

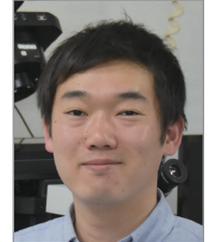
[植物と情報処理] <カテゴリ② 植物学を加速する情報処理技術>

2.1 AI 技術による植物発生研究



近藤洋平

生命創成探究センター 定量生物学研究部門



発生理解のための AI 技術とは

生物学における「発生」ないし「形態形成」とは、多数の細胞が相互のコミュニケーションを通じて協働し、我々の目に映るさまざまな生命体を作り出すプロセスを指す。近年、発生学の研究においてさまざまな情報・統計科学の技術が応用され、成果を生み出しつつある。この分野は生物への応用として似たところのある医療 AI や農業 AI になぞらえて「発生 AI」と呼び得るだろうが、それらと異なり「器官や個体の形成という現象への理解を深める」という一見漠とした目標に資するものであるために、分野外の研究者には研究動機や内容が分かりにくい。しかし近年の関連分野の進歩もあり、望みの機能を持った組織・器官・個体の設計が現実的な可能性とされるようになってきているなど潜在的なインパクトは大きく、多くの研究者を惹きつけ得るものがあると考えている。そこで本稿では生物学の話題に馴染みのない読者にも向けて、「発生 AI」でなされている試みと今後の展望を紹介したい。この目的に関連し、以下では植物を主要な話題とする一方で動物や生体外での培養システムを対象とした研究についても言及する。というのは、AI 技術の発生学への応用は動物・植物の垣根を超えてなされてきたため、話題を植物のみに限定することはかえって一貫性を持った研究史や業界動向の紹介を困難にするためである。

できあがった形を理解する

形を定量化する

発生研究において欠かせないステップは、生物の器官や個体の形態を定量的に表現することである。定量化によって、ゲノム配列や気候など生物学的に興味深い諸条件と形態の関係が格段に調べやすくなる。私を含めた分類学の素人でも道端に生えている草木の枝や葉の形が多様であることは見てとれるが、これらの形態はただ偶然に生まれたのだろうか、それともたとえば力学的な最適化の結果なのだろうか？ シーケンシングと呼ばれる技術の革命によってあらゆる種のゲノム配列を低コストかつ高精度で読むことが可能となった現代においても、上記の問いに答えるには昔ながらの形態定量化という営みに立ちかえる必要がある。また当然ながら、絶滅し化石でしか確認できない種についてはゲノム配列が失われてしまっており残っている情報は形態くらいしかない。そこでさまざまな形態定量化技術が開発されてきており、たとえば葉の輪郭を周期変数として捉えフーリエ解析によって特徴量を得る手法は広く用いられている。これは非常に汎用的かつ有効なやり方である一方、容易に想像されるように、形態の直感的なパラメトライゼーションにはなりにくい。

そこで生物学的に解釈しやすい特徴量セットを画像や点群による表現からデータ駆動的につくる試みが生まれている。特に注目を集めているのは、深

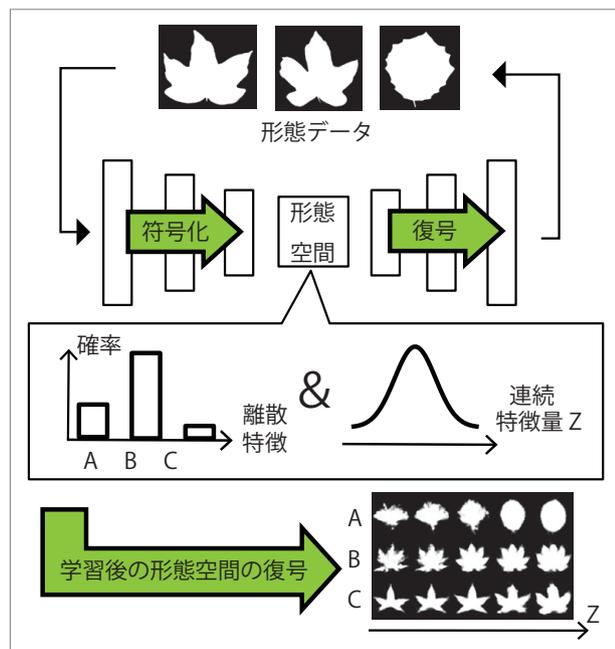
特集

Special Feature

層表現学習モデルの変分自己符号化器 (VAE) である。VAE は分子構造への応用などで示されるように、問題やデータの性質に合わせて符号化方法や特徴量が住む空間のトポロジー・計量を設定できる自由度に魅力がある。そこで筆者らは、植物形態データに潜む種の違いといった離散的な変動と微小環境の違いといった連続的な変動を切り分けつつも同時に扱うというハイブリッド非線形主成分分析を試みた。その概要を図-1 にまとめた。葉形態データ (UCI Repository, One-hundred plant species leaves data set) に適用したところ非常に直感的な特徴が得られることに驚かされた。ただし画像に対する VAE に基づく手法は画像の回転の取り扱いなどに難があり、現状では人間が設計した特徴量を用いる既存手法に対する優位性を主張できる段階にない。今後の発展が期待される。

形の進化学

さて、前節のようなやりかたによって、形態のうまい定量化ができたとする。その後に実行可能にな



■図-1 VAE (特に、その変種である JointVAE) による、葉形態データからの離散的・連続的特徴の同時抽出

る解析は多岐にわたるが、ここでは統計的機械学習と関係の深い祖先状態復元を取り上げる。祖先状態復元とはその名の通り現代の生物種の祖先の形態や遺伝子の配列を推定する手法を指し、化石も残っていないほど古い花の形態や、枯葉に擬態する蛾の進化プロセスなどについての知見をもたらしてきた。魔法のように聞こえるが、これは生物種がいかなる枝分かれによって生まれてきたかという系統樹の情報によって可能となる。形態の進化を系統樹上の確率過程によってモデリングし、最尤法などによって推定するわけである。問題の性質上、不確定性を見積もりが強く望まれるためにベイズ的な手法が人気を集めており、マルコフ連鎖モンテカルロ (MCMC) 法、特に Reversible-jump MCMC がよく用いられる。

形成過程を理解する

上で話題にしてきた生物の形は、どのようなメカニズムでつくられるのか。動物・植物問わず盛んなのは、細胞が集まった組織を流体力学モデルによって捉え、天気予報や大気海洋科学で用いられる方法論であるデータ同化によってシステム同定するというアプローチである。ただし、近年のバイオメカニクス研究の急速な進展と、Physics-guided machine learning などと呼ばれる機械学習と物理学的手法の融合に関する知見の増加によって急速に変革されつつあり、注視に値する問題領域である。

自然知能としての植物

これまでの話題は、人間が自然界を理解するために統計学や機械学習の分野で生まれた手法を利用するというものだった。しかし自然界を理解しなければならないのは人間に限らない。生物学の研究対象として最も単純なシステムの1つである大腸菌ですら、食べ物や毒となる分子の濃度の勾配を検知し、

特集

Special Feature

泳ぐ向きを適応的に変えている。最近では、そのために使われている大腸菌の生化学システムの特徴は最適フィルタとして説明できるとの主張もあらわれてきた。これは、大腸菌よりも相当に複雑なシステムである植物の知能を研究するにあたって重要な教訓を与える。つまり、植物細胞の振舞いを生み出すメカニズムを生化学・生物物理的に理解するだけでは十分でなく、それを学習や推論や制御のモデルによって説明する必要があるということである。最もポピュラーな自然知能システムである脳を植物は持たないが、その発生において多種多様な分子の分泌や感知を通し細胞間の密なコミュニケーションを行っていることが、近年ますます明らかになっている。そして「ベイズ推定としての形態形成」や「植物神経科学」といったトリッキーなフレーズまで提唱されているほどである。

そこで重要な課題は、ある種の分散型計算機である植物の挙動に適した学習・推論のモデルを選び出すことである。これは細胞や分子レベルで考えられてきたモデルとは異なったものになるだろう。セルオートマトンのように古くから自然知能の文脈で調べられてきたモデルは有望だが、現状の知見は定性的なものにとどまる。そこで我々はデータ駆動的にセルオートマトンを構成するというやり方でこの問題に挑戦しているものの、それが普遍的に有効なアプローチという気もしない。過去には神経科学からシャノンの情報理論を利用した時系列解析が、制御工学からは積分フィードバック機構などのモデルが生物学に持ち込まれたように、異分野で蓄積された知見を取り入れていく必要がある。

人工知能としての植物

本稿では、標語的に言うと「人工知能による植物の理解」と「自然知能としての植物の理解」という2つの流れを紹介した。最後に、その2つが合流することにより今後生まれてくるとされる新たな分

野、「人工知能としての植物」について簡単な議論をし、むすびにかえたい。遺伝子やタンパク質の改変ないし新規設計によって細胞に目的の機能を持たせる試みは合成生物学と呼ばれすでに数十年の歴史を持つ。最近では改変した免疫細胞による治療技術が米国FDAの認証を受けるに至った。無論それらの技術は分子生物学的には高度なものであるが、計算という観点からは素朴なものである。一方で基礎研究レベルでは、遺伝子やタンパク質がお互いの機能を相互に活性化/抑制しあっているメカニズムを利用して複雑な回路を組み上げる研究がいくつも生まれている。興味深い例として、数のカウントや、制御工学に基づいたフィードバック機構であるPIDコントローラの生体分子による実装が挙げられる。ただし実験室内の理想化された状況での研究結果からは、このような複雑なシステムが細胞というホストのシステムと干渉した上で頑強に動作し個体のレベルで意図した機能を発揮できるかは明らかではない。しかしその課題は、人工知能による自然知能としての生物理解の進歩によって徐々に解決されていこう。そのとき、すでに街路樹などの形で都市環境に溶け込んでいる植物は、魅力的な設計対象となる。昼に光合成したエネルギーを使い夜に葉を光らせ道を照らす樹木、といったイメージはフィクションの世界でも見かけるところである。もちろんその際に生じる倫理的・法的・社会的課題は安易に考えられるべきものではないが、夢のある未来像であると言えるだろう。

(2021年8月30日受付)

■近藤洋平 y-kondo@nibb.ac.jp

2013年東京大学大学院総合文化研究科博士課程修了, 博士(学術).
2017年より現職. 統計的機械学習を用いた細胞の研究に従事.