

ノーベル物理学賞と化学賞 - NIMSとAI for Science -

東京大学 大学院新領域創成科学研究科
複雑理工学専攻
岡田 真人

内容

- 2024年ノーベル物理学賞
 - 脳のモデル
 - AIとの関連
 - 原典主義ではなく、波及効果主義
- AIの歴史
 - ゲームソフトの開発と終焉
 - 2016年のAlpha Goの登場
 - Demis HassabisによるAI for Science の提案
- 国内のAI for Science のトップランナーとしてのNIMS
 - 今後のNIMSのAI for Scienceの展望

内容

- 2024年ノーベル物理学賞
 - 脳のモデル
 - AIとの関連
 - 原典主義ではなく、波及効果主義
- AIの歴史
 - ゲームソフトの開発と終焉
 - 2016年のAlpha Goの登場
 - Demis HassabisによるAI for Science の提案
- 国内のAI for Science のトップランナーとしてのNIMS
 - 今後のNIMSのAI for Scienceの展望

2024年ノーベル物理学賞

- The Nobel Prize in Physics 2024 was awarded jointly to John J. Hopfield and Geoffrey E. Hinton "for foundational discoveries and inventions that enable machine learning with artificial neural networks”
- 正式な発表では、ニューラルネットを用いた機械学習について、物理学賞が授与された。
- 岡田の私見
 - 脳のモデルとしてのニューラルネットワークに関しても、大きな寄与があった二人の受賞

脳のモデル (1/3)

- Hopfield
 - 1982年にPNASでHopfieldモデルを提案
 - Hopfieldモデルと統計物理学のランダムスピン系の対応を示し、記憶容量という明確な数理指標を提案することで、多くの統計物理学者が脳科学に参入することになった。
 - それから40年を超え、脳科学に参入した統計物理学者は、理論脳科学だけでなく実験脳科学に影響を与えている。
 - Hopfieldモデルから提案されたアトラクターニューラルネットワークの概念は、現代の脳科学では必要不可欠な概念になっている。

脳のモデル (2/3)

- Hinton
 - 1985年にBoltzman Machineを提案
 - 1986年にNatureで誤差逆伝播法を提案し、第二次ニューラルネットワークブームの火付け役の一つになった。
 - RBM(Restricted Boltzman Machine)により、大規模多層パーセプトロンの学習が可能であることを示した。
 - 2012年にFukushimaにより提案された脳の視覚野の構造に基づくネオコグニトロンのアーキテクチャを用いたSuper Visionで、2012年IRSVRCで2位以下に圧倒的な差をつけて勝利

脳のモデル (3/3)

- Hinton

ILSVRC 2012

チーム	Result	手法
SuperVision	15.3%	Deep CNN
ISI	26.1%	FV + PA
OXFORD_VGG	26.7%	FV + SVM
XRCE/INRIA	27.1%	FV + SVM
Univ. of Amsterdam	29.6%	FV + SVM
LEAR-XRCE	34.5%	FV + NCM

https://www.itmedia.co.jp/makoto/articles/1507/27/news067_4.html

AIとの関連

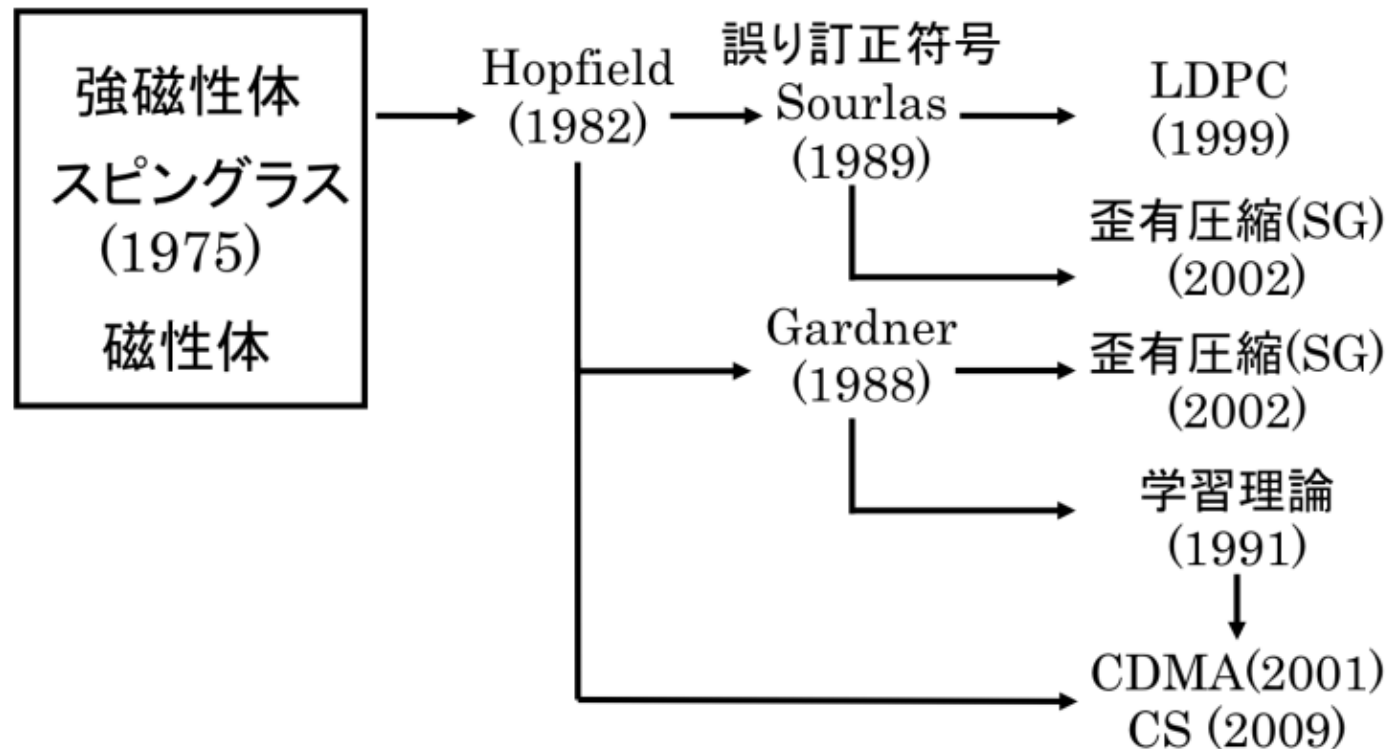
- Hopfield
 - ChatGPTに代表されるLLM(Large Language Models; 大規模言語モデル)との関連が議論されている。
- Hinton
 - Super Visionをきっかけに、2016年のAlphaGoからLLMに至る現代風AIの源流を創った。

原典主義ではなく、波及効果主義

- Hopfield
 - 甘利俊一東京大学名誉教授は、Hopfieldの1982年の提案の5年前に、Hopfieldモデルを内包するモデルを提案した。現在、HopfieldモデルをAmari-Hopfieldモデルと呼ぶべきだという意見がある。
- Hinton
 - Super Visionの原点であるネオコグニトロンは福島邦彦電気通信大学特別栄誉教授が1980年に提案したものである。
- この実績は、ノーベル賞審査会の審査報告誌にも記載されている。
- つまり、今回の受賞は、原典主義ではなく、波及効果主義であることがわかる。

Hopfieldモデルの波及効果

情報統計力学とデータ駆動科学の創成 (1/6)



CS: Compressed Sensing(圧縮センシング)

STAM Methodsのノーベル物理学賞解説に記述予定

Hopfieldモデルの波及効果

情報統計力学とデータ駆動科学の創成 (2/6)

- Hopfieldモデルの解析の日本人の寄与は絶大
- 1987年のAmit, Gutfreund and Sompolinskyの記憶容量のレプリカ法
- 1988年のAmariとMaginuの記憶想起の引き込み領域などの統計神経力学
- 1992年のShiinoとFukaiの記憶容量のTAP法に基づくSCSNA(Self-Consistent Signal to Noise Analysis)。レプリカ法と等価な結果
- 1995年のOkadaによる、レプリカ法/SCSNAと統計神経力学の統合理論

Hopfieldモデルの波及効果

情報統計力学とデータ駆動科学の創成 (3/6)

- 1982年のHopfieldモデルの提案後、SoulausがHopfieldモデルの影響を受けて、情報理論の誤り訂正符号のSoulausを提案。
- 1999年にKabashimaとSaadがSoulaus符号を出発点に、Low Density Parity Check符号のレプリカ解析と平均場近似アルゴリズムを提案。
- これを機に、情報統計力学と呼ぶべき分野が創成。
- 情報理論の有歪み圧縮へも展開。

Hopfieldモデルの波及効果

情報統計力学とデータ駆動科学の創成 (4/6)

- 学習理論では、1988年のGardnerのパーセプトロンの記憶容量のレプリカ解析を参考に、学習理論にも情報統計力学は展開された。
- さらに通信工学のCDMAにも情報統計力学は展開される。
- 2009年には、Kabashima, WadayamaとTankaにより、LASSOへも情報統計力学は展開される。

Hopfieldモデルの波及効果

情報統計力学とデータ駆動科学の創成 (5/6)

- 文科省の特定領域で二期連続で情報統計力学のプロジェクトが採択

1. 平成14年度～平成17年度

確率的情報処理への統計力学的アプローチ

領域代表者: 田中 和之

(東北大学・大学院情報 科学研究科・助教授)

2. 平成18年度～平成21年度

情報統計力学の深化と展開

領域代表者: 樺島 祥介

(東京工業大学・大学院 総合理工学研究科・教授)

Hopfieldモデルの波及効果

情報統計力学とデータ駆動科学の創成 (6/6)

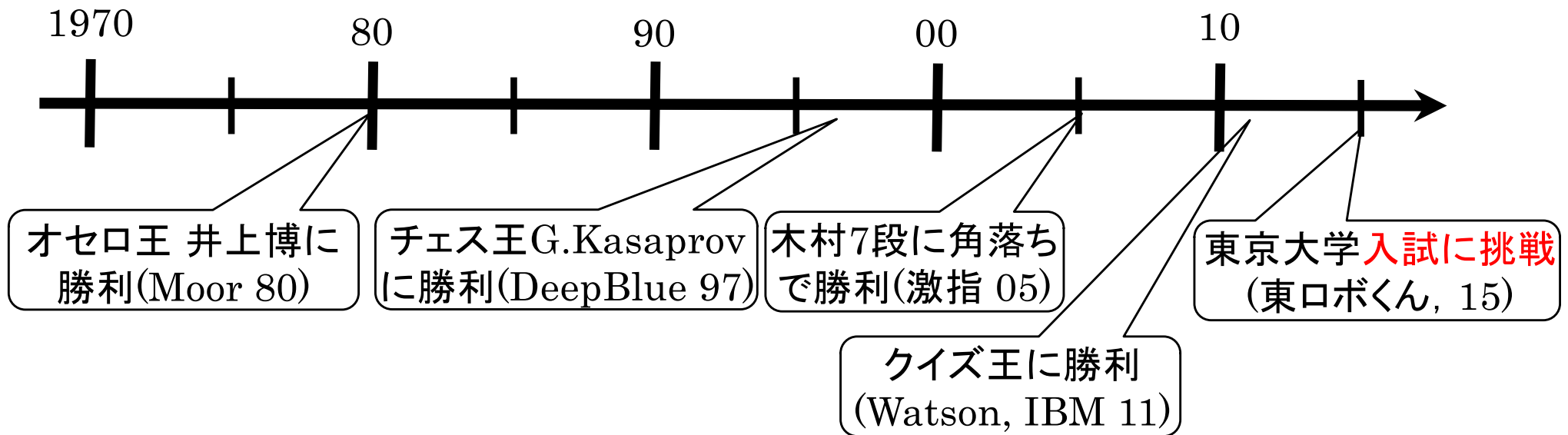
- これら二つの後継プロジェクトとして新学術領域研究に採択
- 平成25年度～平成29年度
- スパースモデリングの深化と高次元データ駆動科学の創成
- 領域代表者:岡田 真人
(東京大学・大学院新領域創成科学研究科・教授)
- スパースモデリングを共通の情報数理基盤とし、生物学地学を普遍的に議論できる**データ駆動科学の創成**を目指す。

内容

- 2024年ノーベル物理学賞
 - 脳のモデル
 - AIとの関連
 - 原典主義ではなく、波及効果主義
- AIの歴史
 - ゲームソフトの開発と終焉
 - 2016年のAlpha Goの登場
 - Demis HassabisによるAI for Science の提案
- 国内のAI for Science のトップランナーとしてのNIMS
 - 今後のNIMSのAI for Scienceの展望

AIの歴史

- AIの能力のテストベッドとして、ルールと勝敗が明らかにはゲームが用いられてきた。
- IBM: 1997年DeepBlueでKasparovに勝利(チェス)
- IBMのビジネスモデルの変革: ハードからソフトへ

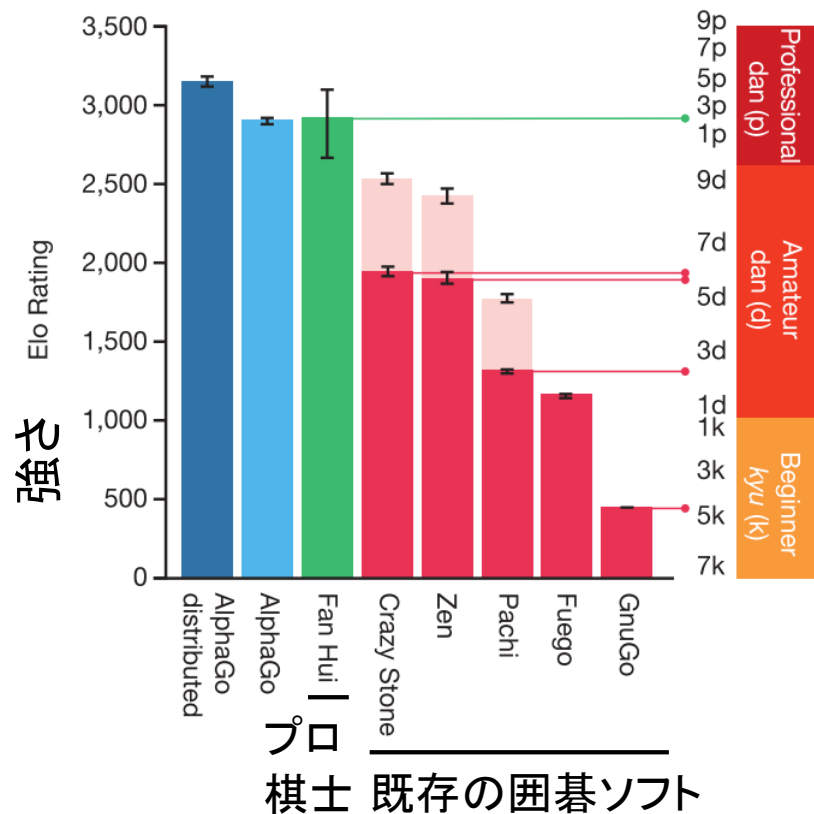


AI for Scienceとデータ駆動科学 —ベイズ計測とVMAの提案—
五十嵐 康彦, 竹中 光, 永田 賢二, 岡田 真人

Mastering the game of Go with deep neural networks and tree search

Silver, D. (Google DeepMind) et al.

深層強化学習に基づく囲碁ソフト「AlphaGo」
欧州チャンピオンのプロ棋士に5戦全勝



Nature, 2016年1月28日出版

2024ノーベル化学賞受賞

Demis HassabisによるAI for Science

- I **don't think** much about **robotics** myself personally.
- What I'm really excited to use this kind of **AI for is science**, and advancing that faster.
- I was giving a talk at **CERN** a few months ago.
- I think it'd be cool if one day an AI was involved in **finding a new particle**.

<http://www.theverge.com/2016/3/10/11192774/demis-hassabis-interview-alphago-google-deepmind-ai>

Next target of Demis Hassabis AI for Science



*"I THINK IT'D BE COOL
IF ONE DAY AN AI WAS
INVOLVED IN FINDING A
NEW PARTICLE."*

<http://www.theverge.com/2016/3/10/11192774/demis-hassabis-interview-alphago-google-deepmind-ai>

内容

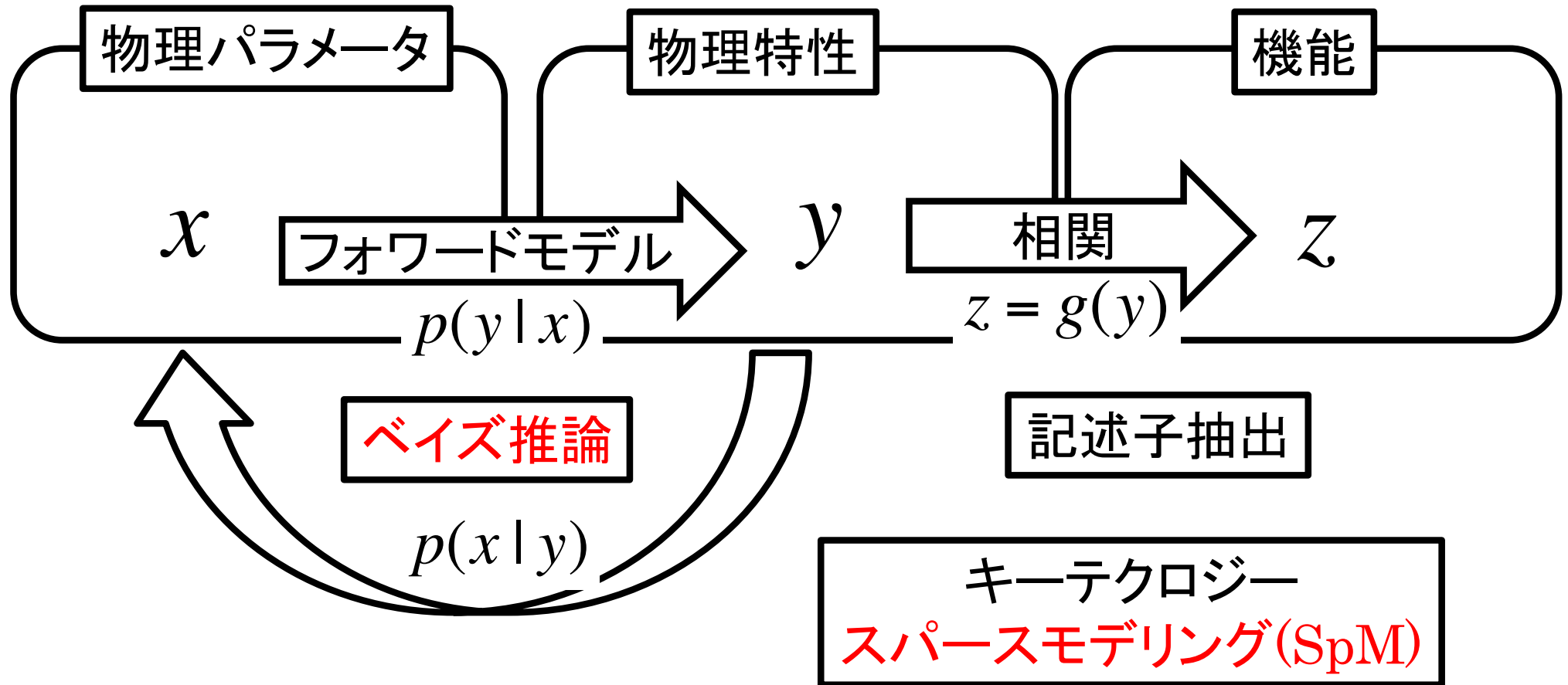
- 2024年ノーベル物理学賞
 - 脳のモデル
 - AIとの関連
 - 原典主義ではなく、波及効果主義
- AIの歴史
 - ゲームソフトの開発と終焉
 - 2016年のAlpha Goの登場
 - Demis HassabisによるAI for Science の提案
- 国内のAI for Science のトップランナーとしてのNIMS
 - 今後のNIMSのAI for Scienceの展望

国内のAI for Science トップランナーとしてのNIMS

- 2015年7月「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(MI²I)」
- 2017年4月「統合型材料開発・情報基盤部門 (MaDIS)」
- 技術開発・共用部門「材料データプラットフォーム(MDPF)」
- マテリアル基盤研究センター
- STAM Methods責任編集機関として、MI(マテリアルズ・インフォティクス)と計測インフォマティクス(Measurement Informatics)を世界規模で支援
 - 今回のノーベル物理学賞に関しても、解説記事を世界発信

今後のNIMSのAI for Scienceの展望

機能発現メカニズム解明のためのAI



Igarashi, Nagata, Kuwatani, Omori, Nakanishi-Ohno, and Okada “Three levels of data-driven science” International meeting on High-dimensional Data-Driven Science (HD3-2015), *Journal of Physics: Conference Series*, 699 (2016) 012001(2016)

今後のNIMSのAI for Scienceの展望

- NIMSがこれまでのAI for Scienceの国内のトップランナーを維持するとともに、世界のAI for Scienceをリードできる立場を目指す。
- そのためには、NIMSの各部門とMDPFおよびマテリアル基盤研究センターを強化し、単なる機械学習のアルゴリズム開発にとどまらない、データ駆動科学に立脚したAI for Scienceを目指す。
- STAM Methodsを使って、この成果を世界発信することでNIMSを世界のAI for Scienceのメッカにすることを目指す。
- この素地が今のNIMSにはあると、私は確信している。