

第35回関東CAE懇話会: AI・IoT時代のデータ利活用による理解と発見
2019年10月4日

機械学習は真の理解や発見に寄与できるか

瀧川 一学 (たきがわ・いちがく)

ichigaku.takigawa@riken.jp

- 理化学研究所 革新知能統合研究センター (AIP)
iPS細胞連携医学的リスク回避チーム
- 北海道大学 化学反応創成研究拠点 (WPI-IReDD)



本日のスライドは後で公開しておきます！

<https://itakigawa.github.io/news.html>

<https://www.slideshare.net/itakigawa/presentations>

人工知能学会 第110回人工知能基本問題研究会(SIG-FPAI)
2019年9月24-25日 Permalink: <http://id.nii.ac.jp/1004/00010344/>

人工知能の基本問題：これまでとこれから

瀧川一学 (たきがわ・いちがく)
ichigaku.takigawa@riken.jp

- 理化学研究所 革新知能統合研究センター (AIP)
iPS細胞連携医学的リスク回避チーム
- 北海道大学 化学反応創成研究拠点 (WPI-iCReDD)

iCReDD-JST CREST情報交換シンポジウム
2019年9月26日

不均一系触媒研究のための機械学習と最適実験計画

瀧川一学 (たきがわ・いちがく)
ichigaku.takigawa@riken.jp

- 理化学研究所 革新知能統合研究センター (AIP)
iPS細胞連携医学的リスク回避チーム
- 北海道大学 化学反応創成研究拠点 (WPI-iCReDD)

「AIと有機合成化学」研究部会第3回勉強会
2019年6月21日

分子のグラフ表現と機械学習

瀧川一学 (たきがわ・いちがく)
ichigaku.takigawa@riken.jp

- 理化学研究所 革新知能統合研究センター (AIP)
iPS細胞連携医学的リスク回避チーム
- 北海道大学 化学反応創成研究拠点 (WPI-iCReDD)

2019.5.13@NTT CS研

科学と機械学習

瀧川一学 (たきがわ・いちがく)
ichigaku.takigawa@riken.jp

- 理化学研究所 革新知能統合研究センター (AIP)
iPS細胞連携医学的リスク回避チーム ←上田チーム!
- 北海道大学 化学反応創成研究拠点 (WPI-iCReDD)

データ社会を生きる技術 ～人工知能のHopeとHype～

瀧川一学 (北海道大学 情報科学研究科 准教授)

平成遠友夜学校 2017年8月1日

*With malice toward none,
With charity for all.*

「何者にも悪意を向けず
全ての人に思いやりを」
(エイブラハム・リンカーン)

無実を追求

「学問より実行」
(新渡戸稻造)

道具としての機械学習： 直感的概要とその実際

北海道大学 情報科学研究科 瀧川一学

本日の話は1年半前に下記行事へ話題提供したもの

今日は、その後いろいろな方とお話しする中で得たものを反映した再編版です。

MI²I・JAIST合同シンポジウム

(情報統合型物質・材料開発イニシアティブ・北陸先端科学技術大学院大学) データ科学における予測と理解の両立を目指して 一分かるとは何か? —

開催日 2018年5月21日（月）13:00～17:40 【終了】

会場 JST東京本部別館1階ホール（東京都千代田区五番町K's五番町）

趣旨

アルファ碁が世界最強棋士に勝利したニュースは大きな話題となった。その根幹である深層学習手法は、非常に高い予測能を有する一方、その選択に関し理解することは不能とされる。古来、科学における最終ゴールは説明・理解できることであった。今、新規物質探索にも最先端の深層学習等のデータ科学手法が利用されつつある。理解は一旦諦め、高い予測能による新たな科学技術の可能性を探るのか、その選択が現実問題となりつつある。最近の研究成果を紹介しつつ、この問題への理解を深めたい。

主催

国立研究開発法人物質・材料研究機構 (NIMS)

Take Home Message

科学が求めること: 分からないことが分かる(科学的発見)

理解

原因と結果(因果関係)を見出す

$x \rightarrow y$ の過程を理解し(人間が)発見する

発見

今まで見出されていない良い対象を見出す

$x \rightarrow y$ を利用して良い y を持つ x を発見する

今日伝えたいたった3つのこと

1. 単純に機械学習を使うだけでは いざれも解けない
2. 機械学習以外のもの(介入やドメイン知識)が原理上必須
3. 最近まさに研究が進行中の未解決領域だが研究は色々ある

今日の内容

1. イントロ

機械学習と科学(あるいは"ものづくり")

2. 機械学習で何かを「理解」できるか?

Answer: 直接的には**原理上困難**

3. 機械学習で何かを「発見」できるか?

Answer: 直接的には**原理上困難**

4. じゃあどうすんの！？何がいるの！？

Answer: 「表現」と「介入」

2と3を前提に機械学習分野のトピックを簡単に紹介

今日の内容

1. イントロ

機械学習と科学(あるいは"ものづくり")

2. 機械学習で何かを「理解」できるか?

Answer: 直接的には**原理上困難**

3. 機械学習で何かを「発見」できるか?

Answer: 直接的には**原理上困難**

4. じゃあどうすんの！？何がいるの！？

Answer: 「表現」と「介入」

2と3を前提に機械学習分野のトピックを簡単に紹介

自己紹介：瀧川一学(たきがわ・いちがく)

専門：機械学習・データマイニングとその科学での利活用
「データからの学習」をどう問題解決に活用できるのか？



10年 北大
(1995～2004) 統計的信号処理とパターン認識 (工学研究科)
"劣決定信号源分離のL1ノルム最小解の理論分析"



7年 京大
(2005～2011) バイオインフォマティクス (化学研究所)
ケモインフォマティクス (薬学研究科)



7年 北大
(2012～2018) データ駆動科学・離散構造を伴う機械学習
(情報科学研究科)
+ JSTさきがけ: 材料インフォマティクス



?年 理研(京都)
(2019～) AIPセンター iPS細胞連携医学的リスク回避チーム
(北大 化学反応創成研究拠点とクロアポ)

Empirical optimization or "Edisonian empiricism!"



問題：時間とコストは有限！！
理論的に可能なあらゆる候補を
この方式で検証することは不可能



次の実験計画へ
feedback

既知の知見・
観測(データ)

仮説形成

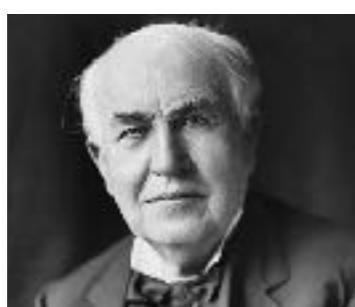
- 実験
- シミュレーション

仮説検証

結果の確認と
検証

"観察と帰納 (empirical/inductive)"

"論理と演繹 (rational/deductive)"



Thomas Edison先生

- Genius is 1% inspiration and 99% perspiration.
- There is no substitute for hard work.
- I have not failed. I've just found 10,000 ways that won't work.
- :

よく考えるとブラックなことしか言ってない！

科学的発見とセレンディピティ



問題：時間とコストは有限！！
理論的に可能なあらゆる候補を
この方式で検証することは不可能



次の実験計画へ
feedback

既知の知見・
観測(データ)

- 実験
- シミュレーション

結果の確認と
検証

仮説形成

仮説検証

- それゆえ「研究者のセンス・腕の見せ所」 + 「幸運(セレンディピティ)」に依存する筋の良さそうな候補を選ぶ、今まで試されてない全く新しいやり方を思いつく、etc
- 候補が**あまりに膨大(実質ほぼ無限)**なので(数多く試すのは有利だとは言え...)必ずしも「力技とお金と人海戦術で数多く試した者が勝つ」とは限らない

機械学習はシミュレーション・実験と相補的



次の実験計画、
feedback

既知の知見・
観測(データ)

高速・高精度な
Data-Driven予測

結果の確認と
検証

仮説形成

(機械学習・データマイニング)

- どういう実験・シミュレーションを次に行うかの計画立案
- 時間のかかる計算の高精度高速近似
- 曖昧な因子や実験条件の最適化
- Multilevelの情報統合

仮説検証

(シミュレーション+実験)

- 再現性を担保する高精度・高速実験系
- 仮想化検証が可能な因子のシミュレーション(計算科学)による探索
→ 望ましい対象のさらなる絞り込み

今日の内容

1. イントロ

機械学習と科学(あるいは"ものづくり")

2. 機械学習で何かを「理解」できるか?

Answer: 直接的には**原理上困難**

3. 機械学習で何かを「発見」できるか?

Answer: 直接的には**原理上困難**

4. じゃあどうすんの！？何がいるの！？

Answer: 「表現」と「介入」

2と3を前提に機械学習分野のトピックを簡単に紹介

「機械学習」的シチュエーション

事例：写真をAさんかBさんかに分類するコンピュータプログラムを作りたい。(大量の写真を人手分類するの嫌)



?

?

?

?

?

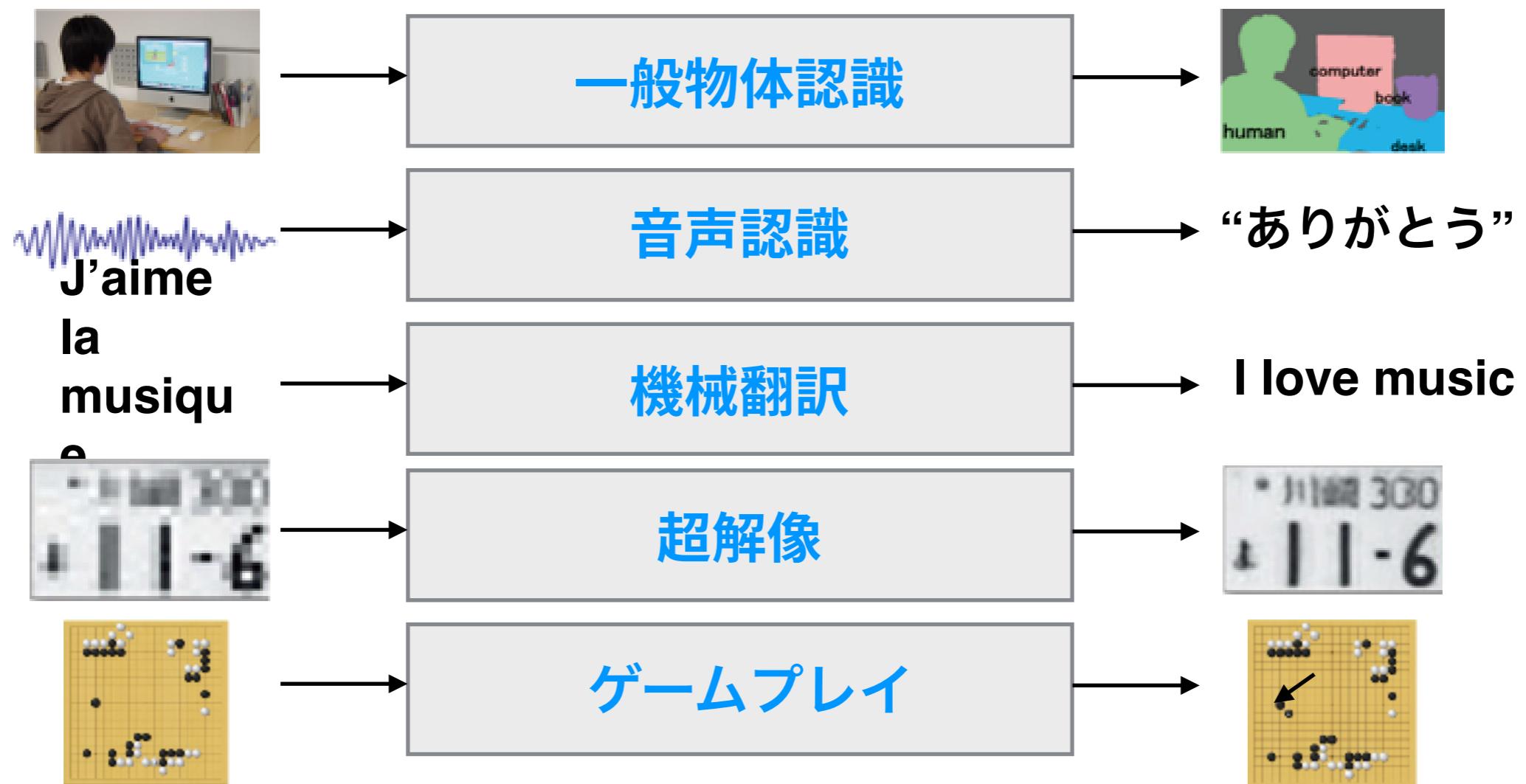
?

?

- 人間は簡単にできる
- が、どうやってやっているのか原理は不明確
- 髮型、角度、照明、背景、表情、化粧、年齢、などを考えると明示的なプログラミングはとても難しい

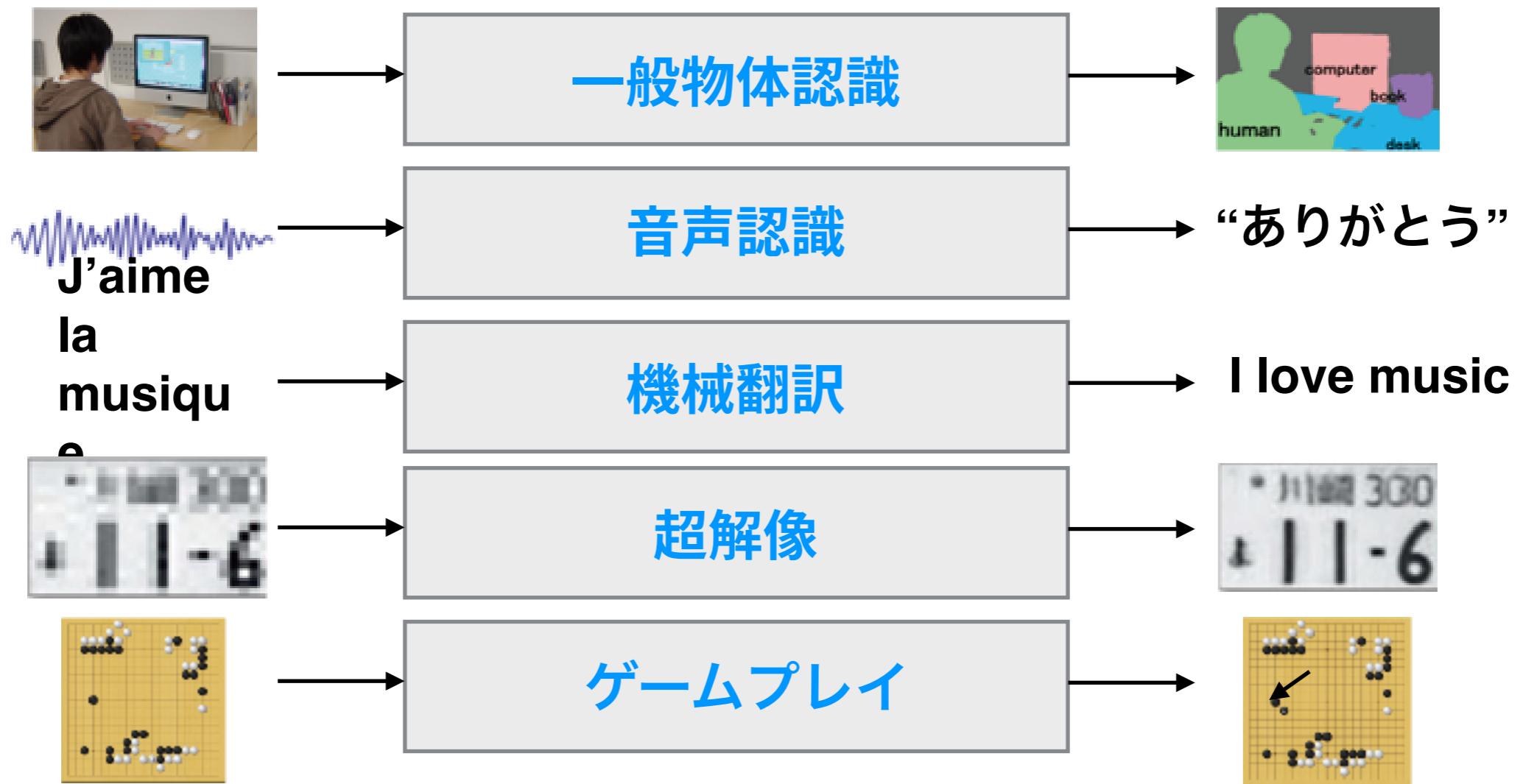
機械学習: 新しいプログラミングのかたち

入出力の関係がよく分からない変換過程(関数)を大量の入出力の見本例から明示的にプログラミングすることなく構成する技法



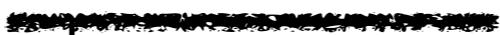
機械学習できたときの2種類の期待

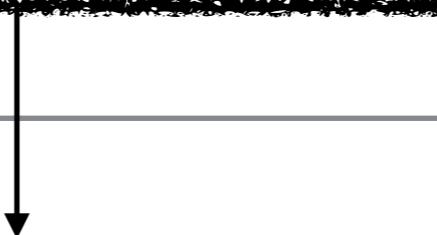
1. 得られた変換過程(関数)による予測を色々な目的に使う
2. 得られた変換過程(関数)を分析して背景過程の仕組みを知る



「理解」 編のポイント！

1. 得られた変換過程(関数)による予測を色々な目的に使う
2. 得られた変換過程(関数)を分析して背景過程の仕組みを知る

1はOKだが
2はとても微妙！


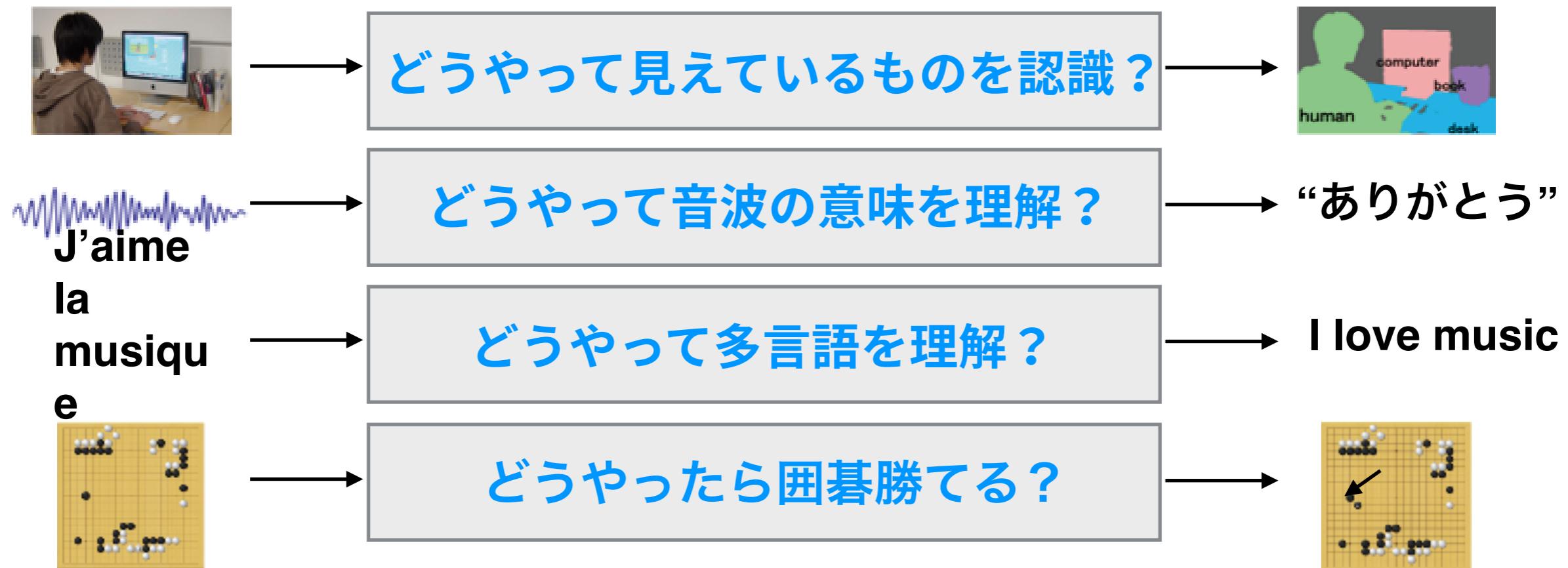


そしてその理由もまた微妙なのですが
さしあたって...

機械学習予測とその理解の「深い溝」

下記はどれも機械学習でかなり高精度な予測ができますが、果たしてその仕組みの理解が得られたのでしょうか...?

実情：予測は当たるんだけど理由はよくわからない！



予測があれば理由はわからなくともOK？

どう考えてもOKなわけないやろ... 😞 と思うかもしれません
が

- それは用途による (予測が高い精度で当たるという前提で)

現在の商業的成功を牽引する多くの用途では要らない場合も。
検索、広告、推薦、センサー/IoT、画像・音声認識、芸術など

- 最近、適用先が広がり 「理由」 を求められるように

社会的にクリティカルな目的に投入するなら 「理由」 必要。
医療、自動制御、インフラ制御、雇用、政策決定、融資など

└ 説明責任・透明性・公平性・安全性・倫理を担保可能？

論文：Use and Abuse of Regression (1966)

コンピュータが初めて卑近な道具になり、人々はあらゆる目的に
Data-driven(回帰分析)を多用するようになってしまった… 😅

TECHNOMETRICS VOL. 8, No. 4 NOVEMBER 1966

Use and Abuse of Regression[†]

GEORGE E. P. Box 今 の 機 械 学 習 

University of Wisconsin

Let us first restate the usual assumptions and conclusions for linear least squares. Gauss showed that if we have n observations y_1, y_2, \dots, y_n and if an appropriate model for the u th observation is

$$y_u = \beta_0 + \beta_1 x_{1u} + \beta_2 x_{2u} + \dots + \beta_k x_{ku} + \epsilon_u \quad (1)$$

where the β 's are unknown parameters, the x 's known constants, and the ϵ 's random variables uncorrelated and having the same variance and zero expectation, then estimates b_0, b_1, \dots, b_k of the β 's obtained by minimizing

論文：Use and Abuse of Regression (1966)



大統計学者 George E. P. Box (1919-2013)

"one of the great statistical minds of the 20th century"

**"Essentially, all models are wrong,
but some are useful"**

https://en.wikipedia.org/wiki/All_models_are_wrong

回帰分析の目的: (教師付き学習一般に当てはまる) ...苦言? 😅

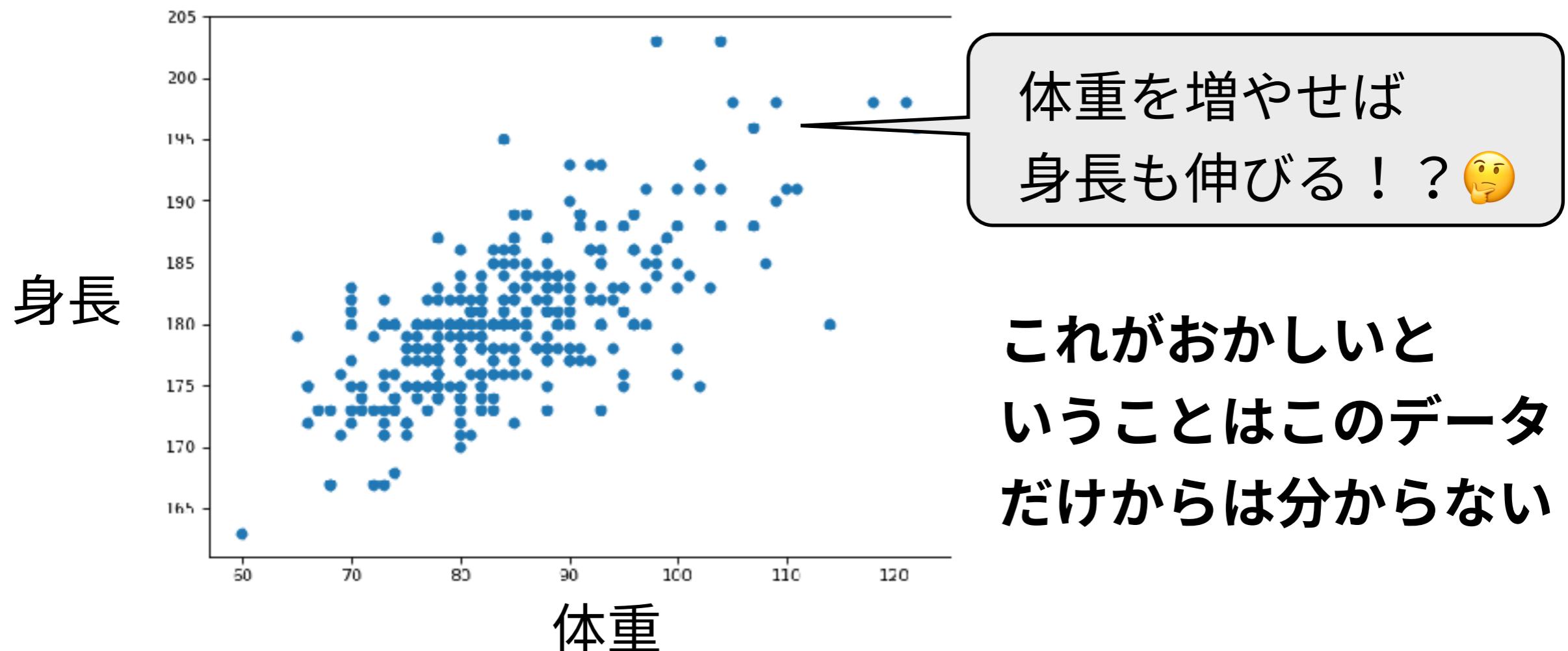
1. 説明変数を観測したときの目的変数の予測 → **Use** 😊
2. 説明変数に外的操縦を加えたときの
目的変数への因果的効果の発見 → **Abuse** 😥

相関関係は必ずしも因果関係を意味しない

応用統計学のイロハ : Correlation does not imply causation

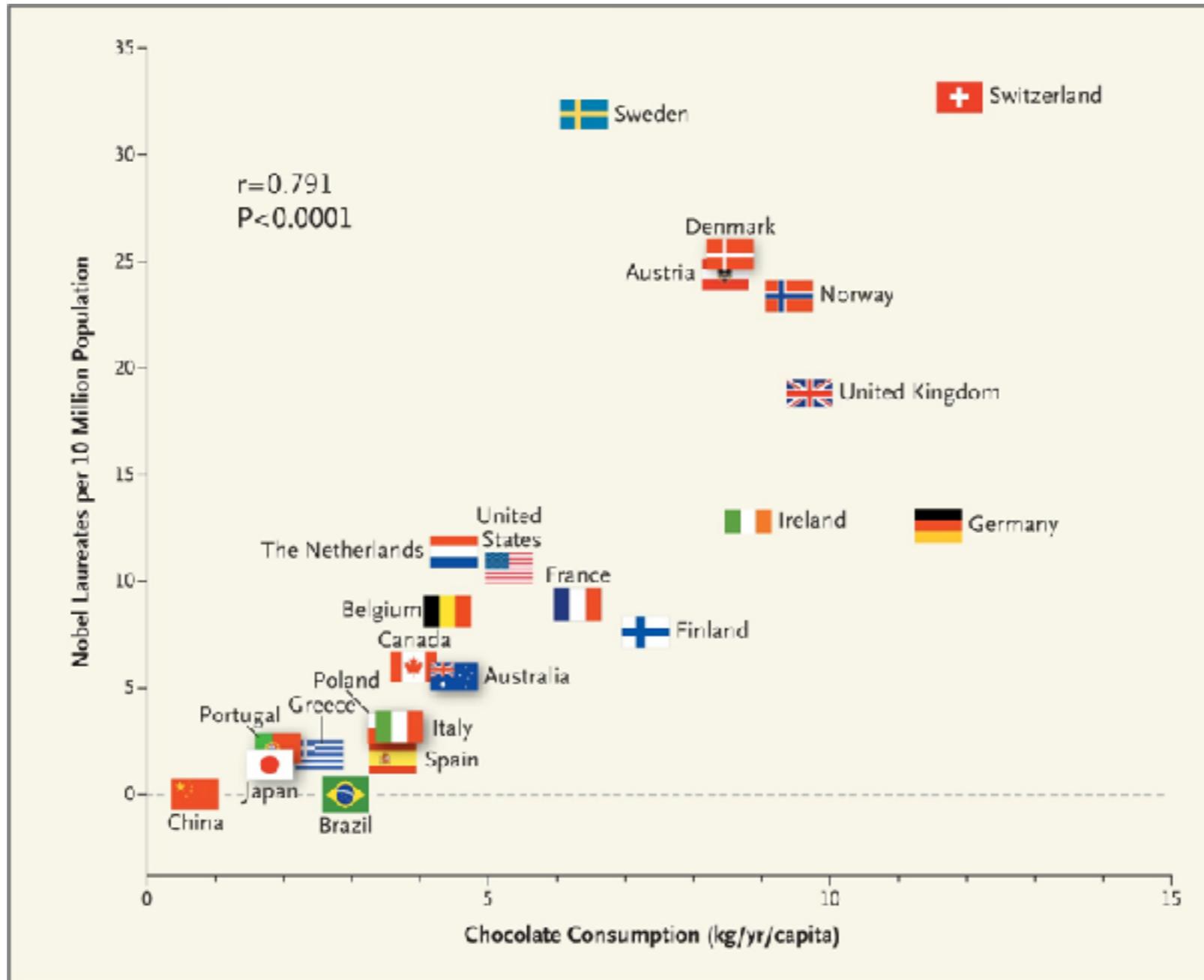
└→ そして機械学習はデータに内在する**相関関係**の利活用技術

日本プロ野球開幕一軍選手の身長・体重データ
(2016年球団公式サイト選手データより自作)



人口1千万人あたりの
ノーベル賞受賞者数

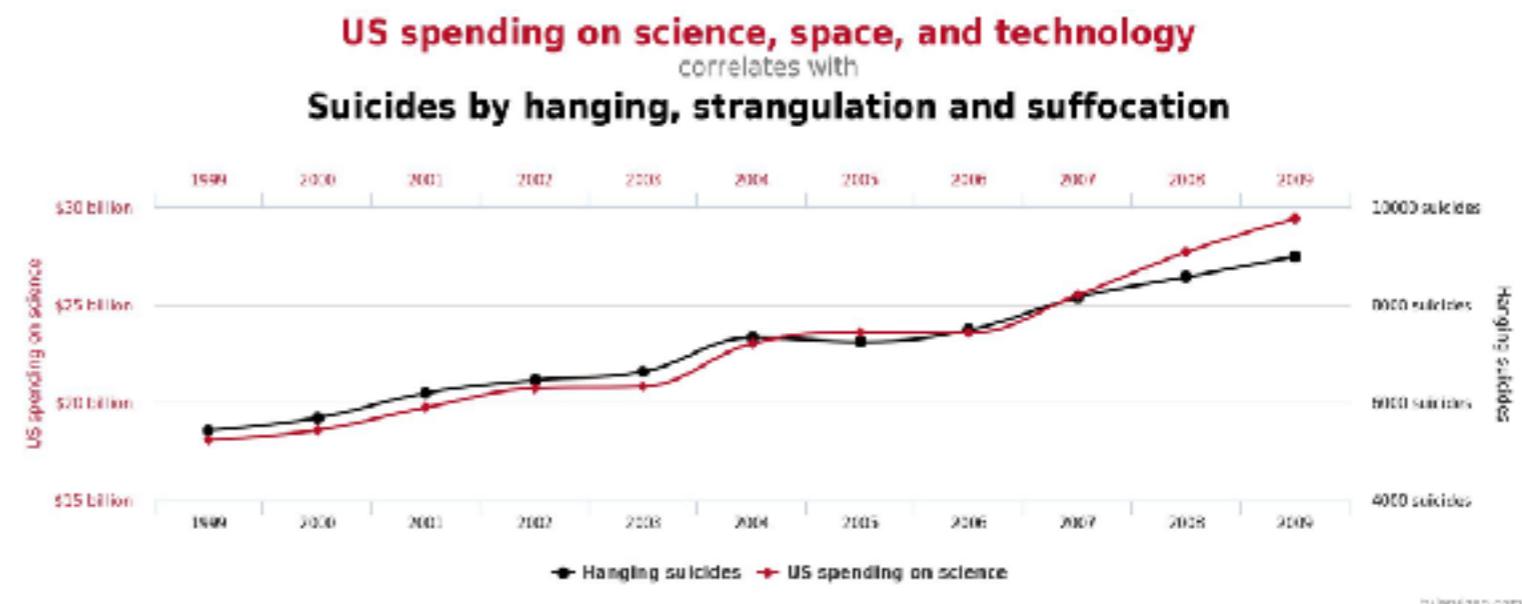
→ IF(2018) 70.670 😳 の最も歴史と権威のある医学誌



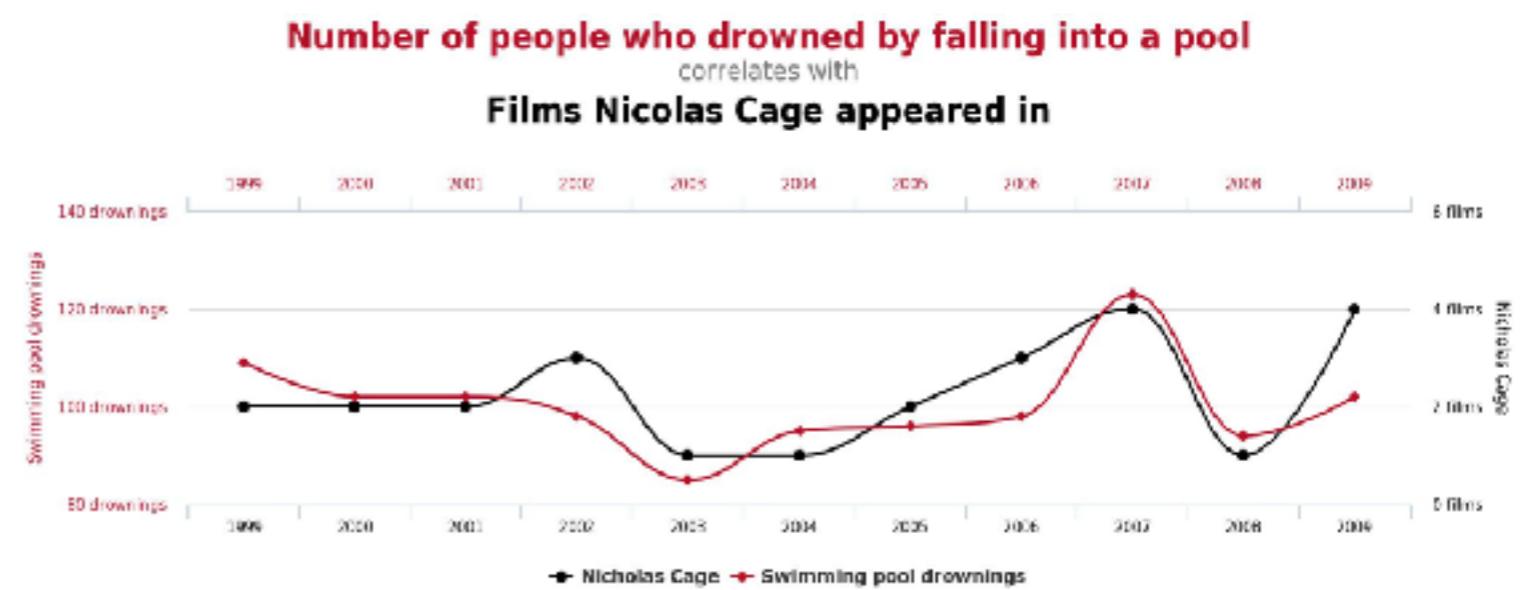
チョコレート消費量

観察データだけからは因果は分からぬ

アメリカの科学予算 vs
首吊りによる自殺者数



プールでの溺死者数 vs
ニコラスケイジの映画出演数



<http://phenomena.nationalgeographic.com/2015/09/11/nick-cage-movies-vs-drownings-and-more-strange-but-spurious-correlations/>

いつ相関と因果は乖離しうるのか？

因果関係判定のHillのガイドライン (Hill, 1965)

相関について

それ以外
(Check難)

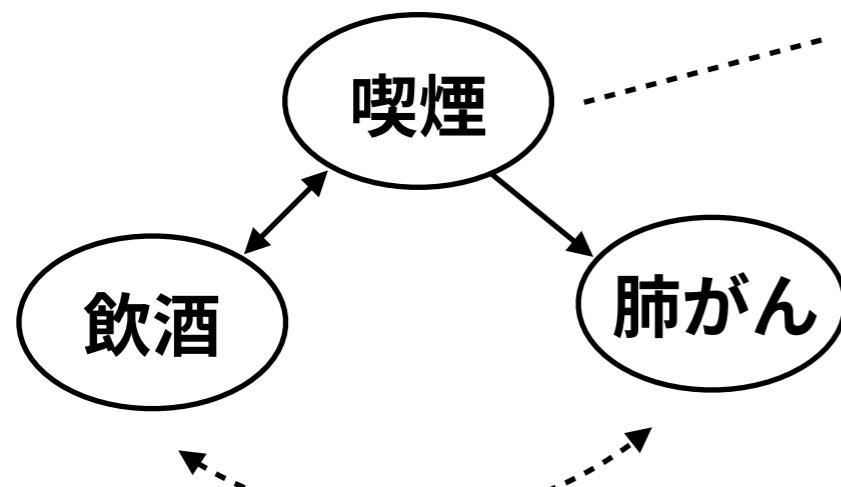
事象 A が事象 B の原因であると結論づけるためには以下の基準に適合しているかを確認することを推奨する。

- | | |
|--------------|---|
| 1. 相関関係の強さ | A の生起と B の生起の間に強い相関関係がある。 |
| 2. 相関関係の一致性 | 相関関係の大きさは様々な状況で、対象や実証に利用する手法が違っても一致している。 |
| 3. 相関関係の特異性 | B と「A 以外に原因として想定される変数」の相関は高くない。また A と「B 以外の結果変数」の相関も高くない。 |
| 4. 時間的な先行性 | A は B に時間的に先行する。 |
| 5. 量・反応関係の成立 | 原因となる変数 A の値が大きくなると、単調に結果となる変数 B の値も大きくなる。 |
| 6. 妥当性 | A が B の原因となっているという因果関係が生物学的に(または各分野の知見にもとづいて)もっともらしい。 |
| 7. 先行知見との整合性 | これまでの先行研究や知見と首尾一貫している。 |
| 8. 実験による知見 | 動物実験などでの実験研究による証拠がある。 |
| 9. 他の知見との類似性 | すでに確立している別の因果関係と類似した関係・構造を有している。 |

Hill, A. B., The Environment and Disease: Association or Causation?, Proc. R. Soc. Med., 58, 295-300, 1965. および星野崇宏『調査観察データの統計科学』岩波書店, 2009, p. 140 より作成。

交絡因子と見せかけの相関

例：飲酒は肺がんのリスク要因である(?)



交絡因子(cofounders)

因果の上流に共通因子が存在

見せかけの相関(spurious correlation)

因子「喫煙」が交絡している

交絡にどう対処するか？

理想「実験する」：

介入するか否かを無作為に割り付けるランダム化比較試験(RCT)



観察研究ではできない: 喫煙するかどうかを割り付けてない

観察研究による因果推論の基本

必要な前提：興味の対象の関係因子と交絡因子がすべて測定されている（さらに因子の間の因果構造も分かっている）

→ よく分からない対象では現実的に満たされづらい…

① 層別(Stratification)

喫煙=有の群と、喫煙=無の群に分け、各々解析したあと統合

② 回帰分析の利用

「喫煙」を説明変数に含めて回帰分析で有意性検定

→ 交絡しそうな因子は全て説明変数に入れておけば良いが
サンプル数によっては回帰分析が破綻してしまう

- 「傾向スコア」によって多数の共変量を1次元に変換する
- 「バックドア基準」によって取り入れるべき説明変数を選ぶ

統計学と機械学習の「溝」

注意：機械学習屋は因果をあまり気にしない

- 相関関係の利活用で"予測がめっちゃ当たるんならええやん..."

しばしば「ええわけないやろ」という軋轢を生んできた...

e.g. 言語学の巨人 Chomsky vs Google研究部門長 Norvig

<http://norvig.com/chomsky.html>

- 統計学と機械学習の違い: データや変数に対する仮定が違う

統計学: 制御された実験計画 (臨床試験, 社会調査, 農業試験,...)

機械学習: 制御されないデータ (画像, 音声, テキスト, 信号, ...)

特徴量 vs 説明変数: 因子的意味はない場合も(画像のピクセル)

😊 Statistical Modeling: The Two Cultures (Breiman, Statist. Sci. 16(3), 199-231, 2001)

データ駆動科学: 科学も因果(理由)が主たる関心

科学の関心は「仕組みや原理がよく分からぬ現象」



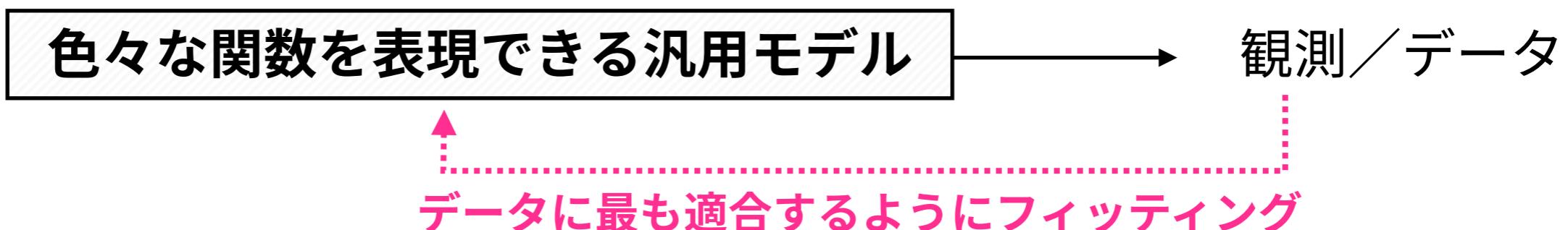
演繹

- Theory-driven / Hypothesis-driven (自然科学)



帰納

- Data-driven (機械学習、人工知能、統計学など)



Data-driven vs Theory-driven

Data-drivenはTheory-drivenと考え方・役割が異なるので注意

All models are wrong, but some are useful
(George Box)

Theory-driven models can be wrong
But data-driven models **cannot be wrong**



David Hand

Data-driven vs Theory-driven

Data-drivenはTheory-drivenと考え方・役割が異なるので注意

All models are wrong, but some are useful
(George Box)

Theory-driven models can be wrong
But data-driven models **cannot be wrong**

or right



David Hand

Data-driven vs Theory-driven

Data-drivenはTheory-drivenと考え方・役割が異なるので注意

All models are wrong, but some are useful
(George Box)

Theory-driven models can be wrong
But data-driven models **cannot be wrong**



or right
David Hand
Data-driven are **not trying to describe an underlying reality.**

But are merely intended to be **useful**
so they could be **poor or useless, but not wrong**

*If data can speak for themselves,
they can also lie for themselves*

David Hand

So it's critically important to

- exercise caution
- do not claim too much
- understand the data
- and its quality

cf.

With enough data, the
numbers speak for
themselves.

Chris Anderson (2008)

WIRED

CHRIS ANDERSON SCIENCE 06.23.08 12:00 PM

THE END OF THEORY: THE
DATA DELUGE MAKES THE
SCIENTIFIC METHOD OBSOLETE

KDD2018



「理解」編: まとめ

データの相関関係の利活用技術である機械学習だけでは
対象現象の背後にある仕組みを理解するのは原理上困難

- 相関関係は必ずしも因果関係を意味しない
- 因果の検証には観察研究ではなく介入研究が必要
- 医療や脳科学など倫理的に介入研究が難しい場合も多く
因果推論の理論・手法は長らく研究されてきている
- 因果推論では関連因子や因果構造がすべて分かっている
などの現実的には難しい前提が満たされる必要がある
- 相関関係は因果の示唆ではあるので注意深く考えよう！

今日の内容

1. イントロ

機械学習と科学(あるいは"ものづくり")

2. 機械学習で何かを「理解」できるか?

Answer: 直接的には**原理上困難**

3. 機械学習で何かを「発見」できるか?

Answer: 直接的には**原理上困難**

4. じゃあどうすんの！？何がいるの！？

Answer: 「表現」と「介入」

2と3を前提に機械学習分野のトピックを簡単に紹介

「発見」は学習の発展系？

発見 = 今までにないもの・ことを見つける

- 今までにない画期的な新薬
- 今までのデータのどれよりも長持ちする電池材料
- 今まで誰も試さなかつた画期的な会社経営戦略
- 今まで未発見だった画期的な科学法則や科学理論
- 今まで対戦した誰よりも強いボードゲーム勝利戦略

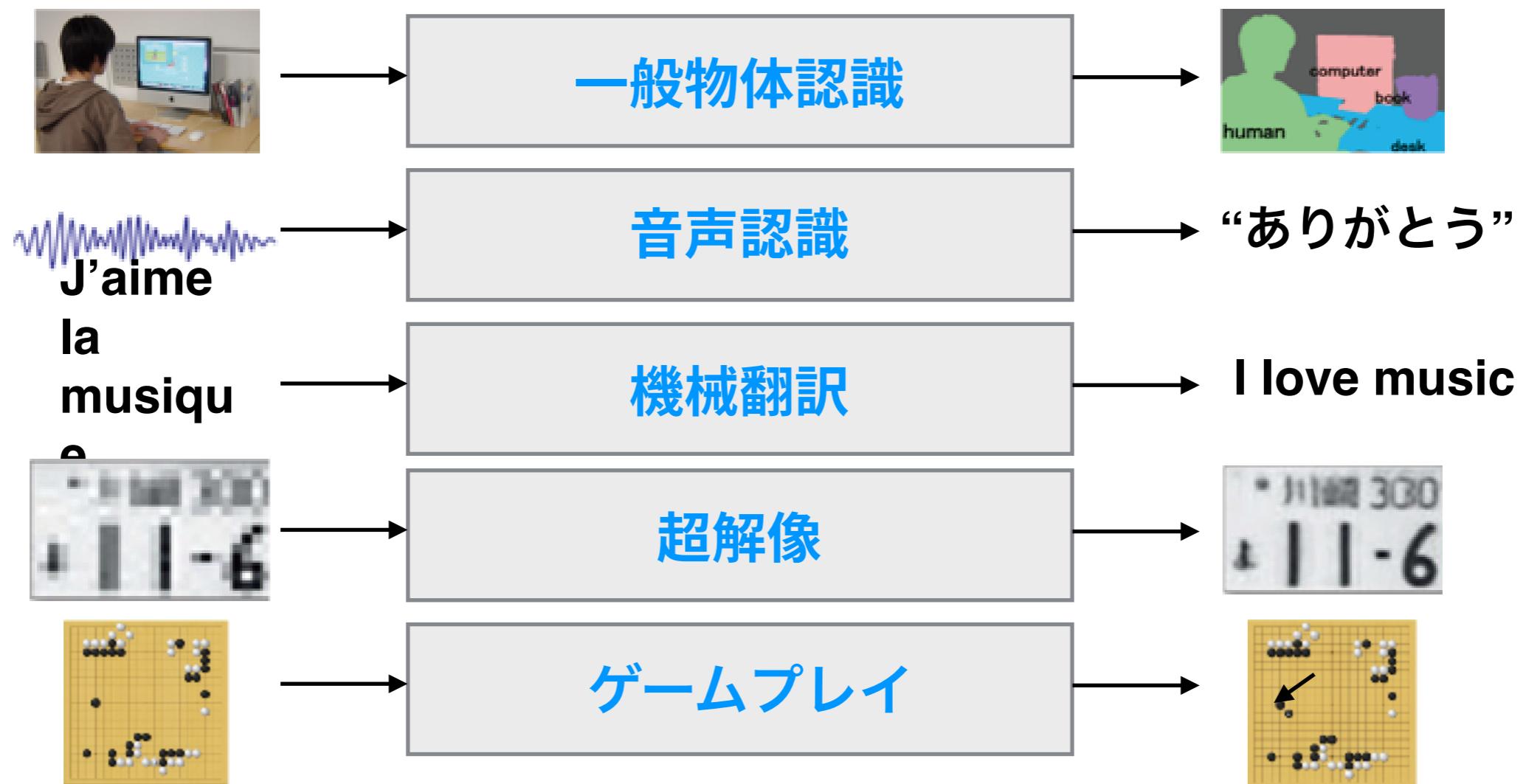
発見はふつう完全に行き当たりばったりではない。

「勘と経験」が非常に大切 「幸運は準備された者に降りる」

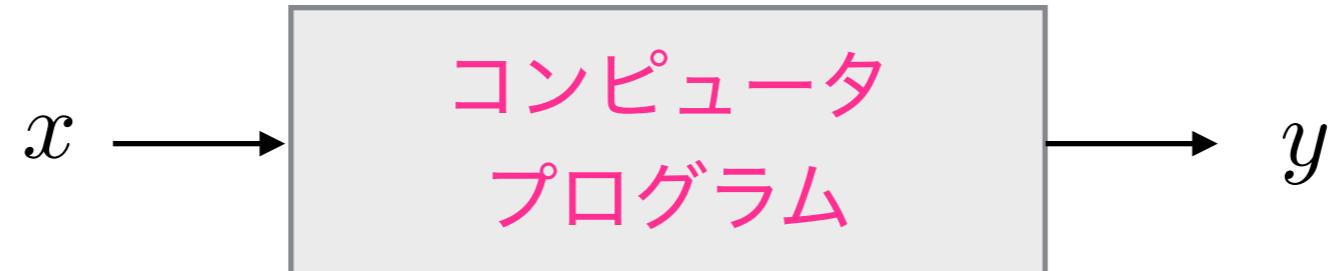
経験(過去のデータ)から学習した勘(法則性) = 機械学習
と考えるとなんだかイケそうな気がする～？

一方、機械学習とは何だったか

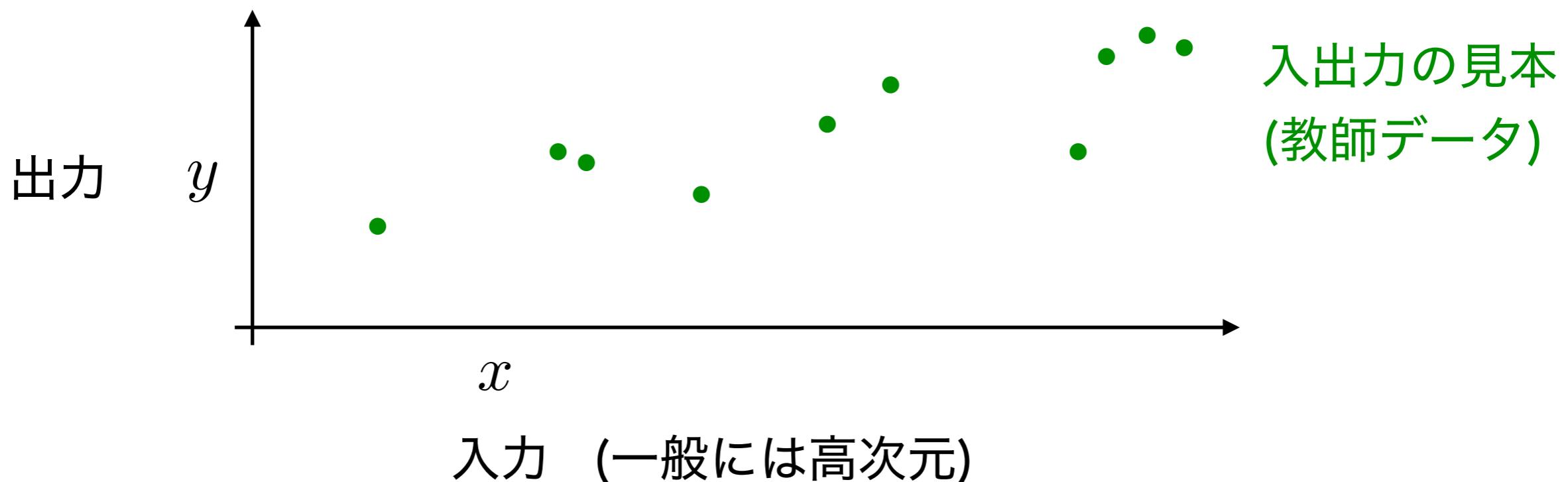
入出力の関係がよく分からない変換過程(関数)を大量の入出力の見本例から明示的にプログラミングすることなく構成する技法



機械学習の仕組み = 高次元での曲面あてはめ



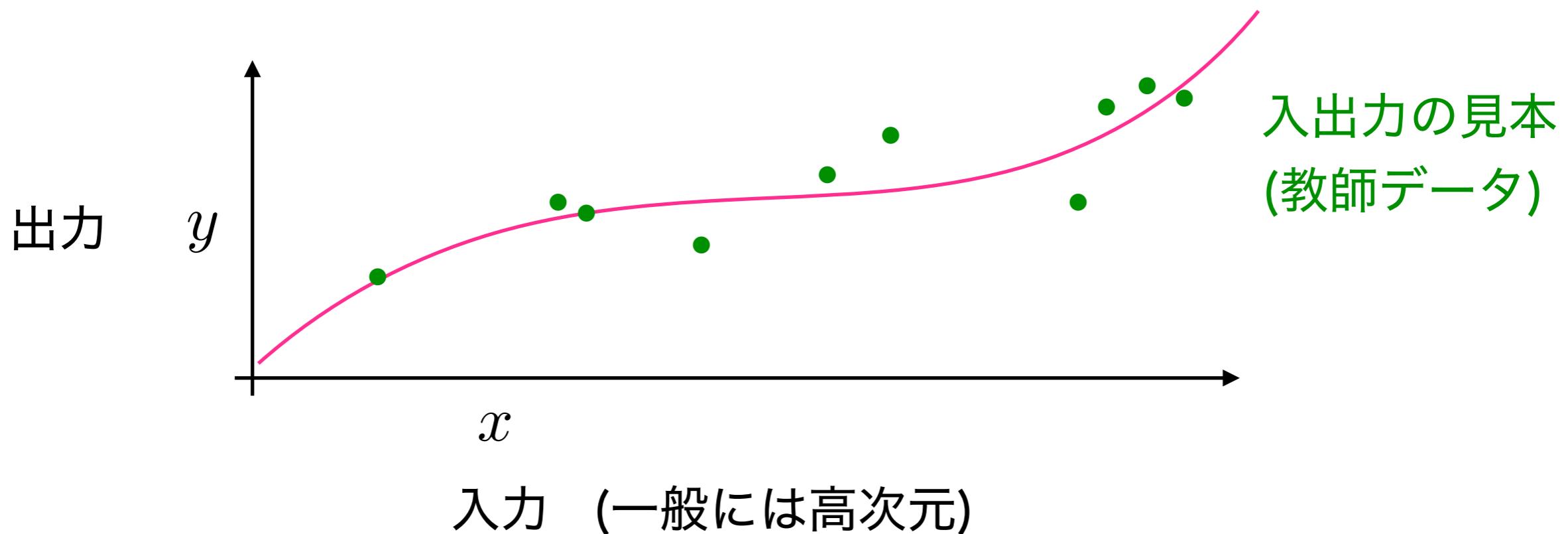
入出力の見本: $\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$



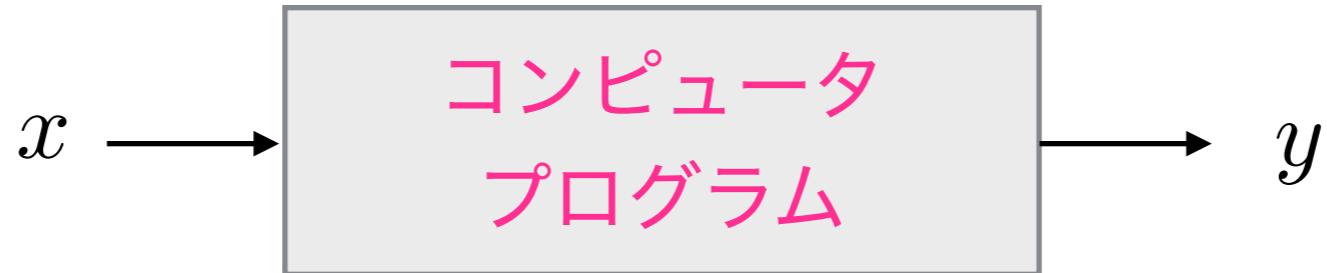
機械学習の仕組み = 高次元での曲面あてはめ



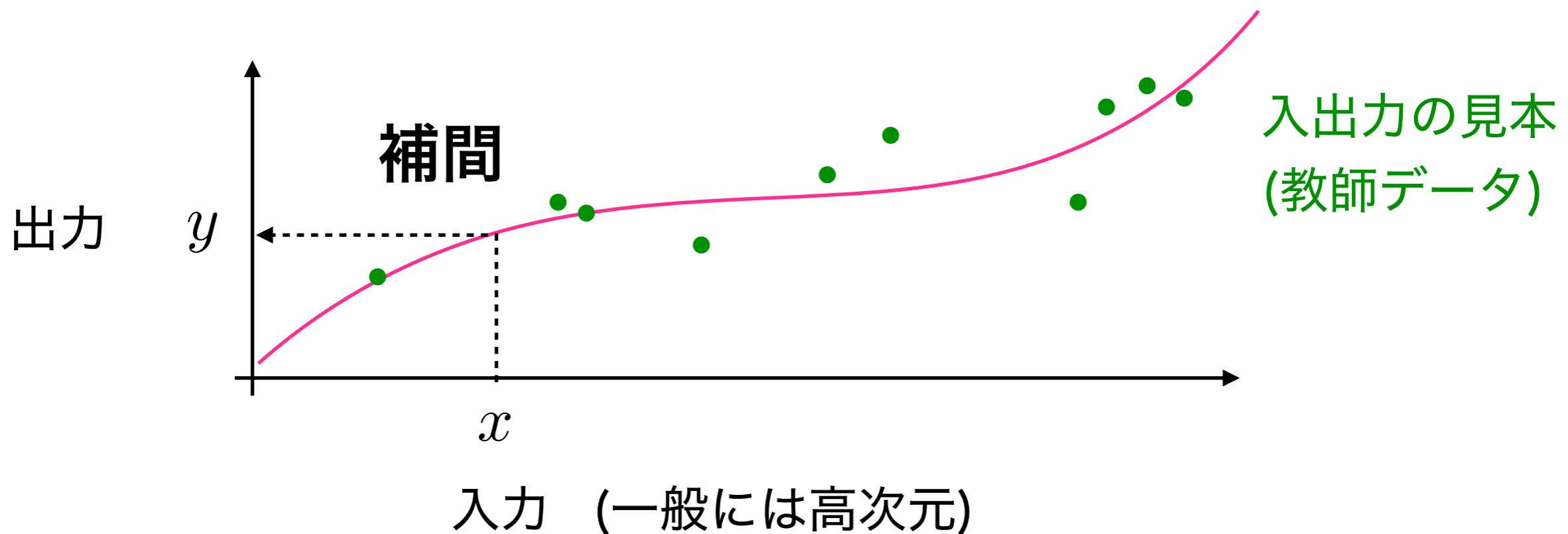
入出力の見本: $\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$



機械学習の仕組み = 高次元での曲面あてはめ

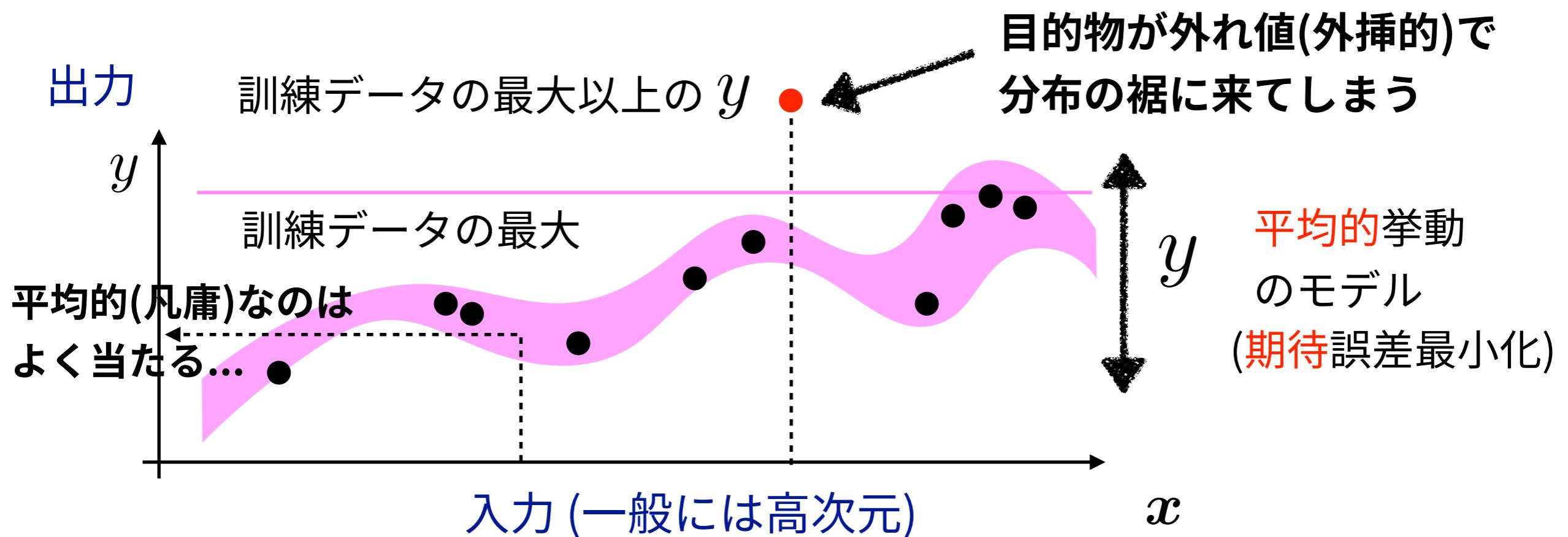


入出力の見本: $\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$



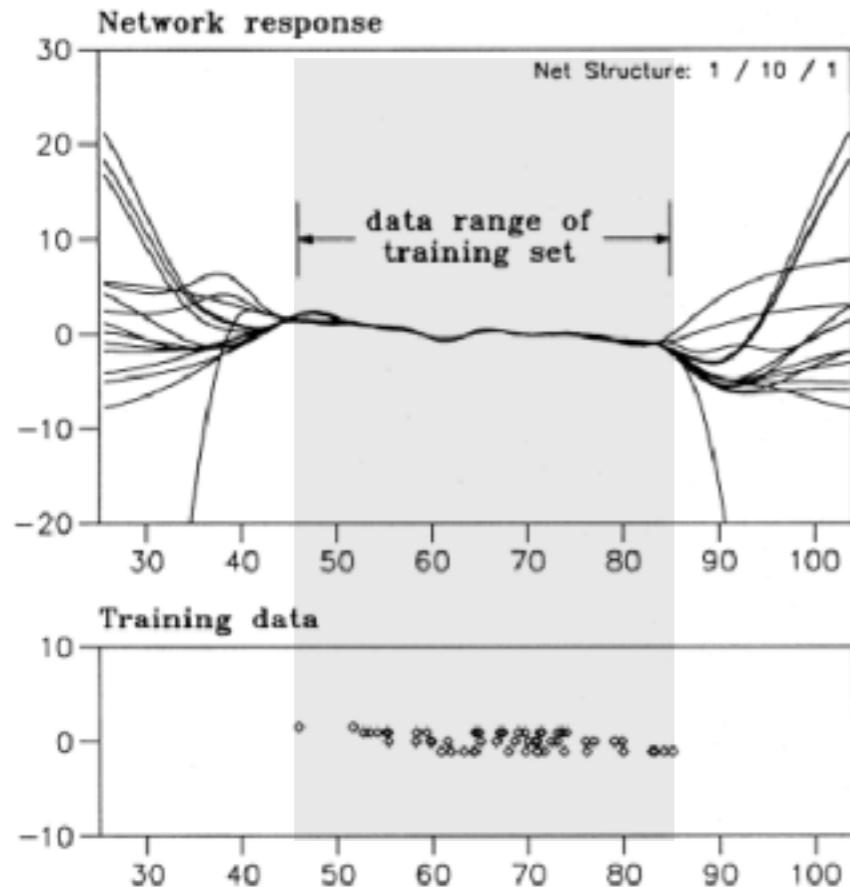
注意：機械学習は「発見」に向いていない

機械学習 = 訓練データの平均的法則性をとらえる
目的が不整合 → 予測モデルとの誤差の「期待値」を最小化 = 汎化
発見 = 見本データの中にはないものを見つけたい
「外れ値」



機械学習は与えた訓練データを代表するだけ

Highly Inaccurate Model Predictions
from Extrapolation (Lohninger 1999)



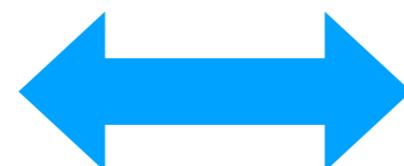
CAUTION

与えたデータの傾向を(曲線あてはめで)
表すだけでデータがない外挿領域では
無根拠な予測を返す



探索 "exploration"
新しい知識/データを獲得

トレードオフ

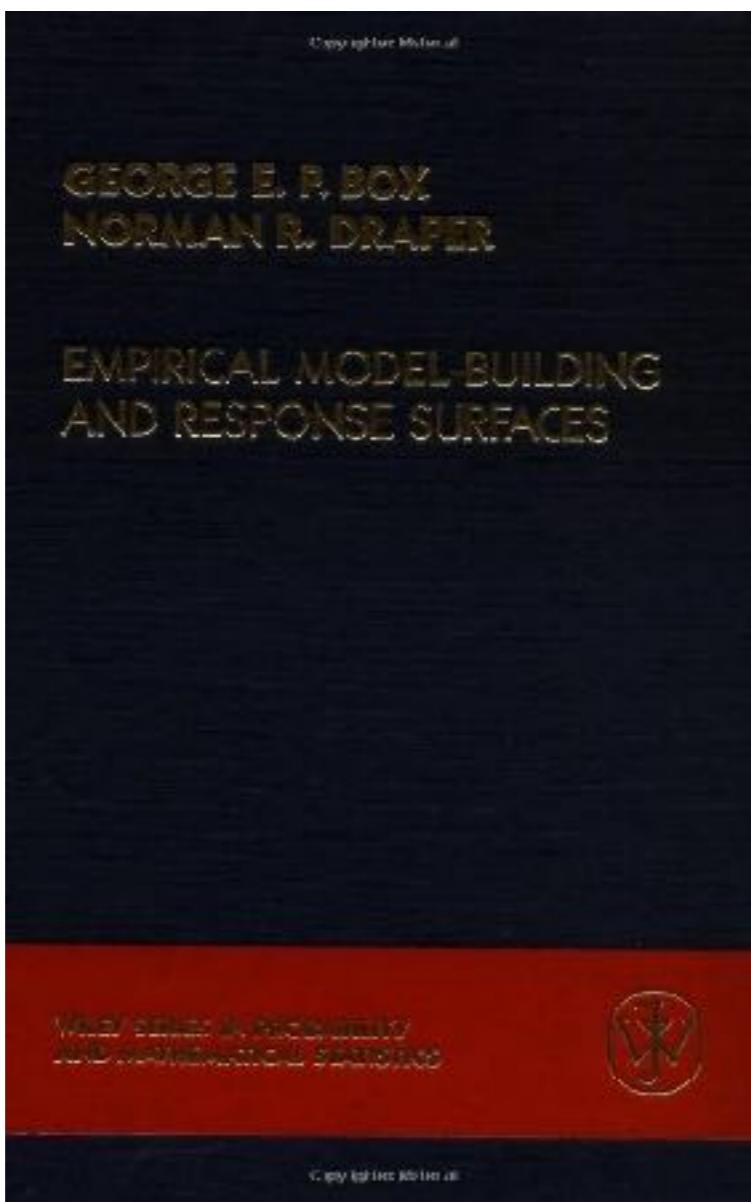


利用 "exploitation"
獲得した知識/データを利用

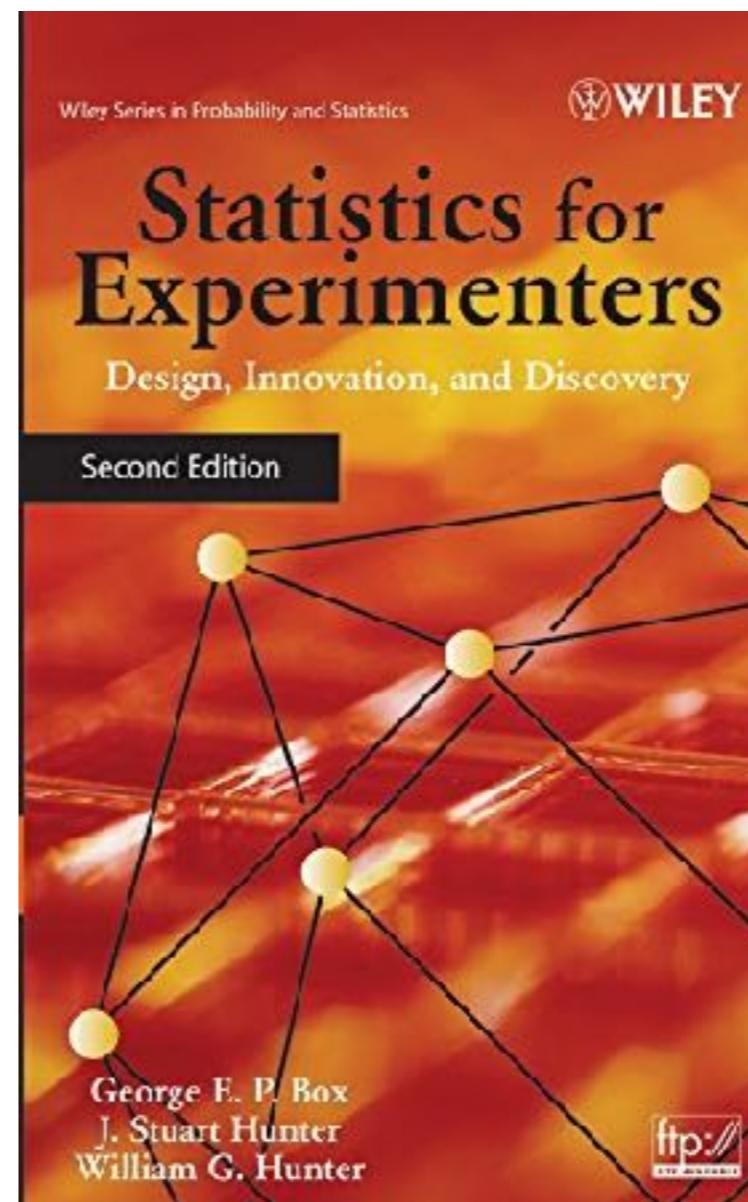
介入実験の計画：実験計画法と応答曲面法

当然Boxはどのように回帰分析を使えば良いか探求済み！ 😊

Empirical Model-Building and Response Surfaces (1987)



Statistics for Experimenters: Design, Innovation, and Discovery (2005)



Box-Wilsonの応答曲面法

応答曲面法 (Box & Wilson, 1951)

1. 応答曲面(Response Surface)をモデル化
(e.g. 二次多項式回帰)
2. 上記モデルを当てはめるための実験計画(e.g. 中心複合計画)で検査点を得る
3. 応答曲面を検査点に当てはめそれが最大になる点を求める

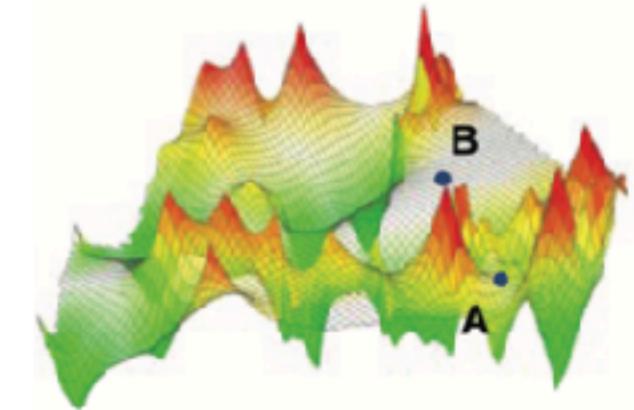
探索空間(関心領域)の内挿になるよう実験計画で事例点を得る



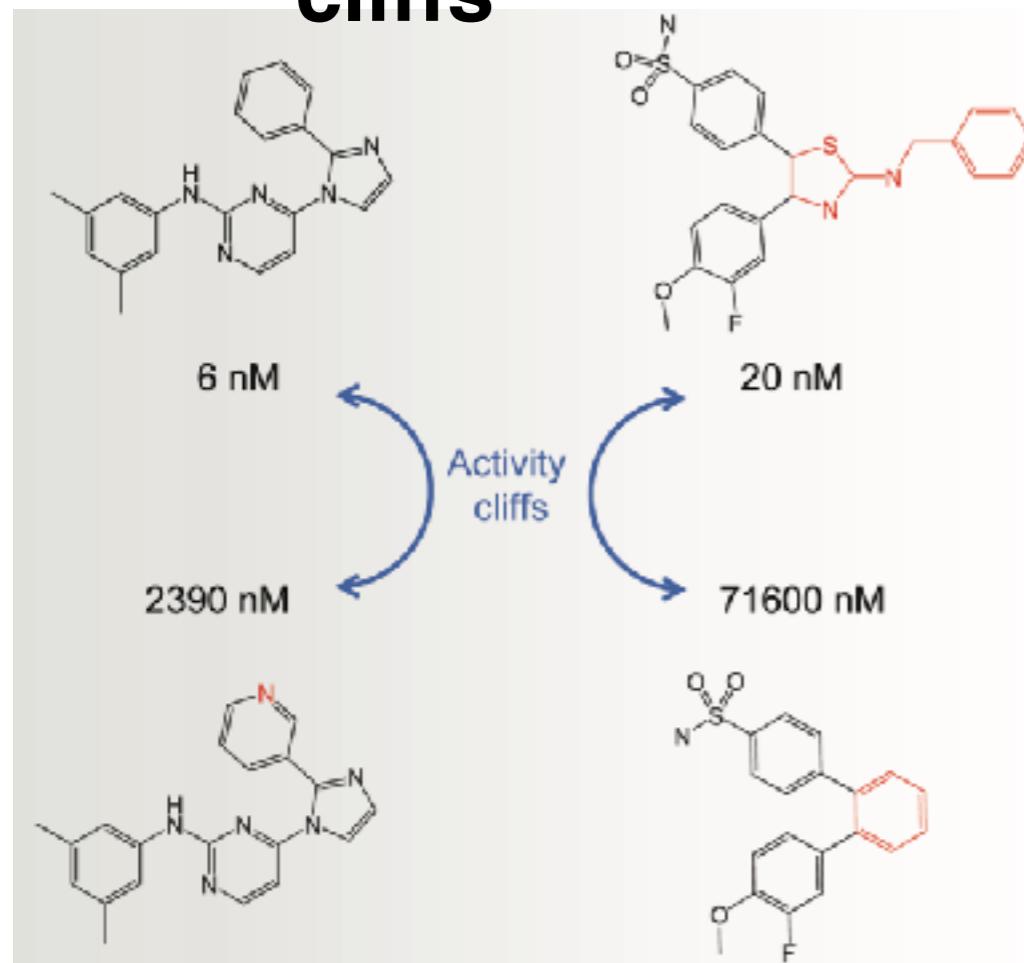
変数の数が少なく統計学的な仮定がある程度有効ならこれでOK。
しかし、現代の実問題のデータは...

入力が多様 + 少しの変化で出力が変わり得る

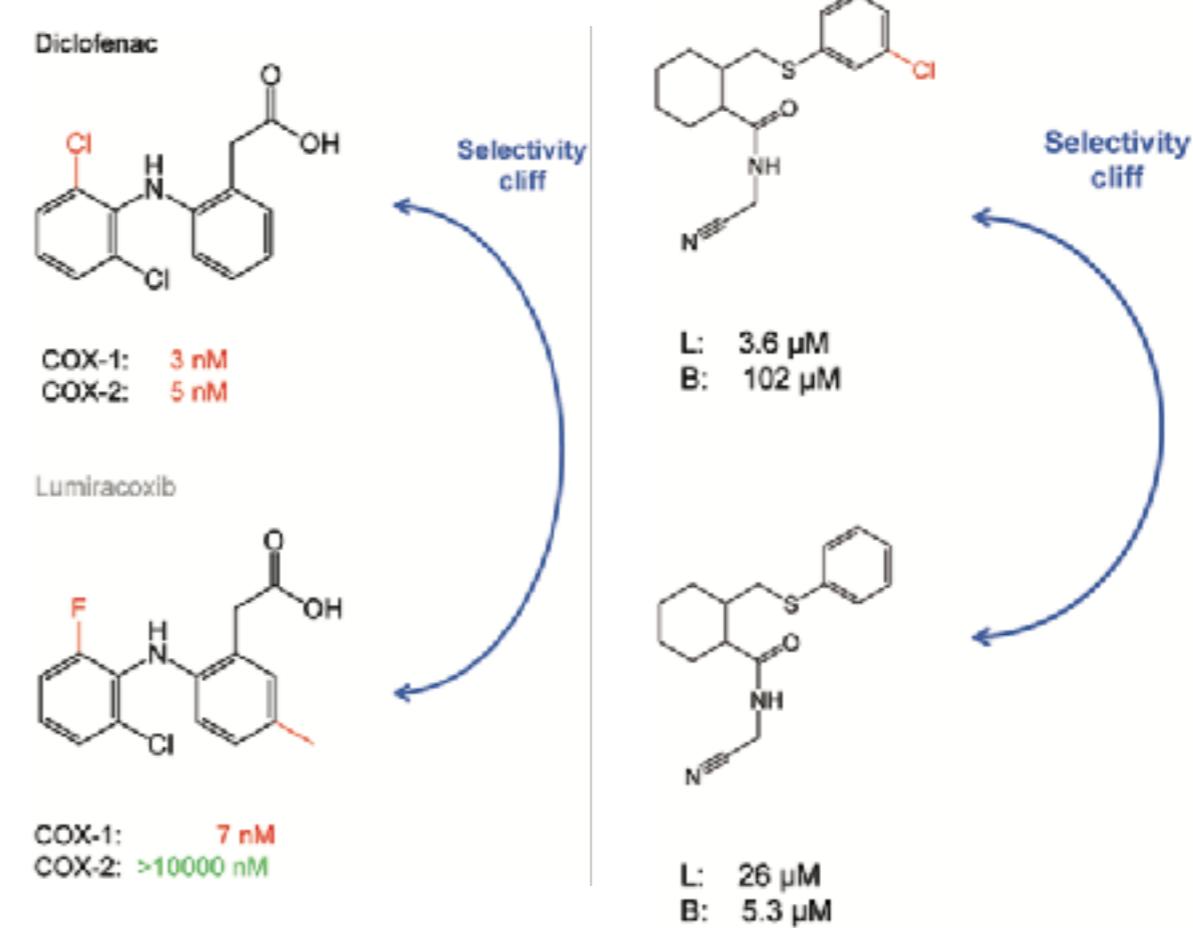
物性や活性のランドスケープは非平滑的
(少しの構造変化が急峻な影響をもたらす)



Activity cliffs



Selectivity cliffs



さらに高次元では外挿か内挿かの判定すら難しい...



与えられた訓練データ

内挿 or 外挿？

高次元空間は非直感的な性質を持つ

- **偽相関**：変数の数があまりに多いと訓練データすべてをとおる曲面が自由に作れてしまい偽相関が生じやすくなる
- **測度の集中現象**：見本点の間の距離が全てほぼ同じになる

成功例も内挿的だと直感するのは非常に困難

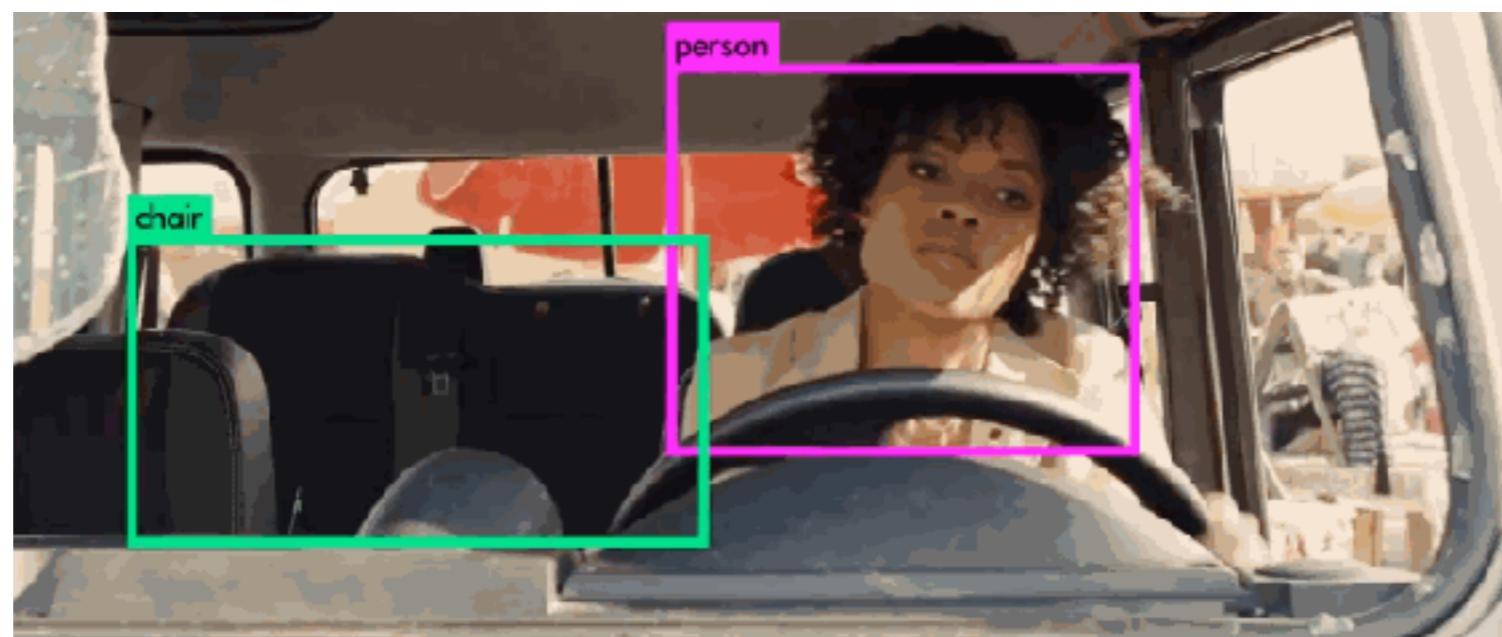
pix2pix



**CycleGAN
(e.g. DeepFake)**



YOLO



成功例も内挿的だと直感するのは非常に困難

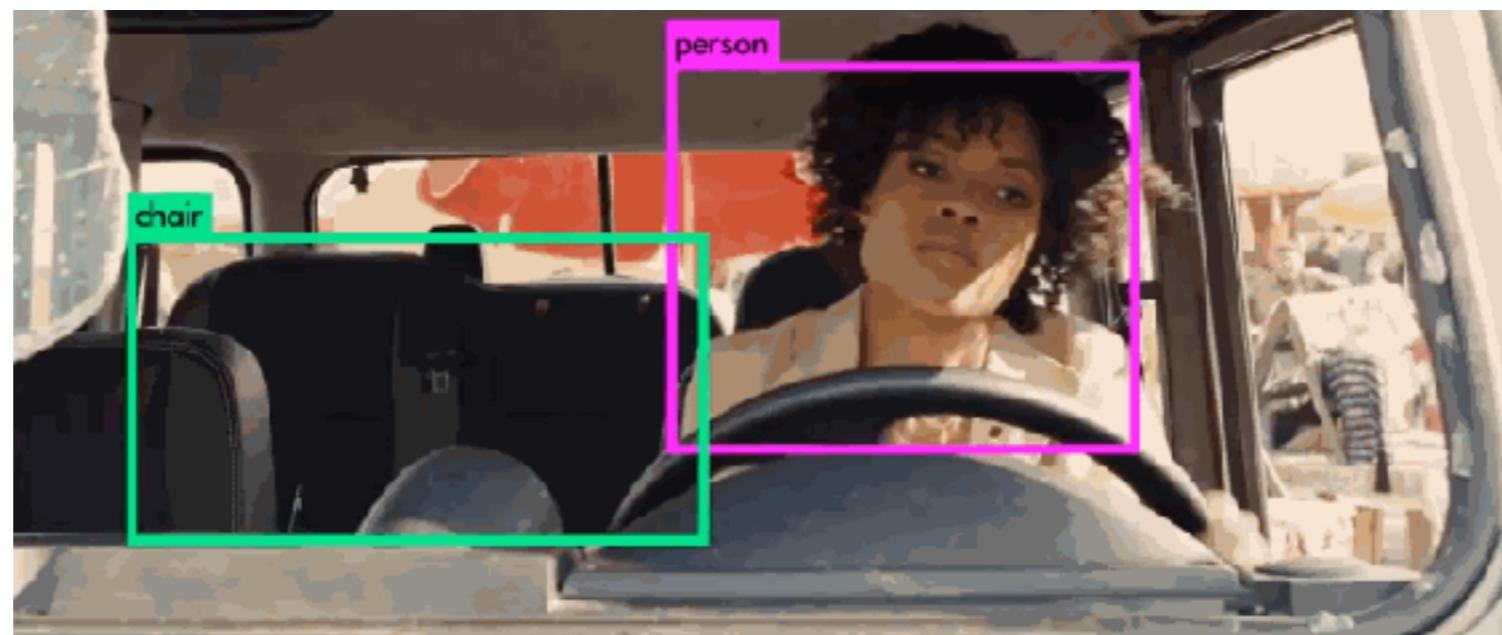
pix2pix



**CycleGAN
(e.g. DeepFake)**



YOLO



あてはめる曲面のほうも高次元では非直感的

e.g. Adversarial examples (GANの発想)、内挿 or 外挿の判定の難しさ

$$X + \text{sign}(\nabla_X J(\theta, X, Y)) = X + \epsilon \cdot \text{sign}(\nabla_X J(\theta, X, Y))$$

97.3% macaw
88.9% bookcase



"stop"
to "30m speed limit"

"80m speed limit"
to "30m speed limit"



"go right"
to "go straight"

<https://towardsdatascience.com/know-your-adversary-understanding-adversarial-examples-part-1-2-63af4c2f5830>

<http://www.evolvingai.org/fooling>

<https://arxiv.org/pdf/1610.06940.pdf>

Direct Encoding					Indirect Encoding			
brambling	redshank	robin	cheetah	king penguin	starfish	baseball	electric guitar	
armadillo	lesser panda	centipede	jackfruit	freight car	remote control	peacock	African grey	

「発見」編: まとめ

データの曲面あてはめによる内挿である機械学習だけでは
訓練データに全くない新規発見をするのは原理上困難

- 機械学習は曲面あてはめで訓練データを代表するだけ
- 曲面は見本データにあうようフィットされるので
外挿的なトレンドは予測根拠がきわめて薄くなる
- 発見(知識獲得)には知識の利用と探索のトレードオフの
考慮が必須
- 最近のデータは複雑で多様で制御されていないので古典
的な実験計画や曲面応答方ではなかなか十分ではない

今日の内容

1. イントロ

機械学習と科学(あるいは"ものづくり")

2. 機械学習で何かを「理解」できるか?

Answer: 直接的には**原理上困難**

3. 機械学習で何かを「発見」できるか?

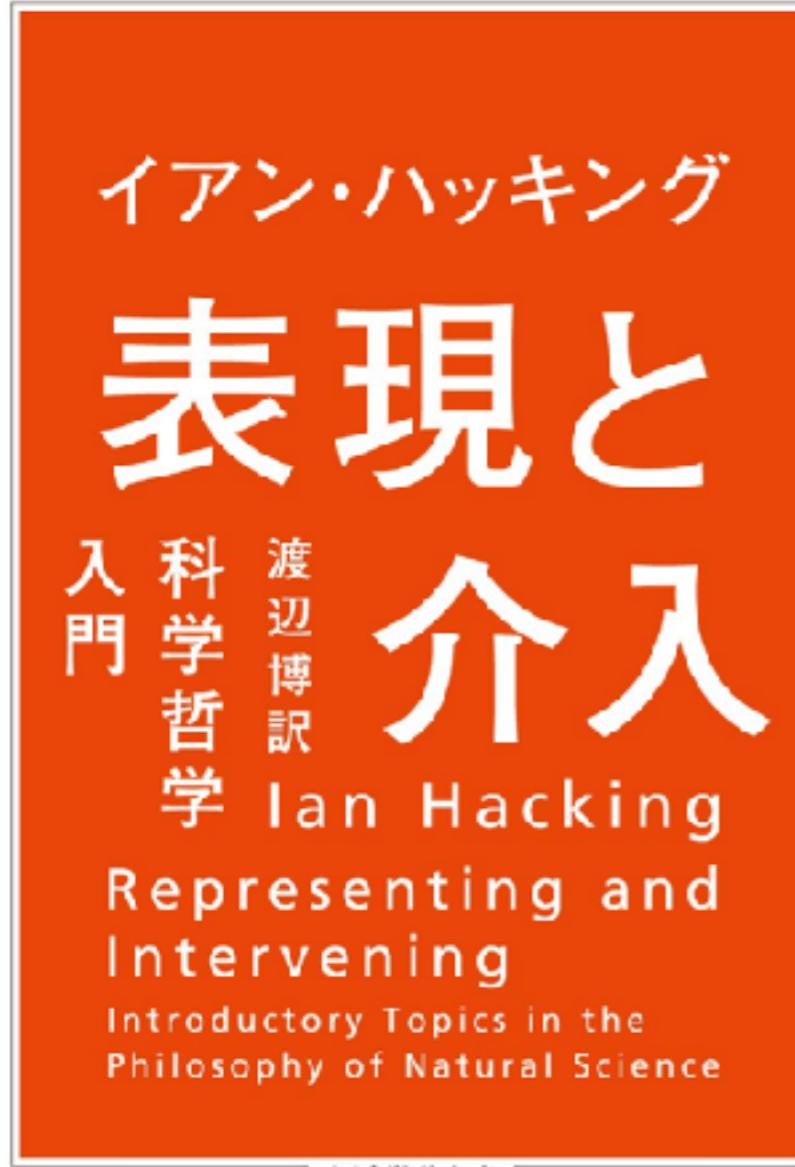
Answer: 直接的には**原理上困難**

4. じゃあどうすんの！？何がいるの！？

Answer: 「表現」と「介入」

2と3を前提に機械学習分野のトピックを簡単に紹介

科学的「理解・発見」に必要な二大要素?



「表現」

- 対象をどう表現するか？何を測るか？
- 問題を内挿的にする表現の学習
(いまのところ設計に要ドメイン知識)
- 背景過程について分かっている
ことの反映や活用 (帰納バイアス)

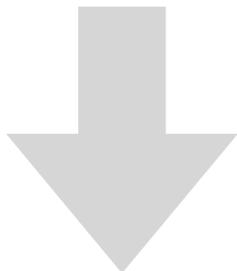
「介入」

- 機械学習に「実際に追加データを取りに行く」仕組みを融合
- 次に何を実験するかの最適計画

→ 科学的「理解」や「発見」とは何か(何であるべきか)は
科学哲学の問題

機械学習できたときの2種類の期待

1. 得られた変換過程(関数)による予測を色々な目的に使う
2. 得られた変換過程(関数)を分析して背景過程の仕組みを知る



1.について

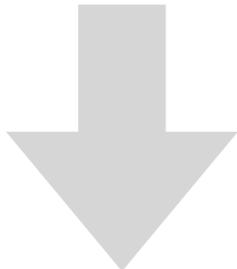
- **問題が内挿的になるよう工夫 (表現学習・隠れ構造同定)**
- **内挿・外挿判定 (予測の信頼度計算)**
- **モデルベース最適化と探索 (最適実験計画)**

2.について

- **ポストホック解析と解釈性モデル (学習済みモデル分析)**

機械学習できたときの2種類の期待

1. 得られた変換過程(関数)による予測を色々な目的に使う
2. 得られた変換過程(関数)を分析して背景過程の仕組みを知る



1.について

- 問題が内挿的になるよう工夫 (表現学習・隠れ構造同定)
- 内挿・外挿判定 (予測の信頼度計算)
- モデルベース最適化と探索 (最適実験計画)

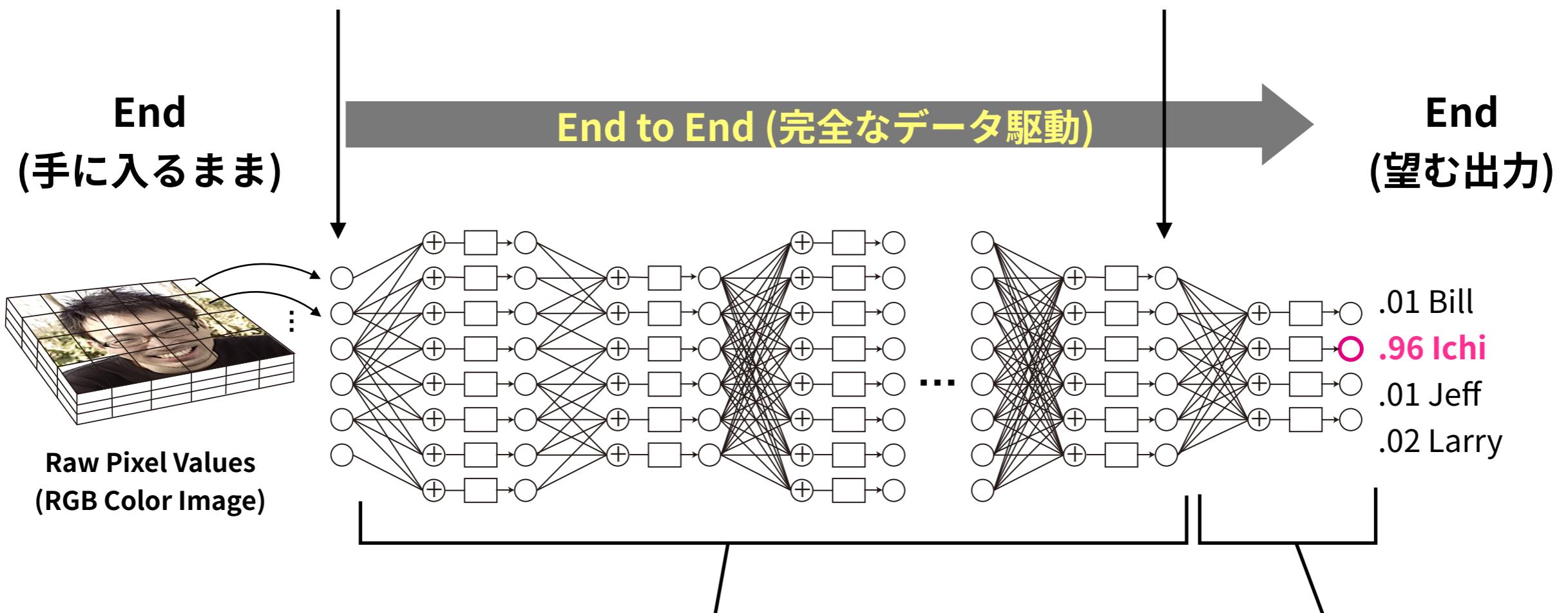
2.について

- ポストホック解析と解釈性モデル (学習済みモデル分析)

深層学習による表現学習

入力変数の段階では
内挿的じゃなくても...

予測に使う中間表現(隠れ
構造)で内挿的であればOK!

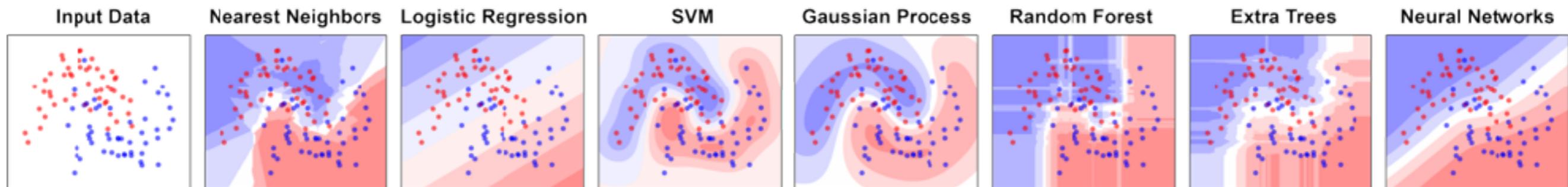


入力の「多次元の数値組(ベクトル)」を少しづつ
別の「多次元の数値組(ベクトル)」へ変換するプロセス

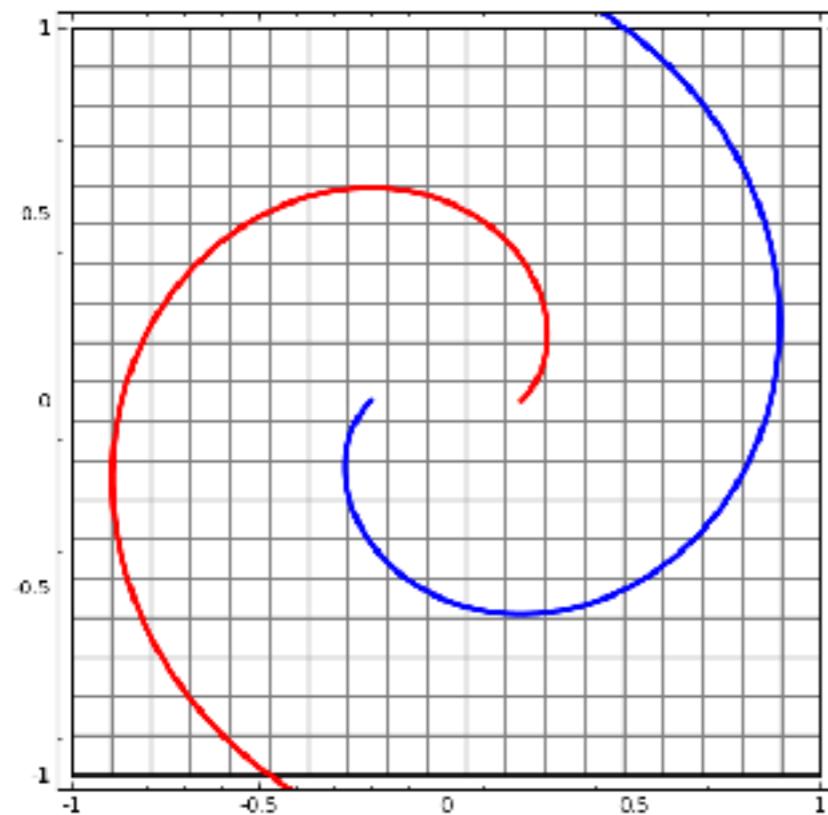
変換された最終量
について予測

例) 深層学習は入力の多段の変換プロセスを学習

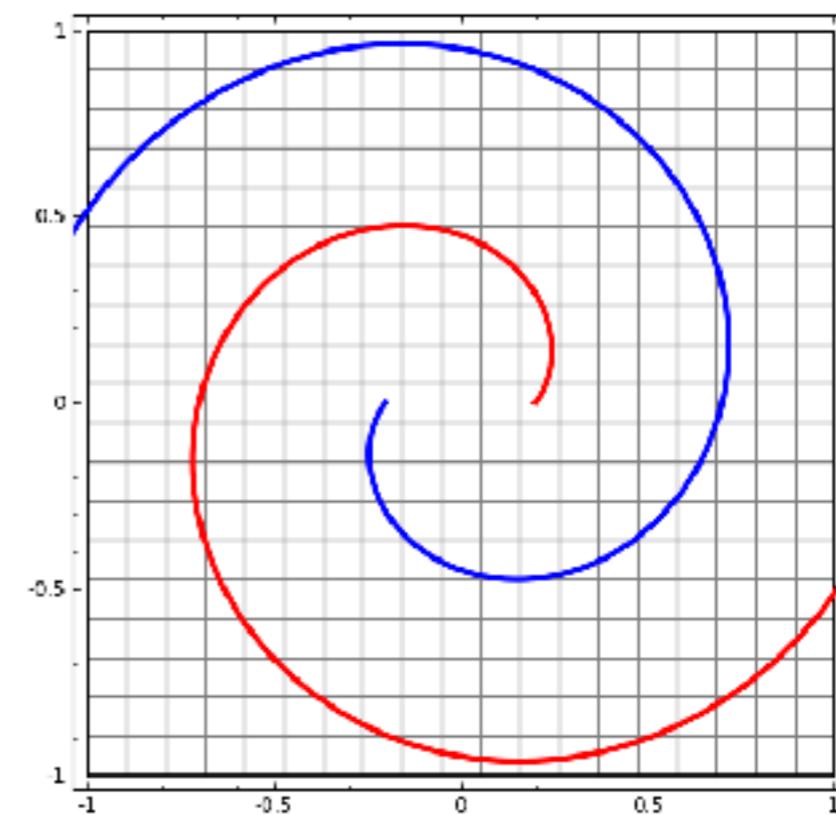
<https://colah.github.io/posts/2014-03-NN-Manifolds-Topology/>



線形分離できるような変換を学習

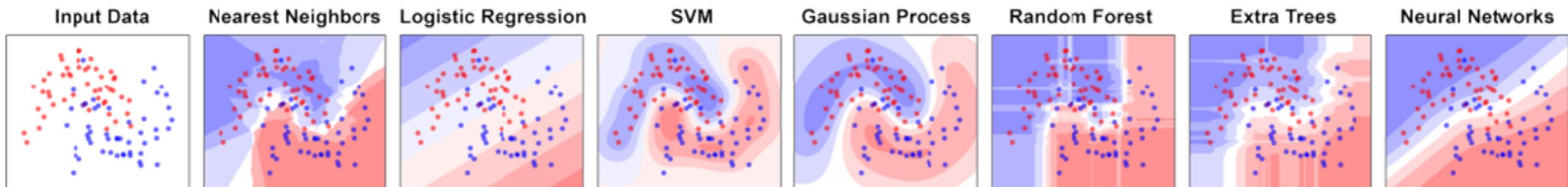


失敗例(常に成功するとは限らない)

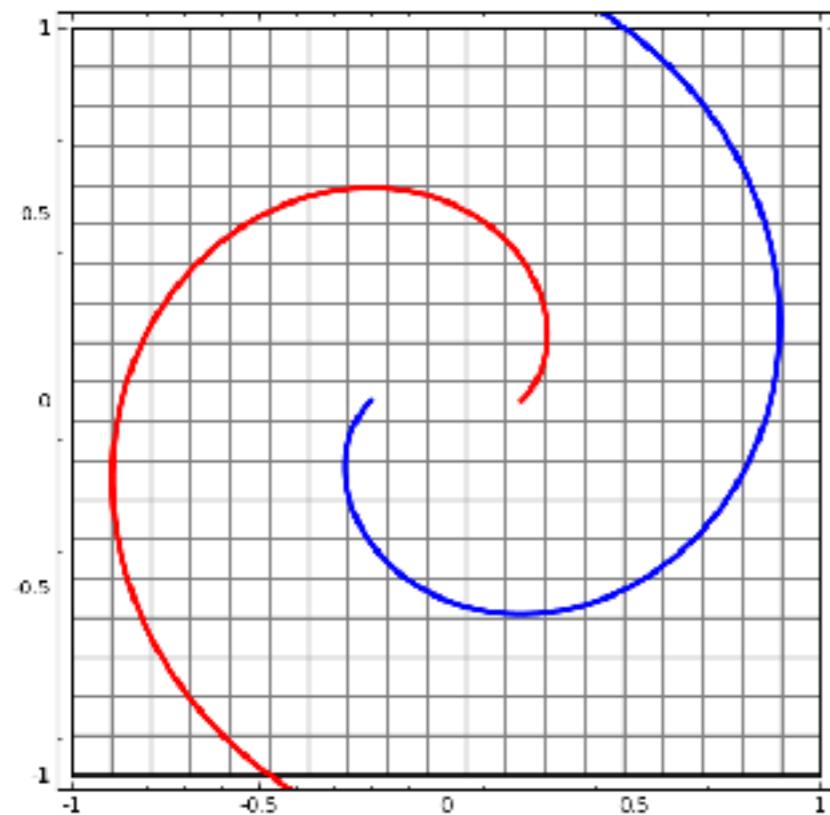


例) 深層学習は入力の多段の変換プロセスを学習

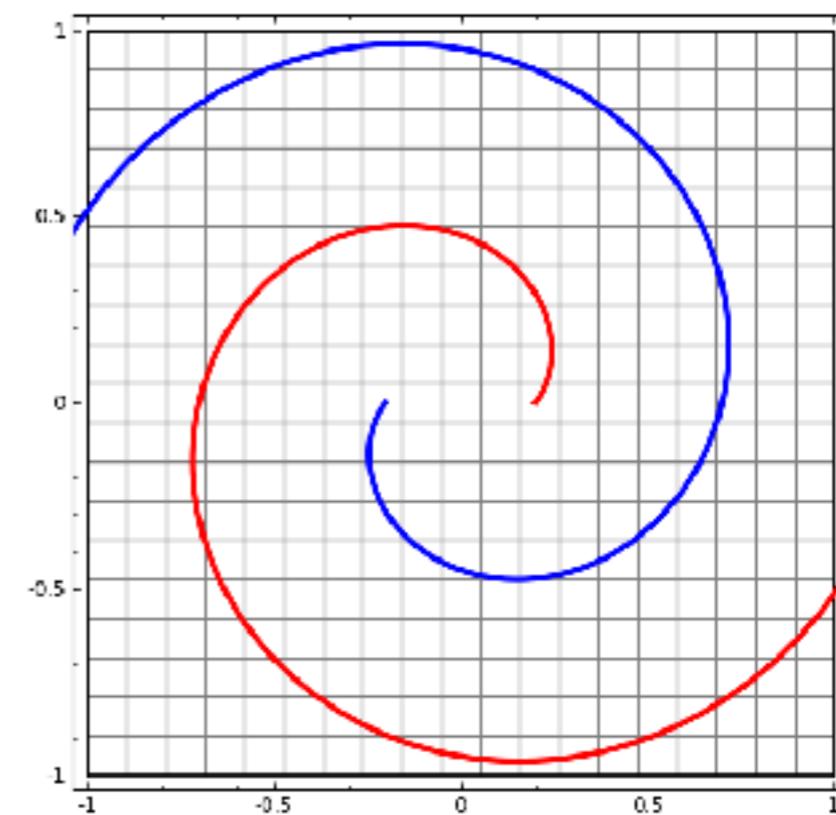
<https://colah.github.io/posts/2014-03-NN-Manifolds-Topology/>



線形分離できるような変換を学習

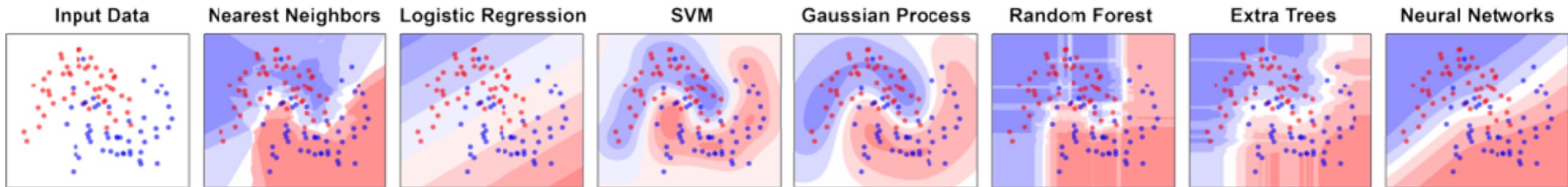


失敗例(常に成功するとは限らない)

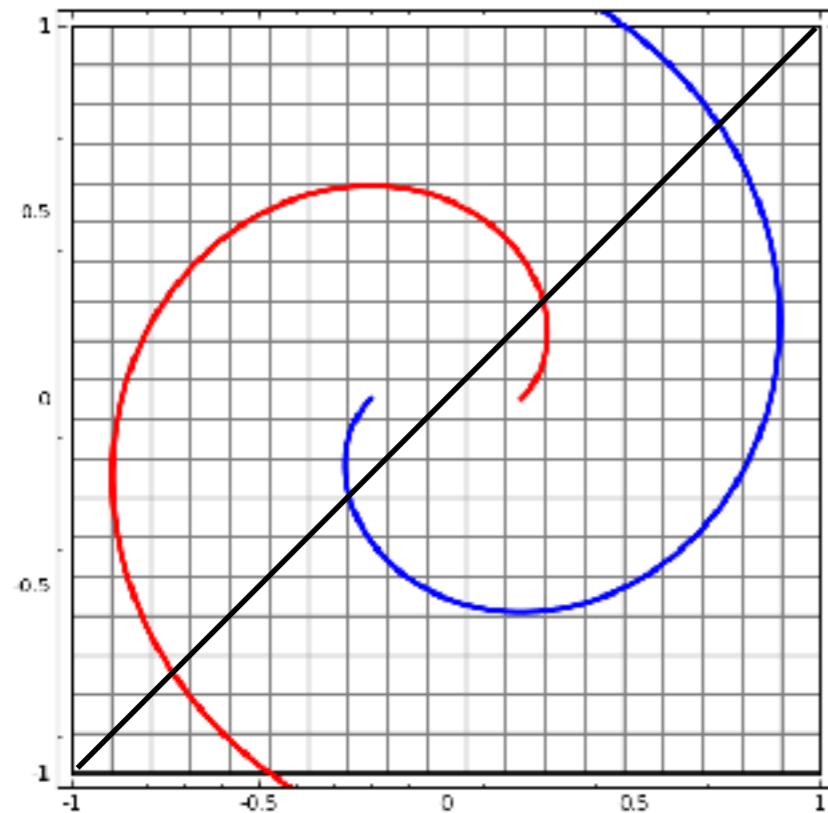


例) 深層学習は入力の多段の変換プロセスを学習

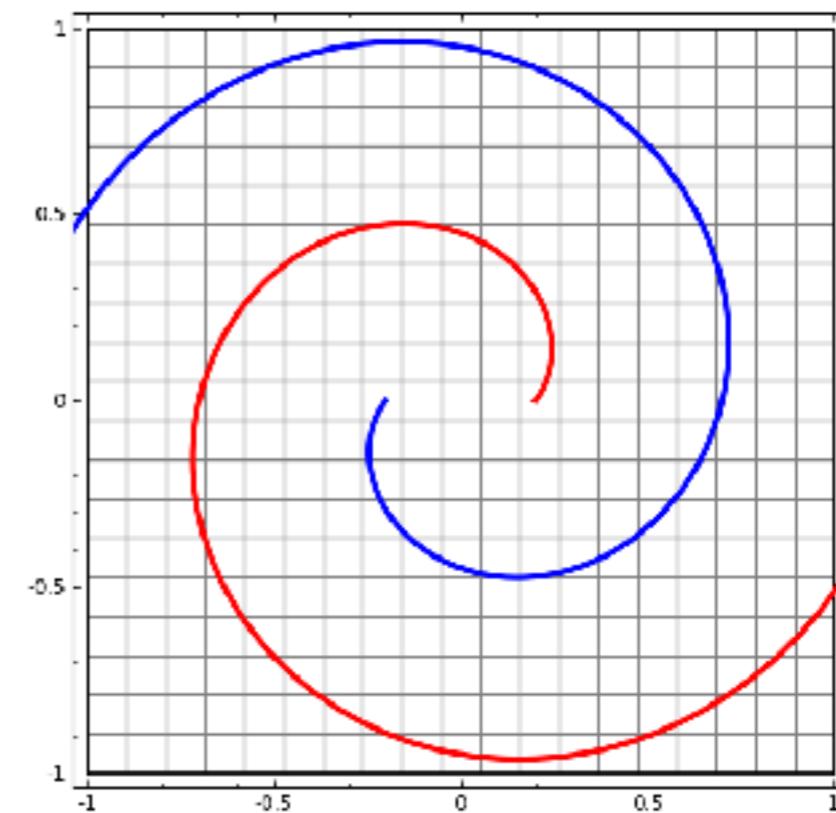
<https://colah.github.io/posts/2014-03-NN-Manifolds-Topology/>



線形分離できるような変換を学習

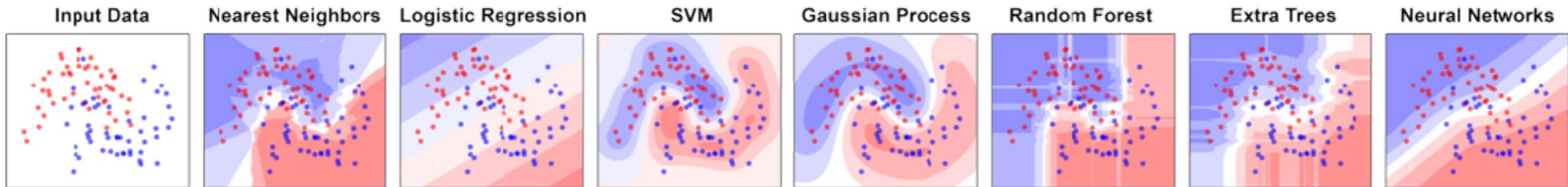


失敗例(常に成功するとは限らない)

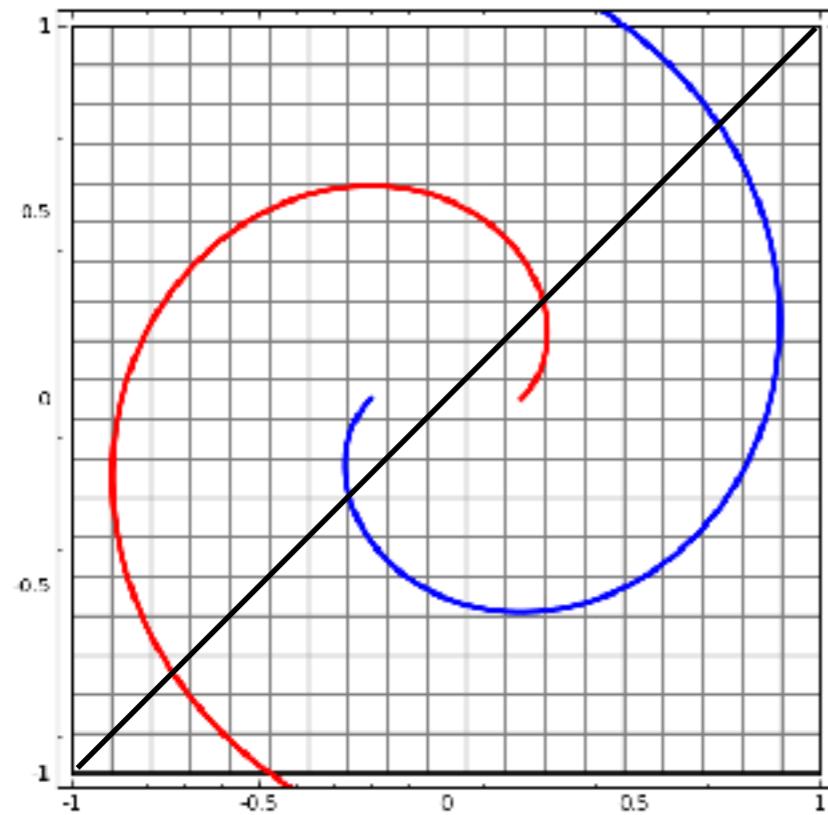


例) 深層学習は入力の多段の変換プロセスを学習

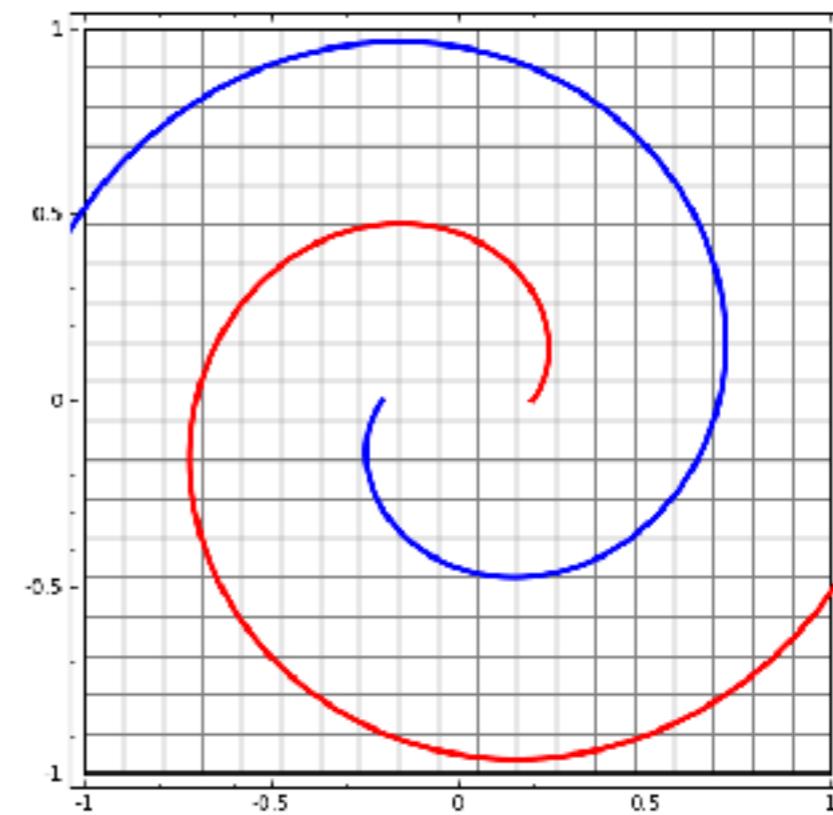
<https://colah.github.io/posts/2014-03-NN-Manifolds-Topology/>



線形分離できるような変換を学習



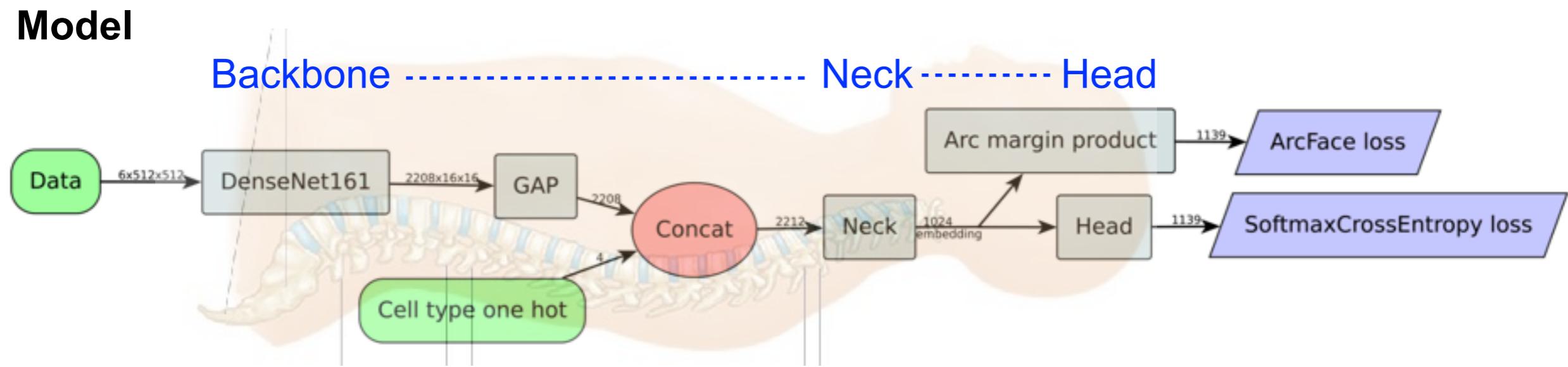
失敗例(常に成功するとは限らない)



モデル構造へのドメイン知識のエンコード

とにかく微分可能な演算の(深い)合成関数にさえなっていれば
モデルパラメタは自動微分(aka backprop)で学習できるので
背景過程を理解しそれにそって柔軟にモデル構造を設計

Model



- Backbone is pre-trained on ImageNet and first convolution is replaced with 6 input channel convolution
- Neck: BN + FC + ReLU + BN + FC + BN
- Head: FC

事前学習からの転移も有効

<https://www.kaggle.com/c/recursion-cellular-image-classification/discussion/110543#latest-637352>

事前学習が効かないとされた言語タスクでも...

かつて言語タスクではRNN(LSTM/GRU)→CNNの流れだったが...

Attention Is All You Need

arxiv.org ▾

by A Vaswani - 2017 - Cited by 3294 - Related articles

Jun 12, 2017 - Attention Is All You Need. ... The best performance was achieved by stacking multiple layers of an encoder and decoder through an attention mechanism. We

Googleの華麗な論文を契機にRNNやCNNよりTransformerが支配的に!?

超巨大な事前学習モデルの(Attentiveな)「転移学習」へ

2018/10/18

→ Googleの言語モデルBERT

GLUEベンチマークの全言語理解タスクでぶっちぎりのSOTA !
質疑応答タスクのSQuADでもSOTA !

2019/01/31

→ Microsoftの言語モデルMT-DNN

2019/02/14

→ OpenAIの言語モデルGPT-2

作文性能が高すぎてオープンソースとして公開してしまうとフェイクニュースが作り放題になってしまふ懸念から研究者向けに規模縮小版のみを公開

2019/06/19

→ CMUのXLNet

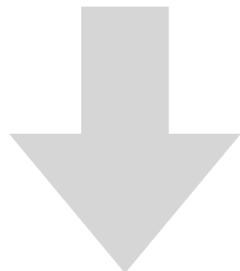
外挿的領域での機械学習の活用

見本点がない外挿的領域で機械学習(曲面あてはめ)を活用する。

- 類似した問題・データでの関係性を横断的に活用して類推
(転移学習、半教師つき学習、マルチタスク学習、注視的学习)
- 近さの測り方を適切に学習して問題を内挿的に (計量学習)
- 背景過程の第一原理モデル(シミュレーション)を不確実な因子を含めて立てその最適な推定値を機械学習する (データ同化)
- シミュレーションデータや経験者の教示を用いてデータを増やしできるだけ問題を内挿的に (敵対的生成、模倣学習)
- シミュレーション結果から実現象のギャップを機械学習する
(転移学習、メタ学習)

機械学習できたときの2種類の期待

1. 得られた変換過程(関数)による予測を色々な目的に使う
2. 得られた変換過程(関数)を分析して背景過程の仕組みを知る



1.について

- 問題が内挿的になるよう工夫 (表現学習・隠れ構造同定)
- 内挿・外挿判定 (予測の信頼度計算)
- モデルベース最適化と探索 (最適実験計画)

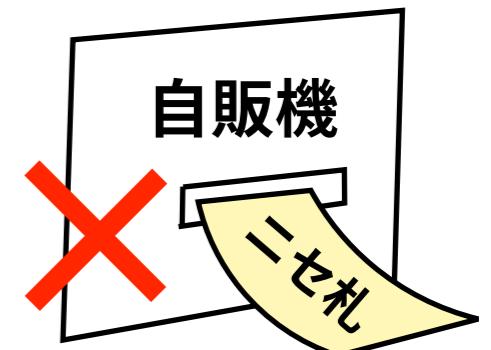
2.について

- ポストホック解析と解釈性モデル (学習済みモデル分析)

外挿判定もしくは信頼領域推定

予測したい検査入力点の近くに見本点が全然ない(or 非常に少ない)場合は基本的に外挿的

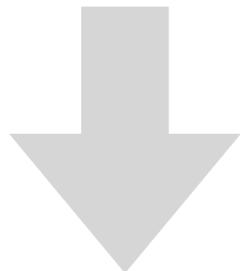
- パターン認識における棄却オプション
- 信頼区間計算
- ベイズにおける予測分布
- CheminfoにおけるApplicability Domain(AD)



😊科学と機械学習のあいだ：変量の設計・変換・選択・交互作用・線形性
<https://www.slideshare.net/itakigawa/ss-69269618>

機械学習できたときの2種類の期待

1. 得られた変換過程(関数)による予測を色々な目的に使う
2. 得られた変換過程(関数)を分析して背景過程の仕組みを知る



1.について

- 問題が内挿的になるよう工夫 (表現学習・隠れ構造同定)
- 内挿・外挿判定 (予測の信頼度計算)
- モデルベース最適化と探索 (最適実験計画)

2.について

- ポストホック解析と解釈性モデル (学習済みモデル分析)

機械学習の利活用による最適実験計画？



次の実験計画・
feedback

既知の知見・
観測(データ)

高速・高精度な
Data-Driven予測

結果の確認と
検証

仮説形成

(機械学習・データマイニング)

- どういう実験・シミュレーションを次に行うかの計画立案
- 時間のかかる計算の高精度高速近似
- 曖昧な因子や実験条件の最適化
- Multilevelの情報統合

仮説検証

(シミュレーション+実験)

- 再現性を担保する高精度・高速実験系
- 仮想化検証が可能な因子のシミュレーション(計算科学)による探索
→ 望ましい対象のさらなる絞り込み

2000-2010年頃から創薬/生命科学で先行

NATURE REVIEWS | DRUG DISCOVERY
VOLUME 17 | FEBRUARY 2018 | 97

PERSPECTIVES

INNOVATION

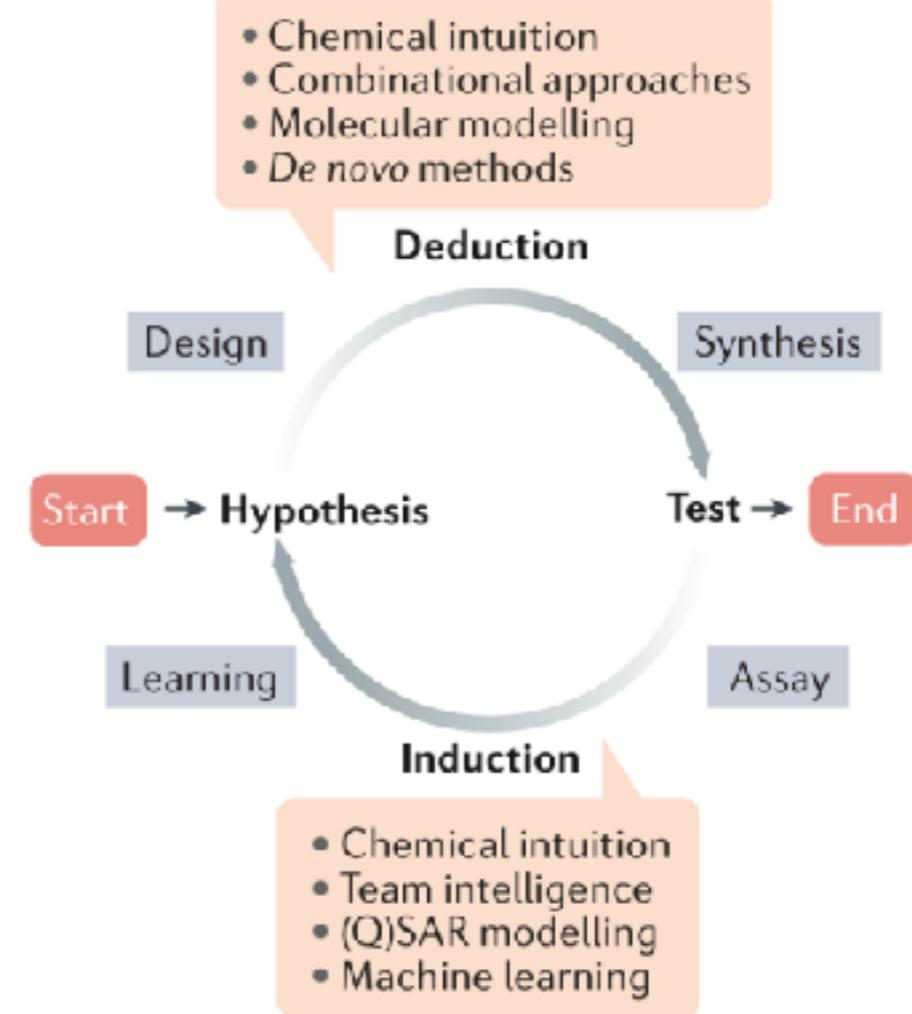
Automating drug discovery

Gisbert Schneider



Figure 2 | Automated drug discovery facilities. a | Millions of compound samples are stored in compact high-capacity facilities and handled by robots. b | Robot systems perform both high-throughput and medium-throughput screening of up to ten thousand samples per day to determine the activity against the biological target of interest. Multiple arms and flexible workstations enable fully automated liquid dispensing, compound

preparation and testing. These storage and screening systems have become cornerstones of contemporary drug discovery. c | A prototype of a novel miniaturized design-synthesize-test-analyse facility for rapid automated drug discovery at AstraZeneca is shown. Images a and b courtesy of Jan Kriegel, Boehringer-Ingelheim Pharma; Image c courtesy of Michael Kossenjans, AstraZeneca.



材料開発へも展開

Toyota teams with China's CATL and BYD to power electric ambitions

Automaker diversifies battery source and moves up electrification goal by 5 years

YUKIHIRO OMOTO, Nikkei staff writer

JUNE 07, 2019 02:00 JST • UPDATED ON JUNE 07, 2019 14:39 JST



↓品質を担保する大規模化の技術的必須要素：
製造ラインに人が(ほとんど)いない



CATL

研究開発体制

材料開発、セルデザインにおいて
最先端シミュレーション技術を活用

生産体制

完全自動化によるフレキシブルな生産
IoTやビッグデータを活用した生産管理

材料開発へも展開

Toyota teams with China's CATL and BYD to power electric ambitions

Automaker diversifies battery source and moves up electrification goal by 5 years

YUKIHIRO OMOTO, Nikkei staff writer

JUNE 07, 2019 02:00 JST • UPDATED ON JUNE 07, 2019 14:39 JST



↓品質を担保する大規模化の技術的必須要素：
製造ラインに人が(ほとんど)いない



CATL

研究開発体制

材料開発、セルデザインにおいて
最先端シミュレーション技術を活用

生産体制

完全自動化によるフレキシブルな生産
IoTやビッグデータを活用した生産管理

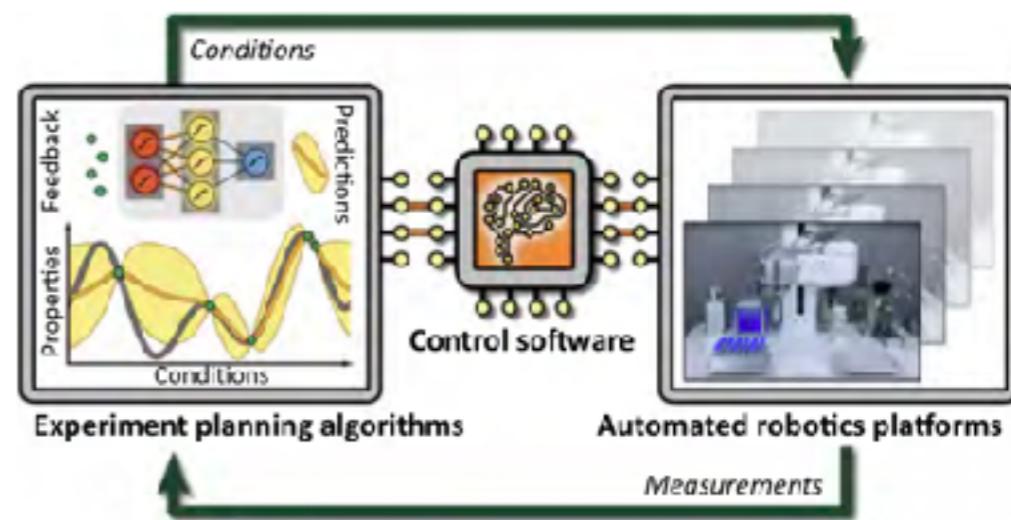
化学にも波及

Trends in Chemistry, June 2019, Vol. 1, No. 3 [10.1016/j.trechm.2019.02.007](https://doi.org/10.1016/j.trechm.2019.02.007)

Opinion

Next-Generation Experimentation with Self-Driving Laboratories

Florian Häse,^{1,2,3,4} Loïc M. Roch,^{1,2,3,4} and Alán Aspuru-Guzik^{1,2,3,4,5,*}



Computer-Aided Synthetic Planning

International Edition: DOI: 10.1002/anie.201506101
German Edition: DOI: 10.1002/ange.201506101

Computer-Assisted Synthetic Planning: The End of the Beginning

Sara Szymkuć, Ewa P. Gajewska, Tomasz Klucznik, Karol Molga, Piotr Dittwald, Michał Startek, Michał Bajczyk, and Bartosz A. Grzybowski*

Angew. Chem. Int. Ed. 2016, 55, 5904–5937

Angewandte
Chemie
International Edition

Machine-Assisted Chemistry Special Issue 150 Years of BASF

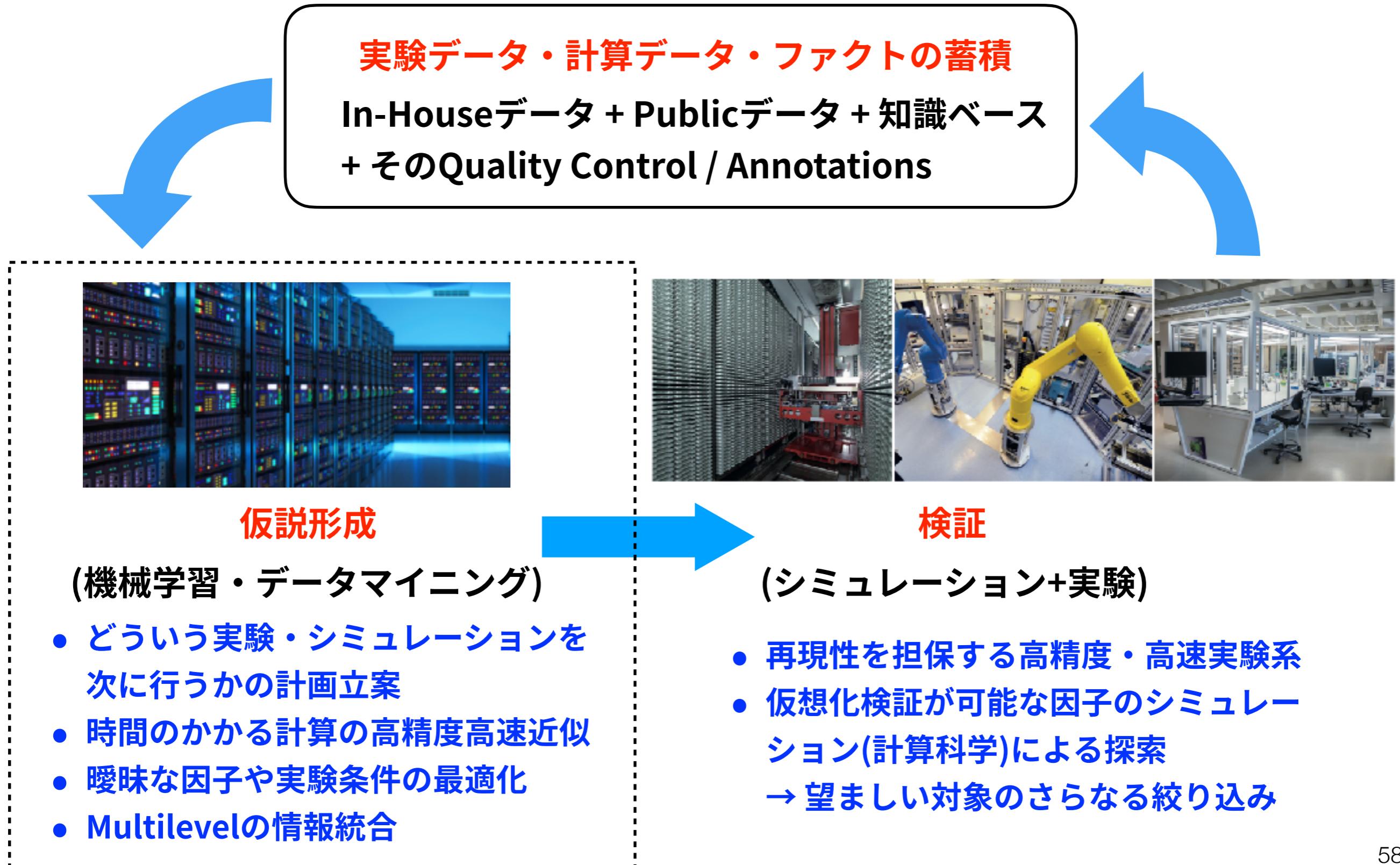
DOI: 10.1002/anie.201410744

Organic Synthesis: March of the Machines

Steven V. Ley,* Daniel E. Fitzpatrick, Richard J. Ingham, and Rebecca M. Myers

Angew. Chem. Int. Ed. 2015, 54, 3449–3464

Key：蓄積された「計算・実験データ」の利活用



「データ利活用技術」は科学研究の道具の一つに

Science is changing, the tools of science are changing. And that requires different approaches. Eric Bloch, 1925-2016

Nature, 559
pp. 547–555 (2018)

REVIEW

<https://doi.org/10.1038/s41586-018-0337-2>

Machine learning for molecular and materials science

Keith T. Butler¹, Daniel W. Davies², Hugh Cartwright³, Olexandr Isayev^{4*} & Aron Walsh^{5,6*}

Here we summarize recent progress in machine learning for the chemical sciences. We outline machine-learning techniques that are suitable for addressing research questions in this domain, as well as future directions for the field. We envisage a future in which the design, synthesis, characterization and application of molecules and materials is accelerated by artificial intelligence.

The Schrödinger equation provides a powerful structure–property relationship for molecules and materials. For a given spatial arrangement of chemical elements, the distribution of electrons and a wide range of physical responses can be described. The generating, testing and refining scientific models. Such techniques are suitable for addressing complex problems that involve massive combinatorial spaces or nonlinear processes, which conventional procedures either cannot solve or can tackle only at great computational cost.

Science, 361
pp. 360-365 (2018)

SPECIAL SECTION FRONTIERS IN COMPUTATION

REVIEW

Inverse molecular design using machine learning: Generative models for matter engineering

Benjamin Sanchez-Lengeling¹ and Alán Aspuru-Guzik^{2,3,4*}

The discovery of new materials can bring enormous societal and technological progress. In this context, exploring completely the large space of potential materials is computationally intractable. Here, we review methods for achieving inverse design, which aims to discover tailored materials from the starting point of a particular desired functionality. Recent advances from the rapidly growing field of artificial intelligence, mostly from the subfield of machine learning, have resulted in a fertile exchange of ideas, where approaches to inverse molecular design are being proposed and employed at a rapid pace. Among these, deep generative models have been applied to numerous classes of materials: rational design of prospective drugs, synthetic routes to organic compounds, and optimization of photovoltaics and redox flow batteries, as well as a variety of other solid-state materials.

act properties. In practice, approximations are used to lower computational time at the cost of accuracy.

Although theory enjoys enormous progress, now routinely modeling molecules, clusters, and perfect as well as defect-laden periodic solids, the size of chemical space is still overwhelming, and smart navigation is required. For this purpose, machine learning (ML), deep learning (DL), and artificial intelligence (AI) have a potential role to play because their computational strategies automatically improve through experience (1).

In the context of materials, ML techniques are often used for property prediction, seeking to learn a function that maps a molecular material to the property of choice. Deep generative models are a special class of DL methods that seek to model the underlying probability distribution of both structure and property and relate them in a nonlinear way. By exploiting patterns in massive datasets, these models can distill average and salient features that characterize molecules (2,3).

Inverse design is a component of a more complex materials discovery process. The time

Science, 293
pp. 2051-2055 (2001)

VIEWPOINT

Machine Learning for Science: State of the Art and Future Prospects

Eric Mjolsness* and Dennis DeCoste

Recent advances in machine learning methods, along with successful applications across a wide variety of fields such as planetary science and bioinformatics, promise powerful new tools for practicing scientists. This viewpoint highlights some useful characteristics of modern machine learning methods and their relevance to scientific applications. We conclude with some speculations on near-term progress and promising directions.

Machine learning (ML) (1) is the study of computer algorithms capable of learning to improve their performance of a task on the basis of their own previous experience. The field is closely related to pattern recognition and statistical inference. As an engineering field, ML has become steadily more mathematical and more successful in applications over the past 20 years. Learning approaches such as data clustering, neural network classifiers, and nonlinear regression have found surprisingly wide application in the practice of engineering, business, and science. A generalized version of the stan-

correlate surprisingly well with subsequent gene expression analysis (3). Postgenomic biology prominently features large-scale gene expression data analyzed by clustering methods (4), a standard topic in unsupervised learning. Many other examples can be given of learning and pattern recognition applications in science. Where will this trend lead? We believe it will lead to appropriate, partial automation of every element of scientific method, from hypothesis generation to model construction to decisive experimentation. Thus, ML has the potential to ameliorate every aspect of a working scientist's

creating hypotheses, testing by decisive experiment or observation, and iteratively building up comprehensive testable models or theories is shared across disciplines. For each stage of this abstracted scientific process, there are relevant developments in ML, statistical inference, and pattern recognition that will lead to semi-automatic support tools of unknown but potentially broad applicability.

Increasingly, the early elements of scientific method—observation and hypothesis generation—face high data volumes, high data acquisition rates, or requirements for objective analysis that cannot be handled by human perception alone. This has been the situation in experimental particle physics for decades. There automatic pattern recognition for significant events is well developed, including Hough transforms, which are foundational in pattern recognition. A recent example is event analysis

一方で、生命科学でも得られた教訓として、（お金もかかるので、）
実効性をともなう方式の確立にはまだ要素技術の改良と「良い」データの蓄積が必要

"low input, high throughput, no output science." (Sydney Brenner)

→ 雜な設定・系で網羅的なハイスループット実験をいくらしても何も得られない

「(筋の良い)仮説形成」と機械学習・データマイニング

- 自動化のもう一つの恩恵は、「再現性」「結果の質」の担保
属人性が残っているとデータの質にも(予測にも)ばらつきが生じる
- 近年の自動化で「高速にできるだけたくさん試す」のは
探索を効率化する王道だが、考えられる候補がほぼ無限にありえる
ので、「何を試すか」の選択の問題は残る(全部は試せない...)
- 自動化をするかしないかによらず、実験でも計算でも、筋の良い
ターゲット、実験条件、パラメタを決めるステップはボトルネック



実験データ・計算データ・ファクトの蓄積

In-Houseデータ + Publicデータ + 知識ベース
+ そのQuality Control / Annotations)

+



機械学習・データマイニング

モデルベース最適化(代理モデル最適化)

航空宇宙機のような流体機械設計など、計算時間がかかるシミュレーションを用いた設計最適化技術として発展

計算時間がかかるシミュレーションの代理(surrogate)として、機械学習 $x \rightarrow y$ を活用する

1. Initial Sampling

実験計画

e.g.

Latin hypercube sampling (LHS)

2. Loop:

1. Construct a Surrogate Model.

機械学習

2. Search Infill Criterion.

適応サンプリング

3. Add new samples.

e.g.

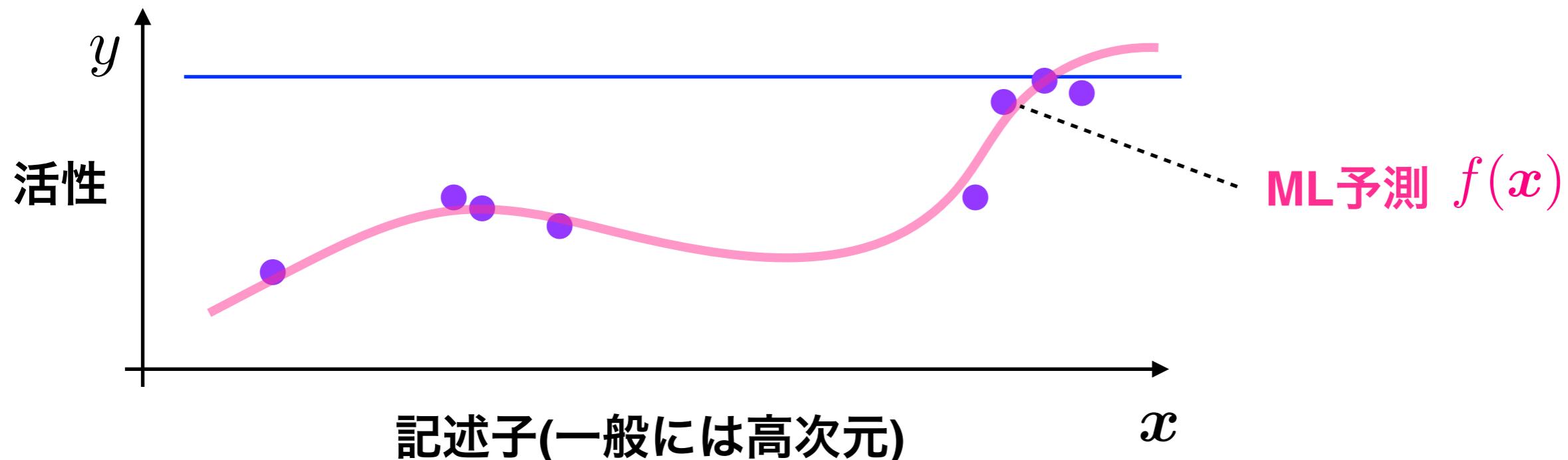
Expected improvement (EI)

Recent advances in surrogate-based optimization (Forrester & Keane, 2009)

<https://doi.org/10.1016/j.paerosci.2008.11.001>

Infill基準と最適実験計画

"exploitation" と "exploration" のバランス制御にもMLを用いる

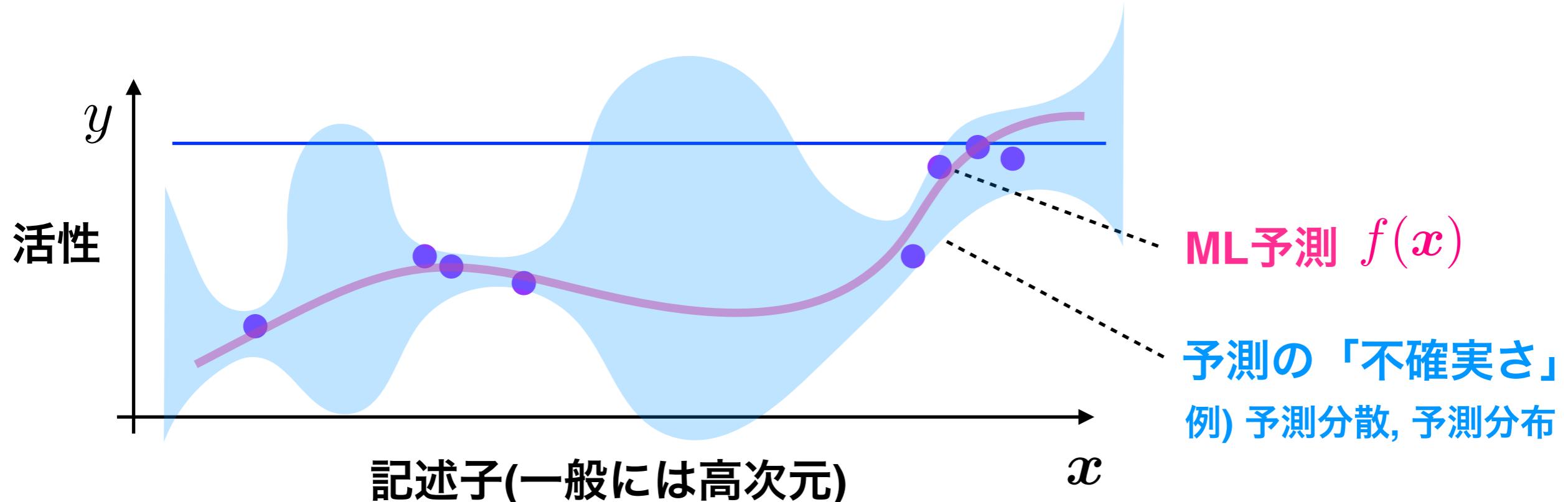


どうやってバランス制御するのかには色々なやりかたがあり Hot Topics

- 強化学習 + 探索
- ブラックボックス最適化
- ベイズ最適化
- 逐次実験計画
- アクティブラーニング
- 多腕バンディット
- 進化計算
- ゲーム理論 (CFRなど)

Infill基準と最適実験計画

"exploitation" と "exploration" のバランス制御にもMLを用いる

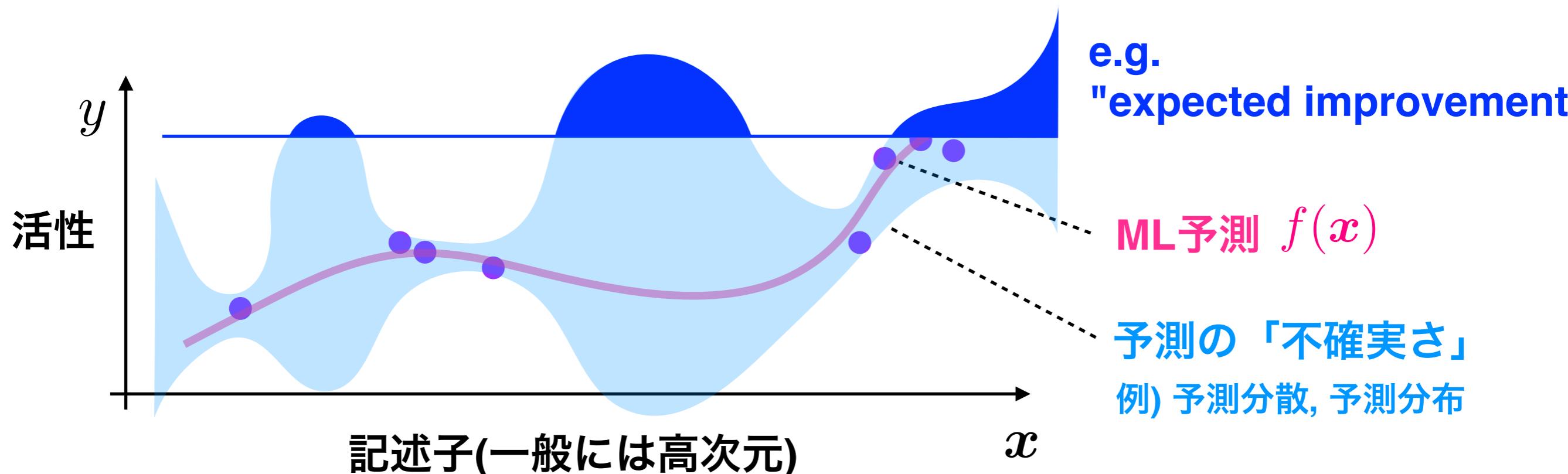


どうやってバランス制御するのかには色々なやりかたがあり Hot Topics

- 強化学習 + 探索
- ブラックボックス最適化
- ベイズ最適化
- 逐次実験計画
- アクティブラーニング
- 多腕バンディット
- 進化計算
- ゲーム理論 (CFRなど)

Infill基準と最適実験計画

"exploitation" と "exploration" のバランス制御にもMLを用いる



どうやってバランス制御するのかには色々なやりかたがあり Hot Topics

- 強化学習 + 探索
- ブラックボックス最適化
- ベイズ最適化
- 逐次実験計画
- アクティブラーニング
- 多腕バンディット
- 進化計算
- ゲーム理論 (CFRなど)

機械學習分野自体でもHot Research Topic



AlphaGo
(Nature, Jan 2016)

ARTICLE

Mastering the game of Go without human knowledge

David Silver^{1,2*}, Julian Schrittwieser^{3*}, Karen Simonyan¹, Ioannis Antonoglou¹, Aja Huang¹, Arthur Guez¹, Thomas Hubert¹, Lucas Baker¹, Matthew Lai¹, Adriaan Bentaïb¹, Yutian Chen¹, Timothy Lillicrap¹, Fan He¹, Laurent Sifre¹, George van der Driessche¹, Thore Graepel¹ & Demis Hassabis¹

A long-standing goal of artificial intelligence is an algorithm that learns, while remaining superhuman proficiency in challenging domains. Recently, AlphaGo became the first program to defeat a world champion in the game of Go. The tree search algorithm evaluated positions and selected moves using deep neural networks. These neural networks were trained by supervised learning from human expert moves and by reinforcement learning from self-play. Here we introduce an algorithm based solely on reinforcement learning, without human data, to extract domain knowledge beyond game rules. AlphaGo becomes its own teacher: a neural network is trained to predict AlphaGo's own move selection and also the winner of AlphaGo's games. This neural network improves the strength of the tree search, resulting in higher quality move selection and storage. Self-play in the next iteration starting tabula rasa, our new program, AlphaGoZero, achieved superhuman performance, winning 100–0 against the previously published, champion-defeating AlphaGo.

Much progress towards artificial intelligence has been made using supervised learning systems that are trained to replicate the decisions of human experts^{1–3}. However, expert data can be often expensive, unreliable or simply unavailable. Even when reliable data sets are available, they may become a ceiling on the performance of systems trained in this manner. By contrast, reinforcement learning systems are trained from their own experience, in principle allowing them to exceed human capabilities and to operate in domains where human expertise is lacking. Recently, there has been rapid progress toward this goal, using deep neural networks trained by reinforcement learning. These systems have outperformed humans in computer games, such as Atari^{4–6} and Shazam⁷. However, these systems have

Silver *et al.*, *Science* **362**, 1140–1144 (2018)

7 December 2018

COMPUTER SCIENCE

A general reinforcement learning algorithm that masters chess, shogi, and Go through self-play

David Silver^{1,2*}, Thomas Hubert^{1*}, Julian Schrittwieser^{3*}, Ioannis Antonoglou¹, Matthew Lai¹, Arthur Guez¹, Marc Lanctot¹, Laurent Sifre¹, Dhruvish Kumar¹, Thore Graepel¹, Timothy Lillicrap¹, Karen Simonyan¹, Demis Hassabis¹

The game of chess is the longest-studied domain in the history of artificial intelligence. The strongest programs are based on a combination of sophisticated search techniques, domain-specific adaptations, and handcrafted evaluation functions that have been refined by human experts over several decades. By contrast, the AlphaGo Zero program recently achieved superhuman performance in the game of Go by reinforcement learning from self-play. In this paper, we generalize this approach into a single AlphaZero algorithm that can achieve superhuman performance in many challenging games. Starting from random play and given no domain knowledge except the game rules, AlphaZero convincingly defeated a world champion program in the games of chess and shogi (Japanese chess), as well as Go.

AlphaGo Zero
(Nature, Oct 2017)

AlphaZero
(Science, Dec 2018)

AutoML (全自動機械學習)

- Algorithm Configuration
- Hyperparameter Optimization (HPO)
- Neural Architecture Search (NAS)
- Meta Learning / Learning to Learn



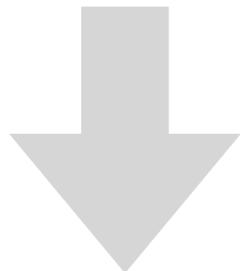
AutoML



Amazon
SageMaker

機械学習できたときの2種類の期待

1. 得られた変換過程(関数)による予測を色々な目的に使う
2. 得られた変換過程(関数)を分析して背景過程の仕組みを知る



1.について

- **問題が内挿的になるよう工夫 (表現学習・隠れ構造同定)**
- **内挿・外挿判定 (予測の信頼度計算)**
- **モデルベース最適化と探索 (最適実験計画)**

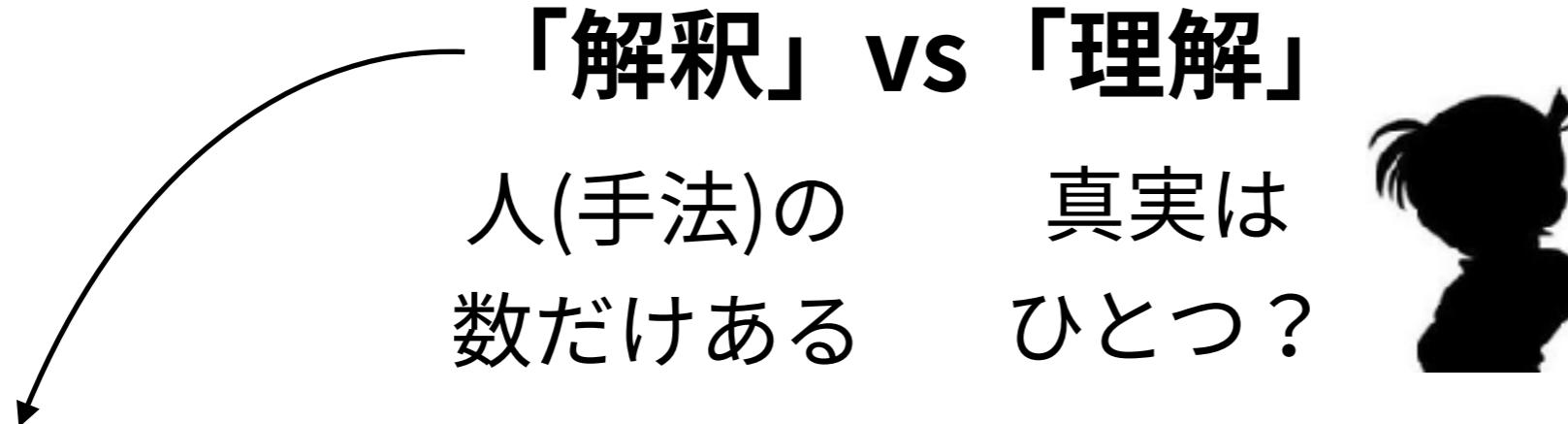
2.について

- **ポストホック解析と解釈性モデル (学習済みモデル分析)**

(因果の理解は諦めて?)解釈/説明/仮説生成へ

Explainable AI (XAI), Interpretable ML, Causal ML

- ・ 米DARPAのExplainable AI (XAI)プログラム
- ・ 機械学習業界におけるInterpretable ML
- ・ CausalML: 機械学習 for Causal Inference, Counterfactual Prediction, and Autonomous Action



各手法によって異なる仮説形成や示唆の提供

背後の真の法則に関する情報が得られるとは限らないので注意

☺私のブックマーク：機械学習における解釈性 (原聰, 人工知能 33(3), 366-369, 2018年5月)

機械学習モデルの解釈、機械学習による解釈

• $x \rightarrow y$ の関数のPost-hoc解析

- 回帰分析における要因分析
(回帰係数の有意性検定)
- ベイズ予測分布
- 変数重要度・部分従属度plot
- グローバル/ローカル感度解析 (Sobol'法, FAST法, etc)
- 深層学習におけるSaliencyやAttentionの利用
- 局所説明生成: LIME (KDD16), SHAP (NIPS17)

• $x \rightarrow y$ の階層的分解による隠れ因子や階層構造の同定

• 深層学習

計算グラフとして表現 (汎用的パラメタ推定: 逆モード自動微分)

• 確率的プログラミング (生成的統計モデリング)

確率変数の階層的生成関係で表現 (汎用的パラメタ推定: MCMC/自動VI)

統計学手法は要前提の検証

- 説明変数の選択
- 線形の仮定
- 多重共線形性 "マルチコ"
- 残差の検討
- :

今日の内容

1. イントロ

機械学習と科学(あるいは"ものづくり")

2. 機械学習で何かを「理解」できるか?

Answer: 直接的には**原理上困難**

3. 機械学習で何かを「発見」できるか?

Answer: 直接的には**原理上困難**

4. じゃあどうすんの！？何がいるの！？

Answer: 「表現」と「介入」

2と3を前提に機械学習分野のトピックを簡単に紹介

再考 統計的理解と科学の文法

科学の文法 (1892)

"Statistics is the grammar of science." (Karl Pearson)

夏目漱石より10才年上の大統計学者



現在の科学的疑問の多くは**100%YES/NOな答えが無い**問い！

- ・ この薬を飲めば私の病気は治るの？
- ・ この健康食品食べていれば長生きできるの？
- ・ この化粧品つけていれば少しでも若くいられるの？
- ・ この食品たべればダイエットできるの？
- ・ 原子力は安全なの？

YES and NOの
間にきっと真実が

科学は「データの見方」と無縁ではいられない！

科学というものには、本来限界があって、広い意味での再現可能の現象を、自然界から抜き出して、それを統計学的に究明していく、そういう性質の学問なのである。「科学の方法 (中谷宇吉郎)」

Impossible to model everything...?



大統計学者 George E. P. Box (1919-2013)

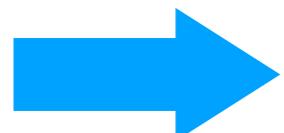
"one of the great statistical minds of the 20th century"

**"Essentially, all models are wrong,
but some are useful"**

https://en.wikipedia.org/wiki/All_models_are_wrong

モデルとは何かを捨象したものであり実世界(複雑系)とは違う。

- 真の法則が人間に理解可能なほどシンプルなモデルに要素還元できる保証はどこにもない。
- データが有限ならそれを説明できるモデルは一般に無数にある。



論述的理解/要素還元から複雑系の"統計的理解"へ?

展望：Theory-driven vs Data-drivenの解消と融合

Theory-driven 【合理論】

- 対象現象の複雑化
- シミュレーション手法も複雑化
- "経験的に決める"パラメタや初期値
- 汎関数、交換相関項の設計

(人工知能分野)

- 知識ベースと論理推論(記号AI)の限界
- 厳密推論や探索の計算爆発(NP困難性)
- 大量データの知識化の問題
- 制約プログラミングや組合せ最適化

→ データ同化、模倣学習、論理合成、etc

→ モデルベース最適化、強化学習、メタ
学習、ドメイン適応、生成モデル、etc

→ 新たな方法論へ？

Data-driven 【経験論】

- 小サンプル・低カウントの問題
- 外挿の不可能性の問題
- 帰納バイアスのモデルエンコード
- Blackbox性・解釈性の問題

(人工知能分野)

- Data-Driven手法(機械学習)と人間の
論理的思考との大きなギャップ
- Dataがない領域の探索や「ひらめき」
- モデル適用範囲と信頼性・安全性

魂は細部に宿る：道具としての機械学習

God is in the details.

- Ludwig Mies van der Rohe



<http://www.900910.com/mies.php>

「機械学習」研究の意義

より理解するために技法(道具)を整備する
「良い仕事は良く手入れされた道具から」

職人魂 (技術者魂)

- ・ プロにとって使う道具は命。
- ・ 道具の特性に精通し、丁寧に扱い、手入れを怠らない。
- ・ 道具箱の中をひとめ見るだけでその職人の気質とレベルが分かる。

最後に：介入・実験も含む最適化へ

件のBoxの1966年の論文「Use and Abuse of regression」は
非常に有名なこんな一文で締めくくられる。

To find out what happens to a system when you
interfere with it **you have to interfere with it**
(not just passively observe it).

理屈から言っても機械学習屋とデータ「だけ」では何もできない
ということです。

ドメイン知識を持った専門家との協働が必須です！
どうぞよろしくお願ひします(?)

Take Home Message

科学が求めること: 分からないことが分かる(科学的発見)

理解

原因と結果(因果関係)を見出す

$x \rightarrow y$ の過程を理解し(人間が)発見する

発見

今まで見出されていない良い対象を見出す

$x \rightarrow y$ を利用して良い y を持つ x を発見する

今日伝えたいたった3つのこと

1. 単純に機械学習を使うだけでは いざれも解けない
2. 機械学習以外のもの(介入やドメイン知識)が原理上必須
3. 最近まさに研究が進行中の未解決領域だが研究は色々ある