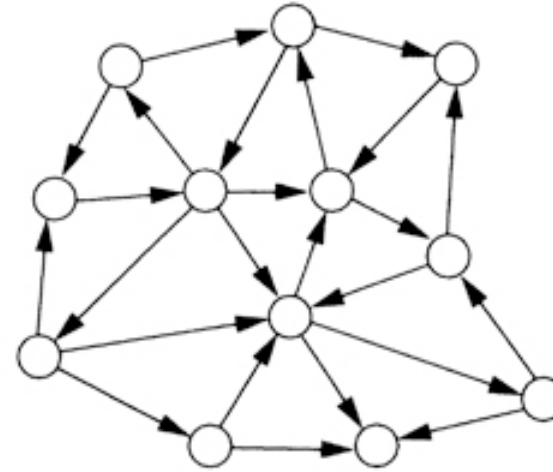
A I の種類概要

宿題：

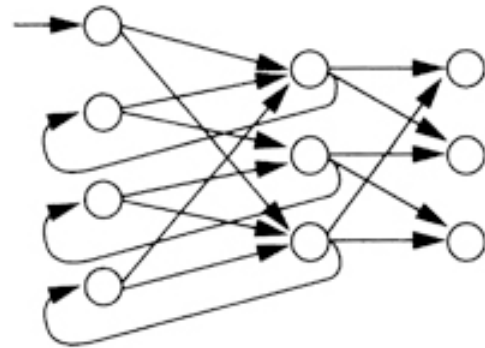
深層学習で使用するニューラルネットワークには様々な種類がありますが、このうち畳み込みニューラルネットワークについて自分なりに理解を試みてください。



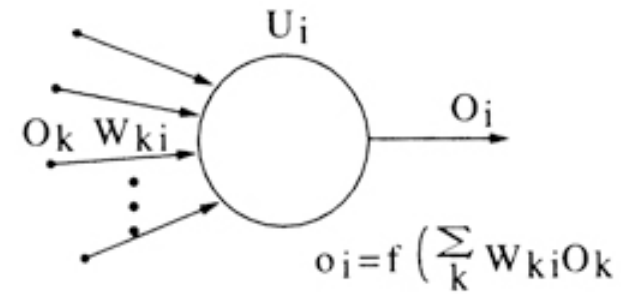
階層型ニューラルネットワーク



相互結合型ニューラルネットワーク



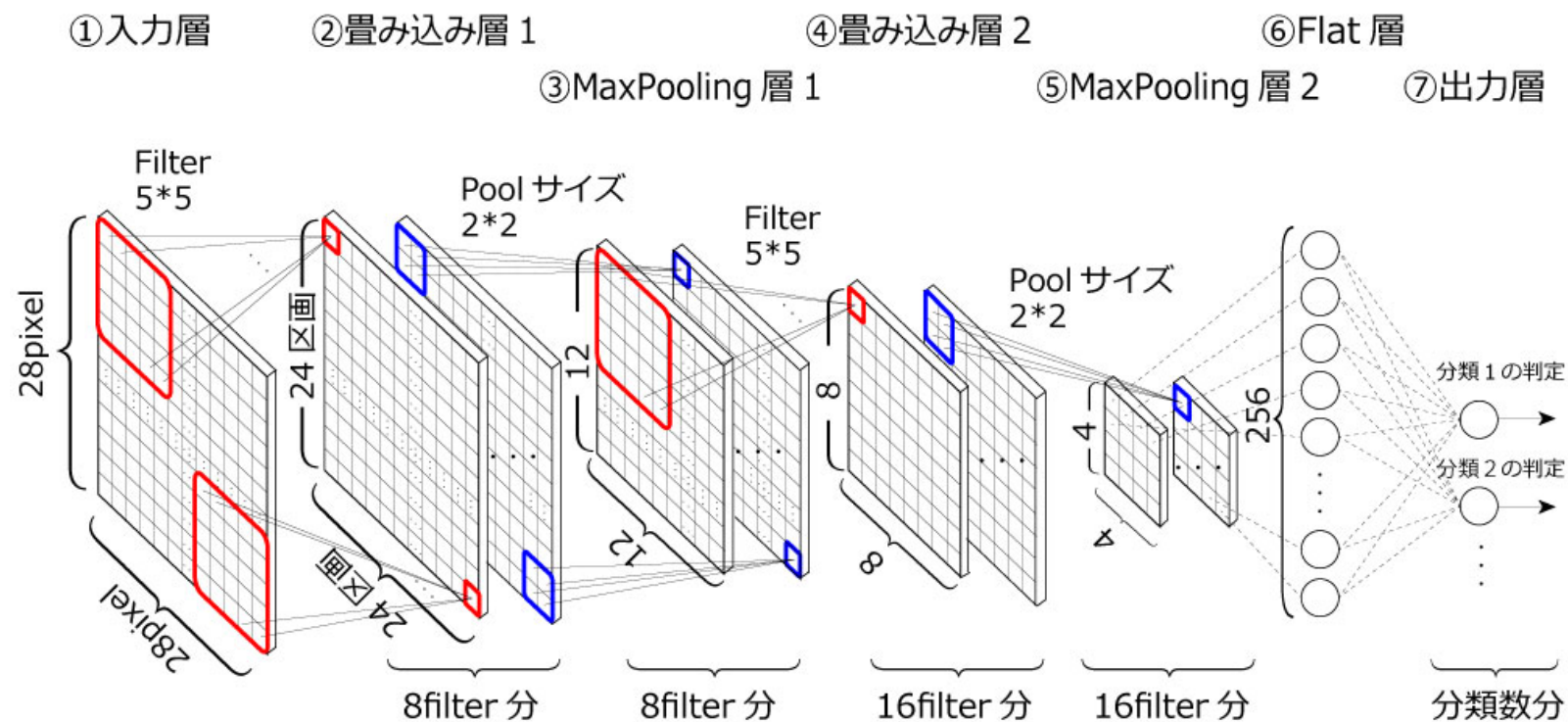
リカレントニューラルネットワーク



ニューロンモデル

基本はニューロンモデルですが、その構造の可能性は無限大です

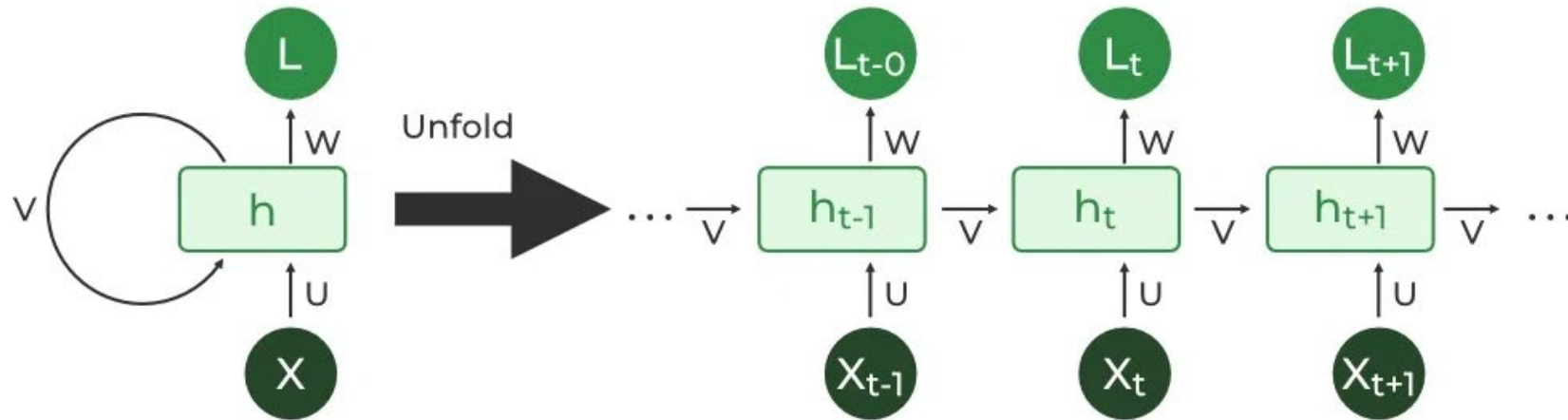
CNN



	①入力	②畳み込み	③MaxPooling	④畳み込み	⑤MaxPooling	⑥Flat	⑦出力
出力サイズ	28*28*1	24*24*8	12*12*8	8*8*16	4*4*16	256 (4*4*16)	分類数
調整：重み	-	200 (5*5*8)	-	3200 (8*(5*5*16))	-	-	256 * 分類数
調整：閾値	-	8	-	16	-	-	分類数

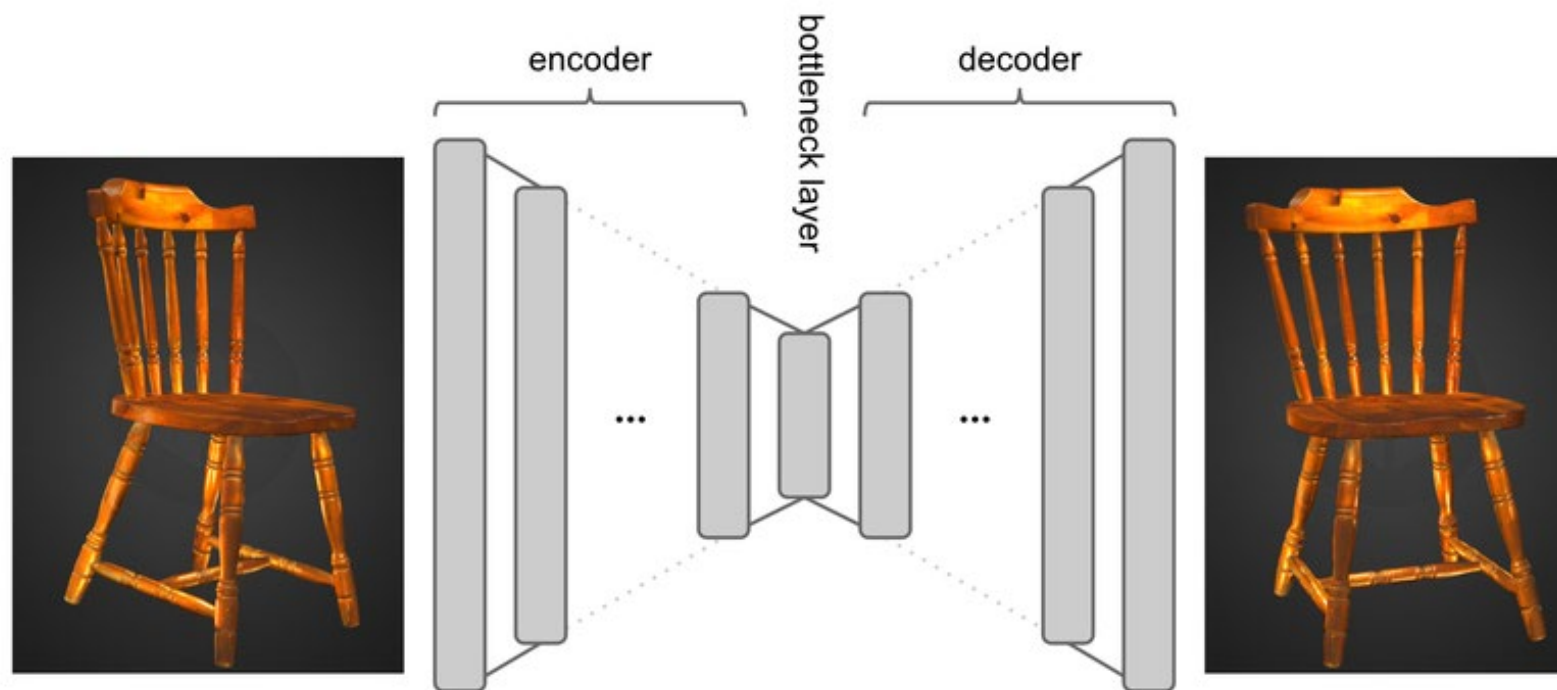
空間的な関係性（近傍は相関する）を表現する特徴量（フィルター）を学習する

RNN



過去の自身への入力を減衰させながら再度入力する（時系列データへの対応）

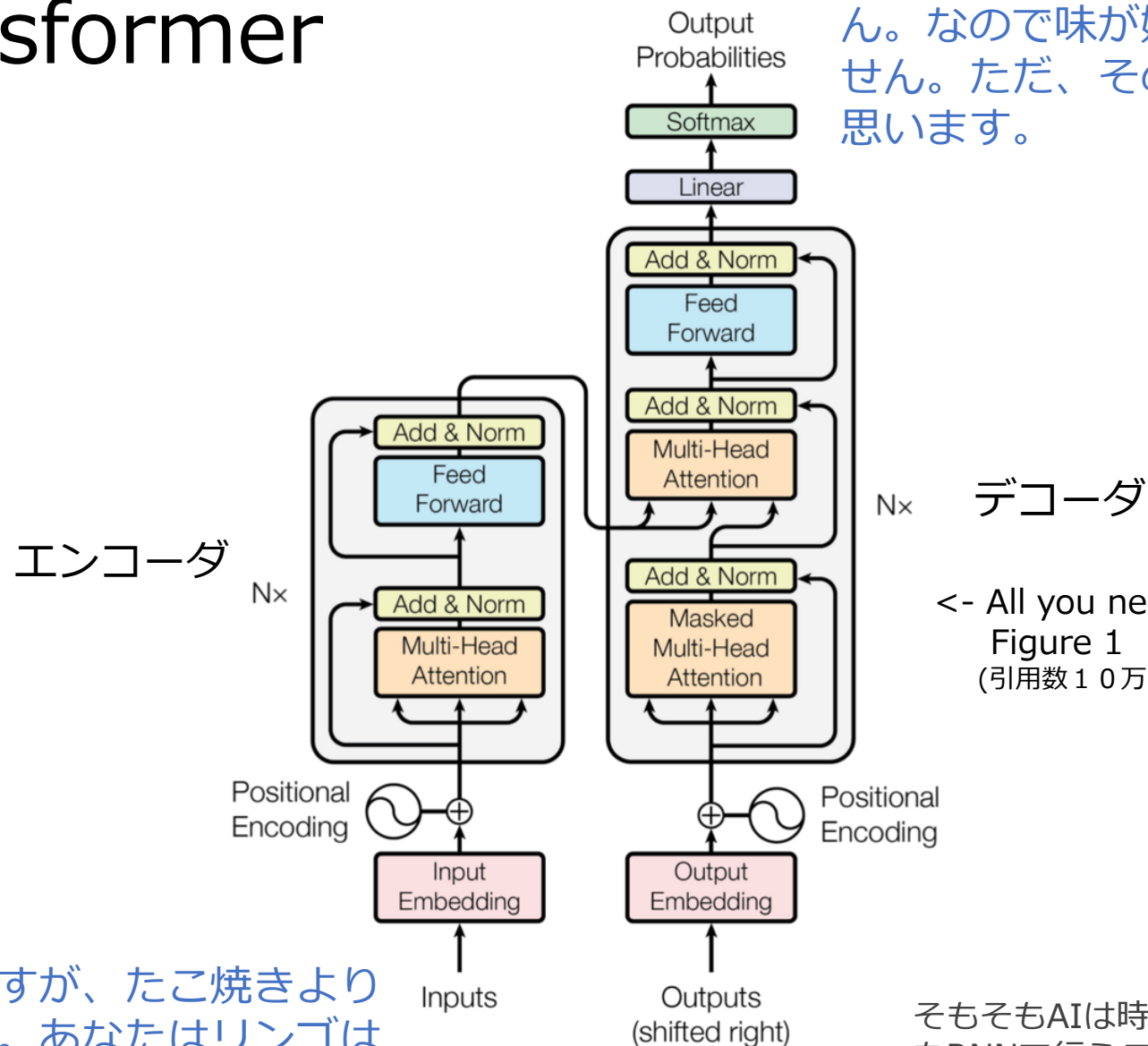
Auto Encoder



ボトルネック層に特徴量を圧縮して獲得する。
通常は元画像をそのまま教師画像とするが、
この図の場合は回転させた図を学習させている。

The Transformer

私はAIなのでリンゴは食べることはできません。なので味が好きかどうかの判断はできません。ただ、その形状や色はとても魅力的だと思います。



<- All you need is attention (2017)
Figure 1
(引用数 10 万を超えるモンスター論文)

私は大阪出身なのですが、たこ焼きよりもリンゴが好きです。あなたはリンゴは好きですか？

そもそもAIは時系列データが苦手。このような課題をRNNで行うことは不可能。そこで単語すべての関係性を丸ごと学習してしまう方策をとった。

ChatGPT

ChatGPT (GPT-4)

非常に膨大なテキストデータから自然な言語の並び方を学習した A I (Transformer) である。

その成り立ちから、最も精度が高いのはコーディングやコードレビュー、バグフィクス、スタイルを指定した翻訳、要約、質疑応答が得意な分野。当初の嘘つきは解消しつつある。最近では画像の読み込みと書き出しもできるようになった。コードの実行もできる。 APIも公開されているため応用がかなり進んでおり、特にGTPsの発展が凄まじい。基盤 A I のひとつ。

ChatGPT

画像に含まれるデータの分析

アップロードしたグラフを分析してください。

(.txt, .pdf, .csv, .md, .jpynb, .html, .jpg, .png, .gif, .bmp, .xlsx/xls, .pptx/ppt, .docx/doc, mp3, wav, .mp4, .py)



ChatGPT

Code Interpreter

先程の画像をpythonで左右反転させ、白黒画像に変換してください。出来上がった画像はブラウザー上に表示してください。



ChatGPT

My GPTs

自分が必要としている「カスタマイズしたChatGPT」を、特別な予備知識なくチャットから作れるというとんでもない機能。チューニングするにはそれなりに時間がかかるが、コードを書く労力がないので「自分のcopilot」を自在に作ることができる。あとはアイデア次第。



2023年11月アップデートの**有料版**対応

面倒なことは ChatGPT

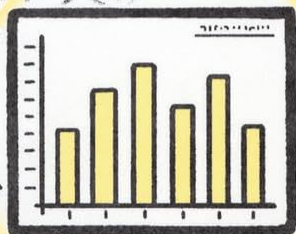
カレーちゃん
からあげ 著

にやらせよう

Let ChatGPT
do the troublesome
work for you

拡張機能ではじまる、
魔法のような
効率化革命！

- ☒ 丸投げで
売上データ分析
- ☒ Webサイトからサクッと
PowerPoint 作成
- ☒ Excel、PDF、画像の
処理も自由自在



「普通の人にも
驚くほど
簡単にできる」

松尾豊氏推薦！
(東京大学教授)

まるで魔法！

PART 1

知っておきたいChatGPTの基本

- CHAPTER 1 ChatGPTの基礎知識
- CHAPTER 2 ChatGPTの基本的な使い方
- CHAPTER 3 ChatGPT Plusのセットアップ
- CHAPTER 4 ファイルのアップロードとダウンロード

PART 2

ChatGPTが使える日常テクニック

- CHAPTER 5 繰り返し作業を瞬で
- CHAPTER 6 画像の多彩な加工・生成
- CHAPTER 7 手軽に音声ファイル処理
- CHAPTER 8 丸投げ！ PowerPoint スライド作成
- CHAPTER 9 マニュアル不要でExcel操作
- CHAPTER 10 WordファイルとPDFファイルの便利技

PART 3

ChatGPTでのデータサイエンス

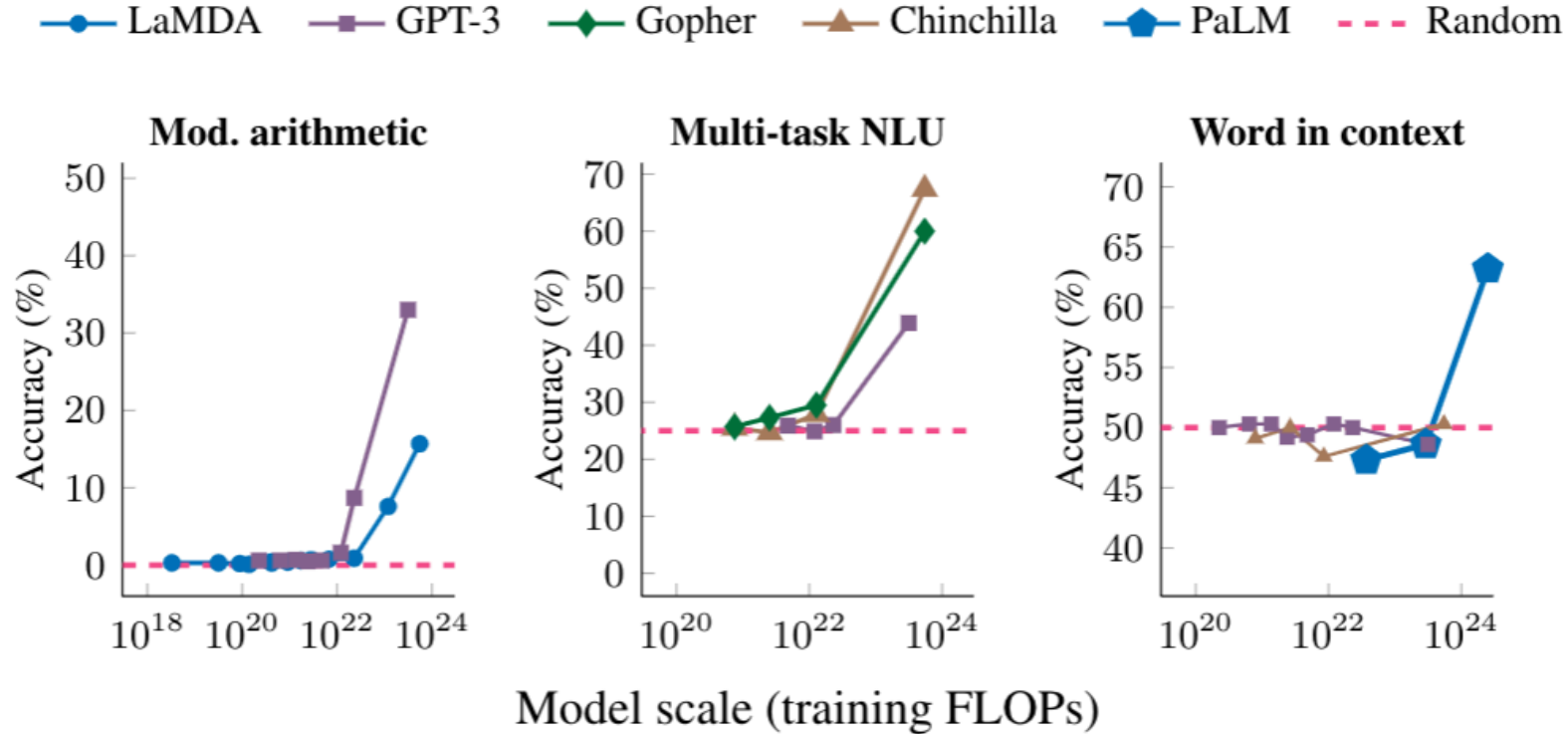
- CHAPTER 11 データからかんたんグラフ作成
- CHAPTER 12 データからビジネスに役立つヒントを得る

PART 4

ChatGPTのさらに便利な
応用テクニック

- CHAPTER 13 業務を効率化する
- CHAPTER 14 ゲームで遊ぶ
- CHAPTER 15 ブラウザアプリを作る
- CHAPTER 16 PythonをChatGPTと勉強する
- CHAPTER 17 アドバンスな活用法にチャレンジ

サポートサイトに
そのまま使えるプロンプト掲載！



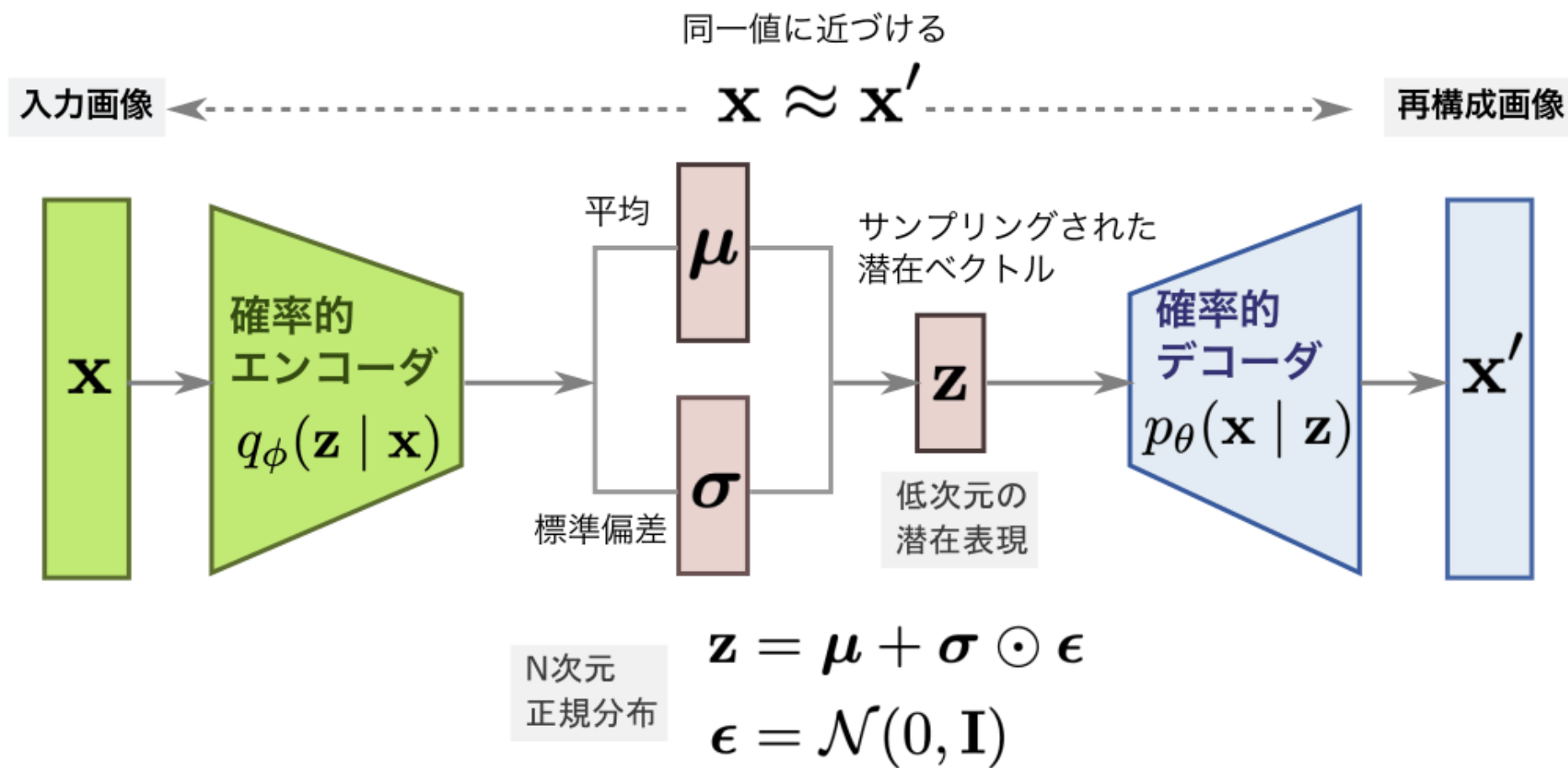
The ability to perform multi-step arithmetic (left), succeed on college-level exams (middle), and identify the intended meaning of a word in context (right) all emerge only for models of sufficiently large scale. The models shown include LaMDA, GPT-3, Gopher, Chinchilla, and PaLM. FLOPs = number of floating-point operations.

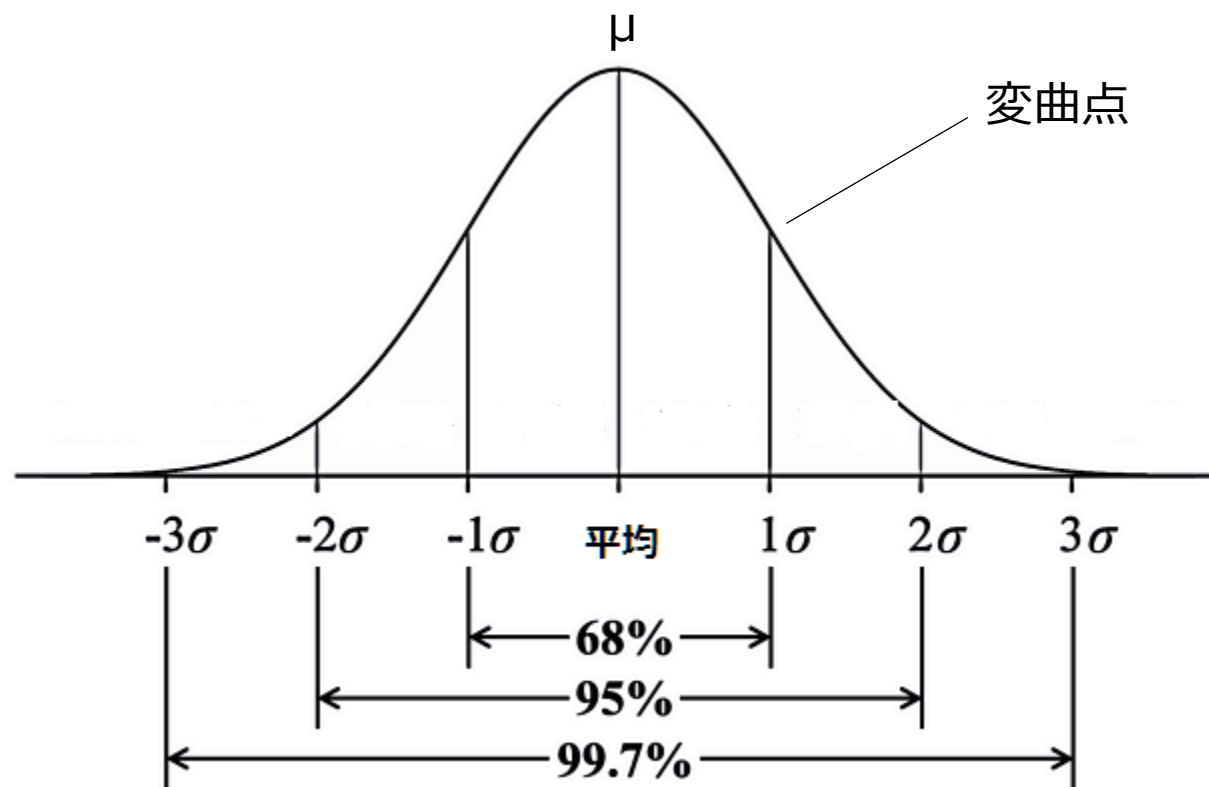
複数ステップの計算、大学レベルの試験、文脈の言葉の意味を読み取る精度

<https://ai.googleblog.com/2022/11/characterizing-emergent-phenomena-in.html>

シングルセル解析とVAE (Google Colabでのデモ)

VAE：潜在変数 z を確率分布という構造に押し込める





$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

μ (算術平均)と σ (標準偏差)が決定すると、 x (確率変数)に対しての $f(x)$ (確率密度)が決定する。

Python

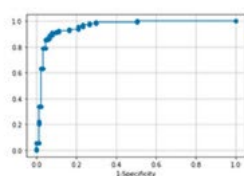
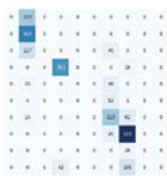
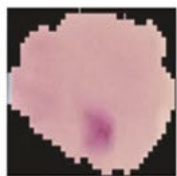
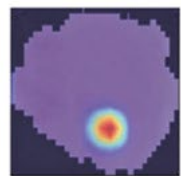
で
実践

実験医学別冊

生命科学 データの 機械学習

あなたのPCで最先端論文の
解析レシピを体得できる!

編 清水秀幸

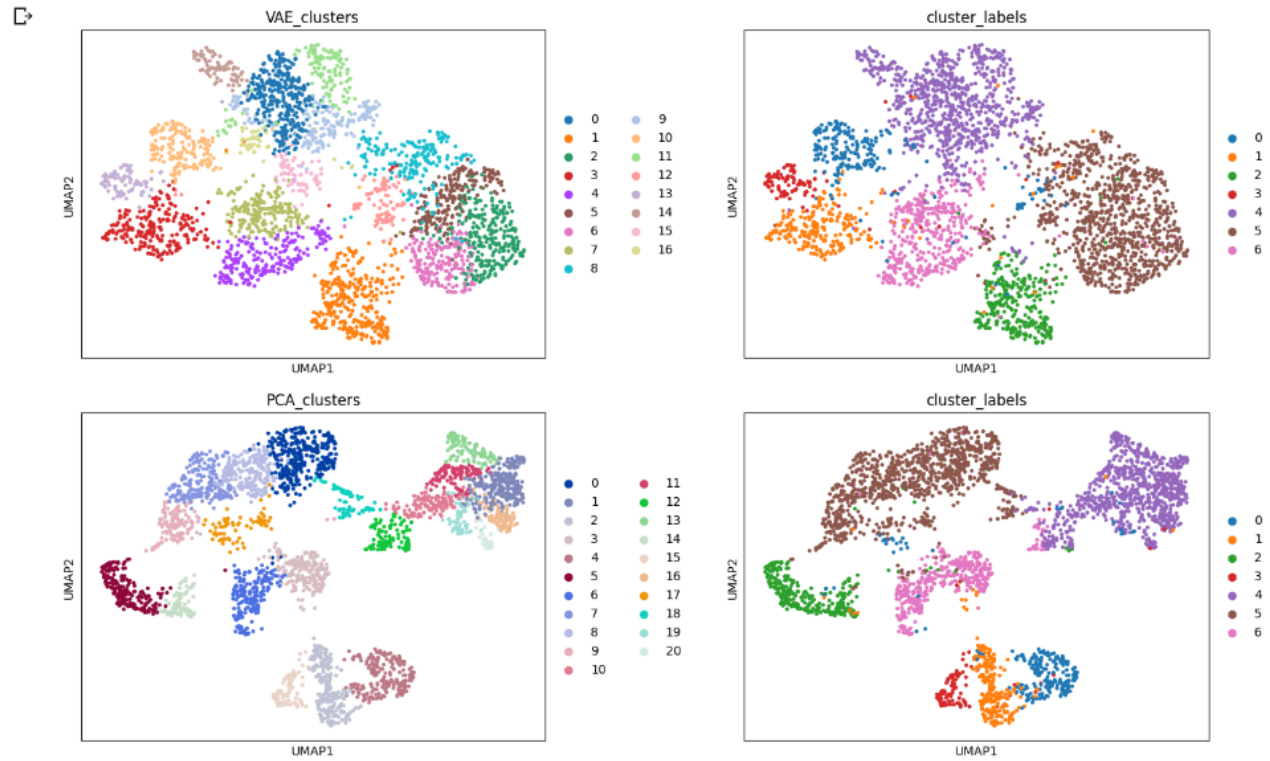


羊土社
YODOSHA

- 第1章 機械学習の概要とライフサイエンス研究への応用
- 第2章 Google Colaboratory, Pandas, Matplotlib, NumPy の基礎
- 第3章 教師あり学習のためのデータ前処理
- 第4章 scikit-learn を用いたトランスクリプトームデータの分類
- 第5章 PyTorch を用いたトランスクリプトームデータの分類
- 第6章 実践編 (1) : 生命科学・医歯学分野の画像を用いた機械学習
- 第7章 実践編 (2) : 腫瘍特異的ネオ抗原の機械学習を用いた予測
- 第8章 実践編 (3) : シングルセル解析とVAE
- 第9章 実践編 (4) : エピジェネティクスを含む多階層の統合によるがん研究
- 第10章 実践編 (5) : タンパク質の「言語」の法則を解き明かす ~ アミノ酸配列からのタンパク質局在の予測
- 第11章 実践編 (6) : AI 創薬へのはじめの一步
- 第12章 発展編 (1) : 機械学習を用いたアプタマー配列の解析と創薬
- 第13章 発展編 (2) : 機械学習によるマイクロバイオームと機能未知遺伝子の解析 ~ メタゲノム・対偶遺伝学・近傍遺伝子解析
- 第14章 終章 : さらなる学習のためのリソース



ch08_eijwat_230529_v2.ipynb



ARI score : clusters_label vs PCA_clusters 0.344
ARI score : clusters_label vs VAE_clusters 0.387



A I の動作環境概説

1) Google Colab

<https://colab.research.google.com/>

2) 自然科学研究機構・計算科学研究センター（分子研）

<https://ccportal.ims.ac.jp/>

3) ローカルサーバー

<https://doraemonkokoro.blogspot.com/2021/>

A I の勉強の仕方

A I の業界は、徹底したオープン作戦によって超高速での発展を可能にした。

変化が非常に激しいので、これまでの科学分野における情報の取り方では追いつかない。学会&論文&教科書からSNS&arXiv&githubへ。それでももはや変化が激し過ぎて全容は追いきれない（これ大問題）。

また最先端が一部のメガ企業の独占になりつつ（これも大問題）。

しかしメガ企業の動向だけに振り回されず、オリジナルのアイデアを追求している研究者も多くいます。やはり丹念に情報を集めておくしかない。

A I の未来

いずれコードも学習もいらない時代がくる。基盤 A I はすでに現実化し、その次の汎用 A I も目の前か。

「計算資源や倫理」の問題によって、抑制がかかるステージが来るかもしれない。しかし、それを A I の限界と勘違いしてはいけない。

「やりたいことがある人」にとって最高の時代になります。

ご清聴ありがとうございます

渡辺英治（NIBB/TSBセンター A I 解析室）

eiji@nibb.ac.jp