

A Survey of Deep Learning for Scientific Discovery

Abstract

ここ数年、機械学習の中核となる問題において、主にディープニューラルネットワークの進歩による根本的なブレークスルーが見られるようになりました。同時に、さまざまな科学的領域で収集されるデータ量は、規模、複雑さともに劇的に増加しています。このことは、科学分野における深層学習の応用に多くのエキサイティングな機会があることを示唆しています。しかし、このための重要な課題は、単にどこから始めればよいかを知ることです。深層学習技術は非常に幅広く多様であるため、どのような科学的問題がこれらの手法に最も適しているのか、あるいは、どの手法の特定の組み合わせが最も有望な最初のアプローチを提供できるのかを判断することは困難である。本調査では、この中心的な問題に取り組むことに焦点を当て、視覚的、連続的、グラフ構造のデータ、関連するタスク、異なる学習方法にわたる、広く使われている多くの深層学習モデルの概要を提供するとともに、より少ないデータで深層学習を使用し、これらの複雑なモデルをより良く解釈する技術（多くの科学の使用例にとって重要な2点）について検討します。また、設計プロセス全体の概要、実装のヒント、およびコミュニティによって開発された多数のチュートリアル、研究概要、オープンソースの深層学習パイプラインと事前学習モデルへのリンクが含まれています。この調査が、さまざまな科学的領域で深層学習の利用を加速させる一助となることを期待しています。

Introduction

ここ数年、ディープニューラルネットワークを用いた機械学習は目覚ましい発展を遂げている。利用可能なデータと計算機資源の急増に後押しされ、これらのニューラルネットワークモデルとアルゴリズムは著しい発展を遂げ、音声認識[70, 167]から、画像分類、（インスタンス）分割、行動認識などのコンピュータビジョンにおける複雑なタスク[117, 78, 240]、質問応答、機械翻訳、要約などの自然言語における中心問題[186, 172, 233, 197]まで、基本課題に取り組むための定番の手法となっています。これらの基本的なタスクの多くは（適切な再定式化により）、より広範なドメインに関連し、特に、中心的な科学的問題の調査を支援する上で非常に大きな可能性を持っている。

しかし、ディープラーニングを使い始めるにあたって大きな障害となるのは、単純に何から手をつければいいのか、ということです。膨大な数の研究文献と、膨大な数の基礎となるモデル、タスク、お

よびトレーニング方法があるため、どの技術を試すのが最も適切か、あるいはどのように実装を開始するのが最善かを特定するのが非常に困難です。

本調査の目的は、この中心的な課題の解決に貢献することです。具体的には、以下のような特長があります。

- 本調査では、様々なデータモダリティに対応する深層ニューラルネットワークモデル（視覚データ用のCNN、シーケンシャルデータ用のグラフニューラルネットワーク、RNN、トランスフォーマー）から、多くの異なるキータスク（画像分割、超解像、シーケンス間のマッピングなど）、深層学習システムの複数の学習方法まで、非常に多岐にわたる深層学習の概念を概説しています。
- しかし、これらの技術の説明は、コアとなる考え方が幅広い読者に理解され、サーベイ全体を端から端まで容易に読むことができるように、比較的ハイレベルで簡潔なものとなっています。
- 科学的応用を助けるという観点からは、(i) 少ないデータで深層学習を利用するための手法（自己教師、半教師付き学習など）、(ii) 解釈可能性や表現解析のための手法（予測タスクを超えるための手法）などが詳細に説明されています。これらは、エキサイティングで急速に発展している2つの研究領域であり、科学的なユースケースの可能性にも特に重要な意味を持ちます。
- また、本調査は実装の迅速な立ち上げを支援することにも重点を置いており、深層学習の設計プロセス全体の概要や実装のヒントに関するセクション（セクション9）に加え、本文中にはコミュニティが開発したオープンソースコード、研究概要、チュートリアルのリファレンスを多数掲載し、これに関するセクション（セクション3）も充実させています。

このアンケートは誰のためのものですか？

このアンケートは、機械学習の基礎知識をお持ちの方で、(i)多くの基本的な深層学習の概念について包括的かつ分かりやすい概要を知りたい方、(ii)実装を強化するための参考資料や指針を得たい方に特にお役に立つと期待しています。また、深層学習の中核的な分野以外にも、より少ないデータで深層学習システムを開発するための手法や、これらのモデルを解釈するための技術に焦点を当てており、これらの技術を科学的問題に応用することに関心のある方に特に役立つと期待しています。しかし、これらのトピックをはじめ、提示された多くのトピックは、多くのコード／チュートリアル／論文の参照とともに、深層学習について学び、実装しようとするすべての人に役立つと思われます。

1.1. Outline of Survey

調査の構成は以下の通りです。

- 第2節では、まずディープラーニングを利用するためのハイレベルな考察を行う。具体的には、まず、深層学習が科学的な領域で適用される可能性のあるいくつかのテンプレートについて述べ、次に、深層学習の設計プロセス全体の概要を説明し、最後に、ある問題により適していると

思われる他の中央機械学習技術について簡単に議論する。最初の部分は、科学的なアプリケーションを考えている人には特に興味深いかもしれないが、後半の2つの部分は一般的な関心事であろう。

- セクション3では、深層学習コミュニティが開発したチュートリアル、オープンソースのコードモデル／アルゴリズム実装、研究論文の要約を掲載したWebサイトへの参照を提供している。このセクションは多くの読者にとって非常に有用であり、提供されたリンクにざっと目を通すことをお勧めする。
- 第4章では、畳み込みネットワークとその多くの用途、グラフニューラルネットワーク、シーケンスモデル（RNN、Transformer）、および関連する多くのシーケンスタスクを取り上げ、深層学習における多くの標準タスクとモデルを概観する。
- セクション5では、転移学習、ドメイン適応、マルチタスク学習など、教師あり学習の学習プロセスの主要なバリエーションについて見ていく。これらは、深層学習の多くの成功したアプリケーションの中心である。
- セクション6では、急速に発展している研究分野であり、科学的領域を含む多くのアプリケーションの中核となる検討事項である、ディープニューラルネットワークモデルを開発するためのデータ効率を向上させる方法について考察しています。自己教師付き学習や半教師付き学習の多くのバリエーションや、データ増強やデータノイズニングを取り上げる。
- セクション7では、解釈可能性と表現分析における進歩について概観する。これは、エンドツーエンドシステムの内部を洞察することに焦点を当てた一連の技術であり、データにおける重要な特徴を特定し、モデル出力への影響を理解し、モデルの隠れた表現の特性を見出す。これらは、予測精度よりも理解を重視する多くの科学的問題にとって非常に重要であり、また、モデルのデバッグの支援や故障モードの先制的特定など、より広範な関心事になり得る。
- セクション8では、より高度なディープラーニング手法、特に生成モデリングと強化学習の概要を説明する。 - セクション9では、エンドツーエンドのディープラーニングシステムを構築する際の重要な実装のヒントについて結論付けているので、ぜひご一読いただきたい。

2. High Level Considerations for Deep Learning

このセクションでは、まず、深層学習技術に関するハイレベルな考察を行う。まず、深層学習が科学的環境に適用される可能性のあるテンプレートの概要から始まり、エンドツーエンドの設計プロセスの議論、そしていくつかの問題により適していると思われる代替の機械学習手法の簡単な紹介を行う。

2.1. Templates for Deep Learning in Scientific Settings

深層学習技術を科学的な場で応用する場合、一般的にはどのような方法があるのでしょうか。非常に高いレベルで、深層学習がそのような問題で使われるかもしれない方法のいくつかのテンプレートを提供することができます。

1. 予測問題 ディープラーニングを応用する最も簡単な方法は、入力と予測される出力の対応付けという重要な予測問題に取り組むことであると言える。ディープラーニングのこの予測的な使用例は、一般的に、コンピューティングや機械学習の中核的な問題でも使用される方法である。例えば、入力は生検画像で、モデルは画像化された組織が癌の兆候を示すかどうかの予測を出力しなければならないかもしれません。この予測的な使用例は、モデルに目標関数を学習させると考えることもできます。この例では、入力された視覚的特徴から癌／癌でない出力へのマッピングを学習します。この方法で深層学習を使用すると、ターゲット関数が非常に複雑で、入力から出力に至る方法を記述する数学的な閉形式や論理的なルールのセットがない場合、その設定をカプセル化することもできます。例えば、明示的にモデル化することが非常に困難な複雑なプロセス（例えば、気候モデリング）を（ブラックボックス的に）シミュレートするために、深層学習モデルを使用することができるかもしれません[101]。
2. 予測から理解へ 科学的質問とコアな機械学習問題の根本的な違いの1つは、前者では根本的なメカニズムを理解することに重点が置かれていることである。多くの場合、正確な予測結果を出力するだけでは十分ではない。その代わりに、データのどのような性質やデータ生成プロセスが、観測された予測や結果につながったのかについて、解釈可能な洞察を得たいと考えている。このような洞察を得るには、深層学習における解釈可能性と表現分析手法を利用することができ、これらはニューラルネットワークモデルが特定の予測を行う方法を決定することに焦点を当てます。入力のどのような特徴が出力予測に最も重要であるかを理解するためのツールと、ニューラルネットワークモデルの隠れた表現を直接分析し、基礎となるデータの重要な特性を明らかにする技術の両方について、大きな研究が行われてきました。
3. 入力データの複雑な変換 多くの科学領域において、生成データ、特に視覚データ（蛍光顕微鏡、空間配列、標本動画など[177, 97]）の量は劇的に増加しており、効率的な解析と自動処理が急務である。例えば、ディープニューラルネットワークに基づくセグメンテーションモデルを用いて細胞の画像中の核を自動的に識別したり、ポーズ推定システムを用いて神経科学解析のためにマウスの動画に見られる行動を迅速にラベル付けするなど、データの複雑な変換を多く行うことができる深層学習技術は、このような場面で非常に有効であると言えるでしょう。

2.2. Deep Learning Workflow