

自然科学における機械学習と機械発見

2022年11月1日

瀧川 一学

ichigaku.takigawa@riken.jp

理化学研究所 革新知能統合研究センター
北海道大学 化学反応創成研究拠点 (ICReDD)





たきがわ いちがく
瀧川 一学

<https://itakigawa.github.io>

機械学習を研究している技術屋デス！

- うどん県高松市生まれ
- 1995～2004 北海道大 (工学研究科)
2004 博士(工学) "劣決定信号源分離の解の理論分析"
- 2005～2011 京都大 (化学研究所/薬学研究科)
バイオインフォマティクスセンター 助教
- 2012～2018 北海道大 (情報科学研究科)
大規模知識処理研究室 准教授
2015～2018 JSTさきがけ (材料インフォマティクス)
- 2019～ 北海道大学 化学反応創成研究拠点(ICReDD)
2019～ 理化学研究所 革新知能統合研究センター(AIP)

普段は京大iPS細胞研との連携ラボ@京阪奈ATRに勤務
(iPS細胞連携医学的リスク回避チーム)



たきがわ いちがく
瀧川 一学

<https://itakigawa.github.io>

と同時に機械学習のユーザでもあります！

- うどん県高松市生まれ
- 1995～2004 北海道大 (工学研究科)
2004 博士(工学) "劣決定信号源分離の解の理論分析"
- 2005～2011 京都大 (化学研究所/薬学研究科)
バイオインフォマティクスセンター 助教
- 2012～2018 北海道大 (情報科学研究科)
大規模知識処理研究室 准教授
2015～2018 JSTさきがけ (材料インフォマティクス)
- 2019～ 北海道大学 化学反応創成研究拠点(ICReDD)
2019～ 理化学研究所 革新知能統合研究センター(AIP)

普段は京大iPS細胞研との連携ラボ@京阪奈ATRに勤務
(iPS細胞連携医学的リスク回避チーム)

解説

機械学習と機械発見：データ中心型の自然科学の教訓と今後

瀧川一学^{1,2*}

Machine Learning and Machine Discovery: Lessons and Challenges of Data-Centric Natural Sciences

Ichigaku Takigawa^{1,2*}

Machine learning is increasingly becoming a daily tool for natural scientists, forging collaborations across disciplines. This article presents a brief overview from a modern machine-learning viewpoint on what machine learning is, how it can be useful for natural science research, and how it can transform our way of doing science. Every natural science field is now facing diverse experimental, simulated, and literature-based data, and trying to leverage this accessibility and multiplicity of heterogeneous views to full advantage. Lessons from data-centric multidisciplinary research over recent years well as common pitfalls and rising challenges are discussed.

今日の話：機械学習の力の光明面と暗黒面

Q. 機械学習・機械発見の技術って自然現象の理解・発見の役に立つのかな？

ライトサイド（光明面）

機械学習は「データを予測に変える」強力なテクノロジー！

- ✓ 表現学習と微分可能プログラミング
- ✓ 帰納バイアスの設計、第一原理やシミュレーションとの融合、大規模事前学習

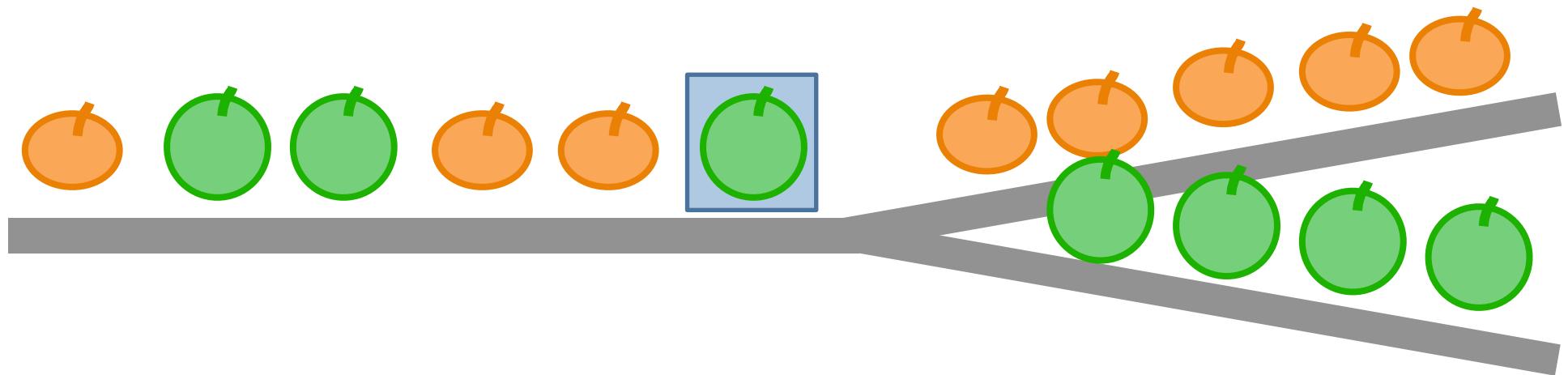
ダークサイド（暗黒面）

自然科学の実現象データで使うのはいろいろ激ムズ！！！

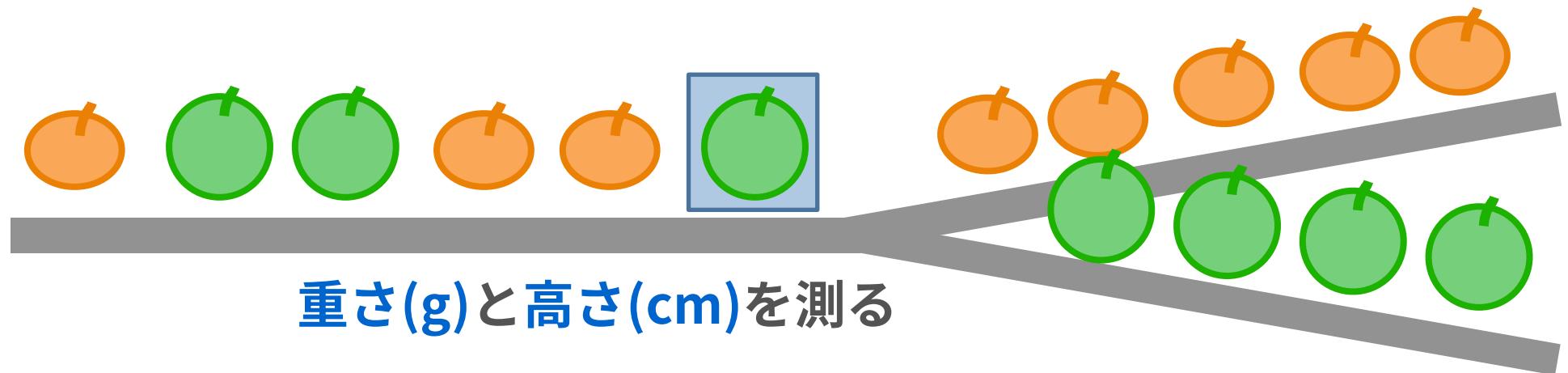
- ✓ 羅生門効果とUnderspecification
- ✓ 「予測ができること」は「理解」や「発見」ができるることを意味しない！

フォースと共にあらんことを May the ML force be with you...

機械学習は「データを予測に変える」技術

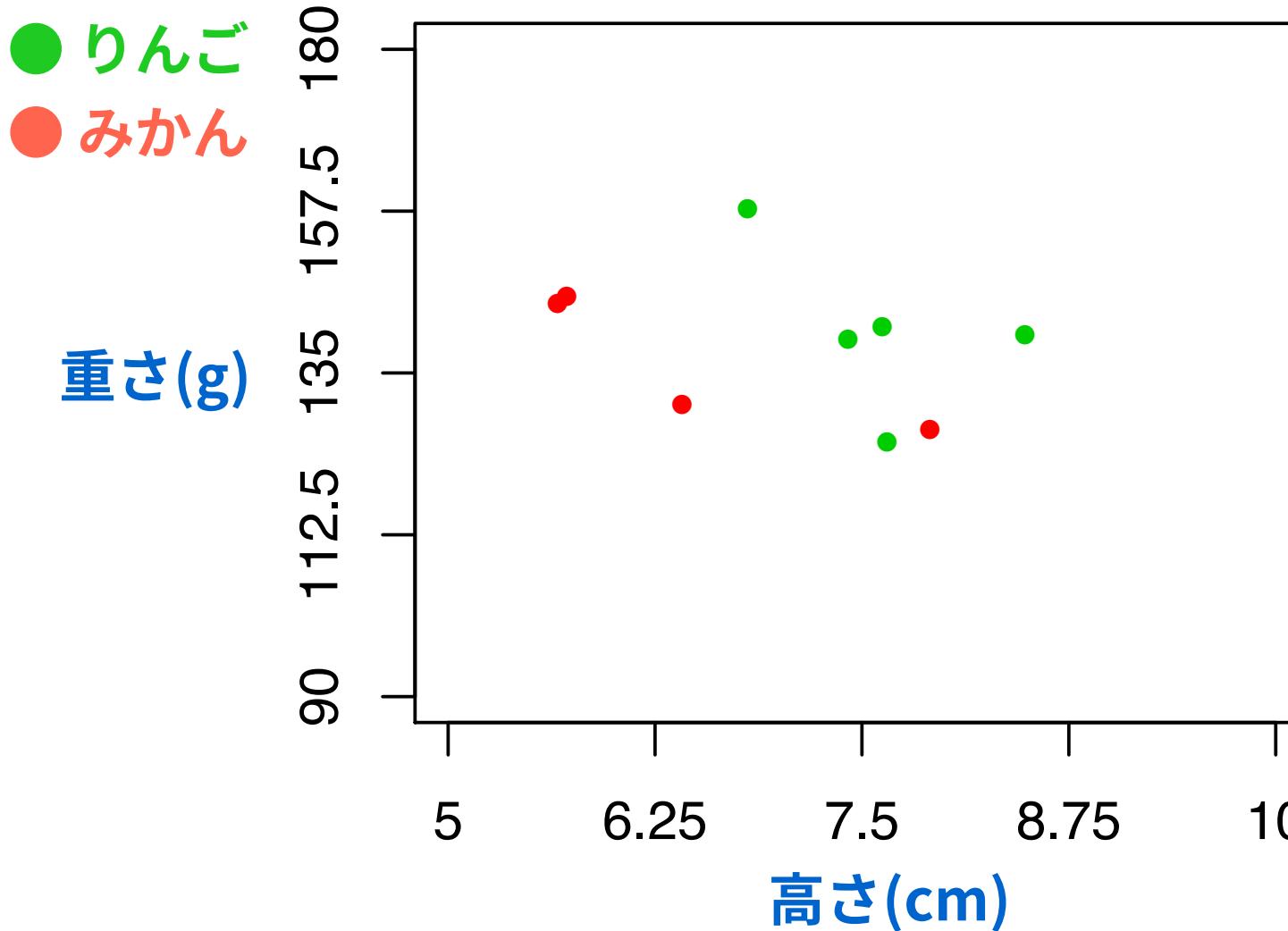
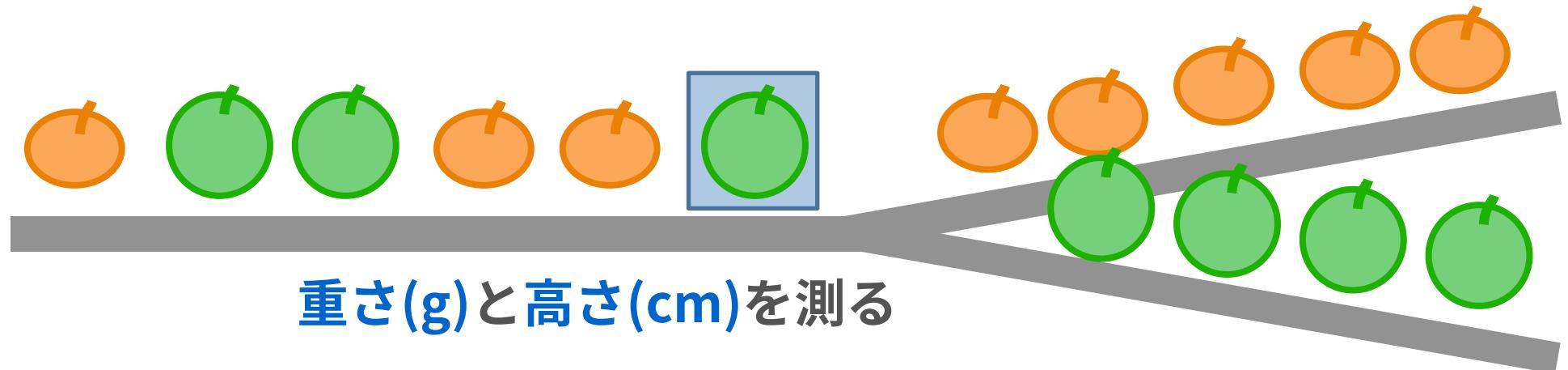


機械学習は「データを予測に変える」技術

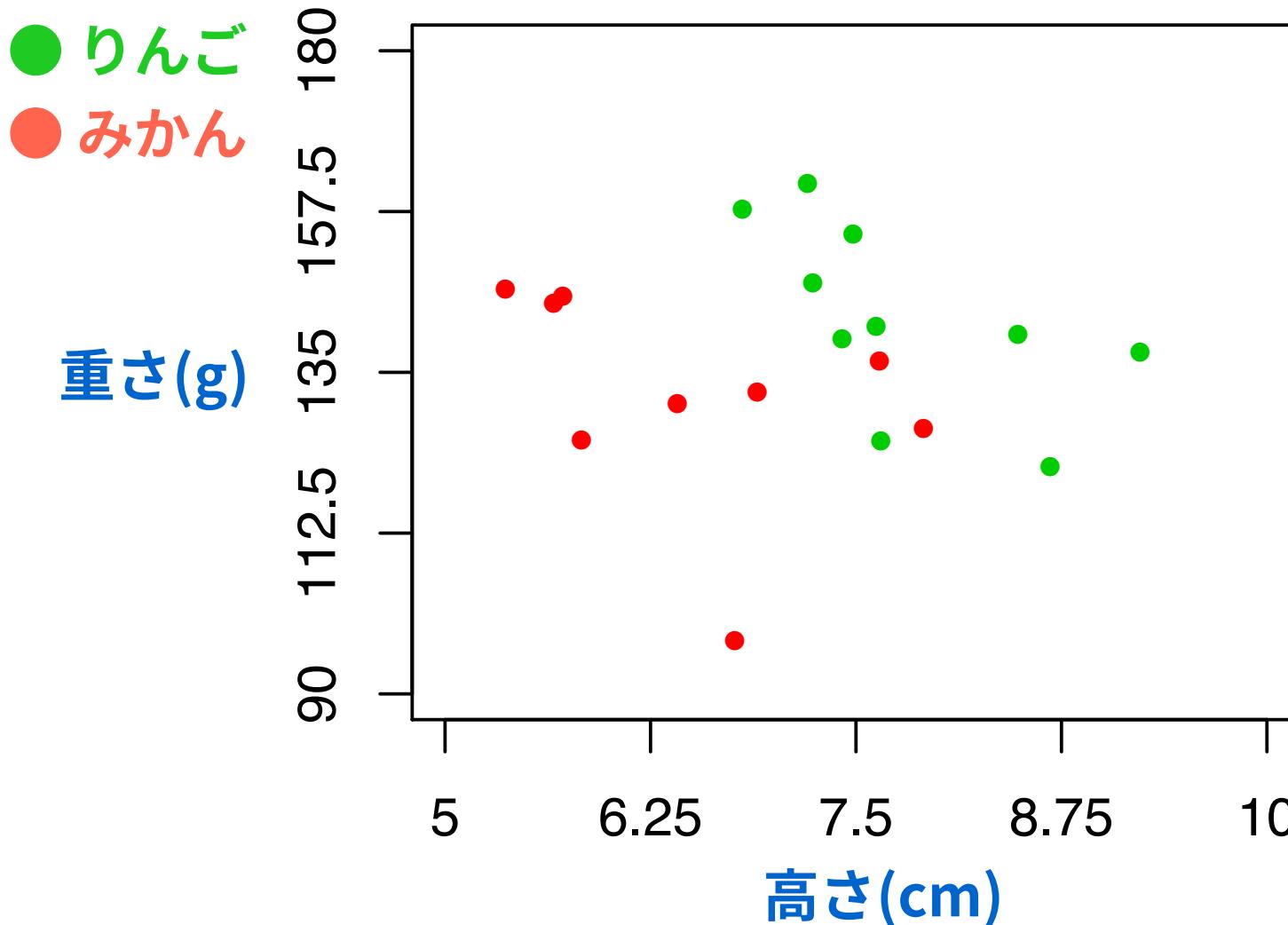
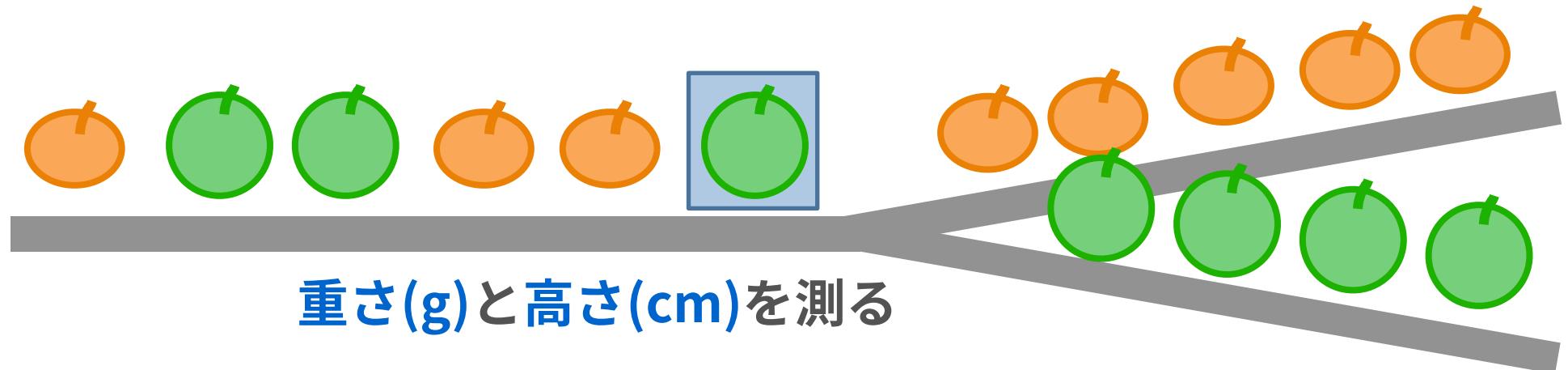


重さ(g)と高さ(cm)を測る

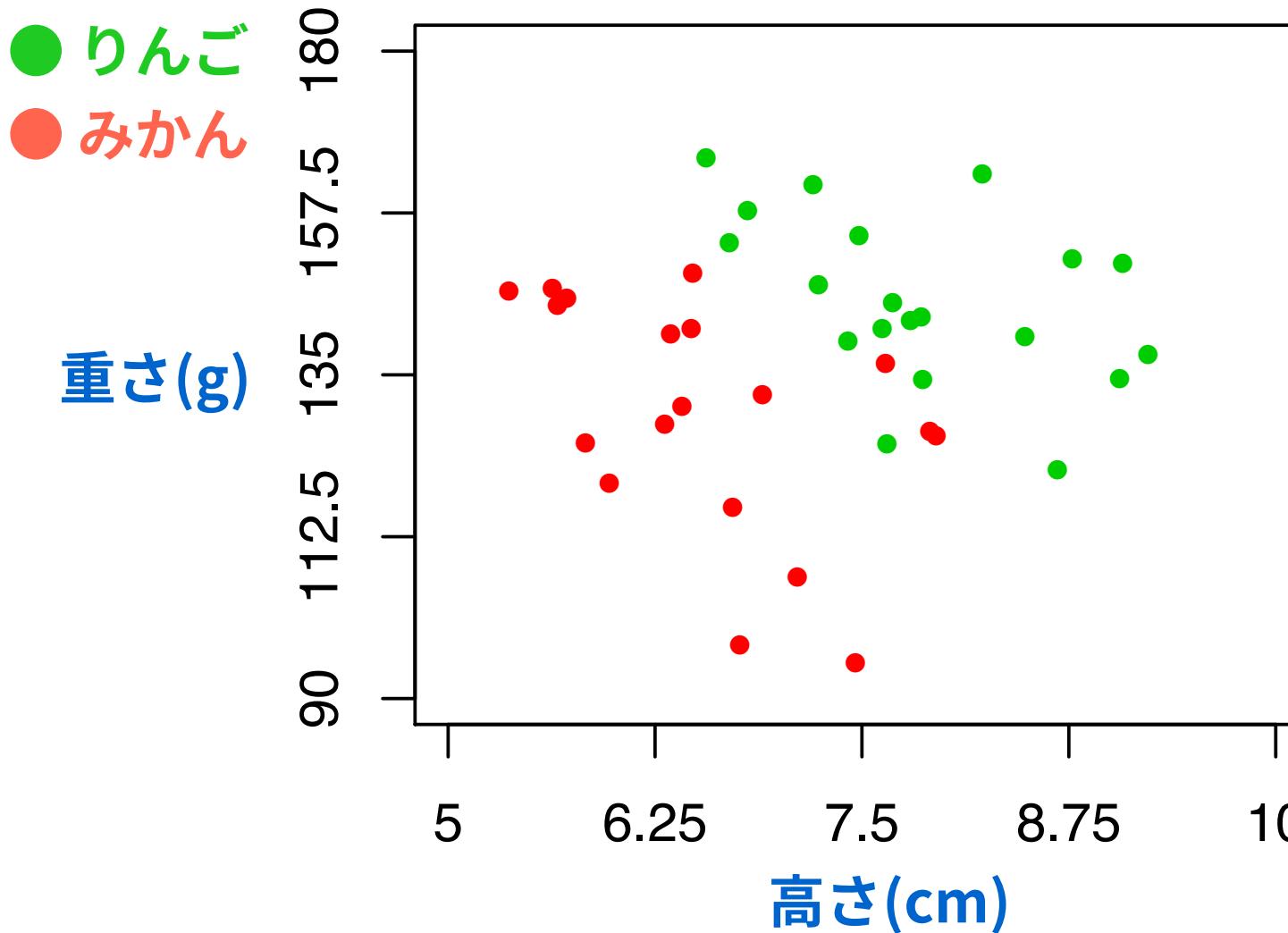
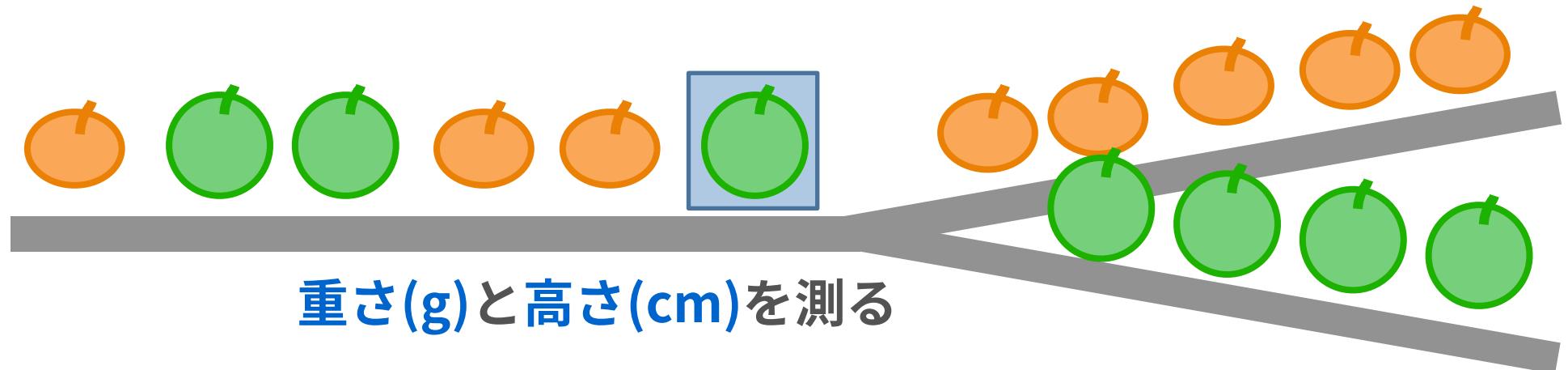
機械学習は「データを予測に変える」技術



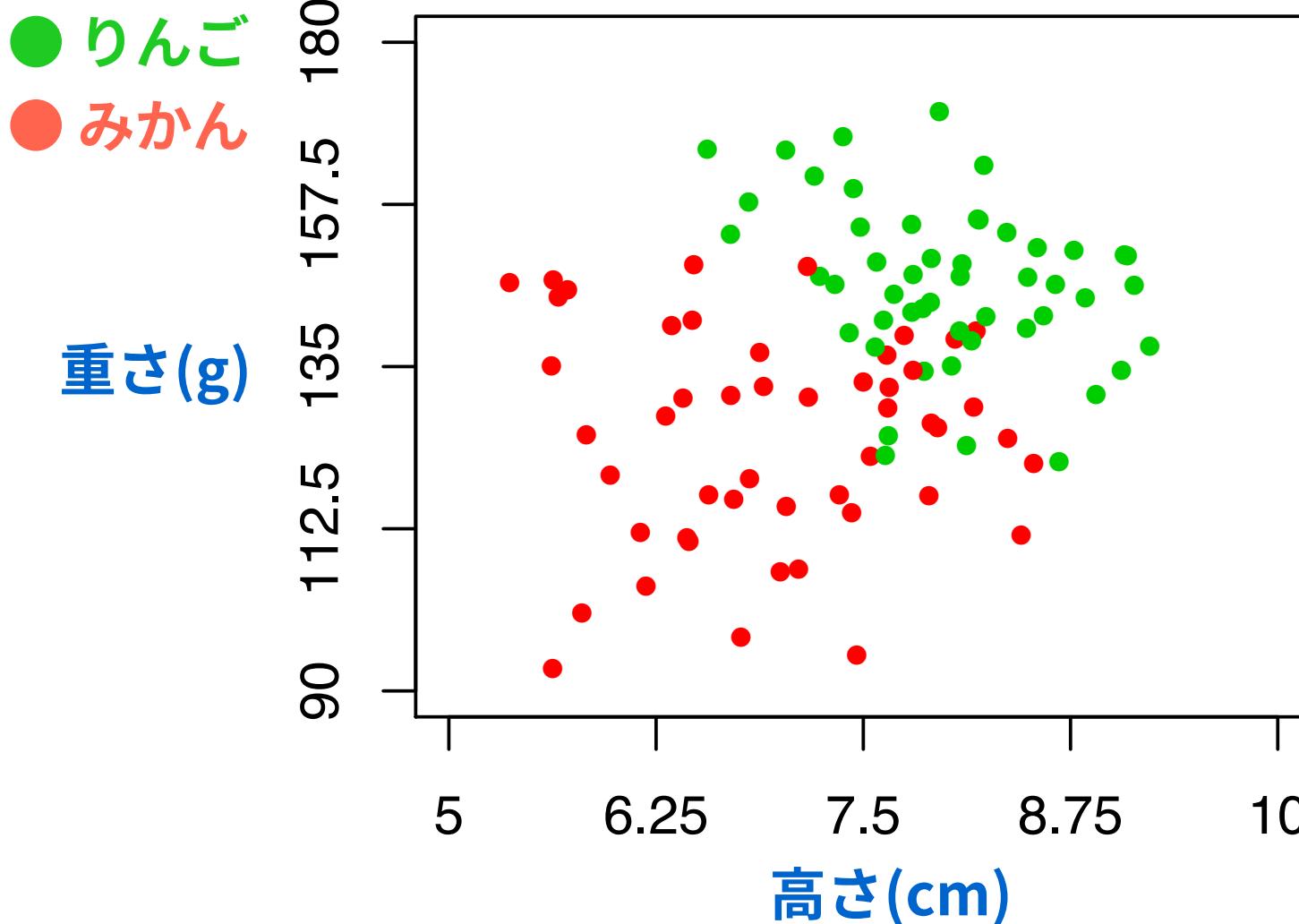
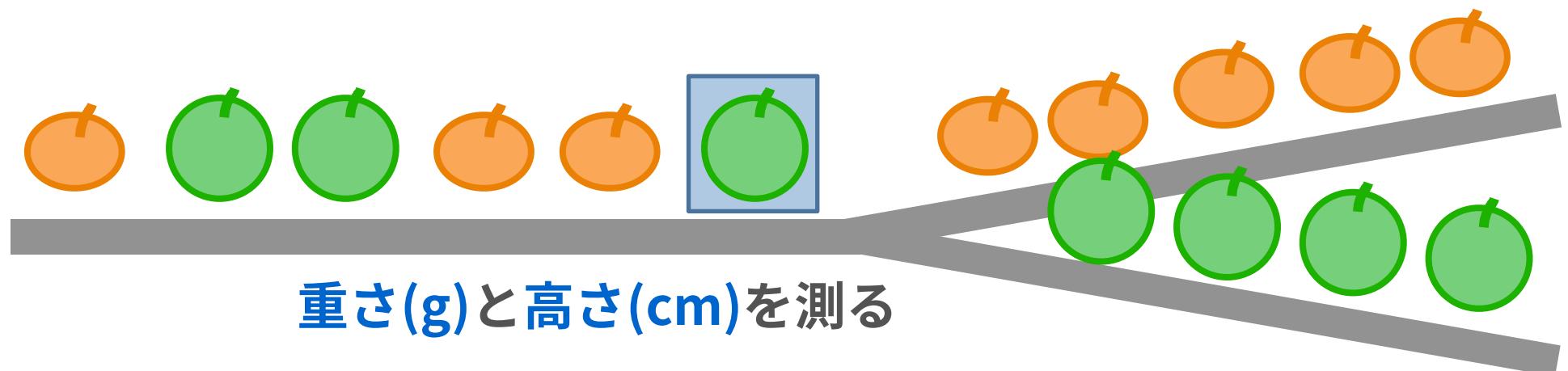
機械学習は「データを予測に変える」技術



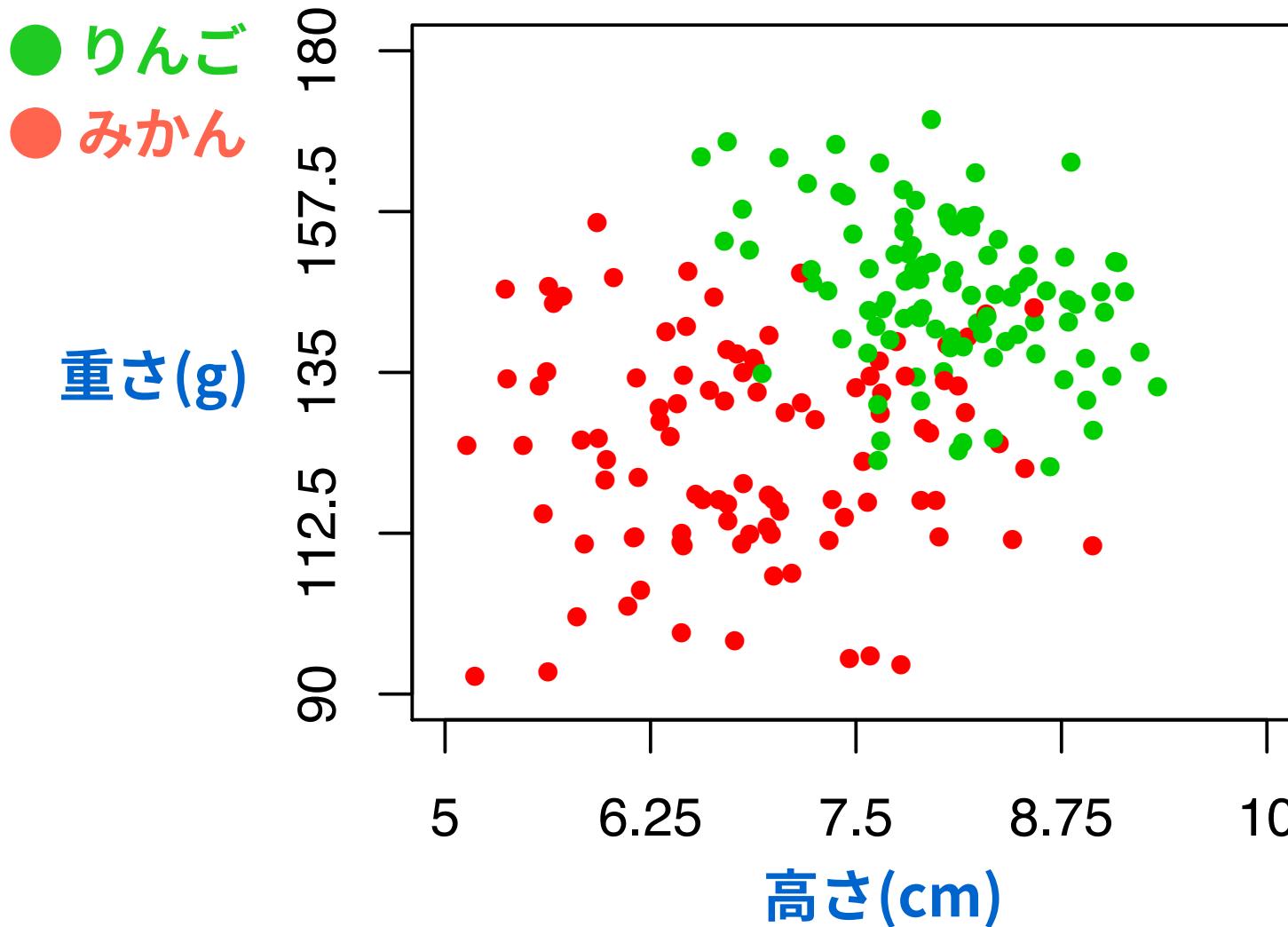
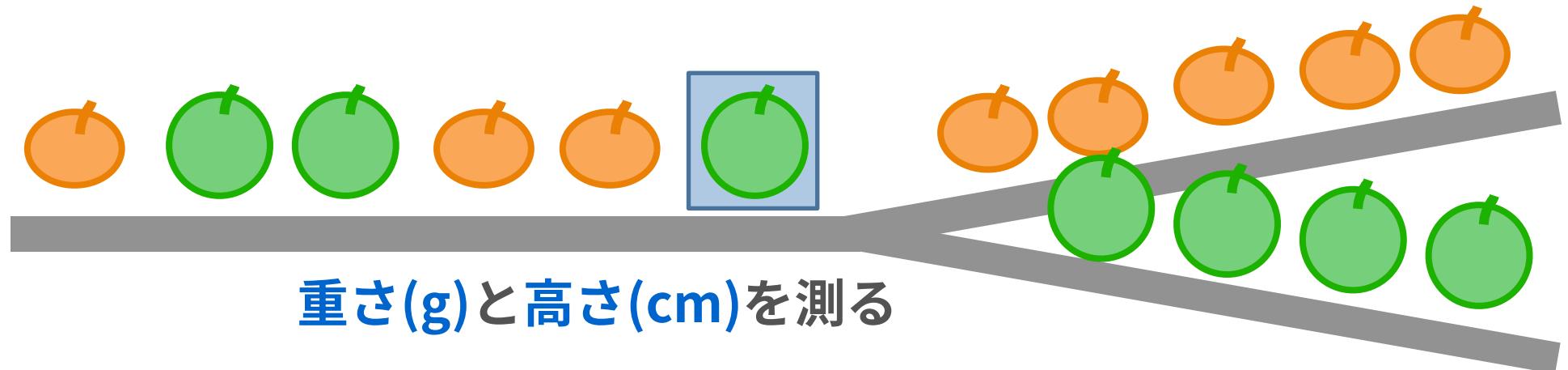
機械学習は「データを予測に変える」技術



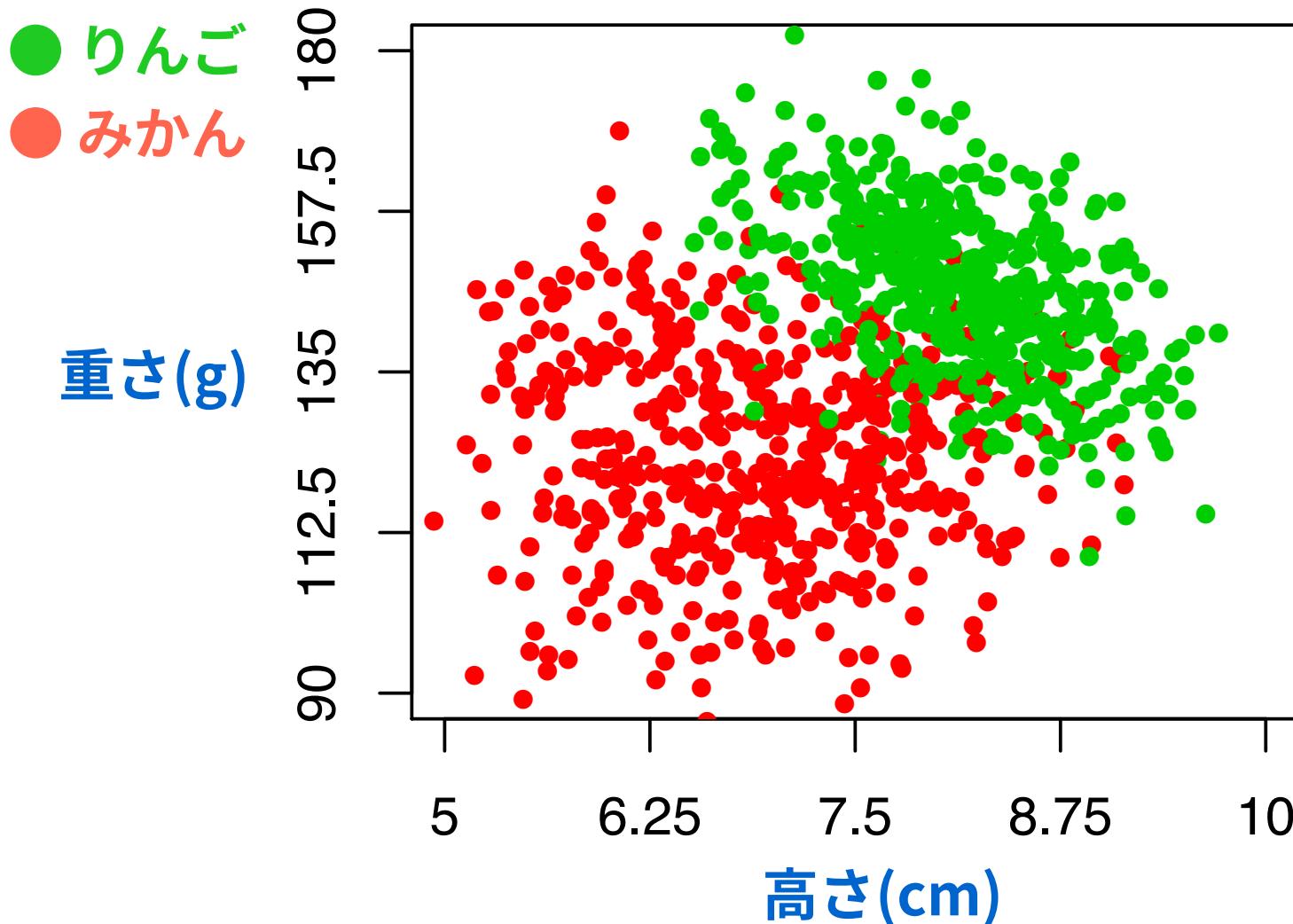
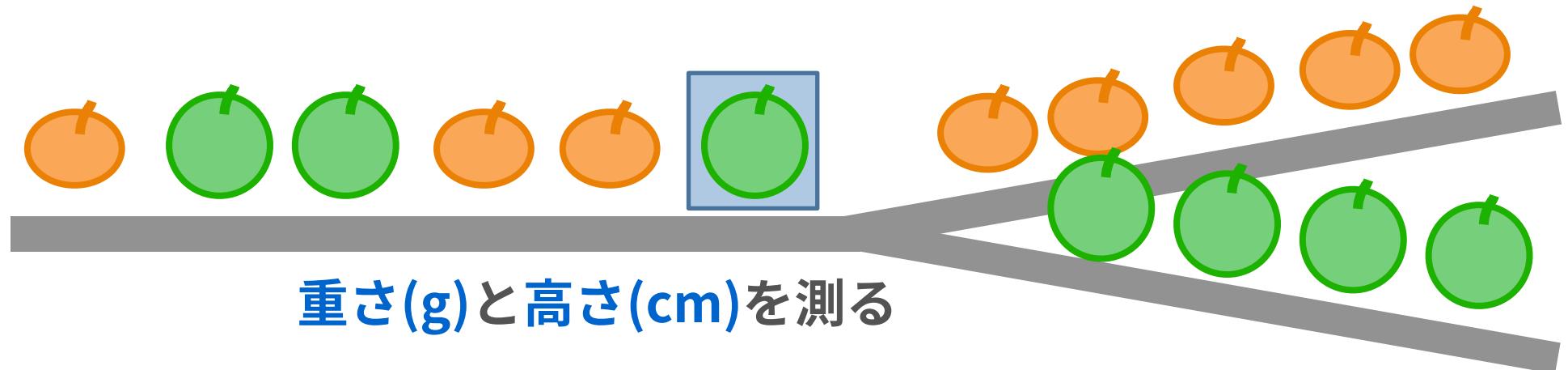
機械学習は「データを予測に変える」技術



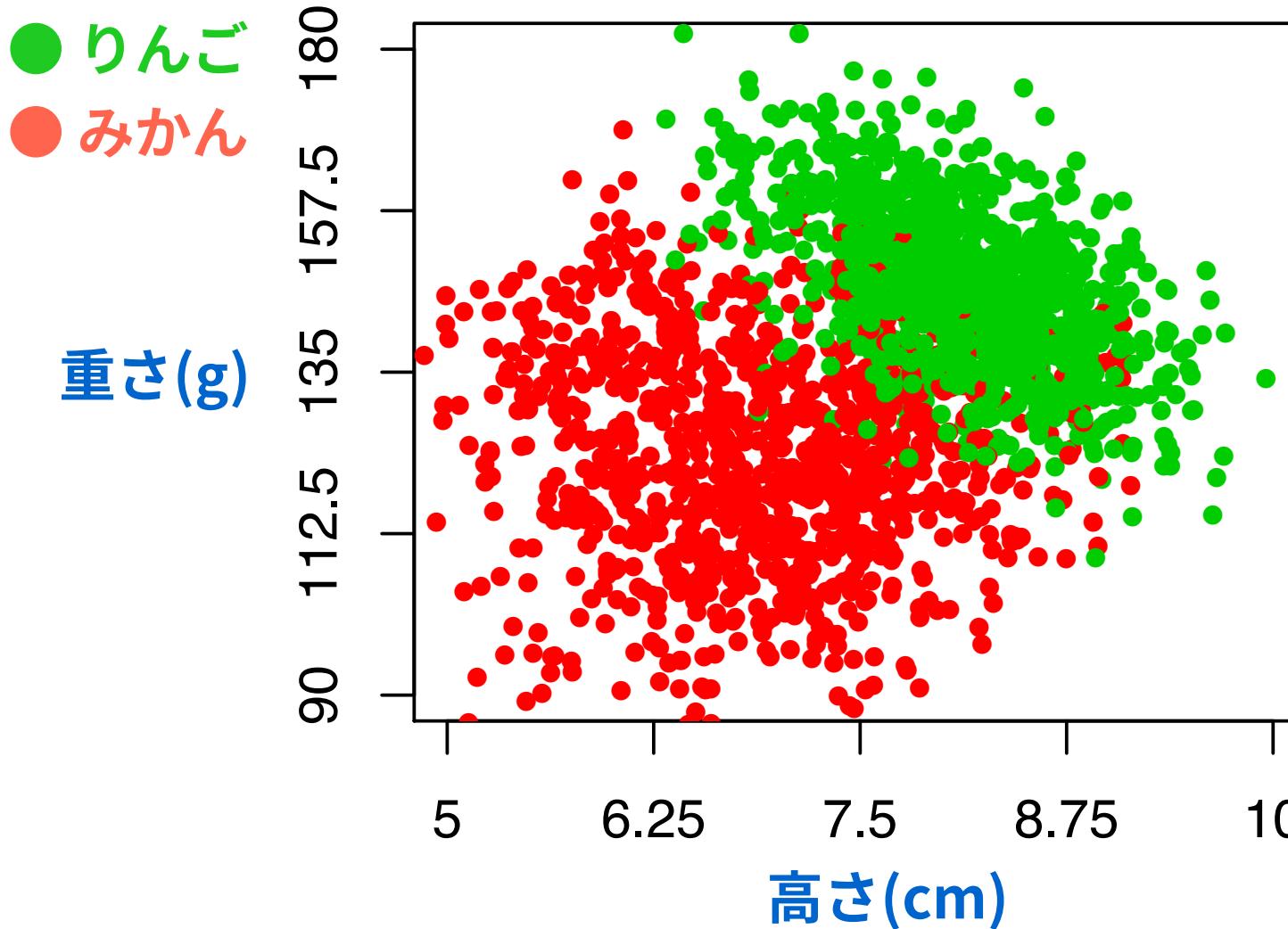
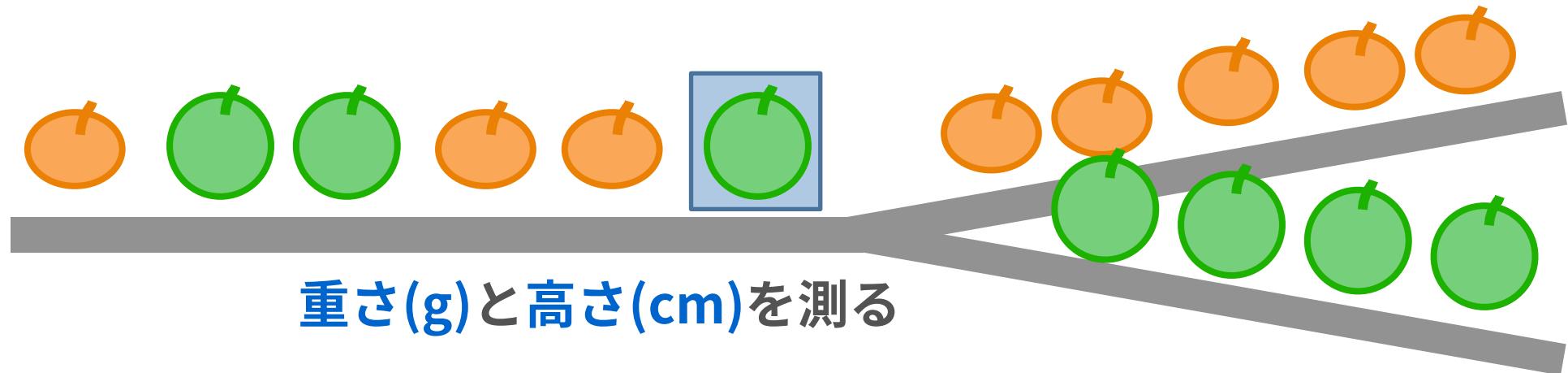
機械学習は「データを予測に変える」技術



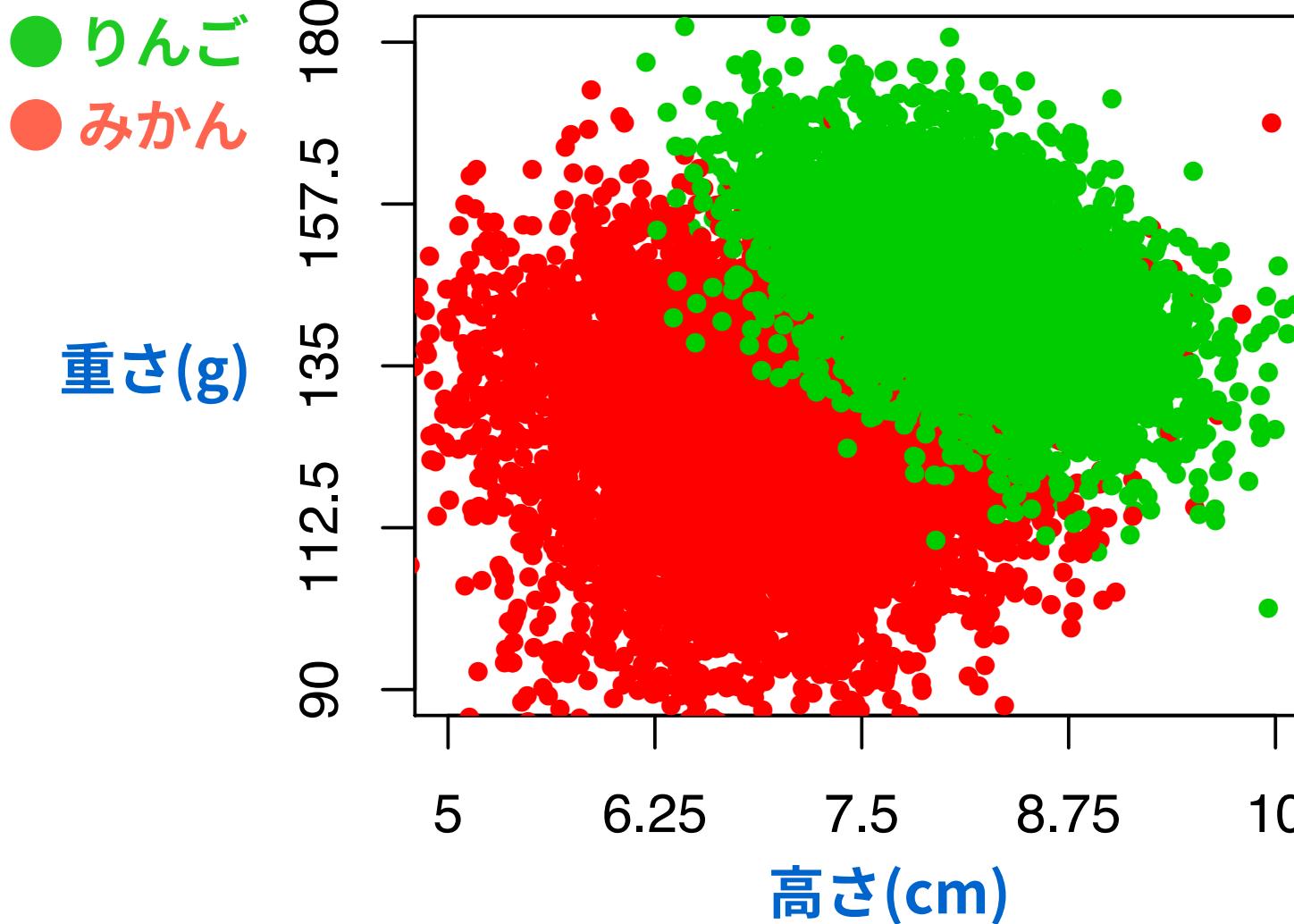
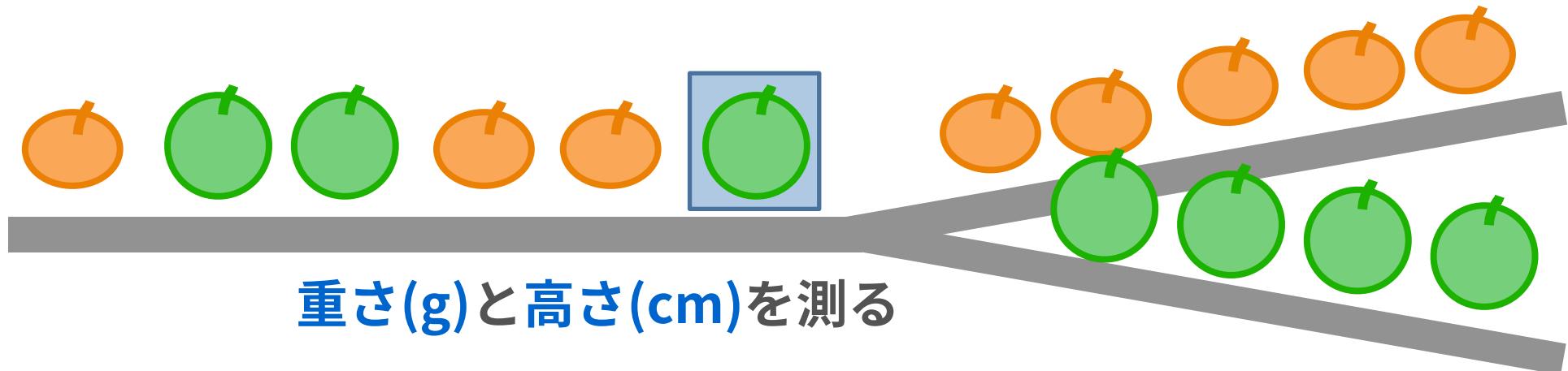
機械学習は「データを予測に変える」技術



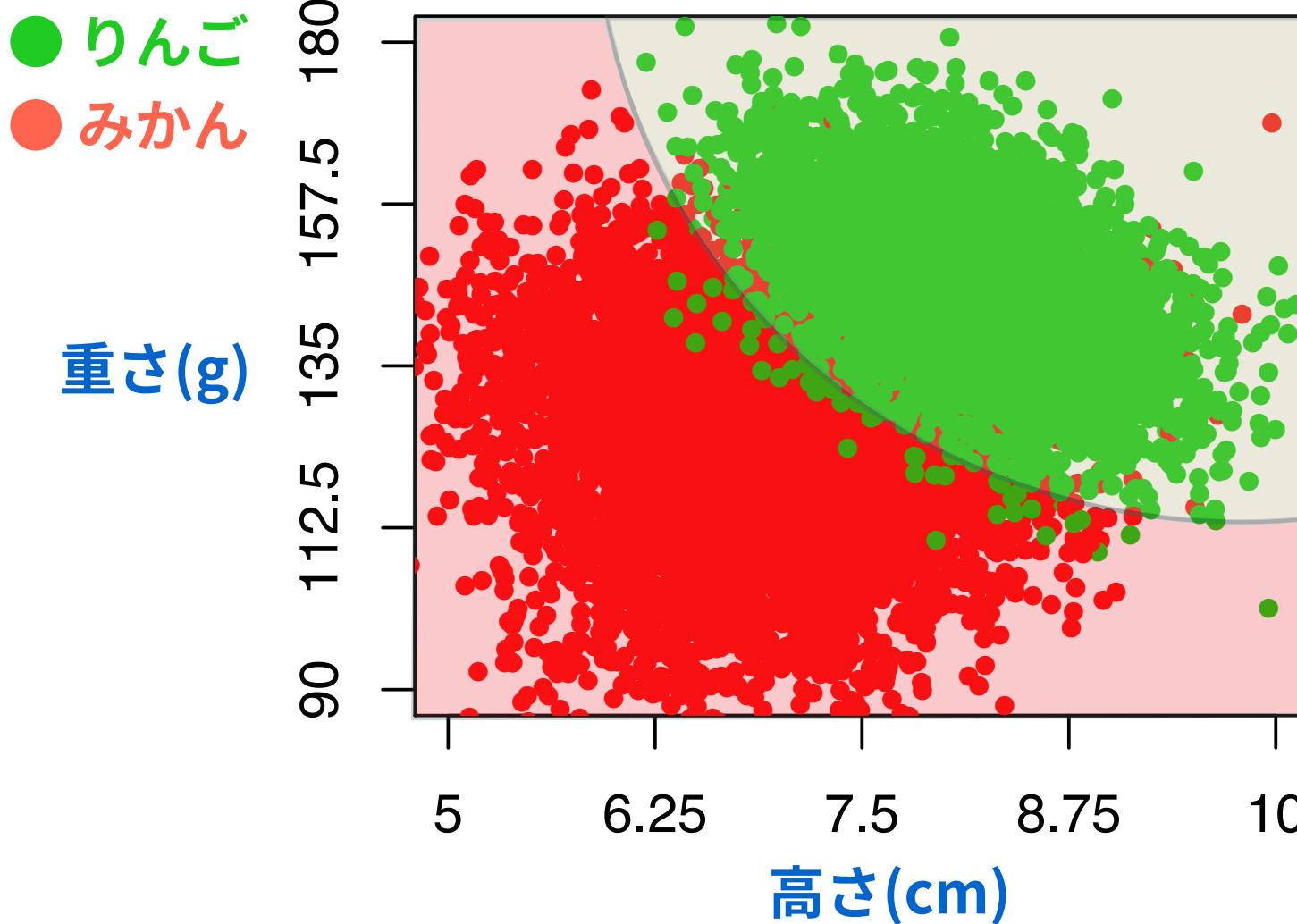
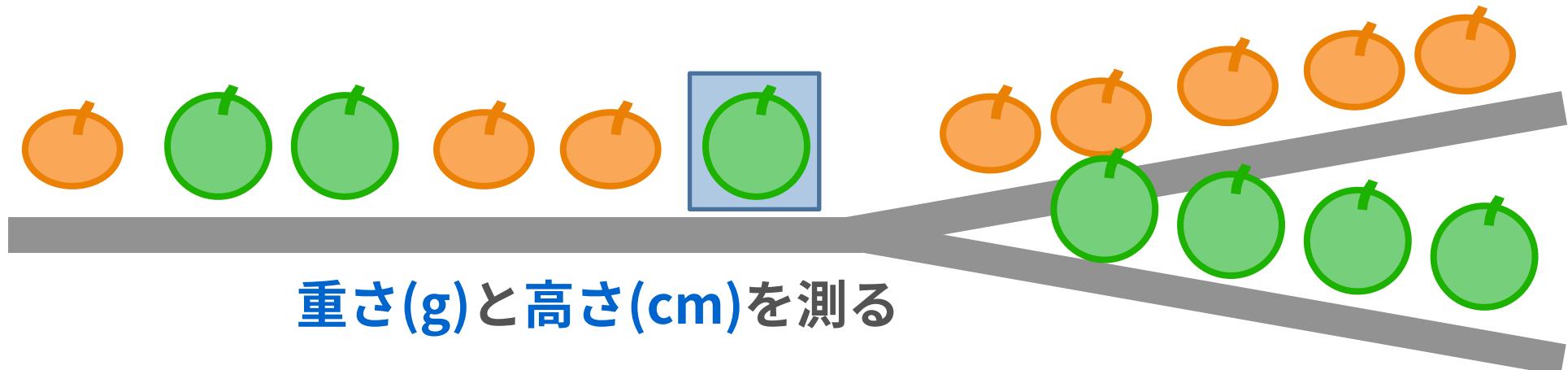
機械学習は「データを予測に変える」技術



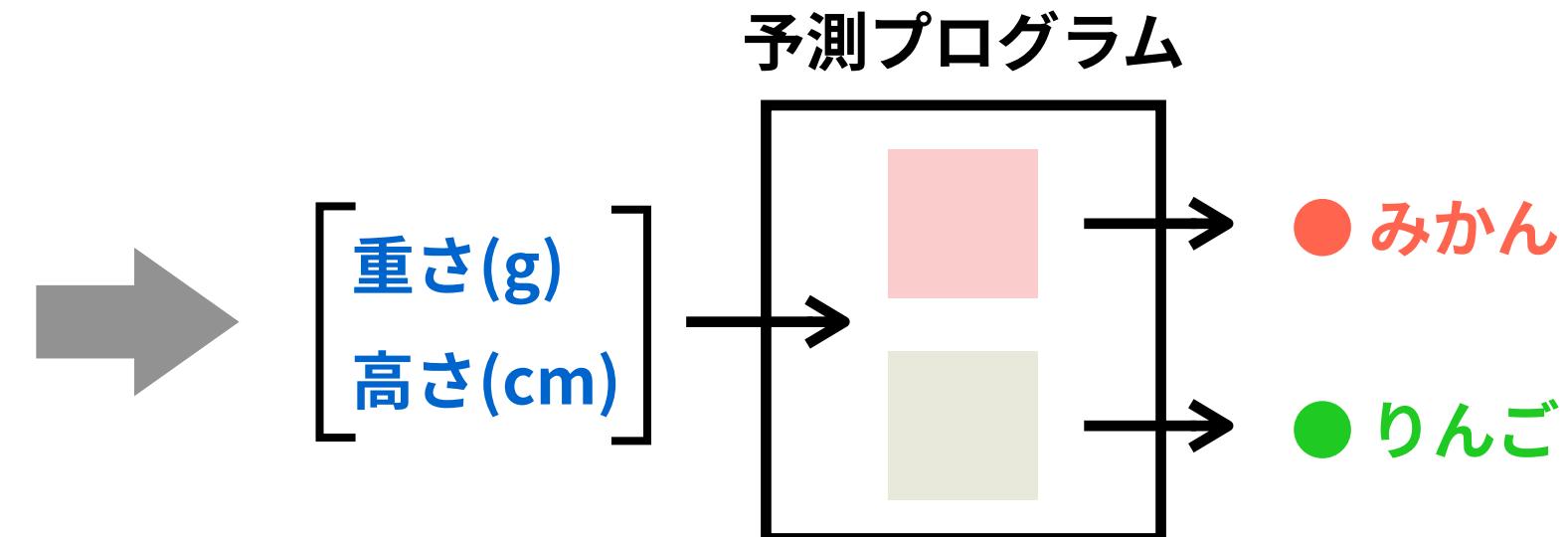
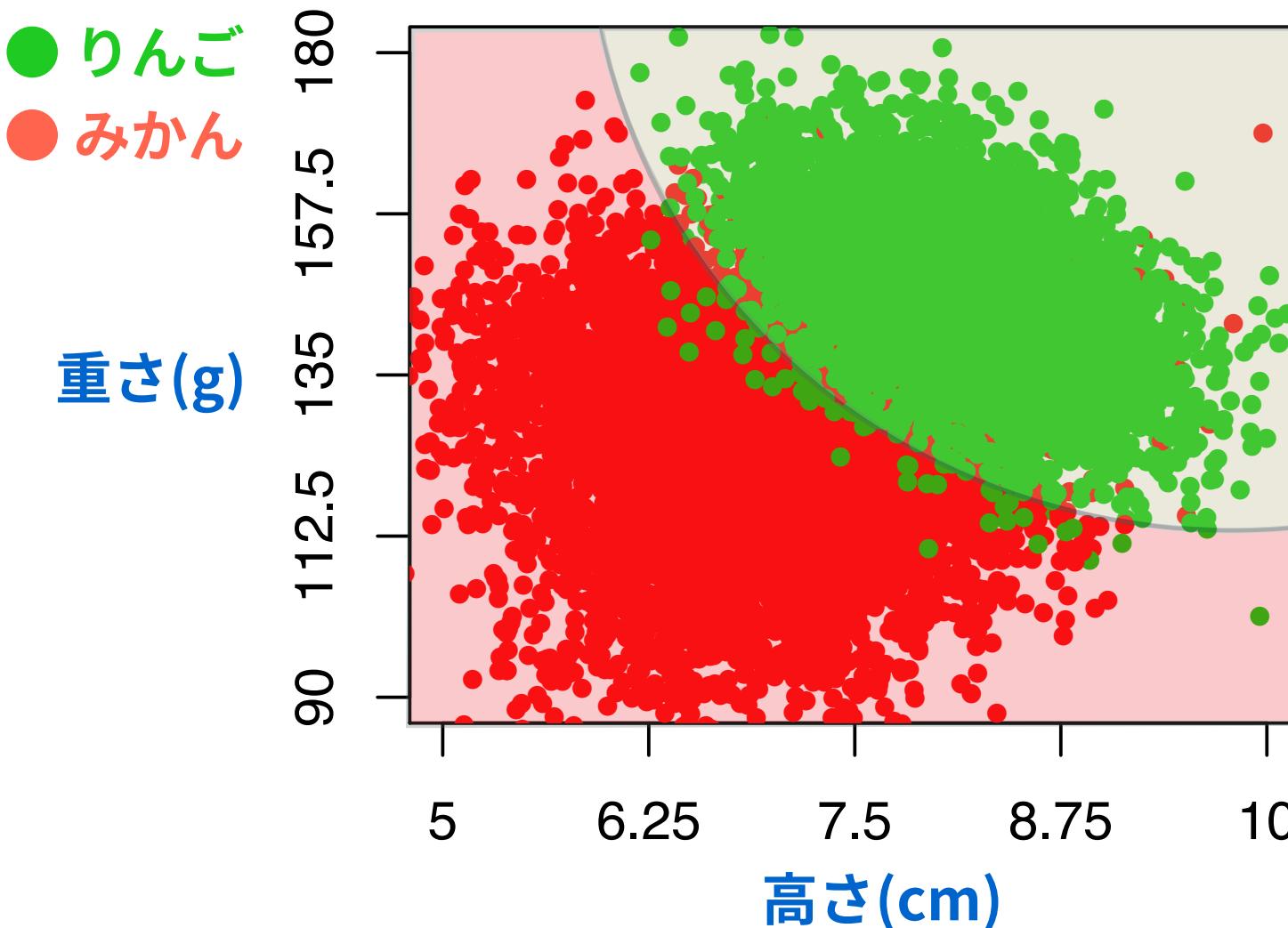
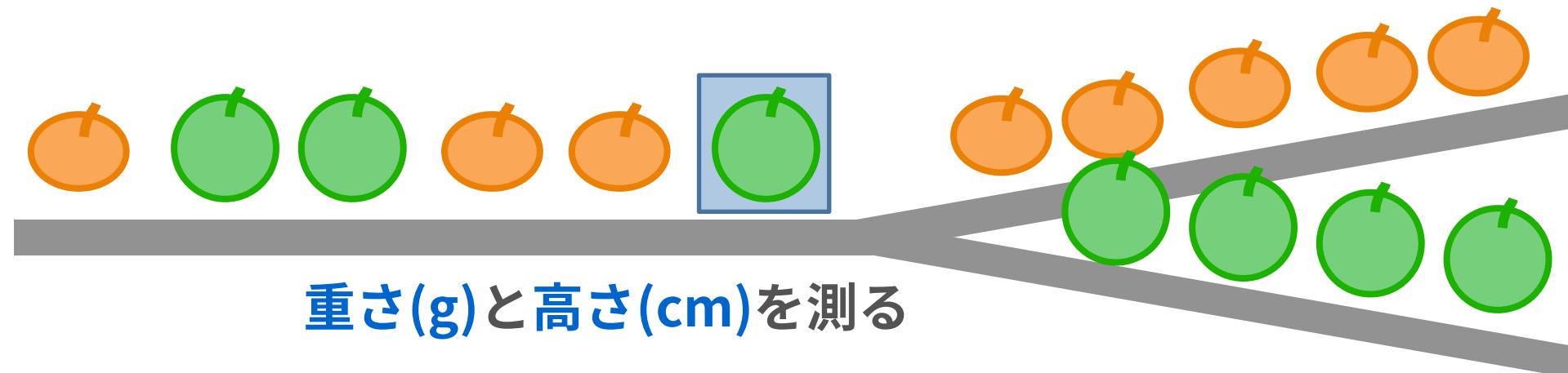
機械学習は「データを予測に変える」技術



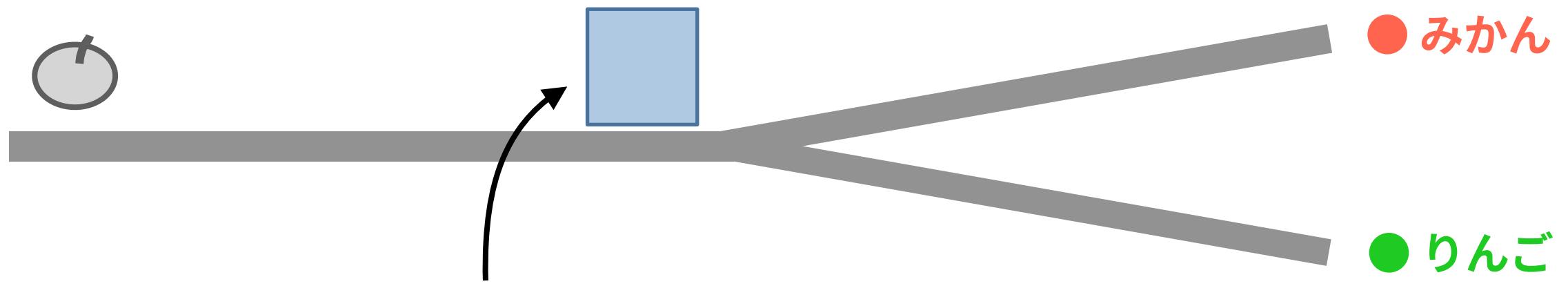
機械学習は「データを予測に変える」技術



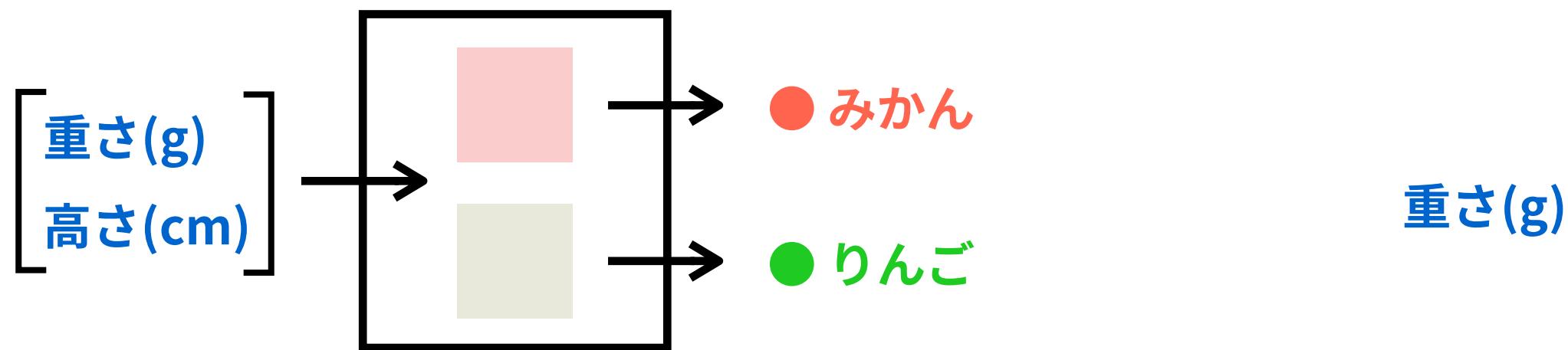
機械学習は「データを予測に変える」技術



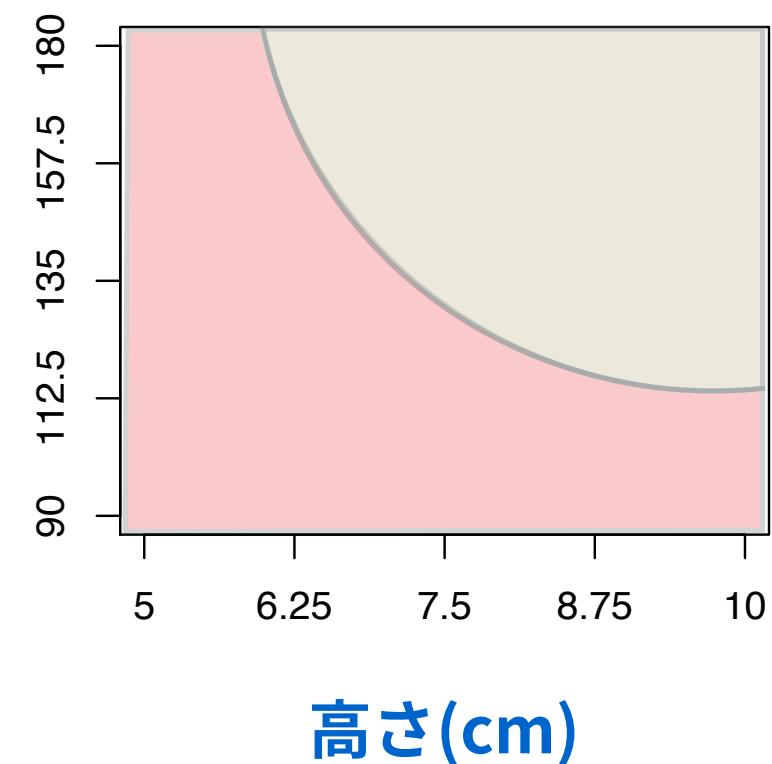
機械学習は「データを予測に変える」技術



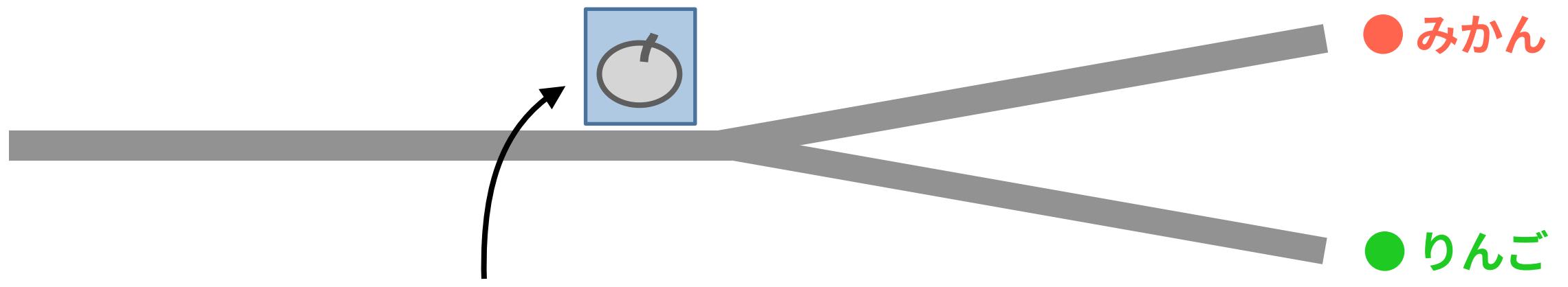
見本データから作っておいた予測プログラム



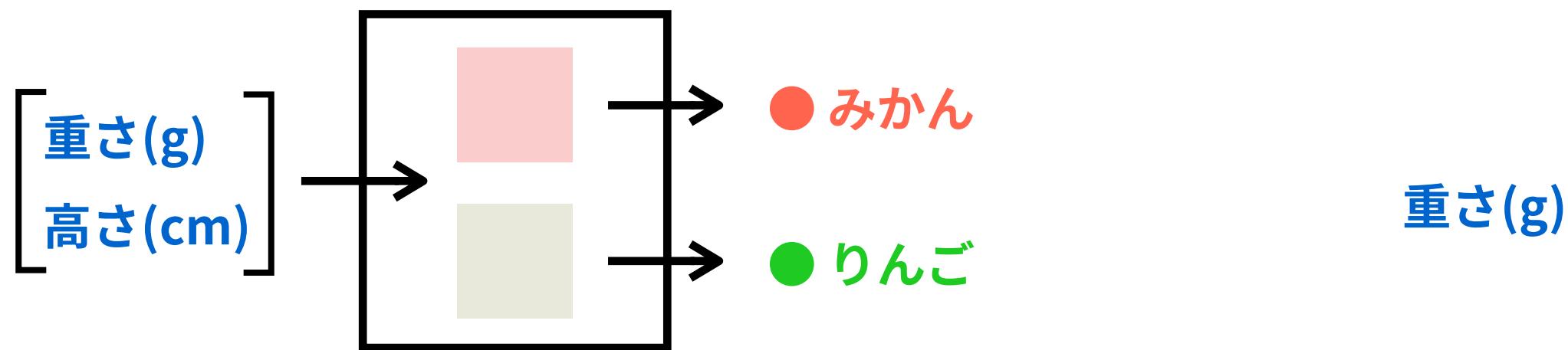
予測プログラムを作ったときに見せた見本例ではない例に対して
「みかん」 or 「りんご」 を予測することができる！



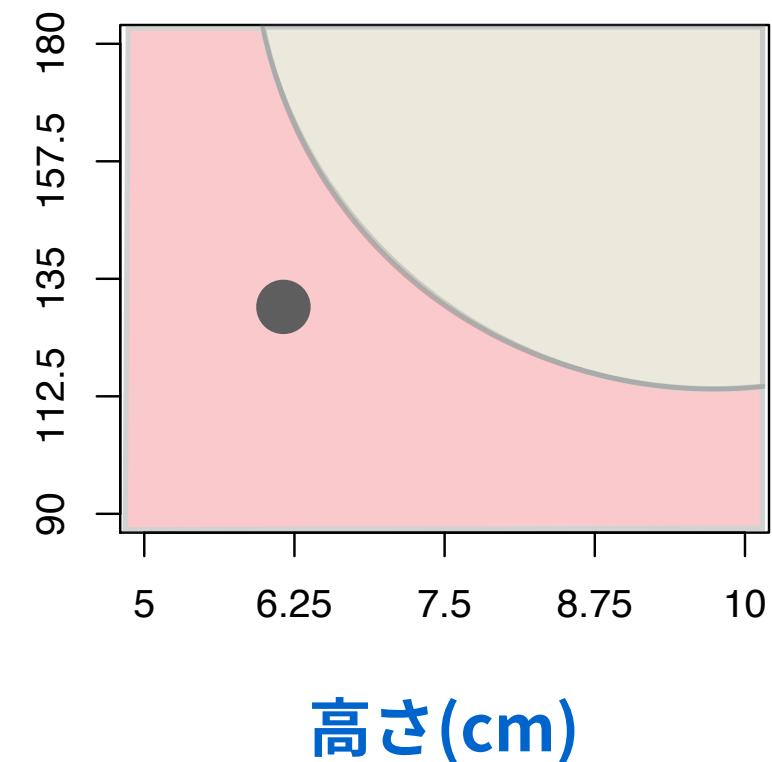
機械学習は「データを予測に変える」技術



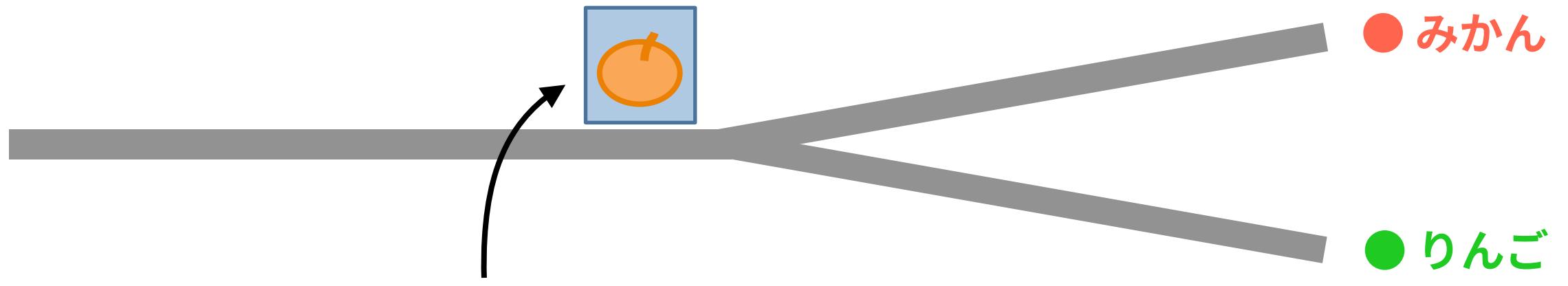
見本データから作っておいた予測プログラム



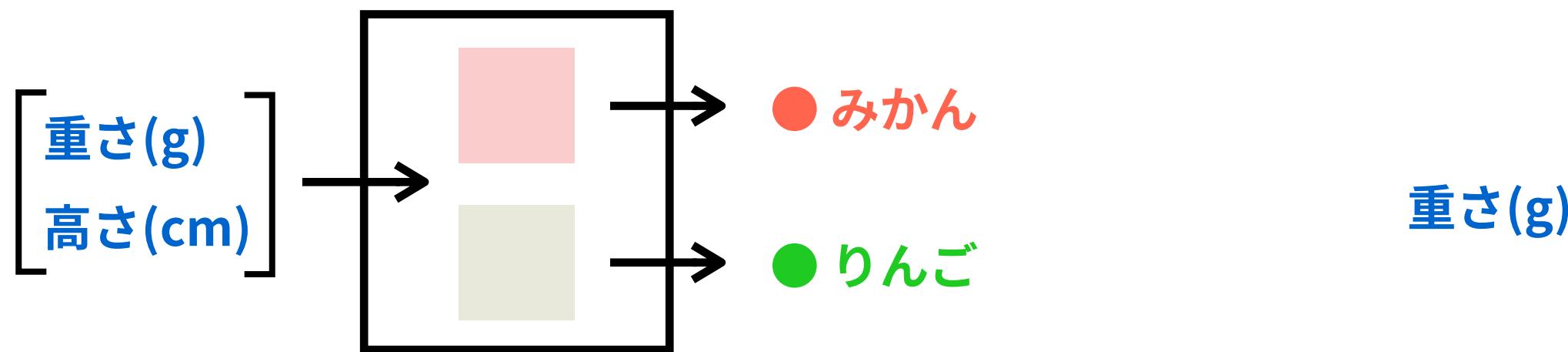
予測プログラムを作ったときに見せた見本例ではない例に対して
「みかん」 or 「りんご」 を予測することができる！



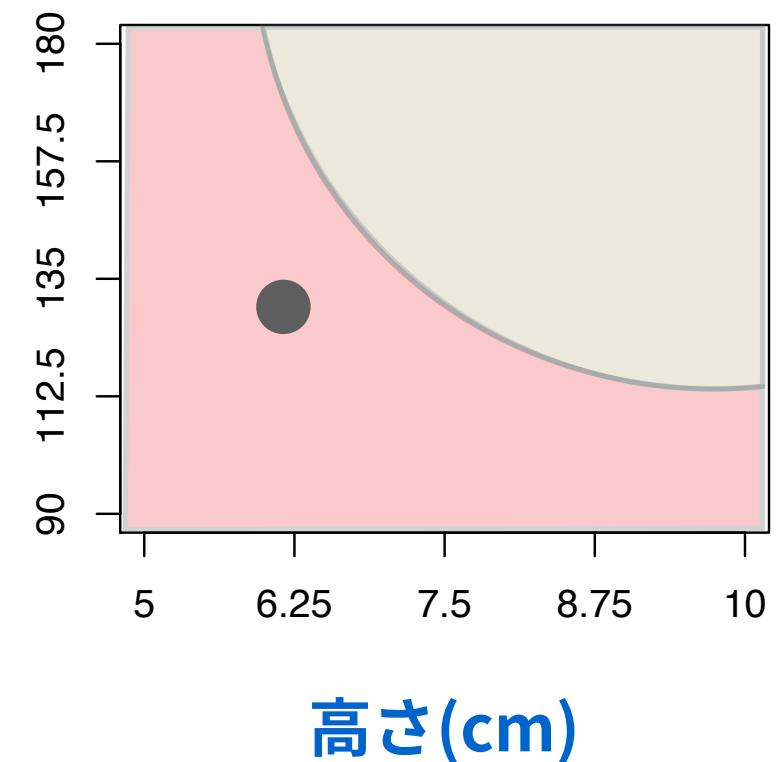
機械学習は「データを予測に変える」技術



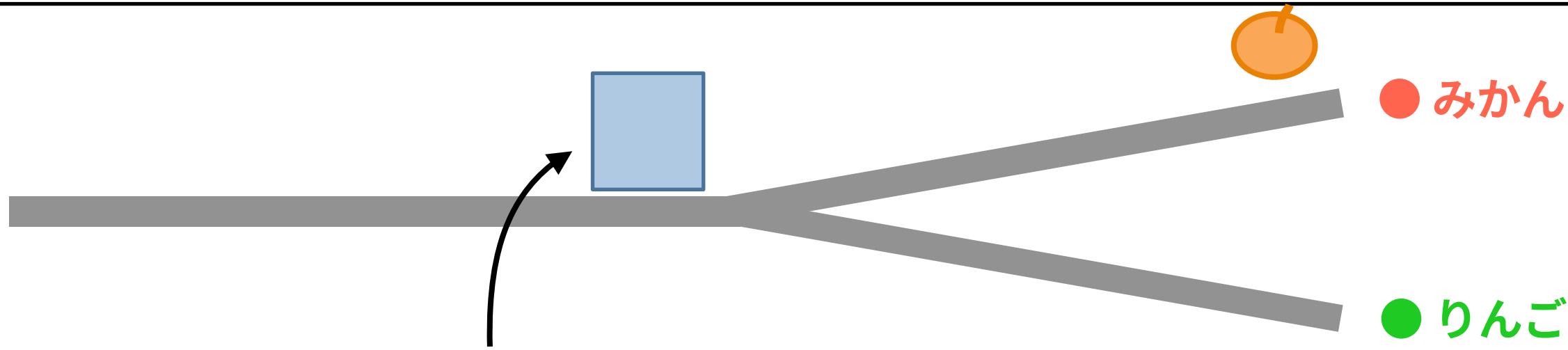
見本データから作っておいた予測プログラム



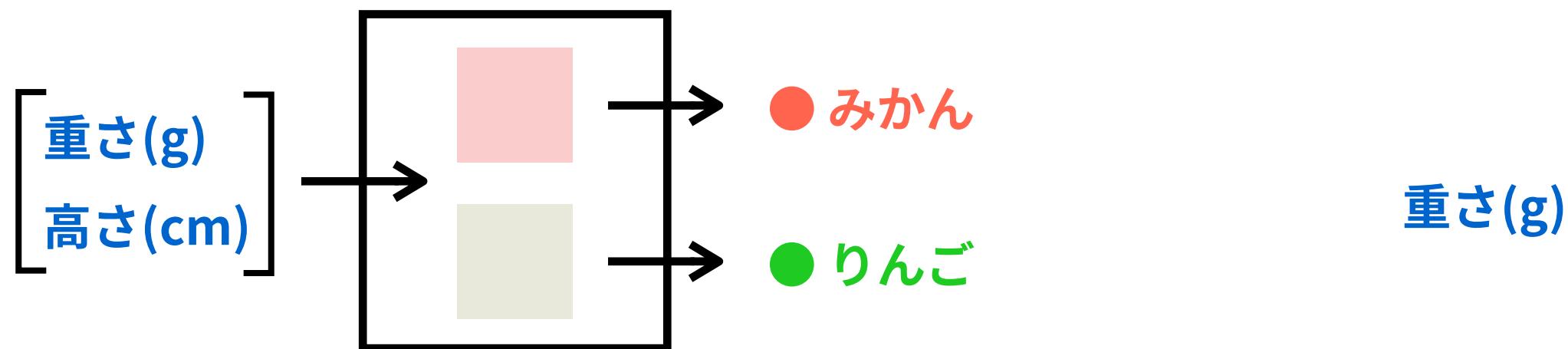
予測プログラムを作ったときに見せた見本例ではない例に対して
「みかん」 or 「りんご」 を予測することができる！



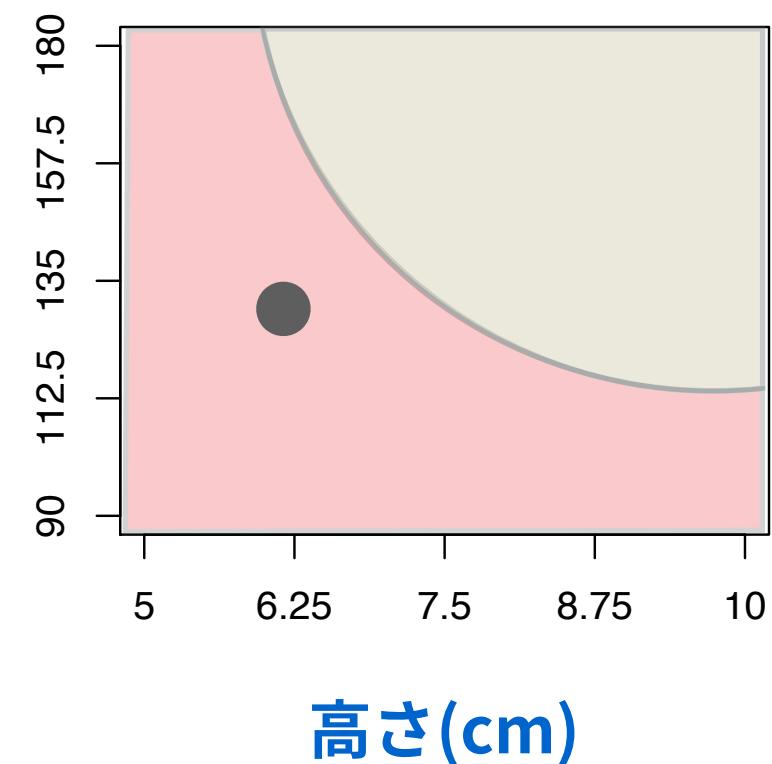
機械学習は「データを予測に変える」技術



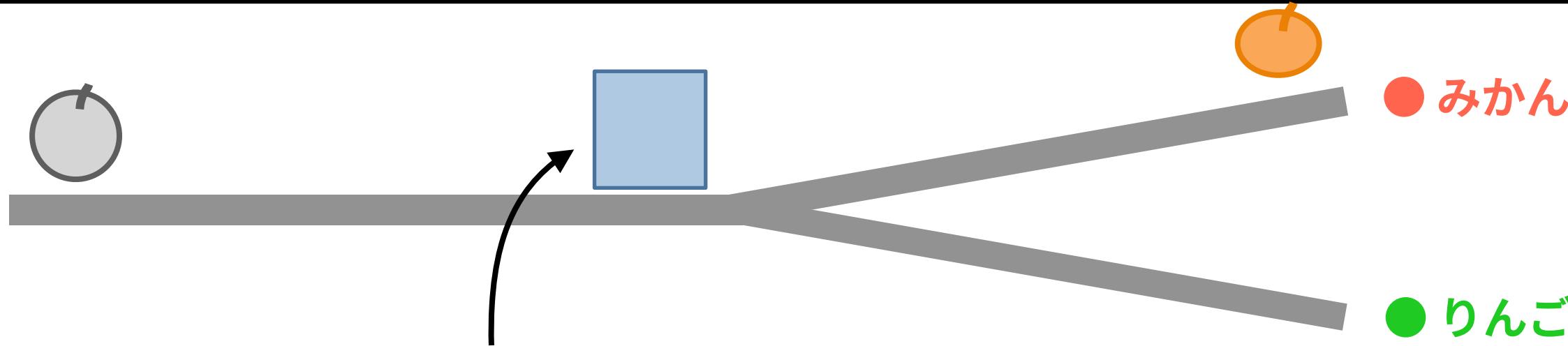
見本データから作っておいた予測プログラム



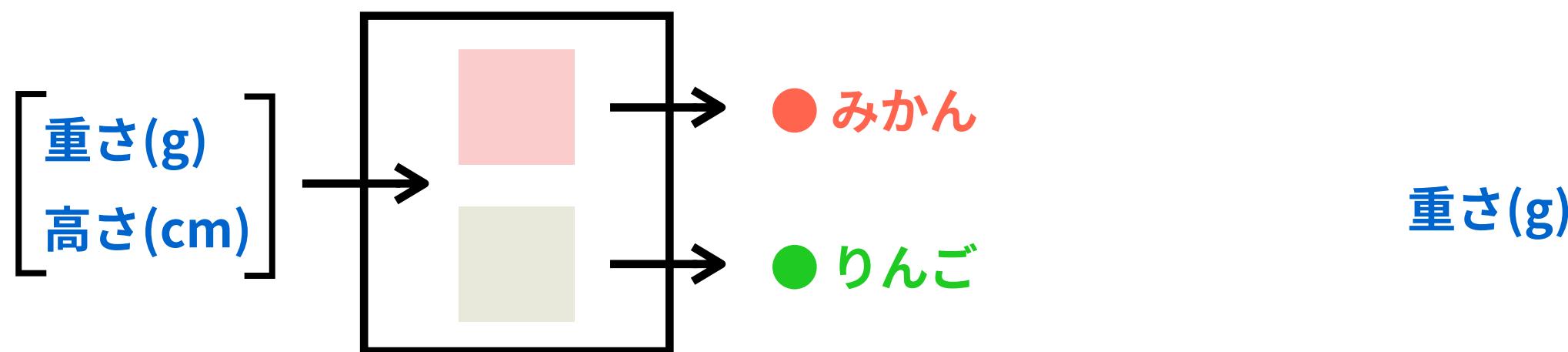
予測プログラムを作ったときに見せた見本例ではない例に対して
「みかん」 or 「りんご」 を予測することができる！



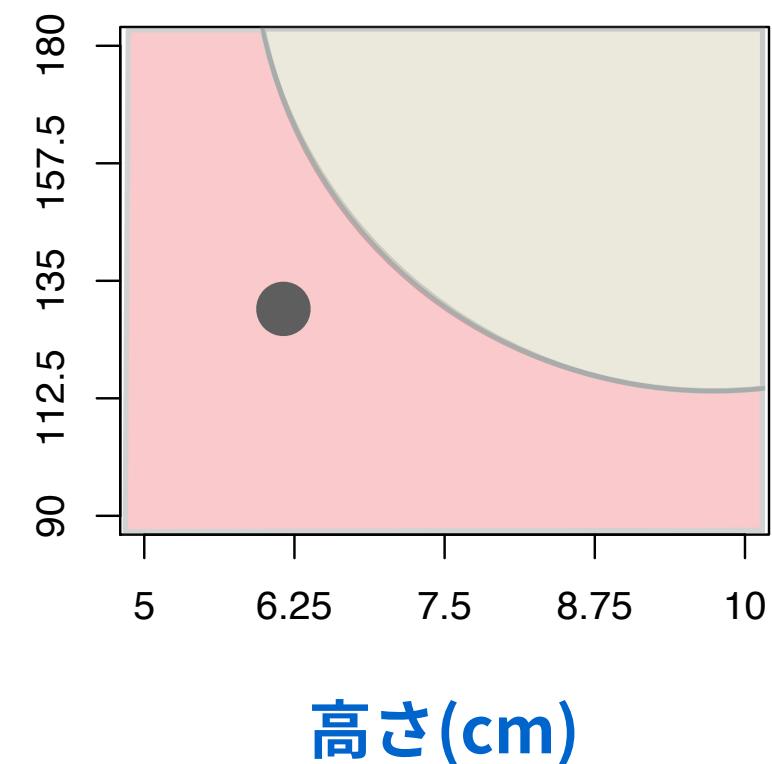
機械学習は「データを予測に変える」技術



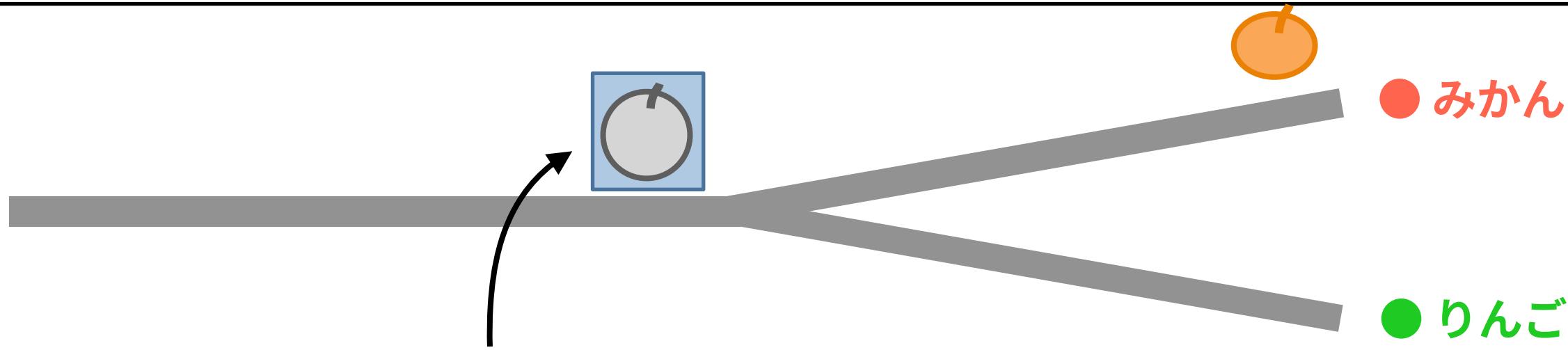
見本データから作っておいた予測プログラム



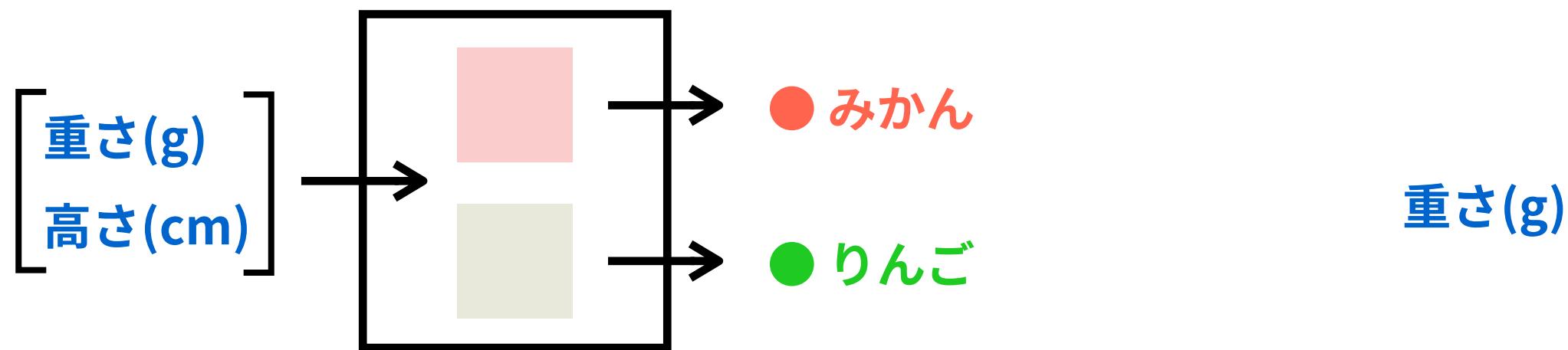
予測プログラムを作ったときに見せた見本例ではない例に対して
「みかん」 or 「りんご」 を予測することができる！



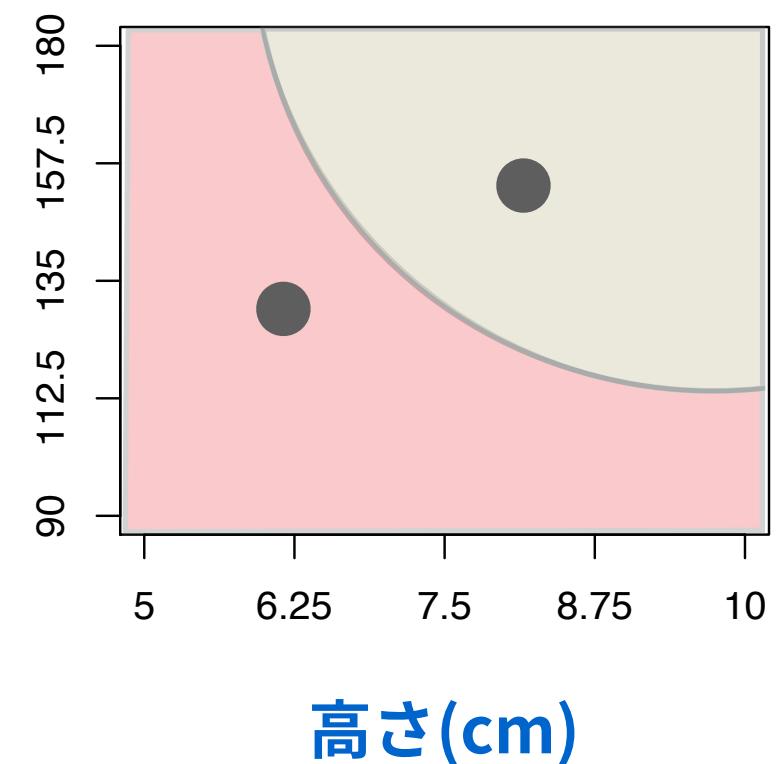
機械学習は「データを予測に変える」技術



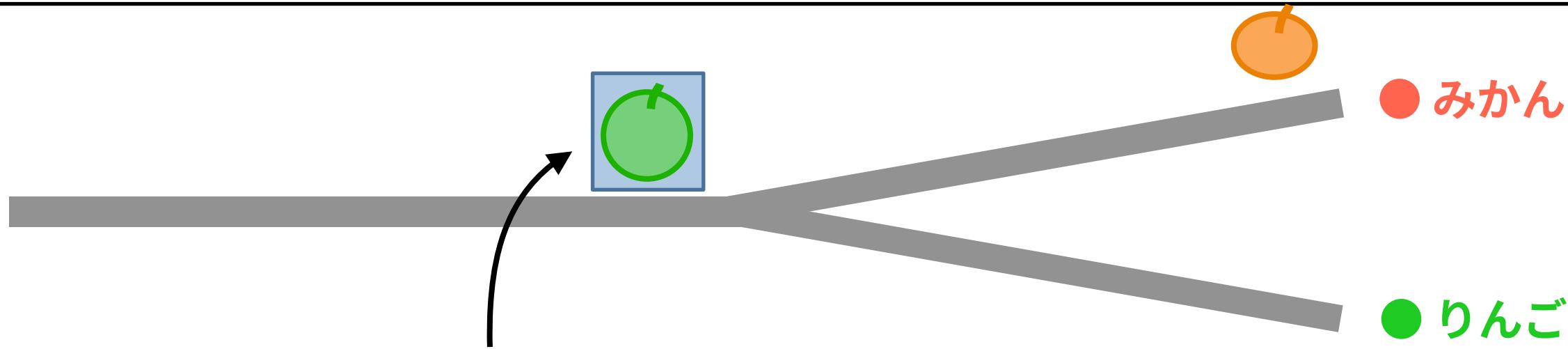
見本データから作っておいた予測プログラム



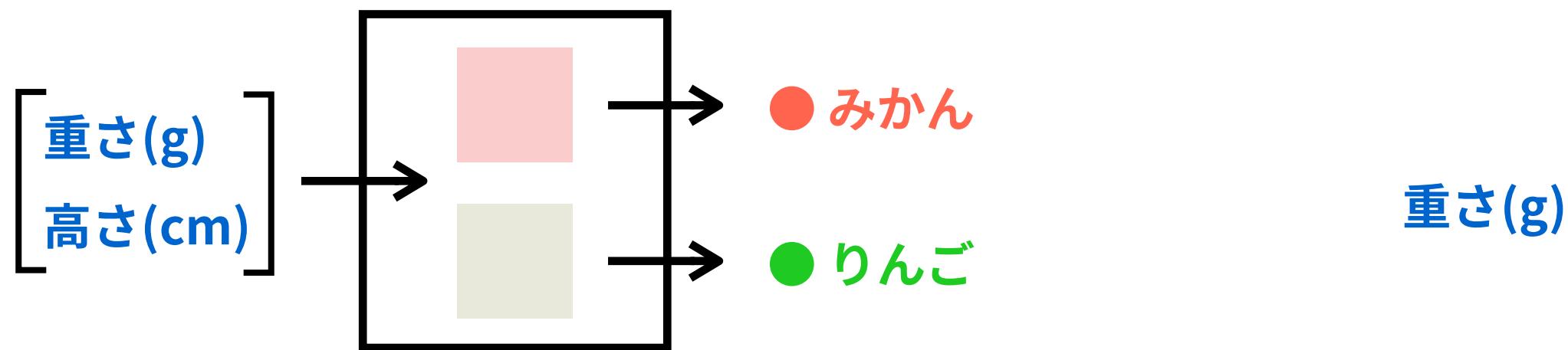
予測プログラムを作ったときに見せた見本例ではない例に対して
「みかん」 or 「りんご」 を予測することができる！



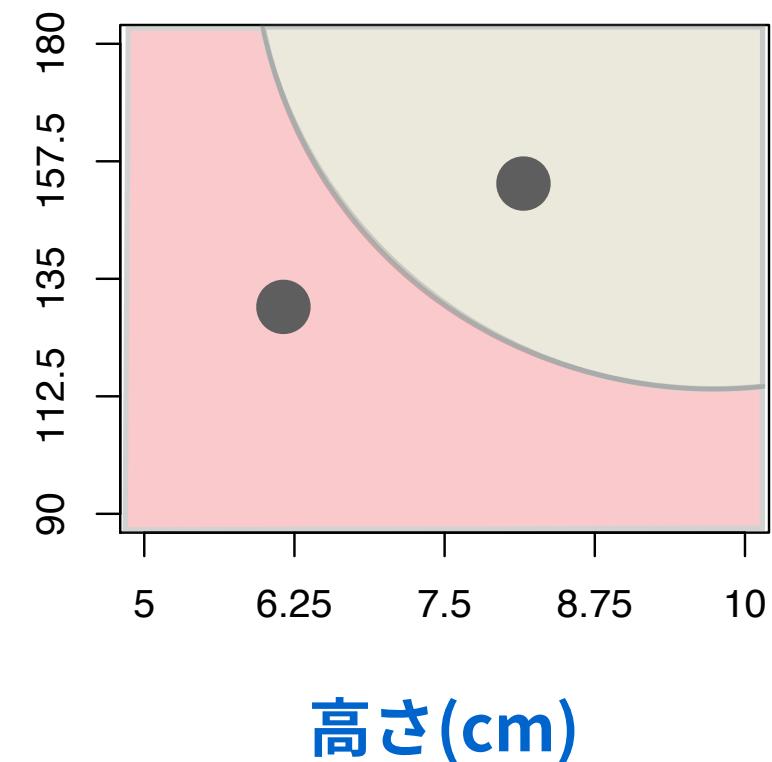
機械学習は「データを予測に変える」技術



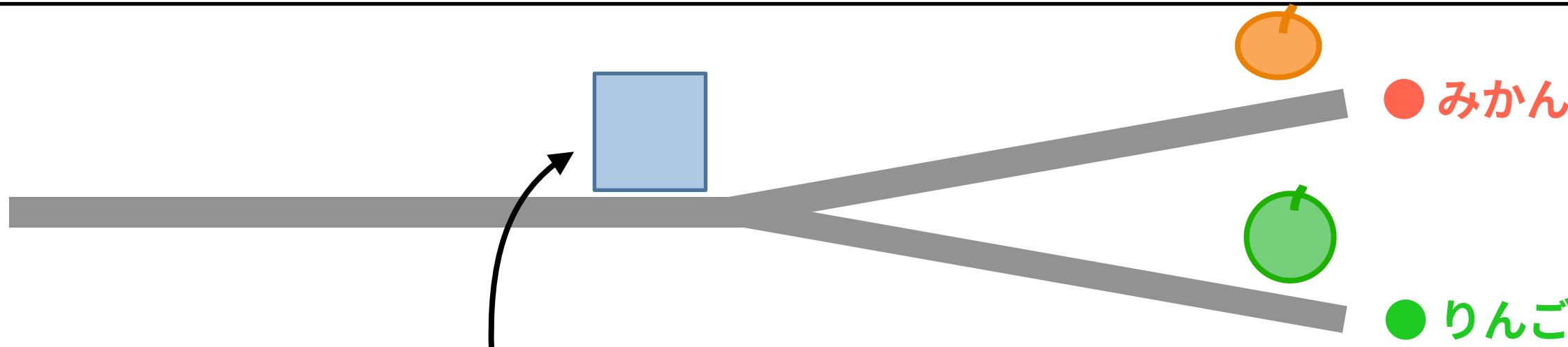
見本データから作っておいた予測プログラム



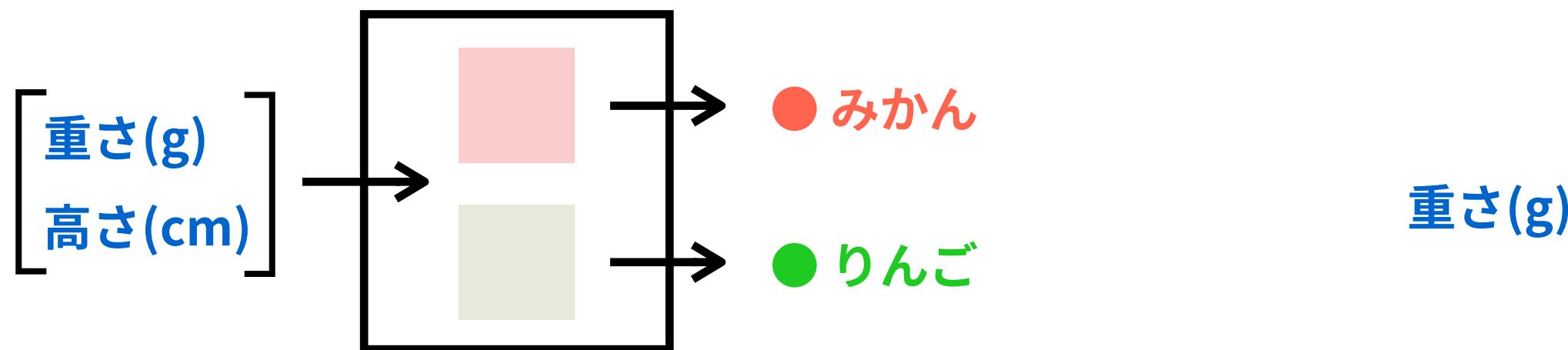
予測プログラムを作ったときに見せた見本例ではない例に対して
「みかん」 or 「りんご」 を予測することができる！



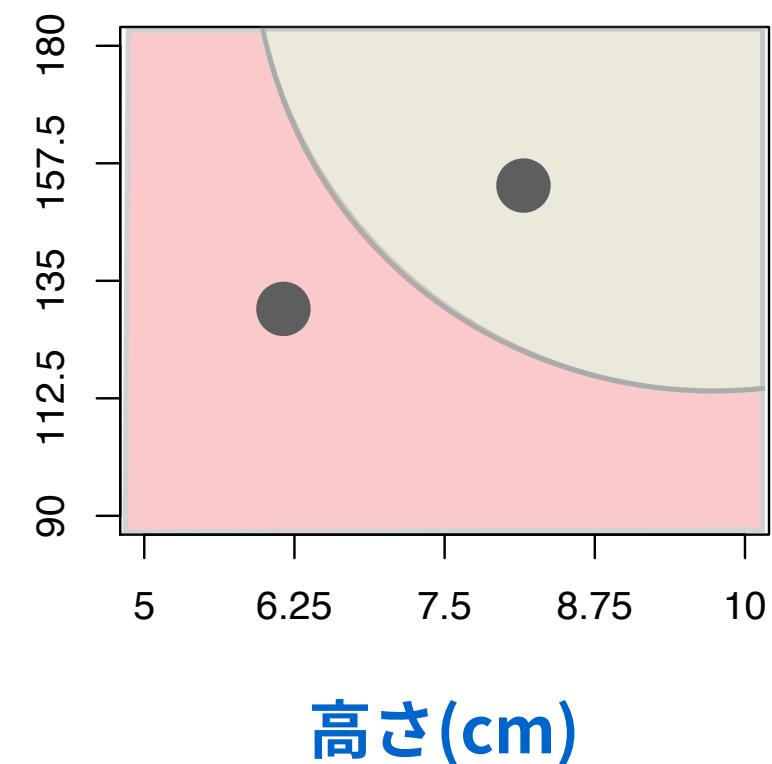
機械学習は「データを予測に変える」技術



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！



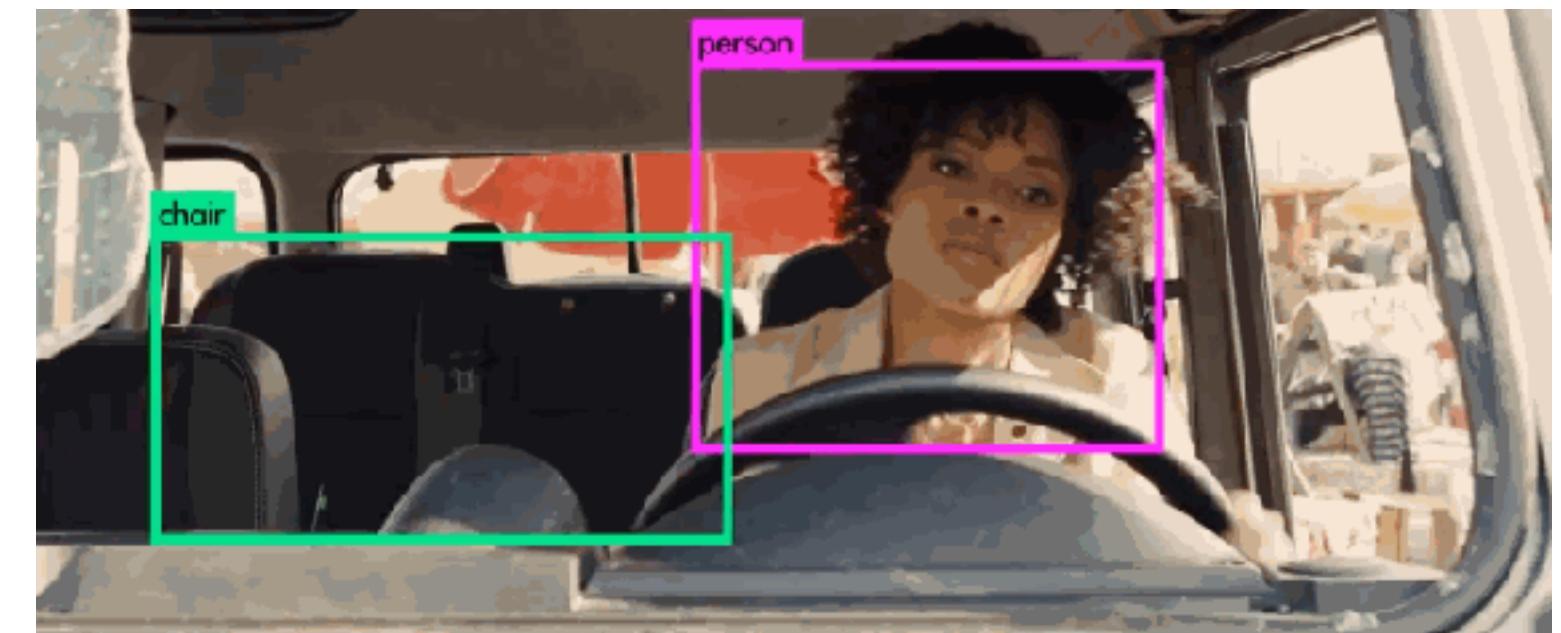
機械学習は「新しい(雑な)コンピュータプログラムの作り方」

プログラムの入力と出力の関係がよく分からない場合でも、
たくさんの入出力の見本データによって間接的に見本を再現するプログラムを作り出す技術



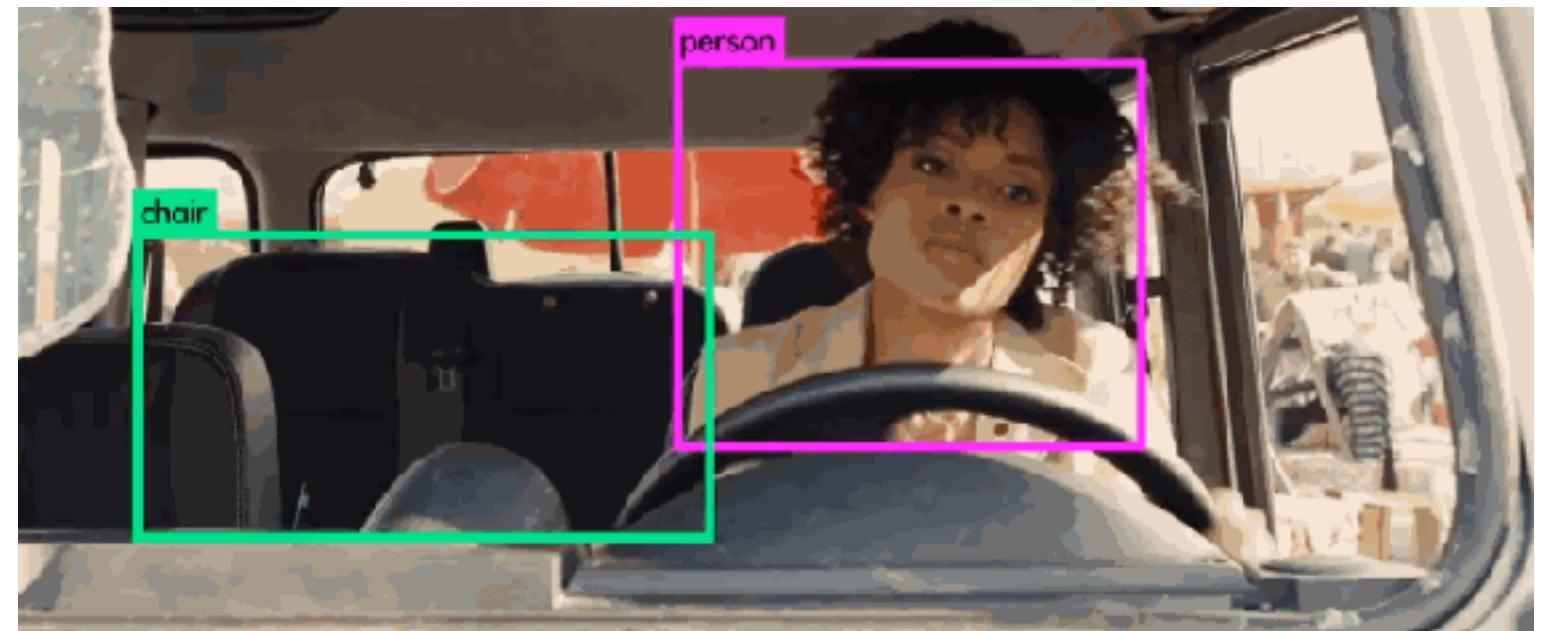
機械学習は「新しい(雑な)コンピュータプログラムの作り方」

この単純なしくみは上手に使うと「めちゃくちゃ強力」でいろいろな楽しいこともできる！



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」

この単純なしくみは上手に使うと「めちゃくちゃ強力」でいろいろな楽しいこともできる！



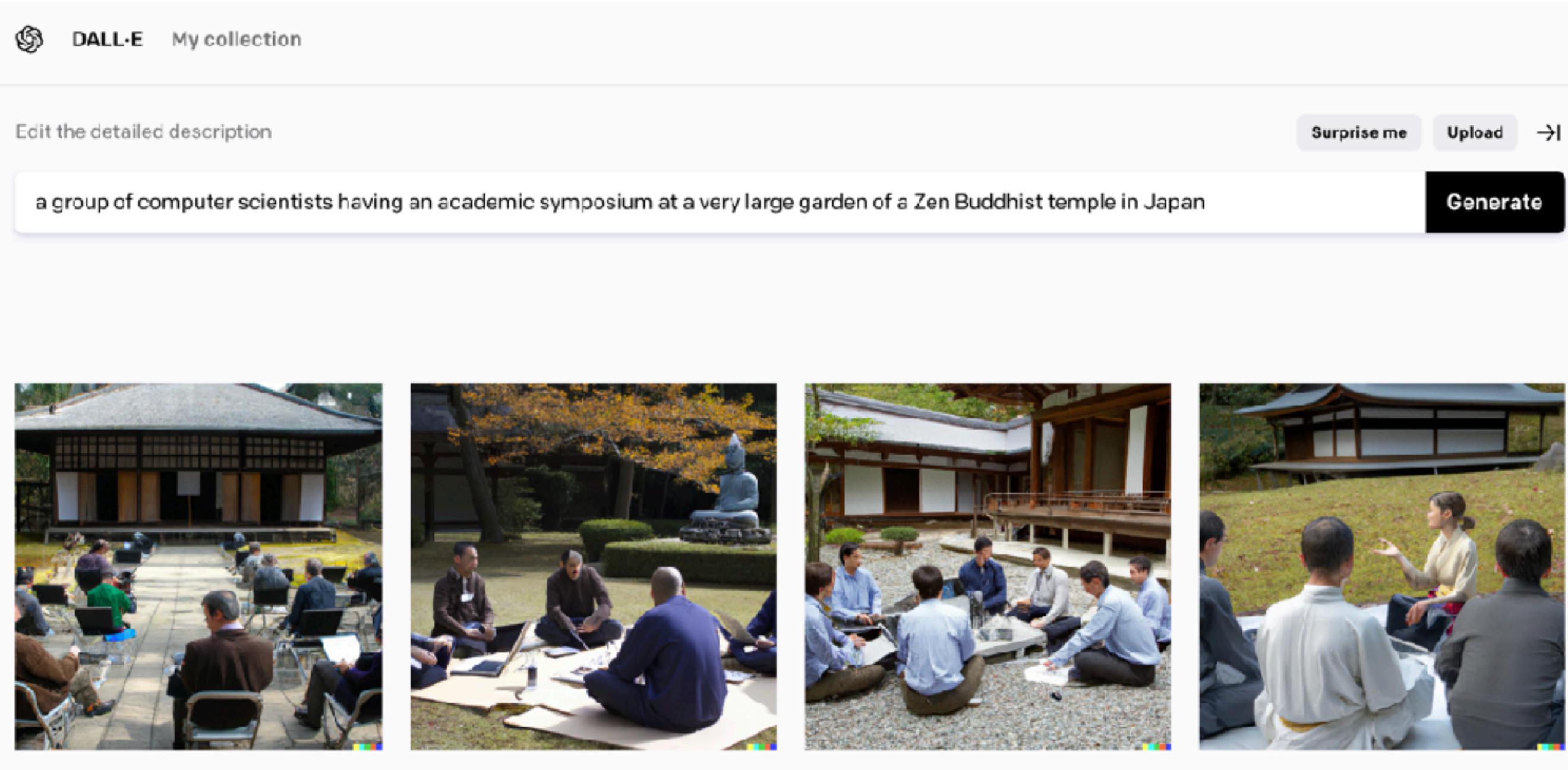
事例: 画像生成 (DALL·E2, Stable Diffusion, Midjourney, ...)

テキスト → 画像 (より正確には「テキスト+ランダム画像」 → 「意味のある画像」)

DALL·E My collection

Edit the detailed description Surprise me Upload →|

a group of computer scientists having an academic symposium at a very large garden of a Zen Buddhist temple in Japan Generate



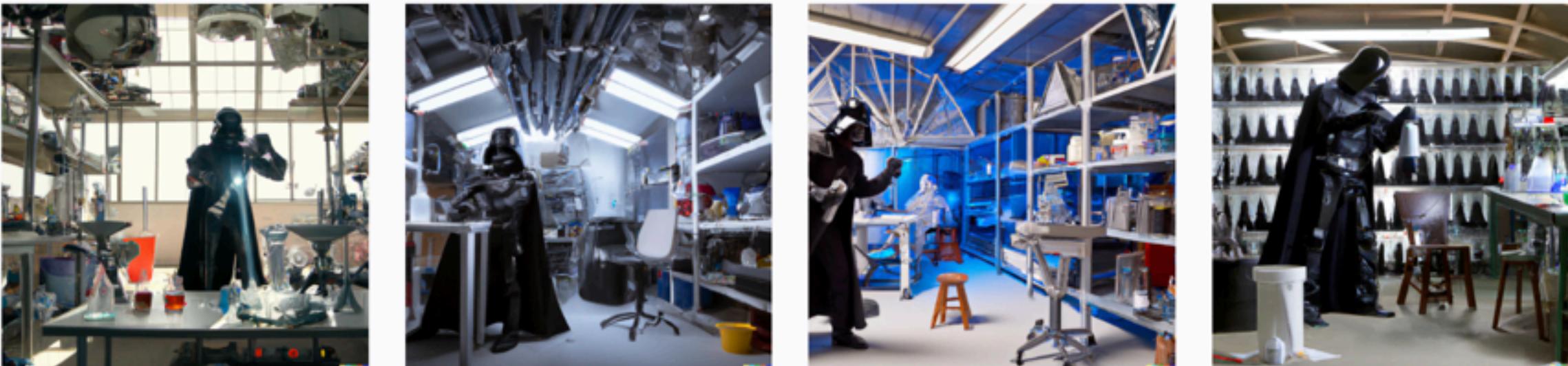
事例: 画像生成 (DALL·E2, Stable Diffusion, Midjourney, ...)

テキスト → 画像 (より正確には「テキスト+ランダム画像」 → 「意味のある画像」)

DALL·E History Collections

Edit the detailed description Surprise me Upload →

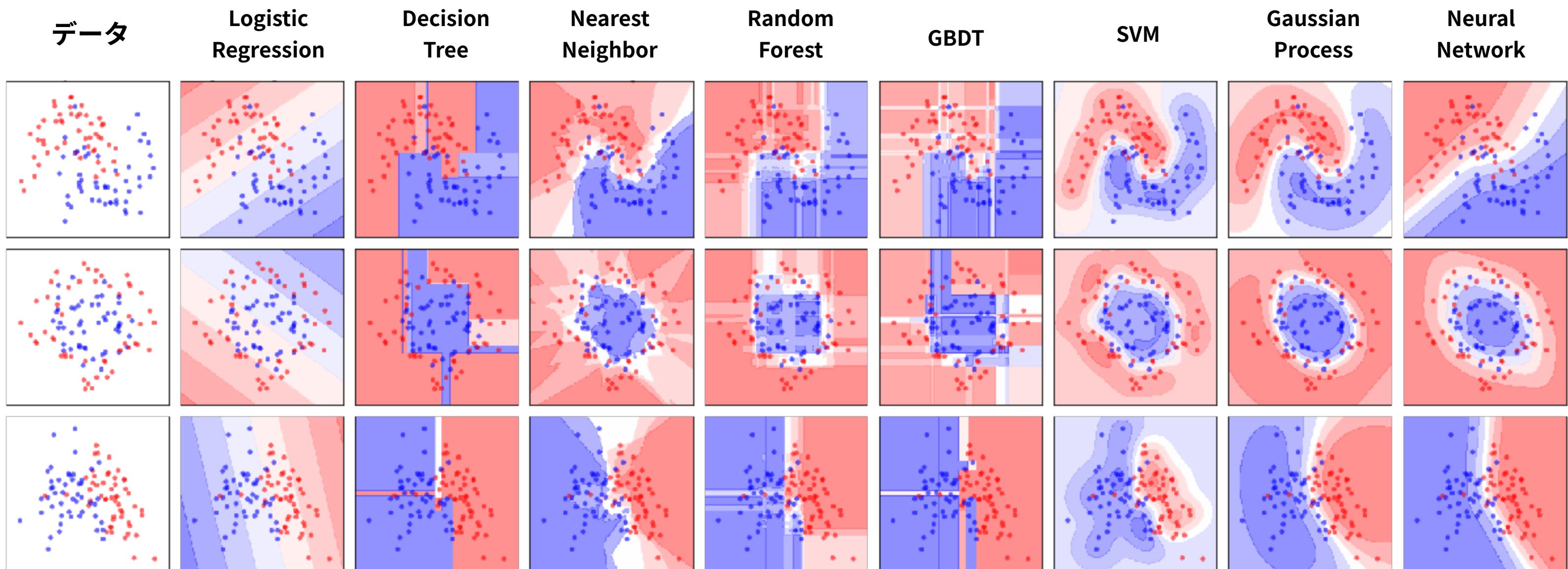
a dramatic photo of Darth Vader working at a messy scientific lab for crystal growth, wide shot Generate



The interface shows a user input field containing the text "a dramatic photo of Darth Vader working at a messy scientific lab for crystal growth, wide shot". Below the input is a "Generate" button. Below the interface are four generated images. The first image shows Darth Vader standing in a lab with various pieces of equipment and shelving units. The second image shows him from behind, looking at something on a table. The third image shows him standing in a lab with blue lighting, surrounded by shelves and equipment. The fourth image shows him from the side, working at a bench in a lab filled with glassware and equipment.

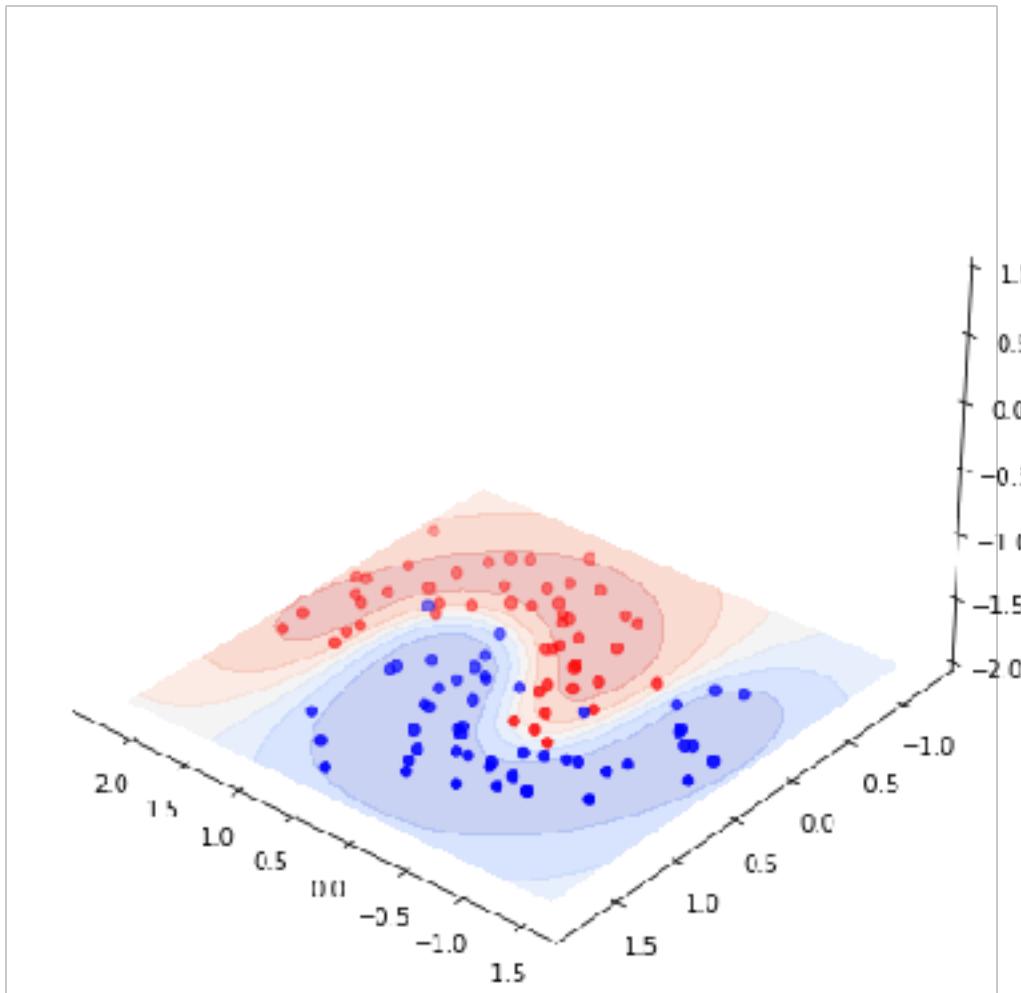
機械学習は「新しい(雑な)コンピュータプログラムの作り方」

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



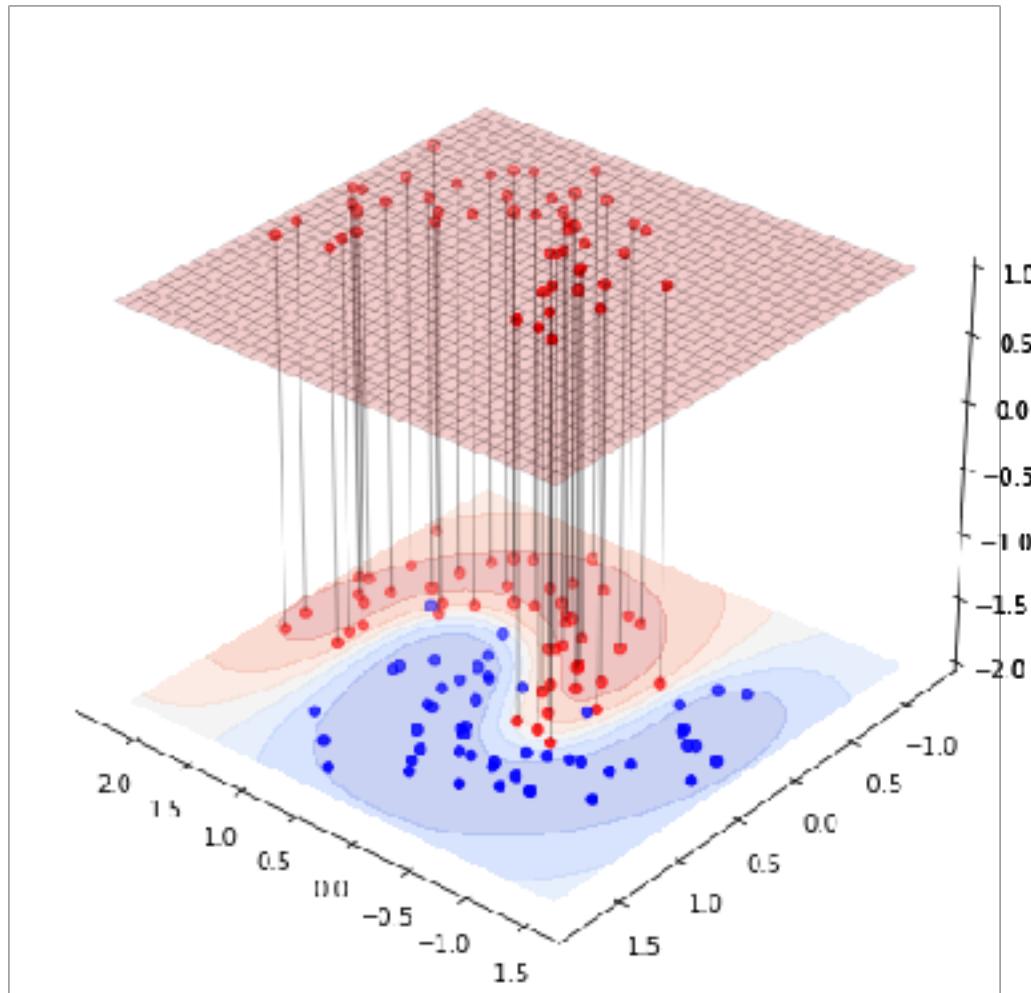
仕組みは曲面フィッティングによるデータ内挿

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



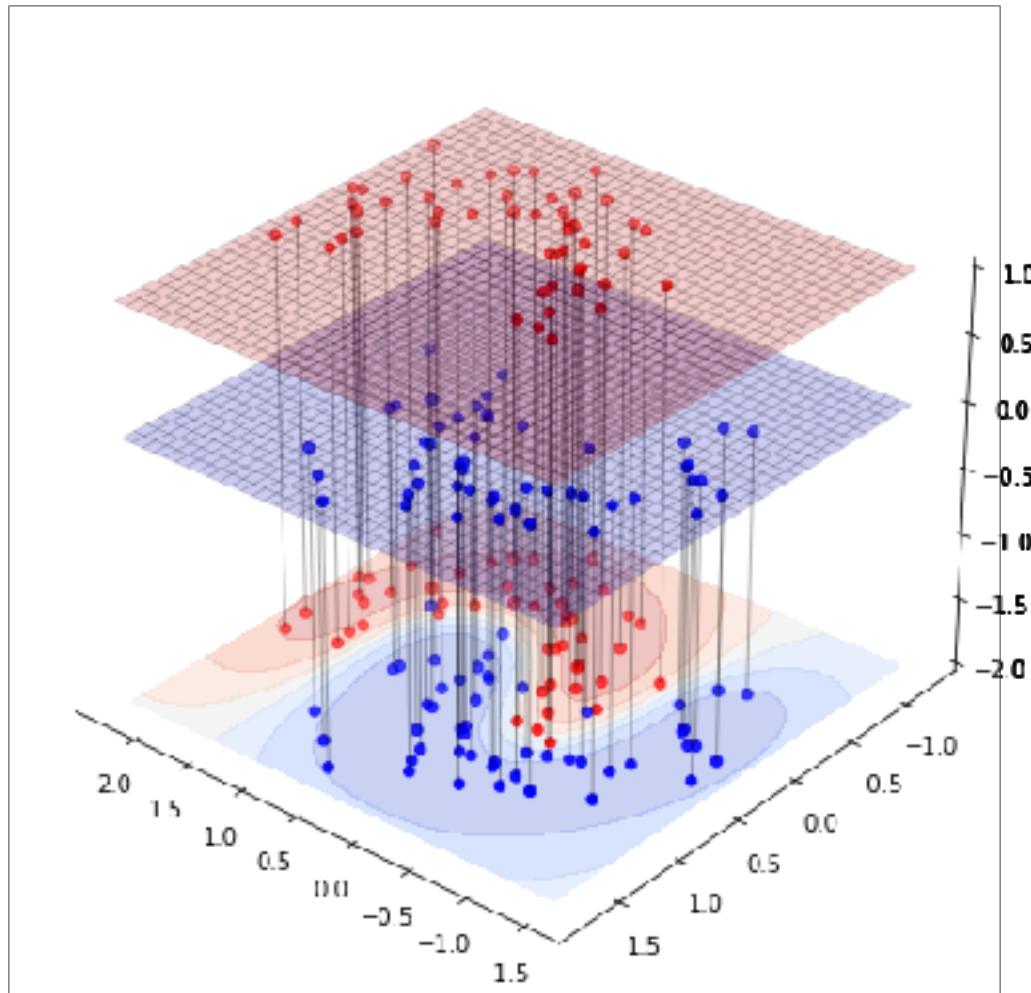
仕組みは曲面フィッティングによるデータ内挿

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



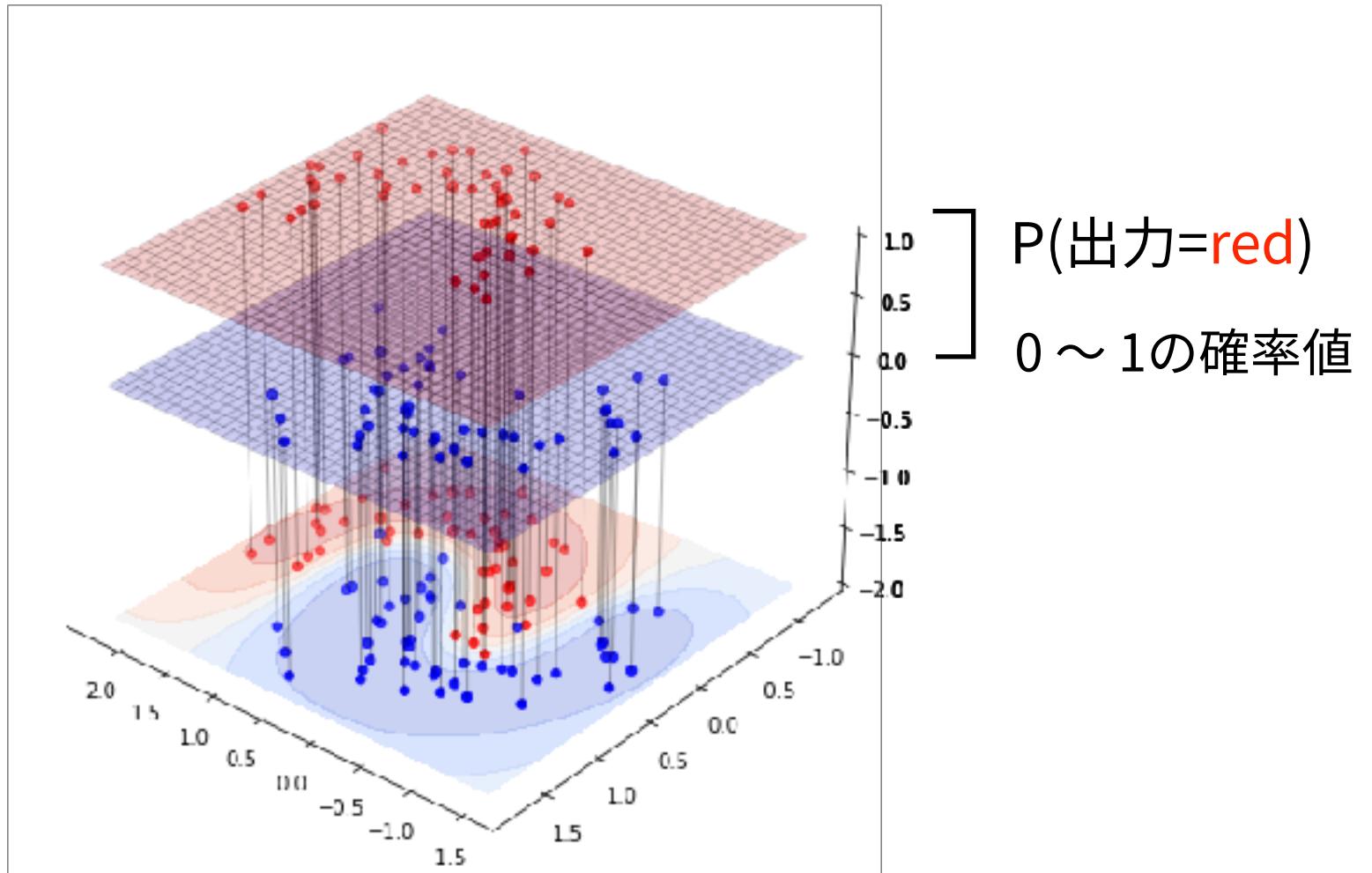
仕組みは曲面フィッティングによるデータ内挿

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



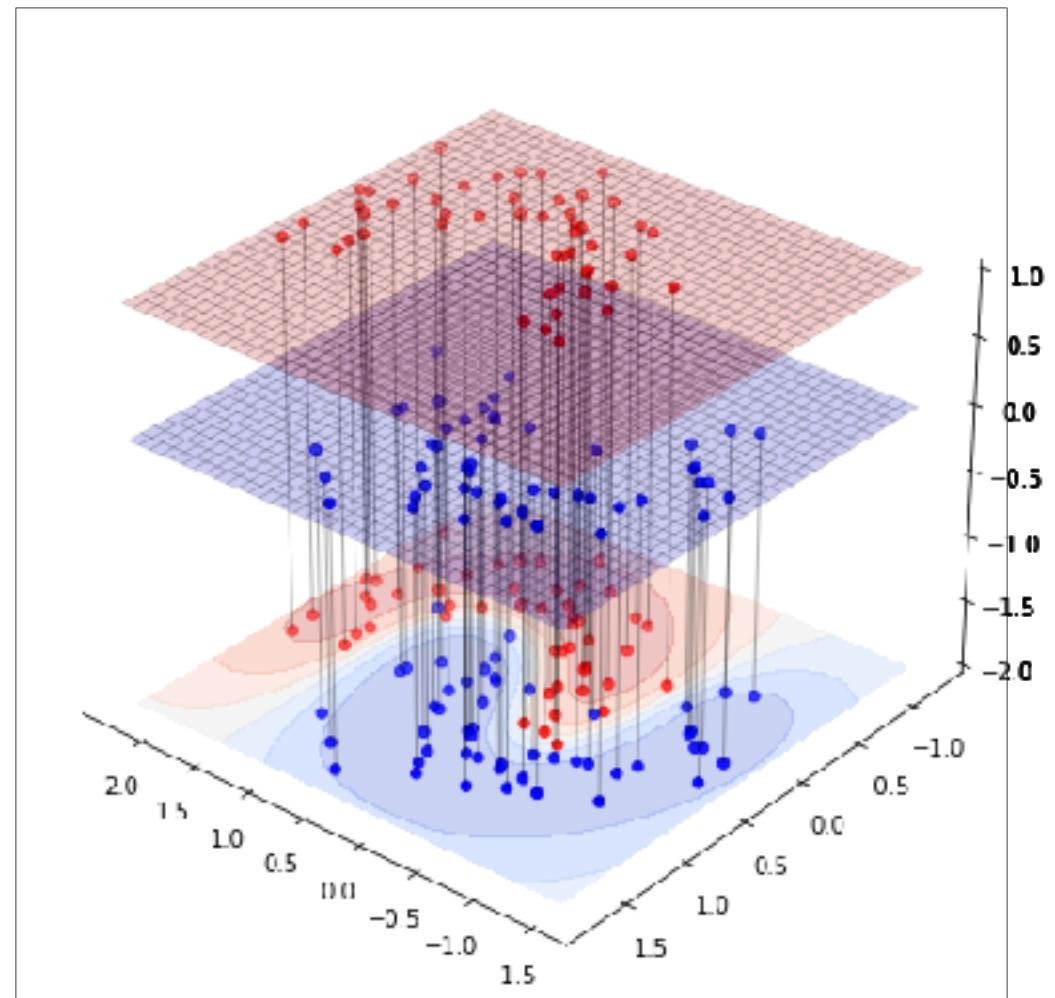
仕組みは曲面フィッティングによるデータ内挿

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

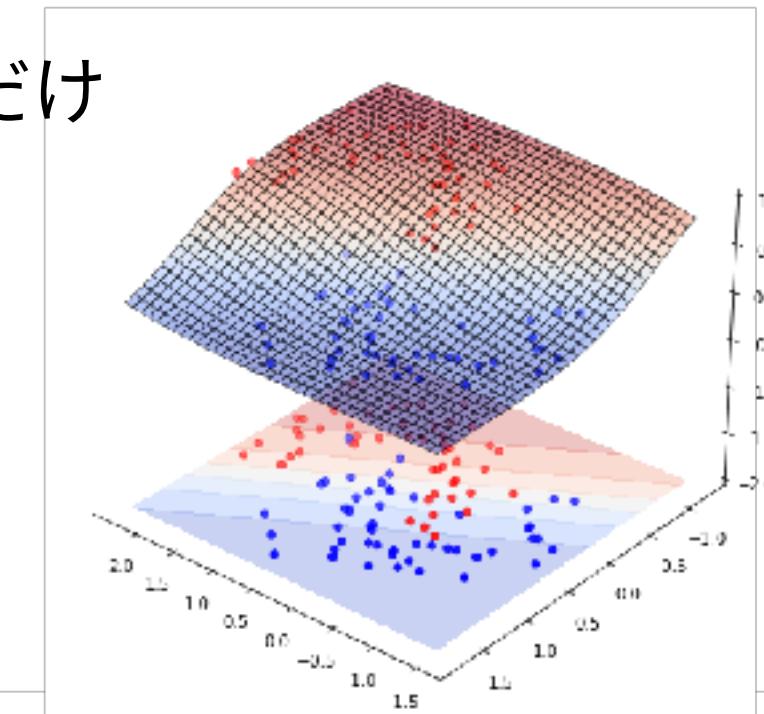


仕組みは曲面フィッティングによるデータ内挿

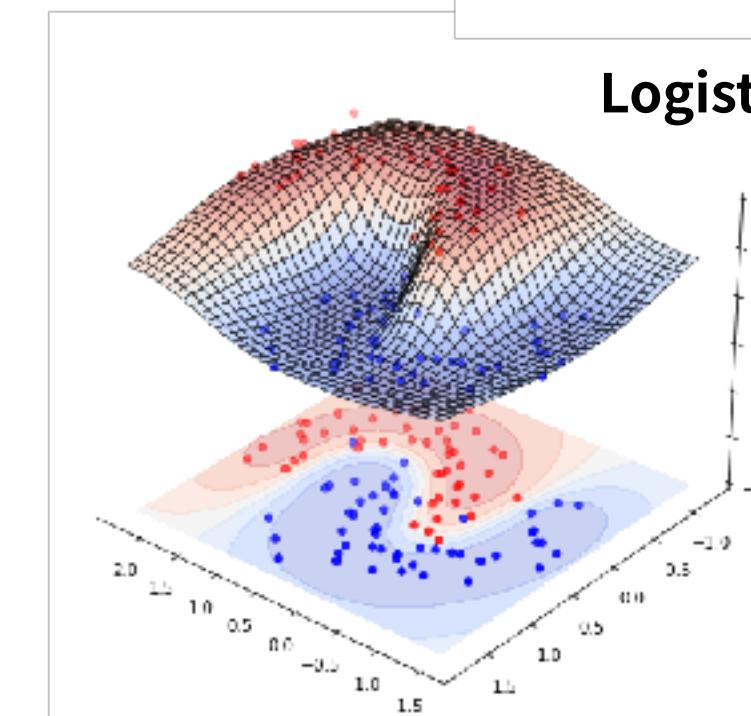
内部原理は「曲面モデル」を点にフィッティングしているだけ



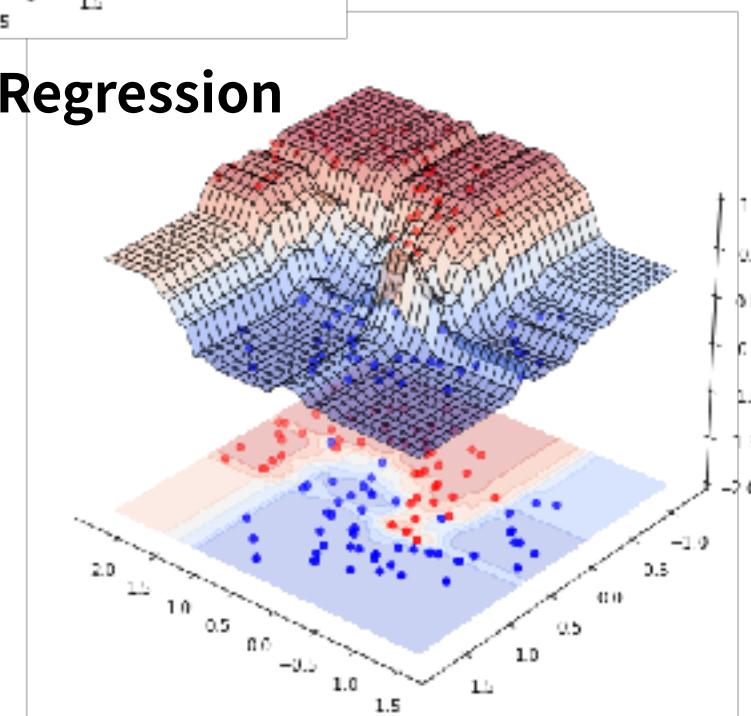
$P(\text{出力}=\text{red})$
0 ~ 1の確率値



Logistic Regression



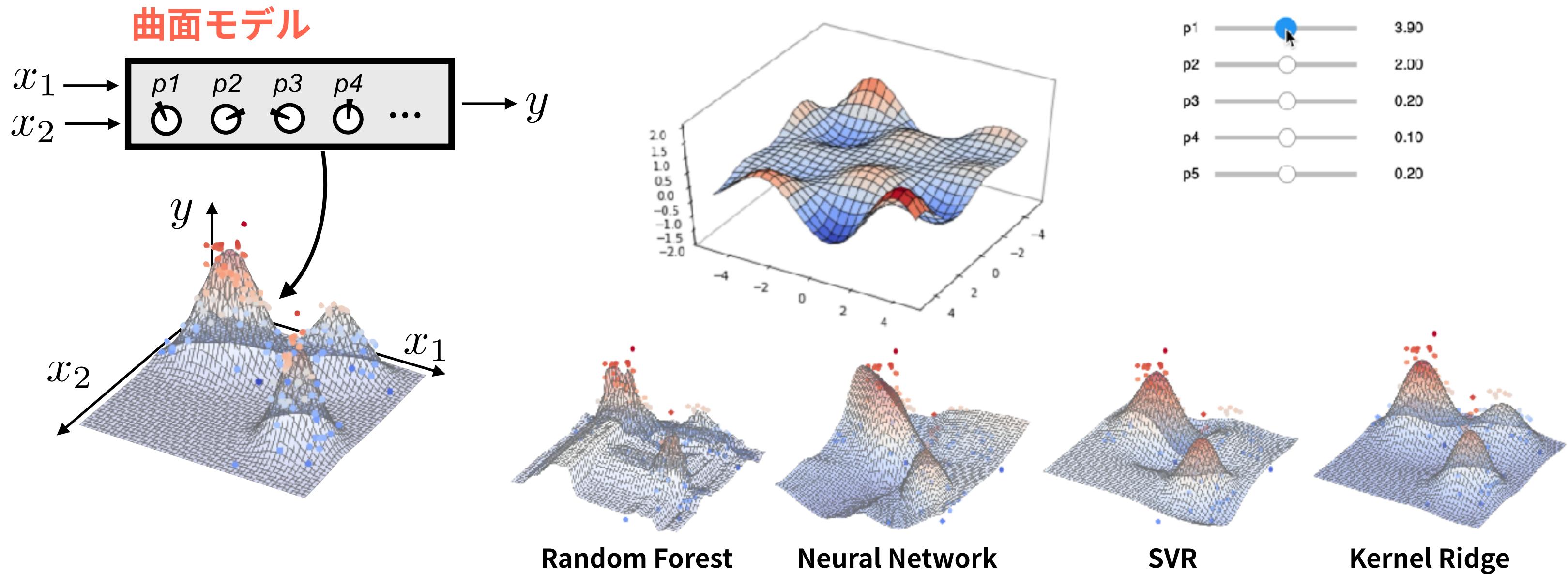
Gaussian Process



Random Forest

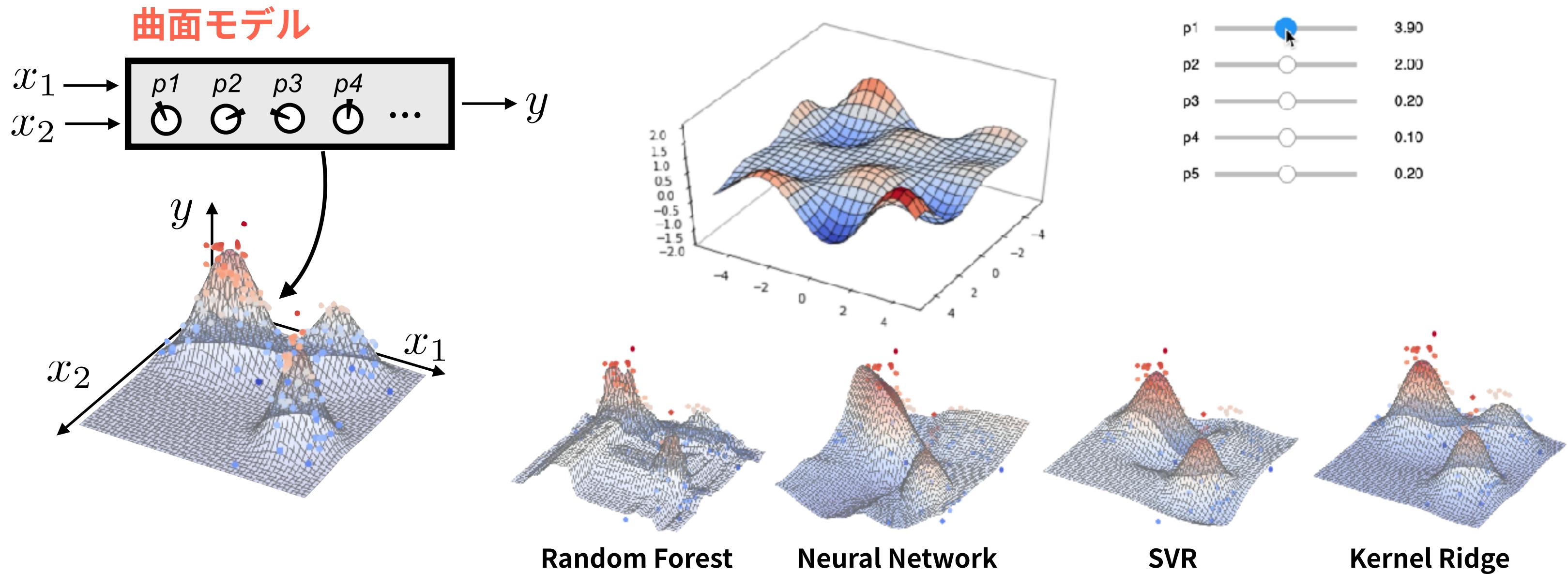
仕組みは曲面フィッティングによるデータ内挿

「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



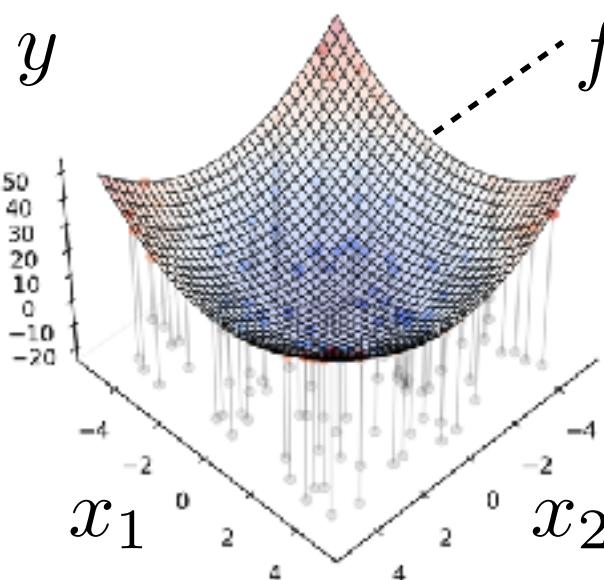
仕組みは曲面フィッティングによるデータ内挿

「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



機械学習を使うのにどれくらいデータが必要ですか？

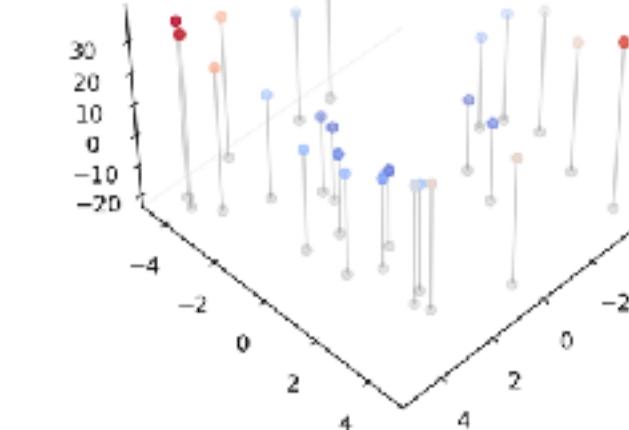
= 曲面の概形を知るのに見本点が何点必要ですか？



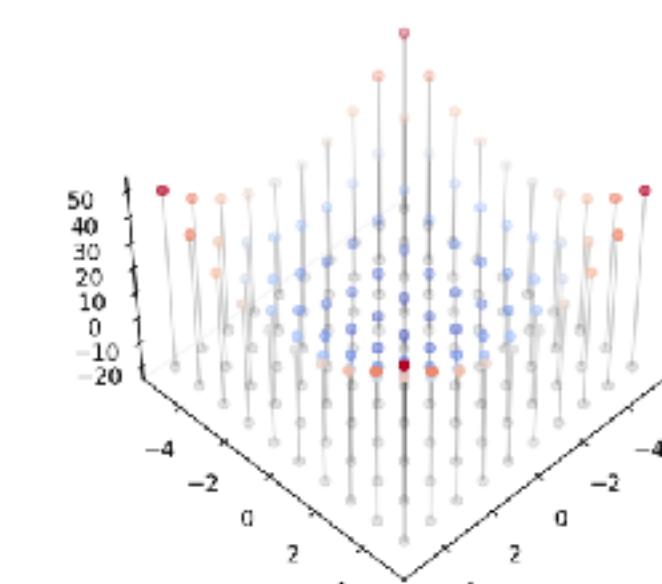
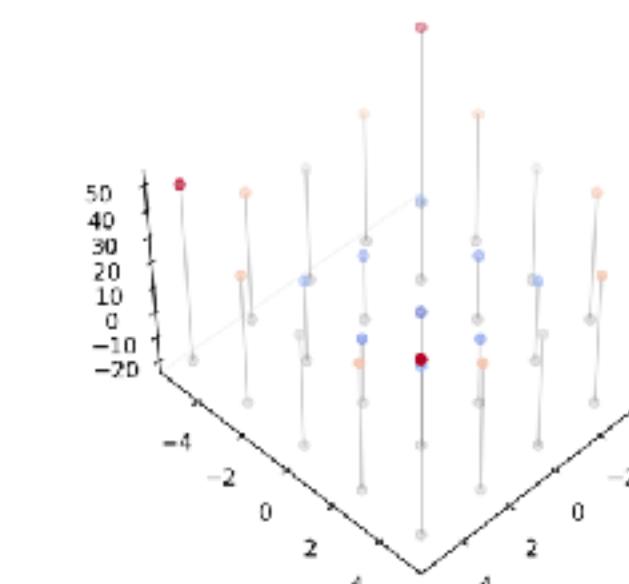
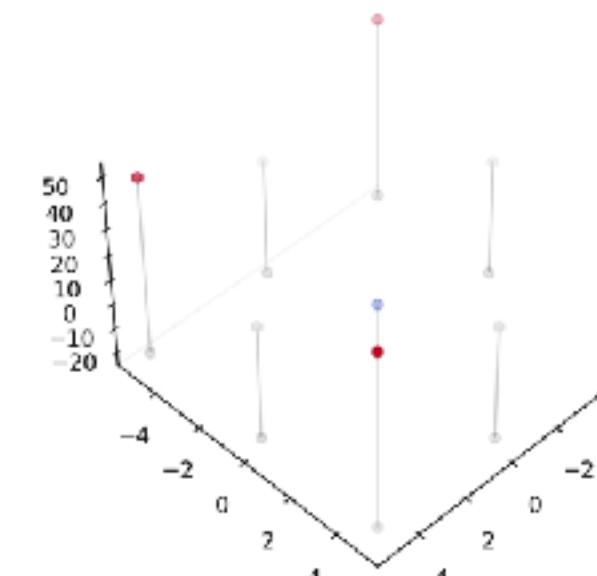
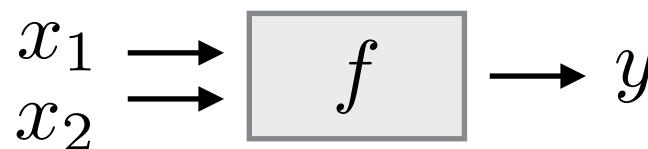
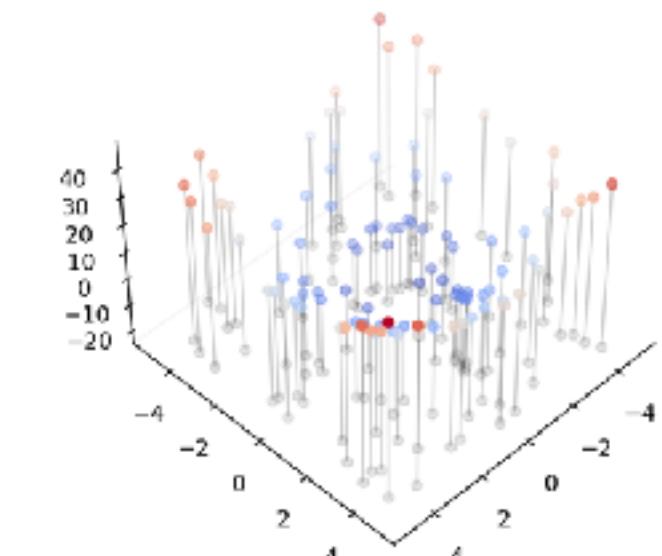
$$N = 3^2 = 9$$



$$N = 5^2 = 25$$

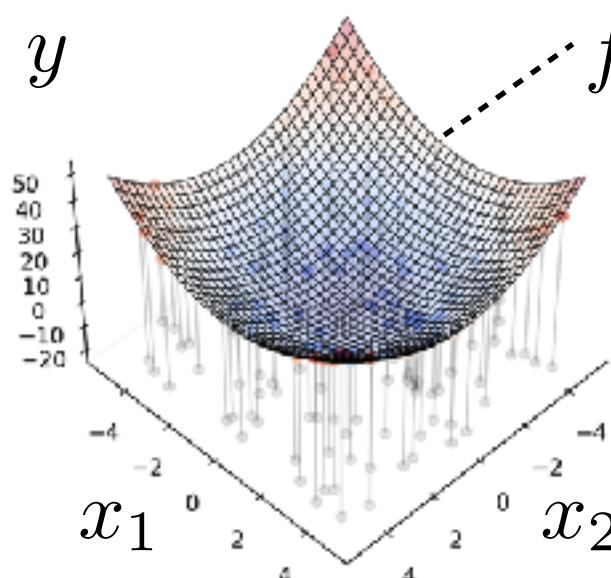


$$N = 10^2 = 100$$

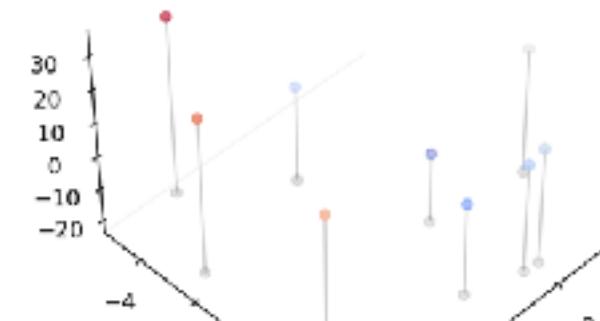


機械学習を使うのにどれくらいデータが必要ですか？

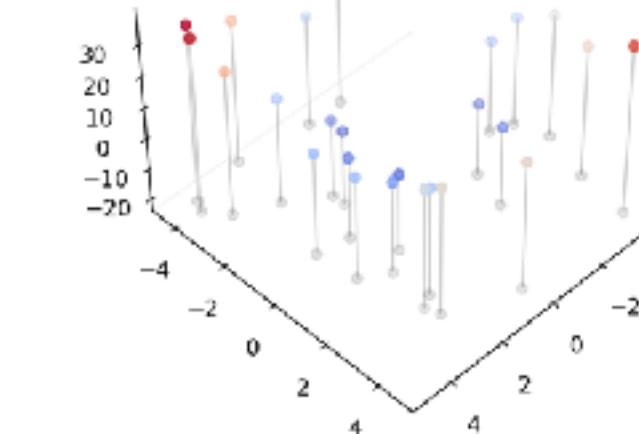
= 曲面の概形を知るために見本点が何点必要ですか？



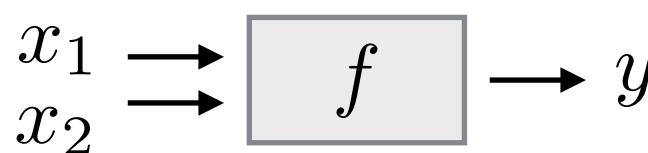
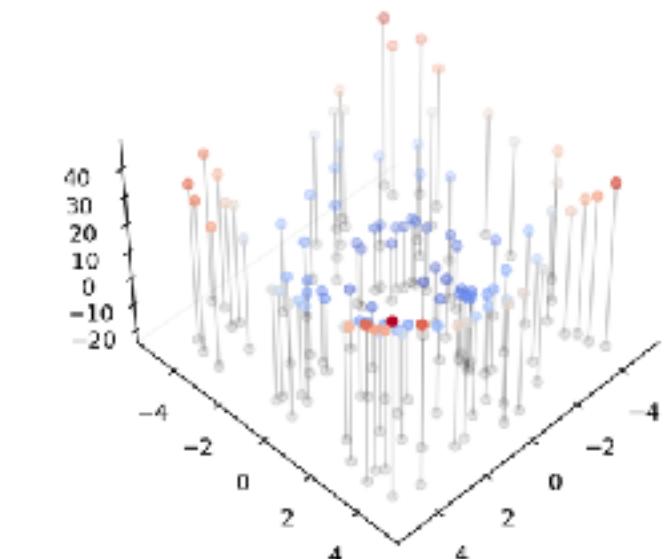
$$N = 3^2 = 9$$



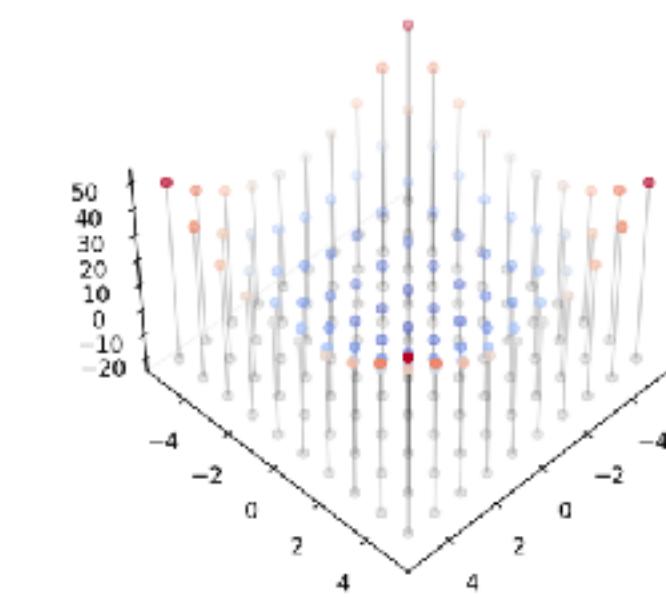
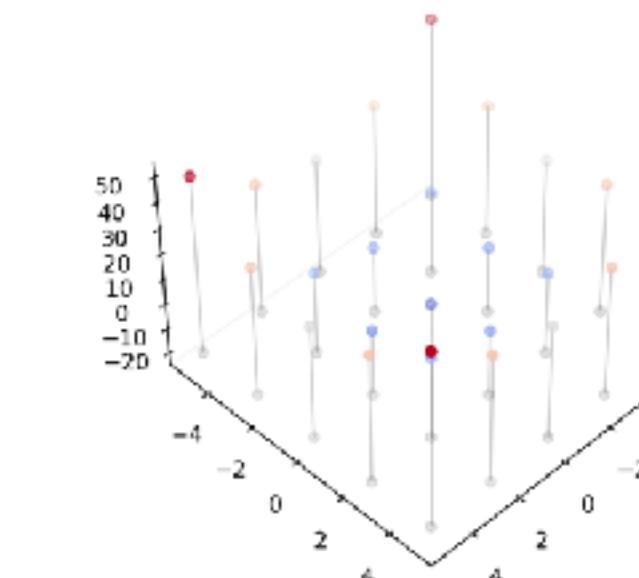
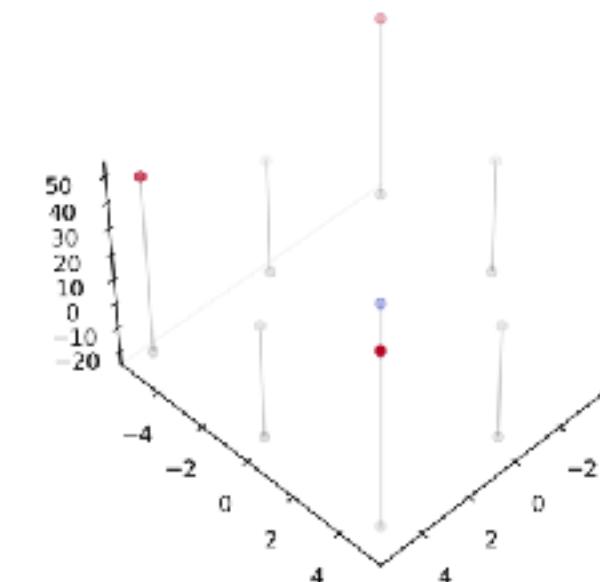
$$N = 5^2 = 25$$



$$N = 10^2 = 100$$

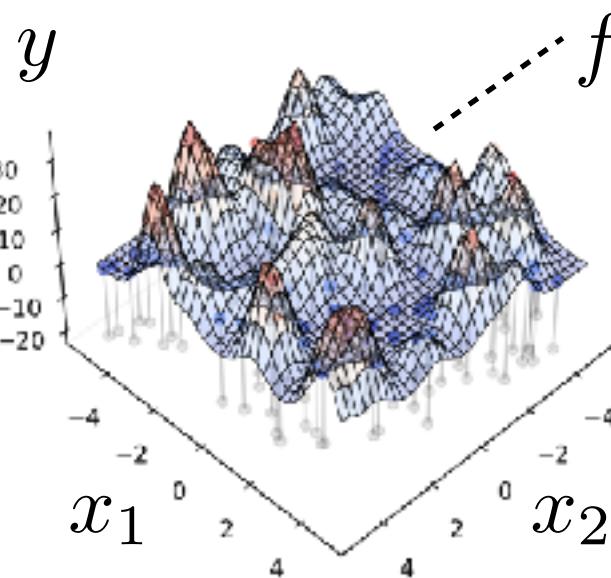


多変数(高次元)だと
データがもっと必要

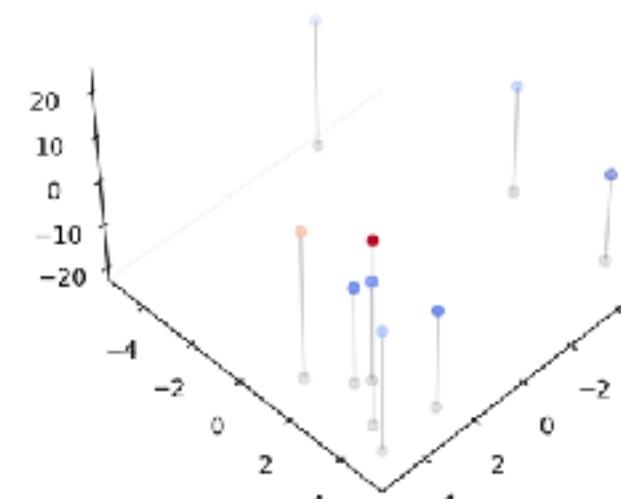


機械学習を使うのにどれくらいデータが必要ですか？

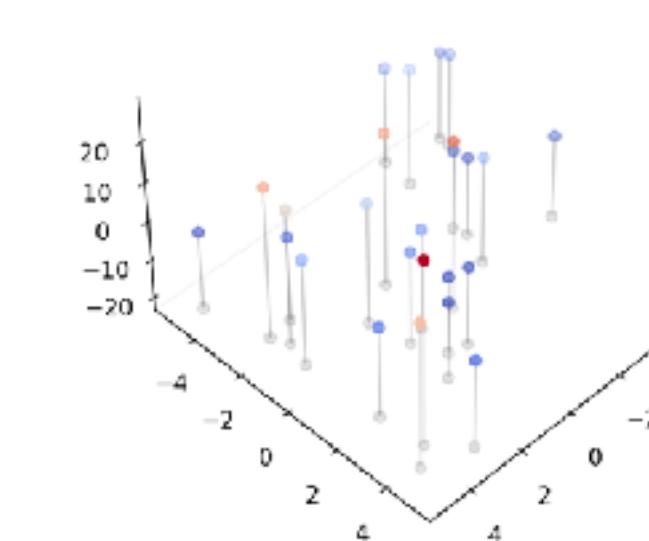
= 曲面の概形を知るのに見本点が何点必要ですか？



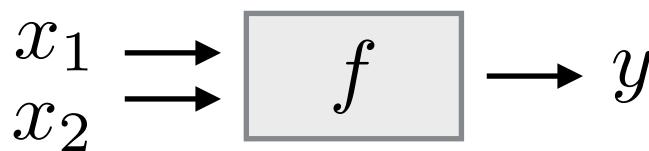
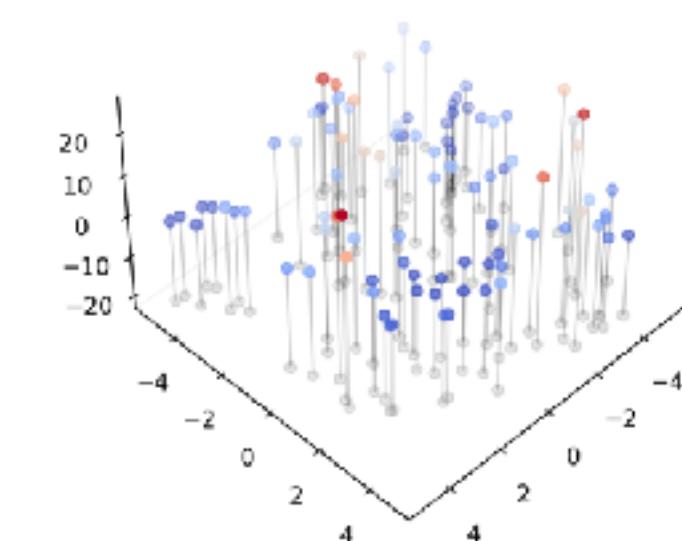
$$N = 3^2 = 9$$



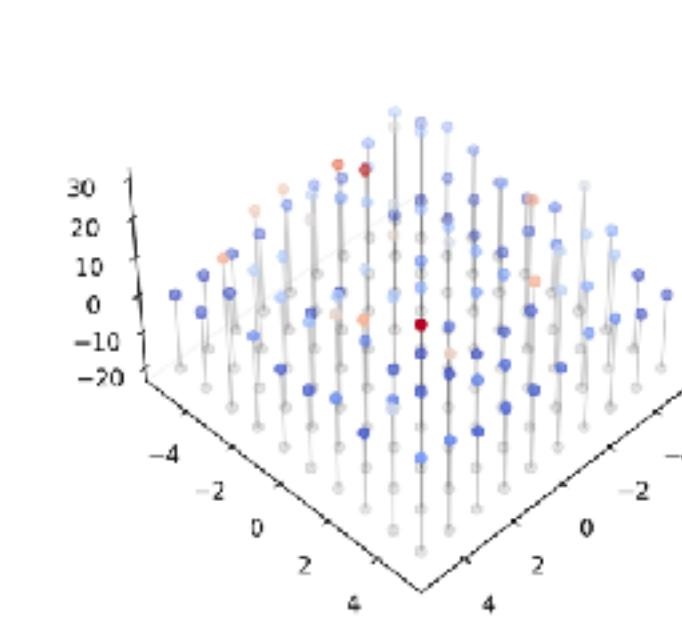
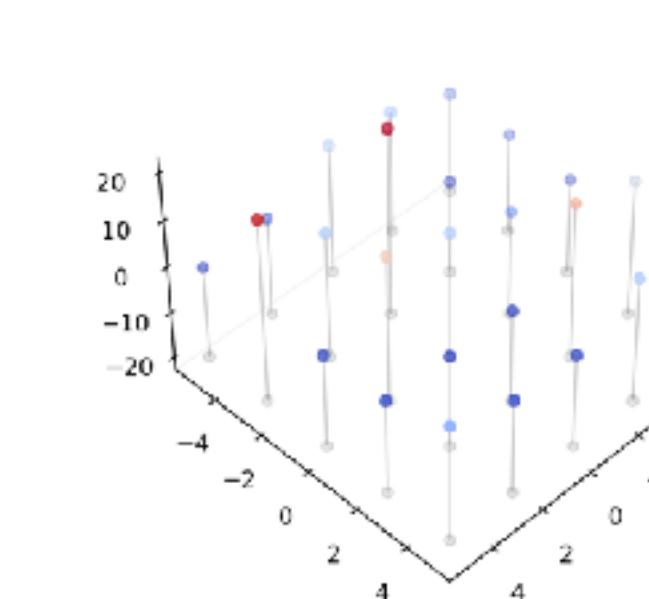
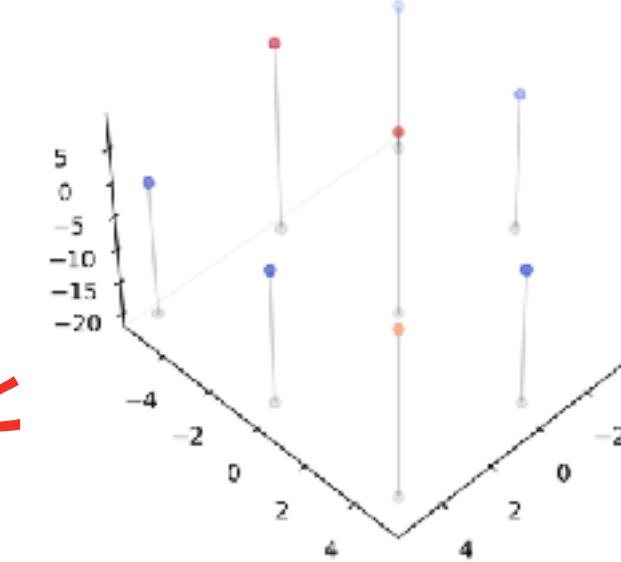
$$N = 5^2 = 25$$



$$N = 10^2 = 100$$

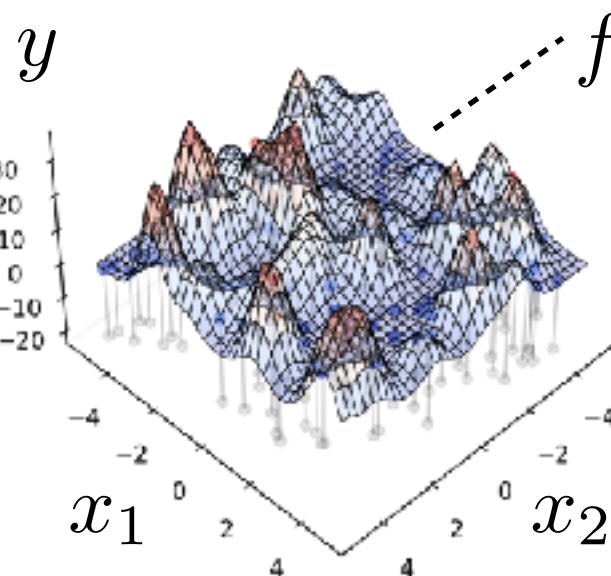


曲面(入出力)が複雑だと
もっとデータ必要

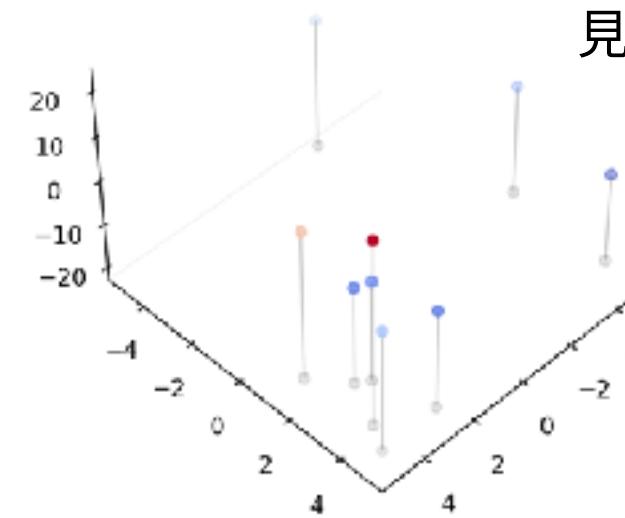


機械学習を使うのにどれくらいデータが必要ですか？

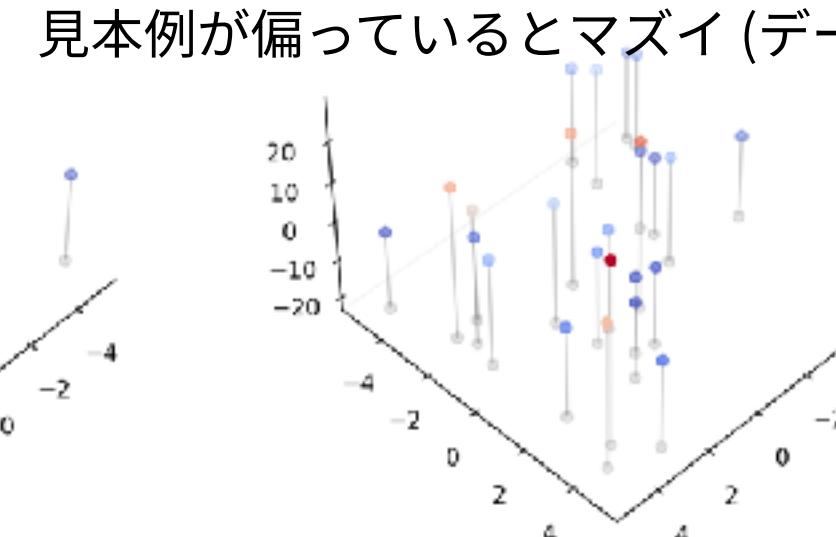
= 曲面の概形を知るために見本点が何点必要ですか？



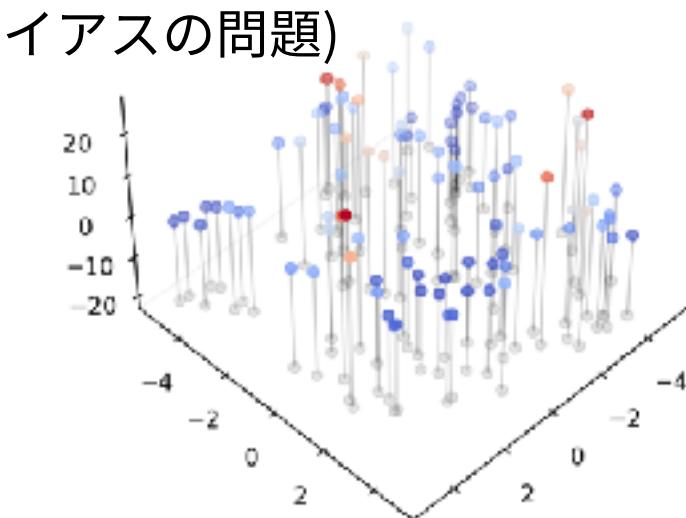
$$N = 3^2 = 9$$



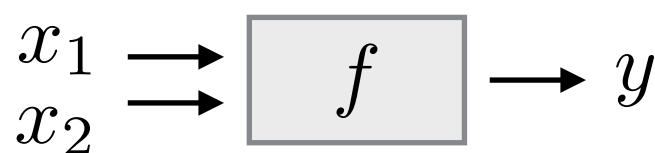
$$N = 5^2 = 25$$



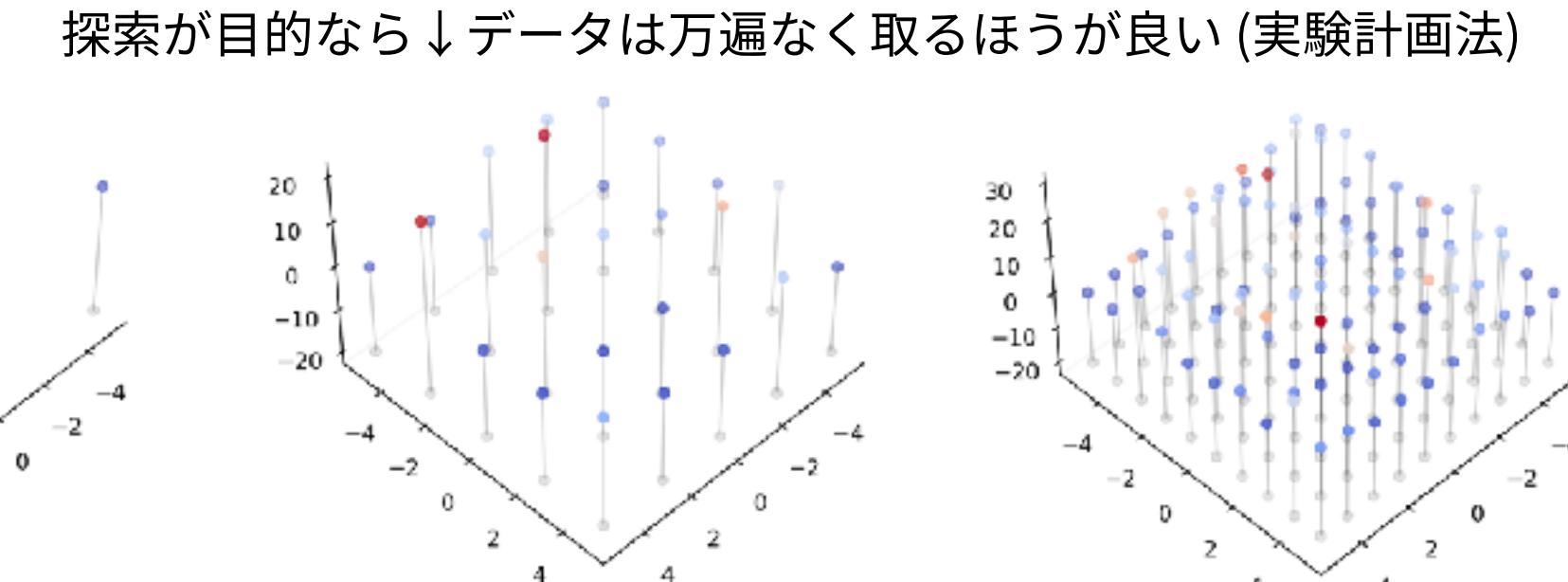
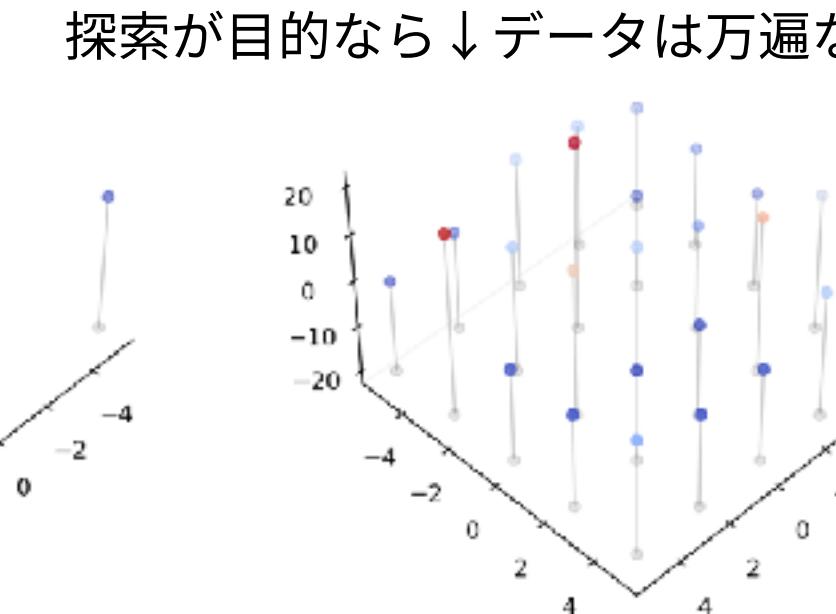
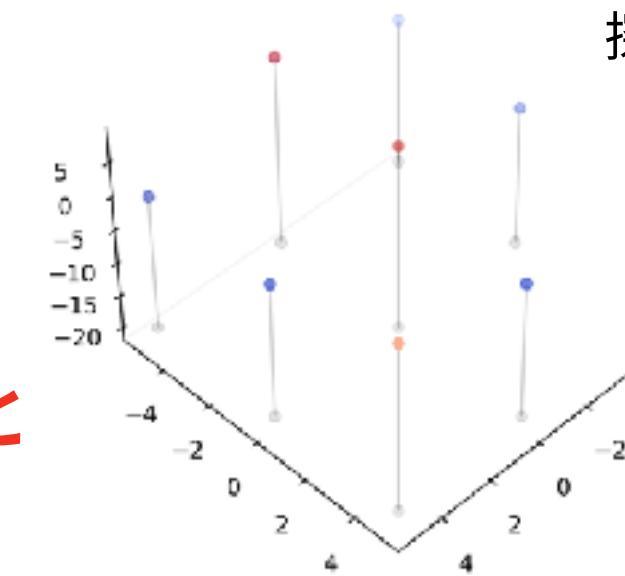
$$N = 10^2 = 100$$



見本例が偏っているとマズイ (データバイアスの問題)



曲面(入出力)が複雑だと
もっとデータ必要



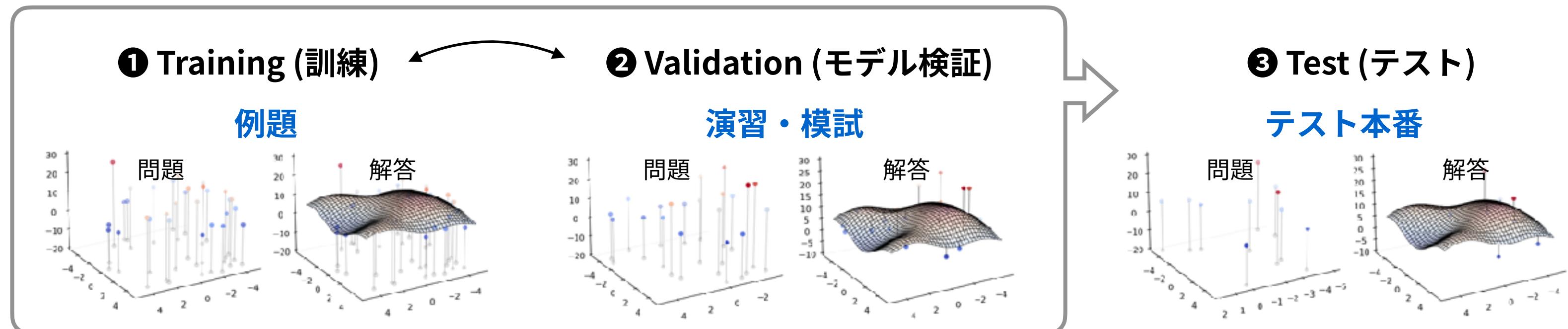
探索が目的なら↓データは万遍なく取るほうが良い (実験計画法)

機械学習の予測が当たっているかの確認には落とし穴多数！

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？

- ✓ 予測精度も手元のデータから見積もるしかないので一般にこの判断は激ムズ
- ✓ データは手元にもうあるので意図しないカンニング事故(data leakage)がとても起きやすい…



半世紀前に生まれた「希望的な呼称」による幻想にご注意

現在の機械学習は一般に想像するSF的な「人工知能(AI)」とはかなりかけ離れているが、「データを予測に変える」機能があまりに強力なため、私たちの日常生活から今後の社会のカタチにまで影響を及ぼそうとしている…

「人工知能」「機械学習」などの希望的な呼称は本質をミスリードしやすいのでご注意を！

https://spectrum.ieee.org/files/11920/10_Spectrum_2021.pdf

SIGART Newsletter No. 57 April 1976

ARTIFICIAL INTELLIGENCE MEETS NATURAL STUPIDITY

Drew McDermott

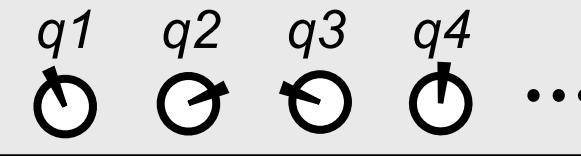
MIT AI Lab Cambridge, Mass 02139

As a field, artificial intelligence has always been on the border of respectability, and therefore on the border of crackpottery. Many critics <Dreyfus, 1972>, <Lighthill, 1973> have urged that we are over the border. We have been very defensive toward this charge, drawing ourselves up with dignity when it is made and folding the cloak of Science about us. On the other hand, in private, we have been justifiably proud of our willingness to explore weird ideas, because pursuing them is the only way to make progress.

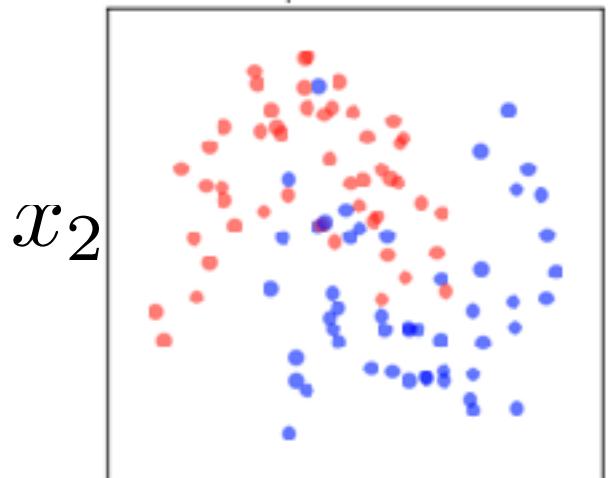
深層学習と表現学習

 x_1 x_2

曲面モデル

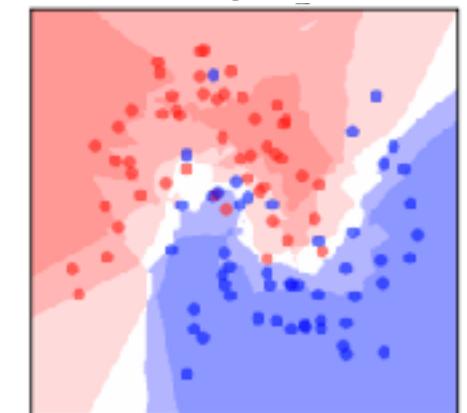


入力表現

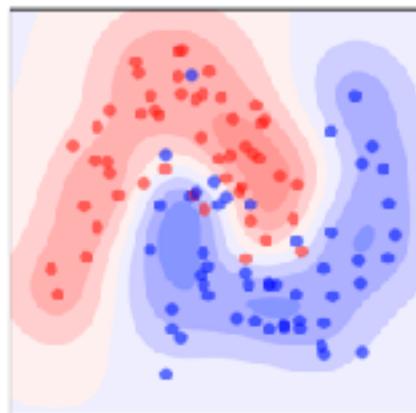


**標準的な
機械学習
(データ内挿)**

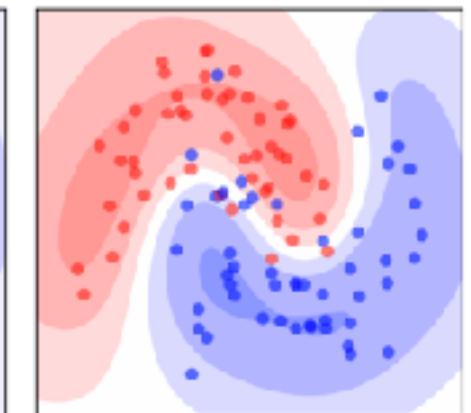
Nearest
Neighbor



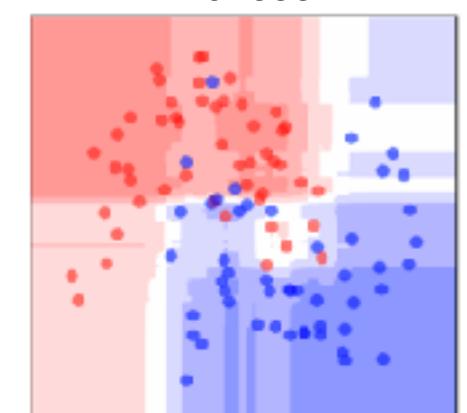
SVM



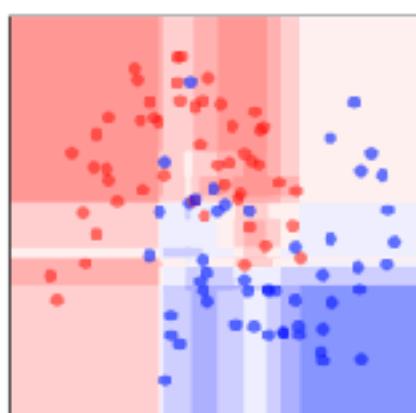
Gaussian
Process



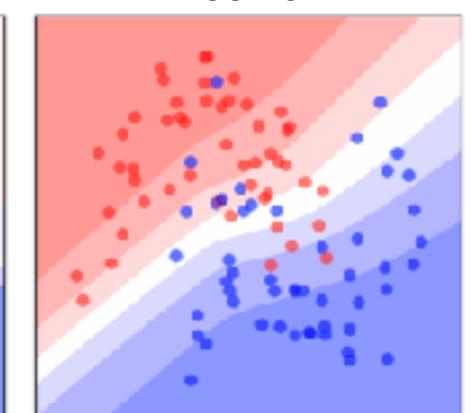
Random
Forest



GBDT

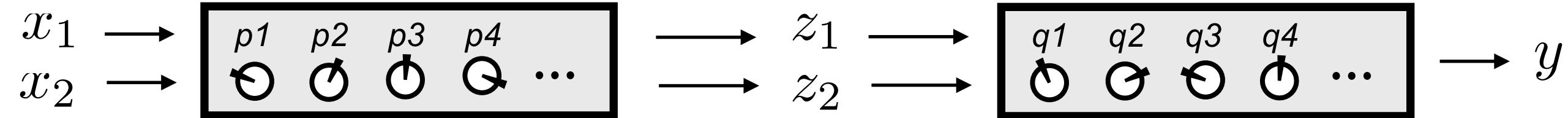


Neural
Network



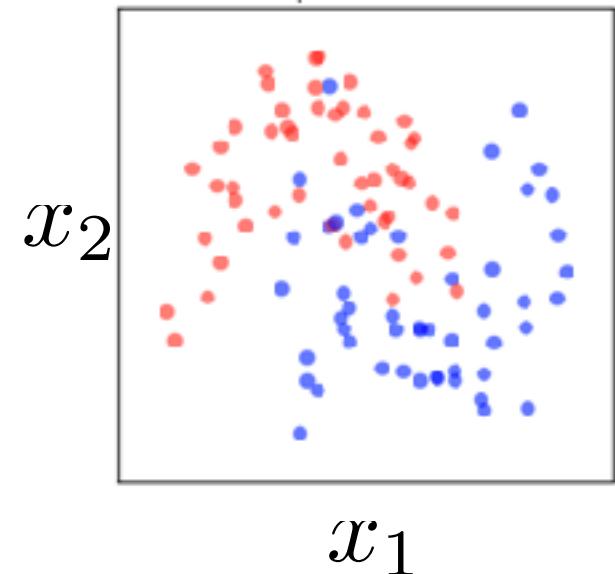
深層學習と表現學習

変数変換(表現學習)



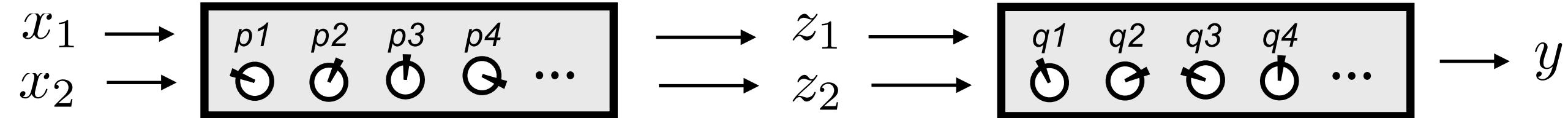
曲面モデル

入力表現



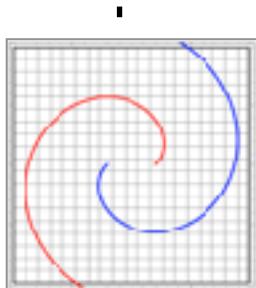
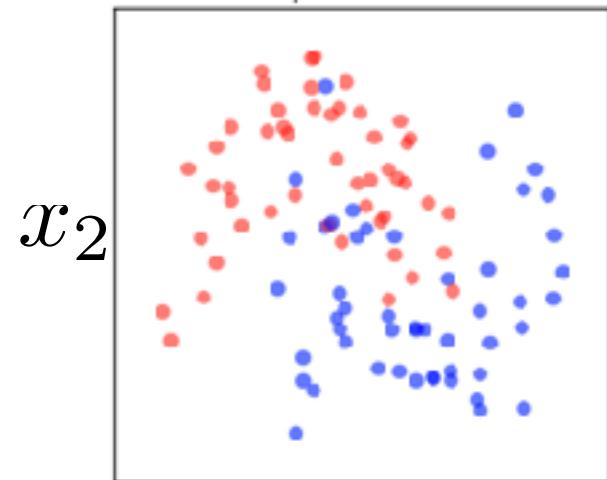
深層学習と表現学習

変数変換(表現学習)



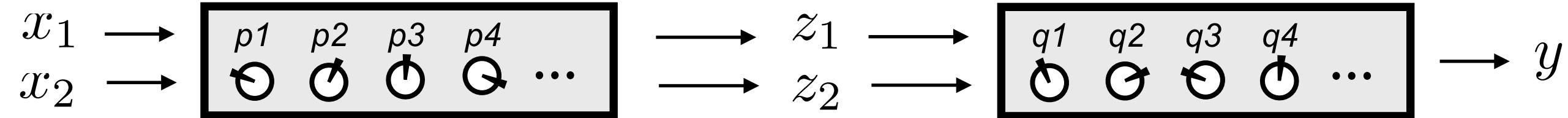
曲面モデル

入力表現



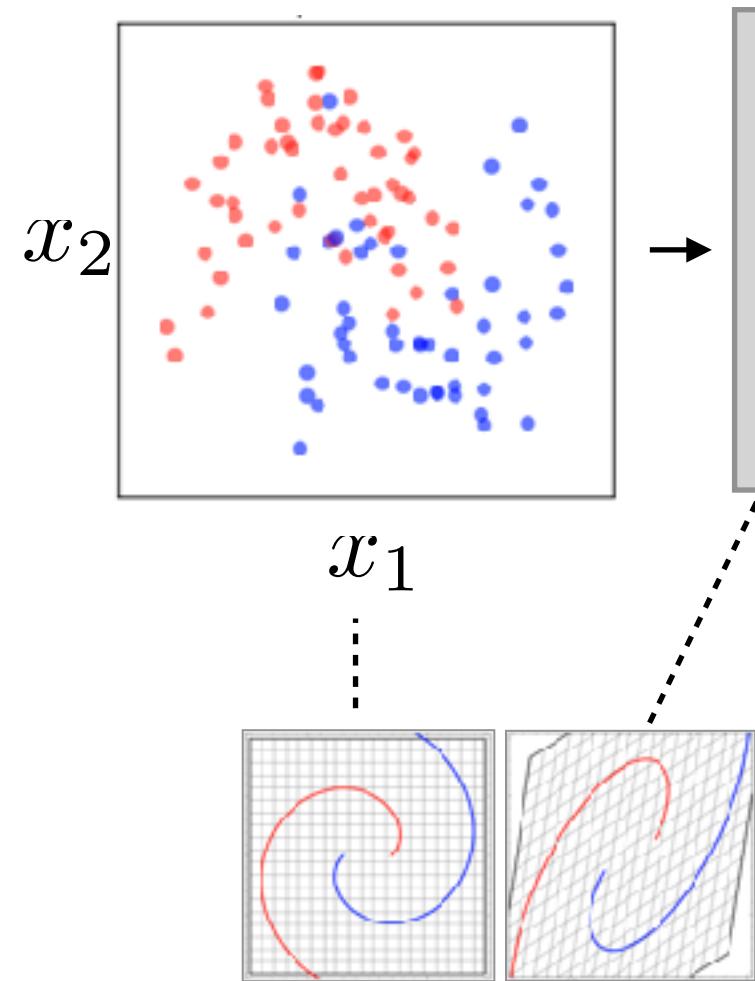
深層学習と表現学習

変数変換(表現学習)



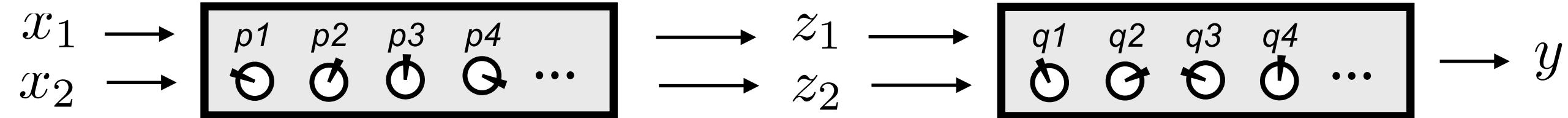
曲面モデル

入力表現



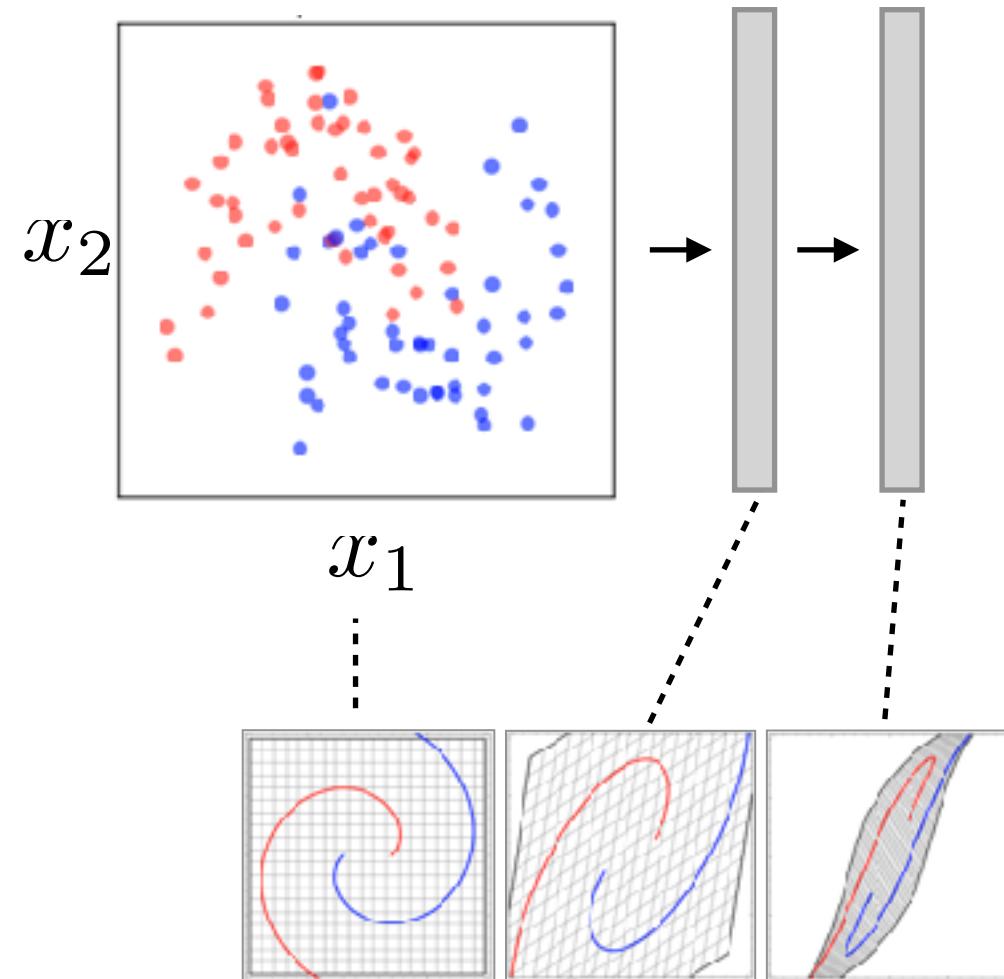
深層學習と表現學習

変数変換(表現學習)



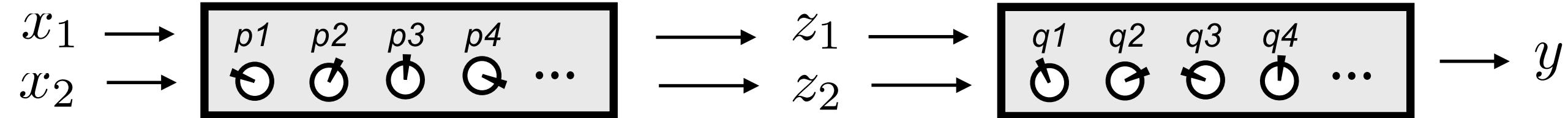
曲面モデル

入力表現



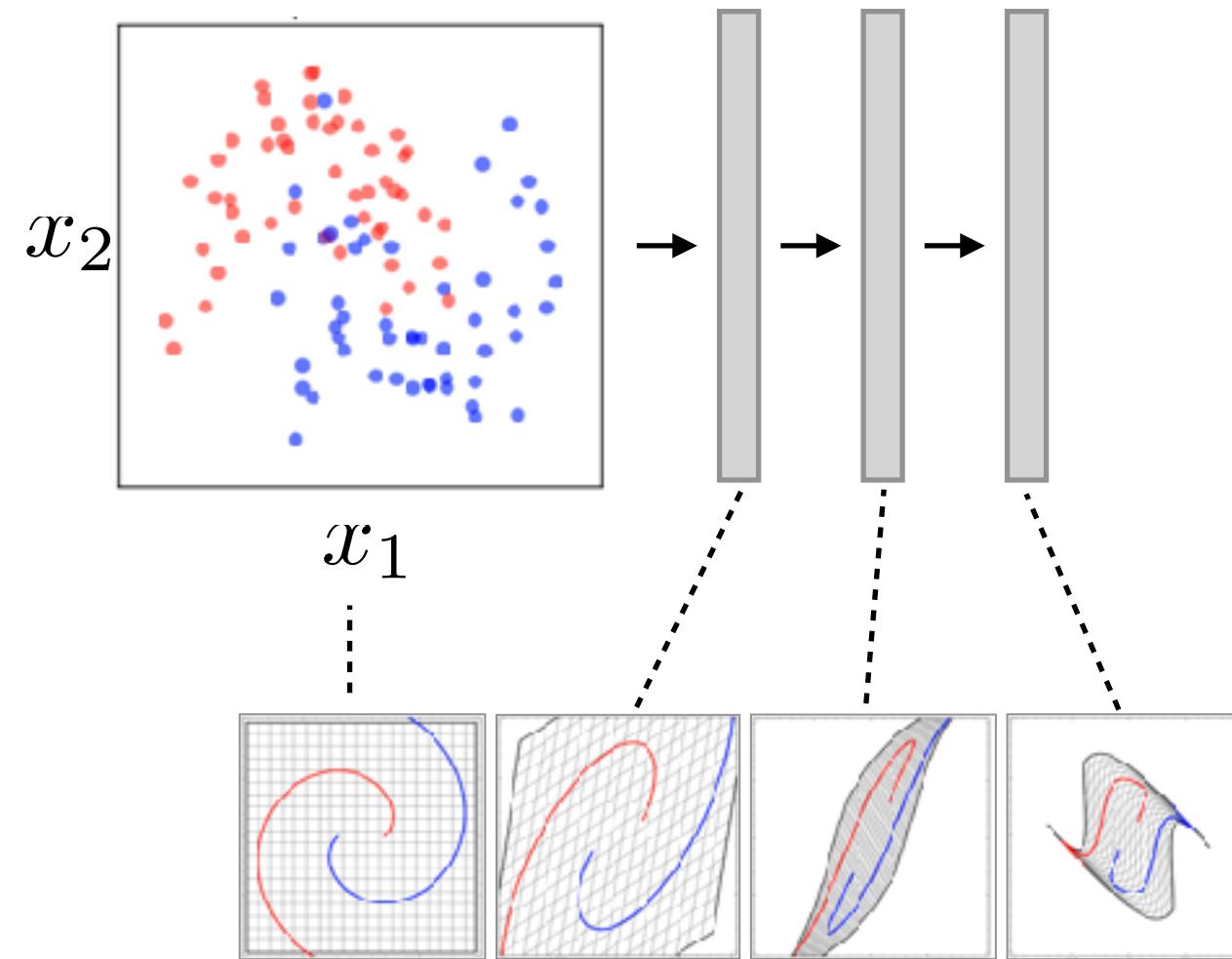
深層学習と表現学習

変数変換(表現学習)



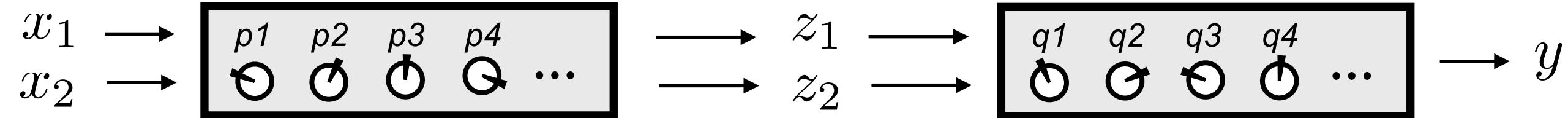
曲面モデル

入力表現

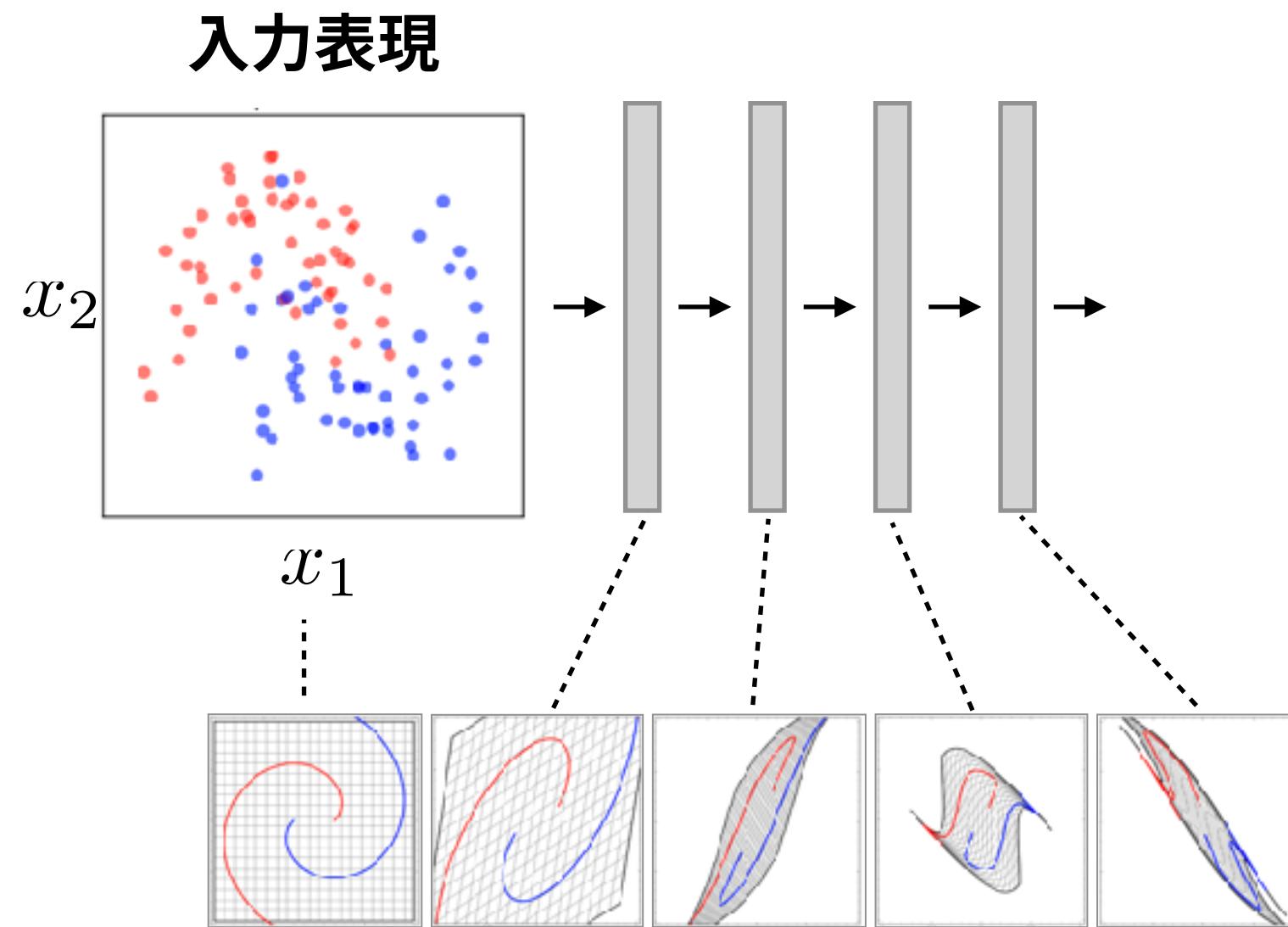


深層学習と表現学習

変数変換(表現学習)



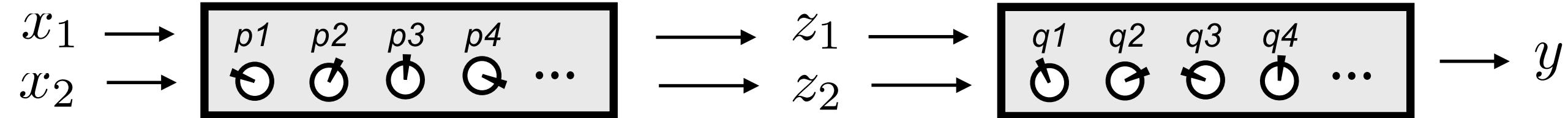
曲面モデル



入力表現

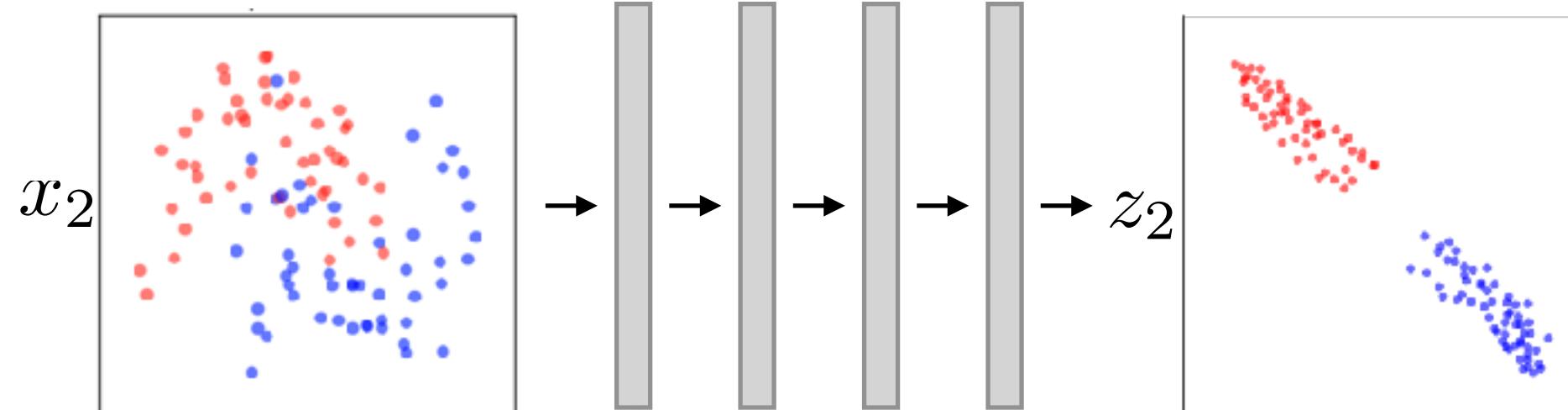
深層学習と表現学習

変数変換(表現学習)

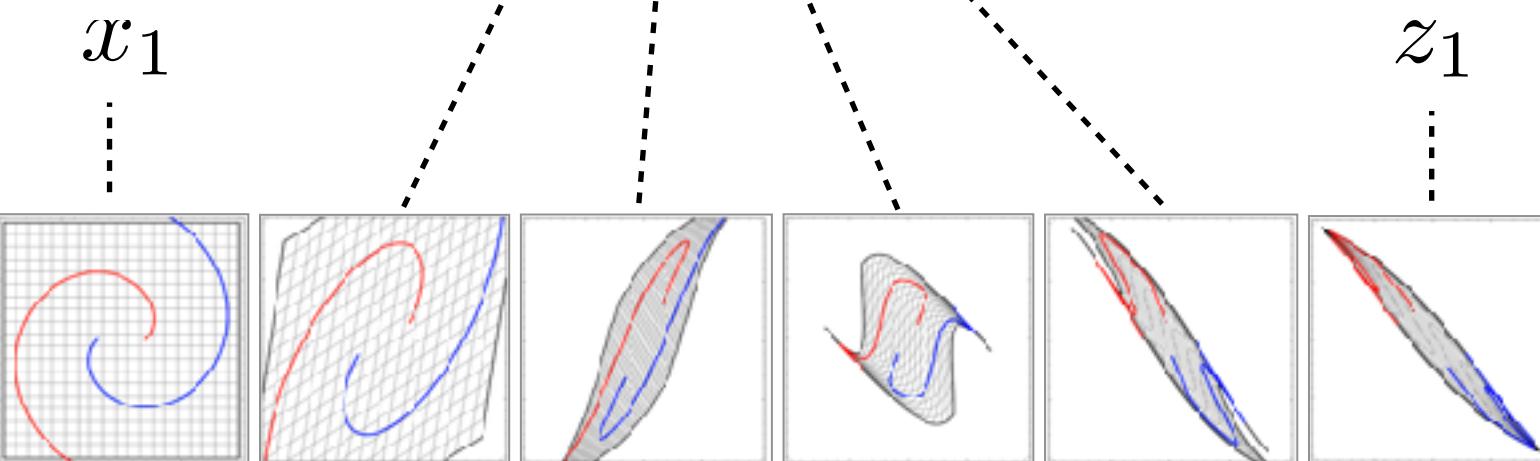


曲面モデル

入力表現

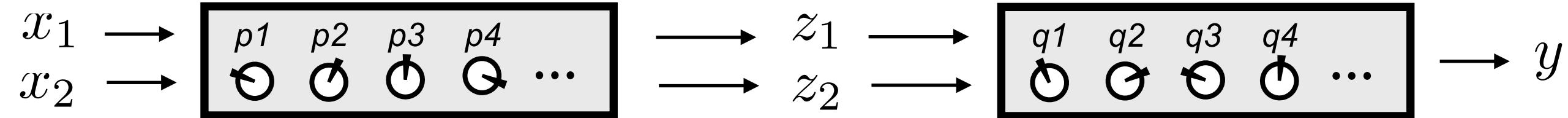


良い表現



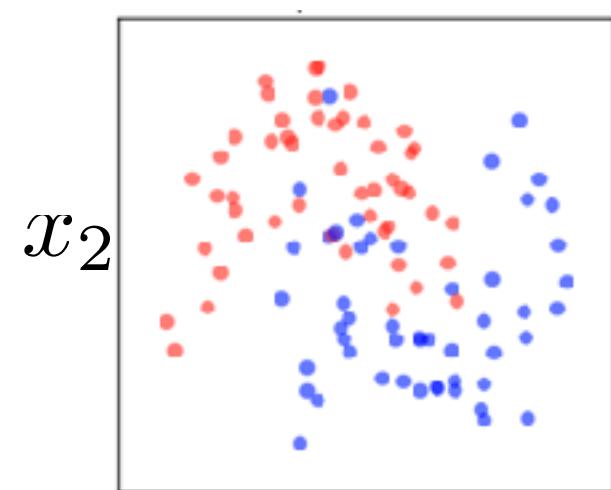
深層学習と表現学習

変数変換(表現学習)

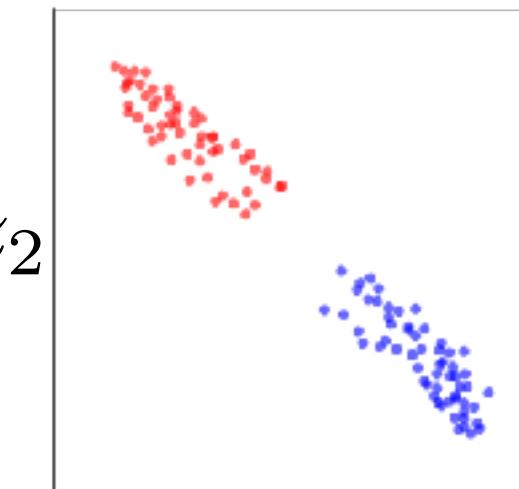


曲面モデル

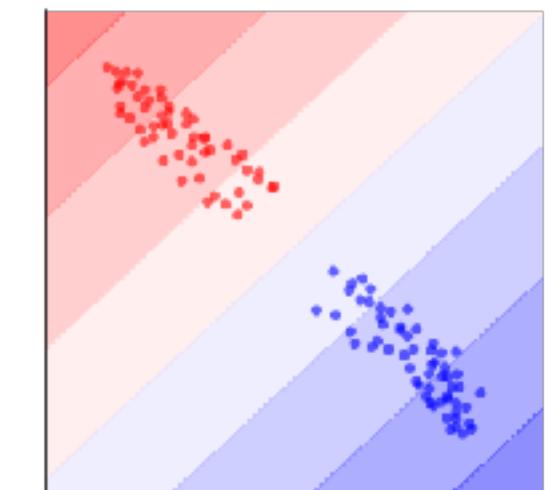
入力表現



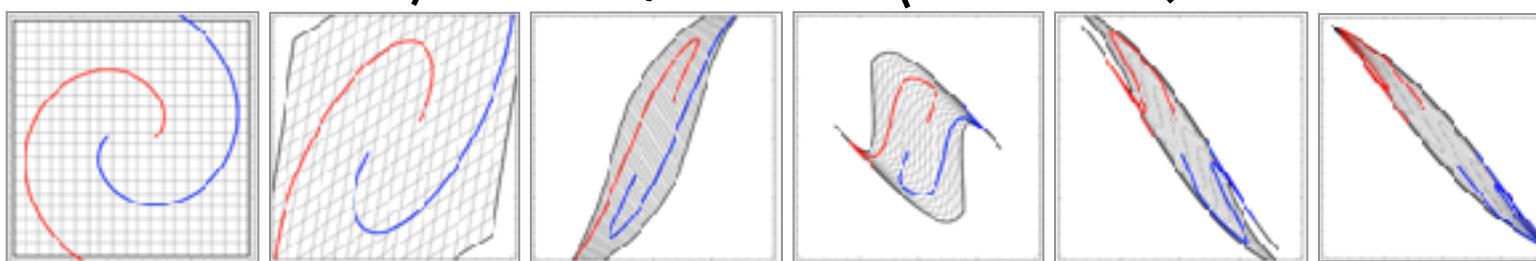
良い表現



標準的な機械学習 (データ内挿)

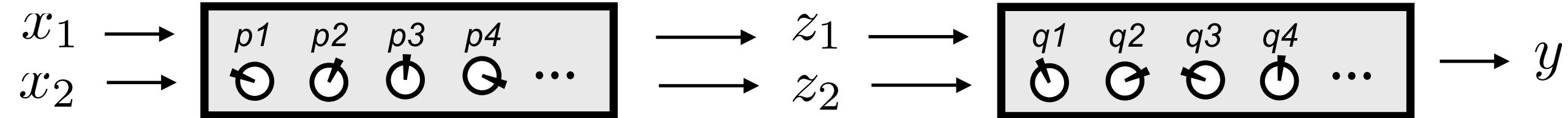
 x_1 z_1

シンプル(線形)で十分



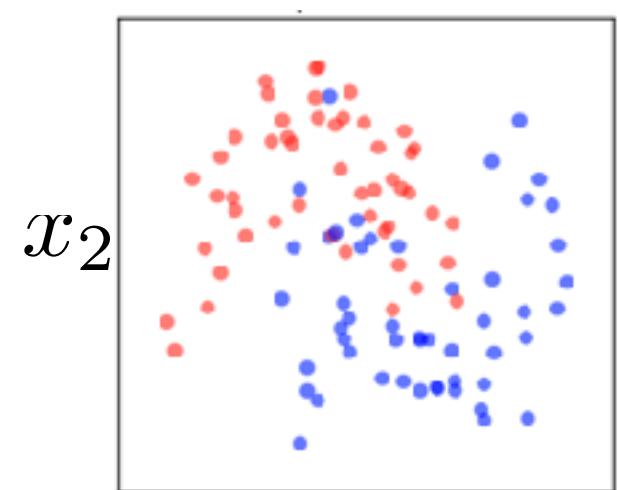
深層学習と表現学習

変数変換(表現学習)

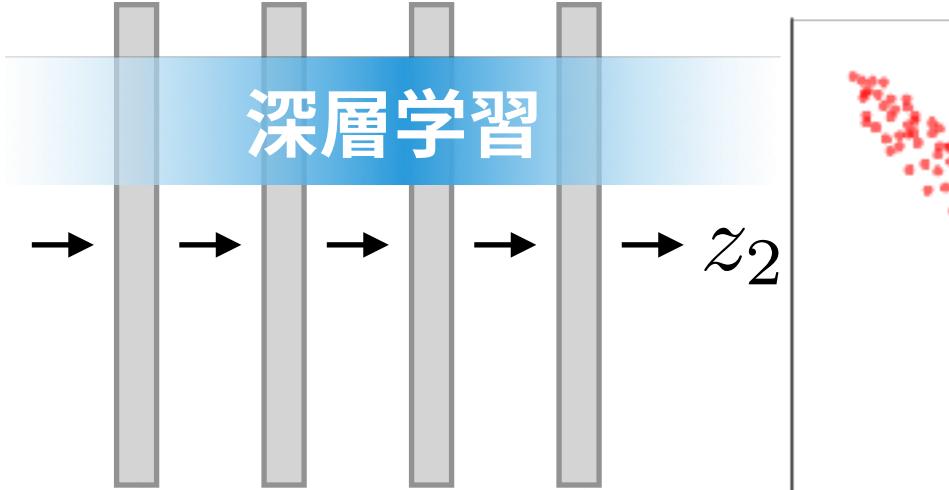


曲面モデル

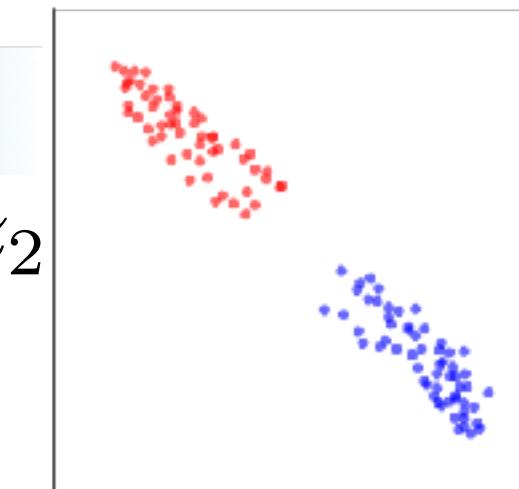
入力表現



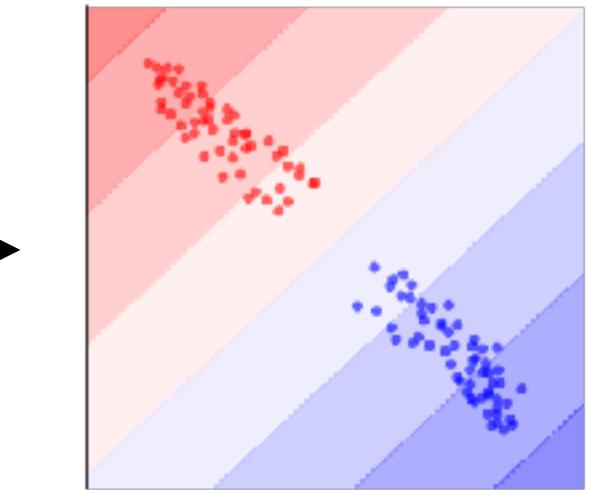
深層学習



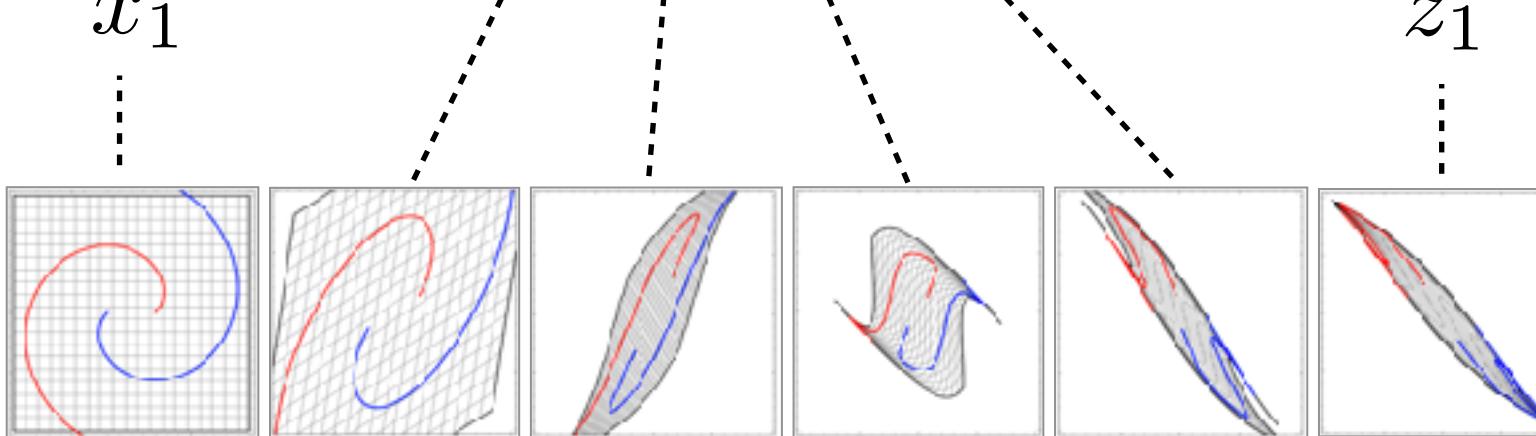
良い表現



標準的な機械学習 (データ内挿)

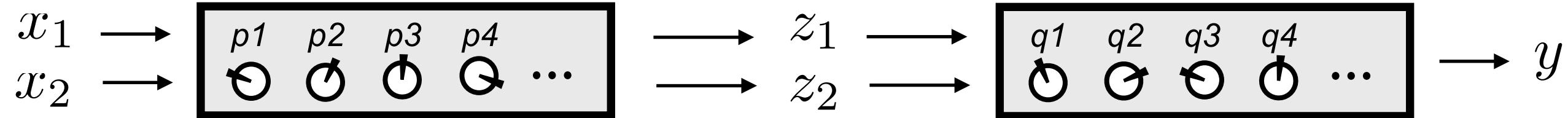


シンプル(線形)で十分



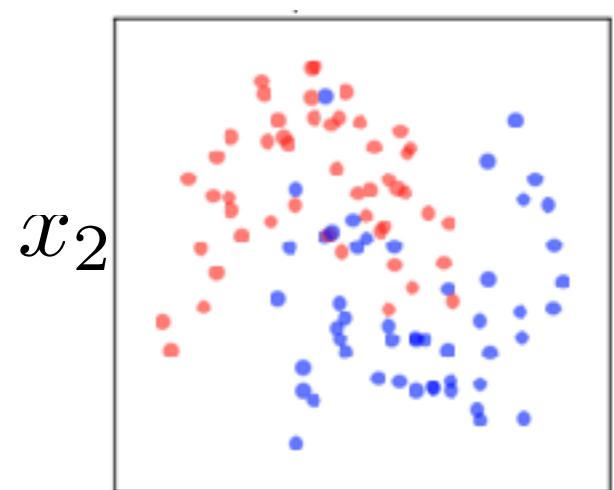
深層学習と表現学習

変数変換(表現学習)

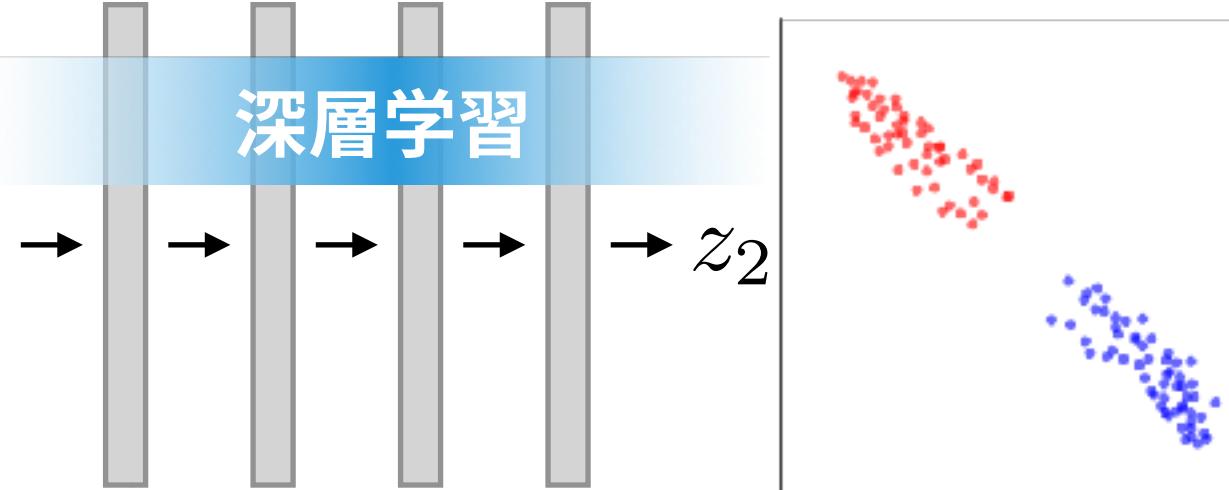


曲面モデル

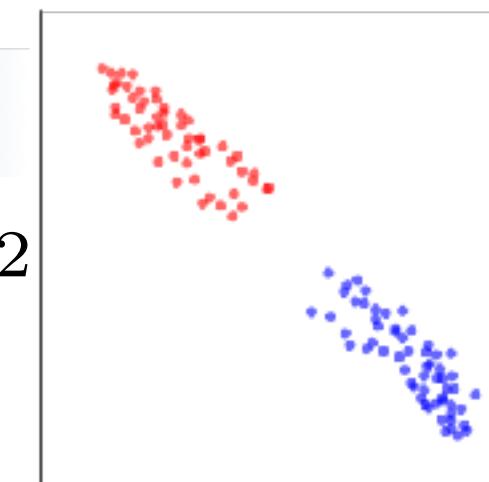
入力表現



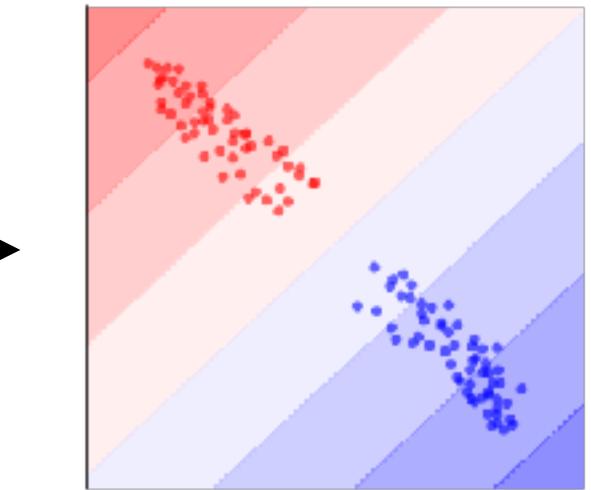
深層学習



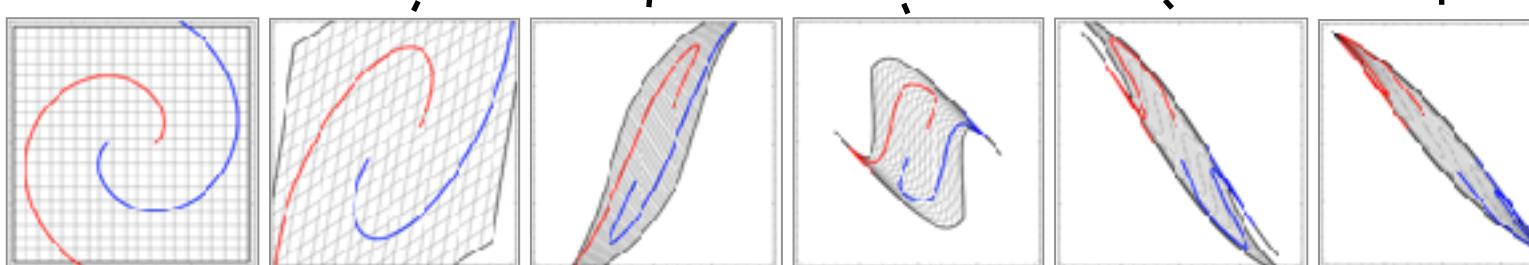
良い表現



標準的な機械学習 (データ内挿)

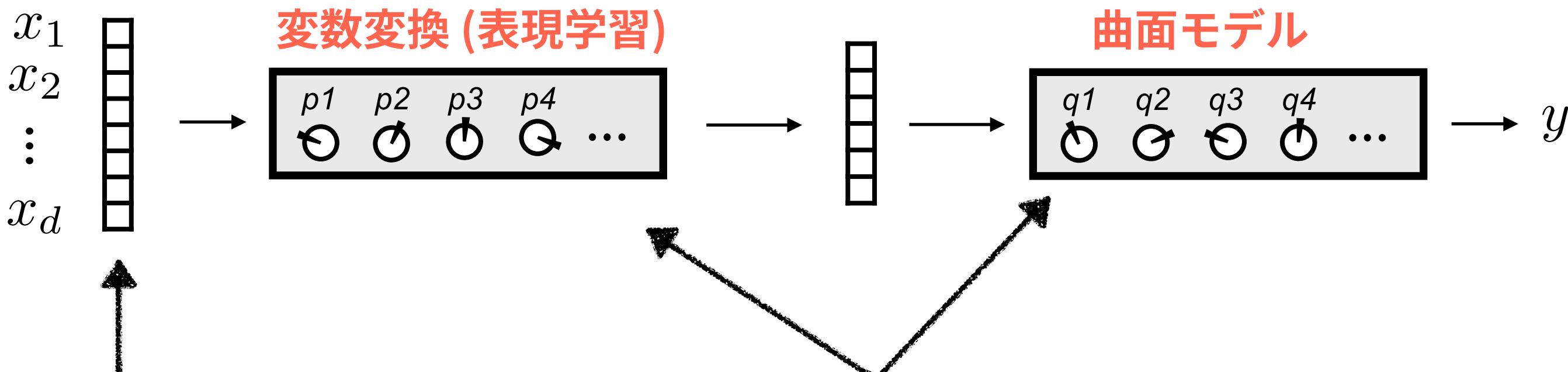


シンプル(線形)で十分



データ内挿は入力表現ではなく
「良い表現」で行う

困難① 現代の機械学習モデルは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

困難② 羅生門効果とUnderspecification

羅生門効果：良い機械学習モデルの多重性（非一意性）

高い予測精度を持つ機械学習モデルは一つのデータセットからたくさん作れる！

有限データから見積もる予測精度では指数的広さのモデル探索空間をspecifyしきれない…

困難② 羅生門効果とUnderspecification

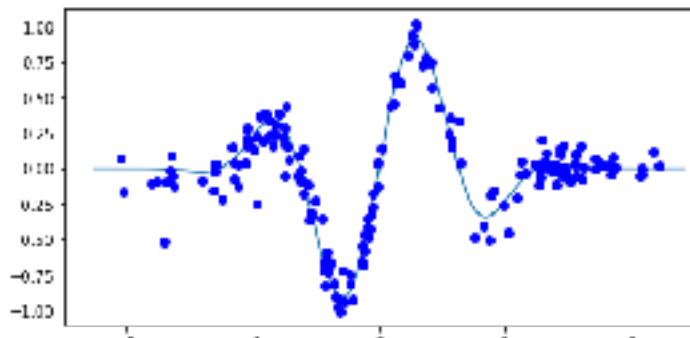
羅生門効果：良い機械学習モデルの多重性（非一意性）

高い予測精度を持つ機械学習モデルは一つのデータセットからたくさん作れる！

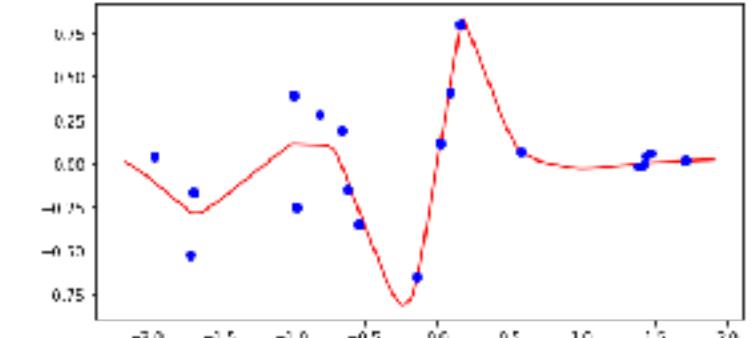
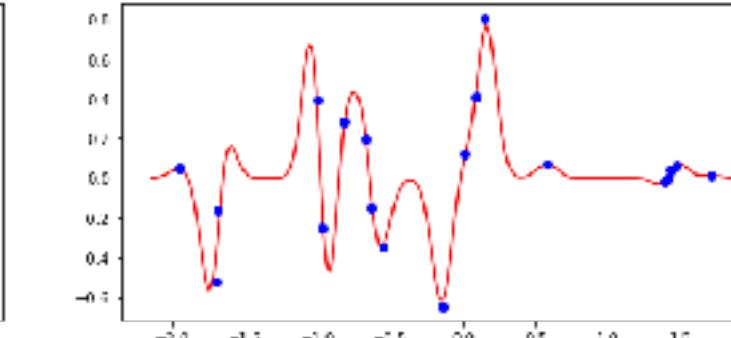
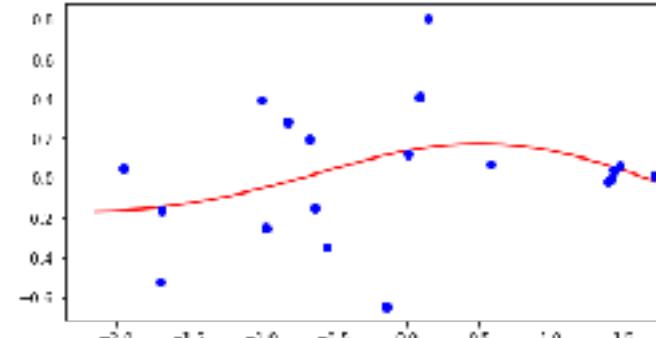
有限データから見積もる予測精度では指数的広さのモデル探索空間をspecifyしきれない…

- ✓ 「どのモデルが求める真実なの？」と考えてしまうと、まさに真実は「**藪の中**」…
→ **複数の手法による多角的解釈**が鉄則 "all models are wrong but some models are useful"
- ✓ 実際には**本質的にデータが足りてない(Underspecification)**ことで多重性はさらに悪化

だいたいの方法で類似



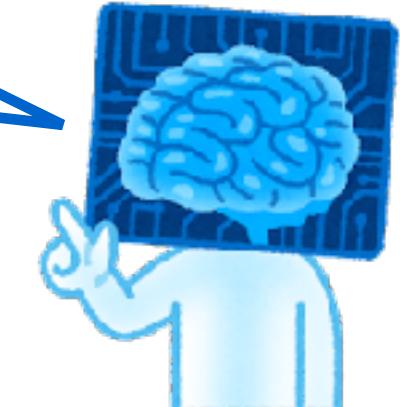
手法やモデルによって予測時の挙動にかなり差が出てしまう



Underspecificationはビッグデータ事例でも広く起こっている？

ショボい認知能力のおまえら人間にとったら「ビッグ」データかもしらんけど、
ホンマに必要な情報量からしたらハナクソみたいなもんやな！

by ディープラーニング様



[https://ai.googleblog.com/2021/10/
how-underspecification-
presents.html](https://ai.googleblog.com/2021/10/how-underspecification-presents.html)



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 well-known: for example, training ML models on poorly curated data, or training models to solve prediction problems that are structurally mismatched with the application domain. Yet, even when

<https://arxiv.org/abs/2011.03395>

arXiv.org > cs > arXiv:2011.03395

Search...

Help | Advanced S

Computer Science > Machine Learning

(Submitted on 6 Nov 2020 (v1), last revised 21 Nov 2020 (this version, v2))

Underspecification Presents Challenges for Credibility in Modern Machine Learning

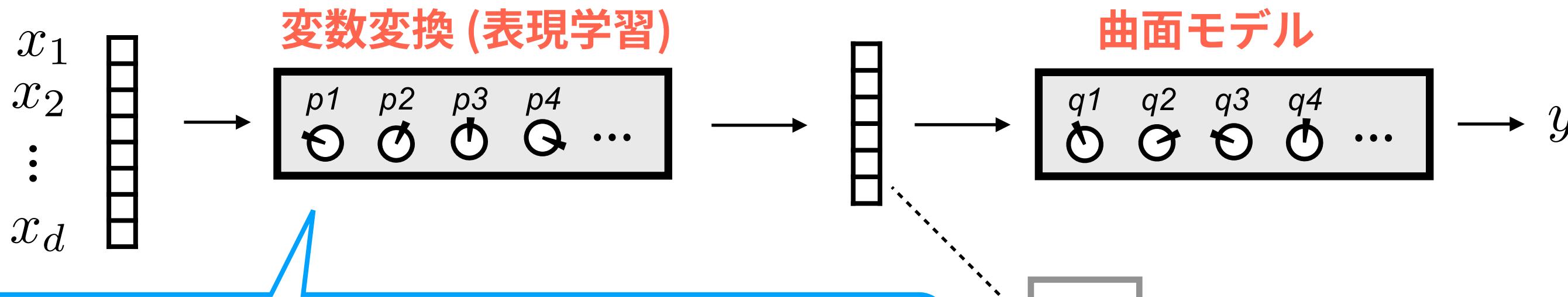
Alexander D'Amour, Katherine Heller, Dan Moldovan, Ben Adlam, Babak Alipanahi, Alex Beutel, Christina Chen, Jonathan Deaton, Jacob Eisenstein, Matthew D. Hoffman, Farhad Hormozdiari, Neil Houlsby, Shaobo Hou, Chassen Jerfel, Alan Karthikesalingam, Mario Lucic, Yian Ma, Cory McLean, Diana Mincu, Akinori Mitani, Andrea Montanari, Zachary Nado, Vivek Natarajan, Christopher Nelson, 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

ML models often exhibit unexpectedly poor behavior when they are deployed in real-world domains. We identify underspecification as a key reason for these failures. An ML pipeline is underspecified when it can return many predictors with equivalently strong held-out performance in the training domain. Underspecification is common in modern ML pipelines, such as those based on deep learning. Predictors

現代の技術的関心はこの高次元性をどう手懐けるか

1. 確率的最適化・正則化 → モデルが大きい自由度の中で暴れまくらないよう動ける範囲を何とかして制御・制限・安定化する
2. 事前学習 (Warm Start) の転移 → 事前に得ておいたイイ感じのパラメタ初期値を使う

小サンプル問題の克服：大規模事前学習とその転移



収集可能な何らかの「大規模なデータ」に対して
本来のタスクとは別の「自己教師あり(SSL)」タスク
(Pretextタスク)を設計し変数変換部を事前に獲得する

SSL Pretextタスクの例 (人手の正解ラベルづけが不要)

- 文の単語をランダムに隠してそれを当てる
- 絵を $90^\circ/180^\circ/270^\circ$ にランダム回転させ角度を当てる
- 分子構造の一部を隠してそれを当てる

理想 Few-shot / Zero-shotでの転移

「良い表現」が得られれば曲面モデルは
シンプル(線形)で良く**小サンプルでOK**

現実 大規模データの取得が困難…

画像・音声・テキストなど華々しい成功例
のケースと違い、自然現象を扱う分野では
大規模データの取得が現状難しい…

事前学習は深層学習を実用ツールに変えた (ImageNet, BERT,...)

"Foundation Model"と呼んじゃおう！とStanfordが研究センターまで設立し議論を呼んだ…

arXiv.org > cs > arXiv:2108.07258

Search...
Help | Advanced

Computer Science > Machine Learning

[Submitted on 16 Aug 2021 (v1), last revised 18 Aug 2021 (this version, v2)]

On the Opportunities and Risks of Foundation Models

Rishi Bommasani, Drew A. Hudson, Ehsan Adeli, Russ Altman, Simran Arora, Sydney von Arx, Michael S. Bernstein, Jeannette Bohg, Antoine Bosselut, Emma Brunskill, Erik Brynjolfsson, Shyamal Buch, Dallas Card, Rodrigo Castellon, Niladri Chatterji, Annie Chen, Kathleen Creel, Jared Quincy Davis, Dora Demszky, Chris Donahue, Moussa Doumbouya, Esin Durmus, Stefano Ermon, John Etchemendy, Kawin Ethayarajh, Li Fei-Fei, Chelsea Finn, Trevor Gale, Lauren Gillespie, Karan Goel, Noah Goodman, Shelby Grossman, Neel Guha, Tatsunori Hashimoto, Peter Henderson, John Hewitt, Daniel E. Ho, Jenny Hong, Kyle Hsu, Jing Huang, Thomas Icard, Saahil Jain, Dan Jurafsky, Pratyusha Kalluri, Siddharth Karamcheti, Geoff Keeling, Fereshte Khani, Omar Khattab, Pang Wei Koh, Mark Krass, Ranjay Krishna, Rohith Kuditipudi, Ananya Kumar, Faisal Ladhak, Mina Lee, Tony Lee, Jure Leskovec, Isabelle Levent, Xiang Lisa Li, Xuechen Li, Tengyu Ma, Ali Malik, Christopher D. Manning, Suvir Mirchandani, Eric Mitchell, Zanele Munyikwa, Suraj Nair, Avanika Narayan, Deepak Narayanan, Ben Newman, Allen Nie, Juan Carlos Niebles, Hamed Nilforoshan, Julian Nyarko, Giray Ogut, Laurel Orr, Isabel Papadimitriou, Joon Sung Park, Chris Plech, Eva Portelance, Christopher Potts, Aditi Raghunathan, Rob Reich, Hongyu Ren, Frieda Rong, Yusuf Roohani, Camilo Ruiz, Jack Ryan, Christopher Ré, Dorsa Sadigh, Shiori Sagawa, Keshav Santhanam, Andy Shih, Krishnan Srinivasan, Alex Tamkin, Rohan Taori, Armin W. Thomas, Florian Tramèr, Rose E. Wang, William Wang et al. (14 additional authors not shown)

AI is undergoing a paradigm shift with the rise of models (e.g., BERT, DALL-E, GPT-3) that are trained on broad data at scale and are adaptable to a wide range of downstream tasks. We call these models foundation models to underscore their critically central yet incomplete character. This report provides a thorough account of the opportunities and risks of foundation models, ranging from their capabilities (e.g., language, vision, robotics, reasoning, human interaction) and technical principles (e.g., model architectures, training procedures, data, systems, security, evaluation, theory) to their applications (e.g., law, healthcare, education) and societal impact (e.g., inequity, misuse, economic and environmental impact, legal and ethical considerations). Though foundation models are based on standard deep learning and transfer learning, their scale results in new emergent capabilities, and their effectiveness across so many tasks incentivizes homogenization. Homogenization provides powerful leverage but demands caution, as the defects of the foundation model are inherited by all the adapted models downstream. Despite the impending widespread deployment of foundation models, we currently lack a clear understanding of how they work, when they fail, and what they are even capable of due to their emergent properties. To tackle these questions, we believe much of the critical research on foundation models will require deep interdisciplinary collaboration commensurate with their fundamentally sociotechnical nature.

現代の技術的関心はこの高次元性をどう手懐けるか

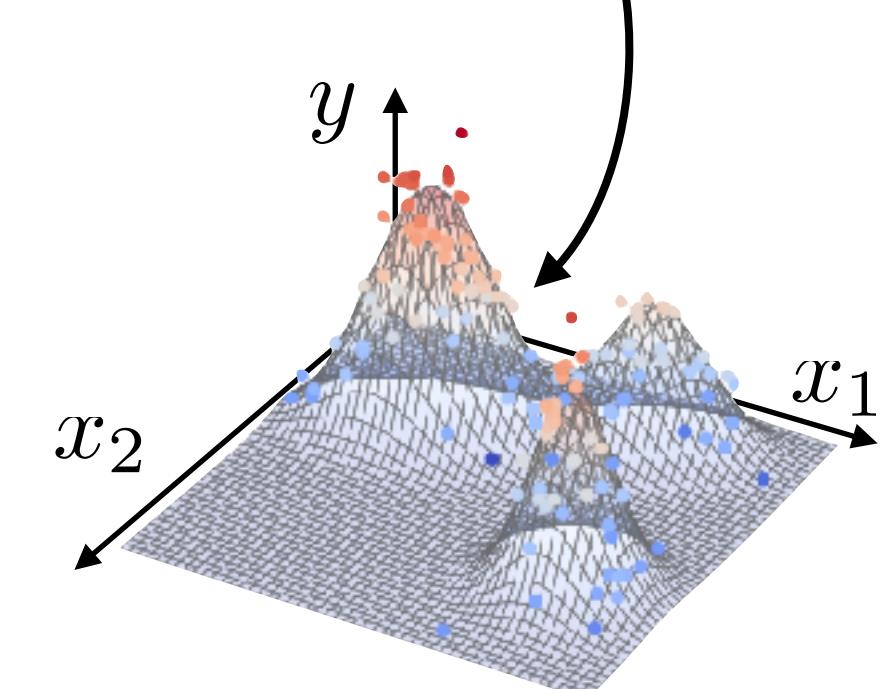
1. 確率的最適化・正則化 → モデルが大きい自由度の中で暴れまくらないよう動ける範囲を何とかして制御・制限・安定化する
2. 事前学習 (Warm Start) の転移 → 事前に得ておいたイイ感じのパラメタ初期値を使う
3. 帰納バイアスの設計

曲面モデルがどんな入出力関係でも表現できることが逆に擬似相関やUnderspecificationの問題を悪化させている



機械学習×化学：化学に適合した帰納バイアスのデザイン

化学的に妥当性を欠くようなモデルが意図せず表現されてしまわないように化学の知識や理論科学・計算化学の知見を総動員してモデルの自由度を技術的に制限する！



機械学習×シミュレーション

量子化学計算だけではなく様々な分野でシミュレーションと機械学習の融合研究が盛んに研究されるように

Annu. Rev. Phys. Chem. 71:361–90 (2020)



Annual Review of Physical Chemistry

Machine Learning for
Molecular Simulation

Frank Noé,^{1,2,3} Alexandre Tkatchenko,⁴
Klaus-Robert Müller,^{5,6,7} and Cecilia Clementi^{1,3,8}

PNAS (2020)

The frontier of simulation-based inference

Kyle Cranmer^{a,b,*}, Johann Brehmer^{a,b}, and Gilles Louppe^c

^aCenter for Cosmology and Particle Physics, New York University, New York, NY 10003; ^bCenter for Data Science, New York University, New York, NY 10011;
and ^cMontefiore Institute, University of Liège, B-4000 Liège, Belgium

Edited by Jitendra Malik, University of California, Berkeley, CA, and approved April 10, 2020 (received for review November 4, 2019)

Many domains of science have developed complex simulations to describe phenomena of interest. While these simulations provide high-fidelity models, they are poorly suited for inference and lead to challenging inverse problems. We review the rapidly developing field of simulation-based inference and identify the forces giving additional momentum to the field. Finally, we describe how the frontier is expanding so that a broad audience can appreciate the profound influence these developments may have on science.

the simulator—is being recognized as a key idea to improve the sample efficiency of various inference methods. A third direction of research has stopped treating the simulator as a black box and focused on integrations that allow the inference engine to tap into the internal details of the simulator directly.

Amidst this ongoing revolution, the landscape of simulation-based inference is changing rapidly. In this review we aim to provide the reader with a high-level overview of the basic ideas

Acc. Chem. Res. 54(7):1575–1585 (2021)



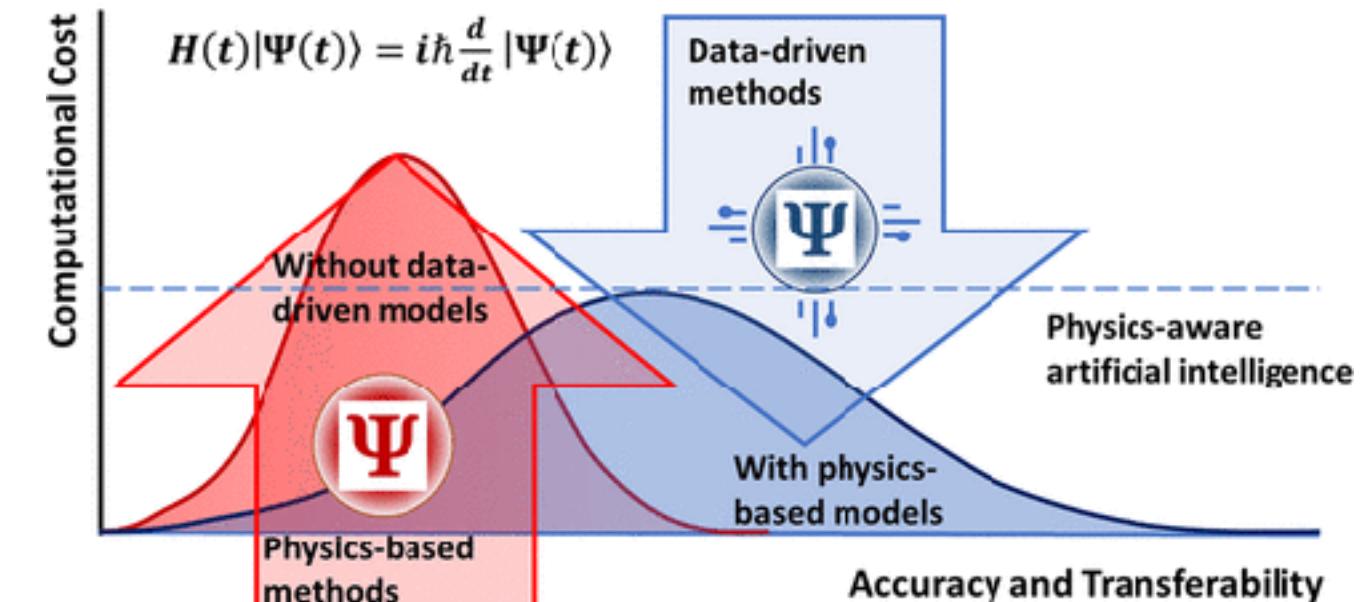
pubs.acs.org/accounts

Article

Development of Multimodal Machine Learning Potentials: Toward a Physics-Aware Artificial Intelligence

Published as part of the Accounts of Chemical Research special issue “Data Science Meets Chemistry”.

Tetiana Zubatiuk and Olexandr Isayev*



機械学習×記号操作・知識処理・論理推論・プランニング

メモリからの適応的読み出しを含む手続き的・記号的操作も学習で扱えるようになってきた！

Neural Abstract Machines & Program Induction

<https://uclnlp.github.io/nampi/>

- Differentiable Neural Computers / Neural Turing Machines (Graves+ 2014)
- Memory Networks (Weston+ 2014)
- Pointer Networks (Vinyals+ 2015)
- Neural Stacks (Grefenstette+ 2015, Joulin+ 2015)
- Hierarchical Attentive Memory (Andrychowicz+ 2016)
- Neural Program Interpreters (Reed+ 2016)
- Neural Programmer (Neelakantan+ 2016)
- DeepCoder (Balog+ 2016)
- :



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 Kłucznik, Karol Molga, Piotr Dittwald, Michał Startek, Michał Bajczyk, and Bartosz A. Grzybowski*

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



AI-Assisted Synthesis Very Important Paper

International Edition: DOI: 10.1002/anie.201912083
German Edition: DOI: 10.1002/ange.201912083

Synergy Between Expert and Machine-Learning Approaches Allows for Improved Retrosynthetic Planning

Tomasz Bądowski, Ewa P. Gajewska, Karol Molga, and Bartosz A. Grzybowski*

Angew. Chem. Int. Ed. 2019, 58, 1–7

関心

知識ベースに収集された明示的な化学的な知識も融合していくか？

Reaxys®

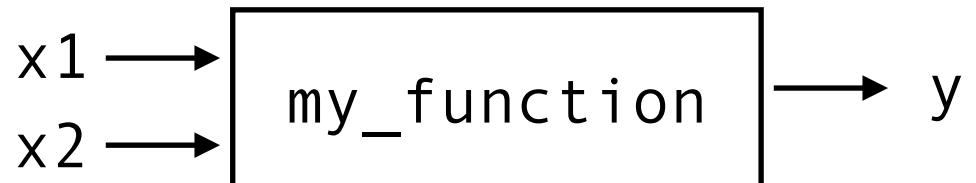
SciFINDER®
A CAS SOLUTION

CHEMATICAA

“微分可能プログラミング”としての深層学習



```
def my_function(x1, x2, \
    a1=4, a2=5, b1=6, b2=10):
    u = x1*x1 - a1*x1*x2 + a2*x1*x2
    v = -b1*x2 + b2
    y = u + v
    return y
```



現代的な「深層学習」は**自動微分系**による
「微分可能プログラミング」

$\partial y / \partial a1 = a1$ の値をちょっとだけ変えると
出力yの値はどう変わるか?

↳ この(偏)微分の値の計算を自動でやってくれる

勾配法という方法と組合わせると**プログラムとして書けるものなら何でも**
見本データに合うように内部パラメタや内部関数の**「最適化」**ができる！
(e.g. 深層学習展開 Deep Unfolding, データ同化 Data Assimilation, ...)

すごく面白い技術課題が山のようになり技術屋にとって
既にものすごく楽しい！

…まさか、技術のディテールに溺れてしまって
君は「本当のゴール」を忘れてしまってはいないだろうな？

本当の戦いは以上のイケてる技術を武器にここから始まる！

Hello

World

ダークサイドへようこそ：こんにちは、世界！

ダークサイドへようこそ：こんにちは、世界！

- ✓ 華々しい成果は今のところ主に「量子化学計算によるデータ」でバーチャルな世界！
観測ノイズがない・出力を得るのに必要十分な入力情報が分かっている・
大規模なオープンデータが利用できる・etc

ダークサイドへようこそ：こんにちは、世界！

- ✓ 華々しい成果は今のところ主に「量子化学計算によるデータ」でバーチャルな世界！
観測ノイズがない・出力を得るのに必要十分な入力情報が分かっている・
大規模なオープンデータが利用できる・etc
- ✓ リアルな世界はつらい… そんなに山ほどの同質なデータ取れねえんだって…

ダークサイドへようこそ：こんにちは、世界！

- ✓ 華々しい成果は今のところ主に「量子化学計算によるデータ」でバーチャルな世界！
観測ノイズがない・出力を得るのに必要十分な入力情報が分かっている・
大規模なオープンデータが利用できる・etc
- ✓ リアルな世界はつらい… そんなに山ほどの同質なデータ取れねえんだって…
 - 観測ノイズがあり物理的複製が必要(二度測ると値が異なる方が普通)

ダークサイドへようこそ：こんにちは、世界！

- ✓ 華々しい成果は今のところ主に「量子化学計算によるデータ」でバーチャルな世界！
観測ノイズがない・出力を得るのに必要十分な入力情報が分かっている・
大規模なオープンデータが利用できる・etc
- ✓ リアルな世界はつらい… そんなに山ほどの同質なデータ取れねえんだって…
 - 観測ノイズがあり物理的複製が必要(二度測ると値が異なる方が普通)
 - 理論計算に取り入れられてない無数の交絡因子や外乱因子の影響

ダークサイドへようこそ：こんにちは、世界！

- ✓ 華々しい成果は今のところ主に「量子化学計算によるデータ」でバーチャルな世界！
観測ノイズがない・出力を得るのに必要十分な入力情報が分かっている・
大規模なオープンデータが利用できる・etc
- ✓ リアルな世界はつらい… そんなに山ほどの同質なデータ取れねえんだって…
 - 観測ノイズがあり物理的複製が必要 (二度測ると値が異なる方が普通)
 - 理論計算に取り入れられてない無数の交絡因子や外乱因子の影響
 - 複雑系では入力変数に何を入れるべきなのかが不明というジレンマ
→ 入出力関係の機序が分からぬから機械学習を使いたいのに必要な情報を入力に入れないと機械学習には擬似相関しか見えない

ダークサイドへようこそ：こんにちは、世界！

- ✓ 華々しい成果は今のところ主に「量子化学計算によるデータ」でバーチャルな世界！
観測ノイズがない・出力を得るのに必要十分な入力情報が分かっている・
大規模なオープンデータが利用できる・etc
- ✓ リアルな世界はつらい… そんなに山ほどの同質なデータ取れねえんだって…
 - 観測ノイズがあり物理的複製が必要 (二度測ると値が異なる方が普通)
 - 理論計算に取り入れられてない無数の交絡因子や外乱因子の影響
 - 複雑系では入力変数に何を入れるべきなのかが不明というジレンマ
→ 入出力関係の機序が分からぬから機械学習を使いたいのに必要な情報を入力に入れないと機械学習には擬似相関しか見えない
 - そもそも計測・制御できないたくさんバックグラウンド因子がある

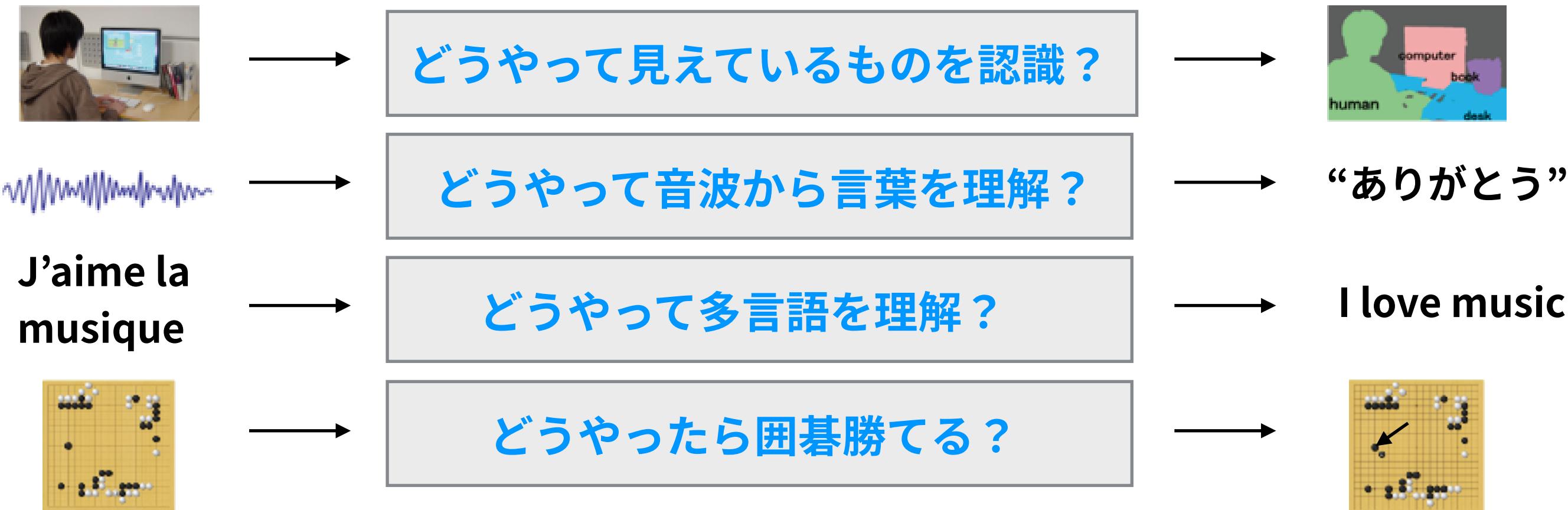
ダークサイドへようこそ：こんにちは、世界！

- ✓ 華々しい成果は今のところ主に「量子化学計算によるデータ」でバーチャルな世界！
観測ノイズがない・出力を得るのに必要十分な入力情報が分かっている・
大規模なオープンデータが利用できる・etc
- ✓ リアルな世界はつらい… そんなに山ほどの同質なデータ取れねえんだって…
 - 観測ノイズがあり物理的複製が必要(二度測ると値が異なる方が普通)
 - 理論計算に取り入れられてない無数の交絡因子や外乱因子の影響
 - 複雑系では入力変数に何を入れるべきなのかが不明というジレンマ
→ 入出力関係の機序が分からぬから機械学習を使いたいのに必要な情報を入力に入れないと機械学習には擬似相関しか見えない
 - そもそも計測・制御できないたくさんのバックグラウンド因子がある
 - 人間が実験を計画すると得られるデータは常にバイアスを含む
→ 何か学習させるとときに「良い例題や良い演習問題」って本当に大事ですよね！！

機械学習×自然科学の真の問題

「予測ができる」ことは「理解」や「発見」ができるることを直接は意味しない！！

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、それは私たちがその仕組みを理解できたことを少しでも意味するでしょうか？

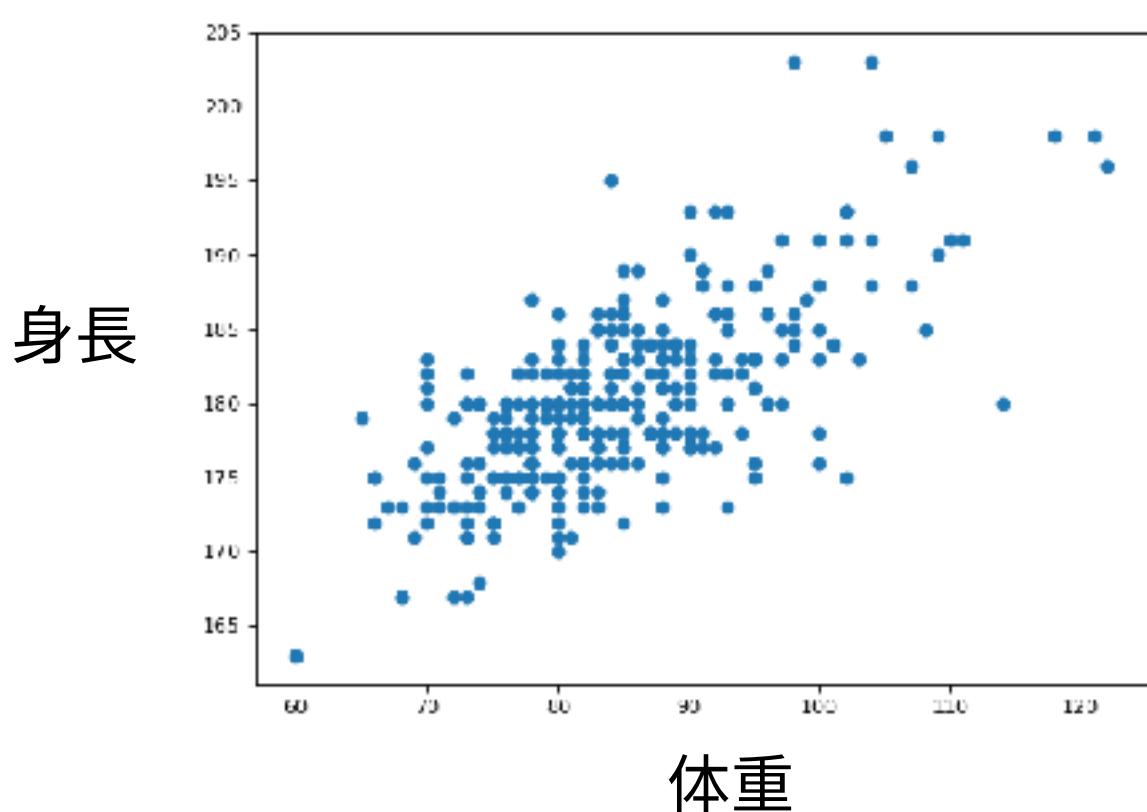


因果の理解には実験研究(介入研究)が必要不可欠

機械学習はあくまでデータの中の多次元相関を捉え、それによって予測する技術
→ 観察された相関が本当に因果性を含むのかを確かめるためには実験するしかない！

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)



「体重を増やせば身長も伸びる」が正しいかは
この観察データだけからは決して分からぬ

応用統計学の基本のキ

相関関係は必ずしも因果関係を意味しない

→ 「予測ができる」ことは「理解」や「発見」ができる^{ことを直接は意味しない！！}

因果理解と「データ」：モデルフリー手法の限界



- 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、理解していかな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。
- 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。

予測の利活用と因果理解(科学的理解)・因果探索(科学的発見)

データだけではいつも解けない！観察事実(データ)に先んじる先駆的情報や機構が重要
→ 予測だけではなく理解や発見には (作業)仮説、モデル、実験 + 失敗の許容 が必須
言い換えると「確実に」理解や発見に至る道などないということ (人間が有利な理由もない)

Herbert A. Simon



チューリング賞 (1975)

ノーベル経済学賞 (1978)

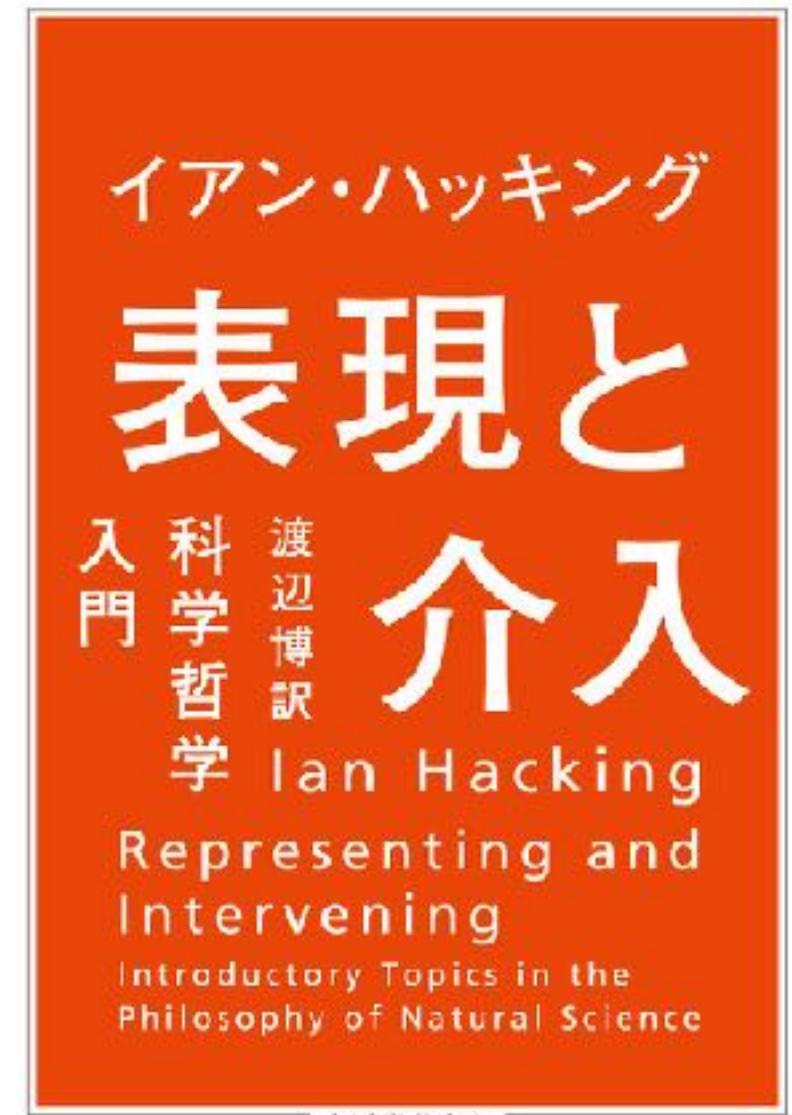
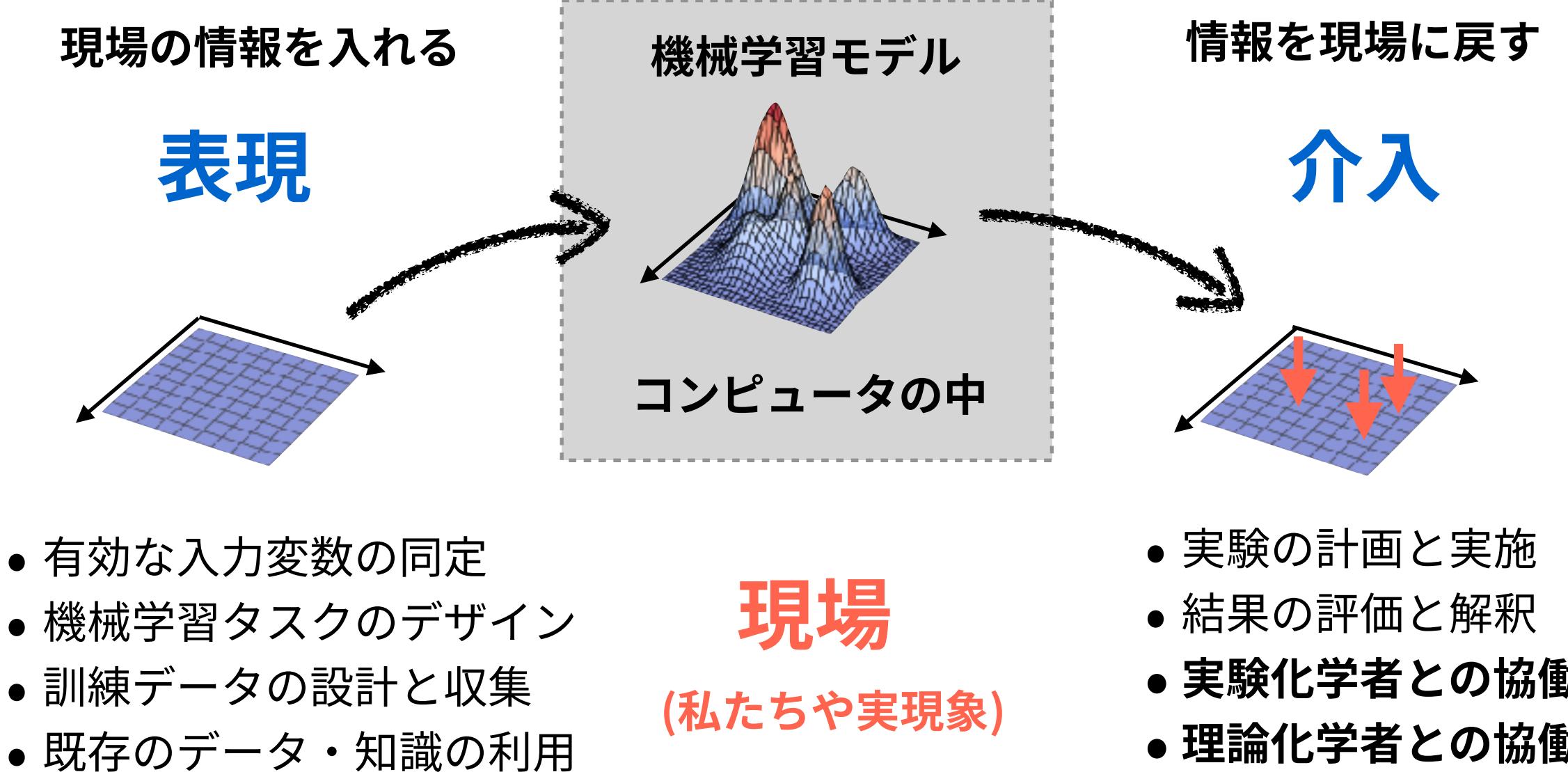
Human and machine discovery are gradual problem-solving processes of searching large problem spaces for incompletely defined goal objects. Research on problem solving has usually focused on search of an “instance space” (empirical exploration) and a “hypothesis space” (generation of theories). In scientific discovery, search must often extend to other spaces as well: spaces of possible problems, of new or improved scientific instruments, of new problem representations, of new concepts, and others. This paper focuses especially on the processes for finding new problem representations and new concepts, which are relatively new domains for research on discovery.

Simon, H. Machine discovery. *Found Sci* 1, 171–200 (1995).

ただし、機械学習はアルゴリズムや表現そのものの探索/学習へも拡大中

予測から理解・発見へ：頭でっかちを脱し、現場に出よう！

事件はコンピュータ(機械学習)の中で起きてるんじゃない、**現場**で起きているんだ！ by 僕



教訓：科学研究とは結局人間の営み！

「理解」や「発見」したいのは機械ではなく私たち人間
つまり、自然法則の問題ではなく私たち自身の精神と世界のあり方の問題を問うことになる！

教訓：科学研究とは結局人間の営み！

「理解」や「発見」したいのは機械ではなく私たち人間
つまり、自然法則の問題ではなく私たち自身の精神と世界のあり方の問題を問うことになる！

- 解釈性：私たちのショボい認知能力に収まるような「平易な理解」が求められている。

教訓：科学研究とは結局人間の営み！

「理解」や「発見」したいのは機械ではなく私たち人間
つまり、自然法則の問題ではなく私たち自身の精神と世界のあり方の問題を問うことになる！

- 解釈性：私たちのショボい認知能力に収まるような「平易な理解」が求められている。
- 時間性：有限の時間しか生きられない私たちに「発見」という体験をお膳立てするためのヒント出しが求められている。（人類絶滅のタイムリミット内に）

教訓：科学研究とは結局人間の営み！

「理解」や「発見」したいのは機械ではなく私たち人間
つまり、自然法則の問題ではなく私たち自身の精神と世界のあり方の問題を問うことになる！

- **解釈性**：私たちの**ショボい認知能力**に収まるような「平易な理解」が求められている。
- **時間性**：**有限の時間**しか生きられない私たちに「発見」という体験をお膳立てするためのヒント出しが求められている。（人類絶滅のタイムリミット内に）
- **情報の部分性**：データにできる情報は**いつでも世界の情報量のほんのひとかけら**だけ。ゆく河の流れは絶えずして、しかももとの水にあらず。すべてを観測することはできない。

教訓：科学研究とは結局人間の営み！

「理解」や「発見」したいのは機械ではなく私たち人間
つまり、自然法則の問題ではなく私たち自身の精神と世界のあり方の問題を問うことになる！

- **解釈性**：私たちの**ショボい認知能力**に収まるような「平易な理解」が求められている。
- **時間性**：**有限の時間**しか生きられない私たちに「発見」という体験をお膳立てするためのヒント出しが求められている。（人類絶滅のタイムリミット内に）
- **情報の部分性**：データにできる情報は**いつでも世界の情報量のほんのひとかけら**だけ。ゆく河の流れは絶えずして、しかももとの水にあらず。すべてを観測することはできない。
- **選択バイアス**：人間が一生懸命集めたデータはどうしたって**何らかの偏り**から逃れられない。与えられたデータの傾向を捉える機械学習の予測も同様にその偏りから逃れられない。

教訓：科学研究とは結局人間の営み！

「理解」や「発見」したいのは機械ではなく私たち人間
つまり、自然法則の問題ではなく私たち自身の精神と世界のあり方の問題を問うことになる！

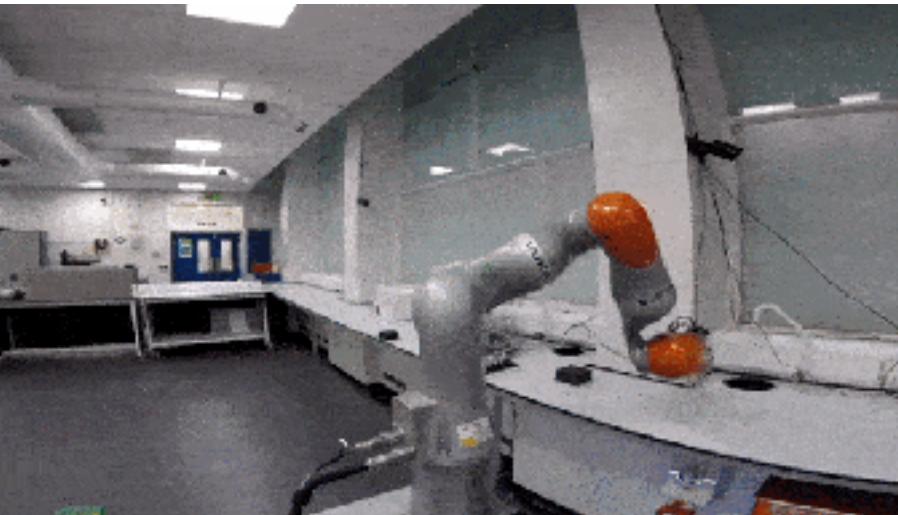
- 解釈性：私たちのショボい認知能力に収まるような「平易な理解」が求められている。
- 時間性：有限の時間しか生きられない私たちに「発見」という体験をお膳立てするためのヒント出しが求められている。（人類絶滅のタイムリミット内に）
- 情報の部分性：データにできる情報はいつでも世界の情報量のほんのひとかけらだけ。ゆく河の流れは絶えずして、しかももとの水にあらず。すべてを観測することはできない。
- 選択バイアス：人間が一生懸命集めたデータはどうしたって何らかの偏りから逃れられない。与えられたデータの傾向を捉える機械学習の予測も同様にその偏りから逃れられない。
- 因果性の理解：「因果性」は直接観測できない。人間がアクセスできるのは「相関」だけ！

機械学習から機械発見へ

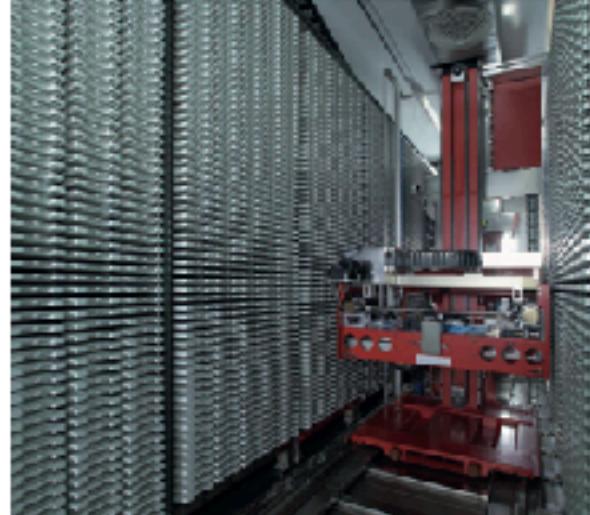
実験自動化の技術的発展：化学でも非効率な労働がいずれ自動化されるのは歴史的必然



Science 363 (2019)



Nature 583 (2020)



Nature Reviews Drug Discovery 17 (2018)



機械学習から機械発見へ

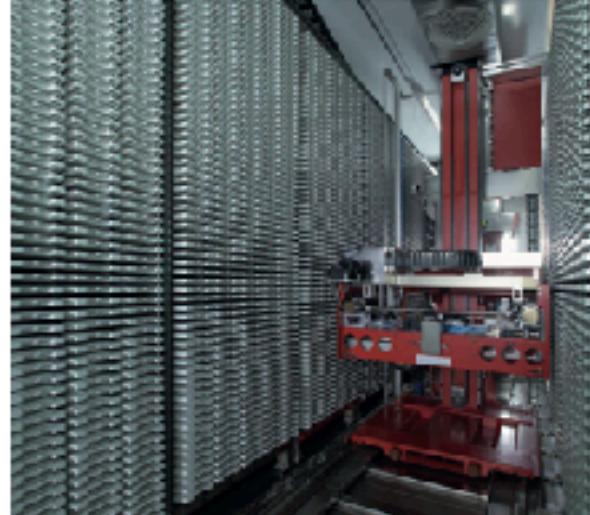
実験自動化の技術的発展：化学でも非効率な労働がいずれ自動化されるのは歴史的必然



Science 363 (2019)



Nature 583 (2020)



Nature Reviews Drug Discovery 17 (2018)



機械学習から機械発見へ

実験自動化の技術的発展：化学でも非効率な労働がいずれ自動化されるのは歴史的必然



Science 363 (2019)



Nature 583 (2020)



Nature Reviews Drug Discovery 17 (2018)



- 機械発見技術の研究基盤として非常に重要：再現性・属人性などデータの質と量の確保 + Negativeデータを取る実験やランダム実験はデータ科学上は必要だが人間はやりたくない…

機械学習から機械発見へ

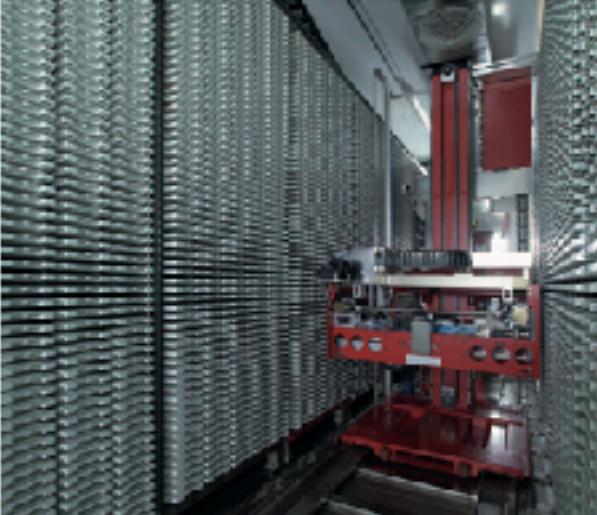
実験自動化の技術的発展：化学でも非効率な労働がいずれ自動化されるのは歴史的必然



Science 363 (2019)



Nature 583 (2020)



Nature Reviews Drug Discovery 17 (2018)



- 機械発見技術の研究基盤として非常に重要：再現性・属人性などデータの質と量の確保 + Negativeデータを取る実験やランダム実験はデータ科学上は必要だが人間はやりたくない…
- 実験自動化が実現されても 「常にひとかけらの部分情報しか手に入らない」 本質は変わらない

機械学習から機械発見へ

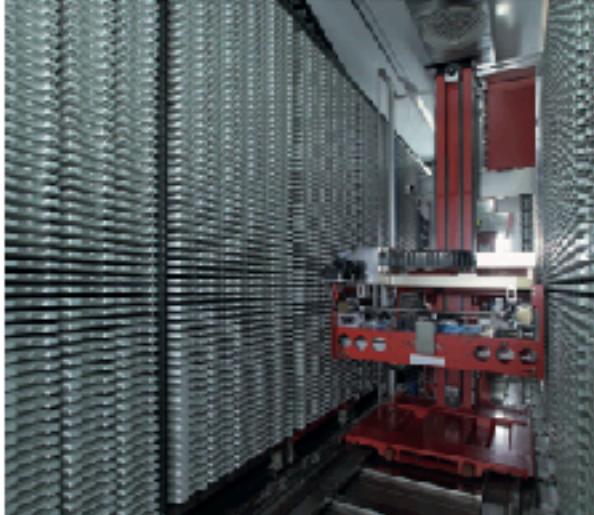
実験自動化の技術的発展：化学でも非効率な労働がいずれ自動化されるのは歴史的必然



Science 363 (2019)



Nature 583 (2020)



Nature Reviews Drug Discovery 17 (2018)



- 機械発見技術の研究基盤として非常に重要：再現性・属人性などデータの質と量の確保 + Negativeデータを取る実験やランダム実験はデータ科学上は必要だが人間はやりたくない…
- 実験自動化が実現されても 「常にひとかけらの部分情報しか手に入らない」 本質は変わらない
- 発見が自動化できるかはAI分野にとっても積年の未解決問題。「人工知能」を作りたいなら私たちが日々小さな「発見」と「学習」を繰り返して世界を理解していく過程の理解は不可避

まとめ：機械学習を自然現象の理解・発見に活用するとは？

必要な情報のうち、いつも偏った「一部」しかデータにはできない前提で、私たち自身の許容限界に見合う情報や示唆を得るために「データを予測に変える道具」をどう使えるか

まとめ：機械学習を自然現象の理解・発見に活用するとは？

必要な情報のうち、いつも偏った「一部」しかデータにはできない前提で、私たち自身の許容限界に見合う情報や示唆を得るために「データを予測に変える道具」をどう使えるか

- 新たな枠組み「見本例によるプログラミング」を「どこにどう使うか」のセンスが問われる。「明示的な関係はよく分からないが入出力見本データは取れる」部分問題を熟考すること。

まとめ：機械学習を自然現象の理解・発見に活用するとは？

必要な情報のうち、いつも偏った「一部」しかデータにはできない前提で、私たち自身の許容限界に見合う情報や示唆を得るために「データを予測に変える道具」をどう使えるか

- 新たな枠組み「見本例によるプログラミング」を「どこにどう使うか」のセンスが問われる。「明示的な関係はよく分からないが入出力見本データは取れる」部分問題を熟考すること。
- 現状では「本質的にはデータが足りてない」場合がほとんどであり、専門家と機械学習屋が協働で分野の今までの知識や知見を生かし上手に「帰納バイアス」を設計する必要がある。

まとめ：機械学習を自然現象の理解・発見に活用するとは？

必要な情報のうち、いつも偏った「一部」しかデータにはできない前提で、私たち自身の許容限界に見合う情報や示唆を得るために「データを予測に変える道具」をどう使えるか

- 新たな枠組み「見本例によるプログラミング」を「どこにどう使うか」のセンスが問われる。「明示的な関係はよく分からないが入出力見本データは取れる」部分問題を熟考すること。
- 現状では「本質的にはデータが足りてない」場合がほとんどであり、専門家と機械学習屋が協働で分野の今までの知識や知見を生かし上手に「帰納バイアス」を設計する必要がある。
- 「因果性」は直接観測できないので、「実際に実験によって確かめてみる」介入が不可欠。この検証ステップをどのようにデザイン・実現するかが非常に大切。

まとめ：機械学習を自然現象の理解・発見に活用するとは？

必要な情報のうち、いつも偏った「一部」しかデータにはできない前提で、私たち自身の許容限界に見合う情報や示唆を得るために「データを予測に変える道具」をどう使えるか

- 新たな枠組み「見本例によるプログラミング」を「どこにどう使うか」のセンスが問われる。「明示的な関係はよく分からないが入出力見本データは取れる」部分問題を熟考すること。
- 現状では「本質的にはデータが足りてない」場合がほとんどであり、専門家と機械学習屋が協働で分野の今までの知識や知見を生かし上手に「帰納バイアス」を設計する必要がある。
- 「因果性」は直接観測できないので、「実際に実験によって確かめてみる」介入が不可欠。この検証ステップをどのようにデザイン・実現するかが非常に大切。
- 「大規模データが得られる設定では非常に強力な技術」なので近視眼的に今のところ手に入るデータだけで何とか場当たり的に頑張り続ける以上の中長期的なデータ獲得戦略が大事。

May the ML force be with you...

ライトサイド（光明面）

機械学習は「データを予測に変える」強力なテクノロジー！

- ✓ 表現学習
- ✓ 帰納バイアスの設計とモデルベース最適化

ダークサイド（暗黒面）

自然科学の実現象データで使うのはいろいろ激ムズ！！！

- ✓ 羅生門効果とUnderspecification
- ✓ 「予測ができること」は「理解」や「発見」ができるることを意味しない！

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」

