# AI for Scienceの今までと これから

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
- ・ AIの歴史
  - AI for Game: 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とデータ駆動科学
- AI for Material science
  - 機能発現の3+1ステップモデル
- AI for Science **ELLM**
- AI for Scienceの国内での動向
- まとめ

### 自己紹介(理論物理学)

- 大阪市立大学理学部物理学科 (1981 1985)
   アモルファスシリン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)
   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 )

## Take Home Messege

- AI for Gameの展開と終焉
- AI for Scienceの登場 –AIとScienceの双方向的相互作用
- AI for Scienceのロールモデル: AI for Material engineering
- AI for Scienceの今まで

   一機能発現の3ステップモデル
- AI for Scienceのこれから

-LLMの機能発現の3ステップモデルへ のグランディング

内容

- 自己紹介
- AIの歴史
  - AI for Game: 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とデータ駆動科学
- AI for Material science
  - 機能発現の3+1ステップモデル
- AI for Science & LLM
- AI for Scienceの国内での動向
- まとめ

### AI for Gameの展開と終焉



Masato Okada, "2024 Nobel Prize in Physics and Chemistry: From neural network models to materials engineering" Science and Technology of Advanced Materials: Methods, accepted, (2025)

doi:10.1038/nature16961

### ARTICLE Alpha Goの登場

#### 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







内容

- 自己紹介
- AIの歴史
  - AI for Game: 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とデータ駆動科学
- AI for Material science
  - 機能発現の3+1ステップモデル
- AI for Science & LLM
- AI for Scienceの国内での動向
- まとめ

### 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 is 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/demishassabis-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/demishassabis-interview-alphago-google-deepmind-ai

内容

- 自己紹介
- AIの歴史
  - AI for Game: 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とデータ駆動科学
- AI for Material science
   機能発現の3+1ステップモデル
- AI for Science & LLM
- AI for Scienceの国内での動向
- まとめ

### データ駆動科学とは

- 機械学習などのAI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、
- 全ての実験/計測のデータ解析をデータ駆動学の
   三つのレベルの鋳型に押し込んで考える

# David Marrの三つのレベル (1982)

David Marrは<mark>複雑な情報処理装置</mark>を理解するには以下 の三つの<u>レベルが必要であると説いた</u>



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

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, 実行するのための 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.



(五十嵐, 竹中, 永田, 岡田, *応用統計学*, 2016)

内容

- 自己紹介
- AIの歴史
  - AI for Game: 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とデータ駆動科学
- AI for Material science
   –機能発現の3+1ステップモデル
- AI for Science **ELLM**
- AI for Scienceの国内での動向
- まとめ



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)

### AI for Material Science 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SpM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

内容

- 自己紹介
- AIの歴史
  - AI for Game: 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とデータ駆動科学
- AI for Material science
  - 機能発現の3+1ステップモデル
- AI for Science **LLM**
- AI for Scienceの国内での動向
- まとめ

## 予測モデルの汎化性能

機械学習モデルに求められる性質

→ 未知データを上手く予測すること(汎化性能)

 $y \approx w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_p x_p$ 汎化性能を高めるためには、必要な特徴量を 見極めることが重要となる



21/57

スパースモデリング(2/2)



22/57

## スパースモデリングとLLM

- スパースモデリングの鍵は、特徴量をどう選ぶかである。
- 通常は、各研究者が個人の経験に基づいて、特 徴量を提案している。
- ここを、LLMを用いて全論文を検索して、関連する特徴量を全て列挙して、スパースモデリングする。
- 特徴量が莫大になると計算量爆発を起こすが、その際は、愚直な全状態探索ではなく、レプリカ交換モンテカルロ法で近似的に全状態探索を行う。

内容

- 自己紹介
- ・ AIの歴史
  - AI for Game: 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とデータ駆動科学
- AI for Material science
  - 機能発現の3+1ステップモデル
- AI for Science & LLM
- AI for Scienceの国内での動向
- まとめ

# AI for Scienceの国内での展開

- NIMS(物質•材料研究機構:文科省): AI for Material engineering
- NICT(情報通信研究機構:総務省):協 創的AI研究促進ファンド
  - NICT内部のファンド
- DX-GEM(再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点: 文科省)

内容

- 自己紹介
- AIの歴史
  - AI for Game: 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とデータ駆動科学
- AI for Material science
  - 機能発現の3+1ステップモデル
- AI for Science & LLM
- AI for Scienceの国内での動向
- まとめ

まとめ • AI for Gameの展開と終焉

- AI for Scienceの登場
   –AIとScienceの双方向的相互作用
- AI for Scienceのロールモデル: AI for Material engineering
- AI for Scienceの今まで
   一機能発現の3ステップモデル
- AI for Scienceのこれから

-LLMの機能発現の3ステップモデルへ のグランディング