

# 人工知能技術の発展と最近の動向

国立研究開発法人 産業技術総合研究所  
人工知能研究センター

麻生 英樹

数学協働プログラムワークショップ

MI2 (情報統合型物質・材料開発) と数学連携による新展開  
2016.2.26

スライド作成協力：岡田真人教授、永田賢二助教  
(東京大学岡田真人研究室)

## ワークショップの趣旨から

- 物質・材料研究者の側から言えば、**情報理論や数学の手法が何を可能とするのか**を理解する必要があり、情報・数学の側から言えば、具体的な課題の目的や問題点を理解する必要がある。即ち、異なる分野の研究者間の情報交流、意見交換の場を設定することが求められる。
- 人工知能のコア技術は何か？
- 人工知能技術が何を可能とするのか？

# 人工知能

- 知的な振る舞いをする人工システム
- その構築を通じた知能の情報処理原理解明
  
- 知的？
- 人間にできて、コンピュータにはできないこと
  
- コンピュータが人間を上回ると「計算」

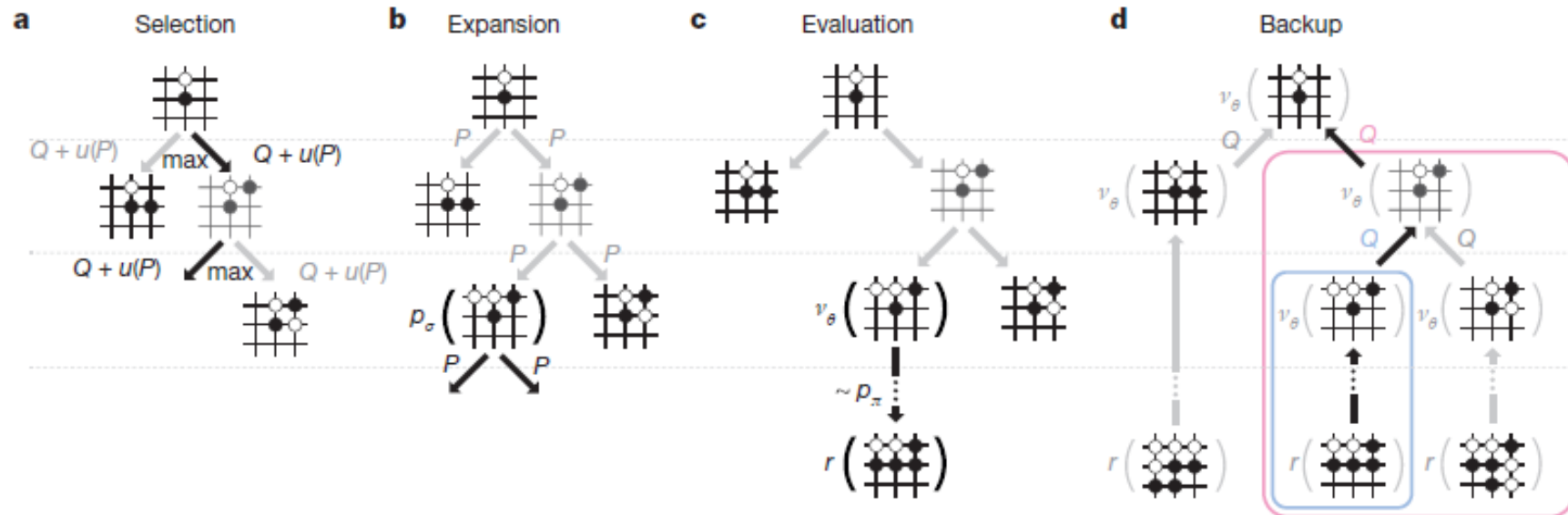
# いろいろな人工知能

- 検索、推薦、ナビゲーションシステム
- コンピュータチェス・将棋・囲碁
- 機械翻訳、翻訳電話
- 質問応答システム、知的エージェント
- 文字認識、音声認識、顔検出、顔認識、生体認証人や物の追跡・監視
- 知能ロボット  
自動運転車、家事ロボット、  
対話ロボット、災害対応ロボット

# コンピュータ囲碁のブレークスルー

- Silver, D. (Google DeepMind) et al: Mastering the game of Go with deep neural networks and tree search, Nature, 2016.1.28
  - Deep Learning (深層学習)
  - 強化学習
  - モンテカルロ木探索
- をうまく組み合わせて、欧州チャンピオンに 5-0 (持ち時間が長いゲーム) で勝利
- コンピュータ囲碁の強さが人間のプロ棋士並みになるのはもう少し先とされていたため、インパクトがあった

# ゲームの木の探索



図の出展: Silver, D. (Google DeepMind) et al: Mastering the game of Go with deep neural networks and tree search, Nature, 2016.

- 勝ちにつながる可能性の高い枝（指し手）を中心に探索したい
- 知識 = 囲碁のルール + 盤面（状態）の評価関数
- 有段者の棋譜データと自己対戦データから学習

# 人工知能のコア技術

- 探索空間の削減
- 知識 = この世界のモデル の獲得と利用
  - 論理的知識
  - 数学・数理的知識
  - 物理的知識
  - 確率統計的知識、ヒューリスティクス
  - 常識
  - . . .

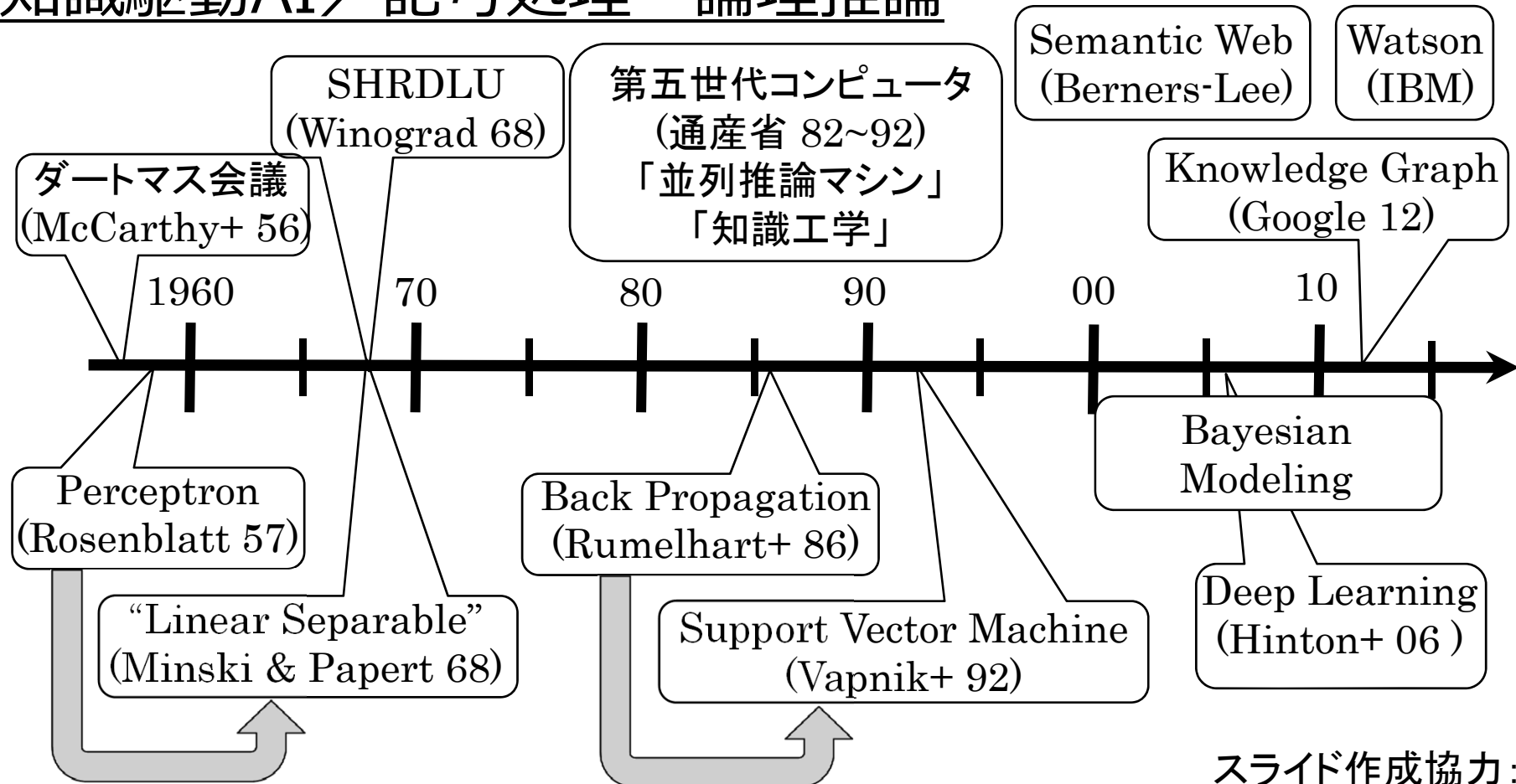
## 二種類の知識

- 明示的知識
    - 言葉や論理式、数式で表せる
      - オバマ大統領はコロンビア大学を卒業した
      - 電磁気学の方程式
    - 事実関係、物理・化学の法則、数学の定理
  - 非明示的・暗黙的知識
    - 簡単に表現しにくい
    - 認識、運動、常識
      - 人の顔の見分け方、自転車の乗り方
- ⇒ データから学習させる



# 二つの人工知能研究の流れ

## 知識駆動AI / 記号処理・論理推論



## データ駆動AI / パターン処理・機械学習

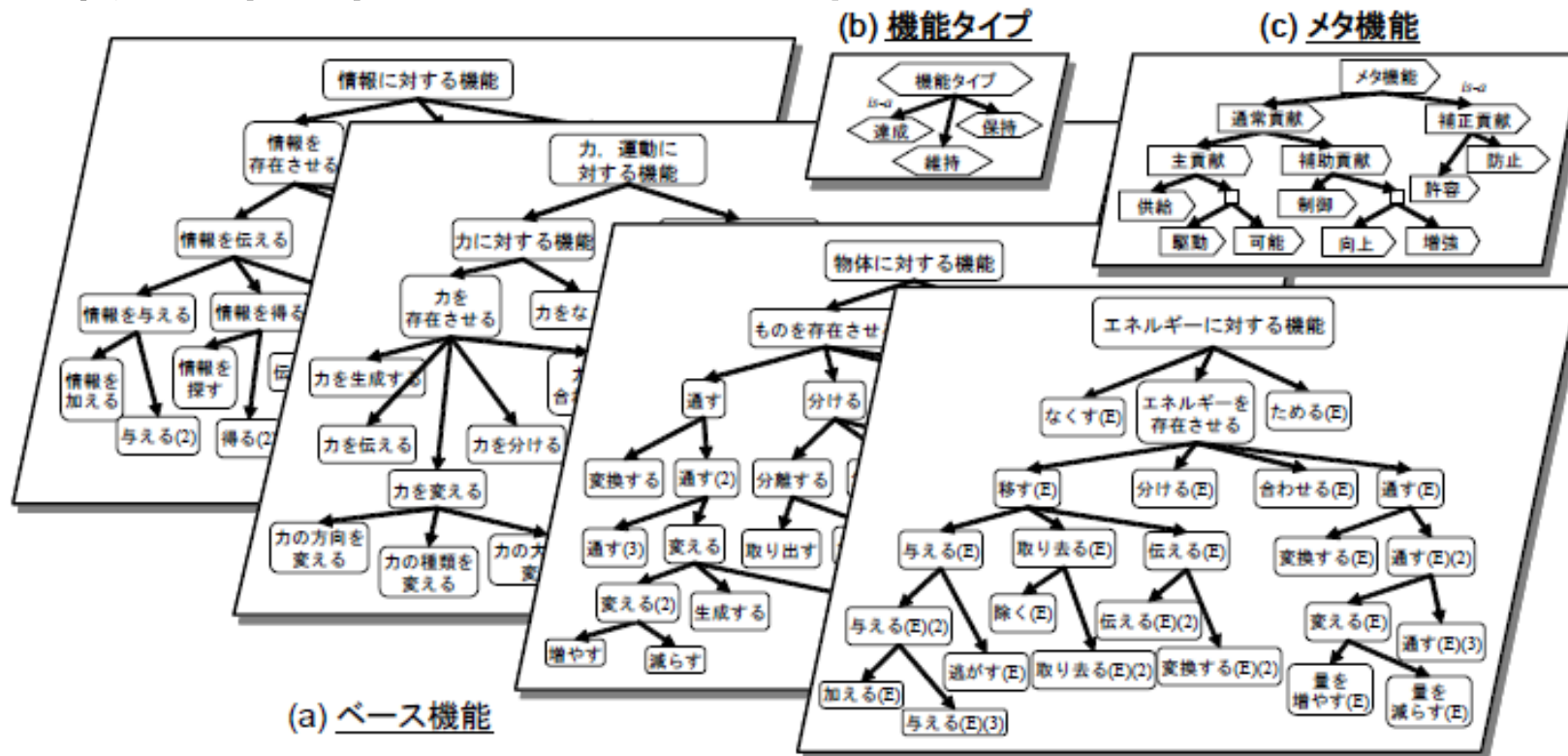
スライド作成協力:  
東京大学岡田真人  
研究室

# 知識駆動型人工知能の動向

- World Wide Web ⇒ Semantic Web
- Wikipedia
- オントロジー（標準的な概念体系）構築
- Linked Open Data
- Google 知識グラフ Web テキストからの知識抽出
  - entity – relation – entity: オバマ-卒業-コロンビア大学
  - 5.7億 entity, 180億 relation (2012年)
- Freebase
- Watson (IBM)（質問応答システムとしてのの）

# オントロジー

- 概念体系の整理と共有



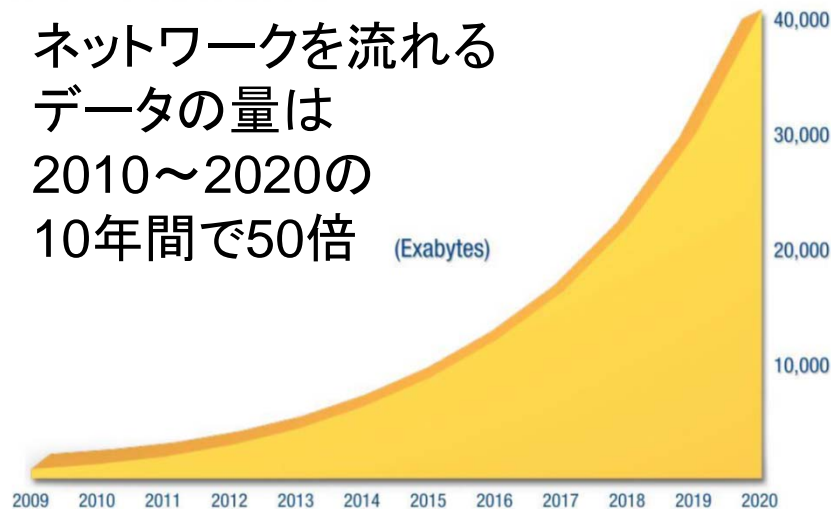
機能概念オントロジー(部分)

図の出典: 溝口、来村、布瀬:オントロジー工学の成功事例, ~機能オントロジーに基づく生産技術知識の共有・再利用~,人工知能学会・知識ベースシステム研究会(第57回)特別講演, 2002

# データ駆動型人工知能の動向

The Digital Universe: 50-fold Growth from the Beginning of 2010 to the End of 2020

ネットワークを流れる  
データの量は  
2010~2020の  
10年間で50倍 (Exabytes)



出展: IDC “The Digital Universe in 2020”

- Web ⇒ IoT
- 人間だけでは活用が不可能
- 人間に代わり大量のデータを価値・知識に変える知能が必要 ⇒ 統計的機械学習



大規模物体認識コンペ ILSVRC2012  
における Deep Learning の性能

# 統計的機械学習が可能にすること

- 観測情報の確率分布  $p(x)$  のモデル化
  - 従来の統計科学よりも複雑な確率分布モデルを使う
    - ニューラルネットワーク
    - 階層ベイズ、ノンパラメトリックベイズ、...
- 潜在変数（潜在的な要因）と変数間の関連構造の導入・データからの学習
  - 観測できる情報は世界のごく一部

# 知的な情報処理とは？

- 「知的な情報処理」の問題の多くは  
観測可能・容易な変数から  
観測不能・困難な変数を推測する問題 [Marr 1970]
  - 外観から食べられるか否かを推測する
  - 顔画像や指紋から人のIDを識別する
  - 音声信号から発話しようとした言葉・意図を推測する
  - テストの結果から能力を推測する
  - アンケート情報から嗜好を推測する
  - 抜き取りサンプルから製品の不良率を推定する
  - 過去の情報から未来を予測する
  - 受信符号から送信情報を推定する
  - 結果から原因の推測する

# 統計的機械学習による知的な情報処理

- なぜ推測できるのか？
  - ➡ 観測可能変数の値と観測不能変数の値の間に**制約関係**がある
- **変数間の制約関係 = 知識**
  - 決定論的アプローチ：  
制約 = 知識をルール（if-thenなど）、関数、論理式、方程式、プログラム等で記述する
  - **確率統計的アプローチ**：  
制約 = 知識を確率分布で記述する  
(決定論的アプローチ + 雑音モデル)

# 知的な情報処理の原理

- $V$  : 観測可能な変数  
 $H$  : 観測困難な変数 (隠れ変数・潜在変数)

- **知識 : 同時確率分布や条件付き確率分布**

$$p(v, h) = \text{Prob}(V = v, H = h)$$

- 隠れ変数の推測 :  
変数  $V$  の値  $v$  が観測されたときの  
 $H$  の値  $h$  の**事後確率分布の計算** ベイズの定理

$$p(h | v) = \frac{p(v, h)}{p(v)} = \frac{p(v, h)}{\sum_{h'} p(v, h')} = \frac{p(v | h) p(h)}{\sum_{h'} p(v | h') p(h')}$$



# David Marrの三つのレベル [1982 Marr]

脳のような複雑な情報処理装置を理解するには  
以下の三つのレベルが必要

## 計算理論

計算の目的とその適切性を議論し、実行可能な方法の論理を構築

何をモデル化？  
何から何を推測？

## データ表現とアルゴリズム

計算理論の実行方法. 特にその入力と出力の表現と変換のためのアルゴリズム

いろいろな  
知識表現と  
推論・学習  
アルゴリズム  
潜在変数・構造

## ハードウェア実装

表現とアルゴリズムの物理的な実現

デジタル回路  
アナログ回路  
神経回路網

# いろいろなモデル = 知識表現

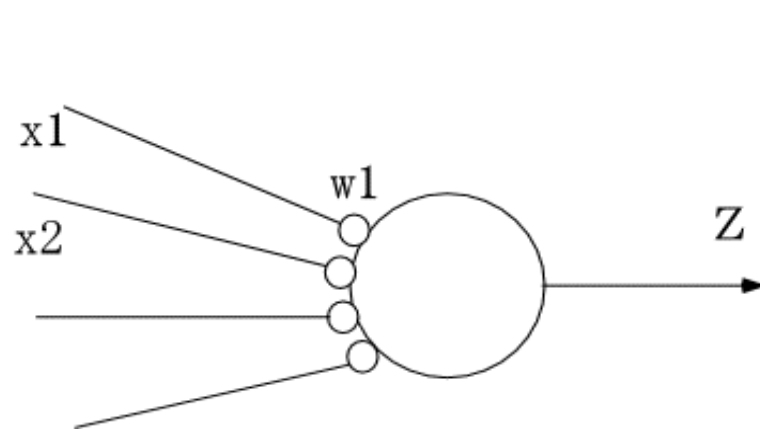
- ニューラルネットワーク
  - 階層型ネットワーク
  - 相互結合、回帰結合ネットワーク
- ベイズモデリング
  - 回帰、予測、補間
  - 一般化状態空間モデル
- 非線形ダイナミカルシステム
  - 非線形振動子ニューロン

# モデリング手法の動向

- Deep Learning（深層学習）
  - 多層のニューラルネットワーク
  - 入力画像 ⇒ ラベル（パターン認識）
  - 階層的な特徴表現学習
- スパースモデリング
  - 信号の重み付き基底和分解
  - 重要因子発見、特徴表現学習の一種
- 確率的プログラミング
  - 複雑な確率分布をプログラムで記述
  - 確率分布からのサンプルを生成

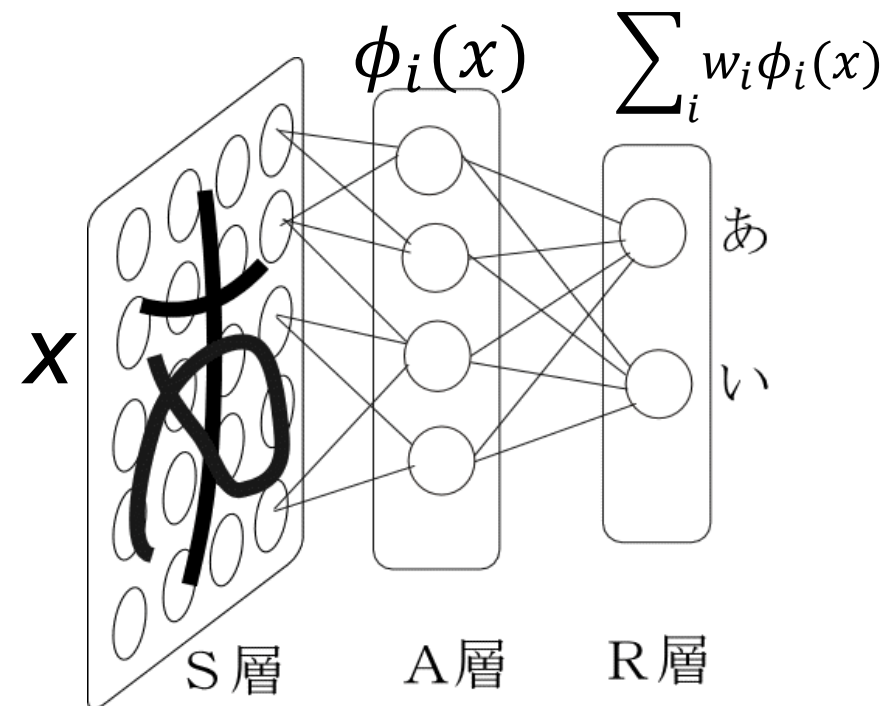
# ニューラルネットワーク

- 脳の情報処理モデル



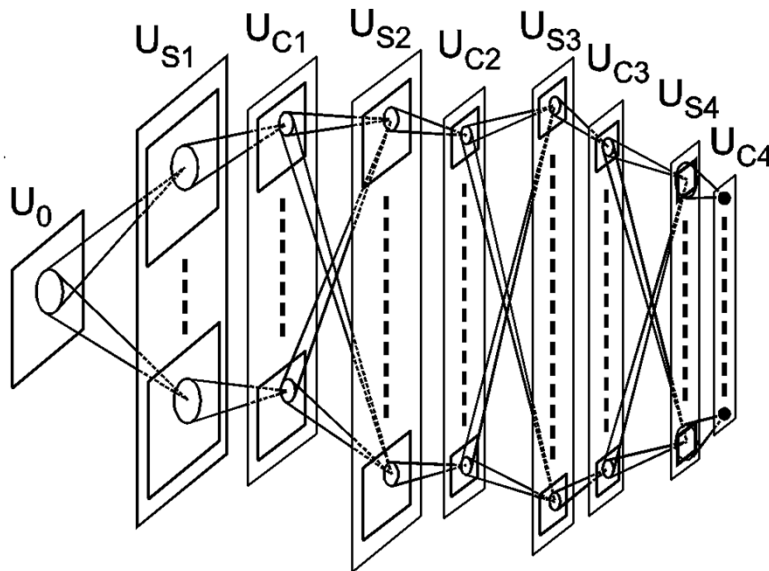
$$z = f \left( \sum_i w_i x_i - \theta \right)$$

神経細胞モデル



パーセプトロン [Rosenblatt 1956]

# Deep Learning (深層学習)

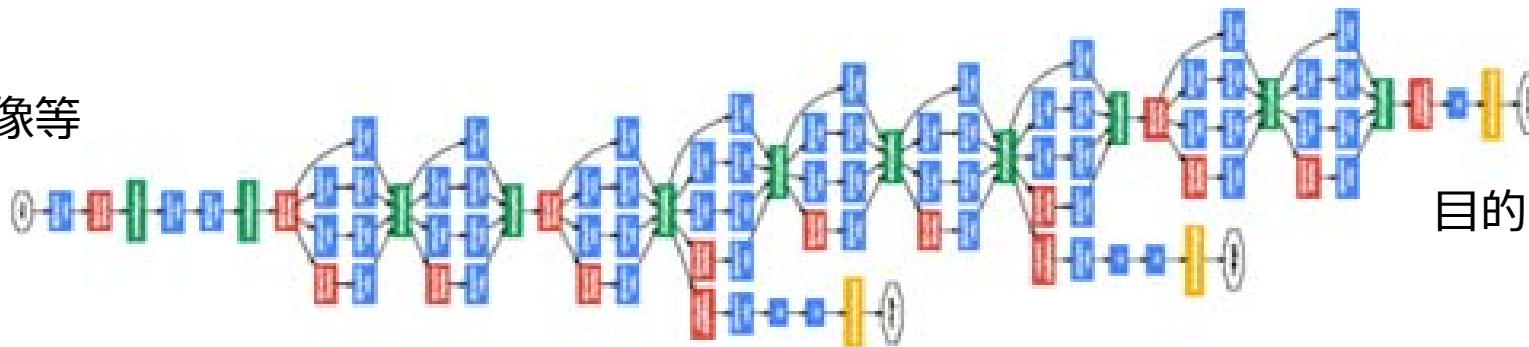


ネオコグニトロン  
 福島邦彦 (1981)  
 手書き数字認識



GoogLeNet (2014)  
 一般物体認識

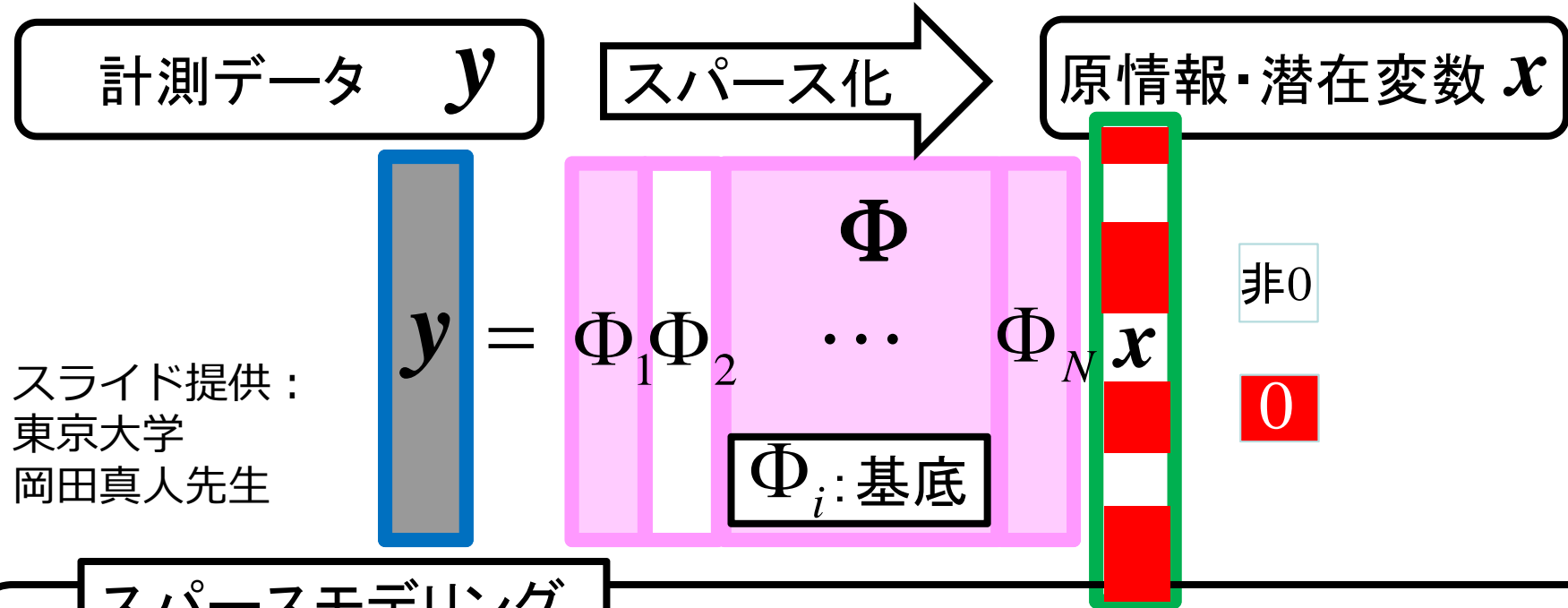
画像等



目的変数

# スパースモデリング(SpM)

## スパース原理による極限計測・潜在構造抽出



スライド提供：  
東京大学  
岡田真人先生

### スパースモデリング

潜在変数が**スパースな**(0が多い)状況で、方程式を解く

$$E(x) = \underbrace{\left\| y - \sum_i \Phi_i x_i \right\|_2^2}_{\text{データの再構成}} + \lambda \underbrace{\sum_i |x_i|}_{\text{スパース性}} \quad O(2^N) \rightarrow O(N^3)$$

ある条件下で、L1とL0が一致する数理的証明[Candes-Tao, 2005]

# スパースモデリングの深化と 高次元データ駆動科学の創成

領域代表：岡田真人（東大）

*Sparse Modeling*

[English](#) [お問い合わせ](#) [サイトマップ](#)

文部科学省科学研究費補助金「新学術領域研究」平成25年度～29年度  
スパースモデリングの深化と高次元データ駆動科学の創成  
Initiative for High-Dimensional Data-Driven Science  
through Deepening of Sparse Modeling

📍 [ホーム](#)

📍 [領域代表のあいさつ](#)

📍 [領域概要](#)


## 📍 News & Topics

2016.2.15 2016年3月6日(日)-8日(火)に、神戸大学にて開催される2015年度チュートリアル講演会・公開シンポジウムのプログラムを公開しました。



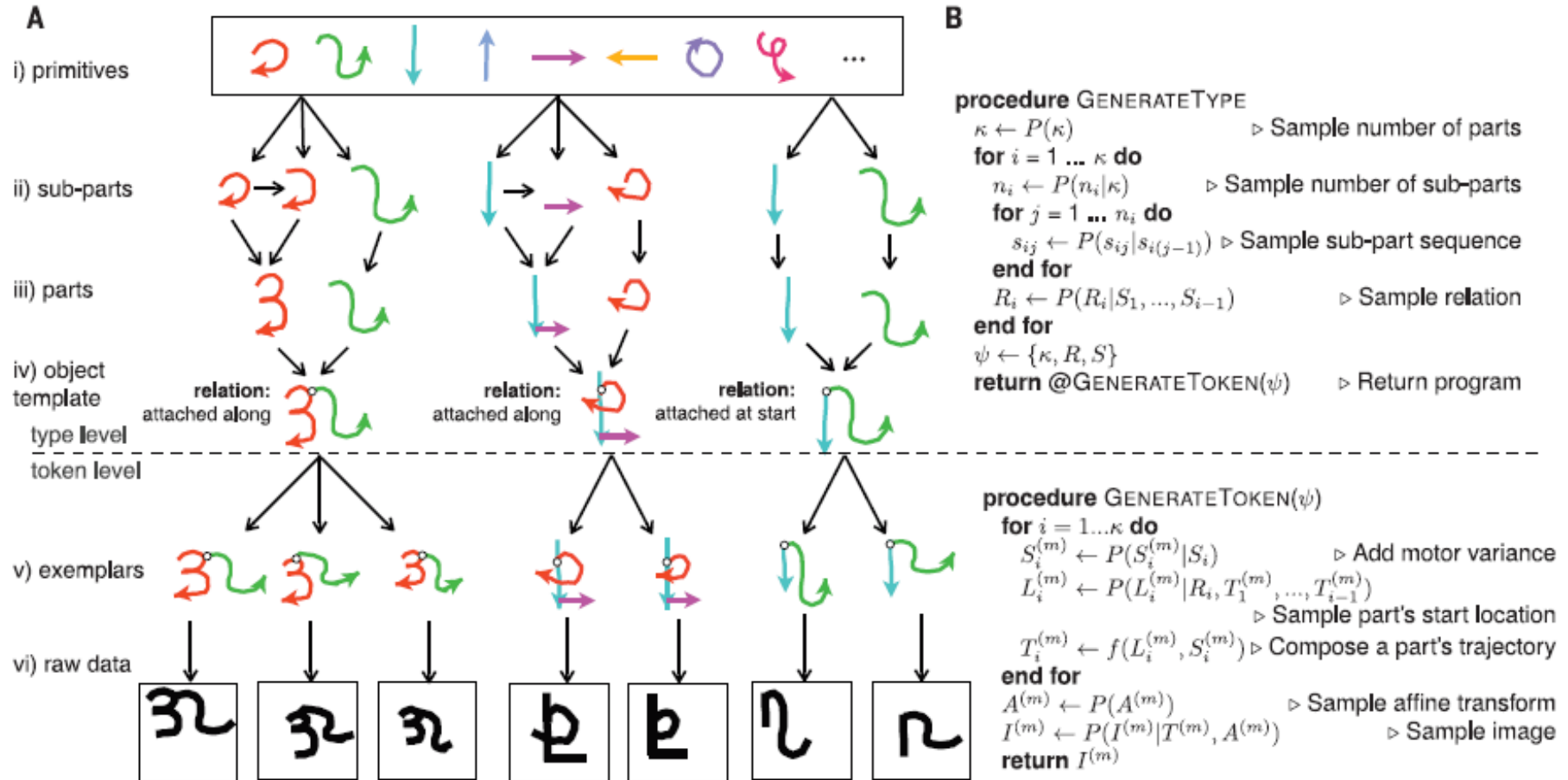
JSPS日本学術振興会

# 確率的プログラミング

- 確率モデルを使った学習・推論
    - 確率モデル記述 (知識表現)
    - 学習・推論アルゴリズム
  - モデルの記述と学習・推論の分離
  - 汎用の学習・推論エンジンを構築
- 
- 複雑な確率モデルを容易に利用可能に
    - BUGS, Stan, ...
    - PRISM, BLOG, Church, Venture, ...  
(DARPA PPAML)



# 手書き文字の確率分布モデル

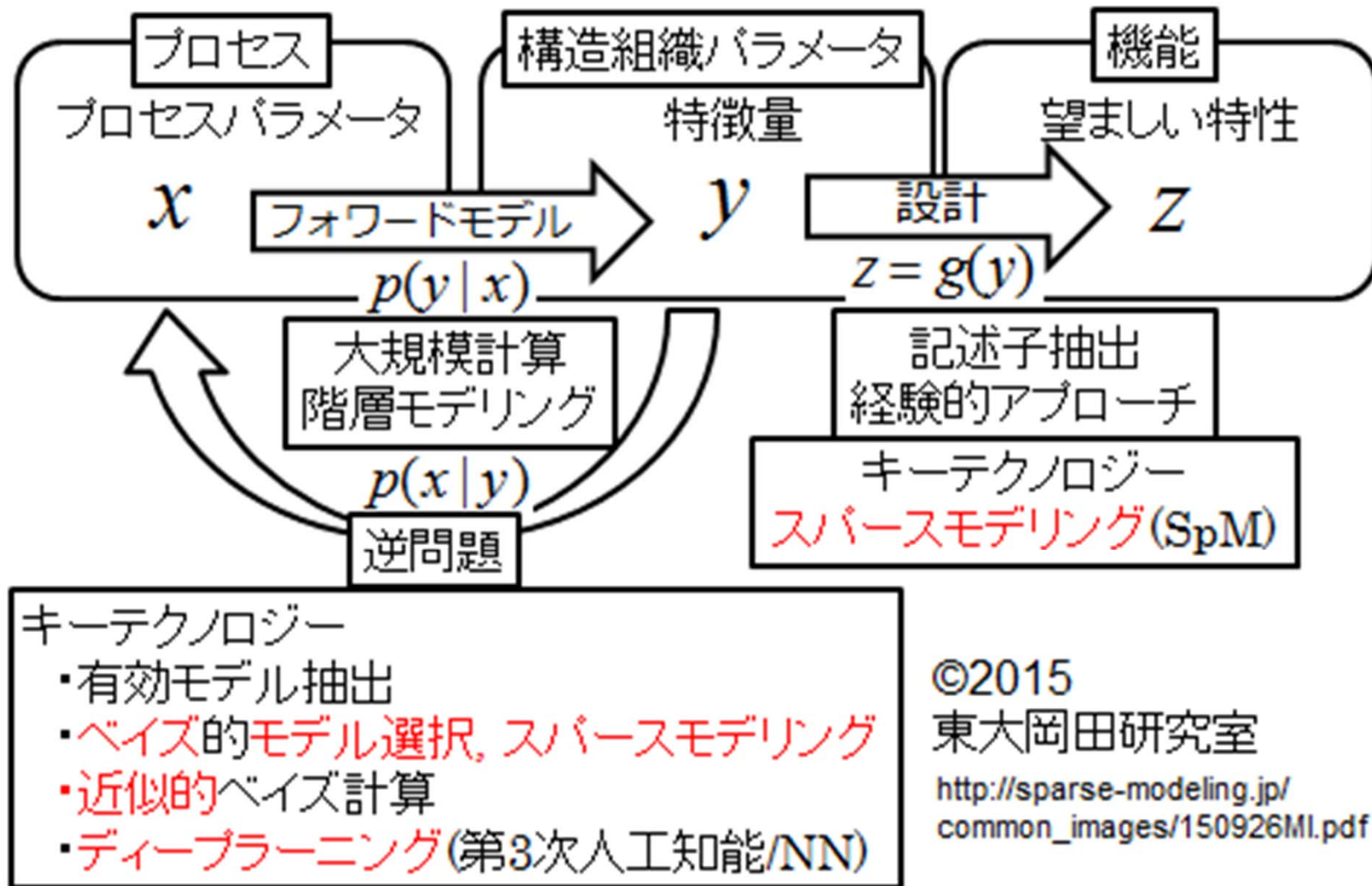


図の出展: Lake+: Human-level concept learning through probabilistic program induction, Science 350, 6266, 2015

# 人工知能技術の材料科学への応用

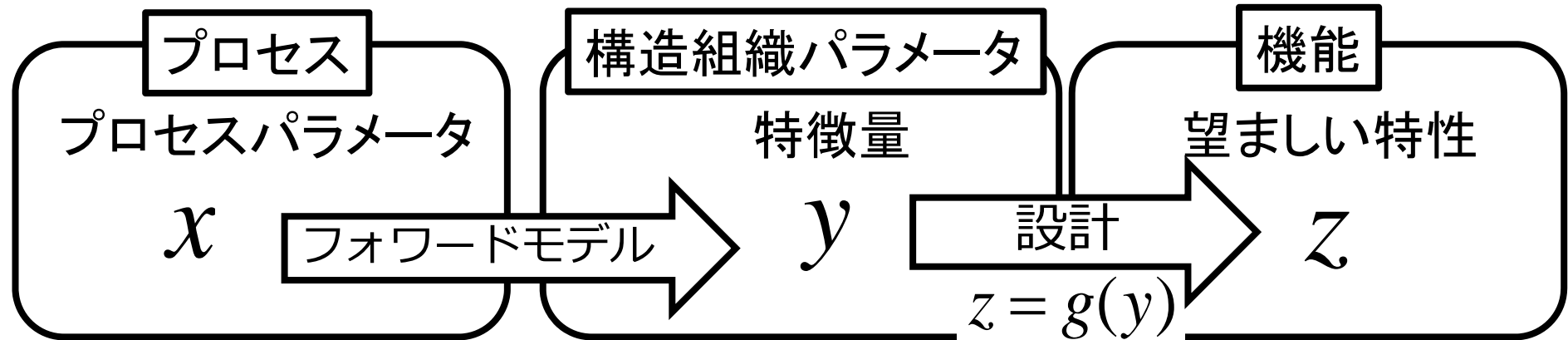
- 探索空間の削減
- 多種多様な知識 = 世界のモデルの利用
  - 論理的知識
  - 数学・数理的知識
  - 物理的知識
  - 確率統計的知識、ヒューリスティクス
  - 常識
  - . . .

# データ駆動型物質材料科学の三つのステップ



Igarashi, Nagata, Kuwatani, Omori, Nakanishi-Ohno and M. Okada,  
 “Three Levels of Data-Driven Science”, Journal of Physics: Conference Series, accepted.

# データ駆動型物質材料科学の三つのステップ

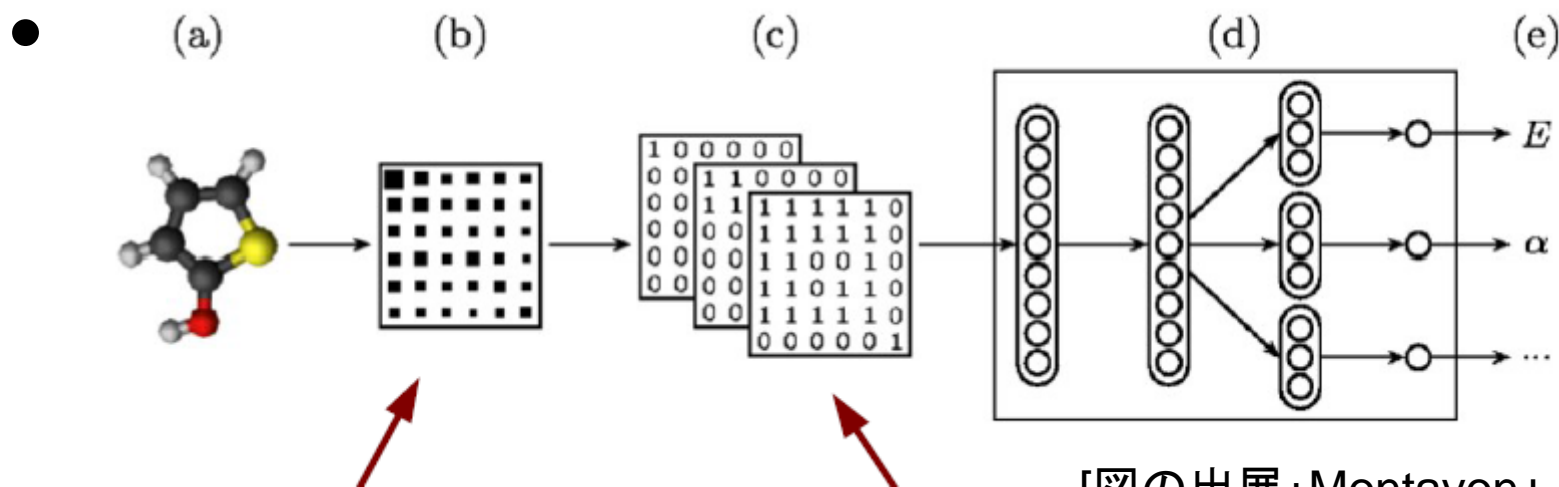


- フォワードモデルの近似・補間  
– 計算コストの削減、探索効率化

東京大学岡田真人先生  
の slides を改変

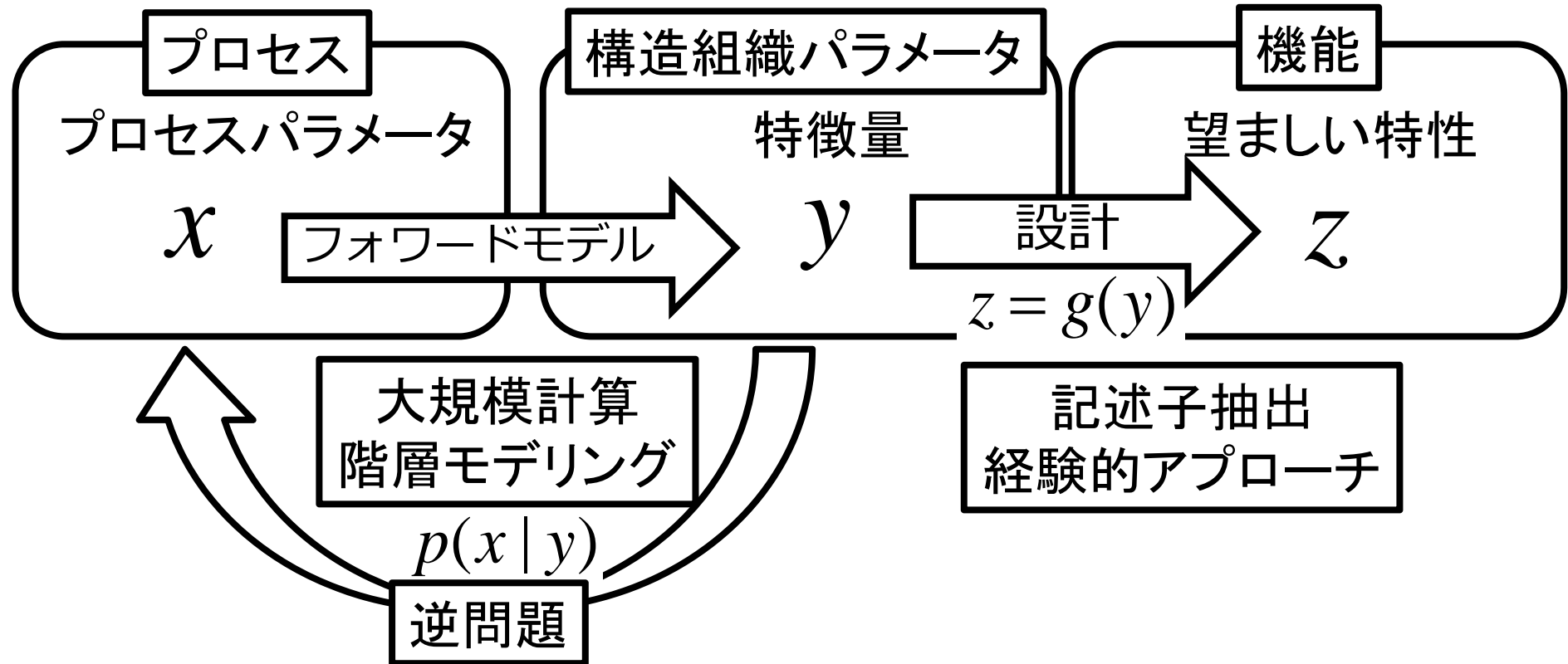
# 有機分子の特性値予測

- G. Montavon, K.-R. Müller, et al.: Deep Learning of Molecular Properties in the Chemical Compound Space, 2013
- データ：GDB-7 7,000有機分子（最大7原子）
- 入力：原子の配置（行列として表現）
- 出力：分子の特性値（14種類）



[図の出展: Montavon+ 2013]

# データ駆動型物質材料科学の三つのステップ

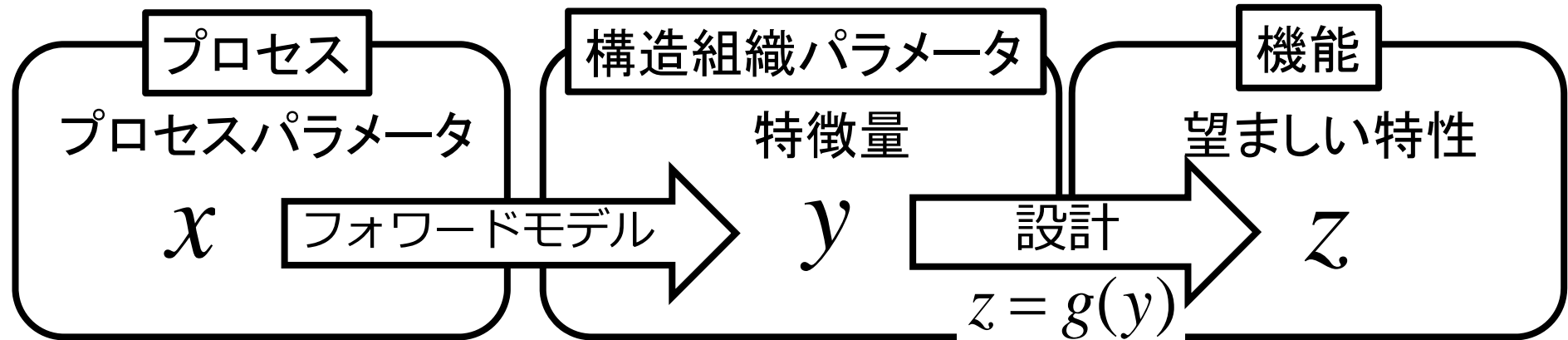


- 良い構造組織を得るためのパラメータの推定

# 物質探索の効率化

- A. Seko, A. Togo, H. Hayashi, K. Tsuda, L. Chaput, and I. Tanaka: Discovery of low thermal conductivity compounds with rst-principles anharmonic lattice dynamics calculations and Bayesian optimization, arXiv 1506.06349, 2015
- 望ましい性質を持った物質の探索
- シミュレーション+ベイズ最適化
- 実験観測データや第1原理計算結果データ
- 機械学習モデル（ガウス過程回帰）による予測を補助的に使用しながら、最適な物質構成を探索

# データ駆動型物質材料科学の三つのステップ



- 設計研究者の  
勘と経験のモデル化
  - 重要特徴量  
= 記述子の抽出



東京大学  
岡田真人先生  
のスライドを改変

- 設計研究者支援



# AI for Science

- 多様な形態の知識の統合的利用
  - 文献情報、特許情報
  - 観測データの背景にある反応ネットワーク情報
  - シミュレーション結果のデータ
  - 実験データ



- 仮説生成
- 実験検証

D. Lenat: Automated  
Mathematician (1976)

R. King+ : Robot Scientist (2004)

Z. Ghahramani, J. Tenenbaum+ :  
Automatic Statistician (2014)

## まとめ：人工知能技術が可能にすること

- 多様な形態の知識の統合的利用
  - 大規模データの活用
  - 大規模知識の活用
  - 従来よりも複雑なモデリング
  - 重要変数・因子のデータからの発見
  - 従来よりもきめ細かい予測
  - データ駆動と知識駆動の融合



- 探索空間の削減