

人工知能による科学研究の加速 Accelerating Science with Artificial Intelligence

渡部 匡己^{*1}
Watabe, Masaki

都築 拓^{*12}
Tsuzuki, Taku

海津 一成^{*1}
Kaizu, Kazunari

高橋 恒一^{*123}
Takahashi, Koichi

^{*1} 理化学研究所 生命システム研究センター
RIKEN QBiC

^{*2} 大阪大学大学院 生命機能研究科
Osaka University Graduate School of Frontier Biosciences

^{*3} 慶應義塾大学大学院 政策・メディア研究科
Keio University Graduate School of Media and Governance

We argue that the automation of scientific discovery is one of the most important applications of artificial intelligence. The automation of the whole process cycle of scientific research involves at least the following four frames; storage and representation of scientific knowledge, induction, deduction and abduction. Tightly coupled with sensing and experimental data acquisition, this automation would form the fifth paradigm of science.

1. はじめに

自然科学は世界のしくみを経験論的に理解しようという試みである。自然現象のよりよい記述と説明は、自然現象のより効率的な操作利用にも結びつく。科学研究は、工業化社会以降では生産活動の効率向上と経済的利潤の発生を期待され、政府などの公的セクターや企業などの経済主体の活動に組み込まれてきた。また、科学的方法は自然科学以外の社会科学や人文科学における知的活動の形態にも影響を与えてきた。

近代科学のアプローチでは、経験的な「帰納」、論理的な「演繹」、実験的な「検証」のプロセスを繰り返すことで、最初に立てた理論が着実に「確からしさ」を得て、「確証」または「反証」されていく[村上 79, 中谷 64, ポアンカレ 53]。科学の歴史は、観察や経験からパターンや法則性を帰納的に発見する第一の科学「経験=実験」からはじまった。その後、発見したパターンや法則性を一般化して形式的に定式化し、自然現象の背後に可る論理・法則に基づいて予測を行う第二の科学「理論」、さらに20世紀の後半には計算機の出現によりこの「理論」予測を大規模な非線形系にまで押し広げた第三の科学「シミュレーション」が勃興した。21世紀初頭の現在は、計算機の能力の急速な向上の継続、またセンシングや統計的機械学習、自動実験などの技術の発展により、いわば第一の科学におけるデータ取得、パターン発見、法則発見を大規模化に自動化した第四の科学である「データ集約」が発展している[Hey 09, Kuhn 62]。第一の科学「経験=実験」と第四の科学「データ集約」がどちらもデータを出発点に法則を探索し帰納的であるのに対し、第二の科学「理論」と第三の科学「シミュレーション」は仮説を出発点とした予測を通じて仮説検証を行い、演繹的である。仮説は新たな科学的知識の候補となる命題である。ただし、これまでは仮説の生成は人間が暗黙のうちに行っており、ごく限定的な自動化しか成されてこなかった。本稿では、科学研究プロセス全体の自動化を通して科学研究を加速するうえで必然的に求められる、仮説生成の加速と自動化を焦点とする「人工知能駆動型科学」を提案したい。ここでは帰納、演繹に次ぐ推論形式であるアブ

ダクション(仮説生成)[Heartshorne 82, 井上 13, 米盛 07]が焦点となるであろう。仮説は帰納と演繹の研究プロセスにおいて発生する齟齬やアノマリーの発見を契機に生成される。この形式には大きく構成論的なものと実在論的なものがあることを議論する。最先端の科学研究における仮説生成は人類の未踏領域も含めた非常に大きな探索空間における探索問題であり、ロボットによる自動化(本稿とは別途議論する)と高い汎用性を持った人工知能技術の開発が必要である。この技術開発の筋道において、既存の物理学の再構成、および生命科学などの「飼いなされた複雑系」における一般法則発見という二つの領域に注力することを提案する。

2. 科学的方法

科学的方法は、世界のありさまを単なる思弁ではなく数理的方法によって捉えて科学理論を構築することを目的としている。ここでは、科学的発見を自動化するため、まずそれに関わる要素と推論のプロセスについて整理する。

2.1. 科学的発見のサイクル

ある現象に対して科学的方法を適用すると、一般的に図1のように (1) 科学的領域知識, (2) 帰納的方法, (3) アブダクション, (4) 演繹的方法の4つの要素に関わるプロセスを通して科学的発見がなされる[Heartshorne 82]。以下に、これらの4つの要素について述べる。

(1) 科学的領域知識

現代科学では、現象を理論の集積として理解しようとする。発見あるいは構築された法則、仮説、理論、検証結果などは総体として科学的領域知識を構成する。

(2) 帰納的方法

帰納的方法とはある現象を計測することによって得たデータから法則を導き出す方法論のことであり、第一の科学「経験=実験」および第四の科学「データ集約」と関連する。結論が科学的真理にたどり着いていることを保証するものではないが、帰納的推論が形式的に成功すれば、得られた法則は計測データが得られたときと同様の状況において観測される事象に関して一定の予測能力を持つと想定できる。帰納的方法による発見の具体的な経路は、

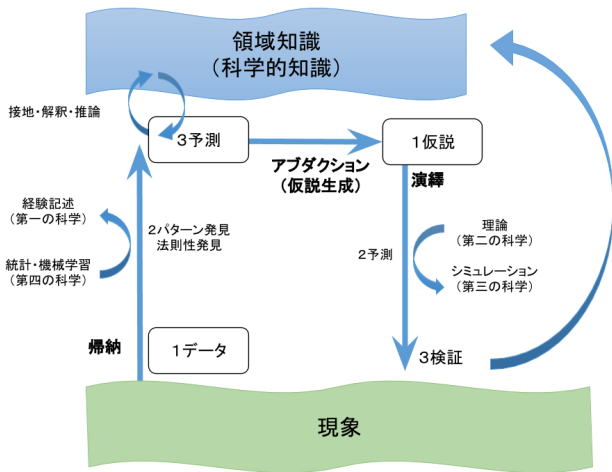


図1：科学的発見のサイクル。データからパターンや法則性を発見し、予測モデルを構築する（帰納）。予測モデルと現象との齟齬に注目し、科学的知識も利用しつつ、新たな仮説が生成される（アブダクション）。仮説による予測と現象とを照らし合わせることで、新たな知識が生まれる（演繹）。

現象→データ→パターン・法則発見→予測→知識

で表される。特定の自然現象を対象に計測を行い、得られたデータから解析してモデルを構築する。データは観測可能な物理量である。それらのデータに対して、統計解析や機械学習も援用しつつ発見した共通のパターンから法則を導き出す。得られたモデルは、現象を説明することのできる記述の候補の一つとして、科学的知識領域に共有される。帰納的方法の例として、ケプラーの法則と落下の法則が発見されるプロセスを図2に示した。

(3) アブダクション

科学的知識を利用して、仮説を与える際には一般にアブダクションと呼ばれる推論形式が用いられる。仮説生成の具体的な経路は、

知識→予測→仮説

で表される。法則、モデル、検証結果などの科学的知識を利用して、新たな仮説が生まれ出される。最後に、仮説を現象レベルで比較できるように理論化する。後述のように、仮説を与える方法には、数学的な枠組みに当てはめて構造化を図る方法と、観測不可能な対象を理論の中に登場させて説明を試みる方法がある。その検証は、理論から導き出された予測を実験や観察との比較でなされる(演繹的方法)。

(4) 演繹的方法

演繹的方法は仮説について検証する時に用いられ、第二の科学「理論」および第三の科学「シミュレーション」が関連する。また、帰納的方法によって得られた法則の再現性を検証する方法でもある。演繹的方法の具体的な経路は、

仮説→理論→予測→シミュレーション→検証→知識

で表される。特定の仮説から導き出される予想について実験や

観測による検証を行う。予想が、現象レベルでどのようにして観察されるべきなのかを計測のシミュレーションを通じて確かめる。計測から得られたデータとシミュレーションデータを比較して、それらの差異について統計的な解析を行い、最小化していく。統計的な有効性が十分な精度で確かめられたら確認、または反証の判断が下される。確認なら、新しい科学的知識として蓄積される。演繹的方法の例として、ニュートリノの実験的な検証のプロセスを図3に示した。

2.2. 仮説生成の方法

近代科学は経験主義哲学に源流を持ち、経験的事実に基づいて命題を検証する実証主義的、唯物論的態度を採る。これは経験に依らずに直観で新たな認識を生成しようとする直観主義や理性主義と対立する。しかしながら、新たな科学的知識の候補である仮説は経験から直接導きだされるものではなく、既存の領域知識や新たな命題を仮定した上での推論、また時には単なる論理的飛躍などによって生み出される。

仮説を与える方法には、「構成論」と「实在論」の2つのアプローチがある。構成論では、観測可能な対象のみを扱い、数学的な枠組みを仮説として導入する。それに対して、实在論では観測不可能な対象を仮説として理論の中に登場させる。以下に、それら2つの方法について述べる。

(1) 構成論

構成論とは、観測可能なレベルでわれわれの経験と矛盾しない理論を組み立てる、つまり、経験的に十全な理論を基本となるモデルをもとにして「構成」して科学理論を形式化する方法である。観測可能な要素によって観測可能な現象を記述するのであり、観測不可能な存在の導入は通常は行わない。実際に観測することのできる自然現象を説明するには、相互に関係性を持ついくつもの基本となるモデル/法則や理論を組み合わさなければならない。ここでは、仮説はそれら複数のモデルをつなぎ合わせるために数学的な枠組みとして導入される。つまり、構成論は、複数の理論を構成的に統合する大きな理論を作って自然現象を理解しようとするアプローチだと言える。

例として、ニュートンによる力学の形式化を考える。ニュートンは、微分積分学という数学的な枠組みを導入して、天上と地上の運動を記述する法則を統一させた力学理論を作り上げた。物体が落ちる(落下の法則)のと地球が太陽のまわりを周回する(ケプラーの法則)のが、同じ力の遠隔作用<万有引力>によることを示し、「自然哲学の数学的原理:プリンキピア」として体系化を行った。ニュートン力学の形式化の過程を図2に示した。

また、知能や生命システムなどのような複雑な機構を内包している系を理解しようとするときは、現実には起きている現象を再現する理論の構成だけでなく、システムの機能的側面を理解するためのアプローチとして利用されている。例えば、構成的生物学[金子 09]では、生命システム一般に当てはまる普遍的な性質を調べるために、生物が共有しているミニマルなシステムの構成を試行し、それらの性質が達成されたか否かを検証する。

構成論的手法は、科学哲学における「反实在論」や「構成的経験主義」などの考え方に類似している

(2) 实在論

仮説を与えるもう一つの方法として实在論的なアプローチがある。实在論とは、観測不可能な実体を理論の中に登場させて形式化を試みることである。力、場、原子、クオークなどの対象が、実際にそのような形で存在すると認める立場のことを「科学的实在論」という[戸田山 15, 戸田山 05]。エーテルや熱素など、科学理論が「ある」としていながら、最終的には存在しなかつ

たものがいくつもあるが、科学的实在論のアプローチが科学の歴史の中で有効性を示してきたことは否定出来ない。

例えば、ニュートリノは实在論的なアプローチによって存在が予想された。β崩壊におけるニュートリノの予想から実験的検証までのプロセスを図3に示した。不安定な原子核は安定な状態へと移るために、中性子が陽子に変化し、電子を放出するβ崩壊を起こす。この崩壊が、その見た目のおおりに、中性子から陽子と電子への二体崩壊を起こしていると考えていると、エネルギー・運動量保存則より、電子のエネルギーが決定する。ところが実際は、電子のエネルギー分布は広がりを持っていてエネルギーが保存しないとの実験結果が得られていた。1931年に、このアノマリーを説明するためにパウリは電磁相互作用をしない観測不可能な中性の素粒子を想定した。ニュートリノの存在はパウリの予想から20年後の1951年にライナスとコーエンの実験により確認された。

このような観測不可能な対象の存在を認める行為は、経験や知識、推論あるいは直感が関わる複合的な心的過程である。これは、不確定なものから形が作られ、ある対象へと確定していくプロセスだとも捉えられる。認知的に閉じた系では、感覚器官を通して得られた情報の集まりが、記号(シンボル)へと変換され、記号同士が凝集してネットワーク化することで意味が与えられる[三宅 15, 谷口 14, ユクスキュル 70]。観測不可能な対象の存在を認める過程は、記号創発問題や記号接地問題など記号のネットワークが形成されるプロセスと関連していると言える。自然科学においては、対象の实在性を認めるプロセス、または記号のネットワークが形成していくプロセスが、個々の科学的事例によって様々であるため、科学的实在論に基づいた形式化の統一的な枠組みを定義する事が課題である。

3. 自然科学への適用戦略

ここまで、科学的発見のフレームワークを一般化して議論した。本節では人工知能駆動型科学へ向けた展開に関して、(1)物理学を題材とした従来科学の再構成による体系化と、性能評価、(2)生物学を題材とした「飼いなされた複雑系」における新たな科学的法則の発見という2つの有望な領域を提案する。

3.1. 既存科学の再構成：物理学を題材として

数学, 物理学, 生命科学, 言語学, 社会学, 歴史学, 心理学

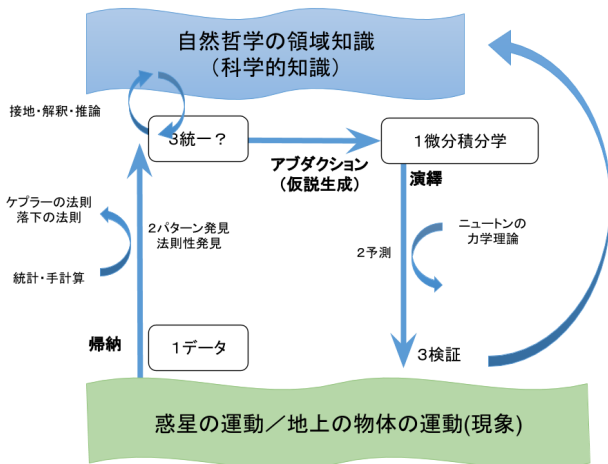


図2：ケプラーの法則と落下の法則の発見と力学の形式化までの経路（帰納的方法と理論の形式化）

などの幅広い学問分野にまたがって多くのデータが存在する。2章で議論したように、科学的方法論は分野によらず一般化して理解が可能である。従って、単一の人工知能システムによって分野に関わらない科学の自動化を目指せる可能性がある。

このような人工知能システムの開発に置ける課題は2点存在する。1点目は、構築したシステムの信頼性を確保するために、その性能を評価する方法を確立すること。2点目は、既に得られている法則を体系化し、より抽象性の高い法則性を導くための方法論を洗練させることである。そして、このような2つの要件を満足させるために、研究開発のモデルとなる適切な学問分野を選択し、多くの研究者がそれを対象に研究を行い、その知見を共有することは有意義である。

研究対象の候補の一つは物理学である。物理学における推論方式や発見の様式は歴史的によく議論され、洗練されている[Hartshorne 82]。物理学は数学を用いた整然とした形式的知識体系を保持している。構築したシステムの性能を適切に評価するために、システムに2体のニュートン力学やブラウン運動などの単純な物理法則から徐々に解析力学や多体問題などの物理学を再構築させ、その出力の妥当性を既存の物理学体系と比較検証することは良いベンチマークとなりうる。知識体系の形式性は实在論および構成論のどちらの発見形式の適用においても有利である。

人工知能技術を用いた物理学法則発見に関するこれまでの研究として、例えば、数値データの中から不変量を発見するプログラム「BACON」[Langley 81]がある。これは、ケプラーの法則、オームの法則などの物理学における基本法則を見つけ出した。近年では、力学的カオス系であり複雑な振る舞いをする二重振り子の軌跡をコンピュータにカメラで観測させ、その支配法則(不変量)を発見することに成功した[Schmidt 09]。ただし、これらの研究は与えられたデータを統計解析し法則性を抽出するデータ集約(第四の科学)の領域に属する試みである。今後は、実験系からのデータ収集と抽出した法則の形式化を自動化するだけでなく、さらに既存知識を用いた推論による仮説生成と、新たな仮説に基づいた実験計画、実験の実行まで範囲を拡張することで一連の研究プロセス全体の自動化を目指す必要がある。

3.2. 複雑系科学への適用：生命科学を題材として

人類の科学の目下の課題は、自然科学の対象を線形、小自

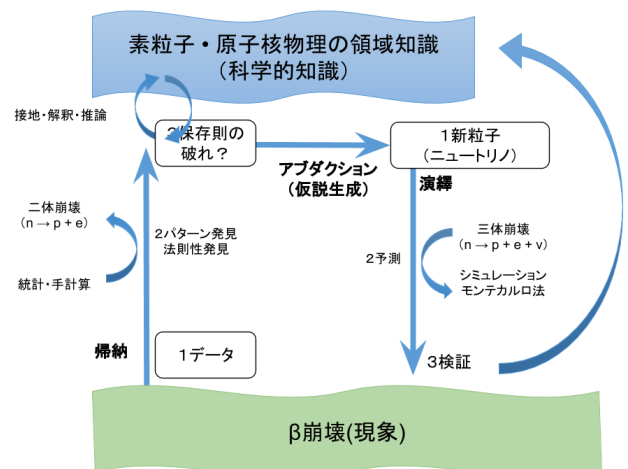


図3：β崩壊におけるニュートリノの予想と実験的検証（演繹的方法）

自由度, 平衡系の領域から非線形, 大自由度, 非平衡系の領域へと押し広げることである。生命現象や社会現象, といった超大自由度系(複雑系)の対象の挙動をいかに体系化, 理解するかの方策は, 20世紀の後半に盛んに模索されたが未だに根本的な糸口は見つかっていない。平衡系の熱力学においてはカルノーサイクルの発見が熱力学第二法則やエントロピーなどの重要な概念の定義に繋がったが, 非平衡系において一般性のある記述モデルは未だ提起されていない。このような系においては, 観察することで得られる情報と操作可能な変数の数は膨大である。人間の認知能力では脳の作業記憶の容量の限界により, いちどきにはたかだか数個の要素の関係を把握するので精一杯である。従って, これまでに多変数の非平衡系において重要な変数の依存関係や普遍的な構造がこれまで検討された範疇を大幅に超えた領域に存在する可能性は否定できない。機械知性によりデータからの法則性の発見とそこからの仮説生成の能力を補強すれば, 複雑系科学研究を飛躍的に加速させる可能性がある。

先述した科学的方法論のサイクルを実際に回すためには, そのための諸々の基盤技術が整備されている必要がある。研究対象自体を操作したり, 観測したりする実験基盤が存在すること(研究対象を「飼いならしている」こと), 対象に対してなんらかの仮説を与えたとき, それをもたらし帰結を予測できるような数値計算のための基盤が整っていることの2点を満足する研究対象の一つとして, 生命科学, 特に細胞生物学がある。この領域では, 酵母の遺伝学実験において分子生物学実験の自動化と仮説推論, 実験計画を自動化した”Robot Scientist”[King 09]などの先駆的な研究が存在する。細胞生物学では, 研究対象である細胞を研究室内に置いて同一環境で飼育, 操作するための洗練された実験技術基盤やそのロボット化技術が存在し, 良質なデータ取得のために必要な実験系をコントロールし, その精度を担保する技術が存在する。その上で, 次世代シーケンサーなどを用いたオミックスデータや蛍光顕微鏡によるライブイメージングなどでハイスループットに大量のデータを取得することが可能であるため, データ集約的, 帰納的アプローチによって対象の予測モデルの構築を実現する実験基盤が整いつつある。加えて, 遺伝子機能, タンパク分子機能, さらに細胞内反応経路などのデータベースや細胞全体をモデリングしその挙動をシミュレーションするための手立ても急速に整備されつつあるため[Karr 12, Tomita 01], 演繹的アプローチを通して提案仮説の反証/確証プロセスを回すことも可能となってきた。仮説生成を可能にするテクノロジーに関しても, 論理推論結果の確率論的選択により状態推定を試みる手法[井上 13, Synnaeve 13]などの開発が進んでおり, またより一般的には近年の汎用人工知能開発に向けた議論と関連して, 例えば海馬における異なる概念の間の等価性の発見のメカニズムなどを参考に研究が進展する可能性がある[Yamakawa 12]。これらの要素技術を一連のプロセスとして統合, 運用する方法論を開発することが今後の大きな課題といえる。

4. まとめ

「科学する人工知能」の開発は, 今後のグランドチャレンジの1つとなるであろう[北野 16]。本稿では, 人工知能の有望な応用分野の一つとして科学研究の自動化を位置づけ, 科学研究の一般的な枠組みの整理と現状確認から出発して議論した。データを出発点としてパターンや法則の発見と通して予測モデルを構築する帰納的プロセスが統計解析や機械学習を有力な手段とするデータ中心科学の焦点であり, また仮説を出発点として予測と検証を行う演繹的プロセスに関してはシミュレーション

科学が発展してきたことを述べた。それに対し, これらをつなぐ仮説生成のプロセスに関しては自動化の手段が未だ発展中であり, 相対的に遅れている。科学哲学的には仮説生成のプロセスは大きく分けて構成論的立場と存在論的立場があることを議論した。科学研究プロセスの自動化における今後の展開の足がかりとして有望な2つの分野として, 物理学の再構成と細胞生物学について述べた。

参考文献

- [村上 79] 村上陽一郎: 新しい科学論, 講談社, 1979.
- [中谷 64] 中谷宇吉郎: 科学の方法, 岩波新書, 1964.
- [ポアンカレ 53] J. H. ポアンカレ (吉田洋一訳): 改訳 科学と方法, 岩波文庫, 1953.
- [Hey 09] T. Hey, S. Tansley, and K. Tolle: The Fourth Paradigm: Data-intensive Scientific Discovery, Microsoft Corporation, 2009.
- [Kuhn 62] T. S. Kuhn: The Structure of Scientific Revolution, University of Chicago Press, 1962.
- [Hartshorne 82] C. Hartshorne, P. Weiss (Vols 1-6), and A.W. Burks (Vols 7-8), editors. Collected papers of Charles Sanders Peirce. Harvard University Press, 1931-1958.
- [井上 13] 井上克巳: 説明と予測: 科学的発見からレジリエンスへ, JSAI, 2013.
- [米盛 07] 米盛裕二: アブダクション, 勁草書房, 2007.
- [戸田山 15] 戸田山和久: 科学的実在論を擁護する, 名古屋大学出版会, 2015.
- [戸田山 05] 戸田山和久: 科学哲学の冒険, NHK 出版, 2005.
- [金子 09] 金子邦彦: 生命とは何か? 複雑系生命科学へ, 東京大学出版会, 2009.
- [三宅 15] 三宅陽一郎: ゲーム 人工知能 環世界, 現代思想 12月号, 青土社, 2015.
- [谷口 14] 谷口忠大: 記号創発ロボティクス, 講談社, 2014.
- [ユクスキュル 70] ユクスキュル, クリサート: 生物から見た世界, 岩波文庫, 1970.
- [Langley 81] P. Langley: Data-driven discovery of physical laws, Cognit. Sci., 1981.
- [Schmidt 09] M. Schmidt, and H. Lipson: Distilling free-form natural laws from experimental data, Science, 2009.
- [Karr 12] J. Karr, J. Sanghvi, et al. : A whole-cell computational model predicts phenotype from genotype. Cell, 2012.
- [Tomita 01] M. Tomita: Whole-cell simulation: a grand challenge of the 21st century, Trends in biotechnology, 2001.
- [King 09] R. King et al. : The automation of science, Science, 2009.
- [Synnaeve 13] G.Synnaeve, K.Inoue, A.Doncescu, H.Nabeshima, Y.Kameya, M.Ishihata, and T.Sato : Discretized kinetic models for abductive reasoning in systems biology, Revised Selected Papers from BIOSTEC 2011, CCIS, Vol.273, pp.141-154, Springer, 2013.
- [Yamakawa 12] H.Yamakawa : Hippocampal formation mechanism will inspire frame generation for building an artificial general intelligence, Proc. The Fifth Conference on Artificial General Intelligence, 2012.
- [北野 16] 北野宏明: 人工知能がノーベル賞を獲る日, そして人類の未来, JSAI, 2016.