

ノーベル物理学賞/化学賞と AI for Science

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

内容

- 自己紹介
- 2024年ノーベル物理学賞
 - 脳のモデル
 - AIとの関連
 - 原典主義ではなく、波及効果主義
- AIの歴史
 - ゲームソフトの開発と終焉
 - 2016年のAlpha Goの登場
 - Demis HassabisによるAI for Science の提案
- AI for Scienceの展望

自己紹介(理論物理学)

- 大阪市立大学理学部物理学科 (1981 - 1985)
 - アモルファスシリコンの成長と構造解析
- 大阪大学大学院理学研究科(金森研) (1985 – 1987)
 - 希土類元素の光励起スペクトルの理論
- 三菱電機 北伊丹製作所(量産エンジニア) (1987 - 1989)
 - 化合物半導体(半導体レーザー)のエピタキシャル結晶成長
- 大阪大学大学院基礎工学研究科生物工学福島研 (1989 - 1996)
 - ニューラルネットワーク
 - 福島先生は畳み込み深層ニューラルネットワークの提案者
- JST ERATO 川人学習動態脳プロジェクト (1996 - 2001)
 - 計算論的神経科学
- 理化学研究所 脳科学総合研究センター 甘利チーム (2001 - 04/06)
 - 情報統計力学
 - ベイズ推論, 機械学習, 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
 - データ駆動科学、ベイズ推論、スパースモデリング (2004/07 –)

内容

- 自己紹介
- 2024年ノーベル物理学賞
 - 脳のモデル
 - AIとの関連
 - 原典主義ではなく、波及効果主義
- AIの歴史
 - ゲームソフトの開発と終焉
 - 2016年のAlpha Goの登場
 - Demis HassabisによるAI for Science の提案
- AI for Scienceの展望

2024年ノーベル物理学賞

- The Nobel Prize in Physics 2024 was awarded jointly to John J. Hopfield and Geoffrey E. Hinton "for foundational discoveries and inventions that enable machine learning with artificial neural networks”
- 正式な発表では、ニューラルネットを用いた機械学習について、物理学賞が授与された。
- 岡田の私見
 - 脳のモデルとしてのニューラルネットワークに関しても、大きな寄与があった二人の受賞

脳のモデル (1/2)

- Hopfield
 - 1982年にPNASでHopfieldモデルを提案
 - Hopfieldモデルと統計物理学のランダムスピン系の対応を示し、記憶容量という明確な数理指標を提案することで、多くの統計物理学者が脳科学に参入することになった。
 - それから40年を超え、脳科学に参入した統計物理学者は、理論脳科学だけでなく実験脳科学に影響を与えている。
 - Hopfieldモデルから提案されたアトラクターニューラルネットワークの概念は、現代の脳科学では必要不可欠な概念になっている。

脳のモデル (2/2)

- Hinton
 - 1985年にBoltzman Machineを提案
 - 1986年にNatureで誤差逆伝播法を提案し、第二次ニューラルネットワークブームの火付け役の一つになった。
 - RBM(Restricted Boltzmann Machine)により、大規模多層パーセプトロンの学習が可能であることを示した。
 - Fukushimaの脳の視覚野の階層構造に基づくネオコグニトロンに基づくAlex Netで、2012年IRSVRCで2位以下に圧倒的な差をつけて勝利

AIとの関連

- Hopfield
 - LLMは、この波及効果の延長線上にあると考えられる。LLMのTransformerあるいはAttention機構は、Hopfieldモデルの改良版を通じて理解できる可能性が最近議論されている。
- Hinton
 - 2012年のAlex Netをきっかけに、2016年のAlphaGo至る現代風AIの源流を創った。

日本人研究者の寄与 (1/3)

- Kaoru Nakano
 - 1972年Associatron: Hopfieldモデルの原型
- Shu-ichi Amari
 - 1972年Hopfieldモデルと同じモデルを提案
- Shu-ichi Amari
 - 1969年誤差逆伝播法の提案
 - これもノーベル賞の報告書に引用されていない
 - <https://www.nobelprize.org/uploads/2024/10/advanced-physicsprize2024-2.pdf>
- Kunishiko Fukushima
 - 1980年Neocognitronの提案

日本人研究者の寄与 (2/3)

NeocognitronへのBPの適用

Communicated by Dana Ballard

**Backpropagation Applied to Handwritten Zip Code
Recognition**

Y. LeCun

B. Boser

J. S. Denker

D. Henderson

R. E. Howard

W. Hubbard

L. D. Jackel

AT&T Bell Laboratories Holmdel, NJ 07733 USA

NEOCOGNITRON LEARNED BY BACKPROPAGATION

Masato Okada and Kunihiro Fukushima

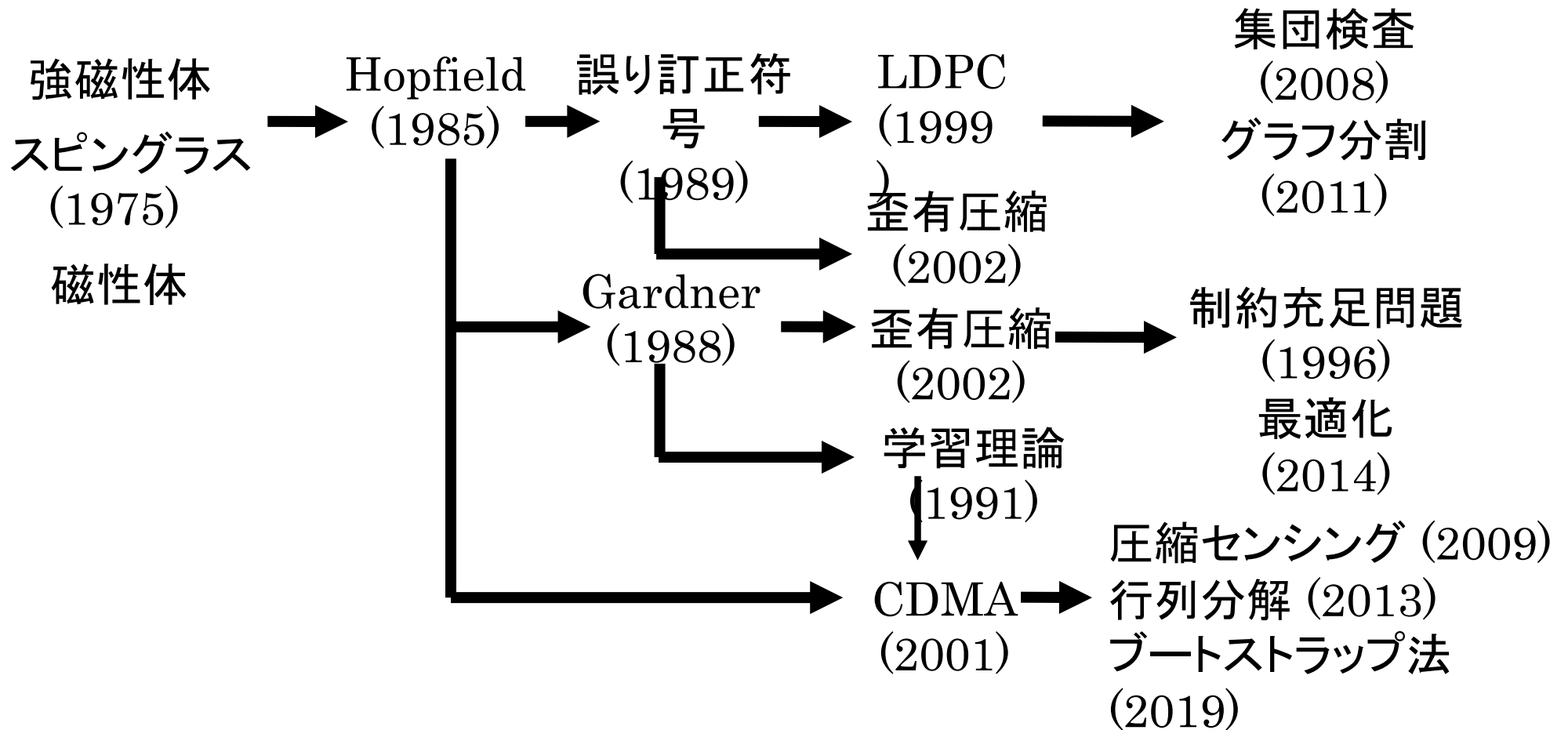
Department of Biophysical Engineering, Faculty of Engineering Science,
Osaka University, Toyonaka, Osaka 560, Japan

日本人研究者の寄与 (3/3)

- 日本人はHopfieldモデルの理論解析に寄与
- Amari and Maginu (1988)
 - Hopfieldモデルの統計神経力学
- Nishimori and Ozeki (1992)
- 統計神経力学の数値的評価
- Shiino and Fukai (1992)
 - TAP法によるHopfield記憶容量の理論
- Okada (1995)
 - レプリカ法と統計神経力学の統合理論

情報統計力学の創成

情報統計力学曼荼羅



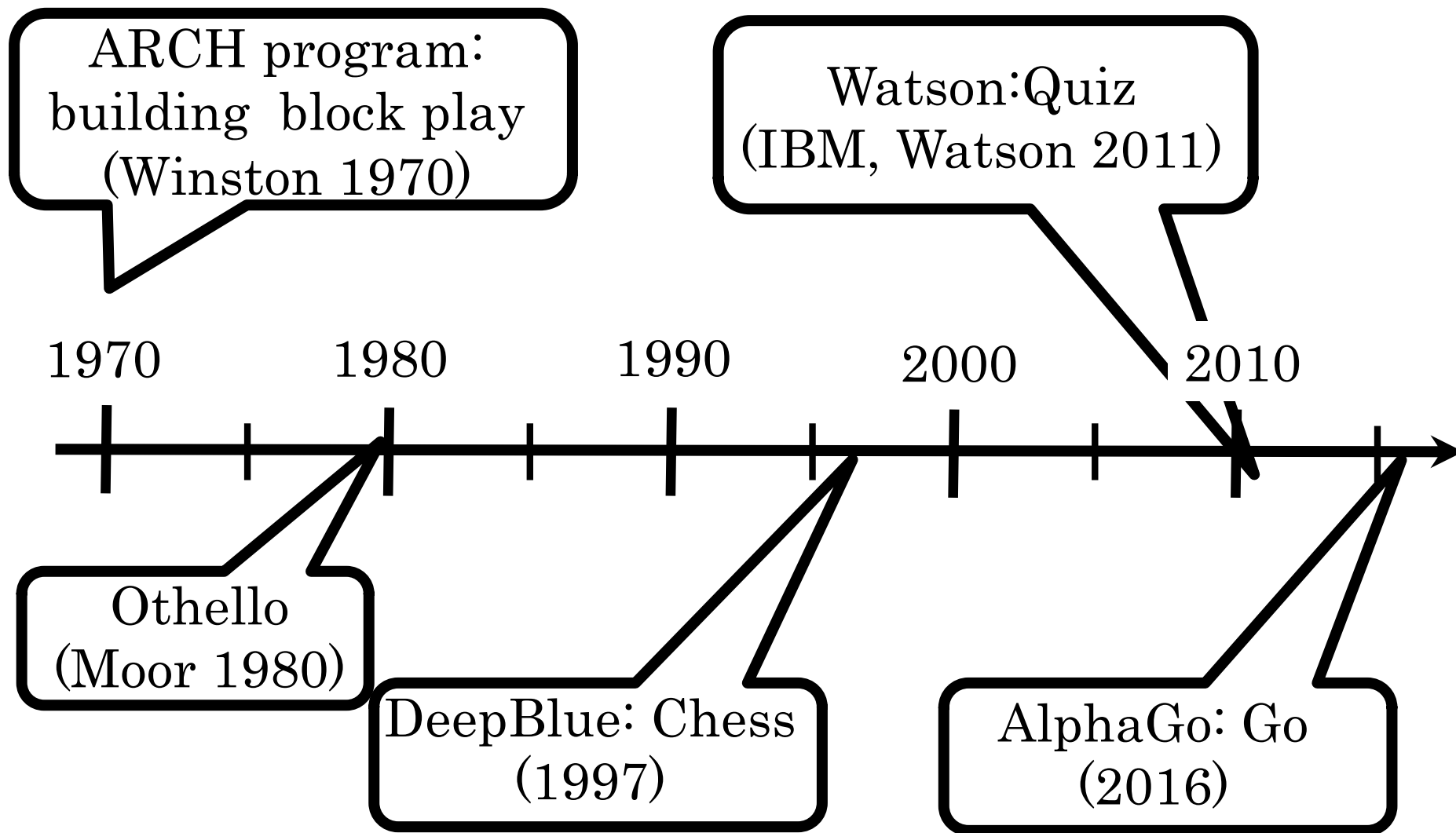
STAM Methodsのノーベル物理学賞解説に記述予定

(岡田2008, 樺島 2024)

内容

- 自己紹介
- 2024年ノーベル物理学賞
 - 脳のモデル
 - AIとの関連
 - 原典主義ではなく、波及効果主義
- AIの歴史
 - ゲームソフトの開発と終焉
 - 2016年のAlpha Goの登場
 - Demis HassabisによるAI for Science の提案
- AI for Scienceの展望

AIの歴史: テストベッドとしてのゲーム

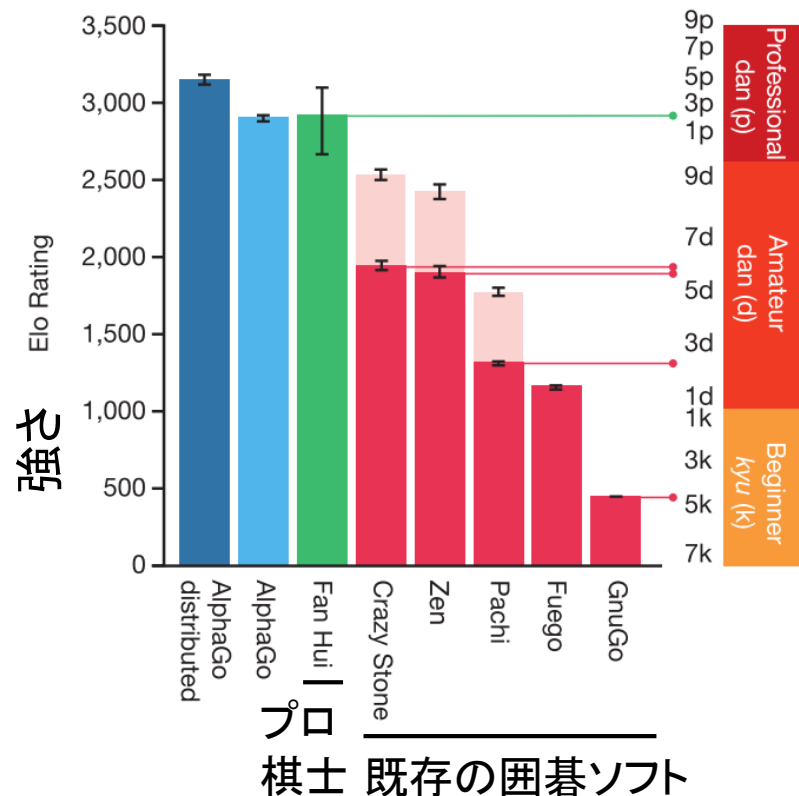


五十嵐、竹中、永田、岡田、AI for Scienceとデータ駆動科学、
応用統計学、45、75-86, (2016)

Mastering the game of Go with deep neural networks and tree search

Silver, D. (Google DeepMind) et al.

深層強化学習に基づく囲碁ソフト「AlphaGo」
欧州チャンピオンのプロ棋士に5戦全勝



Nature, 2016年1月28日出版

2024ノーベル化学賞受賞

Demis HassabisによるAI for Science

- I **don't think** much about **robotics** myself personally.
- What I'm really excited to use this kind of **AI for science**, and advancing that faster.
- I was giving a talk at **CERN** a few months ago.
- I think it'd be cool if one day an AI was involved in **finding a new particle**.

<http://www.theverge.com/2016/3/10/11192774/demis-hassabis-interview-alphago-google-deepmind-ai>

Next target of Demis Hassabis AI for Science



*"I THINK IT'D BE COOL
IF ONE DAY AN AI WAS
INVOLVED IN FINDING A
NEW PARTICLE."*

<http://www.theverge.com/2016/3/10/11192774/demis-hassabis-interview-alphago-google-deepmind-ai>

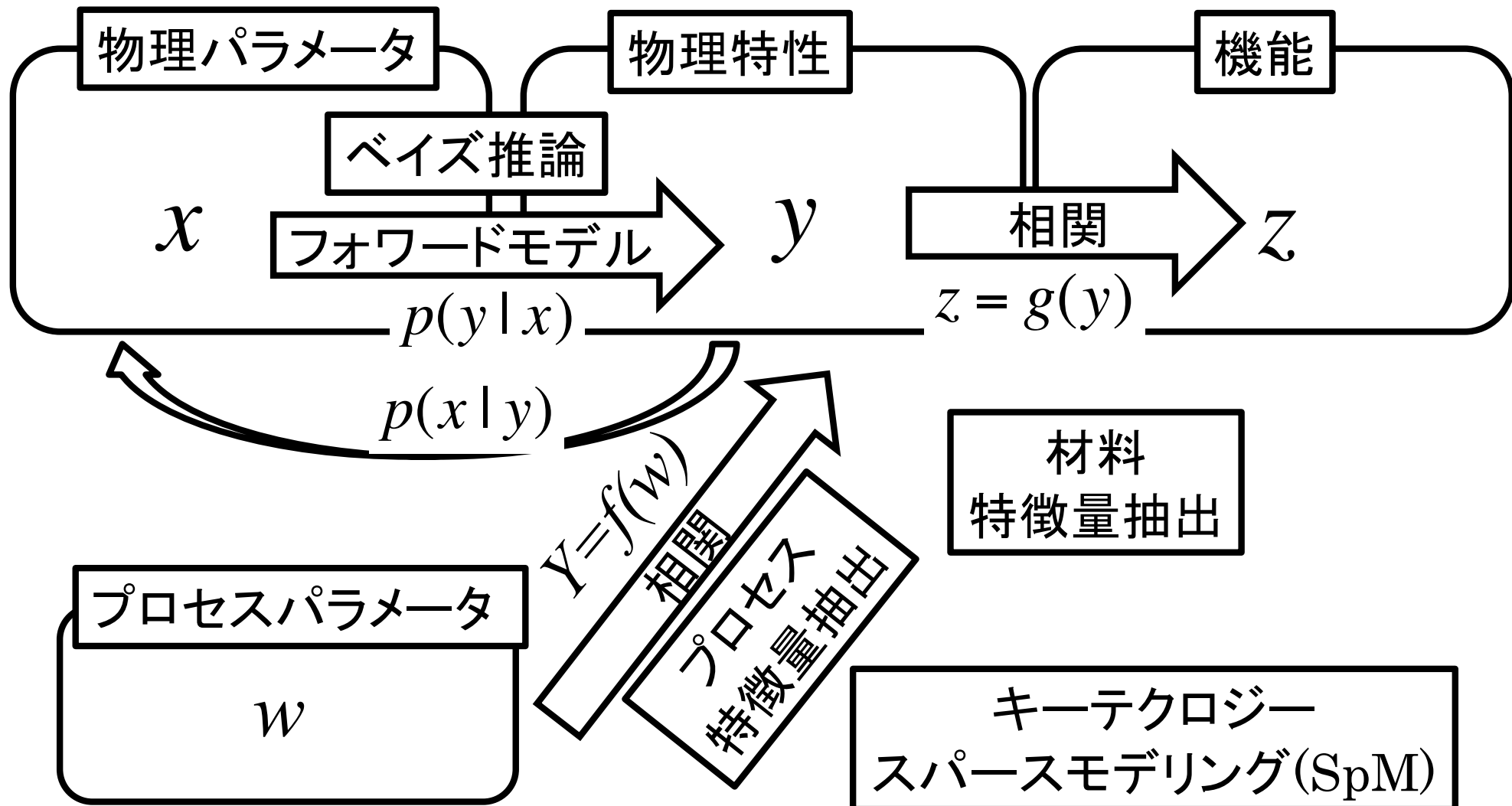
内容

- 自己紹介
- 2024年ノーベル物理学賞
 - 脳のモデル
 - AIとの関連
 - 原典主義ではなく、波及効果主義
- AIの歴史
 - ゲームソフトの開発と終焉
 - 2016年のAlpha Goの登場
 - Demis HassabisによるAI for Science の提案
- AI for Scienceの展望

AI for Scienceの国内での展開

- NIMS: マテリアルAI
- NICT: 協創的AI研究促進ファンド
ただしNICT内部のファンド
- 次スライド以降の機能発現の3+1ステップモデルとデータ駆動科学の三つのレベルでAI for Scienceの導入

マテリアルズ/計測インフォマティクス 機能発現3+1モデル (1/2)



Igarashi, Nagata, Kuwatani, Omori, Nakanishi-Ohno, and Okada "Three levels of data-driven science" International meeting on High-dimensional Data-Driven Science (HD3-2015), *Journal of Physics: Conference Series*, 699 (2016) 012001(2016)

マテリアルズ/計測インフォマティクス 機能発現3+1モデル (2/2)

- 知りたいことを、既知の学問的知見を用いて、モジュール構造で表現
- 各モジュールでのデータ解析は、ベイズ推論とスパースモデリングの二つのみ
- ベイズ推論とSpMIに深層ネットワークを組み込むことは可能
- 各モジュールのデータ解析は、次スライドのデータ駆動科学の三つのレベルで階層的に取り扱う

データ駆動科学の三つのレベル (2016)

計算理論(対象の科学, 計測科学)

データ解析の目的とその適切性を議論し, 実行可能な方法の論理(方略)を構築

モデリング(統計学, 理論物理学, 数理科学)

計算理論のレベルの目的, 適切さ, 方略を元に, 系をモデル化し, 計算理論を数学的に表現する

表現・アルゴリズム(統計学, 機械学習, 計算科学)

モデリングの結果得られた計算問題を, 実行するためのアルゴリズムを議論する.

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

まとめ

- 2024年ノーベル物理学賞について、脳のモデルとAIとの関連述べ、今回の受賞が原典主義ではなく、波及効果主義であることを述べた。
- 次に、AIの歴史がゲームソフトの開発であり、2016年のAlpha Goの登場により、それが終焉し、次のターゲットを科学とするAI for Science が2024年ノーベル化学賞受賞のDemis Hassabisにより提案されたことを紹介した。
- 最後に、AI for Scienceの今後の展望として、国内のAI for Scienceの動向と、マテリアルズ/計測インフォマティクスに関する展望を、機能発現3+1モデルとデータ駆動科学の三つのレベルを用いて述べた。