

計算論的神経科学とデータ駆動科学

東京大学・大学院新領域創成科学研究科 複雑理工学専攻

岡田真人

© 2024 Masato Okada

1. データ駆動科学

図1に示すように、2011年2月にScience誌において、データ科学特集が企画された[1]。図1のその特集号の中の論文で、天文学における高次元データ解析手法(画像処理)が、全く対象とスケールが異なる生命科学でも有効に働くという内容が紹介されており、このようにスケールや対象が異なる場合でも、同じアルゴリズムが有効に働くので、データ科学を創成されそうであると論じている。

しかし、そこには、なぜ、スケールや対象が異なる場合でも、同じアルゴリズムが有効に働く理由を探るという態度は全くみられなかった。そこで我々は、その理由を問い、背景にある普遍性からデータ解析自体を学問的対象とする枠組みである**データ駆動科学**の創成を目指した。

それを基盤に、我々は、文部科学省科学研究補助金「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 Sparse



図1 Science2012のデータ科学特集

データ駆動科学とは

- 機械学習などの**人工知能**を使い、各学問分野の問題を解いていくというアプローチ
- 実験/計測/計算データの**背後にある潜在的構造**の抽出に関して、データが対象とする学問に**依存しない普遍的な学問体系**
- 同じアルゴリズムがスケールや対象を超えて、有用であることが多いという**経験的事実**を背景として、その理由を問い、背後にある**普遍性**から、**データ解析自体を学問的対象とする枠組み**。

図2 データ駆動科学

新学術領域研究 平成25～29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

領域代表岡田真人の個人的な狙い
世界を系統的に記述したい
その方法論と枠組みを創りたい
ヒトが世界を認識するとは?

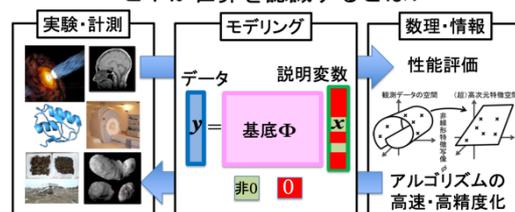


図3 新学術領域 SpM

Modeling (略称 新学術 SpM)を開始した。

<http://sparse-modeling.jp/>

2. 計算論的神経科学と David Marr の三つのレベル

後述するように新学術 SpM の 2013 年 10 月末最初の打ち合わせの際に、データ駆動科学を推進し創成することがいかに難しいかを実感する体験を持った。私は、新学術 SpM の推進し創成をスムーズに行うことを、領域代表の属人的才能で行うのではデータ駆動科学の創生はあり得ないと考え、データ駆動科学のパラダイムを明確化する必要があると考えた。その際に、強く影響されたのがイギリスの神経科学者 David Marr (1945 年 1 月 19 日 - 1980 年 11 月 17 日)

<https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%83%87%E3%83%93%E3%83%83%E3%83%89%E3%83%BB%E3%83%9E%E3%83%BC>

が彼の著書 Vision[2]で提案した、David Marr の三つのレベルである。

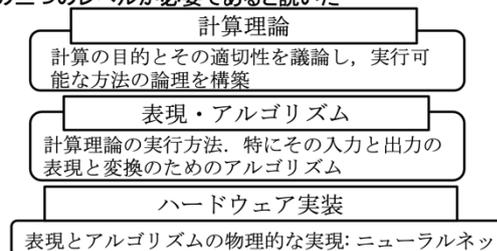
このパラダイムは同時の脳神経科学の状況からすると革新的であった。通常、脳や神経系を研究するには、脳神経系を構成する神経細胞や、その神経細胞のネットワークであるニューラルネットワーク、つまり脳のハードウェアを研究するのが当然であると考えられていた。

事実、David Marr も Cambridge 大での博士学位論文では、現在 Marr の三部作と呼ばれる、総ページ数 300 ページの、小脳の理論、大脳古皮質の理論、大脳新皮質の理論で、脳のハードウェアの研究を行っている。これら三つの論文は、その後の脳のハードウェアの研究の方向性を決定づけるものであった。小脳の理論では、小脳はパーセプトロンであると提唱し、大脳古皮質の理論では、大脳古皮質は連組記憶モデルであると提唱している。さらに、大脳新皮質の理論では、大脳新皮質は分布を表現するとしている。これらすべて、この本質をついており、現在も、このパラダイムで脳のハードウェアの研究は推進されている。

このような実績により、David Marr は MIT の AI ラボの教授に招聘される。驚くべきことにここで、David Marr は、脳はハードウェアレベルの研究だけでは理解できないと宣言する。そして、脳は情報処理機械であるという側面を重視した、図 3 の David Marr の三つのレベルを提唱する。

David Marrの三つのレベル (1982)

David Marrは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であると説いた



David Marr Vision: A Computational Investigation into the Human Representation and Processing of Visual Information (1982)

図 4 David Marr の三つのレベル

ハードウェアの研究は具体的でよくわかるが、計算理論と言われても抽象的でよくわからない。そこで、Marr と Poggio による両眼立体視を例に取り、David Marr の三つのレベルを説明する [3]。両眼立体視とは、左右の網膜像の対応点を探し、その対応関係をつかって、網膜像では顕に表現されていない、奥行方向の情報を推定する問題である。

この問題の計算理論の計算の目的は、両眼の対応問題を解くことである。しかし、この問題は不良設定性を持ち、そのままでは解を一意に決めることは出来ず、適切ではない。そこで、網膜上で近い点同士の奥行きは近いという拘束条件を導入して、問題を適切化する。計算理論の下のレベルの表現とアルゴリズムのレベルでは、計算理論で導入された拘束条件を数理的に表現する。右と左網膜に対して、それぞれ 1 次元の場を用意し、その 1 次元の場で、奥行きを表現する。そして、1 次元の場の中に、近い点同士の相互作用を導入し、計算理論で導入された拘束条件を表現する。そして、それら二つの 1 次元場に評価関数をいかのような評価関数を導入する。その評価関数の最初の項は、各 1 次元場に一つだけ値を取り、そのほかの部分に 0 になるような項である。二つの目の項は、二つの 1 次元場の相互作用を表し、片方の 1 次元場で 1 が立つところの近くに、もう片方が 1 を取りやすいような項である。そして、その評価関数を最小化するアルゴリズムで、両眼立体視の問題を表現し解く。このように Marr と Poggio は両眼立体視の、計算理論と表現・アルゴリズムを論じた。この両眼立体視の話は、脳の機能の研究において、計算理論と表現・アルゴリズムを用いる必要があることを示す良い例である。

David Marr は、脳を複雑な情報処理機械である立場をとり、複雑な情報処理機械一般を理解する戦略として、計算理論、表現・アルゴリズム、ハードウェア実装の三つのレベルを分けて考えるべきだというパラダイムを宣言している (Marr Vision 1982)。ここでいう複雑な情報処理とは、両眼立体視のように、与えられた条件だけでは解が一意に決まらず、他の条件を導入しなければならない情報処理課題のことを言う。

3. データ駆動科学の三つのレベル

3-1. スペクトル分解の三つのレベル

後述するように新学術 SpM の 2013 年 10 月 31 日(木)のハロウィンに東大駒場キャンパスで開かれた最初の領域会議の際に、図 4 のベイズ的スペクトル分解[4]の紹介を私が行った時のことである。

スペクトル分解の計算理論の**計算の目的**は、多峰スペクトルに埋め込まれた複数の離散的な電子構造を、スペクトルデータから抽出することである。スペクトル分解は、非常に多くの物理学/化学/生命科学/地球惑星科学などの応用分野が存在する。物理学/化学/では、X 線光電子分光スペクトル(XPS)、物理学/化学/生命科学では核磁気共鳴スペクトル(NMR)、地球惑星科学では月の表面の分光スペクトルなどである。

ここで複雑な情報処理であるスペクトル分解を、図 6 に示すように、David Marr の三つのレベルで整理してみようこの計算の目的を遂行するには、多峰性スペクトルをガウス関数などの単峰関数の線形和で表現し、その線形展開する際のガウス関数の数 K を決める必要がある。しかし、ガウス関数の数 K を適切に決める方法がすぐには思い当たらない。ガウス関数の数 K を適切に決めないと、電子状態を多峰スペクトルか推定するという**計算の目的**が達成できなくなる。ガウス関数の数 K を大きくすれば、多峰スペクトルの近似精度はどんどんあがっていく。しかし、そうすると、きっと多峰スペクトルの観測データに過適用してしまう。そこで、ベイズ推論の知見を導入し、ベイズ的モデル選択で、ガウス関数の数 K を決めるという戦略を用いる。電子状態を推定するという**計算の目的**を達成するために、ここで計算理論の下のレベルの表現とアルゴリズムのレベルの議論になり、多峰スペクトルを K 個のガウス関数の線形和で**表現**し、多峰スペクトルを再構成するベイズ的モデル選択の**アルゴリズム**をもちいて、電子状態を推定することにした。この方針は成功に終わり、その結果を学术论文にまとめることができた[4]。

このようにして構築したベイズ的スペクトル分解の紹介を終えようとした時、

ベイズ的スペクトル分解: K をどう選ぶか

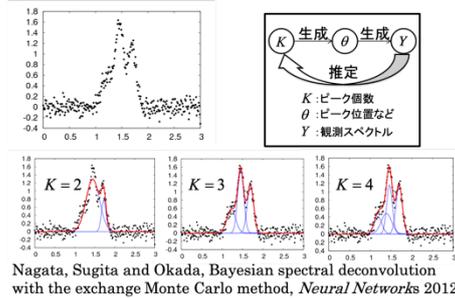


図 5 ベイズ的スペクトル分解

ここで複雑な情報処理であるスペクトル分解を、図 6 に示すように、David Marr の三つのレベルで整理してみようこの計算の目的を遂行するには、多峰性スペクトルをガウス関数などの単峰関数の線形和で表現し、その線形展開する際のガウス関数の数 K を決める必要がある。しかし、ガウス関数の数 K を適切に決める方法がすぐには思い当たらない。ガウス関数の数 K を適切に決めないと、電子状態を多峰スペクトルか推定するという**計算の目的**が達成できなくなる。ガウス関数の数 K を大きくすれば、多峰スペクトルの近似精度はどんどんあがっていく。しかし、そうすると、きっと多峰スペクトルの観測データに過適用してしまう。そこで、ベイズ推論の知見を導入し、ベイズ的モデル選択で、ガウス関数の数 K を決めるという戦略を用いる。電子状態を推定するという**計算の目的**を達成するために、ここで計算理論の下のレベルの表現とアルゴリズムのレベルの議論になり、多峰スペクトルを K 個のガウス関数の線形和で**表現**し、多峰スペクトルを再構成するベイズ的モデル選択の**アルゴリズム**をもちいて、電子状態を推定することにした。この方針は成功に終わり、その結果を学术论文にまとめることができた[4]。

スペクトル分解の三つのレベル (1/2)

スペクトル分解の計算理論

データ解析の目的: 多峰性スペクトルから背後にある離散電子のエネルギー準位を推定する

データ解析の適切さ: 多峰性スペクトルを単峰性関数の線形和で表し、その単峰性関数の個数を推定する。誤差関数の最小化では、単峰性関数が多い方が誤差関数は小さい。そこで統計学の交差検証誤差やベイズ的モデル選択で単峰性関数の数 K を決める。

スペクトル分解のモデリング

多峰性スペクトルを単峰性関数の線形和に観測ノイズが付加されて生成するとモデリングする

スペクトル分解の三つのレベル (2/2)

スペクトル分解の表現・アルゴリズム

多峰性スペクトルを単峰性関数の線形和に観測ノイズが付加されて生成するとモデリングし、ベイズ推論を適用することで、 K 個の単峰性関数の大きさ、位置、幅の事後確率を求める。各 K に対して、ベイズ的自由エネルギーを求め、ベイズ的自由エネルギーを最小にする K を求める。その K 個の単峰性関数の位置を、電子のエネルギー準位とする。

Igarashi, Nagata, Kuwatani, Omori, Nakanishi-Ohno and M. Okada, "Three Levels of Data-Driven Science", *Journal of Physics: Conference Series*, 699, 012001, 2016.

図 6 スペクトル分解の三つのレベル

機械学習研究者が、ガウス関数のような基底関数を無限個で、多峰スペクトルを近似する方法があるとコメントしました。ガウス過程回帰のことです。これに、すぐに反応したのが実験研究者で、ガウス関数の数 K が無限ならもっとすごいことができるのではないかと興奮し出しました。

ここまでの私の説明を読んだ方は、この興奮が全く的外れなことはよくわかると思います。基底関数無限個で多峰スペクトルを高精度に再構成できても、それは**スペクトル分解の計算の目的を達成できてない**ものです。

ここで、私は異分野融合の真の困難さの理由がよくわかりました。通常、異分野融合では使っている言葉の定義が違うので、議論にならないと言う話がありますが、それは誤りです。いくら言葉の定義を一致させても、異分野融合の困難さは解消しません。この本質は、データ解析が、**David Marr** が指摘したように階層的な構造をしており、現在どのレベルの議論をしており、そのレベルの議論が、他のレベルの議論と矛盾がないかをチェックしながら研究を進めるということをこれまで経験したことがないことが、異分野融合の困難さの原因です。同一分野内では、どのレベルの議論をするかがあらかじめ決まっておき、他のレベルのことを意識して議論する必要がないので、このようなトレーニングが秀才であると信じられている通常の研究者にはできていません。

3-2. David Marr の三つのレベルが示唆すること

私は、新学術 **SpM** の推進し創成をスムーズに行うことを、領域代表の属人的才能で行うのではデータ駆動科学の創生はあり得ないと考え、データ駆動科学のパラダイムを明確化する必要があると考えました。そこで思いついたのが、2. で紹介した両眼立体視の問題とベイズ的スペクトル分解の相同性です。この相同性から、スペクトル分解のような自然科学のデータ解析も、脳が解いているような複雑な情報処理に属する問題であることがわかります。スペクトル分解でも、データだけからはガウス関数の数 K を決めることができずベイズ的モデル選択を援用せざるを得ません。また両方とも、表現はベイズ推論をもちいます。そこから、**David Marr** の三つのレベルから示唆されるデータ駆動科学の三つのレベルが導出できる可能性が見えてきました。

3-3. データ駆動科学の三つのレベル[5]

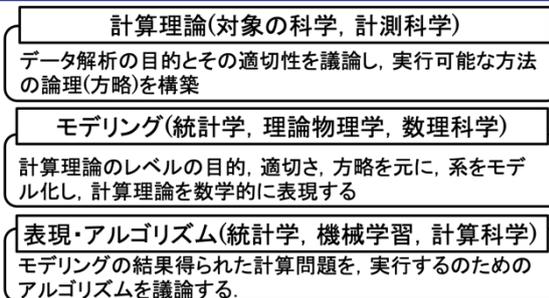
そこで David Marr の三つのレベルを参考にすると、以下のように図7のデータ駆動科学の三つのレベルに到達する。まずデータ駆動科学では、つかうハードウェアはノイマン型のコンピュータなので、ハードウェア実装を議論する必要はない。つぎに、その代わりに、計算理論と表現・アルゴリズムの間に、モデリングを導入しました。データ駆動科学では、ヒトが計算理論の目的や方略を数理モデルに変換する必要があります。

ここで重要な点は、データ駆動科学のこれまでの研究から、表現とアルゴリズムでは、ベイズ推論またはスパースモデリング(SpM)を用いることで十分であることが経験的にわかっています。データが生成されるメカニズムが数理モデルとしてある程度わかっており、解を一意に定める必要がある時に拘束条件を事前確率の形で自然にモデリングできるのがベイズ推論です。一方、データの生成機序が不明な場合、データを再構成するための特徴量をたくさん用意して、それを刈り込むスパースモデリング(SpM)が用いられます。これらベイズ推論とスパースモデリングだけでデータ解析ができることも、脳と自然科学データ解析の相同性です。

3-4. 連立方程式とデータ駆動科学

このデータ駆動科学の三つのレベルの構造は、図8の中学二年生で学ぶ連立方程式の応用問題を考えると容易にわかります。連立方程式のモデリングと表現とアルゴリズムのレベルは連立方程式と加減法、代入法です。データ解析の目的にそうとする部分は、つるかめ算、食塩水の問題、おねえちゃんと弟が遊園地に行く約束していて、弟が寝坊をして、おねえちゃんを追いかける時の速度を求める問題などです。このような森羅万象多様な対象が、連立方程式で全てモデル化でき、

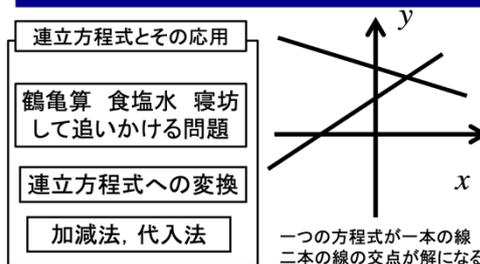
データ駆動科学の三つのレベル (2016)



Igarashi, Nagata, Kuwatani, Omori, Nakanishi-Ohno and M. Okada, "Three Levels of Data-Driven Science", *Journal of Physics: Conference Series*, 699, 012001, 2016.

図7 データ駆動科学の三つのレベル

連立方程式とデータ駆動科学



(五十嵐, 竹中, 永田, 岡田, 応用統計学, 2016)

図8 連立方程式とデータ駆動科学

連立方程式でかければ、加減法と代入法で問題の多様性を考えずに解けるとい構造を、なんと我々は義務教育の中学二年生の数学で学んでいるのです。ここにも、多様な計算問題がモデリングと表現・アルゴリズムで、連立方程式と、加減法/代入法と類型化され、パターン化されていることを学んでいます。図3の新学術 SpM も、図9に示すように、連立方程式とその応用と全く

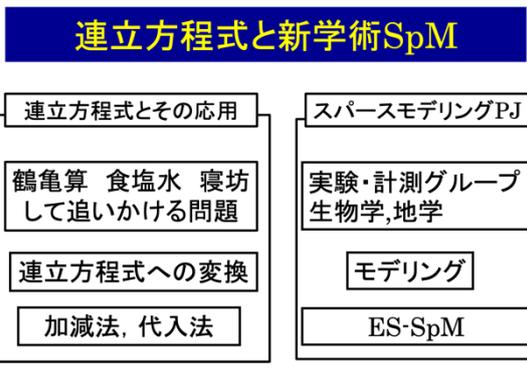


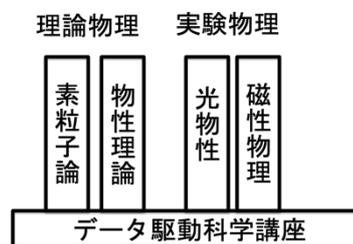
図9 連立方程式と新学術 SpM

同じ構造を持ちます。我々の新学術 SpM は、これまで存在したすべての大型研究プロジェクト中で、一番取り扱う範囲が広いです。そのことにより、新学術 SpM は高く評価されています。しかし、その背景は、これまで述べたように義務教育の中二の連立方程式とその応用と全く同じ構造だということに注意する必要があります。ビジネスとしてデータ解析についても、義務教育で学んだ大切な連立方程式の構造との相同性があることをすっかり忘れてしまっています。

このような結果、2016年のDeepMindのAlphaGoの登場の際に、AIが職業を奪うとか、気楽に深層学習でビジネスになると思って、こけた企業が続出しています。AlphaGoは確かに深層学習を使って驚くべき能力を発揮していますが、その背景にはきちっとデータ駆動科学の三つのレベルで解釈できる理由があります。AlphaGoでは、囲碁のデータを強化学習で学習し、その学習に関数近似能力の高い深層学習を使っているわけです。AlphaGoの計算理論は強化学習で、表現とアルゴリズムが深層学習です。そういう背景をまったく考えずに、深層学習というハードウェアに乗る、高度な関数近似器があれば、どんな問題でも解けると踊っても利益が出るはずはありません。つまり、**データ駆動科学の三つのレベル**にもとづく**戦略こそが、基礎研究の推進**をスムーズにするとともに、**高収益を上げることができる企業体制**を作る鍵になります。その高収益化の鍵は、本来はデータ解析を依頼する顧客が計算理論のレベルをデータ解析企業が請け負うことです。さらに、重要な点は、顧客が計算理論である、データ解析の目的、その目的を達成するための方略をしらないケースの方が、圧倒的に多いです。そこで、顧客をインタビューして、顧客のための計算理論を構築できる技術者が必要で、**その人が、会社の高収益を担っている**のです。

これを基礎研究に当てはめると、実験家自らが行っている実験の目的や実験データから知りたい情報を抽出できる訪略を知らないことも多いです。多くの場合、深く考えて実験しているわけではなく、先生や先輩がやっていることを無批判に反復しているだけなので、なにか状況が変わった場合の対処の仕方がわからないわけです。そこに必要なのは、**実験家でもなく理論家でもないデータ駆動科学研究者**です。データ駆動科学研究者は実験家より、実験の目的や実験データから知りたい情報を抽出できる訪略をよく知っており、理論家よりも、その系の理論的な機序をよく知っている必要があります。大学や企業では、図8のような横串の立場をとる、サッカーの**ミッドフィルダー**のような役割を果たします。

各学科にデータ駆動科学一講座
たとへば物理学科



データ駆動科学による
R&Dのフラット化と人材流動

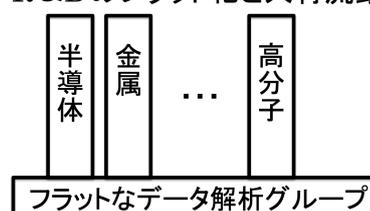


図9 ミッドフィルダーとしての
データ駆動科学研究者技術者

[1] SCIENCE VOLUME 331 | ISSUE 6018 | 11 FEB 2011
 [2] David Marr Vision: A Computational Investigation into the Human Representation and Processing of Visual Information (Mit Press)
 [3] Marr and Poggio, Cooperative Computation of Stereo Disparity, Science, New Series, Vol. 194, No. 4262. (Oct. 15, 1976), pp. 283-287
 [4] Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012
 [5] Igarashi, Nagata, Kuwatani, Omori, Nakanishi-Ohno and M. Okada, "Three Levels of Data-Driven Science", *Journal of Physics: Conference Series*, 699, 012001, 2016.