

題目:機械学習は真の発見に寄与できるのか?

講師:瀧川 一学(北海道大学・JST さきがけ)

要旨:深層学習を含む機械学習は、データ駆動型の「予測」を与える汎用技術である。しかし、「予測」から「発見」や「理解」に至るためには、未だ方法論的に大きな壁が立ちただかっている。2004年「予測と発見の科学」シリーズの第1巻として刊行された「統計的因果推論(宮川雅巳 著)」は、コンピュータが初めて卑近な道具になりつつあった1966年に、20世紀を代表する統計学者 Box が発表した論文“Use and Abuse of Regression”の話で始まる。回帰分析が実験研究よりも観察研究に使われる当時の状況を踏まえ、観察研究における回帰分析の目的を1)説明変数を観測したときの目的変数の予測、2)説明変数に外的操作を加えたときの目的変数への因果的効果の発見、の2つに大別した上で、Box は前者1)を「use」、後者2)を「abuse」と呼んだ。これは50年後の現在、「教師つき機械学習」にそのまま当てはまる。「相関関係は必ずしも因果関係を意味しない」は統計学のイロハである。統計学に精通した研究者ほど、機械学習はあくまでデータ中の相関関係の利活用のための道具である、という立場を強く支持するであろう。実際、検索も推薦も広告も制御も画像・音声・言語のパターン認識や変換も、AIブームを牽引する成功例はこの用途1)の例である。データにおいて観察された相関関係のみから因果関係を論じることは不可能であり、何か新たな枠組みが必要である。社会投入が進む現在、機械学習モデルのブラックボックス性は再認識され、例えば、所謂 FATE: Fairness(公平性), Accountability(説明責任), Transparency(透明性), Ethics(倫理)についての盛んな議論や、米 DARPA の Explainable AI の研究プログラムも始まっている。

さらに、興味が「科学法則の理解」である場合、相関関係の利活用では明らかに不満足である。本発表では、以上を十分認識した上で、機械学習をどのように活用できるか、現在何が研究されているか、について述べる。「探索と利用のトレードオフ」や「帰納推論の限界」の問題、Garbage in, garbage outと言われるような「データ自体の質や量への根本的依存性」や「データのバイアス」の問題、そのままでは新規な発見はできない根拠となる「データが疎な外挿領域での低信頼性・予測不可能性」の問題、どういふ変数(記述子)が取り込まれば良いかという「交絡因子の過不足ない同定」や「疑似相関」の問題など、基本問題と事例を整理し、データ駆動な「予測」から「発見」や「理解」に至るための技術的課題を議論したい。

なお、「データ(経験)による法則性の理解」の本質には、「経験論か合理論か」「帰納と仮説形成」などの、太古より人類が世界を理解するために議論してきた科学哲学上の未解決の難問がある。この点は、不毛な議論や空論を避けるために理解しておくべきである。そもそも現象の真の法則が人間に理解可能な単純なモデルに還元できる保証はどこにもないし、データを説明できるモデルは複数存在しうる。現代の実用的シミュレーションモデルの多くは経験的パラメタやデータ同化を伴う複雑なものであるし、開いた系についての発見的表現に過ぎず、対象現象の本質的理解になっているかには議論の余地がある(*Science*, 263(5147): 641-646, 1994)。Von Neuman はパラメタの多い理論を見て「パラメタが4つあれば象を描ける」と揶揄したと言われるが、現代の予測モデルはそれ以上に多数のパラメタを持つ。こうした事実は、科学で現在も未解明の現象や、科学に対する社会ニーズが、陽なモデル化が著しく困難な程には、多様で多因子的で本質的に複雑であることを示唆している。中谷宇吉郎が「科学の方法」で述べたように、科学には本来限界があつて、広い意味での再現可能の現象を、自然界から抜き出して、それを統計的に究明して行く、そういう性質の学問である。この意味でも、かつて「科学の文法」と呼ばれた統計学が、機械学習や人工知能技術と融合した新たな情報技術として、複雑な現象を「統計的に」理解する新たな手段となり得るのか再考する契機としたい。

**略歴:** 2004年 北海道大学大学院工学研究科 博士後期課程修了. 同情報科学研究科 博士研究員(COE), 京都大学化学研究所 特任助手, 助手, 助教(薬学研究科 兼務), 北海道大学創成研究機構 特任助教(テニュアトラック)を経て, 北海道大学大学院情報科学研究科 准教授. JST さきがけ研究者. 機械学習・データマイニング, データ駆動科学, バイオ/ケモインフォマティクス, 材料インフォマティクス等の研究に従事. 人工知能学会 人工知能基本問題研究会(SIG-FPAI) 主査 (2018-2019).