

2023.2.18 @ 学習院

# 機械学習と機械発見

## 自然科学融合が誘起するデータ科学の新展開

瀧川一学

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

京都大学 国際高等教育院 附属データ科学イノベーション教育研究センター

北海道大学 化学反応創成研究拠点 (WPI-IReDD)

理化学研究所 革新知能統合研究センター

# 自己紹介：瀧川一学(たきがわいちがく)

関心：離散構造を伴う機械学習 + 自然科学における機械発見

(機械学習の研究者)

(機械学習のユーザ)

# 自己紹介：瀧川一学(たきがわいちがく)

関心：離散構造を伴う機械学習 + 自然科学における機械発見

(機械学習の研究者)

(機械学習のユーザ)

境界領域で活動 (面白いこと・新しいことはいつも境界あたりで起こる?)

- 北大 工学研究科 (10年) 統計的信号処理・パターン認識
- 京大 化学研究所 / 薬学研究科 (7年) バイオインフォマティクス・創薬化学
- 北大 情報科学研究科 (7年) 離散構造を伴う機械学習 (大規模知識処理)
- JST さきがけ 材料インフォ領域 (3.5年) 材料インフォマティクス
- 理研 AIPセンター iPS細胞連携G (4年～) 機械学習と幹細胞生物学
- 北大 化学反応創成研究拠点 (4年～) 機械学習と化学(計算化学・実験化学)
- 京大 国際高等教育院 (0.5ヶ月～)

# マテリアルズ・インフォマティクス

生命科学(Bioinformatics)には関わってきたが材料科学は全く「？」であった私は  
「Materials Informatics」なる謎の分野に最初は楽観的イメージを持っていた…

ステップ①



利用できる色々なデータ  
を機械学習に教えこむ

ステップ②



機械学習(エーアイくん)が  
並の専門家より賢くなる

ステップ③



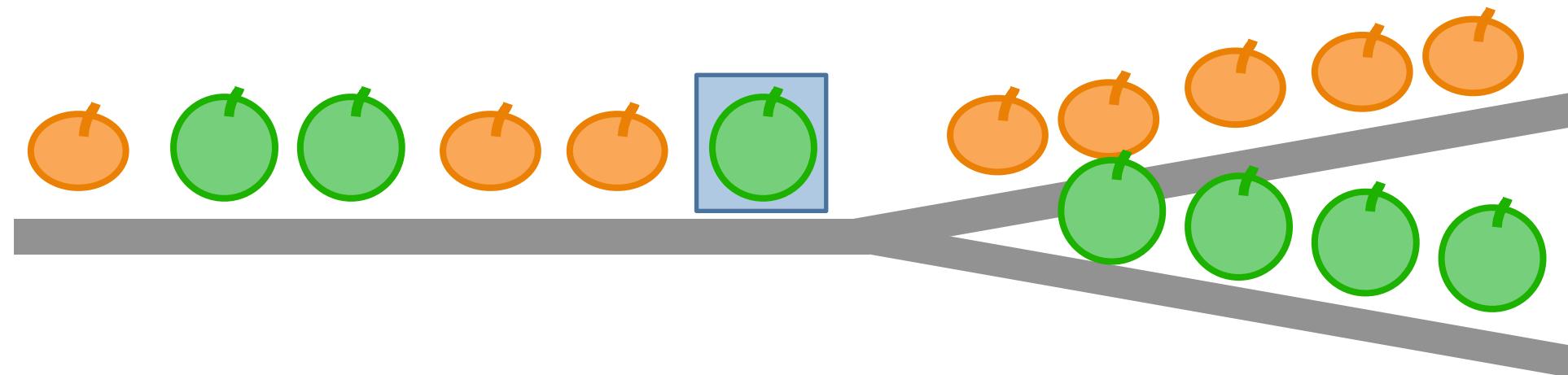
機械学習が有望な材料を  
どんどん提案してくれる

# 今日のたった3つの話

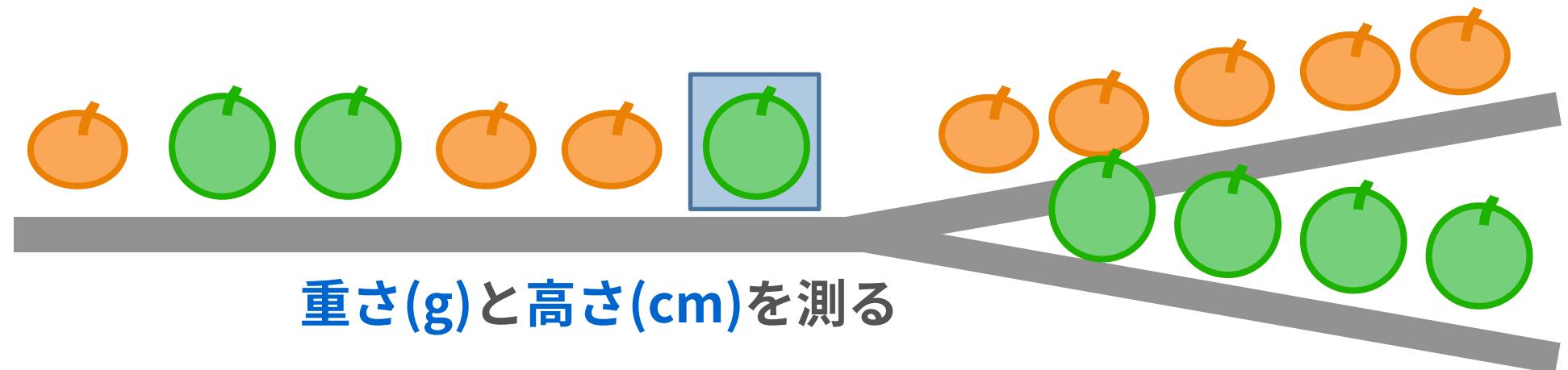
この幻想が打ち砕かれてゆく過程で、機械学習研究者として得た教訓と最新知見をもとに、3つの話をしてみたいと思います…

1. 「機械学習」と「材料科学」はゴールが根本的に食い違っていて、機械学習とは全く設定が異なる「**機械発見**」が求められている。
2. 既存データを学習した機械学習モデルから「自然科学の理解」に役に立つ情報を引き出すのも「**真相は藪の中**」現象(羅生門効果)により激ムズ。
3. 現実的な自然科学のタスクで機械学習に期待されていることを鑑みると**仮説フリーじゃいられない**。

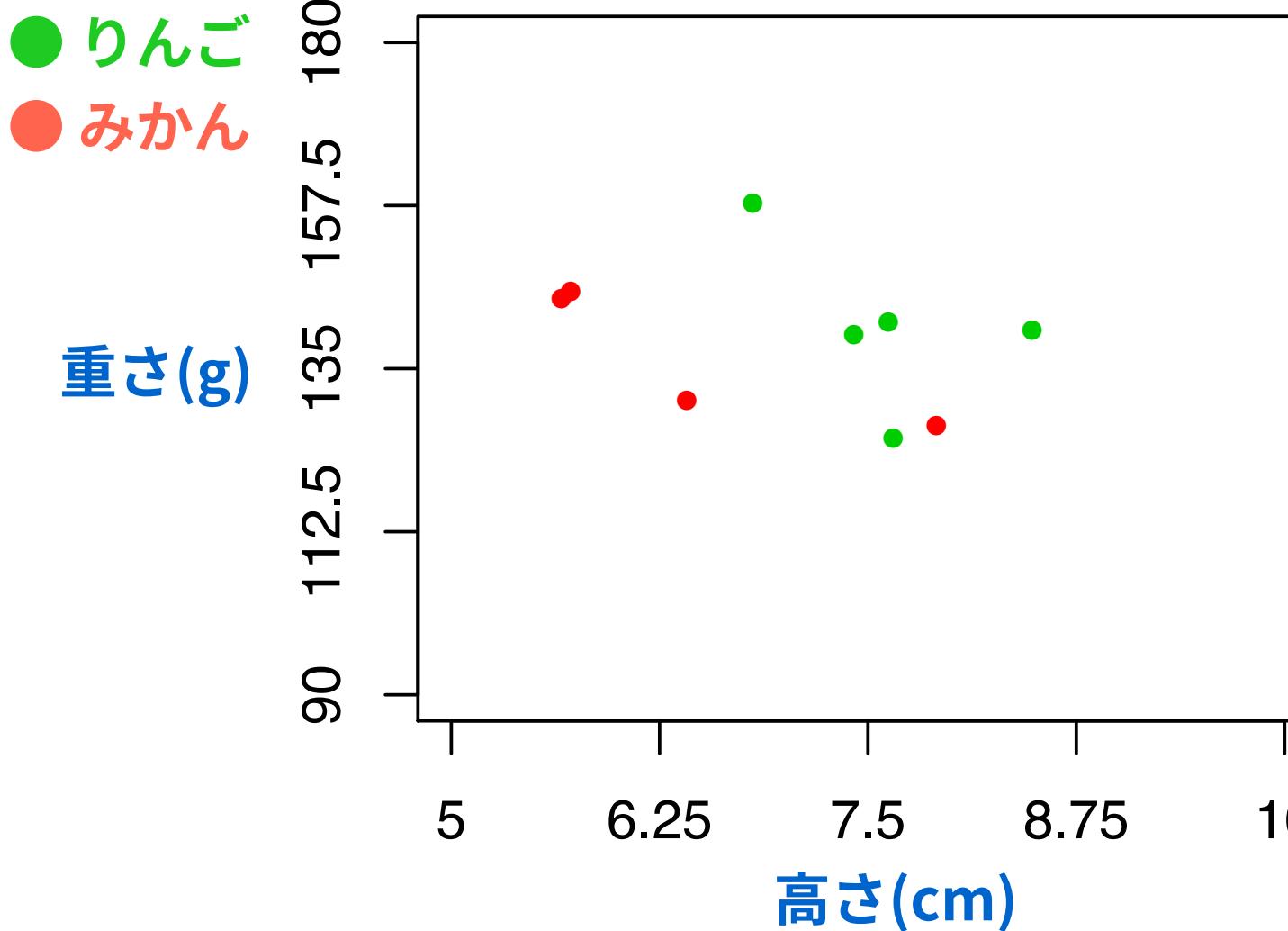
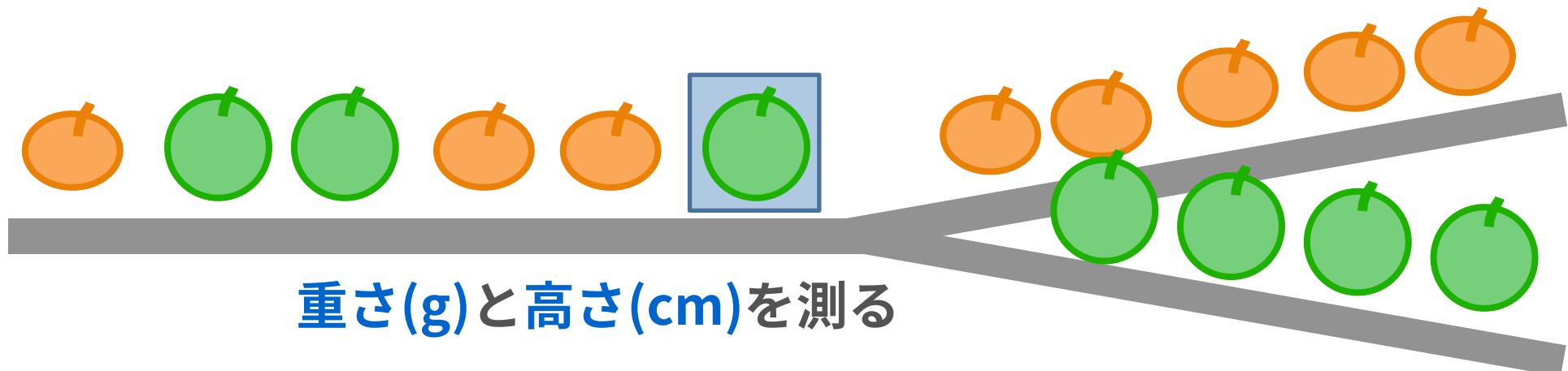
# 機械学習は「データを予測に変える技術」



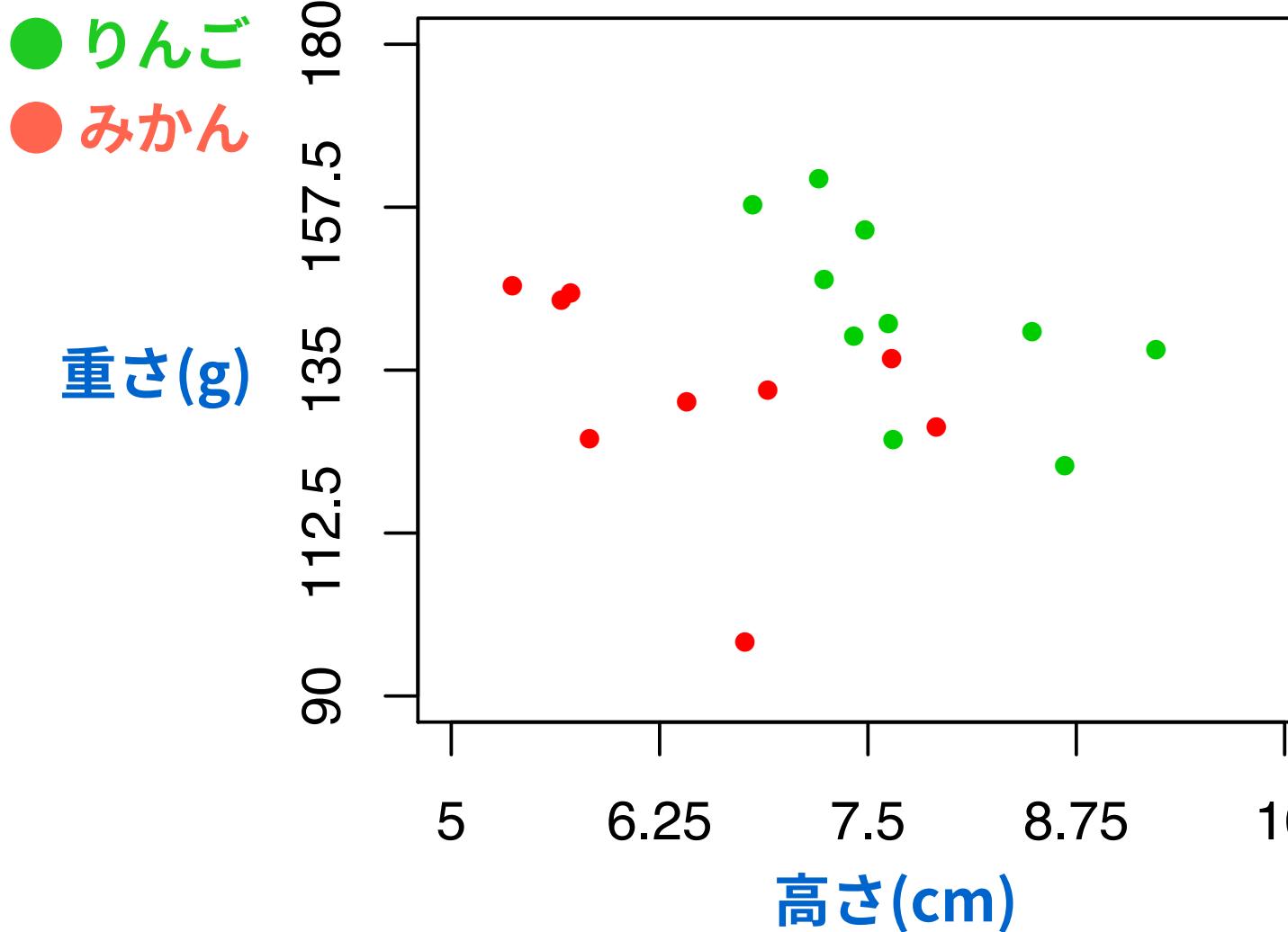
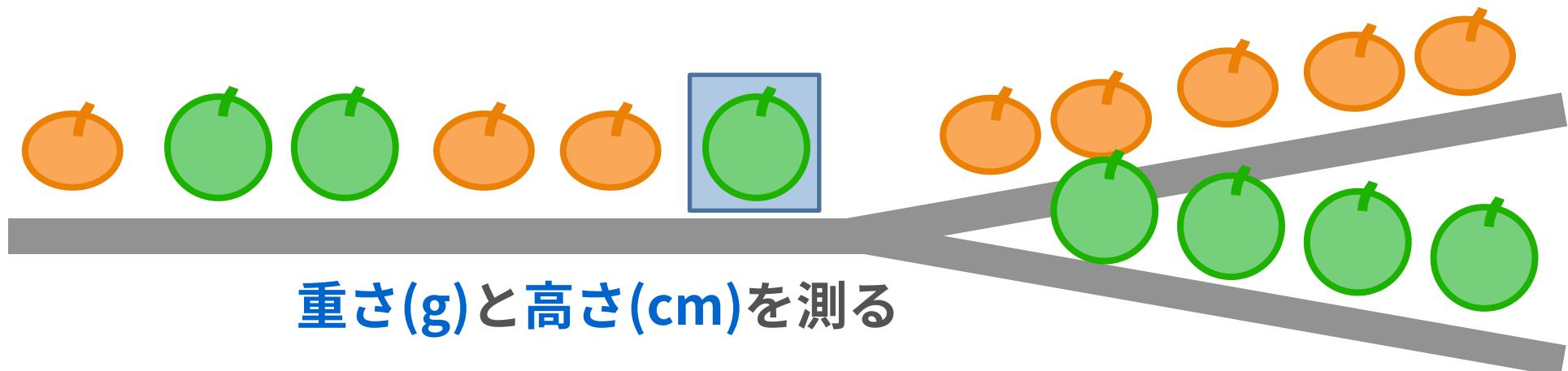
# 機械学習は「データを予測に変える技術」



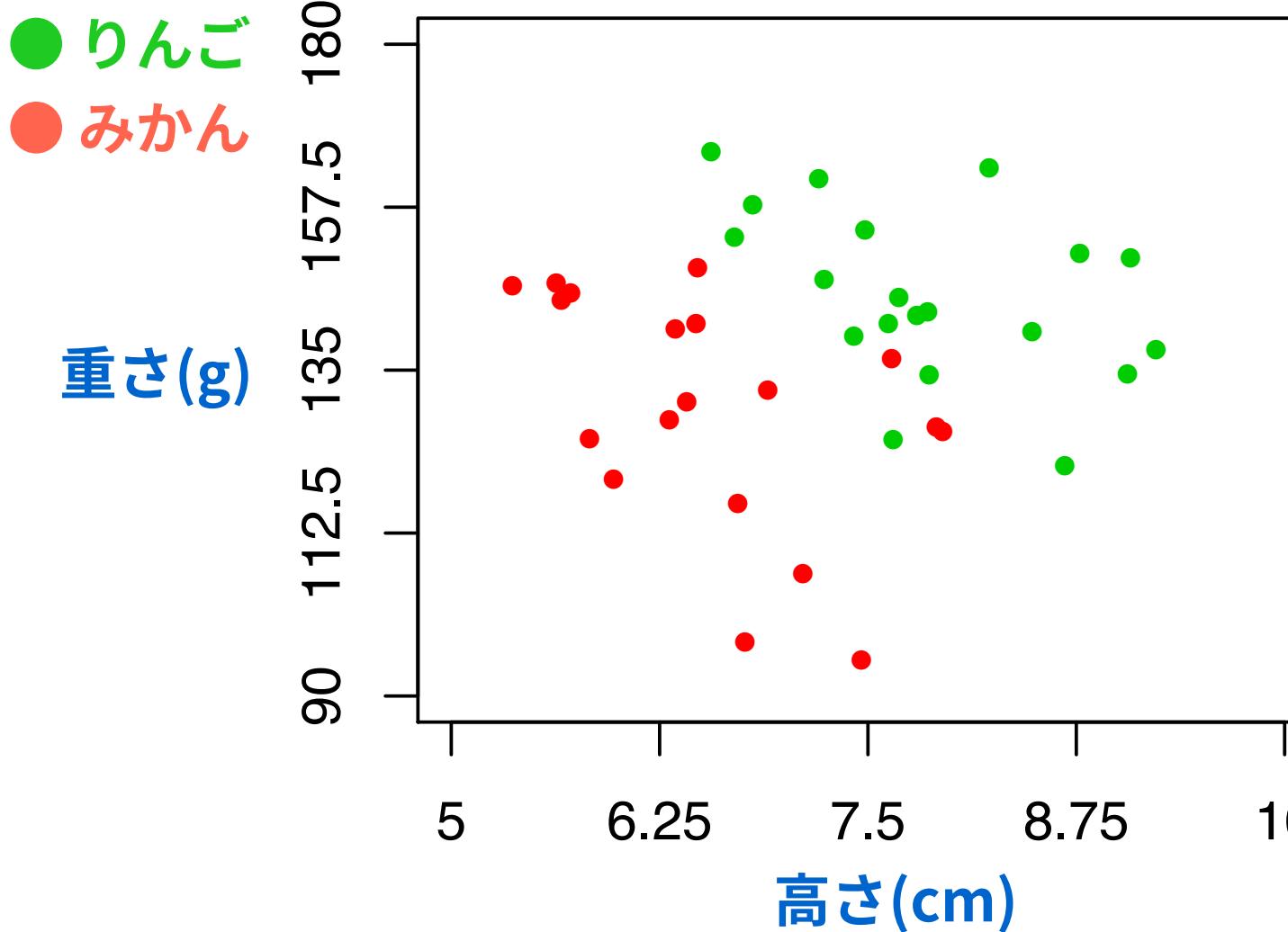
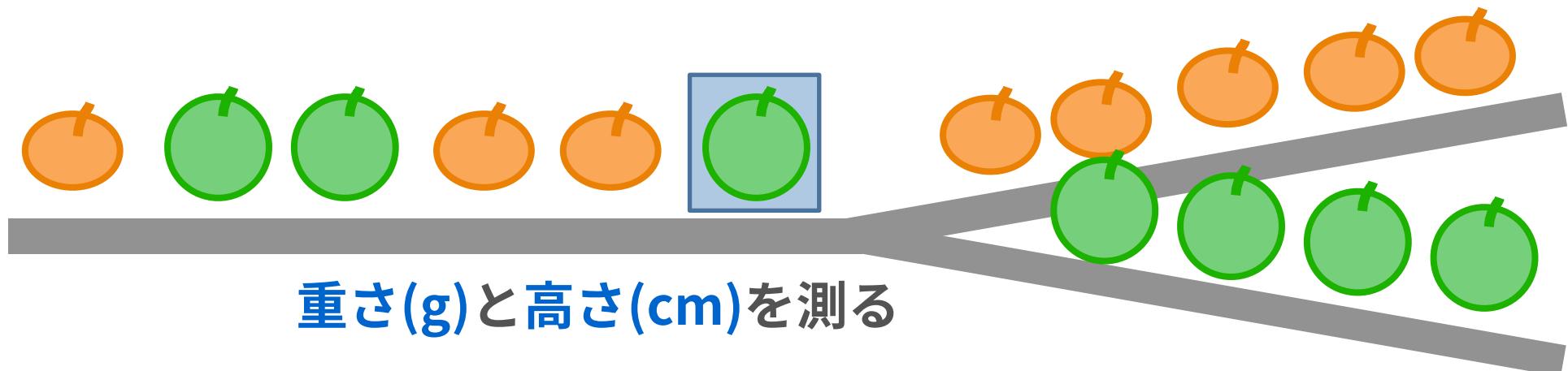
# 機械学習は「データを予測に変える技術」



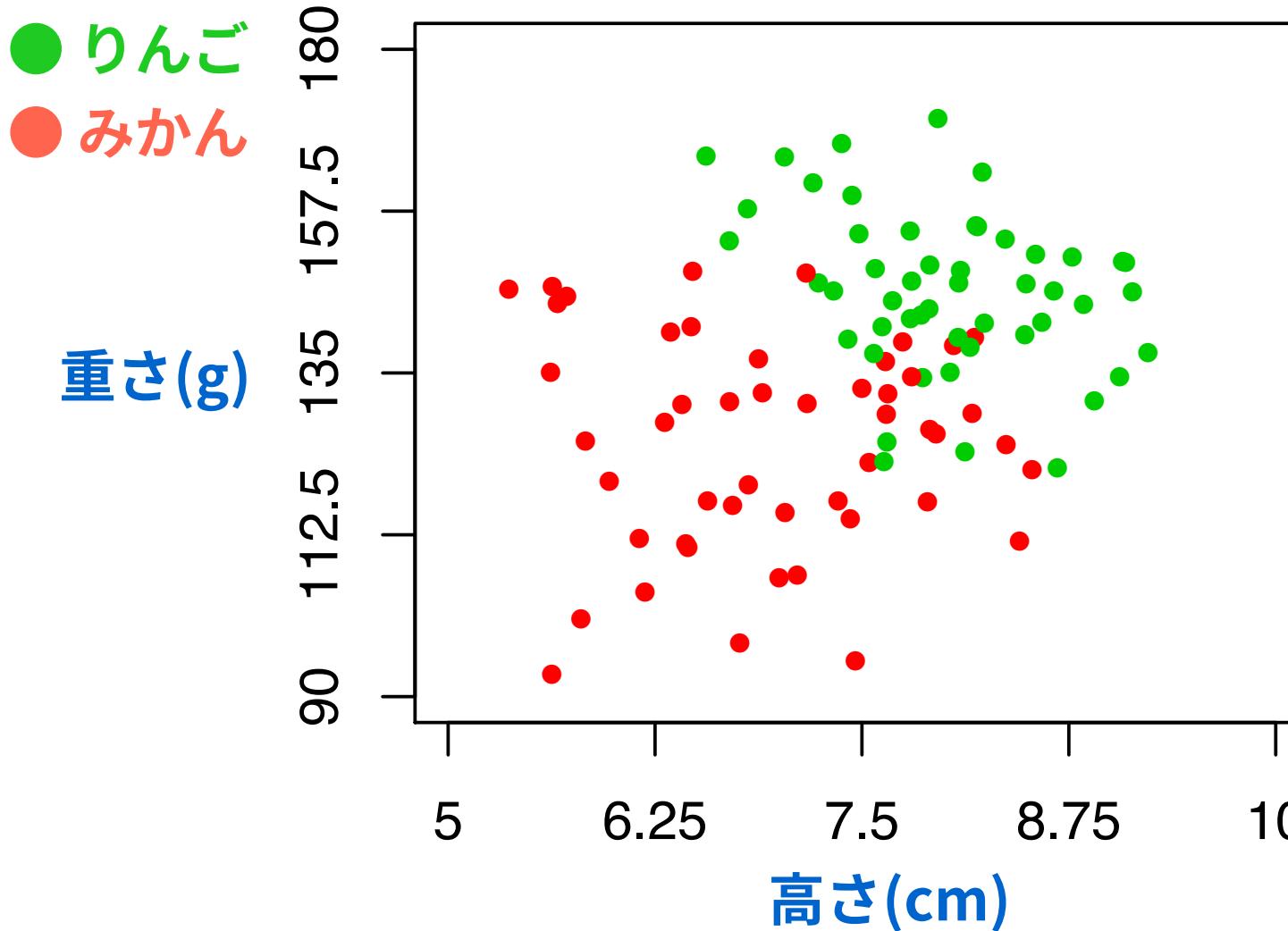
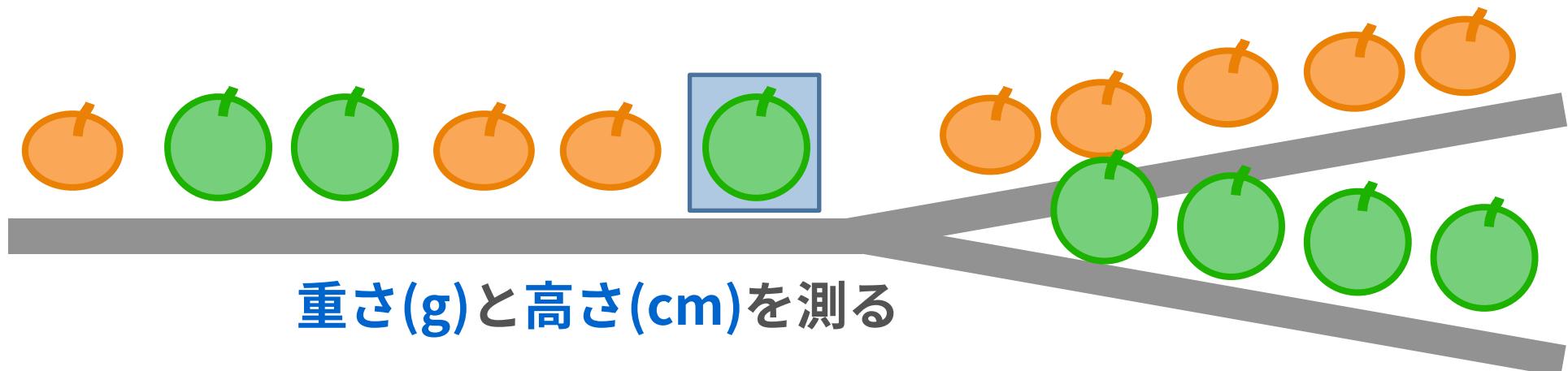
# 機械学習は「データを予測に変える技術」



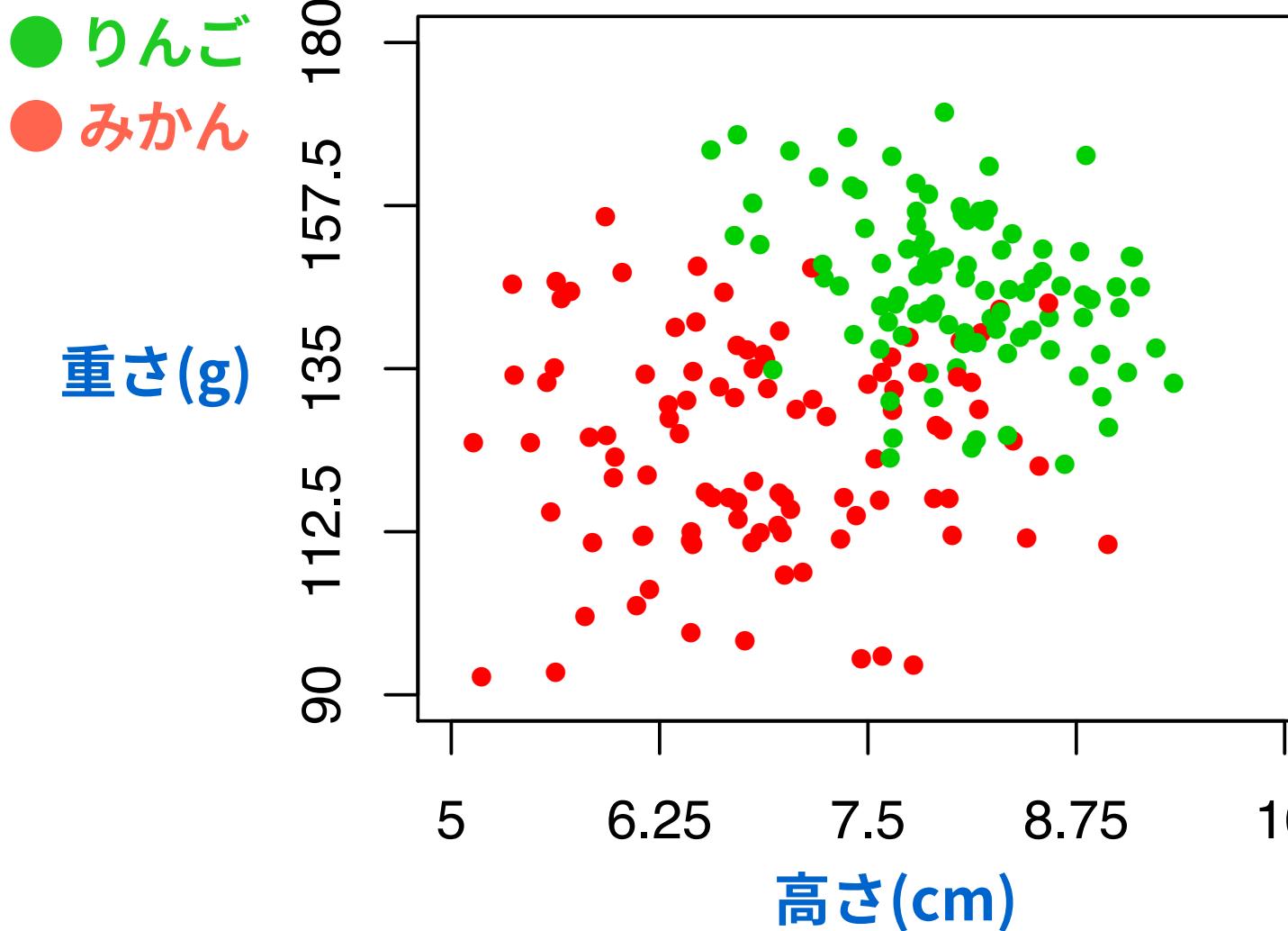
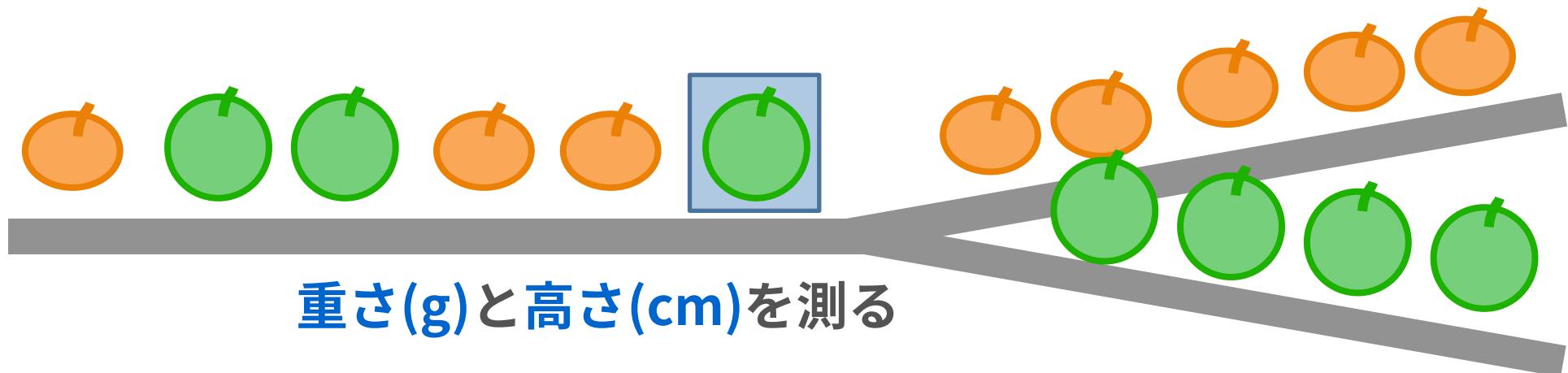
# 機械学習は「データを予測に変える技術」



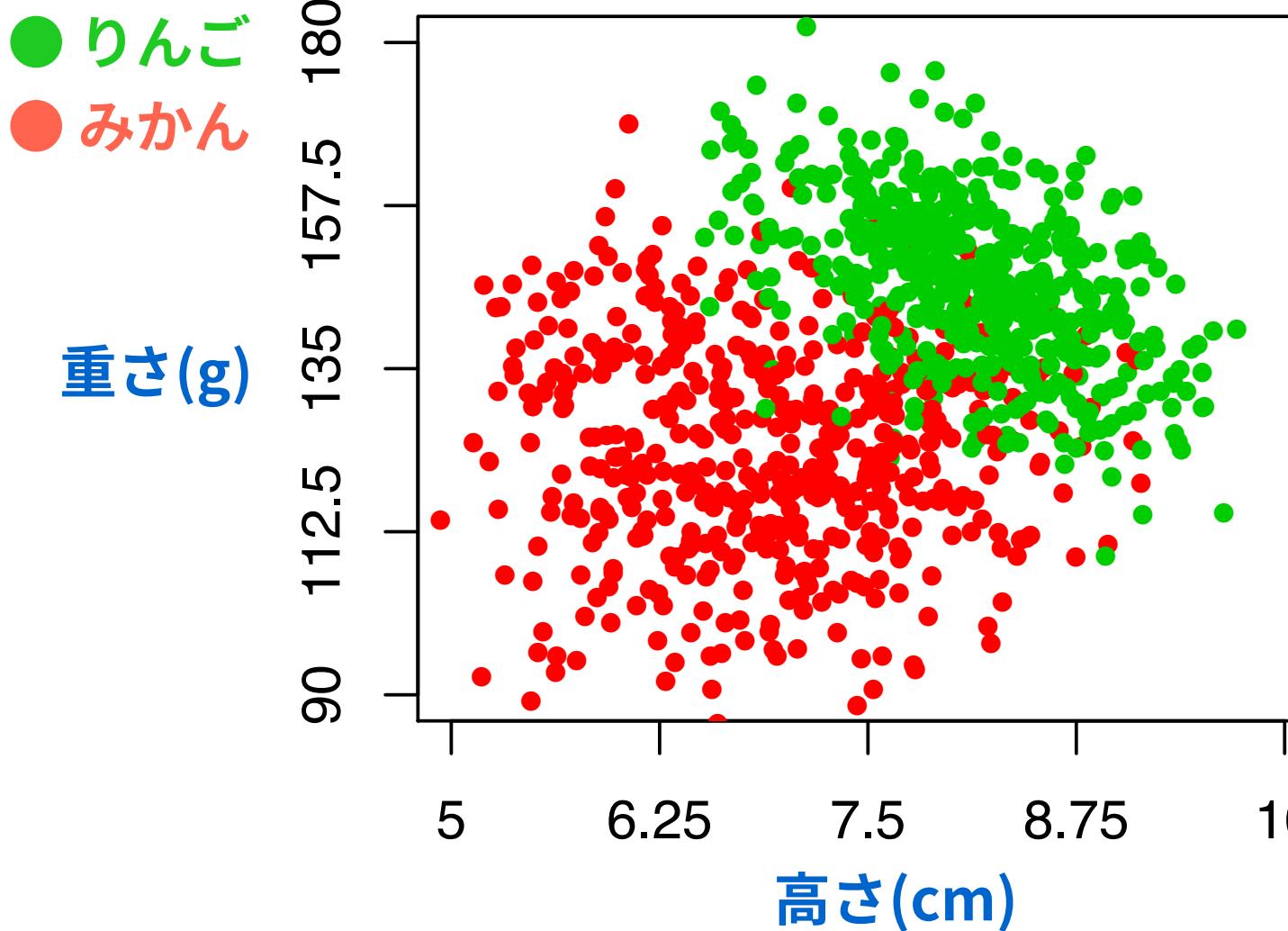
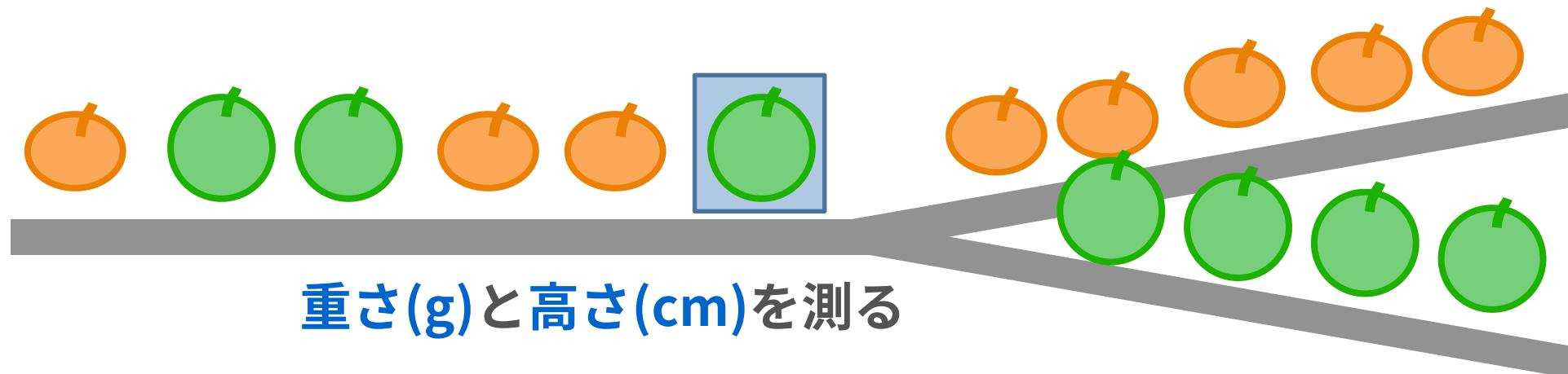
# 機械学習は「データを予測に変える技術」



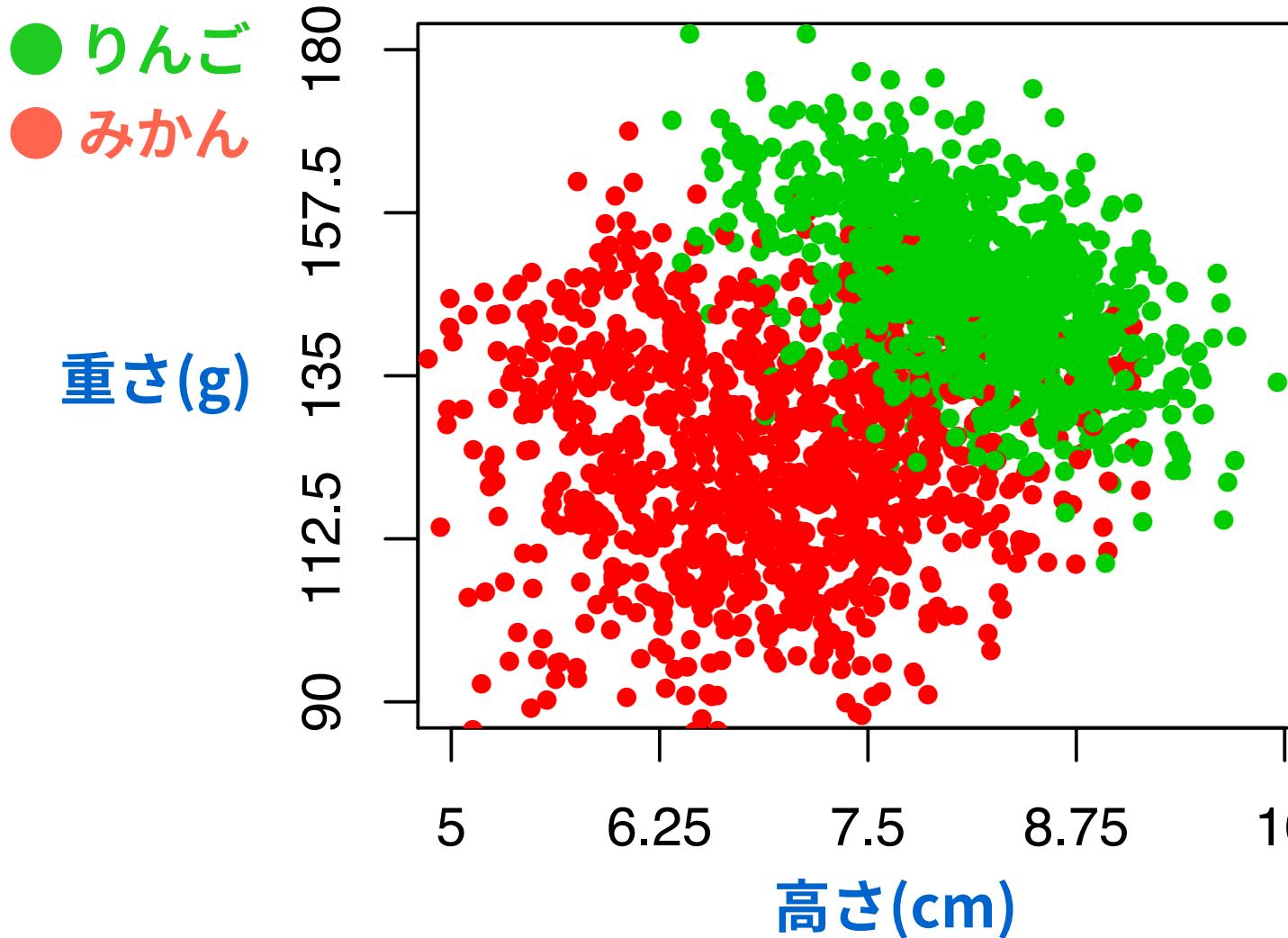
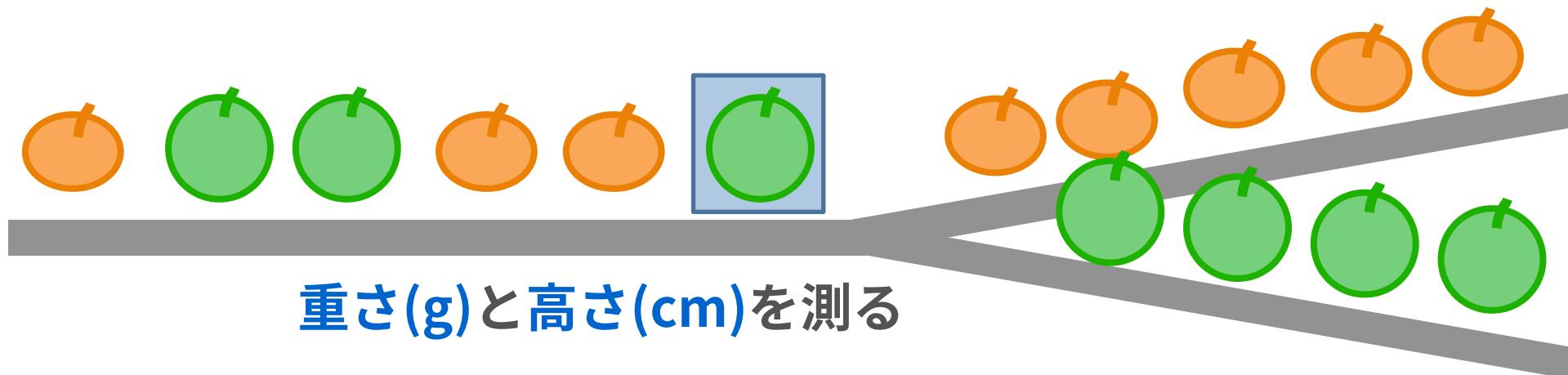
# 機械学習は「データを予測に変える技術」



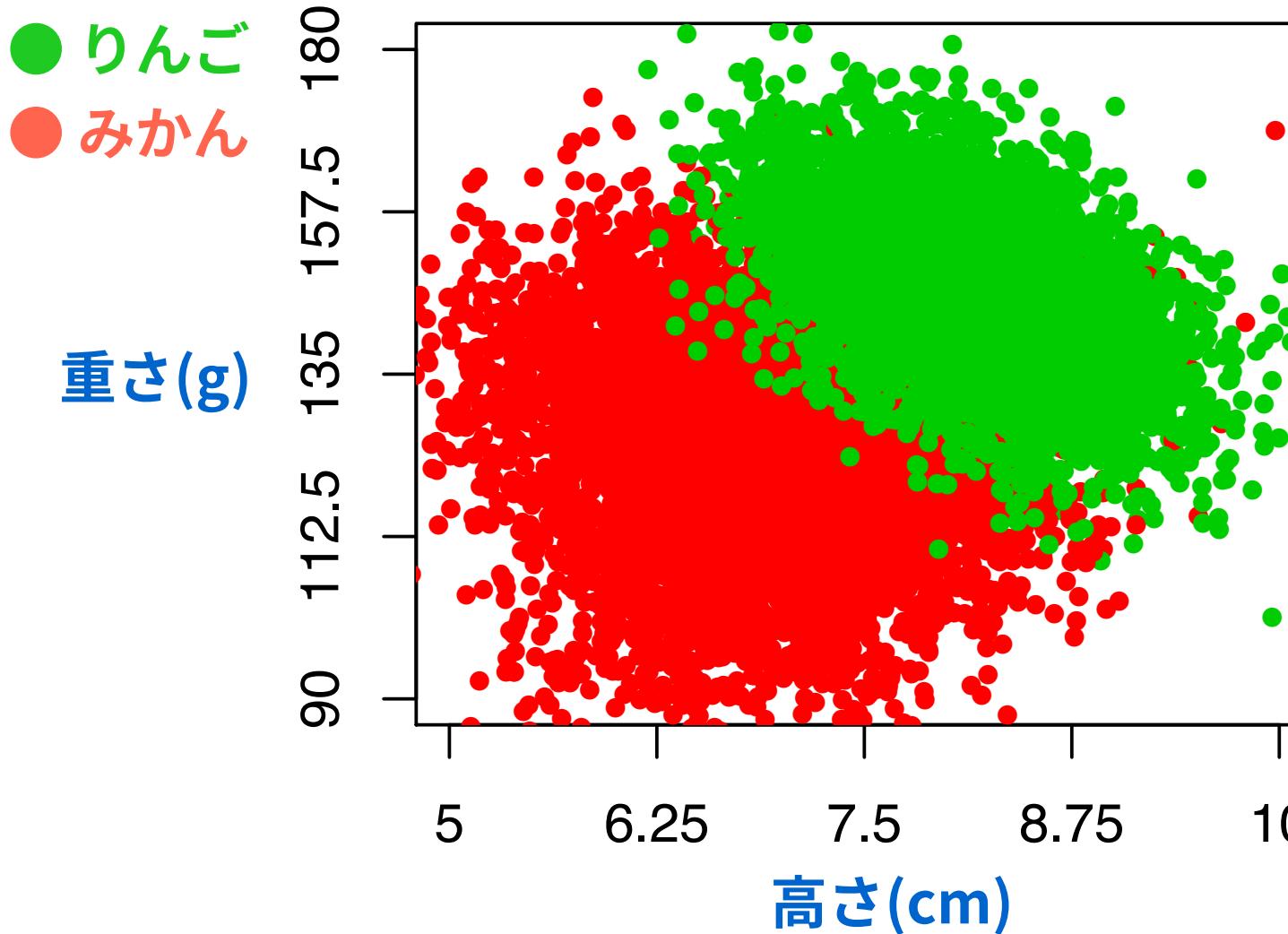
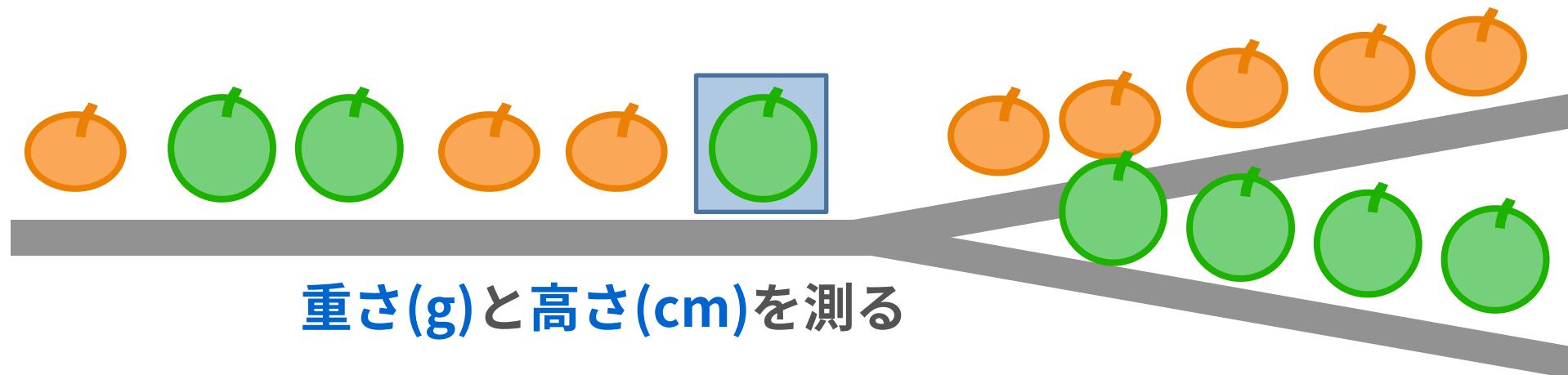
# 機械学習は「データを予測に変える技術」



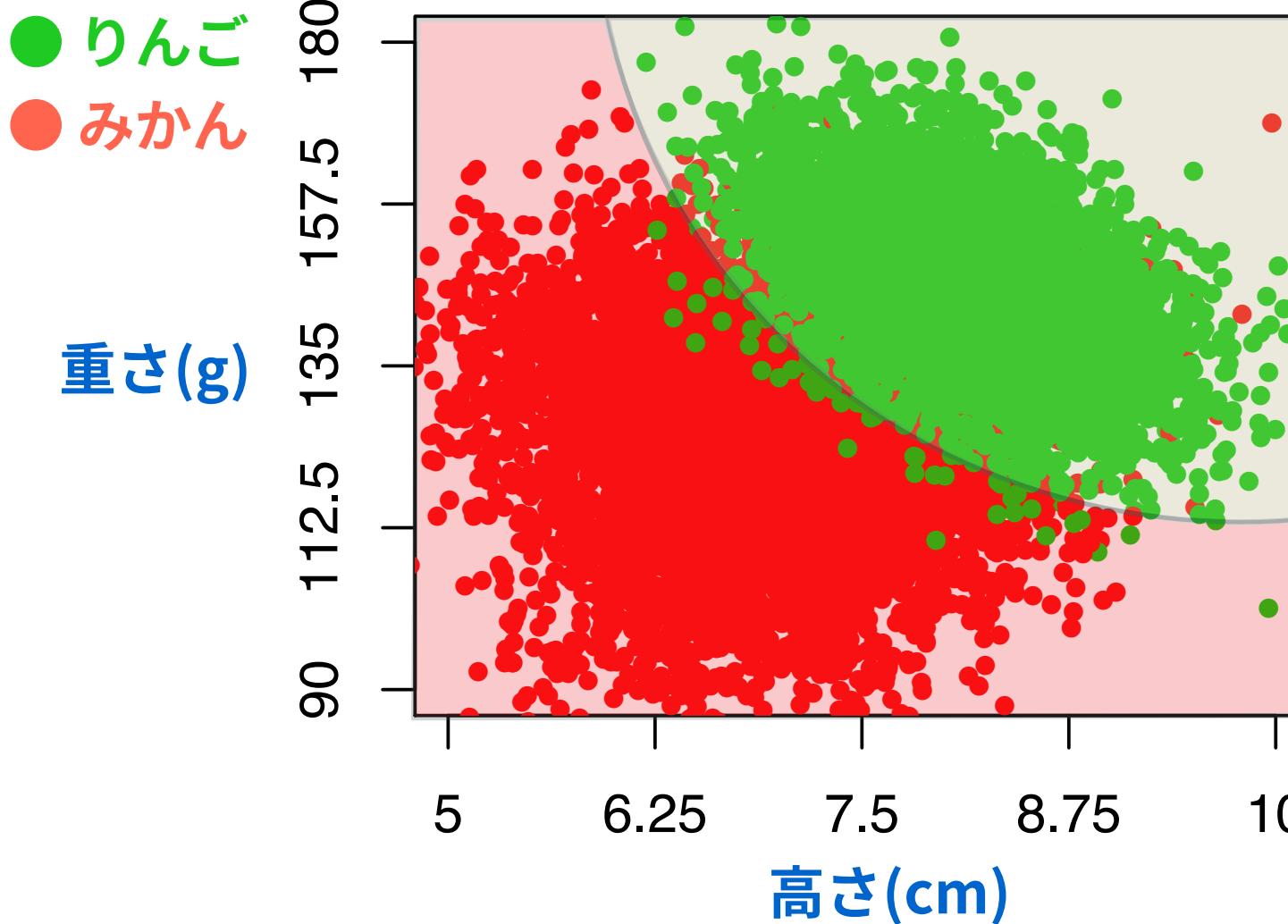
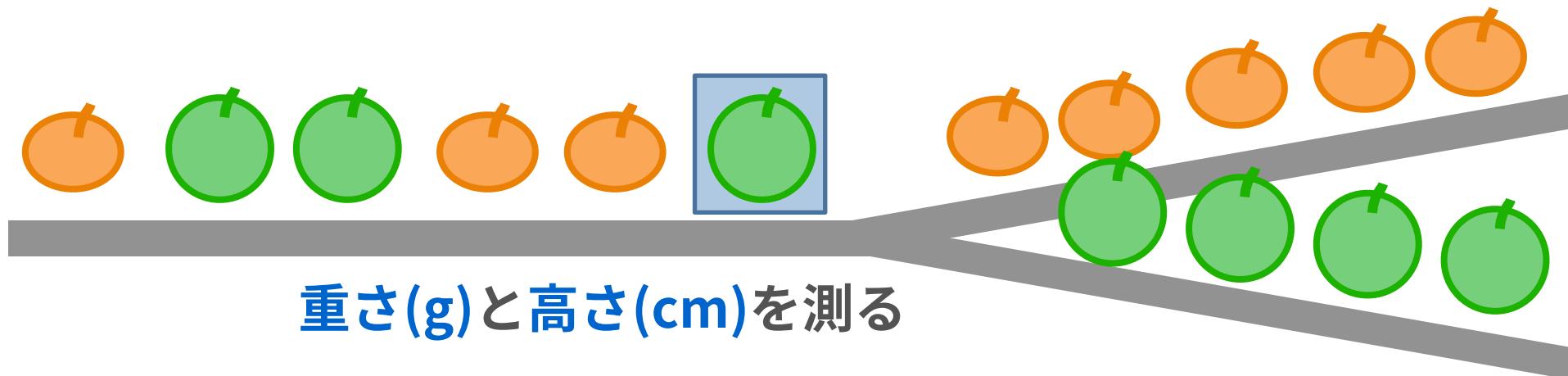
# 機械学習は「データを予測に変える技術」



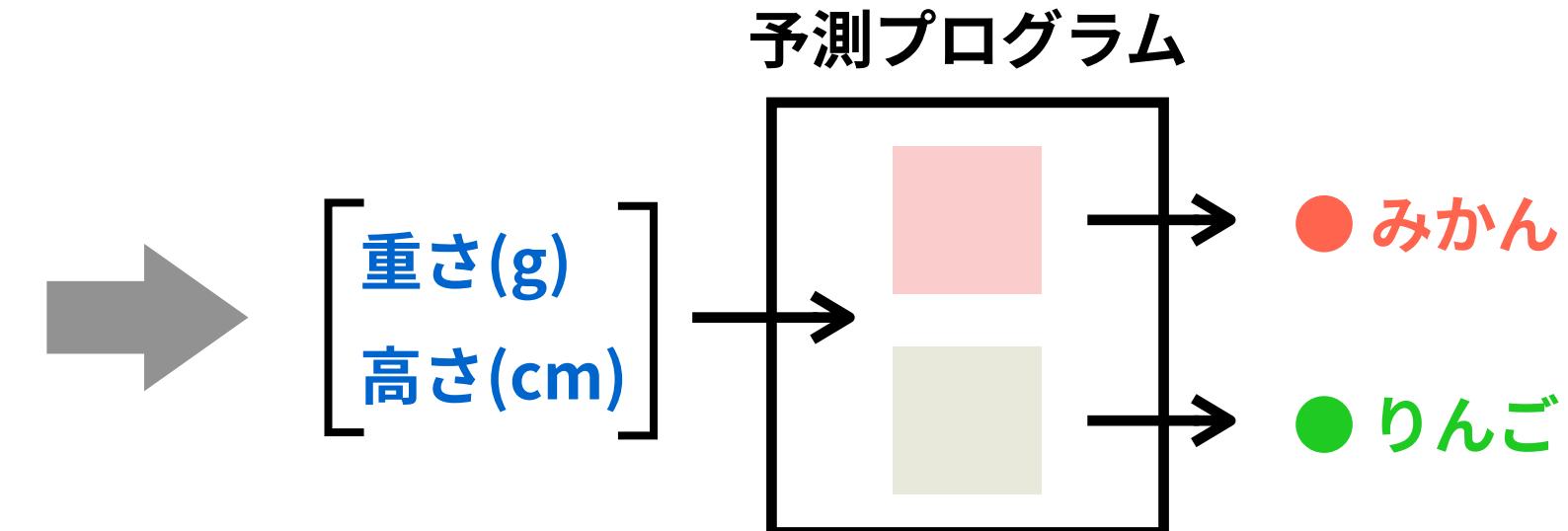
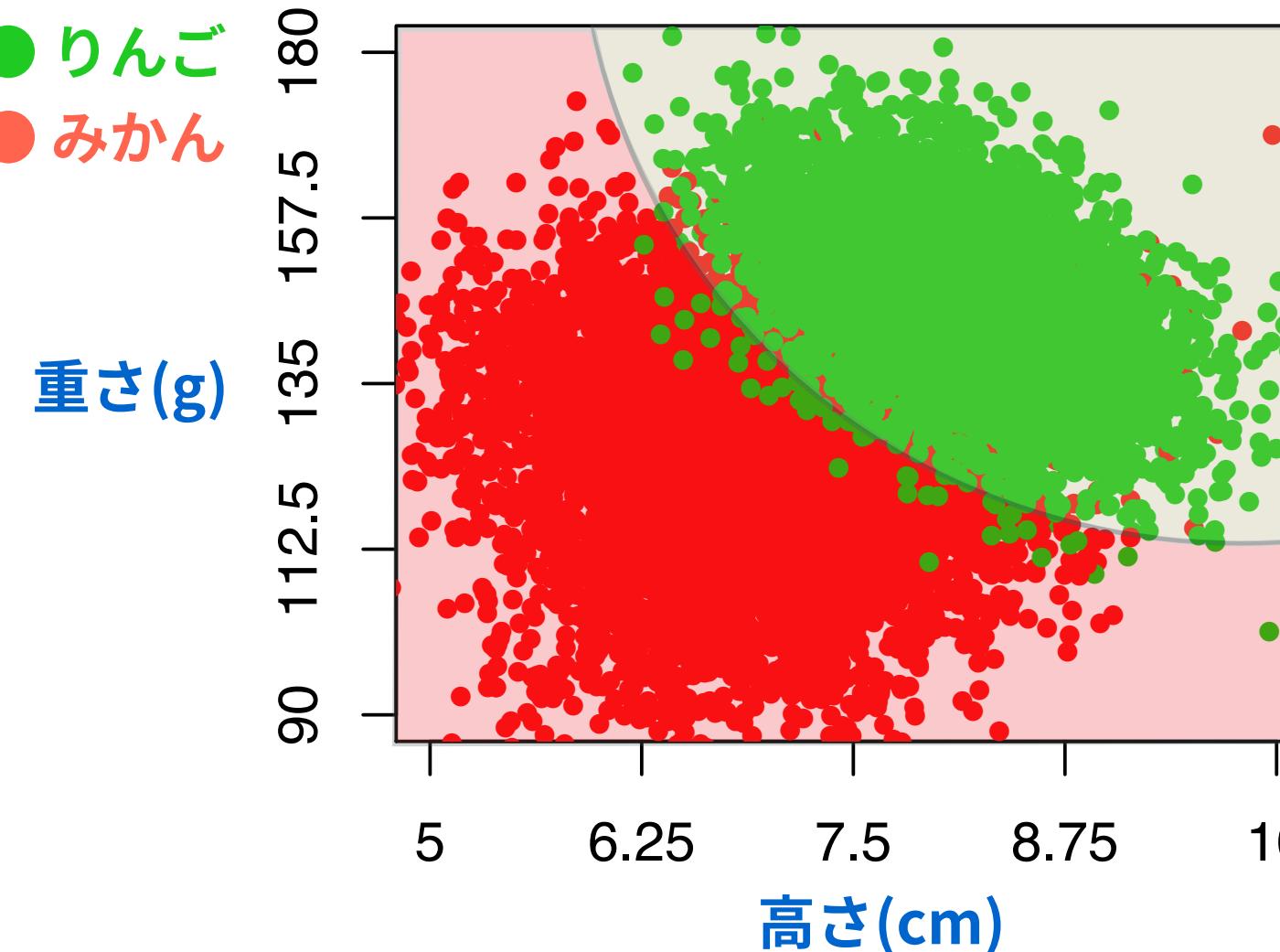
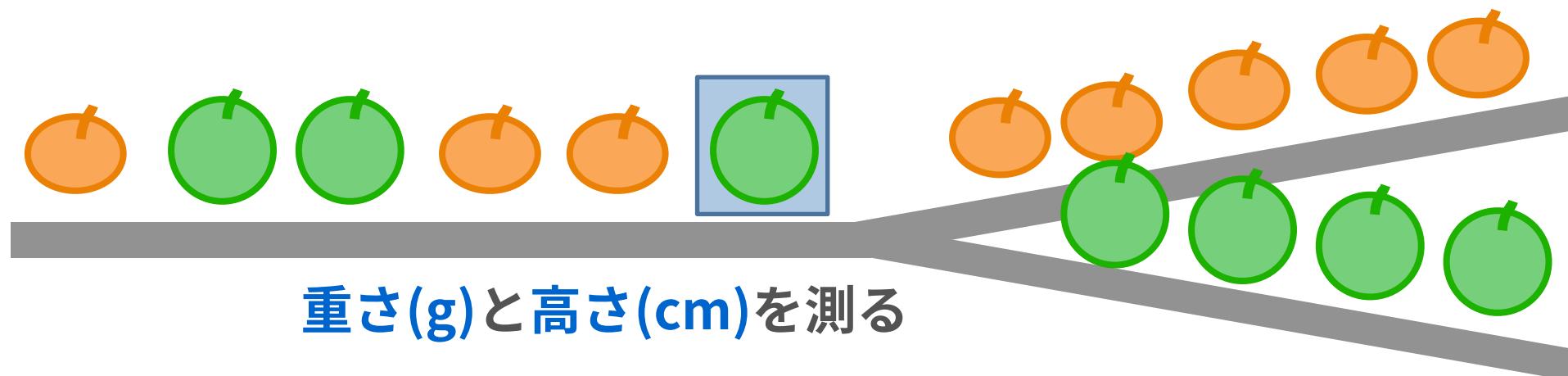
# 機械学習は「データを予測に変える技術」



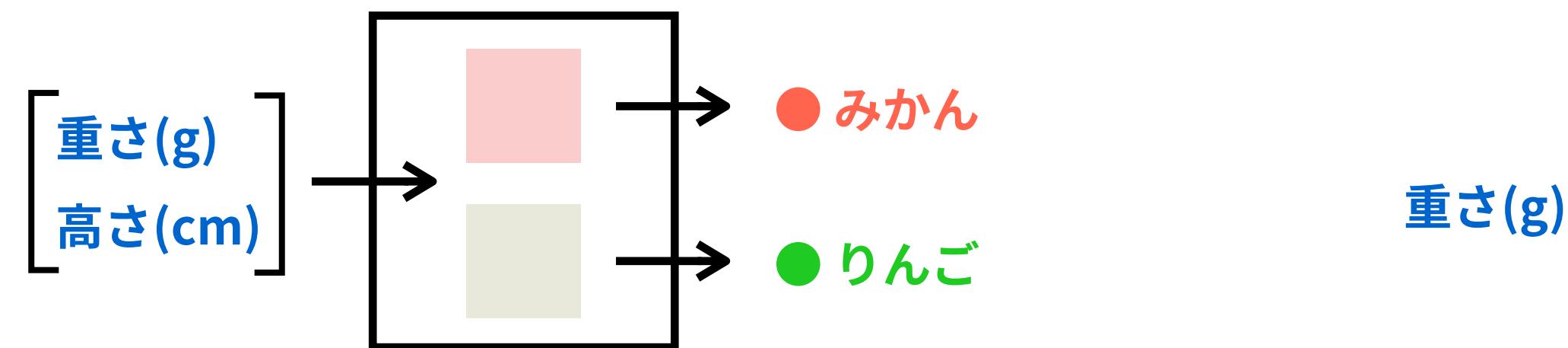
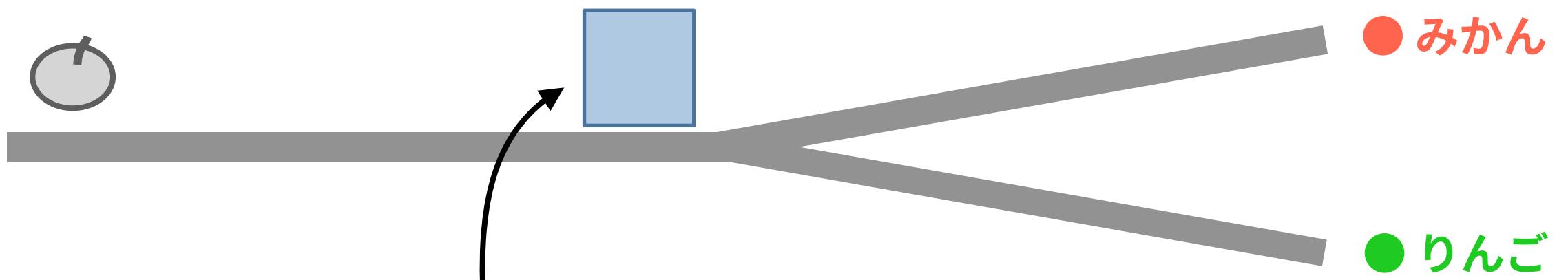
# 機械学習は「データを予測に変える技術」



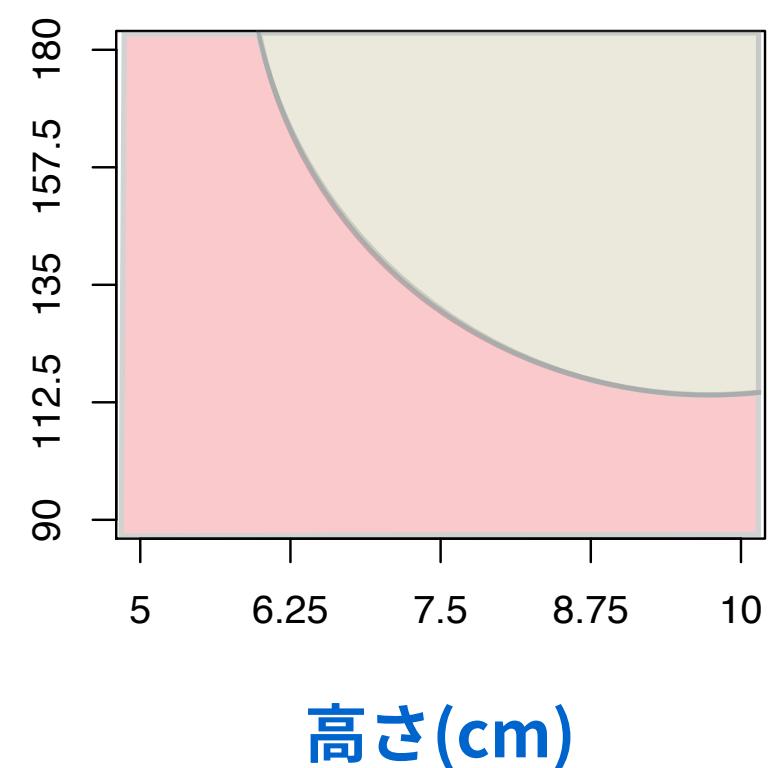
# 機械学習は「データを予測に変える技術」



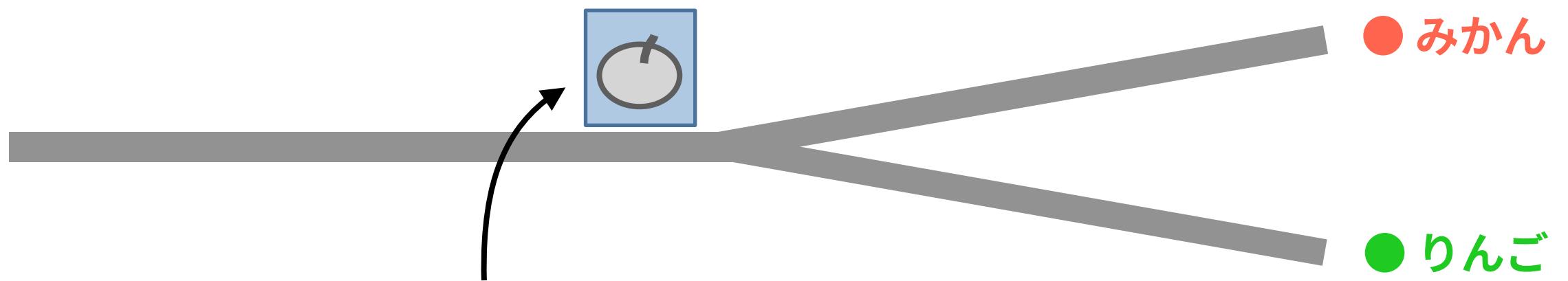
# 機械学習は「データを予測に変える技術」



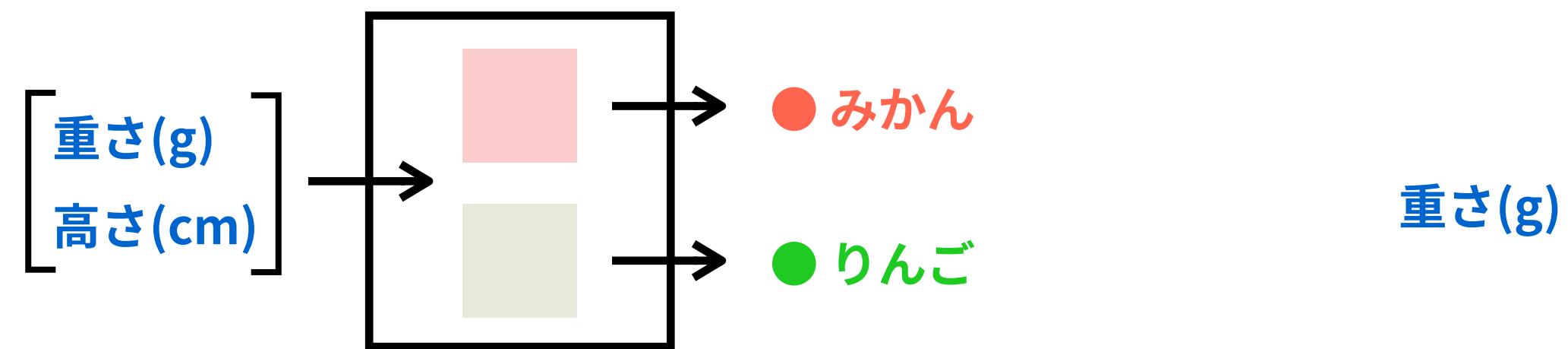
予測プログラムを作ったときに見せた見本例ではない例に対して  
「みかん」 or 「りんご」を予測することができる！



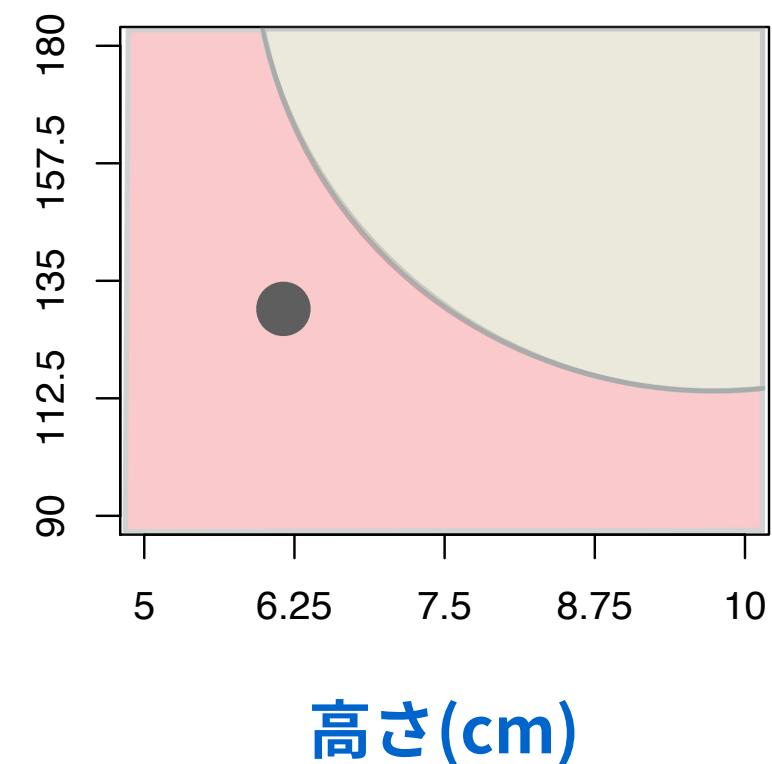
# 機械学習は「データを予測に変える技術」



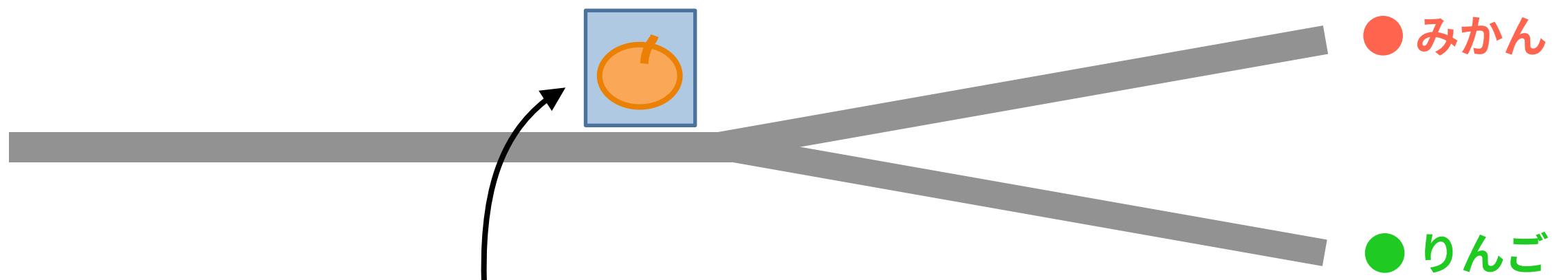
見本データから作っておいた予測プログラム



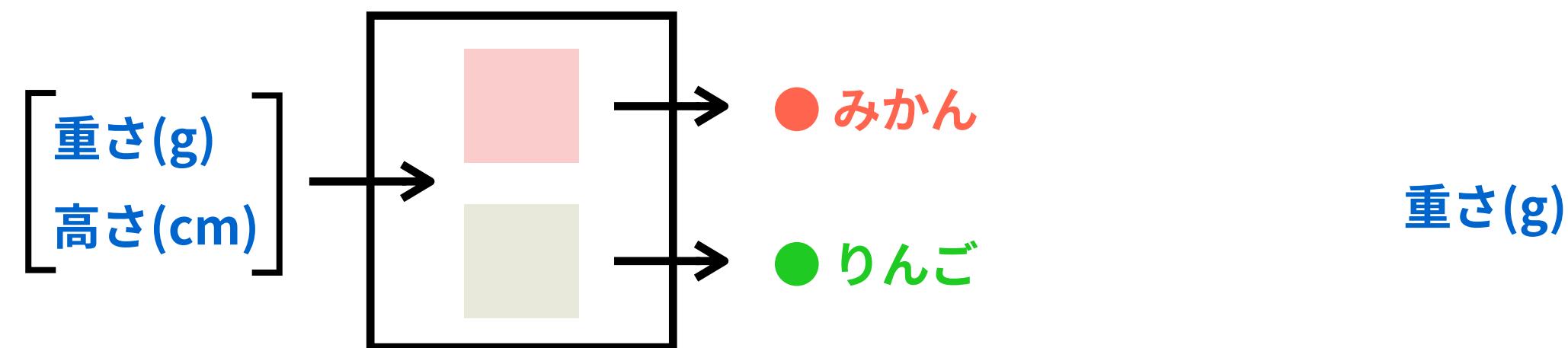
予測プログラムを作ったときに見せた見本例ではない例に対して  
「みかん」 or 「りんご」を予測することができる！



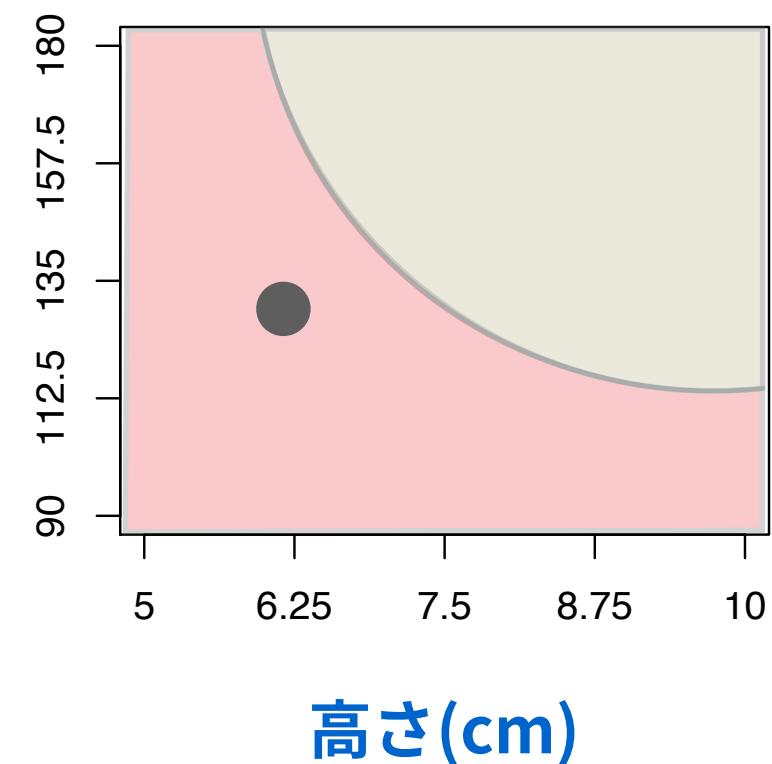
# 機械学習は「データを予測に変える技術」



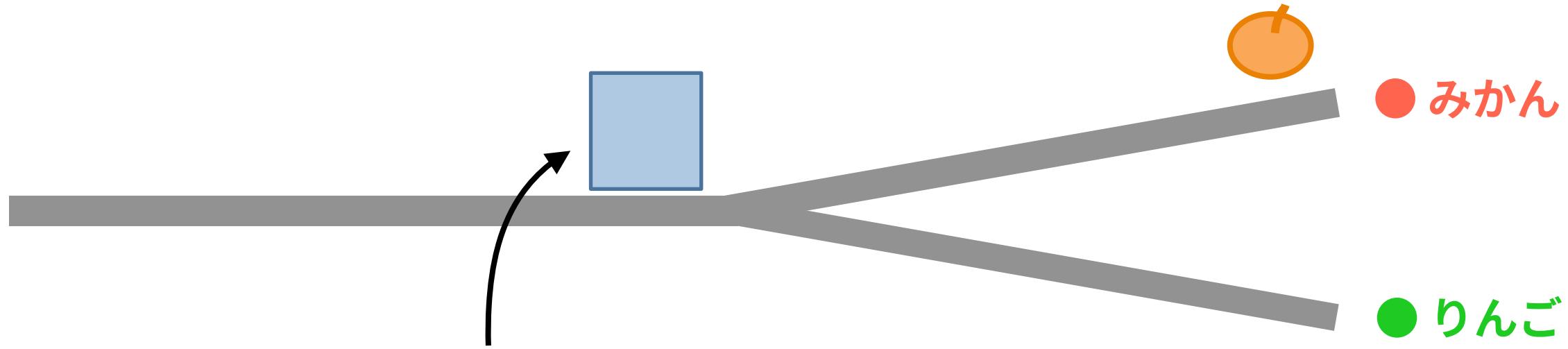
見本データから作っておいた予測プログラム



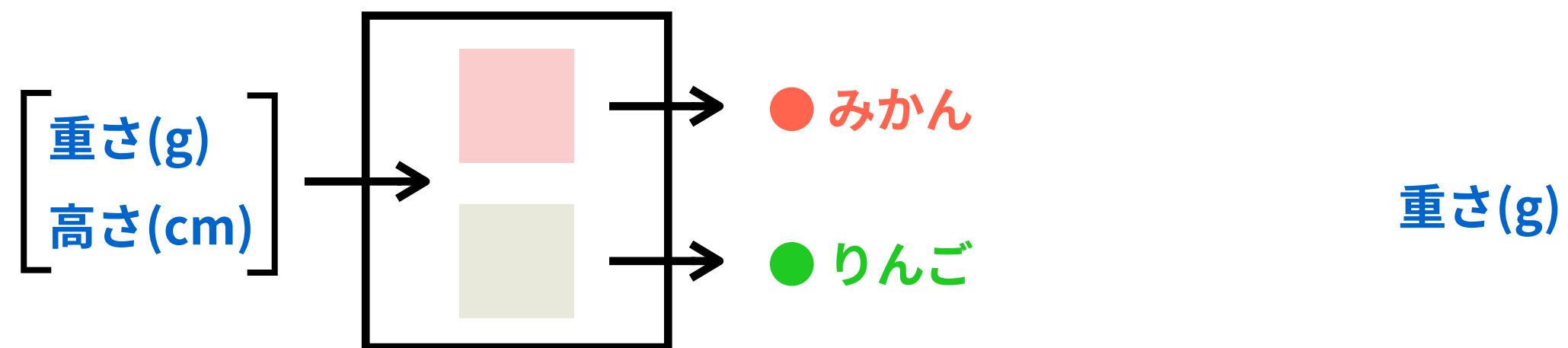
予測プログラムを作ったときに見せた見本例ではない例に対して  
「みかん」 or 「りんご」を予測することができる！



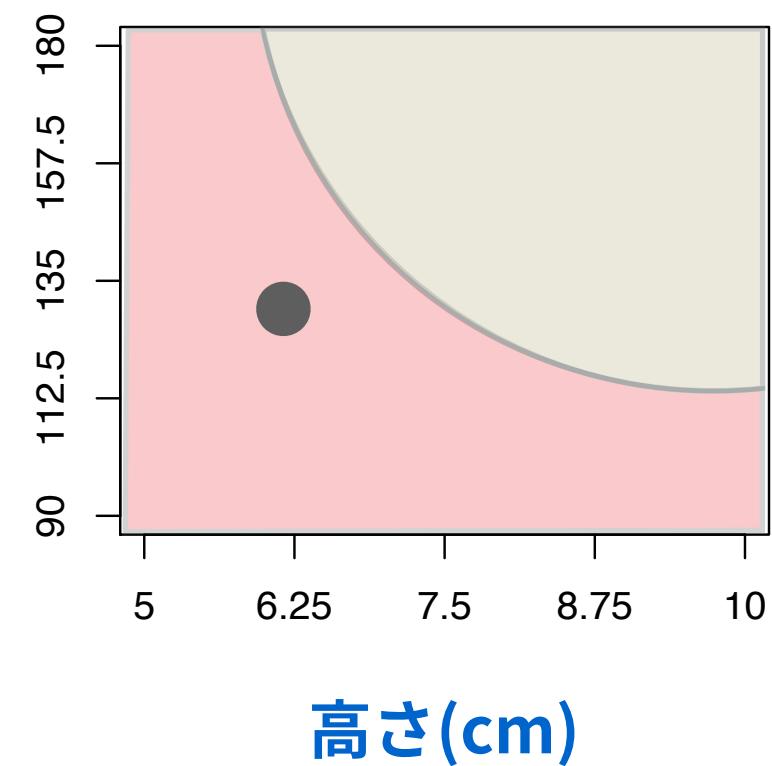
# 機械学習は「データを予測に変える技術」



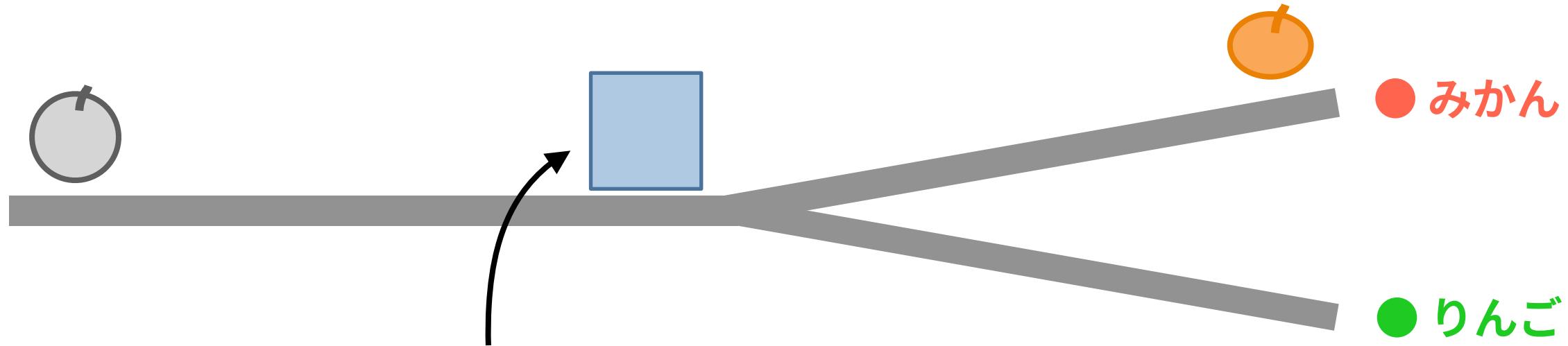
見本データから作っておいた予測プログラム



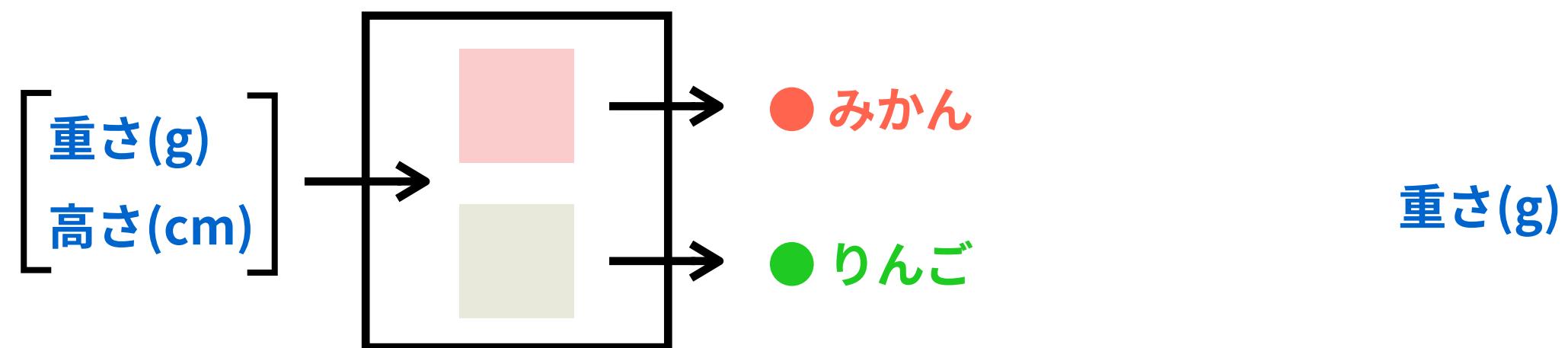
予測プログラムを作ったときに見せた見本例ではない例に対して  
「みかん」 or 「りんご」を予測することができる！



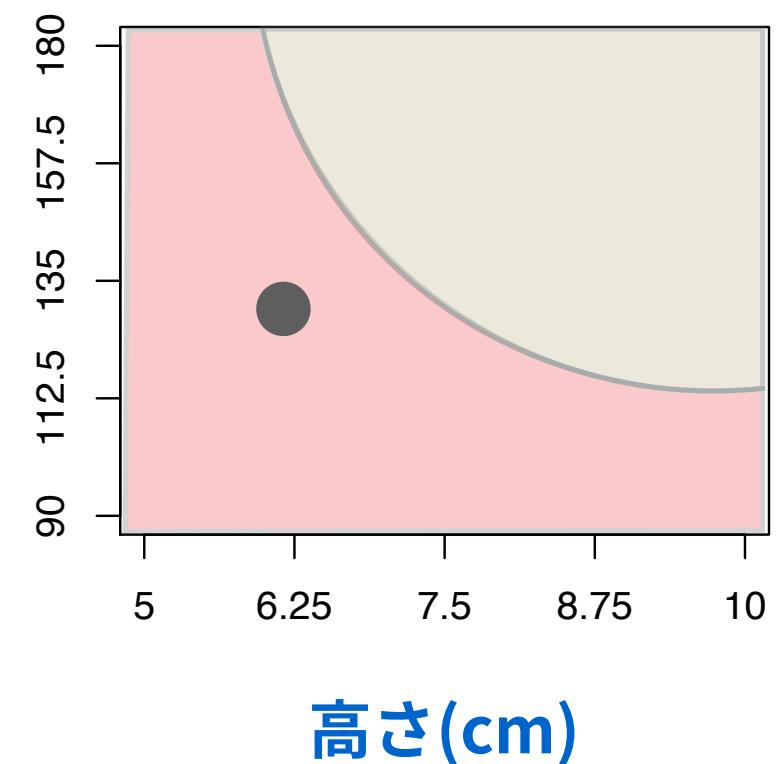
# 機械学習は「データを予測に変える技術」



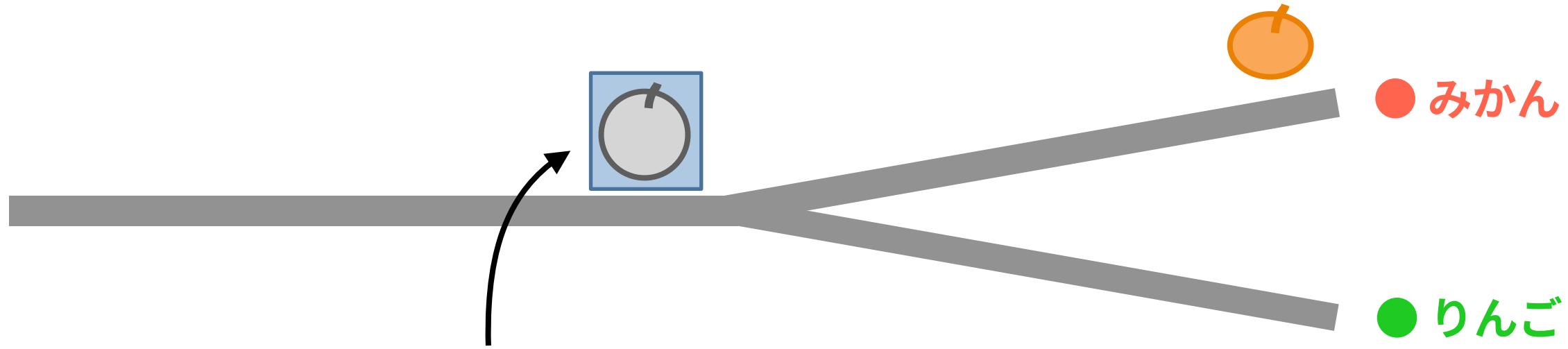
見本データから作っておいた予測プログラム



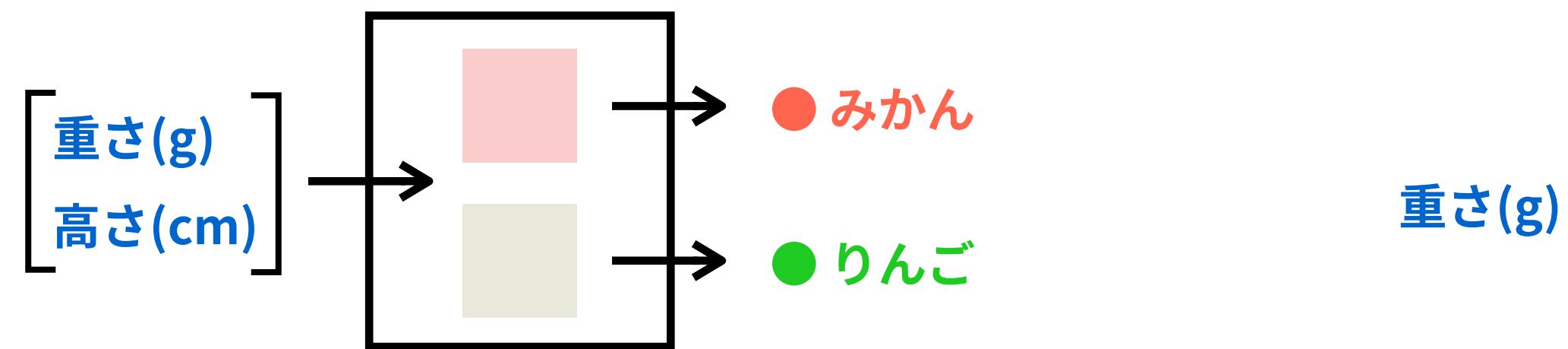
予測プログラムを作ったときに見せた見本例ではない例に対して  
「みかん」 or 「りんご」を予測することができる！



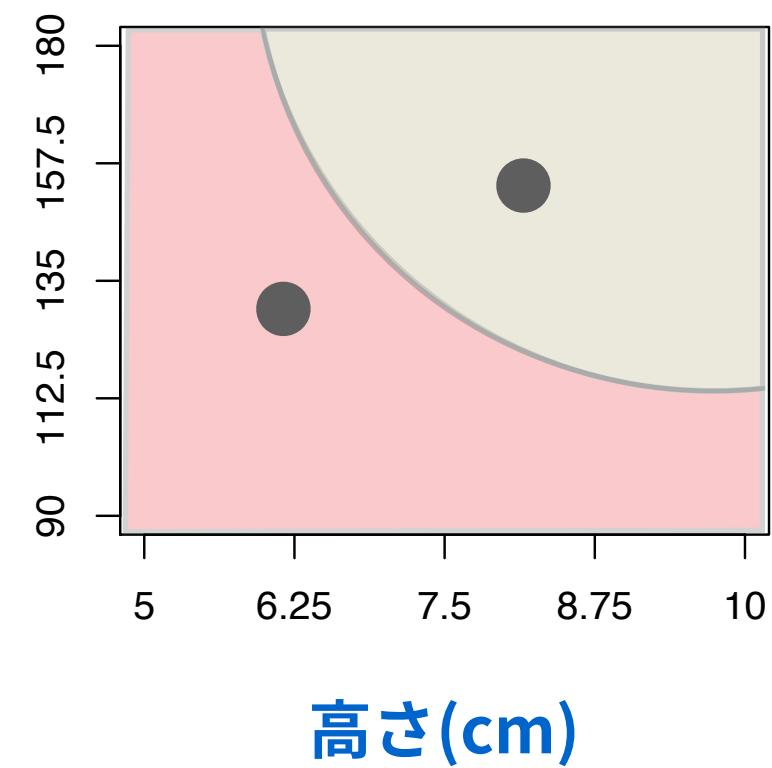
# 機械学習は「データを予測に変える技術」



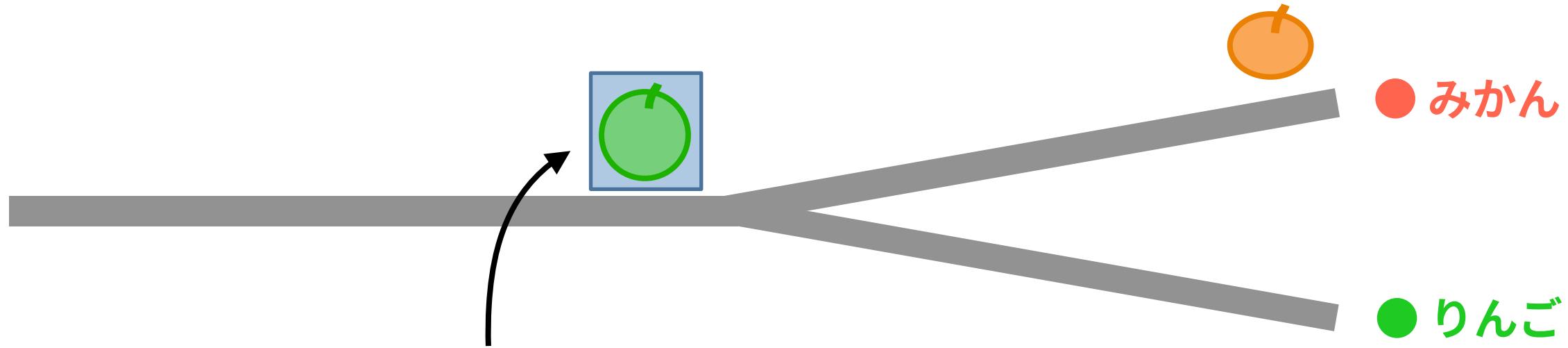
見本データから作っておいた予測プログラム



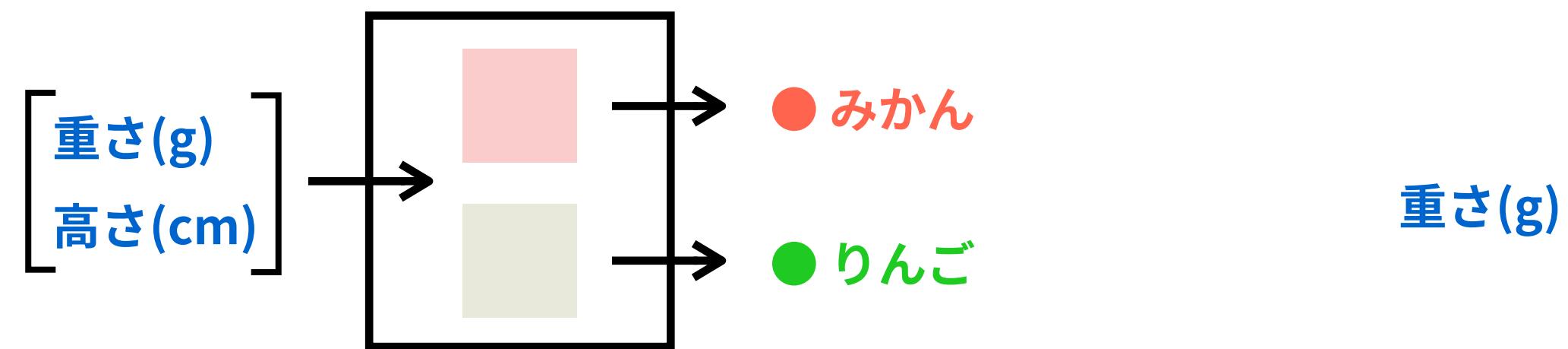
予測プログラムを作ったときに見せた見本例ではない例に対して  
「みかん」 or 「りんご」を予測することができる！



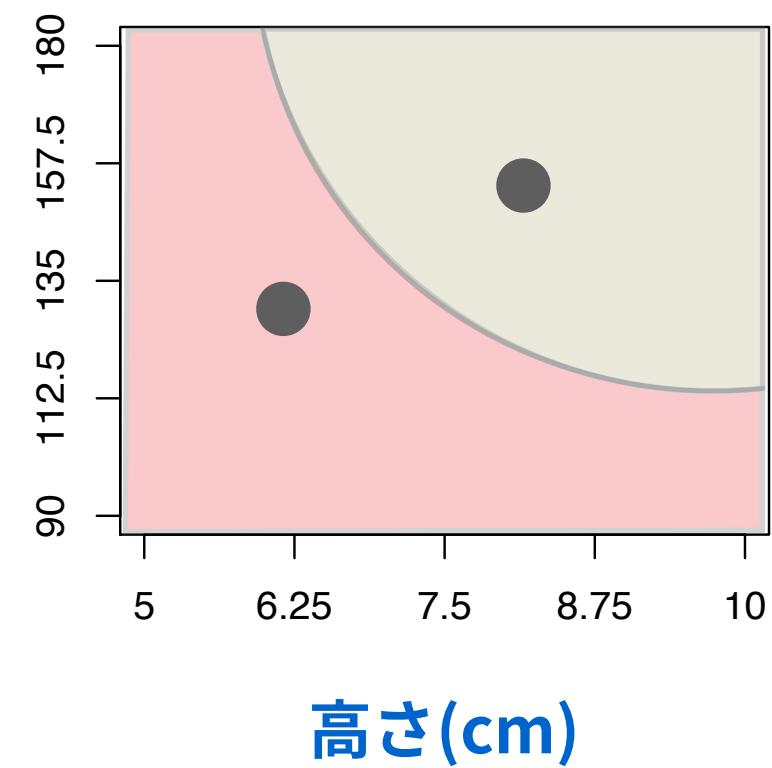
# 機械学習は「データを予測に変える技術」



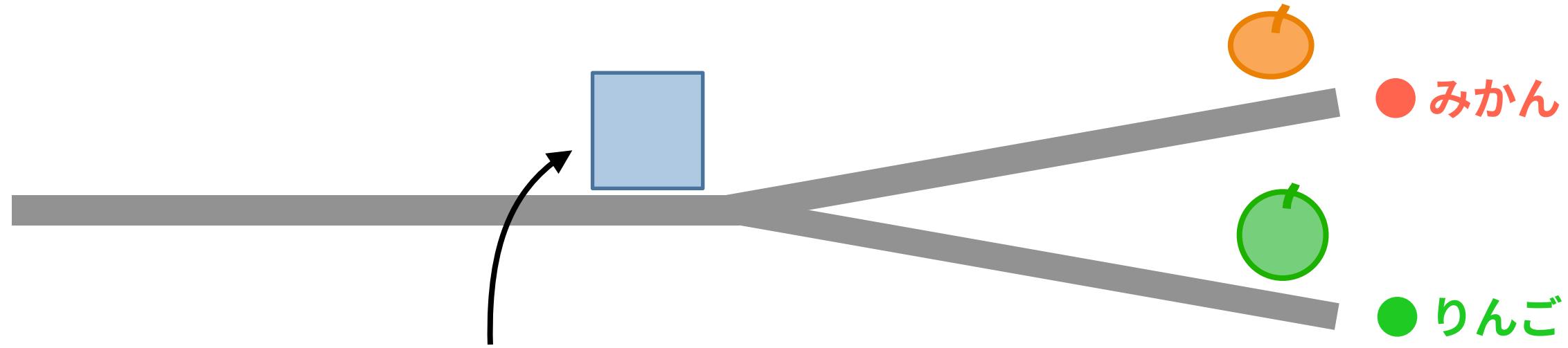
見本データから作っておいた予測プログラム



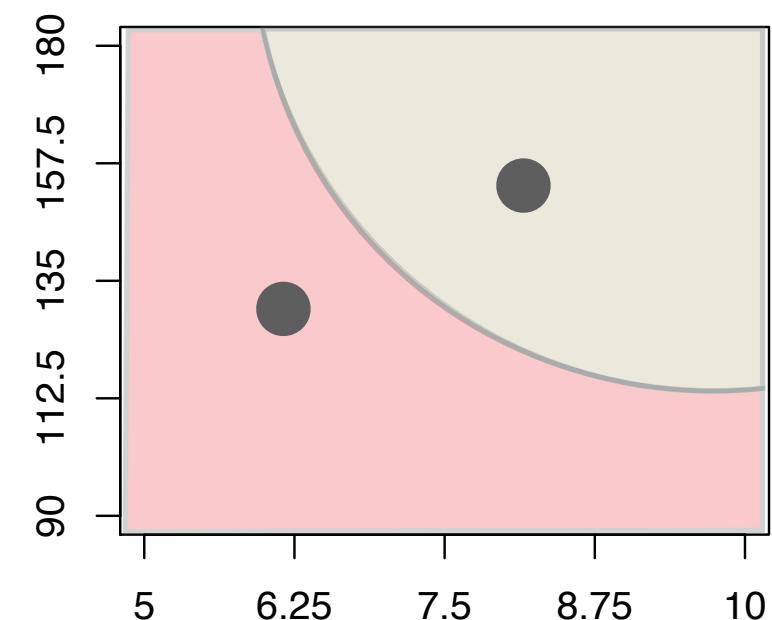
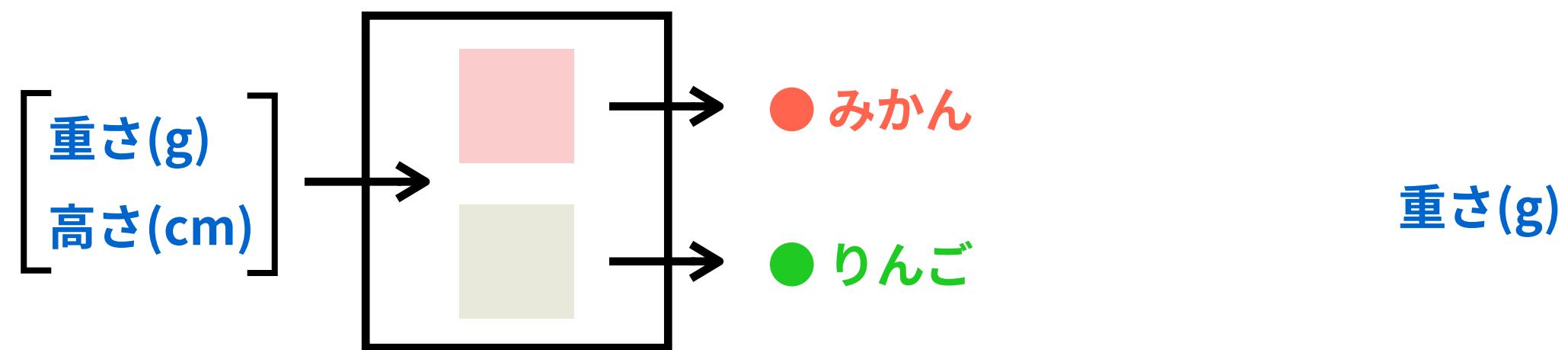
予測プログラムを作ったときに見せた見本例ではない例に対して  
「みかん」 or 「りんご」を予測することができる！



# 機械学習は「データを予測に変える技術」



見本データから作っておいた予測プログラム



予測プログラムを作ったときに見せた見本例ではない例に対して  
「みかん」 or 「りんご」を予測することができる！

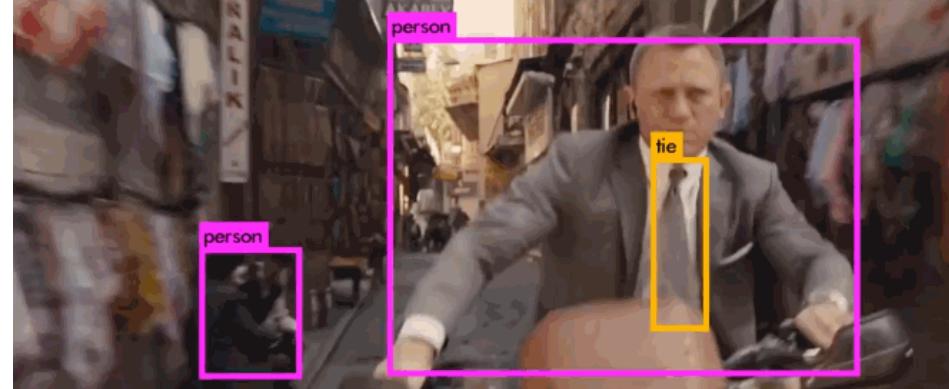
# 機械学習は「新しい(雑な)コンピュータプログラムの作り方」

たくさんの入出力の見本データによって間接的に見本例の入出力を再現する  
プログラムを作り出す技術

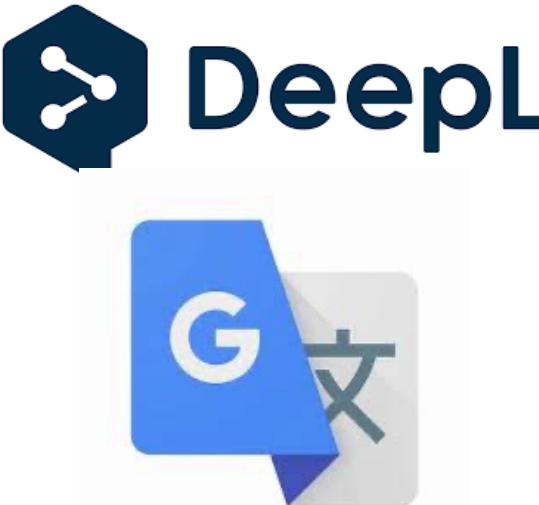


# 適材適所で上手に使うとめちゃめちゃ強力なテクノロジー

## 画像認識



## 機械翻訳



## 画像・動画変換



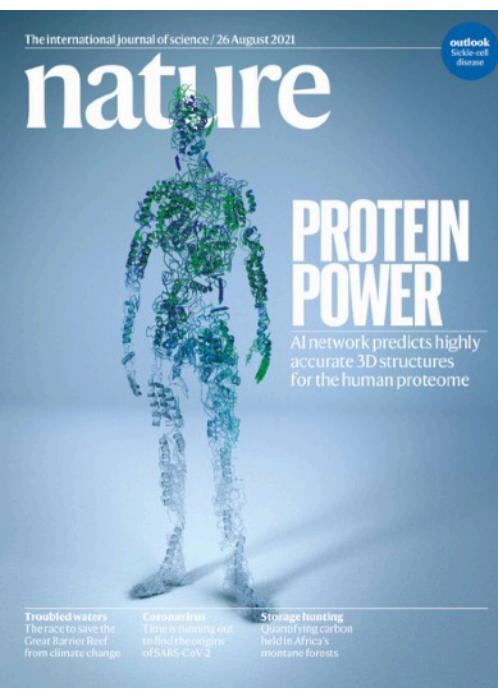
## “Deep Fake”



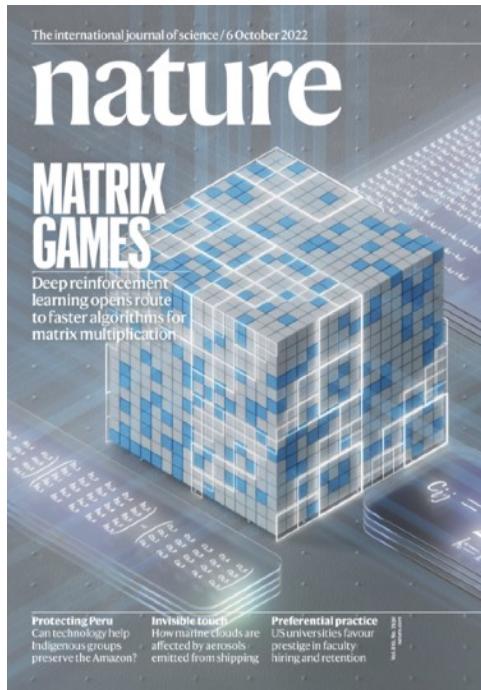
## AlphaGo



## AlphaFold2



## AlphaTensor



OpenAI  
ChatGPT

OpenAI  
DALL·E 2

Midjourney



Stable Diffusion

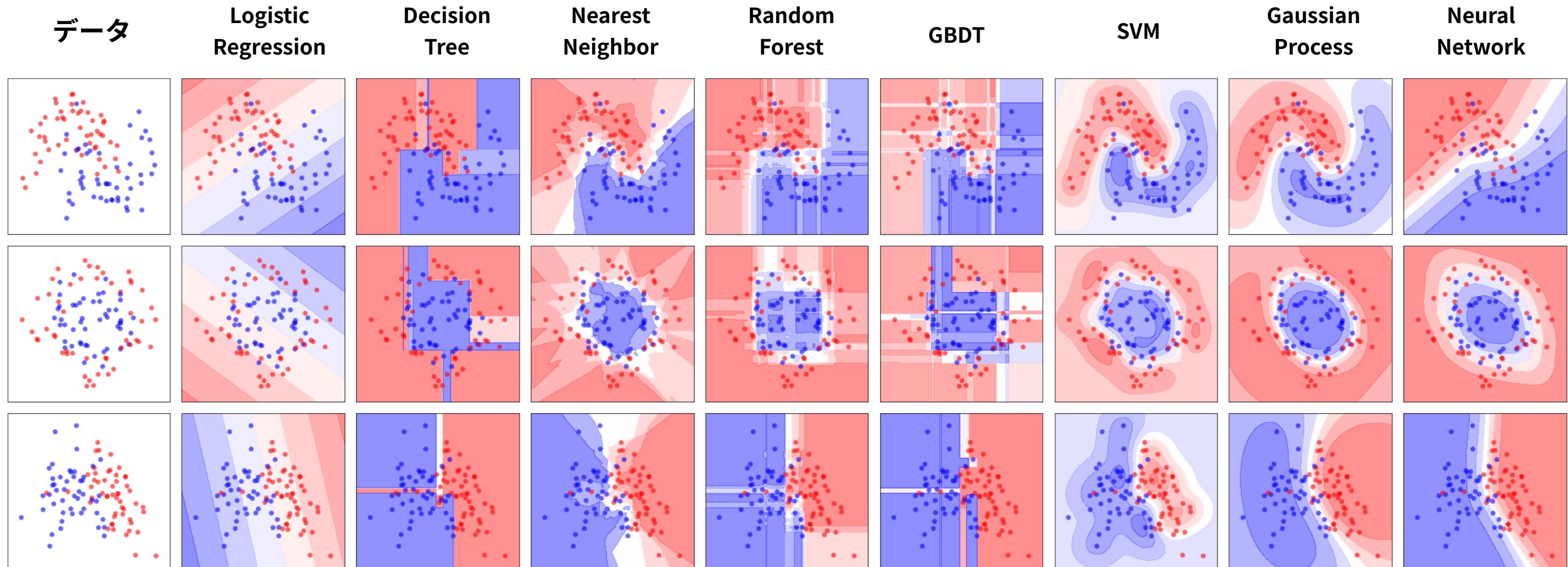
# 膨大な訓練データを入力→出力の関数モデルのパラメタに圧縮

GPTはn個の単語の並びの「次の単語」の確率分布を保持しているだけ (Lossyで雑な「圧縮」)

The screenshot shows a dark-themed web page from The New Yorker. At the top center is the magazine's logo, "THE NEW YORKER". To the right of the logo are links for "Newsletter" and "Sign In". Below the logo, a horizontal line separates it from the main content area. In the main content area, there are several smaller text links: "SCIENCE AND TECH" followed by "Can Computers Learn Common Sense?", "The Ocean's Most Delicate Species", "The Science of Puppies", and "Old Timber, New Climate Data". Further down, the text "Illustration by Vivek Thakker" is visible. In the middle of the page, the title "ANNALS OF TECHNOLOGY" appears above the large, bold, white text of the main article title: "CHATGPT IS A BLURRY JPEG OF THE WEB". Below the title, a subtitle in a smaller, italicized font reads: "OpenAI's chatbot offers paraphrases, whereas Google offers quotes. Which do we prefer?". At the bottom of the page, the author's name "By Ted Chiang" and the date "February 9, 2023" are displayed.

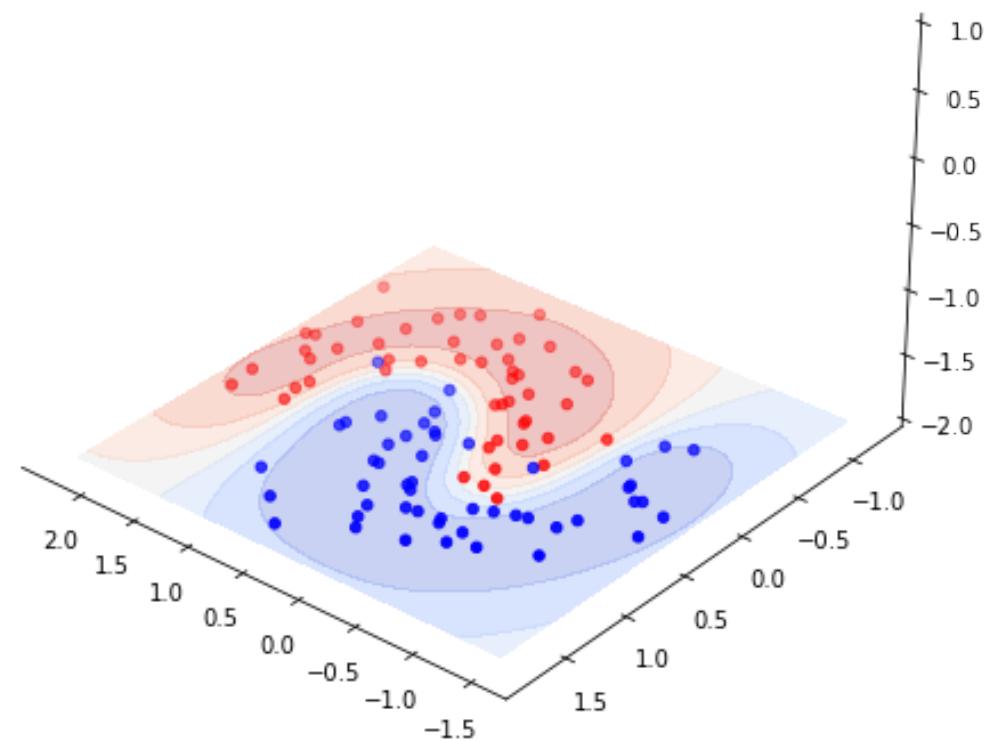
# 要点① 機械学習の手法はたくさんある

機械学習のアルゴリズムはたくさんある。違いは境界線の引き方の方針



## 要点②仕組みは曲面フィッティングによるデータ内挿

内部原理は「曲面モデル」を点にフィッティング  
しているだけ



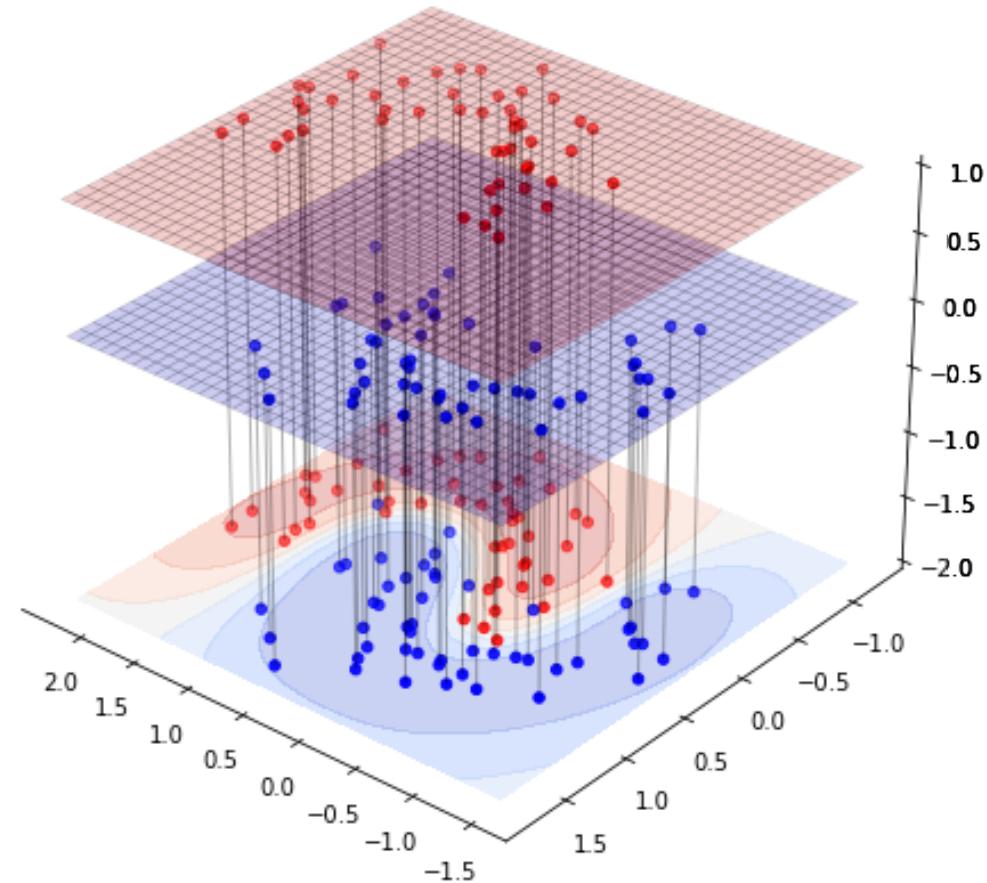
## 要点②仕組みは曲面フィッティングによるデータ内挿

内部原理は「曲面モデル」を点にフィッティング  
しているだけ



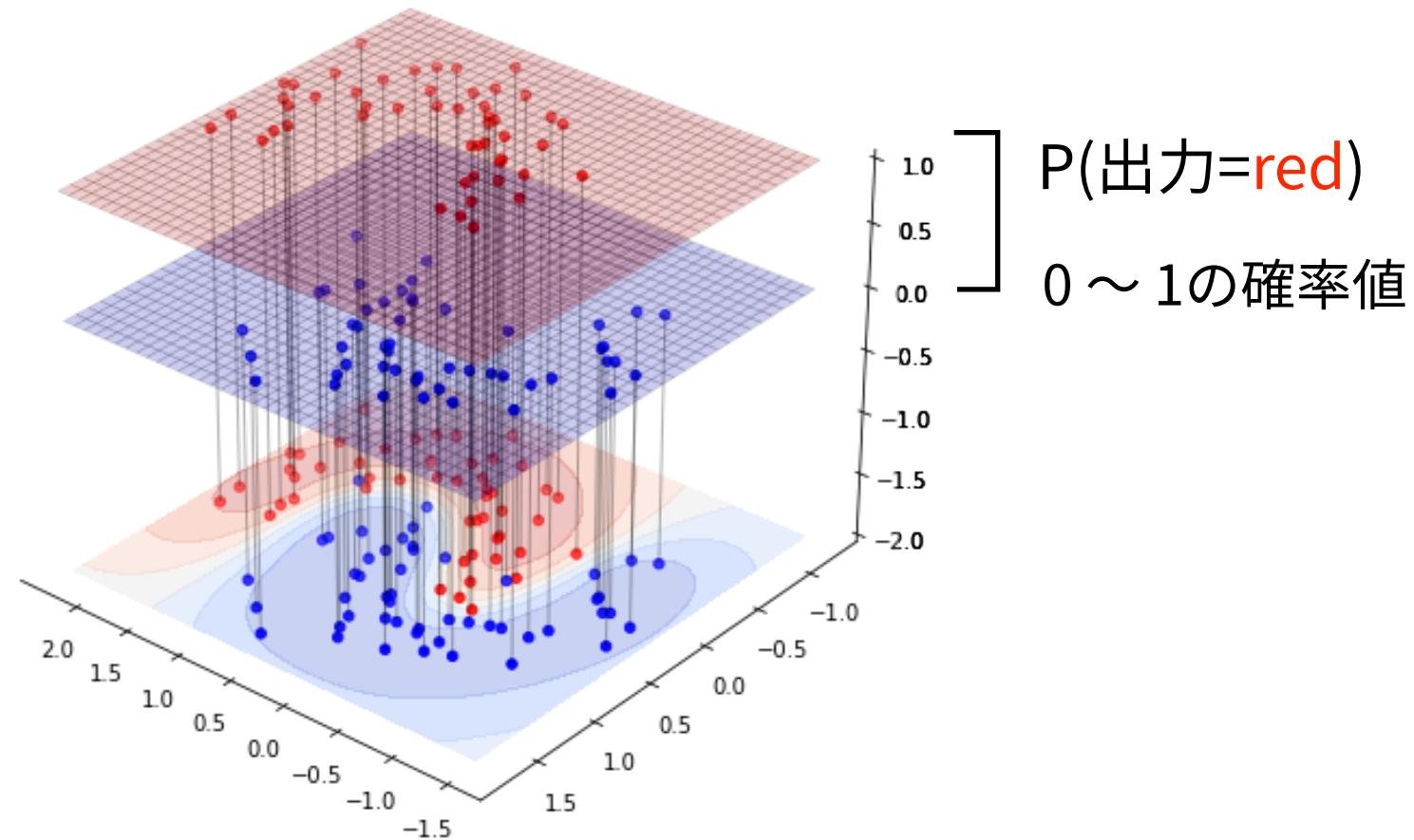
## 要点②仕組みは曲面フィッティングによるデータ内挿

内部原理は「曲面モデル」を点にフィッティング  
しているだけ



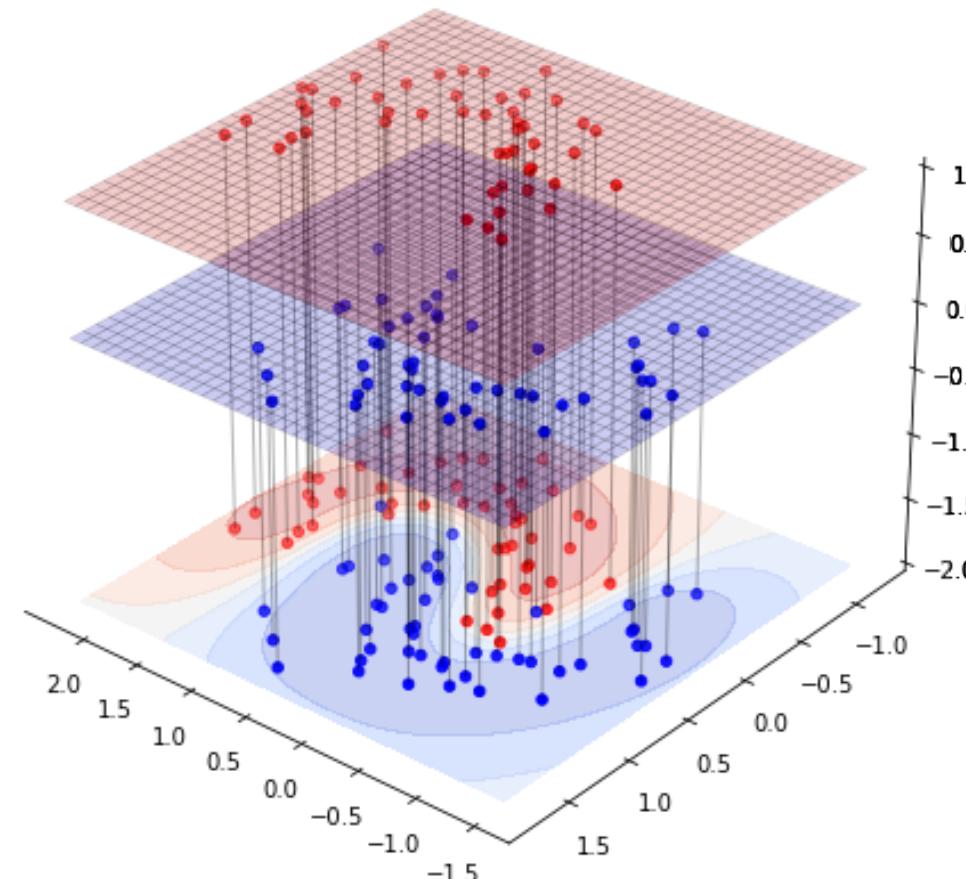
## 要点②仕組みは曲面フィッティングによるデータ内挿

内部原理は「曲面モデル」を点にフィッティング  
しているだけ

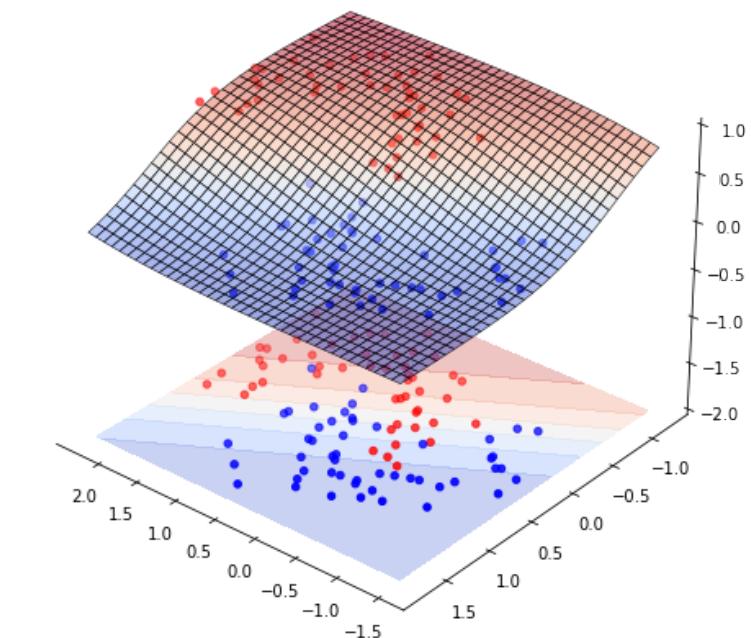


## 要点②仕組みは曲面フィッティングによるデータ内挿

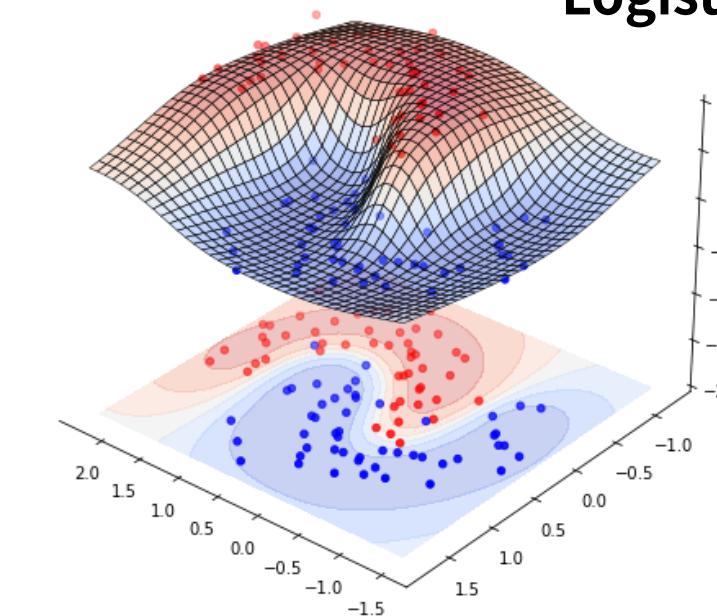
内部原理は「曲面モデル」を点にフィッティングしているだけ



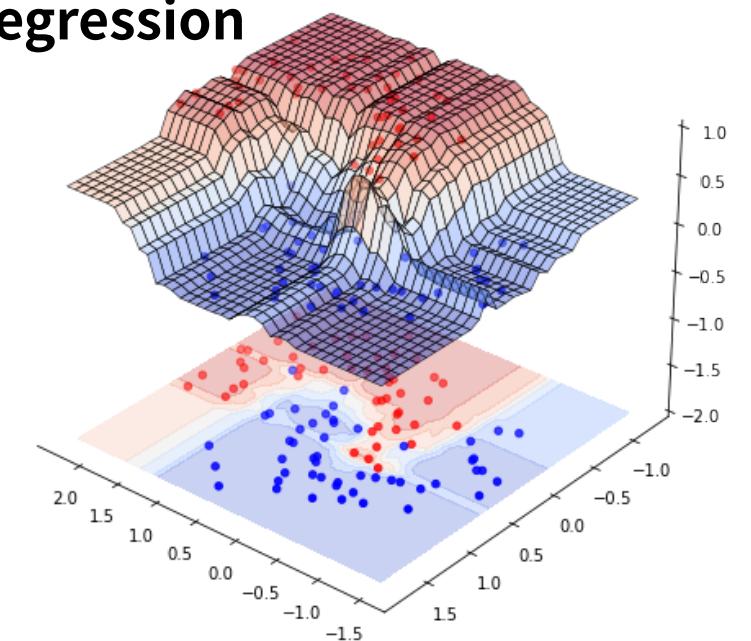
$P(\text{出力}=\text{red})$   
0 ~ 1の確率値



Logistic Regression



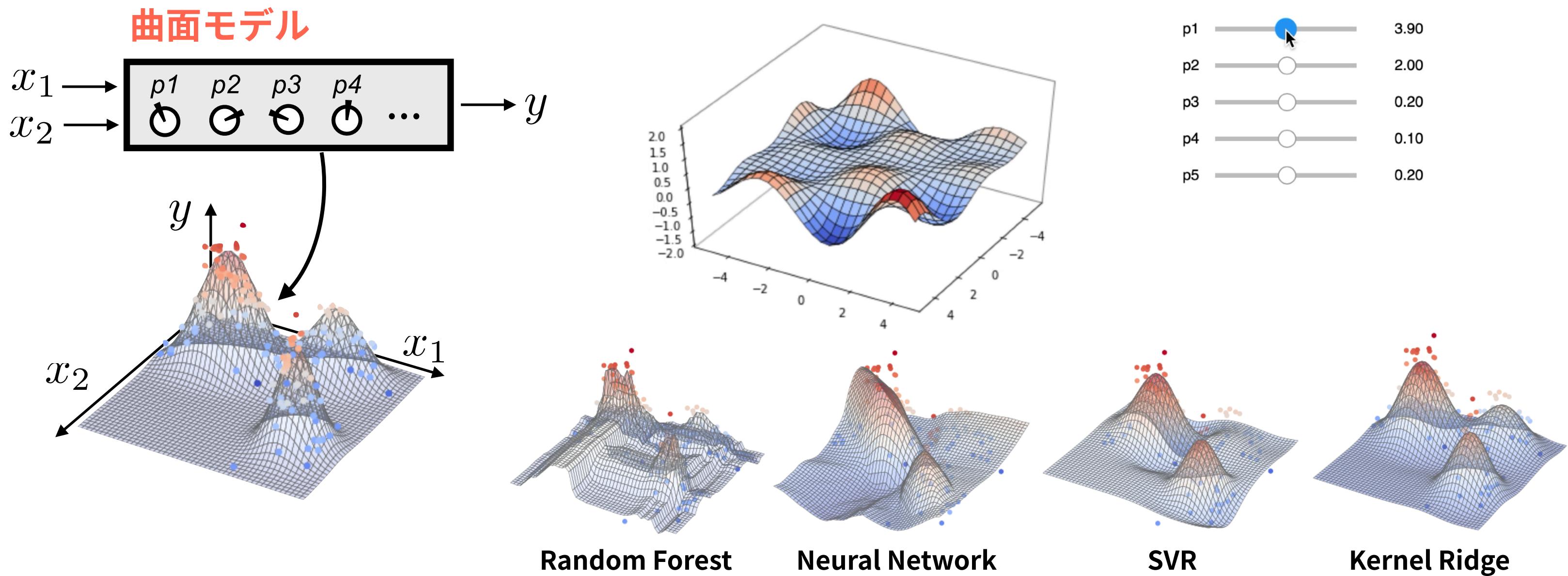
Gaussian Process



Random Forest

## 要点②仕組みは曲面フィッティングによるデータ内挿

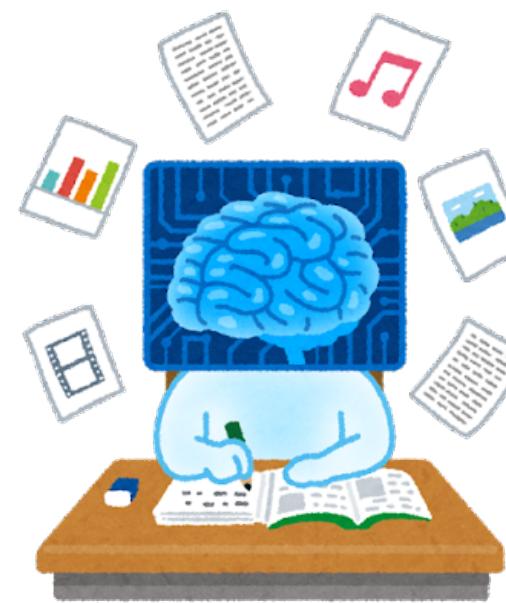
「曲面モデル」の内部パラメタ値を調整して見本点にあうようフィッティングする



# 以降の話：機械学習は科学的発見・科学的理解の役に立つの？

生命科学(Bioinformatics)には関わってきたが材料科学は全く「？」であった私は  
「Materials Informatics」なる謎の分野に最初は楽観的イメージを持っていた…

ステップ①



利用できる色々なデータ  
を機械学習に教えこむ

ステップ②



機械学習(エーアイくん)が  
並の専門家より賢くなる

ステップ③



機械学習が有望な材料を  
どんどん提案してくれる

# 今日のたった3つの話

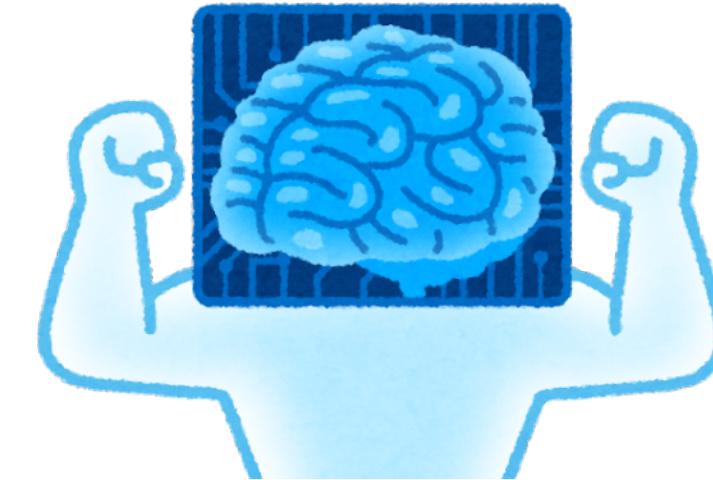
この幻想が打ち砕かれてゆく過程で、機械学習研究者として得た教訓と最新知見をもとに、3つの話をしてみたいと思います…

1. 「機械学習」と「材料科学」はゴールが根本的に食い違っていて、機械学習とは全く設定が異なる**「機械発見」**が求められている。
2. 既存データを学習した機械学習モデルから「自然科学の理解」に役に立つ情報を引き出すのも**「真相は藪の中」現象(羅生門効果)**により激ムズ。
3. 現実的な自然科学のタスクで機械学習に期待されていることを鑑みると**仮説フリーじゃいられない**。

# 「材料科学の目的」と「機械学習の目的」は食い違っている！



「今ある**どの**材料よりも良い材料」  
「今まで**ない**材料」を探したい。



今ある材料のデータの性質を代表する  
モデルを使って予測をしたい。

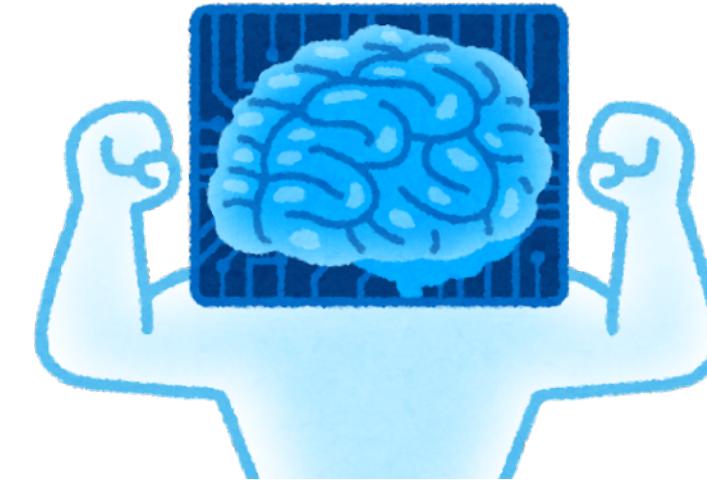
統計学的視点に立てば、「外れ値(例外)が欲しい」と言っているに等しい。  
(今知られている材料の中で最も良い材料でもかなり例外的だがそれより外れ値)

# 「材料科学の目的」と「機械学習の目的」は食い違っている！



「今ある**どの**材料よりも良い材料」  
「今まで**ない**材料」を探したい。

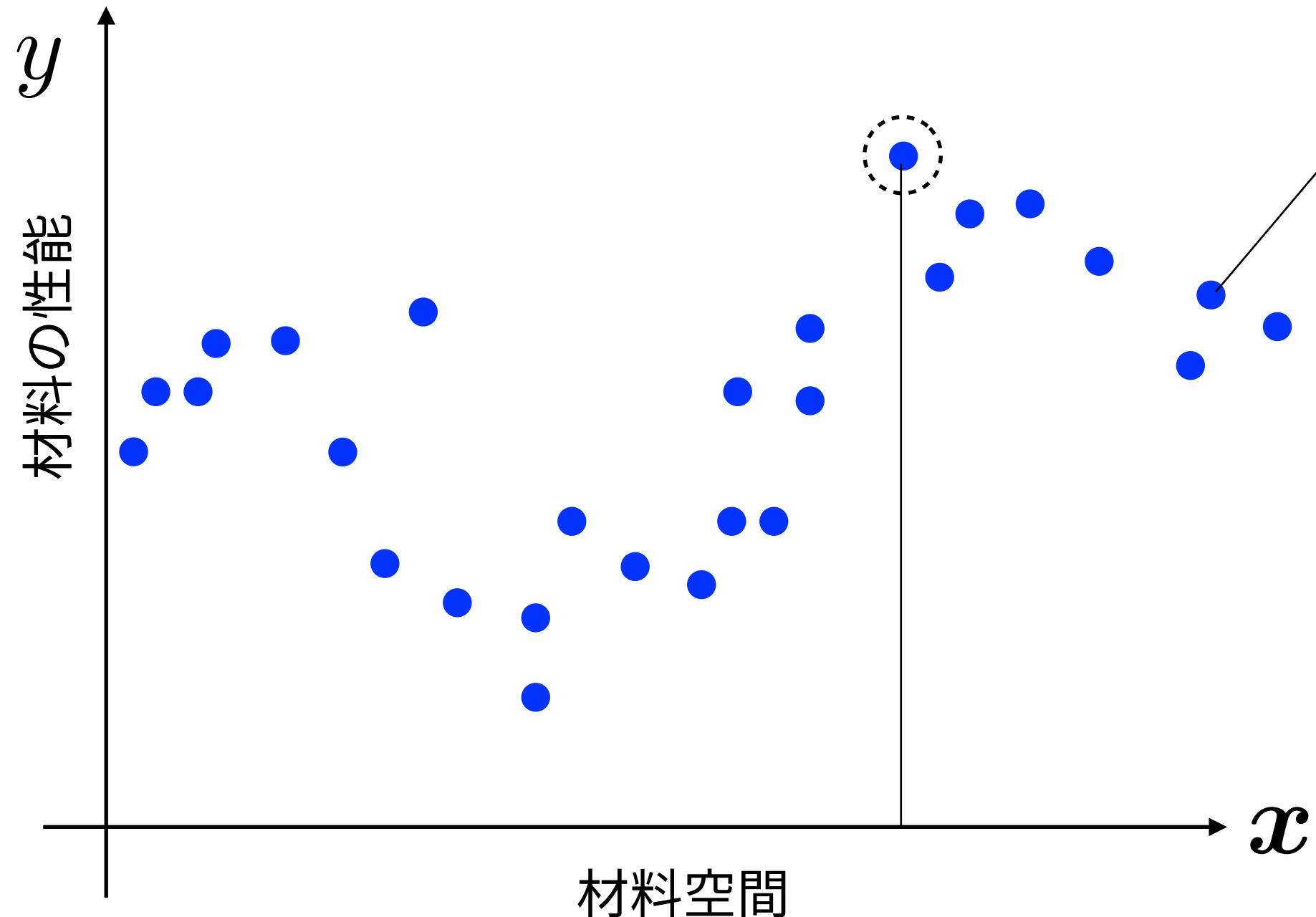
科学的発見：今わかっていること  
の中**にはない**ものを見つける



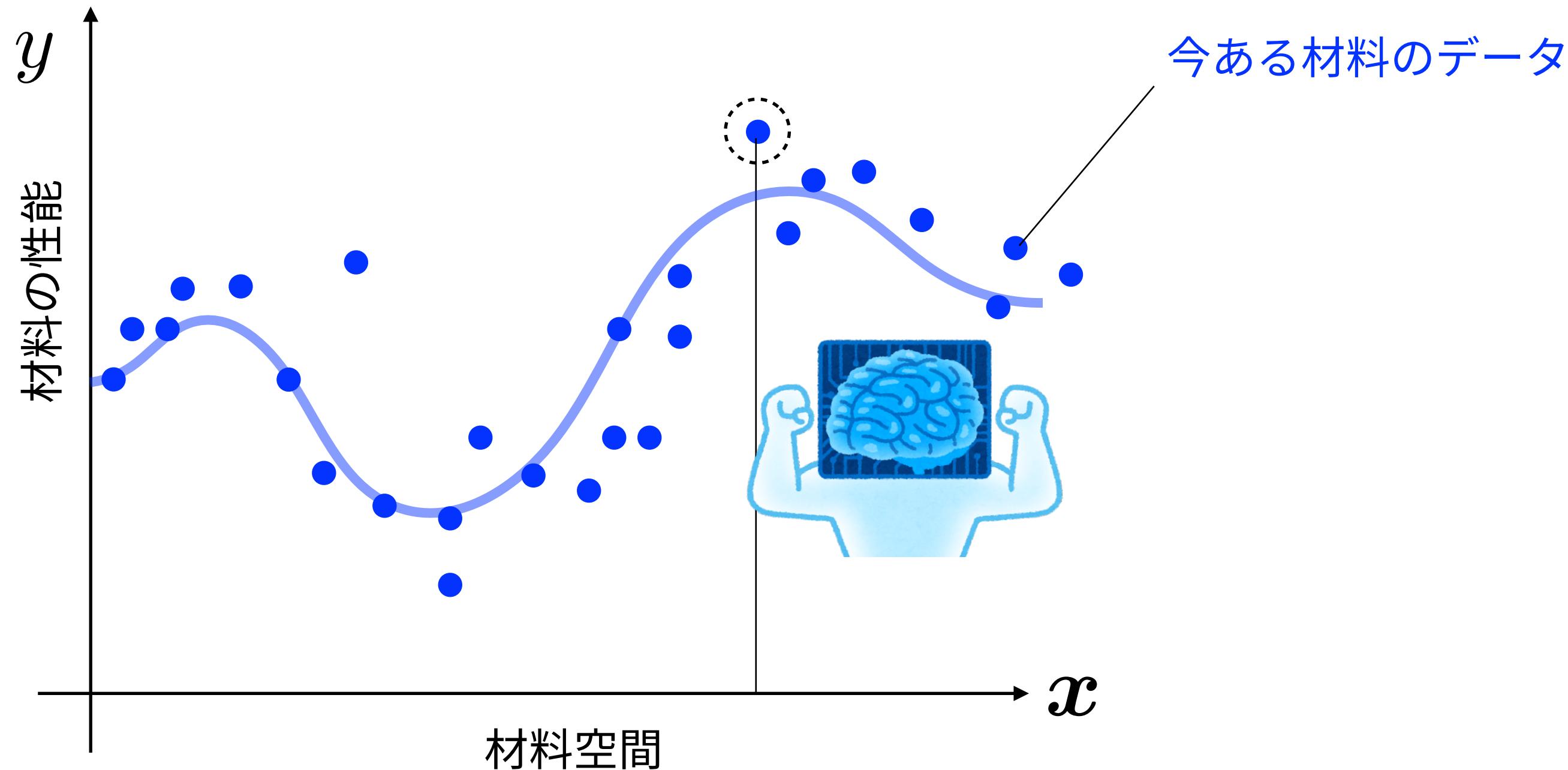
今ある材料のデータの性質を代表する  
モデルを使って予測をしたい。

今**わかっている**ことの延長線で  
予測をする(曲面内挿で敷衍して)

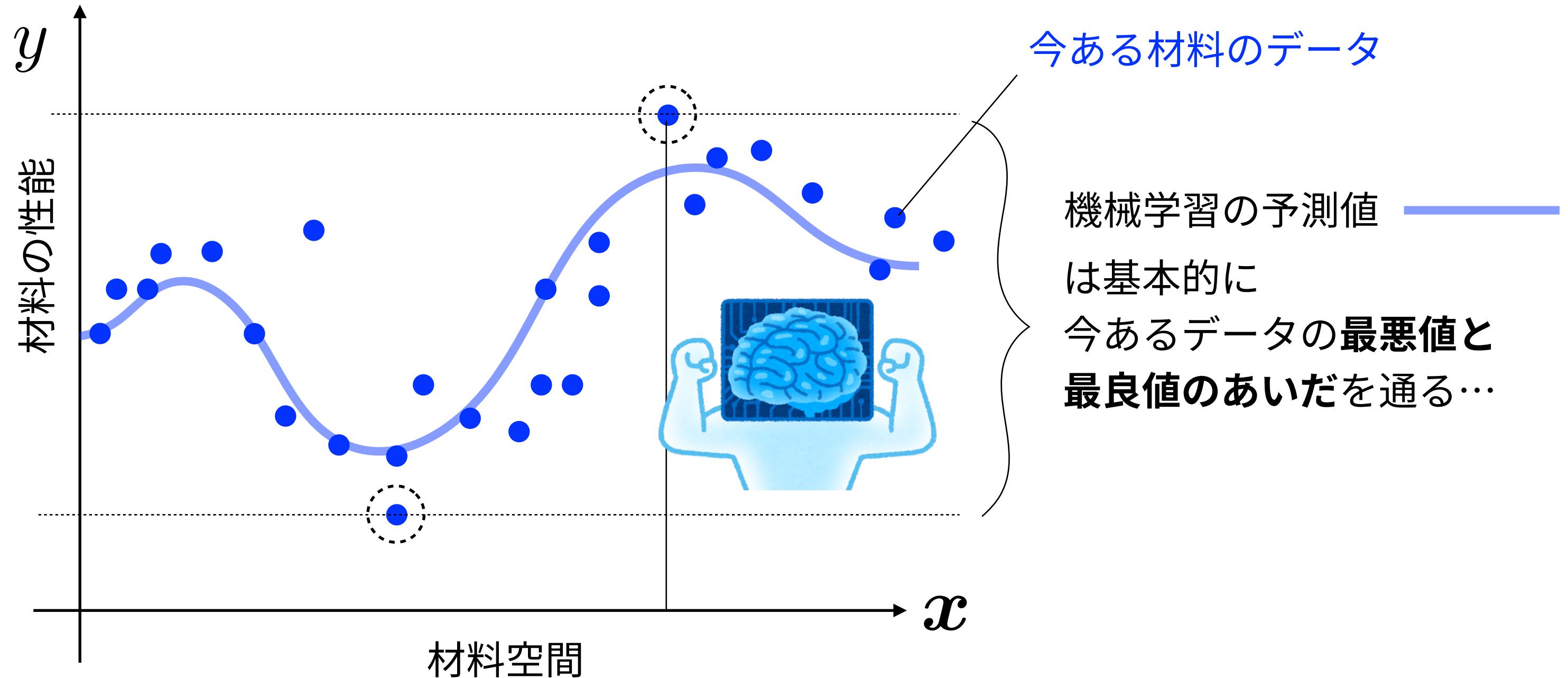
# 「材料科学の目的」と「機械学習の目的」は食い違っている！



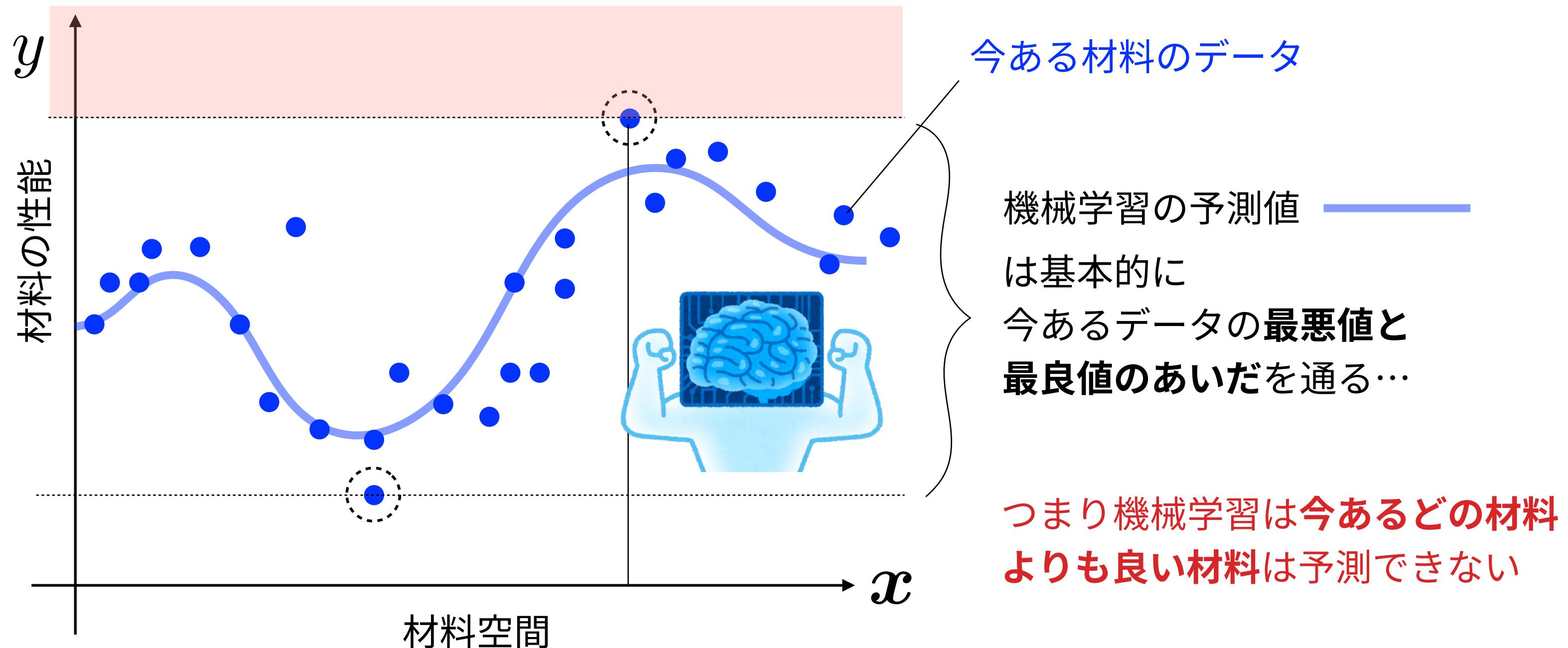
# 「材料科学の目的」と「機械学習の目的」は食い違っている！



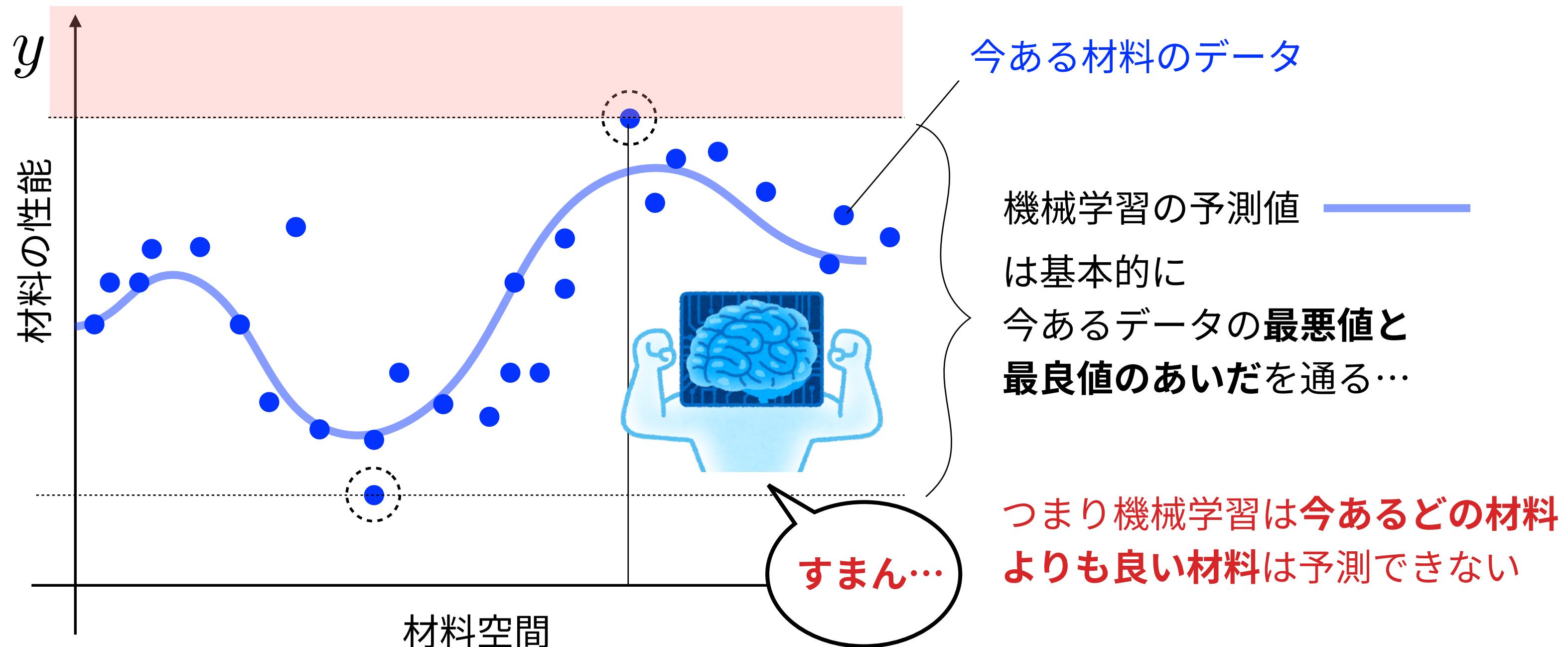
# 「材料科学の目的」と「機械学習の目的」は食い違っている！



# 「材料科学の目的」と「機械学習の目的」は食い違っている！



# 「材料科学の目的」と「機械学習の目的」は食い違っている！



# 「発見」が目的なら(学習や予測ではなく)「探索」の問題

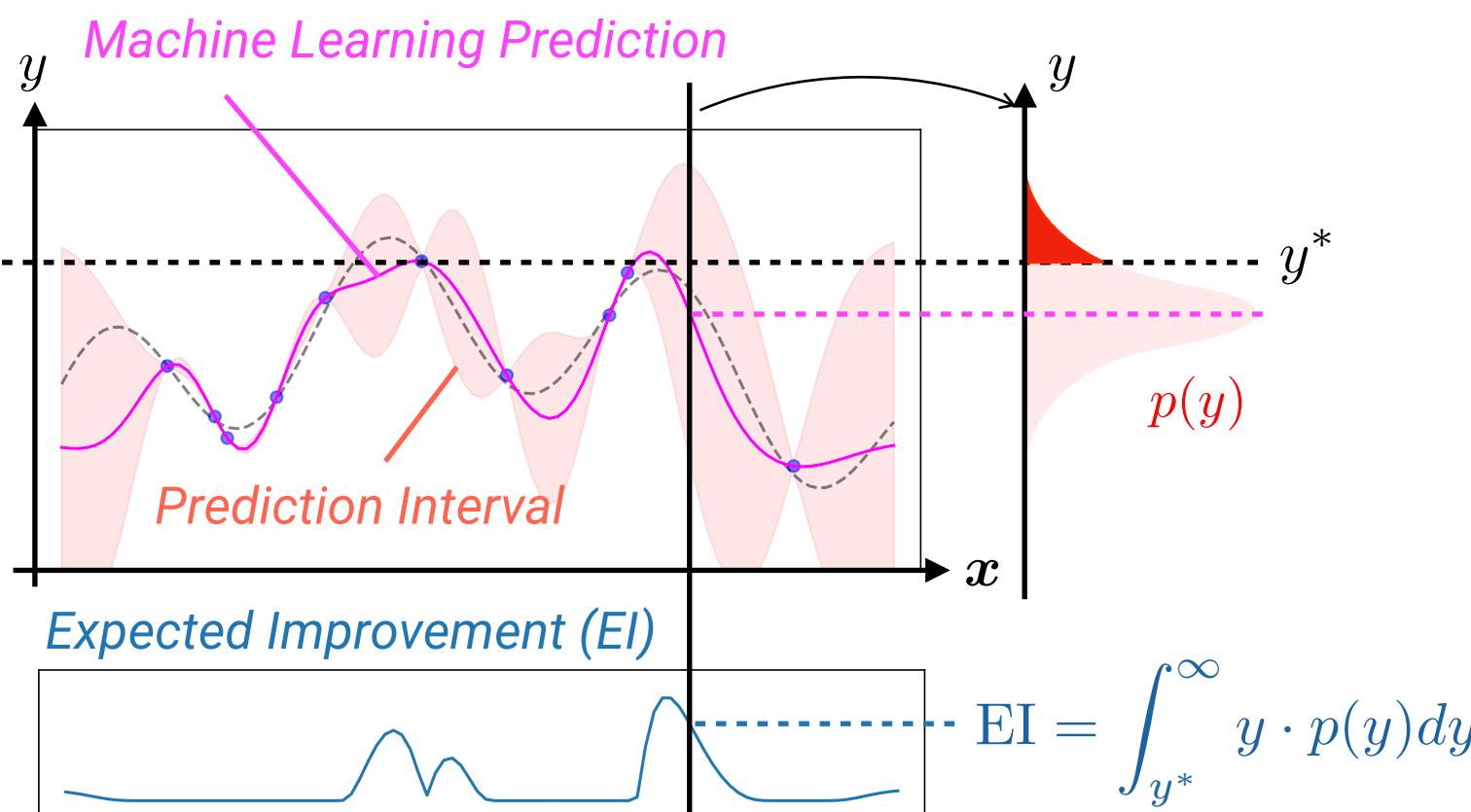
- ・ 「機械学習は今あるどの材料よりも良い材料は予測できない」は機械学習の欠陥ではなく「仕様」です！

# 「発見」が目的なら(学習や予測ではなく)「探索」の問題

- ・ 「機械学習は今あるどの材料よりも良い材料は予測できない」は機械学習の欠陥ではなく「仕様」です！
- ・ その上「機械学習でも使ってみよう」状況= 本質的にデータが足りてない状況  
→もし足りていたらどういう材料が良いかうすうす気がつく(機械学習不要…)

# 「発見」が目的なら(学習や予測ではなく)「探索」の問題

- 「機械学習は今あるどの材料よりも良い材料は予測できない」は機械学習の欠陥ではなく「仕様」です！
- その上「機械学習でも使ってみよう」状況=本質的にデータが足りてない状況  
→もし足りていたらどういう材料が良いかうすうす気がつく(機械学習不要…)



「機械発見」：機械学習より難しい別の新しい問題の解決が期待されている！

- UQ (不確実性の定量化)
  - 探索指標の設計
  - 探索手法の設計
- など

→ 機械学習は要素技術の一つなだけ

# 機械学習の実践で最も難しいこと

# 機械学習の実践で最も難しいこと = 予測が当たるのかの検証

# 機械学習の実践で最も難しいこと = 予測が当たるのかの検証

機械学習が「与えた見本例」を正しく予測できるのは**当たり前**

真の関心：「見本例ではないデータ」に対して正しく予測できるか？

- ✓ 見本例ではないデータ = 手元のもの以外のあらゆるデータなのでこの検証は**本質的に激ムズ**
- ✓ 検証用データも手元に用意するので意図しない**カンニング事故(data leakage)**が起きやすい…

# 機械学習の実践で最も難しいこと = 予測が当たるのかの検証

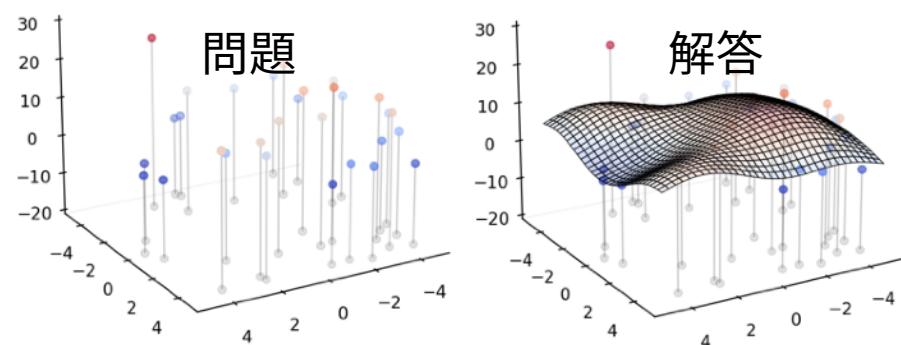
機械学習が「与えた見本例」を正しく予測できるのは**当たり前**

真の関心：「見本例ではないデータ」に対して正しく予測できるか？

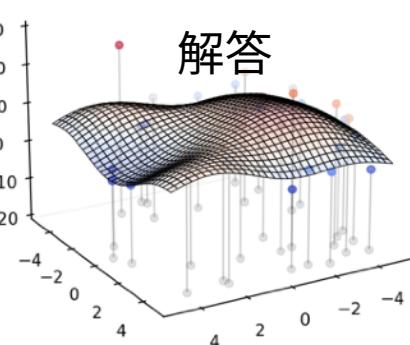
- ✓ 見本例ではないデータ = 手元のもの以外のあらゆるデータなのでこの検証は**本質的に激ムズ**
- ✓ 検証用データも手元に用意するので意図しない**カンニング事故(data leakage)**が起きやすい…

## ① Training (訓練)

### 例題



解答



# 機械学習の実践で最も難しいこと = 予測が当たるのかの検証

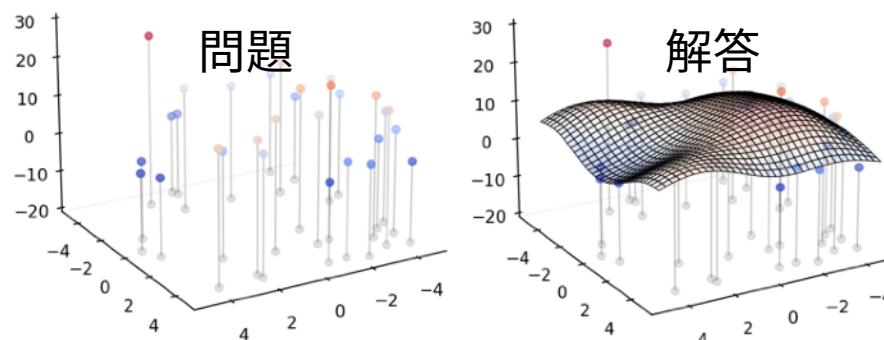
機械学習が「与えた見本例」を正しく予測できるのは**当たり前**

真の関心：「見本例ではないデータ」に対して正しく予測できるか？

- ✓ 見本例ではないデータ = 手元のもの以外のあらゆるデータなのでこの検証は**本質的に激ムズ**
- ✓ 検証用データも手元に用意するので意図しない**カンニング事故(data leakage)**が起きやすい…

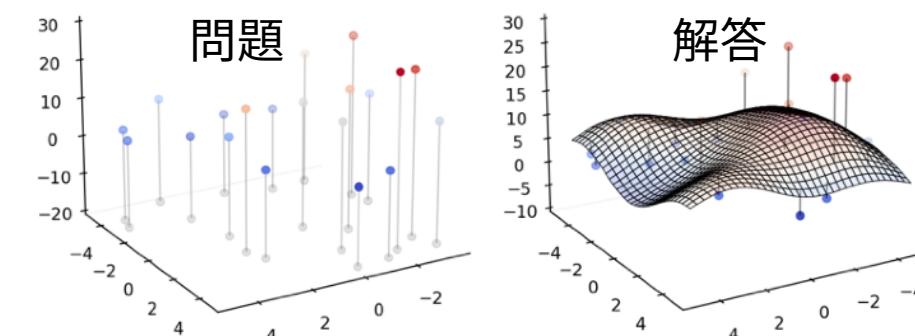
## ① Training (訓練)

例題



## ② Validation (モデル検証)

演習・模試



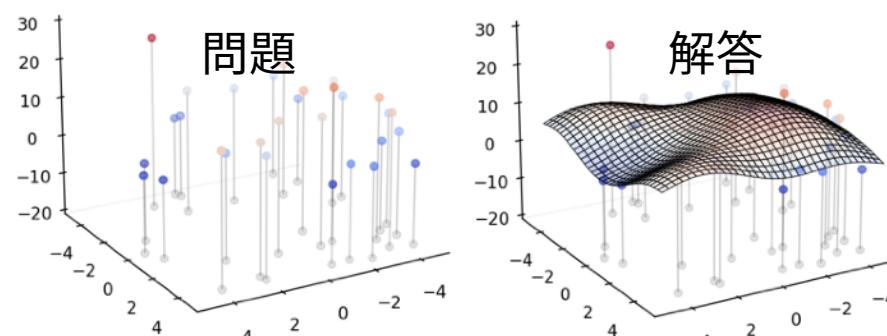
# 機械学習の実践で最も難しいこと = 予測が当たるのかの検証

機械学習が「与えた見本例」を正しく予測できるのは**当たり前**

真の関心：「見本例ではないデータ」に対して正しく予測できるか？

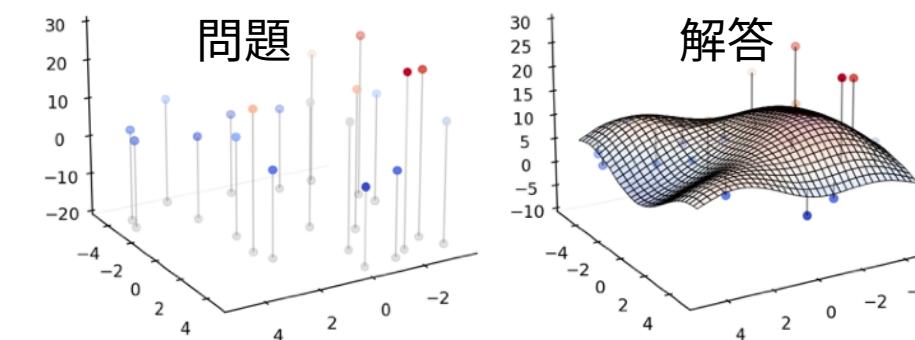
- ✓ 見本例ではないデータ = 手元のもの以外のあらゆるデータなのでこの検証は**本質的に激ムズ**
- ✓ 検証用データも手元に用意するので意図しない**カンニング事故(data leakage)**が起きやすい…

① Training (訓練)



② Validation (モデル検証)

例題



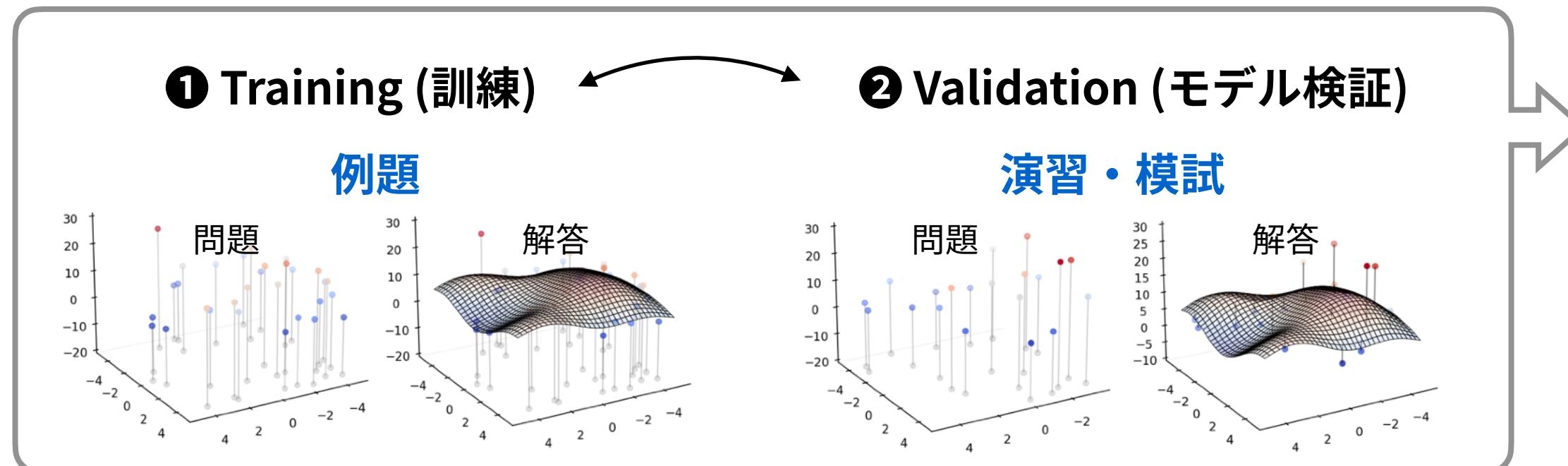
演習・模試

# 機械学習の実践で最も難しいこと = 予測が当たるのかの検証

機械学習が「与えた見本例」を正しく予測できるのは**当たり前**

真の関心：「見本例ではないデータ」に対して正しく予測できるか？

- ✓ 見本例ではないデータ = 手元のもの以外のあらゆるデータなのでこの検証は**本質的に激ムズ**
- ✓ 検証用データも手元に用意するので意図しない**カンニング事故(data leakage)**が起きやすい…

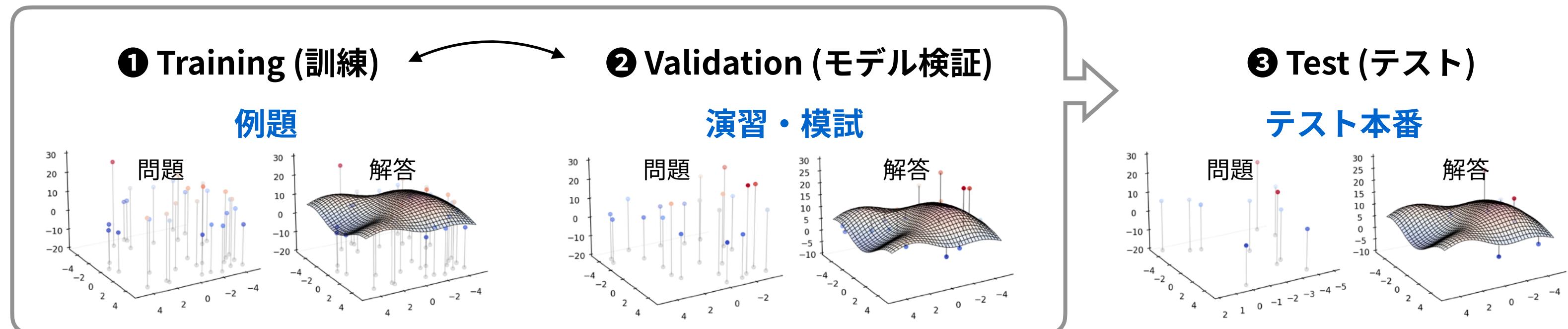


# 機械学習の実践で最も難しいこと = 予測が当たるのかの検証

機械学習が「与えた見本例」を正しく予測できるのは**当たり前**

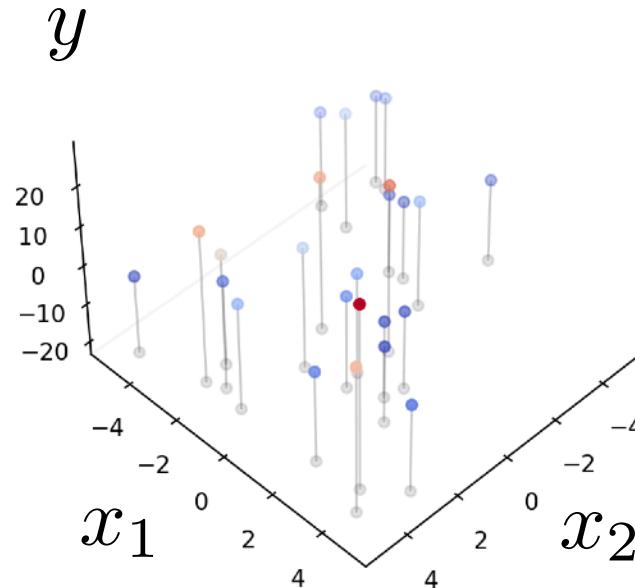
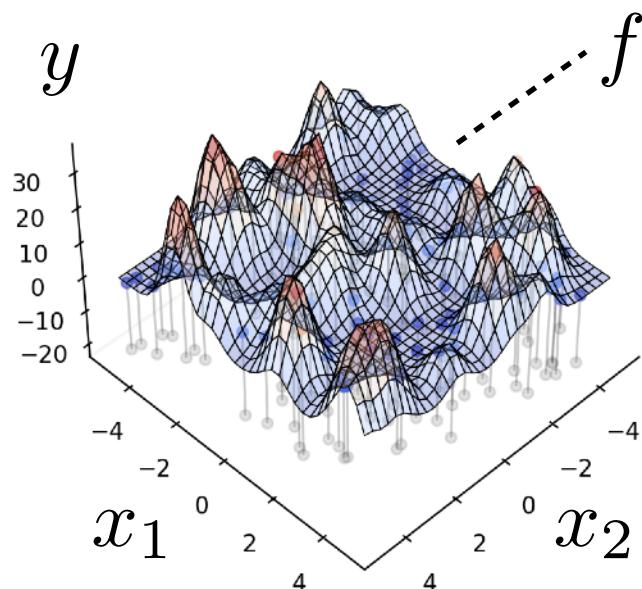
真の関心：「見本例ではないデータ」に対して正しく予測できるか？

- ✓ 見本例ではないデータ = 手元のもの以外のあらゆるデータなのでこの検証は**本質的に激ムズ**
- ✓ 検証用データも手元に用意するので意図しない**カンニング事故(data leakage)**が起きやすい…



# 材料科学と機械学習での「テストデータ」の違い

機械学習の根幹である「**テストデータ**」の概念がそもそも絶望的に異なる！

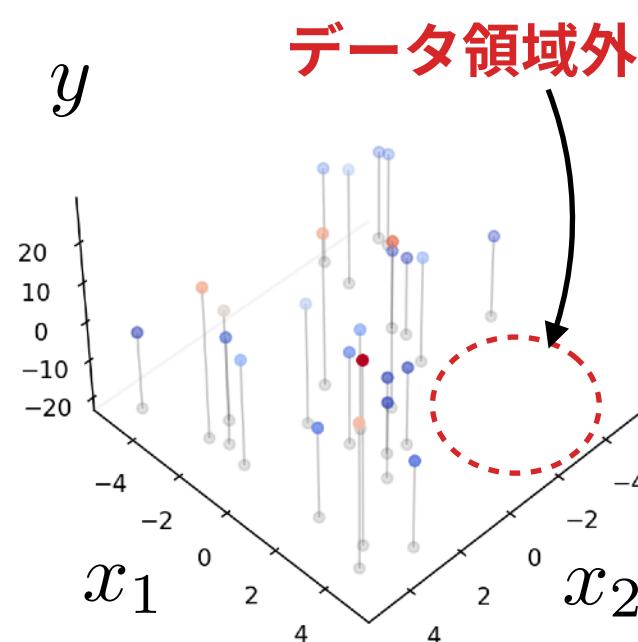
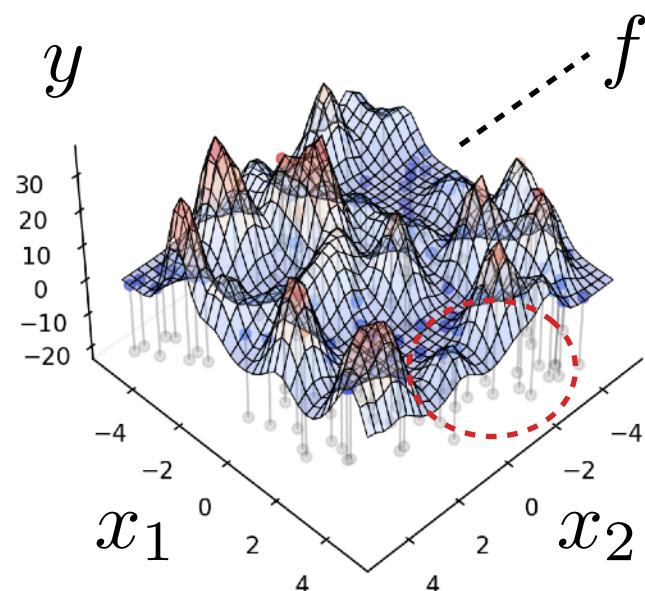


$$x_1 \rightarrow \boxed{f} \rightarrow y$$

得られているデータ  
(訓練データ)

# 材料科学と機械学習での「テストデータ」の違い

機械学習の根幹である「**テストデータ**」の概念がそもそも絶望的に異なる！

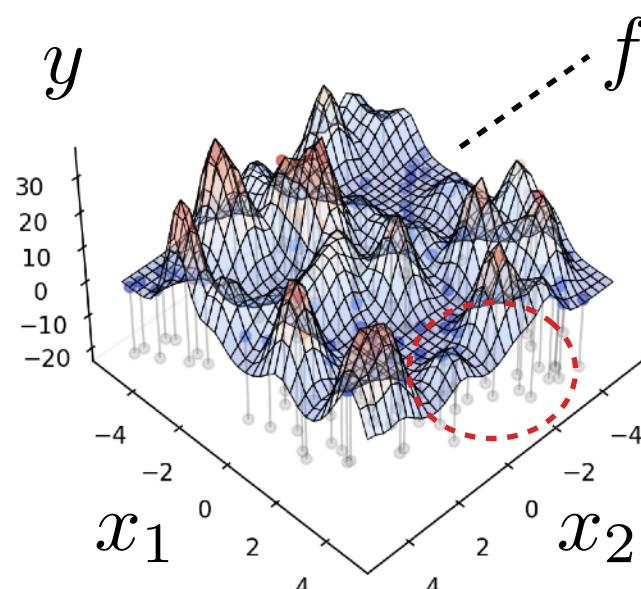


$$x_1 \rightarrow \boxed{f} \rightarrow y$$
$$x_2 \rightarrow$$

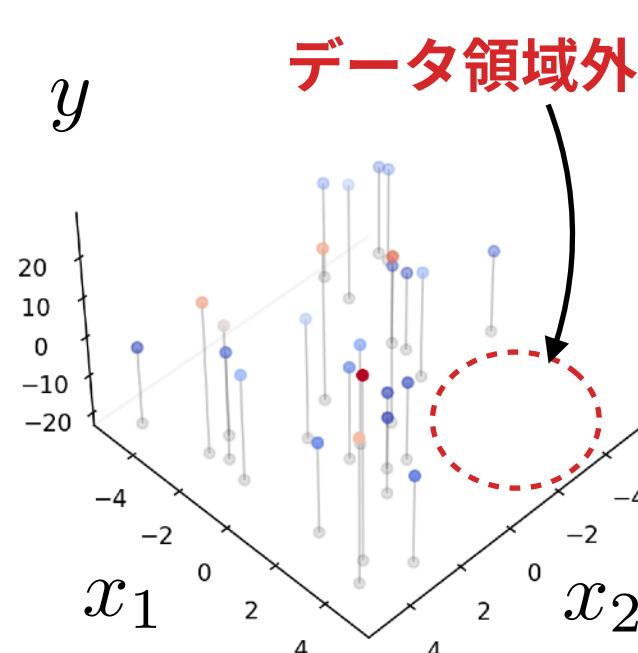
得られているデータ  
(訓練データ)

# 材料科学と機械学習での「テストデータ」の違い

機械学習の根幹である「**テストデータ**」の概念がそもそも絶望的に異なる！



$$x_1 \rightarrow \boxed{f} \rightarrow y$$
$$x_2 \rightarrow$$



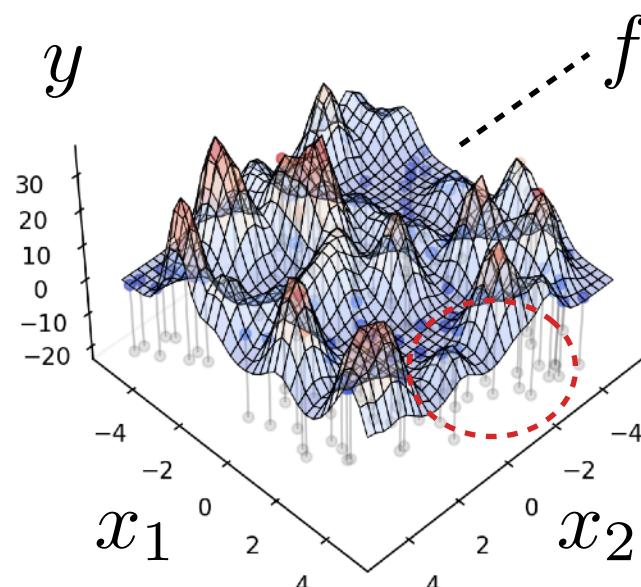
得られているデータ  
(訓練データ)

**機械学習** データ領域外は諦める(小確率だし)

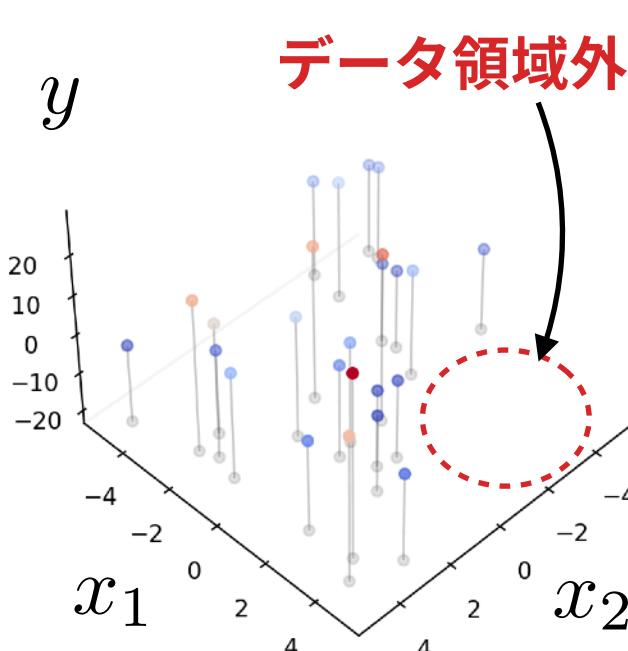
- 得られているデータが分布している領域に  
(=得られているデータとほぼ同じ確率分布で)  
来た点  $(x_1, x_2)$  での  $y$  を予測する

# 材料科学と機械学習での「テストデータ」の違い

機械学習の根幹である「**テストデータ**」の概念がそもそも絶望的に異なる！



$$\begin{matrix} x_1 \\ x_2 \end{matrix} \rightarrow \boxed{f} \rightarrow y$$



得られているデータ  
(訓練データ)

**機械学習** データ領域外は諦める(小確率だし)

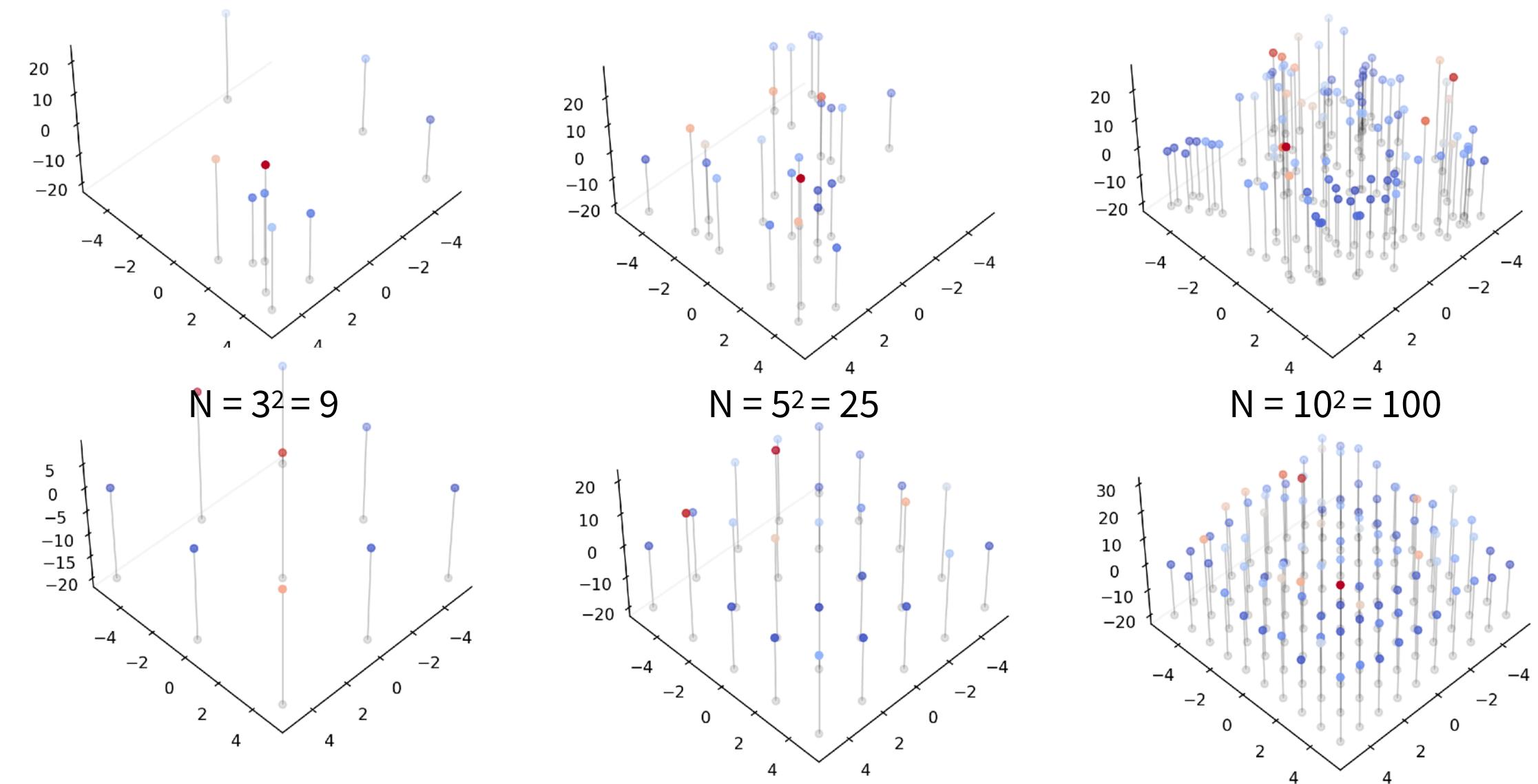
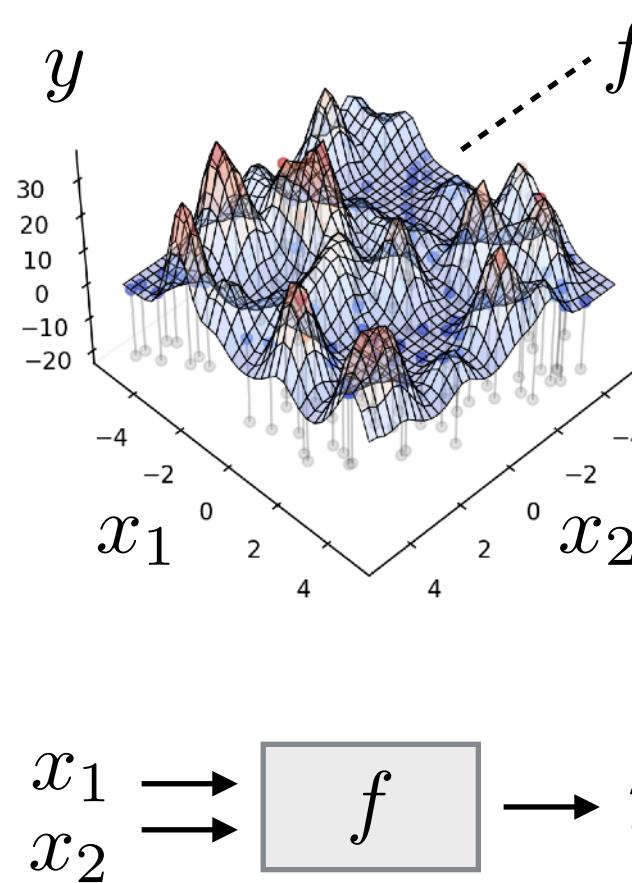
- 得られているデータが分布している領域に (=得られているデータとほぼ同じ確率分布で) 来た点  $(x_1, x_2)$  での  $y$  を予測する

**材料科学** むしろデータ領域外に関心？

- 点  $(x_1, x_2)$  は「どこでも良いので(探索)」大きな  $y$  を与える点  $(x_1, x_2)$  が知りたい

# 材料科学と機械学習での「訓練データ」の違い

探索が目的なら「訓練データ」も探索範囲を満遍なくカバーするよう取るべき。  
→ ただし、高次元では全組合せ実施(完全実施要因計画)は現実的には実施不可能



# 材料科学と機械学習での「訓練データ」の違い

実験計画法におけるFisherの三原則

## 1. 反復 (Replication)

自然現象を対象とする場合、同条件で複数回の実験が必要 (系統誤差と偶然誤差の判別)

## 2. 局所管理 (Local Control)

考慮している因子以外の背景因子はできるだけ均一になるように実験を管理する

## 3. 無作為化 (Randomization) → ランダム化比較試験 (Fisherの奥義)

データバイアスや潜在的交絡因子からのData Leakageによる疑似相関で予測が当たってしまう事故を防ぐため、制御可能な因子はすべてランダムに割り付けを行う

これを全て満たす訓練データを得るのは(自動実験系以外では)現実的に難しい…

# 「機械発見」への道：ゴールは「学習」でも「予測」でもない

「機械発見」：予測を目的とする機械学習の前提とはかなり違う別の問題

既にあるデータのどれよりも「良いもの」の発見を求めて、既に取得したデータを活用し有望候補を絞りつつ、不確実な領域の情報を得るため新データの取得も計画

# 「機械発見」への道：ゴールは「学習」でも「予測」でもない

## 「機械発見」：予測を目的とする機械学習の前提とはかなり違う別の問題

既にあるデータのどれよりも「良いもの」の発見を求めて、既に取得したデータを活用し有望候補を絞りつつ、不確実な領域の情報を得るため新データの取得も計画

自然科学を試験台にすれば抽象論ではない「機械発見」の方法論を再び体系的に研究できる！

→ 「(科学的)発見」を合理化できるのか？は人工知能及び科学哲学の永遠の未解決課題

Herbert Simon



有川 節夫



- Simon HA, *Machine Discovery*. (1997)
- Langley PW, Simon HA, Bradshaw G, Zytkow JM, *Scientific Discovery: Computational Explorations of the Creative Process* (1987).
- 有川節夫, 機械学習から機械発見へ. (1996)
- 森下 真一・宮野 悟 編, *発見科学とデータマイニング*. (2001)

# 「機械発見」への道：ゴールは「学習」でも「予測」でもない

## 「機械発見」：予測を目的とする機械学習の前提とはかなり違う別の問題

既にあるデータのどれよりも「良いもの」の発見を求めて、既に取得したデータを活用し有望候補を絞りつつ、不確実な領域の情報を得るため新データの取得も計画

ノーベル賞＆チューリング賞

自然科：ダブル受賞の激レアさん　　：い 「機械発見」 の方法論を再び体系的に研究できる！

→ 「(科学的)発見」 を合理化できるのか？は人工知能及び科学哲学の永遠の未解決課題

Herbert Simon



有川 節夫



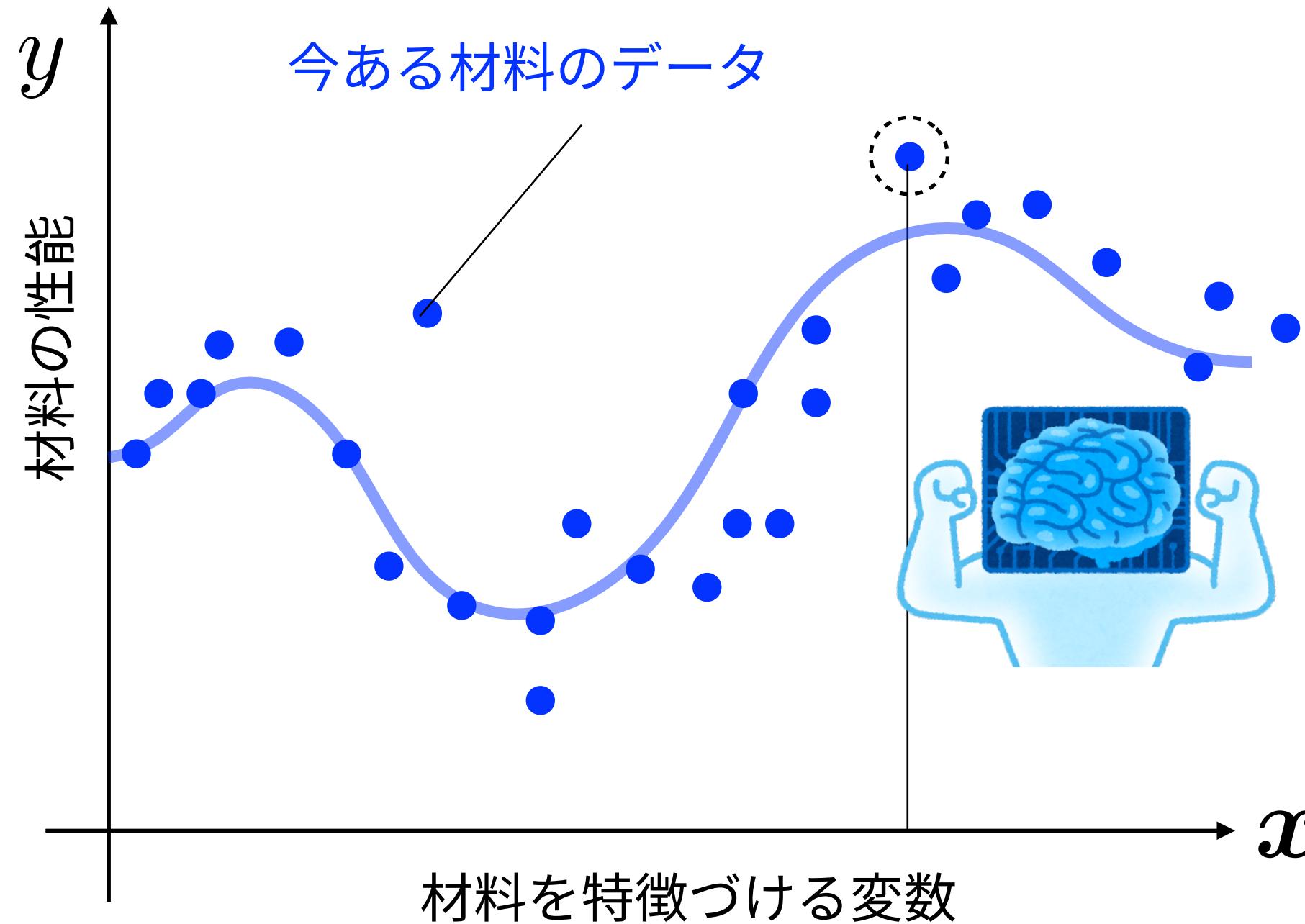
- Simon HA, *Machine Discovery*. (1997)
- Langley PW, Simon HA, Bradshaw G, Zytkow JM, *Scientific Discovery: Computational Explorations of the Creative Process* (1987).
- 有川節夫, 機械学習から機械発見へ. (1996)
- 森下 真一・宮野 悟 編, *発見科学とデータマイニング*. (2001)

# 今日のたった3つの話

この幻想が打ち砕かれてゆく過程で、機械学習研究者として得た教訓と最新知見をもとに、3つの話をしてみたいと思います…

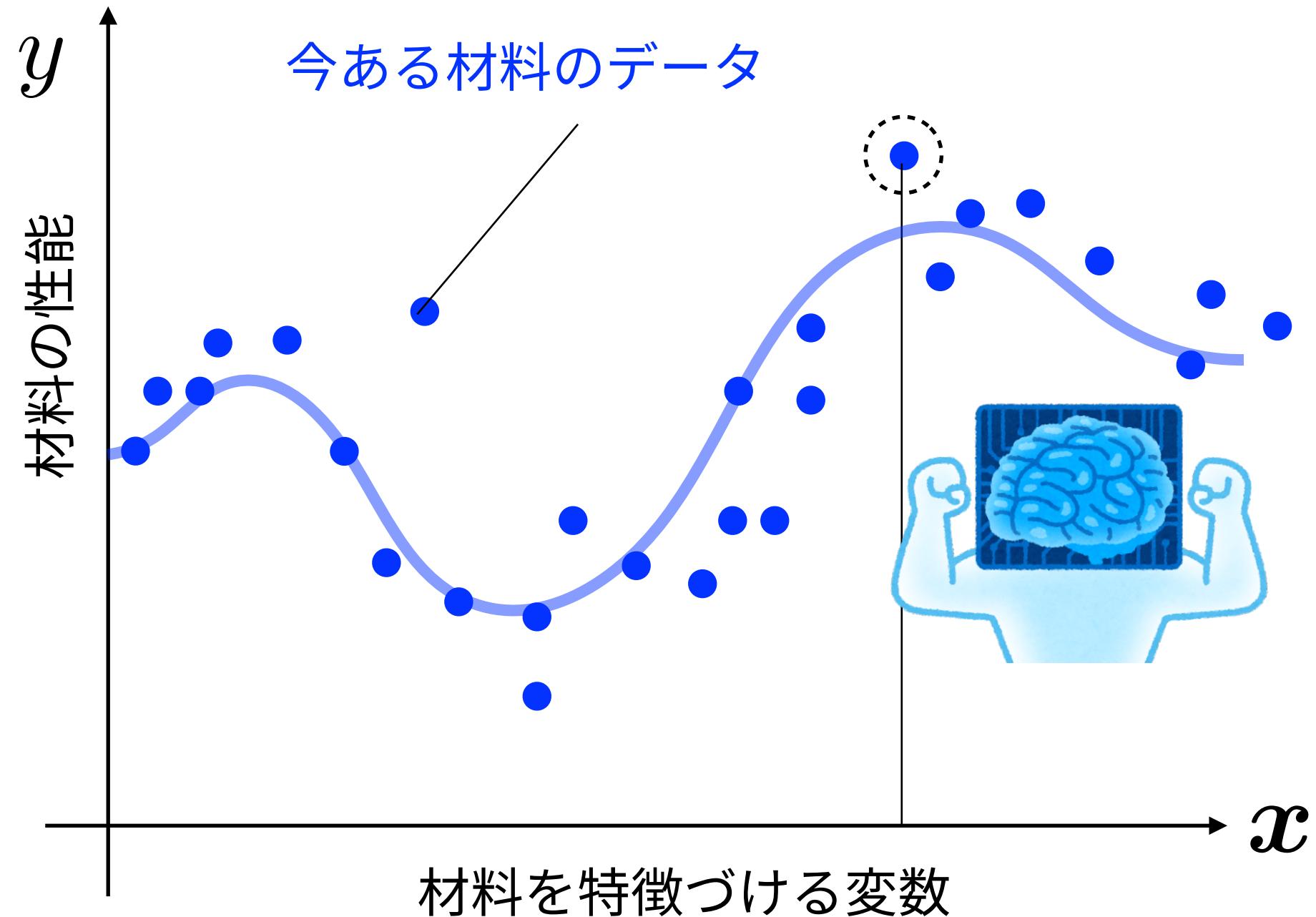
1. 「機械学習」と「材料科学」はゴールが根本的に食い違っていて、機械学習とは全く設定が異なる**「機械発見」**が求められている。
2. 既存データを学習した機械学習モデルから「自然科学の理解」に役に立つ情報を引き出すのも**「真相は藪の中」現象(羅生門効果)**により激ムズ。
3. 現実的な自然科学のタスクで機械学習に期待されていることを鑑みると**仮説フリーじゃいられない**。

# 機械学習モデルの解釈と「解釈を阻む壁」



今あるデータは予測できるんだから  
得られた予測モデルを分析して  
**「材料の性能」を左右する因子**  
について知ることができるので？

# 機械学習モデルの解釈と「解釈を阻む壁」



今あるデータは予測できるんだから  
得られた予測モデルを分析して  
**「材料の性能」を左右する因子**  
について知ることができるので？

A. 部分的にはもちろんできるが  
**解釈を阻む壁**がたくさん存在し  
想像以上に激ムズ

# Two Cultures: 予測と解釈は分けられるのか？

Leo Breiman, **Statistical Modeling: The Two Cultures.** (with comments and a rejoinder by the author), *Statistical Science*, 16(3): 199-231 (August 2001)

<https://doi.org/10.1214/ss/1009213726>

# Two Cultures: 予測と解釈は分けられるのか？

Leo Breiman, **Statistical Modeling: The Two Cultures**. (with comments and a rejoinder by the author), *Statistical Science*, 16(3): 199-231 (August 2001)

<https://doi.org/10.1214/ss/1009213726>

- 統計的モデリングには①Data Modelingと②Algorithmic Modelingの2つの文化があり  
統計学者は①にこだわりすぎて②をもっとやるべきという有名なポジションペーパー

# Two Cultures: 予測と解釈は分けられるのか？

Leo Breiman, **Statistical Modeling: The Two Cultures**. (with comments and a rejoinder by the author), *Statistical Science*, 16(3): 199-231 (August 2001)

<https://doi.org/10.1214/ss/1009213726>

- 統計的モデリングには①Data Modelingと②Algorithmic Modelingの2つの文化があり  
統計学者は①にこだわりすぎて②をもっとやるべきという有名なポジションペーパー
- ①は伝統的な統計学手法、②は機械学習手法(決定木やニューラルネットなど)のこと

# Two Cultures: 予測と解釈は分けられるのか？

Leo Breiman, **Statistical Modeling: The Two Cultures**. (with comments and a rejoinder by the author), *Statistical Science*, 16(3): 199-231 (August 2001)

<https://doi.org/10.1214/ss/1009213726>

- 統計的モデリングには①Data Modelingと②Algorithmic Modelingの2つの文化があり  
統計学者は①にこだわりすぎて②をもっとやるべきという有名なポジションペーパー
- ①は伝統的な統計学手法、②は機械学習手法(決定木やニューラルネットなど)のこと
- 題名はCPスノーの借用で①と②の間には深刻な相互不信と無理解があることを示唆

# Two Cultures: 予測と解釈は分けられるのか？

Leo Breiman, **Statistical Modeling: The Two Cultures**. (with comments and a rejoinder by the author), *Statistical Science*, 16(3): 199-231 (August 2001)

<https://doi.org/10.1214/ss/1009213726>

- 統計的モデリングには①Data Modelingと②Algorithmic Modelingの2つの文化があり  
統計学者は①にこだわりすぎて②をもっとやるべきという有名なポジションペーパー
- ①は伝統的な統計学手法、②は機械学習手法(決定木やニューラルネットなど)のこと
- 題名はCPスノーの借用で①と②の間には深刻な相互不信と無理解があることを示唆
- 2001年と20年以上前の主張ながら、実用レベルでは②が隆盛する現在を予見させる

# Two Cultures: 予測と解釈は分けられるのか？

Leo Breiman, **Statistical Modeling: The Two Cultures**. (with comments and a rejoinder by the author), *Statistical Science*, 16(3): 199-231 (August 2001)

<https://doi.org/10.1214/ss/1009213726>

- 統計的モデリングには①Data Modelingと②Algorithmic Modelingの2つの文化があり  
統計学者は①にこだわりすぎて②をもっとやるべきという有名なポジションペーパー
- ①は伝統的な統計学手法、②は機械学習手法(決定木やニューラルネットなど)のこと
- 題名はCPスノーの借用で①と②の間には深刻な相互不信と無理解があることを示唆
- 2001年と20年以上前の主張ながら、実用レベルでは②が隆盛する現在を予見させる
- 本稿にはCoxやEfronなど統計学の重鎮の(批判的な)コメントと回答があり興味深い

# Two Cultures: 予測と解釈は分けられるのか？

Leo Breiman, **Statistical Modeling: The Two Cultures**. (with comments and a rejoinder by the author), *Statistical Science*, 16(3): 199-231 (August 2001)

<https://doi.org/10.1214/ss/1009213726>

- 統計的モデリングには①Data Modelingと②Algorithmic Modelingの2つの文化があり  
統計学者は①にこだわりすぎて②をもっとやるべきという有名なポジションペーパー
- ①は伝統的な統計学手法、②は機械学習手法(決定木やニューラルネットなど)のこと
- 題名はCPスノーの借用で①と②の間には深刻な相互不信と無理解があることを示唆
- 2001年と20年以前の主張ながら、実用レベルでは②が隆盛する現在を予見させる
- 本稿にはCoxやEfronなど統計学の重鎮の(批判的な)コメントと回答があり興味深い
- 20周年の2021年にObservational Studies誌がこの論文を今振り返る特集号を企画

# Two Cultures: 予測と解釈は分けられるのか？

この論文の最大の要点は「予測」と「解釈」の問題を明確に分けたこと

*Breiman's main point is: If you want prediction, do prediction for its own sake and **forget about the illusion of representing nature.** (Judea Pearl)*

<https://doi.org/10.1353/obs.2021.0008>

だが「予測」だけできれば良いわけではない問題は機械学習が身近になった今再燃！

# Two Cultures: 予測と解釈は分けられるのか？

この論文の最大の要点は「予測」と「解釈」の問題を明確に分けたこと

*Breiman's main point is: If you want prediction, do prediction for its own sake and **forget about the illusion of representing nature.** (Judea Pearl)*

<https://doi.org/10.1353/obs.2021.0008>

だが「予測」だけできれば良いわけではない問題は機械学習が身近になった今再燃！

論文で「**Three Lessons**」と要約された3つの問題は現在も「解釈を阻む壁」の中心

*There have been particularly exciting developments in the last five years.  
What has been learned? The **three lessons** that seem most important to one:*

**Rashomon**: the multiplicity of good models;  
**Occam**: the conflict between simplicity and accuracy;  
**Bellman**: dimensionality—curse or blessing.

# ① Rashomon: the multiplicity of good models

やぶ【藪】の中（なか）

②(芥川龍之介の作品「藪の中」から)関係者のいうことが食い違って、真相がわからないことをいう。「真相は藪の中だ」(精選版 日本国語大辞典より)（

- ・ 「Rashomon」とは1950年の黒沢映画。原作は芥川の「**藪の中**」(+「羅生門」)

# ① Rashomon: the multiplicity of good models

やぶ【藪】の中（なか）

②(芥川龍之介の作品「藪の中」から) 関係者のいうことが食い違って、真相がわからないことをいう。「真相は藪の中だ」(精選版 日本国語大辞典より) (

- ・ 「Rashomon」とは1950年の黒沢映画。原作は芥川の「藪の中」(+「羅生門」)
- ・ **「Rashomon Effect」(羅生門効果): 良い機械学習モデルの多重性**  
手元の1つの検証データで予測精度が同程度に良い機械学習モデルはたくさん作れる！

# ① Rashomon: the multiplicity of good models

やぶ【藪】の中（なか）

②(芥川龍之介の作品「藪の中」から) 関係者のいうことが食い違って、真相がわからないことをいう。「真相は藪の中だ」(精選版 日本国語大辞典より) (

- ・ 「Rashomon」とは1950年の黒沢映画。原作は芥川の「藪の中」 (+「羅生門」)
- ・ **「Rashomon Effect」(羅生門効果): 良い機械学習モデルの多重性**  
手元の1つの検証データで予測精度が同程度に良い機械学習モデルはたくさん作れる！
- ・ 例えば、機械学習コンペを開くと、上位解法は精度面ではほぼ同等だが、内容は色々と異なる場合が典型的。では、どのモデルを「解釈」すべき?? (まさに真相は藪の中…)

# ① Rashomon: the multiplicity of good models

やぶ【藪】の中（なか）

②(芥川龍之介の作品「藪の中」から) 関係者のいうことが食い違って、真相がわからないことをいう。「真相は藪の中だ」(精選版 日本国語大辞典より) (

- ・ 「Rashomon」とは1950年の黒沢映画。原作は芥川の「藪の中」 (+「羅生門」)
- ・ **「Rashomon Effect」(羅生門効果): 良い機械学習モデルの多重性**  
手元の1つの検証データで予測精度が同程度に良い機械学習モデルはたくさん作れる！
- ・ 例えば、機械学習コンペを開くと、上位解法は精度面ではほぼ同等だが、内容は色々と異なる場合が典型的。では、どのモデルを「解釈」すべき?? (まさに真相は藪の中…)
- ・ 本質的には「予測精度を見積もるのにもデータが必要」であり、訓練データもその検証データも有限なことに起因する問題。(データがない余白で色々自由にできてしまう)

# ① Rashomon: the multiplicity of good models

- **Underspecification**

「訓練データとは別の検証データでの精度が良いモデルを採用する」という機械学習の標準的パイプラインで得られる予測モデルと「本当に望まれる予測モデル」の間にはギャップがある

- 「用意した1つの検証データでの評価」では定めきれない(specifyしきれない)自由度が存在。つまり羅生門効果は「データから決めきれない謎の自由度と恣意性(帰納バイアス)」に起因。

# ① Rashomon: the multiplicity of good models

- **Underspecification**

「訓練データとは別の検証データでの精度が良いモデルを採用する」という機械学習の標準的パイプラインで得られる予測モデルと「本当に望まれる予測モデル」の間にはギャップがある

- 「用意した1つの検証データでの評価」では定めきれない(specifyしきれない)自由度が存在。つまり羅生門効果は「データから決めきれない謎の自由度と恣意性(帰納バイアス)」に起因。
- このUnderspecificationはデータの質や量ともに十分配慮してきた実際の実用事例でも広く起こっており深刻な問題を引き起こしうるという報告がGoogleからなされた



The latest from Google Research

## How Underspecification Presents Challenges for Machine Learning

Monday, October 18, 2021

Posted by Alex D'Amour and Katherine Heller, Research Scientists, Google Research

Machine learning (ML) models are being used more widely today than ever before and are becoming increasingly impactful. However, they often exhibit unexpected behavior when they are used in real-world domains. For example, computer vision models can exhibit surprising sensitivity to irrelevant features, while natural language processing models can depend unpredictably on demographic correlations not directly indicated by the text. Some reasons for these failures are

arXiv.org > cs > arXiv:2011.03395

Search...

Help | Advanced S

Computer Science > Machine Learning

[Submitted on 6 Nov 2020 (v1), last revised 24 Nov 2020 (this version, v2)]

## Underspecification Presents Challenges for Credibility in Modern Machine Learning

Alexander D'Amour, Katherine Heller, Dan Moldovan, Ben Adlam, Babak Alipanahi, Alex Beutel, Christina Chen, Jonathan Deaton, Jacob Eisenstein, Matthew D. Hoffman, Farhad Hormozdiari, Neil Houlsby, Shaobo Hou, Ghassen Jerfel, Alan Karthikesalingam, Mario Lucic, Yian Ma, Cory McLean, Diana Mincu, Akinori Mitani, Andrea Montanari, Zachary Nado, Vivek Natarajan, Christopher Nielson, Thomas F. Osborne, Rajiv Raman, Kim Ramasamy, Rory Sayres, Jessica Schrouff, Martin Seneviratne, Shannon Sequeira, Harini Suresh, Victor Veitch, Max Vladymyrov, Xuezhi Wang, Kellie Webster, Steve Yadlowsky, Taedong Yun, Xiaohua Zhai, D. Sculley

## ② Occam: the conflict between simplicity and accuracy

現代の機械学習モデルは色々な予測タスクが実用レベルで解けるようになった代償として、死ぬほど大自由度になり、学習にも多量のデータを必要とする！

### ① 高次元性：入力変数が多すぎ！

- ✓ 機械学習は入力されてない情報を全く考慮してくれない… (擬似相関リスク)
- ✓ とりあえず色々な変数を入れがち

画像そのままを入力する場合

20×20 ピクセルのカラー画像 → 1200変数

1000×1000 ピクセルのカラー画像 → 300万変数

### ② 過剰パラメタ化：パラメタ数が多すぎ！

画像 ResNet50: 2600万パラメタ  
ResNet101: 4500万パラメタ  
EfficientNet-B7: 6600万パラメタ  
VGG19: 1億4400万パラメタ

言語 12-layer, 12-heads BERT: 1億1000万パラメタ  
24-layer, 16-heads BERT: 3億3600万パラメタ  
GPT-2 XL: 15億5800万パラメタ  
GPT-3: 1750億パラメタ

## ② Occam: the conflict between simplicity and accuracy

現代の機械学習モデルは色々な予測タスクが実用レベルで解けるようになった代償として、死ぬほど大自由度になり、学習にも多量のデータを必要とする！

### ① 高次元性：入力変数が多すぎ！

- ✓ 機械学習は入力されてない情報を全く考慮してくれない… (擬似相関リスク)
- ✓ とりあえず色々な変数を入れがち

画像そのままを入力する場合

20×20 ピクセルのカラー画像 → 1200変数

1000×1000 ピクセルのカラー画像 → 300万変数

### ② 過剰パラメタ化：パラメタ数が多すぎ！

画像 ResNet50: 2600万パラメタ  
ResNet101: 4500万パラメタ  
EfficientNet-B7: 6600万パラメタ  
VGG19: 1億4400万パラメタ

言語 12-layer, 12-heads BERT: 1億1000万パラメタ  
24-layer, 16-heads BERT: 3億3600万パラメタ  
GPT-2 XL: 15億5800万パラメタ  
GPT-3: 1750億パラメタ

これらのモデルは複雑すぎて解釈可能ではないが、だからと言って例えば、予測精度はショボいが5変数の線形回帰(解釈しやすい)を解釈とすることを正当化できるだろうか？

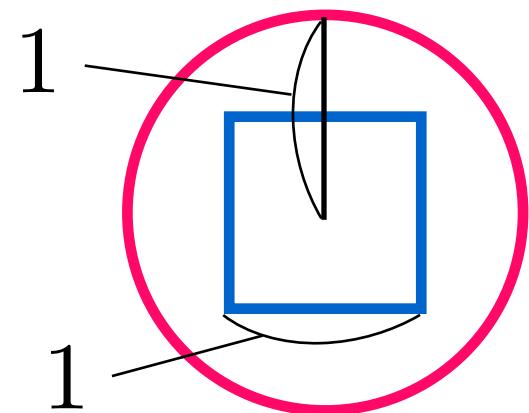
### ③ Bellman: dimensionality—curse or blessing

入力空間・パラメタ空間の高次元性は現代的機械学習の特徴 (恩恵も不都合も色々)  
→しかし「高次元」は人間が直観的に把握するのがそもそも難しい…

### ③ Bellman: dimensionality—curse or blessing

入力空間・パラメタ空間の高次元性は現代的機械学習の特徴 (恩恵も不都合も色々)  
→しかし「高次元」は人間が直観的に把握するのがそもそも難しい…

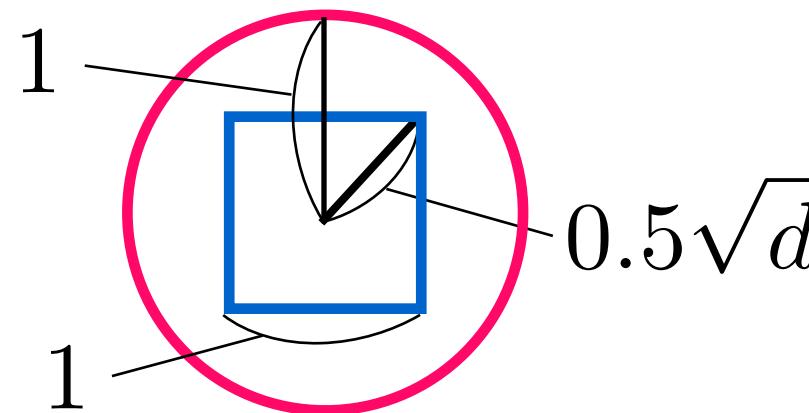
例) 半径1の球の中に辺の長さが1の立方体を考える (ただし、d次元空間で)



### ③ Bellman: dimensionality—curse or blessing

入力空間・パラメタ空間の高次元性は現代的機械学習の特徴 (恩恵も不都合も色々)  
→しかし「高次元」は人間が直観的に把握するのがそもそも難しい…

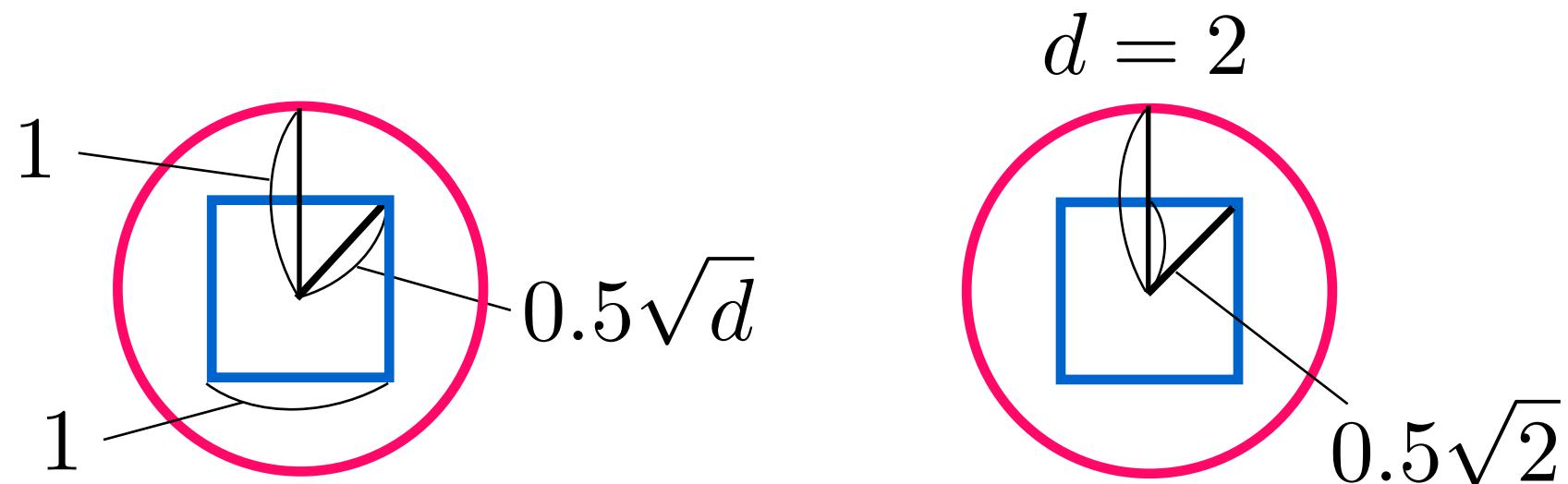
例) 半径1の球の中に辺の長さが1の立方体を考える (ただし、d次元空間で)



### ③ Bellman: dimensionality—curse or blessing

入力空間・パラメタ空間の高次元性は現代的機械学習の特徴 (恩恵も不都合も色々)  
→しかし「高次元」は人間が直観的に把握するのがそもそも難しい…

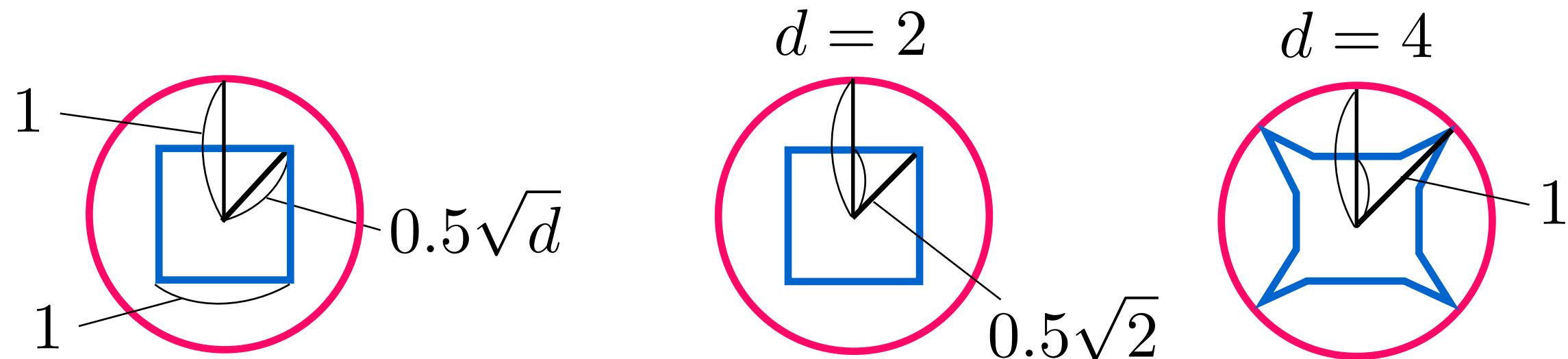
例) 半径1の球の中に辺の長さが1の立方体を考える (ただし、d次元空間で)



### ③ Bellman: dimensionality—curse or blessing

入力空間・パラメタ空間の高次元性は現代的機械学習の特徴 (恩恵も不都合も色々)  
→しかし「高次元」は人間が直観的に把握するのがそもそも難しい…

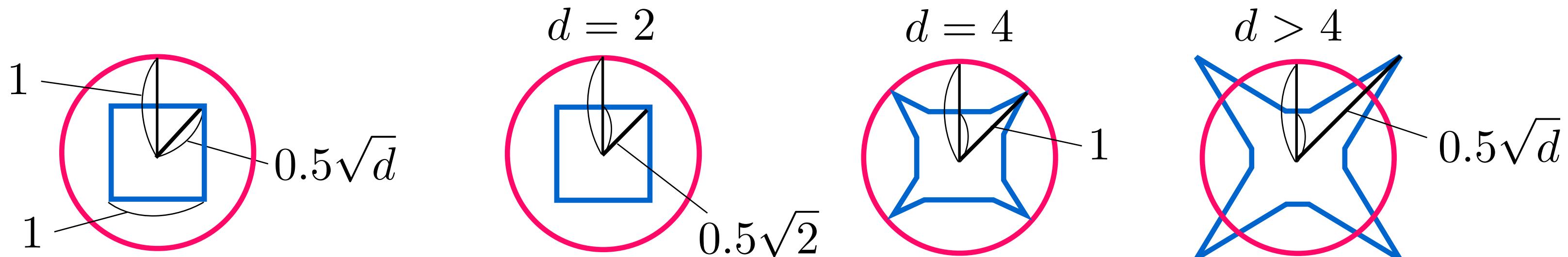
例) 半径1の球の中に辺の長さが1の立方体を考える (ただし、d次元空間で)



### ③ Bellman: dimensionality—curse or blessing

入力空間・パラメタ空間の高次元性は現代的機械学習の特徴 (恩恵も不都合も色々)  
→しかし「高次元」は人間が直観的に把握するのがそもそも難しい…

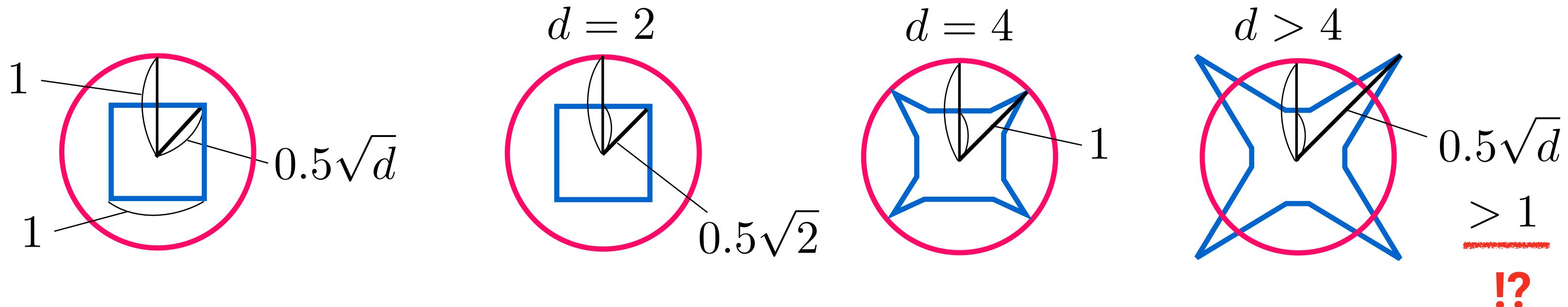
例) 半径1の球の中に辺の長さが1の立方体を考える (ただし、d次元空間で)



### ③ Bellman: dimensionality—curse or blessing

入力空間・パラメタ空間の高次元性は現代的機械学習の特徴 (恩恵も不都合も色々)  
→しかし「高次元」は人間が直観的に把握するのがそもそも難しい…

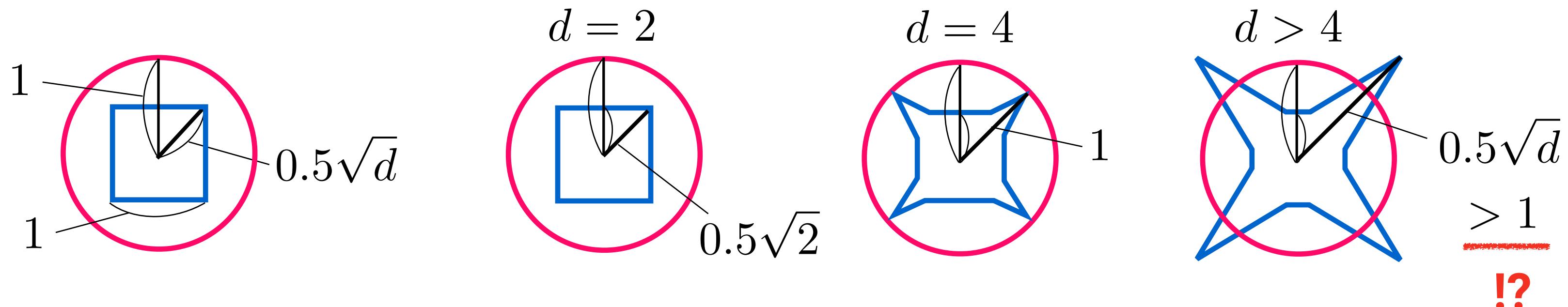
例) 半径1の球の中に辺の長さが1の立方体を考える (ただし、d次元空間で)



### ③ Bellman: dimensionality—curse or blessing

入力空間・パラメタ空間の高次元性は現代的機械学習の特徴 (恩恵も不都合も色々)  
→しかし「高次元」は人間が直観的に把握するのがそもそも難しい…

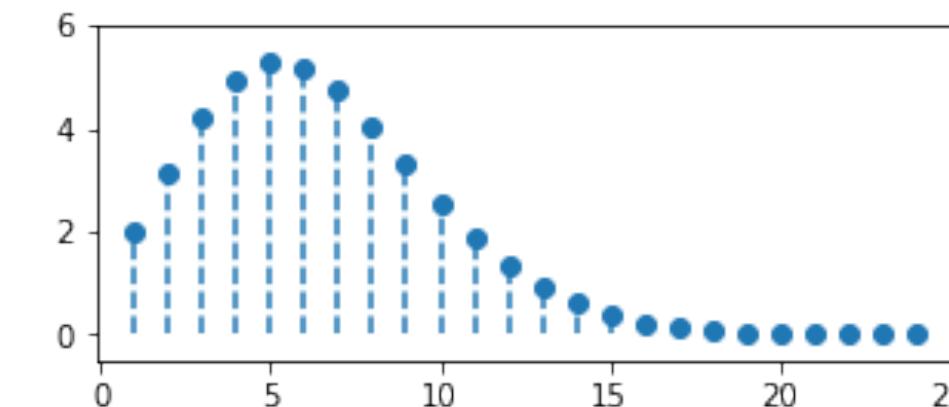
例) 半径1の球の中に辺の長さが1の立方体を考える (ただし、d次元空間で)



d次元での

□ の体積 =  $1^d = 1$

○ の体積 =  $\frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{\frac{d}{2} \cdot \Gamma(\frac{d}{2})} \rightarrow 0 \quad (d \rightarrow \infty)$



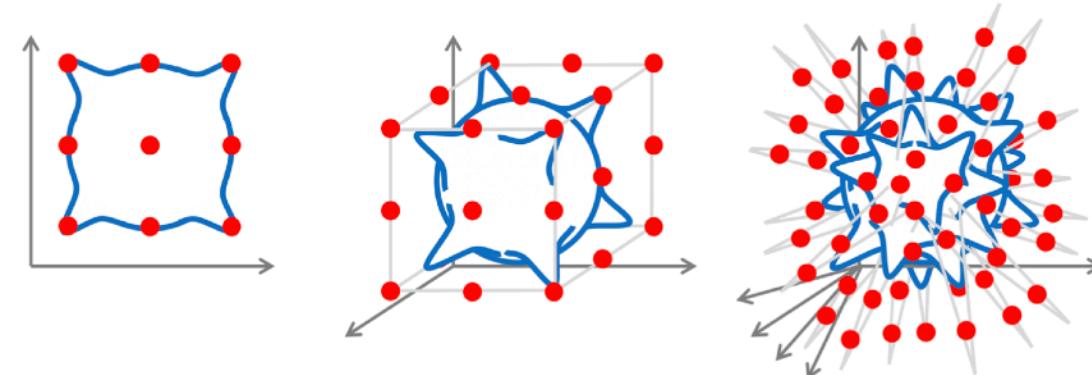
### ③ Bellman: dimensionality—curse or blessing

数学的に分かっている不都合な真実 (次元の呪い)

### ③ Bellman: dimensionality—curse or blessing

数学的に分かっている不都合な真実 (次元の呪い)

1. 入力が似ていたら出力も似ているという緩い連続性(Lipschitz連續性)しか課さない場合、曲面(関数)全域を近似するのに次元dの指數個の訓練サンプルが必要

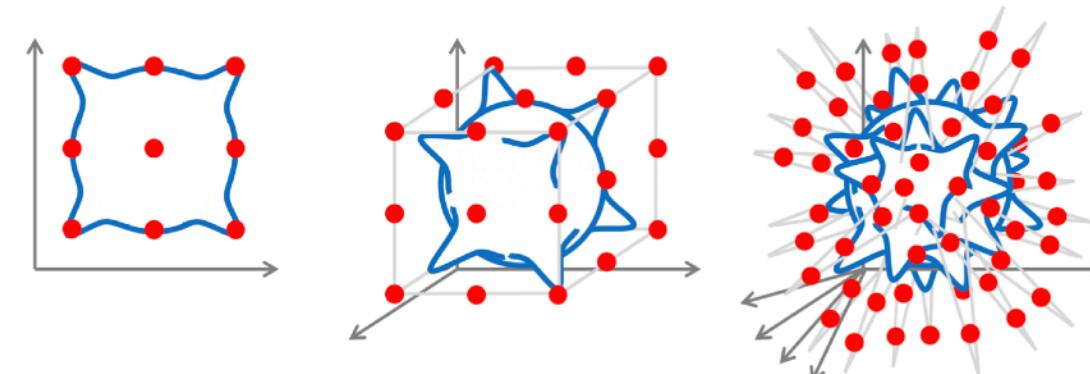


d=2で「100点( $10^2$ )くらい」の稠密さを求めるなら  
d=10で既に $10^{10}=100\text{億点}$ 必要

### ③ Bellman: dimensionality—curse or blessing

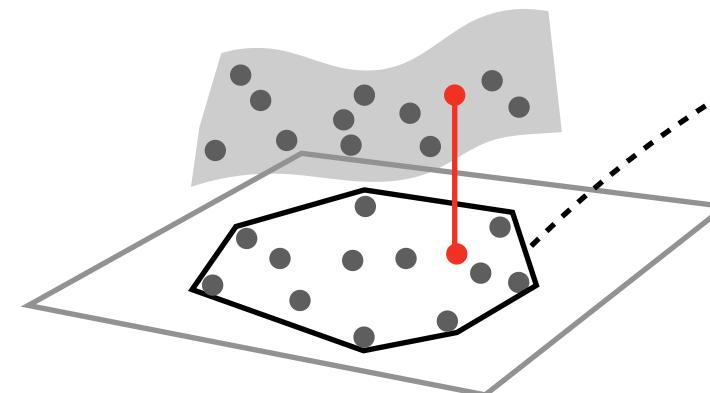
数学的に分かっている不都合な真実(次元の呪い)

1. 入力が似ていたら出力も似ているという緩い連続性(Lipschitz連續性)しか課さない場合、曲面(関数)全域を近似するのに次元dの指數個の訓練サンプルが必要



d=2で「100点( $10^2$ )くらい」の稠密さを求めるなら  
d=10で既に $10^{10}=100\text{億点}$ 必要

2. 高次元( $d>100$ )では、訓練点すべてのなす凸包の中に点が落ちる確率はほぼゼロ



機械学習は似た訓練データを内挿して予測すると考えるのが直観的だが、高次元ではこの意味での内挿が起こる確率はゼロ… (“データ領域外”での予測の挙動が支配的になる)

# 今日のたった3つの話

この幻想が打ち砕かれてゆく過程で、機械学習研究者として得た教訓と最新知見をもとに、3つの話をしてみたいと思います…

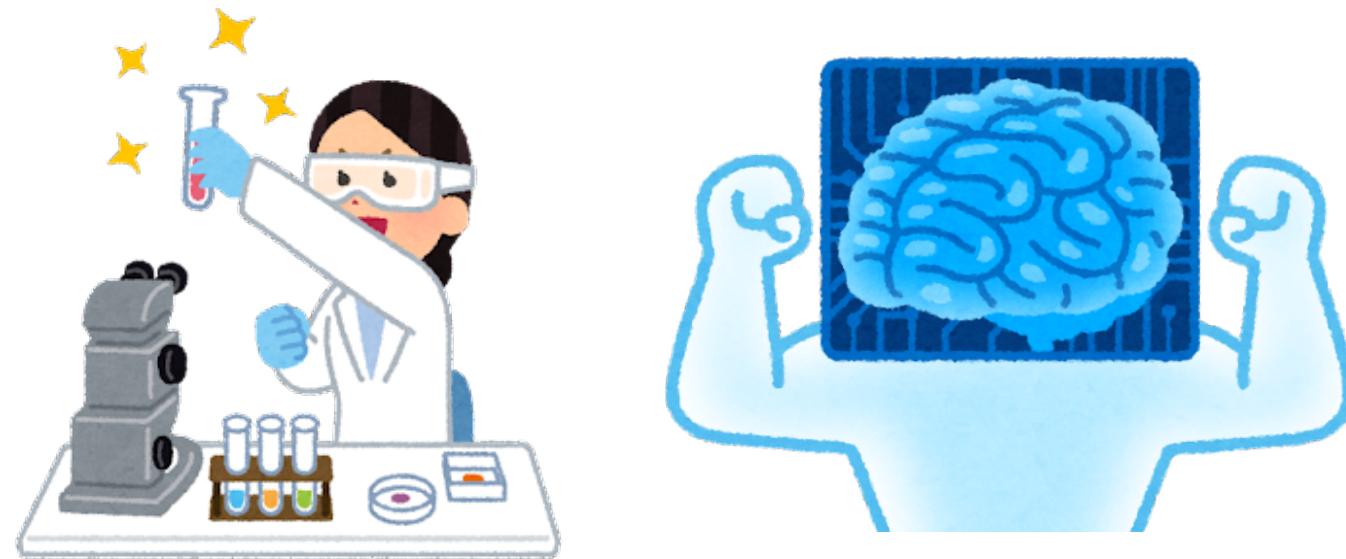
1. 「機械学習」と「材料科学」はゴールが根本的に食い違っていて、機械学習とは全く設定が異なる「**機械発見**」が求められている。
2. 既存データを学習した機械学習モデルから「自然科学の理解」に役に立つ情報を引き出すのも「**真相は藪の中**」現象(羅生門効果)により激ムズ。
3. 現実的な自然科学のタスクで機械学習に期待されていることを鑑みると**仮説フリーじゃいられない**。

# 機械学習は科学的発見・科学的理解に寄与できるか？



- そもそも「機械学習」「Informatics」「データ科学」を使ってみようという背景には、多くの自然科学(実験科学)が未だ経験科学的であり、運や惰性まかせの非合理的な部分がかなりあるのでは、という反省がある

# 機械学習は科学的発見・科学的理解に寄与できるか？



- そもそも「機械学習」「Informatics」「データ科学」を使ってみようという背景には、多くの自然科学(実験科学)が未だ経験科学的であり、運や惰性まかせの非合理的な部分がかなりあるのでは、という反省がある
- 限定合理性(Herbert Simon!)**：人間はその知識や計算能力に関する認知能力に限界があり、完全な合理性を持ちえない(偶然と惰性の中を生かされている)

# 機械学習は科学的発見・科学的理解に寄与できるか？



- そもそも「機械学習」「Informatics」「データ科学」を使ってみようという背景には、多くの自然科学(実験科学)が未だ経験科学的であり、運や惰性まかせの非合理的な部分がかなりあるのでは、という反省がある
- 限定合理性(Herbert Simon!)**：人間はその知識や計算能力に関する認知能力に限界があり、完全な合理性を持ちえない(偶然と惰性の中を生かされている)
- ところが統計的予測も人間とは違う「限定合理性」を伴うことが示唆される

# 失われた因果を求めて：因果推論(因果分析)と因果探索



# 失われた因果を求めて：因果推論(因果分析)と因果探索



- ナイルズは、因果分析の目的を、**XがYの原因だと証明すること**、あるいは**Yの原因を一から見つけ出すこと**だと考えていた。  
この**誤った考え方**は、今でも多くの人に見受けられる。  
だがそれは因果分析ではなく、「因果探索」が扱う問題だ。

# 失われた因果を求めて：因果推論(因果分析)と因果探索



- ナイルズは、因果分析の目的を、**XがYの原因だと証明すること**、あるいは**Yの原因を一から見つけ出すこと**だと考えていた。この**誤った考え方**は、今でも多くの人に見受けられる。だがそれは因果分析ではなく、「因果探索」が扱う問題だ。
- 因果分析は、**ただデータだけがあれば成り立つものではない**。因果分析は、データが作られるプロセスをある程度以上、理解しないければできないことだ。つまり、**データだけではわからな**いことをはじめからある程度、知っていなくてはいけない。

# 失われた因果を求めて：因果推論(因果分析)と因果探索



- ナイルズは、因果分析の目的を、**XがYの原因だと証明すること**、あるいは**Yの原因を一から見つけ出すこと**だと考えていた。この**誤った考え方**は、今でも多くの人に見受けられる。だがそれは因果分析ではなく、「因果探索」が扱う問題だ。
- 因果分析は、**ただデータだけがあれば成り立つものではない**。因果分析は、データが作られるプロセスをある程度以上、理解しないければできないことだ。つまり、**データだけではわからぬことをはじめからある程度、知っていなくてはいけない**。
- 因果分析は、相関関係だけではなく、主流の統計学を構成する他のほどのような道具とも異質である。それは、因果分析が**その使い手に主観的な関与を要求する**からだ。

# 科学と仮説：科学的理解vs科学的発見

人が事実を用いて科学をつくるのは、石を用いて家を造るようなものである。  
事実の集積が科学でないことは、石の集積が家でないのと同じことである。

アンリ・ポアンカレ「科学と仮説」



# 科学と仮説：科学的理解 vs 科学的発見

人が事実を用いて科学をつくるのは、石を用いて家を造るようなものである。  
事実の集積が科学でないことは、石の集積が家でないのと同じことである。

アンリ・ポアンカレ「科学と仮説」



- 「予測」ではなく「理解」はあくまで人間側の認知の問題であり、科学的理解を求めるなら (=因果の理解を求めるなら)、**基本的に仮説フリーではいられない。**

# 科学と仮説：科学的理解 vs 科学的発見

人が事実を用いて科学をつくるのは、石を用いて家を造るようなものである。  
事実の集積が科学でないことは、石の集積が家でないのと同じことである。

アンリ・ポアンカレ「科学と仮説」



- 「予測」ではなく「理解」はあくまで人間側の認知の問題であり、科学的理解を求めるなら (=因果の理解を求めるなら)、**基本的に仮説フリーではいられない。**

- “*Theory-driven models can be wrong. But data-driven models cannot be wrong or right. Data-driven are not trying to describe an underlying reality.*”

David Hand, KDD2018 (Keynote Talk)

[http://videolectures.net/kdd2018\\_hand\\_data\\_science/](http://videolectures.net/kdd2018_hand_data_science/)

# 科学と仮説：科学的理解vs科学的発見

人が事実を用いて科学をつくるのは、石を用いて家を造るようなものである。  
事実の集積が科学でないことは、石の集積が家でないのと同じことである。

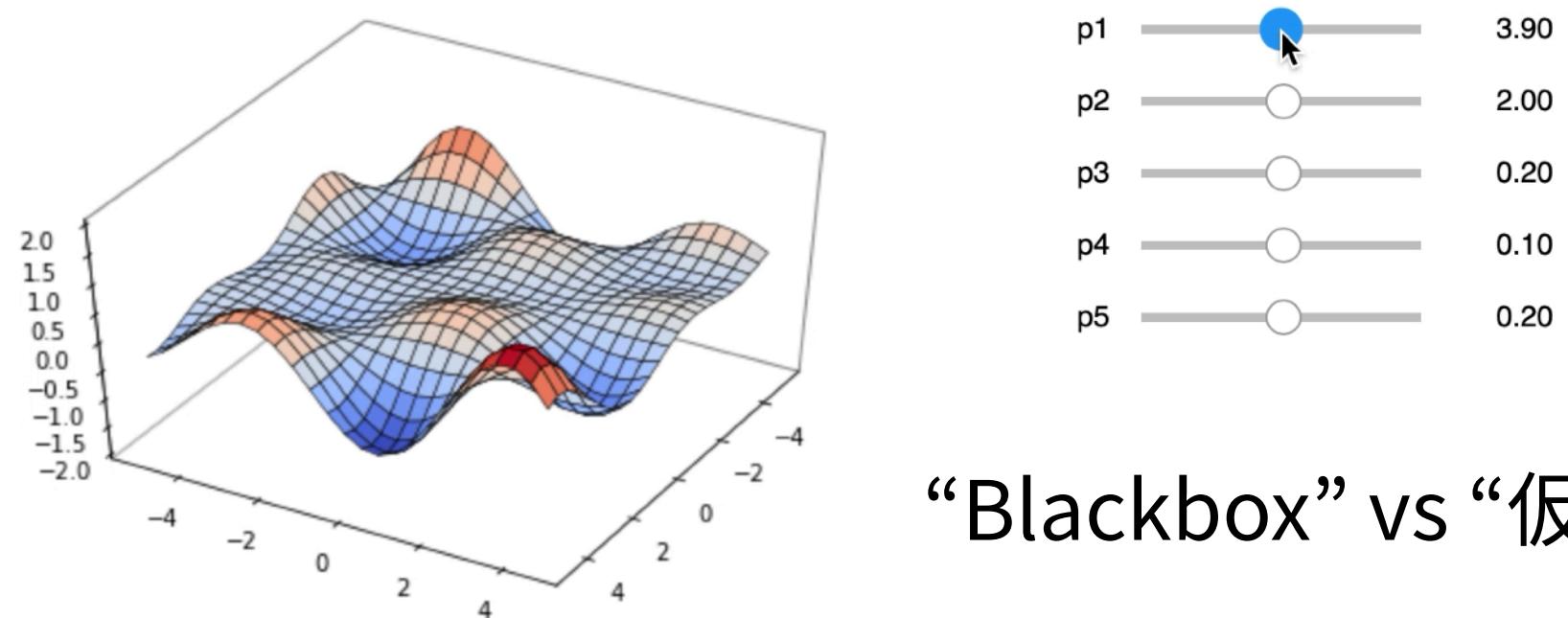
アンリ・ポアンカレ「科学と仮説」



- 「予測」ではなく「理解」はあくまで人間側の認知の問題であり、科学的理解を求めるなら (=因果の理解を求めるなら)、**基本的に仮説フリーではいられない。**
- “*Theory-driven models can be wrong. But data-driven models cannot be wrong or right. Data-driven are not trying to describe an underlying reality.*”  
David Hand, KDD2018 (Keynote Talk)  
[http://videolectures.net/kdd2018\\_hand\\_data\\_science/](http://videolectures.net/kdd2018_hand_data_science/)
- 一方、「発見」は探索空間が明確な場合は高次元探索で解ける潜在性がある！  
(私が**機械理解**や**解釈的機械学習**より「**機械発見**」に魅力を感じている理由)

# 自然科学との融合：機械学習の汎用性を諦めて

機械学習モデルはパラメタ値を変えればどんな曲面でも表現できることが美德だった

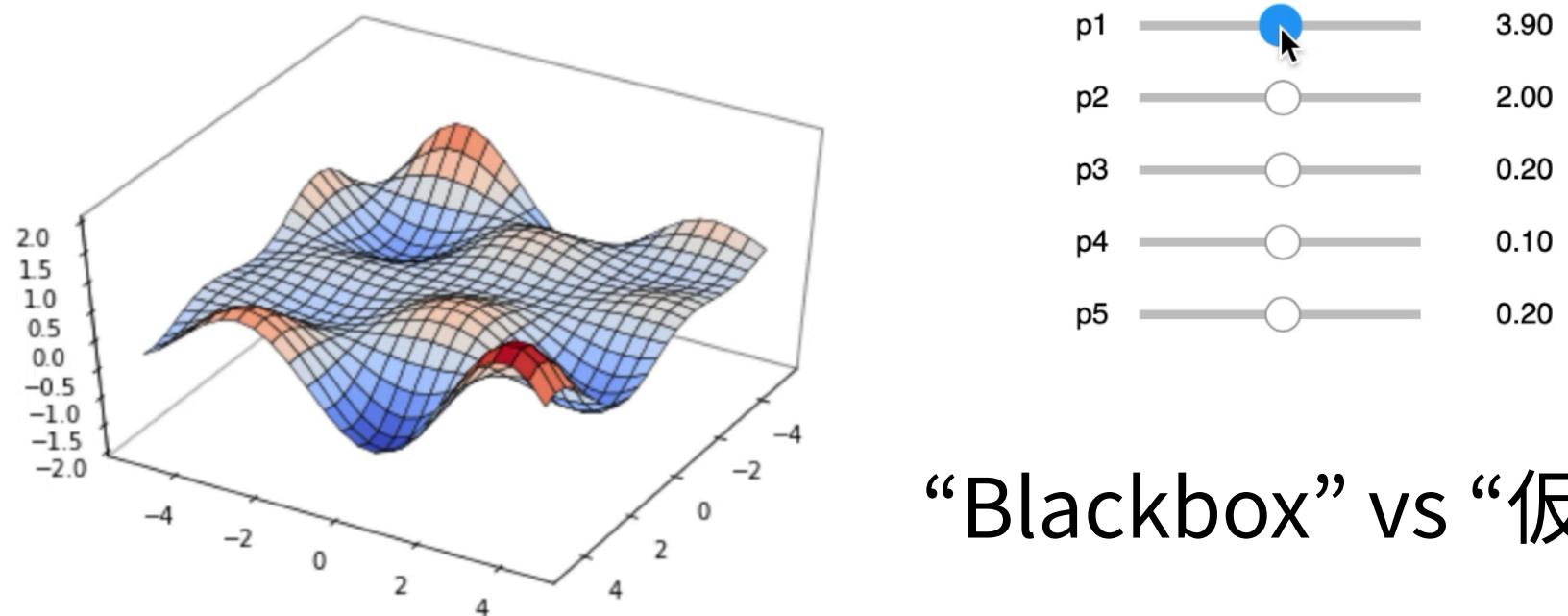


“Blackbox” vs “仮説フリー”

Universal Approximation Theorem  
全結合ニューラルネットはどんな曲面  
(関数)でも近似できる

# 自然科学との融合：機械学習の汎用性を諦めて

機械学習モデルはパラメタ値を変えればどんな曲面でも表現できることが美德だった



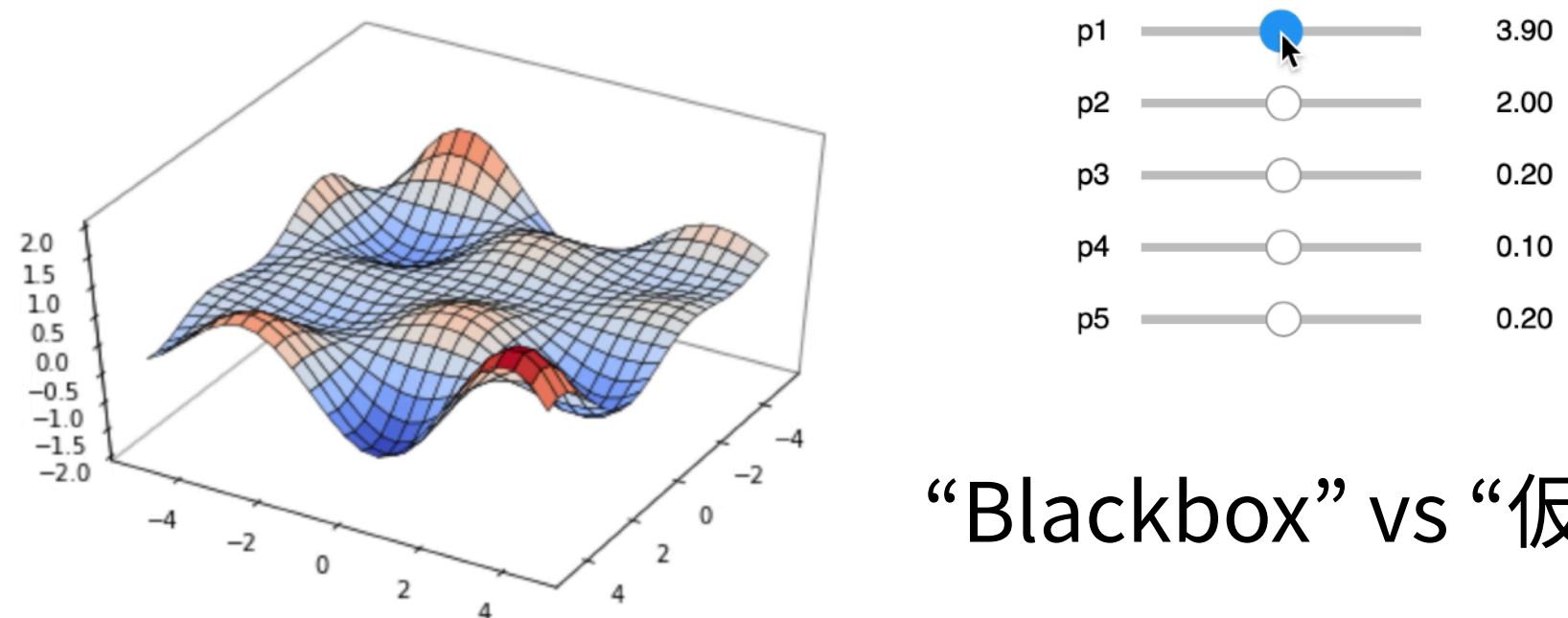
“Blackbox” vs “仮説フリー”

Universal Approximation Theorem  
全結合ニューラルネットはどんな曲面  
(関数)でも近似できる

- ところが、自然科学で使う場合、大自由度に下支えされたこの性質が「見かけ上の相関」にすぎない科学的に妥当ではない予測を引き起こす…

# 自然科学との融合：機械学習の汎用性を諦めて

機械学習モデルはパラメタ値を変えればどんな曲面でも表現できることが美德だった



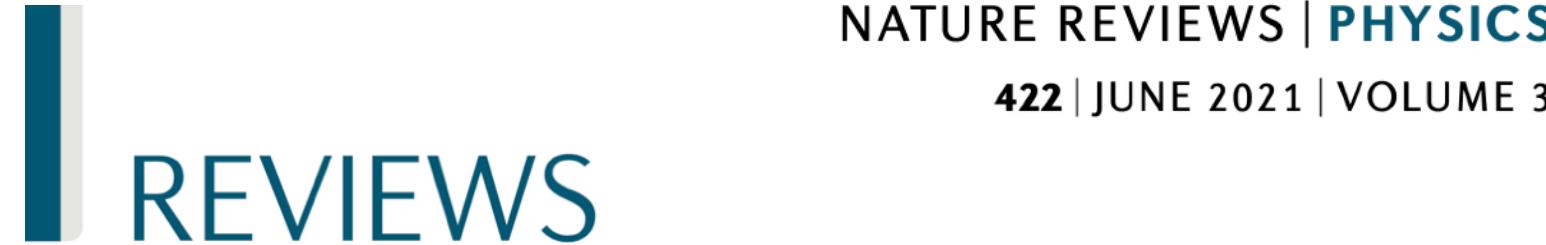
“Blackbox” vs “仮説フリー”

Universal Approximation Theorem  
全結合ニューラルネットはどんな曲面  
(関数)でも近似できる

- ところが、自然科学で使う場合、大自由度に下支えされたこの性質が「見かけ上の相関」にすぎない科学的に妥当ではない予測を引き起こす…
- 「どんな関数でも表現できる」のはまずく、科学的な理論や既知知見を総動員し「科学的に妥当でない関数は表現できない」ようにモデルを制限する方が良い！

# 例：Physics-informed ML, Geometric ML, Causal ML

<https://doi.org/10.1038/s42254-021-00314-5>



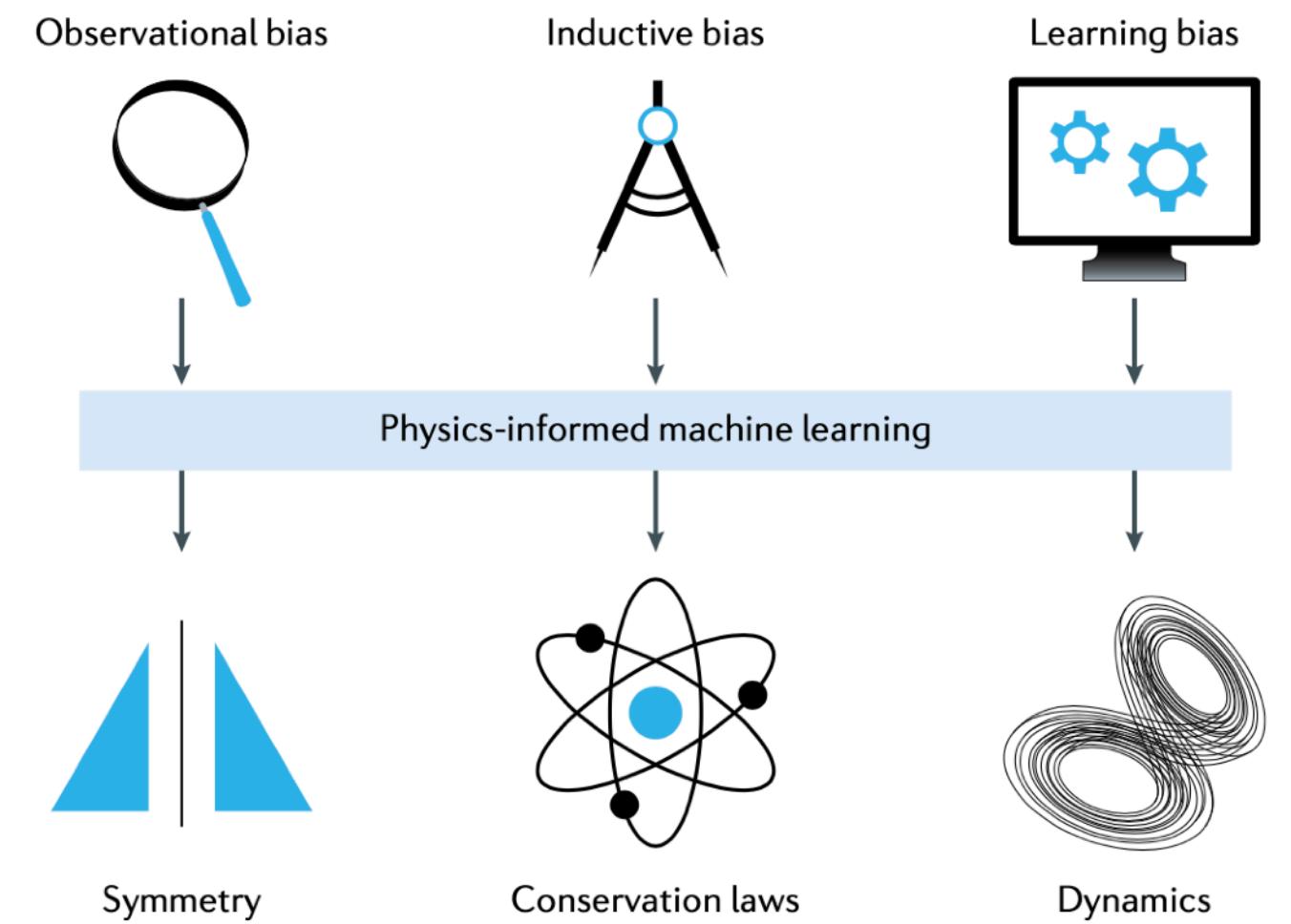
NATURE REVIEWS | PHYSICS  
422 | JUNE 2021 | VOLUME 3

## Physics-informed machine learning

George Em Karniadakis<sup>1,2</sup>✉, Ioannis G. Kevrekidis<sup>3,4</sup>, Lu Lu<sup>1</sup>, Paris Perdikaris<sup>6</sup>, Sifan Wang<sup>7</sup> and Liu Yang<sup>1</sup>

**Abstract** | Despite great progress in simulating multiphysics problems using the numerical discretization of partial differential equations (PDEs), one still cannot seamlessly incorporate noisy data into existing algorithms, mesh generation remains complex, and high-dimensional problems governed by parameterized PDEs cannot be tackled. Moreover, solving inverse problems with hidden physics is often prohibitively expensive and requires different formulations and elaborate computer codes. Machine learning has emerged as a promising alternative, but training deep neural networks requires big data, not always available for scientific problems. Instead, such networks can be trained from additional information obtained by enforcing the physical laws (for example, at random points in the continuous space-time domain). Such physics-informed learning integrates (noisy) data and mathematical models, and implements them through neural networks or other kernel-based regression networks. Moreover, it may be possible to design specialized network architectures that automatically satisfy some of the physical invariants for better accuracy, faster training and improved generalization. Here, we review some of the prevailing trends in embedding physics into machine learning, present some of the current capabilities and limitations and discuss diverse applications of physics-informed learning both for forward and inverse problems, including discovering hidden physics and tackling high-dimensional problems.

機械学習×シミュレーション  
機械学習×理論物理・理論化学・数理科学  
機械学習×数学的構造・論理学・記号操作



# 機械発見：「演繹しかない世界」の終わりの始まり…？

「材料科学・物質科学×機械学習」の分野にとどまらず、演繹的方法が唯一の方法であったあらゆる分野で、「予測」や「学習」の組込みによる発見が始まっている！

ただし下記はいずれも「問題が記述可能かつclosed」で「データ/試行が低コスト」

- プランニング・論理推論・組合せ最適化 (NP-hard問題の求解)  
Schrittwieser et al. *Mastering Atari, Go, chess and shogi by planning with a learned model.* (“MuZero”, Nature, 2020)
- 純粹数学  
Davies et al. *Advancing mathematics by guiding human intuition with AI.* (Nature, 2021)
- アルゴリズム設計  
Fawzi et al. *Discovering faster matrix multiplication algorithms with reinforcement learning.* (“AlphaTensor”, Nature, 2022)

# まとめ：今日のたった3つの話

## 機械学習と機械発見：自然科学融合が誘起するデータ科学の新展開

自然科学を試験台にすることで抽象論ではない「機械発見」の可能性と方法論を再び新しい道具で体系的に研究できる！(データ科学や人工知能の研究としても)

1. 「機械学習」と「自然科学」はゴールが根本的に食い違っていて、機械学習とは全く設定が異なる「機械発見」が求められている。
2. 既存データを学習した機械学習モデルから「自然科学の理解」に役に立つ情報を引き出すのも「真相は藪の中」現象(羅生門効果)により激ムズ。
3. 現実的な自然科学のタスクで機械学習に期待されていることを鑑みると仮説フリーじゃない。