AI数学者を作ろう

小松優治,森田湧登,目瀬道瑛,落合拓真

1. なにをつくるか

1.1 プロジェクトの目的

本プロジェクトの目的は、強化学習を用いて数学の定理を自動で発見・証明するAI、すなわちAI数学者を開発することである。近年、文章や画像の自動生成を行うAIの活躍が目覚ましく、特にチャット型AIがユーザーに知識を提供するツールとして注目を浴びている。しかし、それらはある種のヒューリスティクスに過ぎず、数学の定理に代表されるような演繹的な知識体系とは本質的に異なるものである。そこで私たちは、証明そのものの生成に注目し、数学の定理を自動で発見・証明するAIを開発する。これまで、所与の命題に対してその証明を探索する自動証明技術については、AIを利用したものを含めて開発が行われてきたが、本プロジェクトのように最終的な命題そのものも含めて証明の生成を行う、すなわち定理の発見を行うような技術は未だ存在しない。このように本プロジェクトは、数学者の営みを再現するという点で斬新であるだけでなく、演繹的に正しい答えを出力するAI技術という点でも画期的である。

1.2 背景

1.2.1 強化学習

強化学習とは、行動により報酬が得られる環境を与え、各状態で報酬の総和の最大化に繋がる行動が出力されるように、モデルのパラメータを調整し得た経験から学習する方法である。特に、強化学習は行動の各状態における行動の選び方を学習するため、各行動を評価するタスクを解くことに適している。

強化学習の成功例として、Alpha Starが知られている。Alpha StarはStar Craft2というゲーム(戦略を元に戦闘ユニットを操り、敵陣地を破壊するアクションゲーム)を対象としたAIであり、次のような観点から評価されている。

▶ 取り扱う行動パターンの膨大さ

Alpha Starの行動パターンの数は1億を超えるとも言われている。囲碁を対象とした強化学習として名高いAlpha Zeroの行動パターンは高々361(19×19マス)であり、Alpha Starの行動パターンの膨大さが伺える。

▶ 勝率と学習精度の高さ

Alpha Starは2019年Star Craft2のトップランカーであるTLO氏とMaNa氏に勝利し、10連勝を成し遂げた。Alpha Starの1分間あたりの操作回数は280であり、これはMaNa氏の操作回数390を下回る数字である。つまり、人間よりも高速に操作することで勝利したのではなく、綿密な戦略をAIが学習することで勝利したことが分かる。

このように強化学習を用いたAIは、ゲームをはじめとした様々な場面でその有用性を発揮している。しかし、 $\underline{[n-1]}$ で指摘されている通り、人間の知能の中でも重要な数学的推論能力はまだ発展途上である。より価値のあるAIの実現に向けて、数学における定理の自動証明や自動生成の研究に多くの研究者が取り組んでいる。

▶ AIによる定理の自動証明

定理の自動証明は形式言語を用いて表現された対象の定理と既知の数学的事実を入力として与えたときに、自動的に対象の定理の証明を生成するものである。このプロセスは演繹的な推論であり、AIの数学的推論能力の発展において非常に意義がある。定理の自動証明に関する研究は近年大きな進歩を遂げており、命題論理や述語論理、プログラム合成といったさまざまな数学的領域で有望な結果が報告されている [n-2][n-3][n-4][n-5]。

➤ AIによる定理の自動生成(定理の発見)

上述のように定理の自動証明においては優れた成果が上がっている。しかしながら、定理の 自動生成、つまり既知の数学的事実を基に演繹的推論を行い、未発見の定理を自動的に発 見・証明するAIの研究は未だに有望な成果は得られていない。

1.2.2 数学における証明

ヒルベルトの形式主義以降、数学は記号列の機械的な操作として体系化されている。特に証明とは、公理と推論規則の適用のみによって得られる論理式の列のことであり、定理は証明の最後に現れる論理式のことである。

例えば、図1に示すように「"A"、"A→B"」という二つの公理と、「"X, X→Y \vdash Y" (MP)」という一つの推論規則からは、証明「"A (公理)"、"A→B (公理)"、"B (MP)"」が得られる。ここで、結論にあたる「"B"」がその証明の定理となる。この際、例えば "A"が「ソクラテスは人間である」といった主張であっても、"ソクラテス" や "人間" などの意味に依存せず、常に "B" が得られる。数や "等しい"、"足す"といった概念についても同様であり、その意味に立ち入る必要はない。このように数学において証明や定理は、意味に依存しない記号の列として扱うことができる。

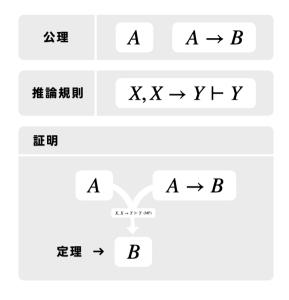


図1:数学における証明の例

1.3 目標と提案内容

私たちは強化学習を用いて数学の定理生成を行うAI、すなわちAI数学者を開発することを目標とする。AI数学者の実現は後述のように、AIと数学の双方の研究において画期的であり、技術的にも学術的にも新たな扉を開くものとなる。

図2に示すように定理の証明はグラフ理論における木を用いて表現することができる。 $A \vdash A \Leftrightarrow B, A \vdash A \Leftrightarrow 1$ つのノードとして見なすと、全体が木構造を成すことがわかる。証明木の葉にあたる $A \vdash A \Leftrightarrow B \vdash B$ は公理を表し、証明木の根の帰結部分にあたる $\neg(A \land \neg B) \vdash A \to B$ は定理を表す。 また、証明木の親ノードと子ノードの間にはマルコフ性が成立することから、強化学習の問題設定に適合しており、強化学習を用いた定理生成が可能となっている。

$$\frac{A \vdash A \stackrel{\text{(Ax)}}{=} (Ax)}{A \vdash B, A \stackrel{\text{(RW)}}{=} (Ax)} \frac{B \vdash B \stackrel{\text{(Ax)}}{=} (Ax)}{A \vdash B, A \vdash B \stackrel{\text{(LW)}}{=} (Ax)} \\
\frac{A \vdash B, A \vdash B \stackrel{\text{(RS)}}{=} (Ax)}{A \vdash B, A \vdash B \stackrel{\text{(RS)}}{=} (Ax)} \\
\frac{A \vdash B, A \vdash B \stackrel{\text{(RS)}}{=} (Ax)}{A \vdash B, A \vdash B \stackrel{\text{(LS)}}{=} (Ax)} \\
\frac{A \vdash B, A \vdash B \stackrel{\text{(LS)}}{=} (Ax)}{A \vdash B, A \vdash B \stackrel{\text{(LS)}}{=} (Ax)} \\
\frac{A \vdash B, A \vdash B \stackrel{\text{(RS)}}{=} (Ax)}{A \vdash B, A \vdash B \stackrel{\text{(LS)}}{=} (Ax)} \\
\frac{A \vdash B, A \vdash B, A \land \neg B}{A \vdash B, \neg B \vdash B} \stackrel{\text{(LS)}}{=} (Ax)}$$

図2:定理証明のグラフ理論における木を用いた表現

2. どんな出し方を考えているか?

本プロジェクトの成果を研究領域において最大限に活用できるよう、以下のように公開する。

▶ さまざまな数学者らが活用できるようなデータベースの公開

このAIによって発見された膨大な数の定理および証明をデータベースに保存して公開することで、数学者や学生にとっての有用なツールとなる。具体的には、ある命題が定理として証明されているかを確認したり、類似の定理や理論がないか検索したりすることができる。(図3参照)

▶ 数学者としての論文の投稿

数学の研究では、既存の未解決問題を一つ取り挙げ、その証明を与えるだけでも、論文を執筆することができる。これは実験やフィールドワークが必要な他分野とは異なり、機械で代替しやすい。このAIが完成した際には、例えばIBMのWatsonのように1人の研究者として擬人化し、論文の執筆と発表を行ってもらう。

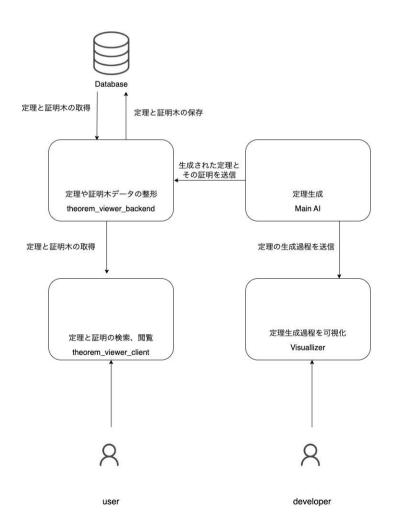


図3:定理生成とそのデータベース化のイメージ

3. 斬新さの主張、期待される効果など

3.1 プロジェクトの斬新さ

本プロジェクトにおいて開発するAIの斬新なポイントはその数学的推論能力と、行動パターンの膨大さである。前述のようにあらかじめ与えられた命題に対し、既知の数学的事実を用いてその証明を生成するという定理自動証明AIに関しては有望な研究結果が得られているものの、特定の命題を証明の目標とせず、既知の数学的事実のみから演繹的なプロセスによって新規の定理を見つけ出すAIは報告されていない。また、本プロジェクトで開発するAIは行動パターンが無限に存在する問題を扱う。これは行動パターンが1億程度と高々有限のAlpha Starとは根本的に異なり、未開発の領域である。

3.2 達成によって期待される効果

既存のAIでは達成されていないこのような技術が実現すれば、AIの領域においてはもちろんのこと、数学の領域における研究に対しても破壊的なイノベーションとなる。具体的には以下のような成果が期待される。

> 汎用人工知能研究への貢献

汎用人工知能(Artificial General Inteligence)とは、特定のタスクに特化した人工知能ではなく、人間のような理性思考と計画能力を持つ人工知能である。汎用人工知能の実現に向けた課題の1つに、環境と行動のパターンが無数に存在し、学習が適切に進行しないことが挙げられる。本プロジェクトで扱う問題は、環境と行動のパターンが無限に存在する問題であり、その成果が汎用人工知能研究の発展に貢献することも十分に考えられる。

▶ 未発見の定理の証明

整数論などの分野を中心に、初等的にみえるにもかかわらず、未だ解決していない数学の問題が多数存在する。例えば、ゴールドバッハ予想(任意の4以上偶数は、2つの素数の和として表すことができる)などがある。このような単純な言明は機械的、形式的にも扱いやすく、AIによって突如として解決する可能性がある。またそのような問題以外にも、単純で重要な問題であるにも関わらず、未だ注目、検討されていないような定理が、次々と発見・証明されることも見込まれる。

▶ 数学者の仕事の変化(問題の証明から公理系の設定へ)

既存の問題の証明に取り組むだけでなく、公理系を設定により新たな議論の枠組みを提供することも、数学者の重要な仕事である。ガロアの抽象代数やカントールの集合論がそれらの代表例である。定理自動生成AIにより。将来の数学者は公理系の設定以降の仕事を全てAIに任せることができ、新たな理論を生み出すなどのクリエイティブな仕事に専念することができる。

▶ 定理空間の構築(クラスタリングなど)

提案する手法では、各定理が実数のベクトルにエンコードされる。そのため、定理全体が成す空間(位相空間)が定義され、各定理がある種の座標として表現できる可能性がある。これにより、定理同士の関係を解析的に説明したり、公理系がなす空間間の関係を論じたりできる。この "定理空間" のアイデアはこれまで定式化されたことがなく、数学の理論としても画期的である。

4. 具体的な進め方と予算

4.1 改善手法と時期

- (1) 主に開発を行う場所:名古屋大学
- (2) 使用する計算機環境: AWS等のパブリッククラウドサービス、Linux
- (3) 使用する言語、ツール: Python, TypeScript (React), VSCode, Git, github, Docker
- (4) 各クリエータの作業の分担:
 - ▶ 小松:強化学習の調査と応用手法の検討
 - ▶ 森田:数学的な基礎理論の提供
 - ▶ 目瀬:システム設計、開発(AI実装以外)
 - ▶ 落合:強化学習の調査と応用手法の検討
- (5) ソフトウェア開発に使う手法: githubを用いて複数人でアジャイル開発のように実装とAIの性能 実験をこまめに繰り返しながら開発を行う

(6) 開発線表:

1. 命題論理で定理生成AIのプロトタイプを作成(完成済み)

定理とその証明木を生成するAIのプロトタイプ制作を行った。定理と定理の関係を可視化するビジュアライザも開発し、AIが定理を生成している様子を見ることができる。現在はシステムの大規模化を見越し、コードのリファクタリングに取り組んでいる。

2. 最新の強化学習を調査(2ヶ月)

行動空間の拡張に向けて、最新の強化学習手法を調査する。ゲームAIを中心に最新手法をキャッチアップし、本研究への応用を検討する。

また、証明木はグラフであることからグラフニューラルネットワークや、世界モデルの利用

も検討する。

3. 行動空間の拡張(5ヶ月)

行動空間を拡張した定理生成AIの研究開発を行う。行動空間の拡張手法の開発は、本研究の 肝であり、汎用人工知能研究への貢献が見込まれる。

4. 定理データベースの構築と公開(2ヶ月)

このAIによって発見された膨大な数の定理および証明をデータベースに記録し公開する。公開中もAIは定理を生成し続け、生成された定理は定理データベースに記録される。

5. 一階述語論理に拡張(2ヶ月)

プロトタイプ制作においては、最も簡単な論理体系である命題論理を対象とした。以降は、一般的な数学の体系(公理的集合論、数論、群論の公理系、ユークリッド幾何学など)への拡張に向けて、「一階述語論理」「Presburger算術」「Peano算術」の順に拡張を試みる。それぞれ、量化子の出現、数学的帰納法の原理、不完全性および決定不能性の対処が課題として想定される。一年目では命題論理の直接的な拡張である一階述語論理に取り組む。

(7) 開発にかかわる時間帯と時間数:土曜日と日曜日:に各5時間ずつの、1人あたり週10時間の開発を予定している。

(8) 予算内訳をまとめた表:

名前	時給	時間	必要予算
小松優治	1,900	360	684,000
森田湧登	1,900	360	684,000
目瀬道瑛	1,900	360	684,000
落合拓真	1,900	360	684,000
合計	7600	1440	2,736,000

4.2 その他に想定される予算

▶ 高負荷の計算に耐えうる計算機環境

行動空間が巨大な人工知能の例として、Alpha Starが挙げられる。Alpha StarはStar Craft2というゲームを対象としたAIであり、このゲームのプロに10連勝したことで一躍有名になった。また、Alpha Starの行動パターンは1億とも言われ、その行動パターンの広さと勝率の高さから、ゲームAIの発展に大きく寄与した。本研究で扱うAIの行動パターンは無限に存在する。これはA

lpha Starの行動パターン数1億の比ではなく、高負荷の学習に耐えうる計算機が必要となる。Alpha Starの学習期間は14日間、この間に約200年間に相当するプレーを経験したと言われており、少なくともAlpha Starと同等の計算機環境が必要だと想定される。

> サーバー代

本プロジェクトは、発見した定理とその証明をデータベース化し公開することを目標としており、計算環境もクラウド上で構築する。計算環境としてAWSなどの利用を検討しており、その構築・運用資金として利用する。

5.提案者たちの腕前を証明できるもの

(1) 小松優治

- ➤ 経歴:名古屋大学工学部を卒業。フロントエンドエンジニアとして2年間インターンを経験 し、現在は自動運転車のシステム開発に従事。また解釈可能なAIの研究に従事。
- ▶ 使用言語: Python, C, C++, Fortran, Javascript, matlab, R
- ▶ 卒論:リザバー計算を用いた線形動的システム同定の非可解性証明
- ▶ 修論:BNNのモデル圧縮を用いた経済指標の性質解析

(2) 森田:名古屋大学工学部卒業

- ▶ デザイナーとしてスタートアップ企業に参加中
 - ✓ 複数社のWebサイトやロゴを担当
 - ✓ 現在は企画やCIのデザインに注力している
 - ✓ 本研究公開時のアプリデザインも担当予定
- ▶ 所属研究室のメンバーの7割が外国人であり日常的に研究において英語を使用している
- ▶ 専門は材料科学
 - ✓ 光触媒を用いた水分解の効率向上のための材料開発研究に従事
 - ✔ 学部の卒業研究では優秀発表彰を受賞

- (3) 目瀬: 名古屋工業大学情報工学科知能情報分野3年
 - EFREI短期留学プログラム(大学主催の情報技術者交換留学)に現在参加中
 - 主にWebサービス開発に関する技術とチームによるプロジェクト開発技術を勉強している
 - 使用言語: Java, Python, C, C++, JavaScript 等
 - Pythonを用いた機械学習の実装
 - JavaScript・Node.js, React等を用いたWebサービス開発が可能
- (4) 落合: 名古屋大学情報学部2年
 - 現在、機械学習モデル作成のインターンに参加中
 - ラベル付けにコストがかかるデータでの機械学習モデルの学習と検証についての研究に参加
- (5) 井上:名古屋大学情報学部卒業,同大学情報学研究科卒業予定(主席卒業)
 - 代数学・計算理論・形式言語理論の研究に従事
 - 研究業績
 - 日本学術振興会 2023年度特別研究員DC1 採用内定
 - 査読付き国際会議1本,英文論文誌2本(うち1本は査読中),
 - 国内学会発表4件(うち1件は研究奨励賞を受賞)
- (6) 佐藤:名古屋大学情報学部卒業、同大学院情報学研究科卒業予定
 - エンジニアとして2年間インターンを経験し、フロントエンド開発をメインにバックエンド開発やAWSを用いた開発を経験
 - 使用可能言語・フレームワーク: JavaScript, TypeScript, React, Express, Ruby, Ruby on Rails, Java, Spring Boot

- 組合せ最適化問題に対するアルゴリズム設計に関する研究室に所属
- DARP (乗合タクシー問題) に対する発見的解法の研究に従事

6.プロジェクト遂行にあたっての特記事項

井上及び佐藤は正式メンバーではなくアドバイザーとして参加。理論や実装に関してメンバーに助 言や協力を行う。雇用契約を結ばない予定のため、予算には記述しなかった。

7.ソフトウェア作成以外の勉強、特技、生活、趣味など

小松

勉強会

数学や機械学習の理論を読み解く思考能力と思考体力の体得を目的として、1回3時間・週に2回自主的な勉強会を開催。メンバーは年代・専門分野ともにバラバラで、異なる視点から多種多様な意見が溢れ出る。現時点で約1年間開催し続けており、扱った題材は10冊に上る。毎回宿題として定理の証明を課し、翌週の勉強会で証明の発表・検討を行う。

扱った題材:代数、位相、論理学、ルベーグ積分、多様体、PRML、ベイズ深層学習、ガウス過程、 強化学習

読書コミュニティ

本を読む習慣つけ、その楽しさを広めるために読書コミュニティを開設した。

月に1冊1900年代に書かれた本を選定し、コミュニティメンバーと協力しながら読み進める。月初め に、その本の感想や意見を交換し、本に対する理解を深める。初月の本はレヴィ=ストロース著「野 生の思考」で「未開社会は本当に遅れているのか」、「私たちの持つ歴史観・進歩史観は正しいの か」など多様な意見を交換する場として好評であった。今後はさらに活動的なコミュニティとなるべ く、対外的な発信も行なっていきたい。

森田

- 勉強会
- オールジャンルの勉強会(隔週1回,1回約2時間, 現在3年目)

- 数学の勉強会(週1回,1回約3時間,現在2年目)
- 湿地再生に向けた基礎知識セミナー(不定期, 1回約2時間, 現在1年目)

好きや楽しい、興味がきっかけでオールジャンルの勉強会を始めたり、後述の環境保全NPOへ参加 したりしたことで、さまざまな社会問題や現状、そして歴史を目の当たりにした。現在は、もちろん それ自体が好きで楽しいという動機もある一方で、知らないままではいられない使命感に駆られて継 続的に学習のジャンルを広げている。

これまでに扱った題材の例:一般向け宇宙の話, 資源・エネルギー, 地球温暖化, 生物多様性, 地質学, 社会学, 文化人類学, 哲学, 世界史, 代数学, 位相空間論, 論理学, 多様体論, 測度論 他

読書コミュニティ

自他問わず読書を通した学びの促進のために小松・井上と共に読書コミュニティを運営している。詳細は小松と同様。

・「学びを考えるラジオ まなかん」 の配信

学習したことを基に対話を通してより理解や考えを深め、実践していくためにラジオの配信をしている。学びをテーマに教育や研究、ときには学習法といった幅広い話題についてメンバーで対話する番組。1週間に1エピソード更新している。

・東山森づくりの会での活動

幼少期からしばしば遊びに行っていた大きな公園の環境保全のNPOに昨年秋より所属して活動を行っている。所属するきっかけは自然が好きというのが主であったが、活動を通して森についてさまざまな実情を学び続けている。

・エレクトーン(趣味)

4歳の頃から習い事として現在まで継続している。演奏曲のジャンルは基本的に定めていないが、フュージョンやジャズの演奏が好きで割合としては多い。大学ではサークルにも所属しており、合奏や採譜などさまざまな形で楽しんでいる。

目瀬

・音楽(エレクトーン)所属サークルにて友人らと共にサークル内部のイベントだけでなく、サークル外部の音楽イベントに定期的に参加している。外部イベントに参加するにあたり、編曲や楽曲データの作成を行う必要があるため音楽理論・楽曲制作についての本を読んでいる。

8.将来のソフトウェア技術について思うこと・期すること

我々が将来のソフトウェア技術について期待することは2点ある.

1つ目は、ソフトウェア分野と機械学習分野の融合を進めることで高性能なソフトウェア開発が加速することである。例えば、自動運転技術の一つである対象認知は最も機械学習の恩恵を受けた技術の一つである。従来のルールベースシステムでは、歩行者と車との距離や路上の状態などあらゆる状況を想定してプログラムを作成する必要があり、その開発は困難であった。しかし、その弱点を大規模な運転データを基にした機械学習で克服したことは、ソフトウェア技術と機械学習分野が融合することによる大きな可能性を感じさせる良い例となった。したがって、将来にわたって自動車分野に留まらず様々な分野のソフトウェアが機械学習と融合することにより、既存の精度を大きく凌駕する新しいソフトウェア開発が進むことが期待される。

2つ目は、大規模化するIT技術開発を安定して支えるためのソフトウェア開発が進展することである。近年のIT企業は、自社サービスのインフラストラクチャの保守コスト及び更新コストを抑えるために、クラウドコンピューティングを利用することが増えている。また、クラウドコンピューティングサービスを提供する企業側も、情報セキュリティの三原則である機密性、安全性及び可用性を常に保つためソフトウェアの改善を行っている。こうした現状を踏まえると、より高度なクラウドセキュリティやクラウド管理機能を提供できるソフトウェア技術の開発が望まれる。特に、我々の提案プロジェクトも計算環境をクラウド上で構築することを想定しているため、この2つ目の期待については大きな関心を寄せている。