

特集「研究会紹介」

人工知能基本問題研究会 (FPAI)

Special Interest Group on Fundamental Problems in Artificial Intelligence

瀧川 一学 理化学研究所革新知能統合研究センター
 Ichigaku Takigawa RIKEN Center for Advanced Intelligence Project.
 ichigaku.takigawa@riken.jp, <https://itakigawa.github.io/>

Keywords: inference and reasoning, machine learning, knowledge representation and acquisition, intelligent programming.

1. はじめに

人工知能基本問題研究会 (略称:SIG-FPAI) (<https://sig-fpai.org>, 主査:瀧川一学, 主幹事:大久保好章)は、人工知能学会と同時に設立された人工知能基礎論研究会 (SIG-FAI) が 2004 年に改称した最も歴史の長い研究会の一つである。SIG-FAI の研究内容「論理, 学習, 知識の表現と獲得, 並列計算モデル, 知的プログラミング, 自然言語理解, パターン理解などに関する人工知能としての基礎的研究」[有川 90] を引き継ぎ, 知能性を計算機上に実現するために必要な基本的仕組みを主な関心としている点は今も変わらない。SIG-FAI が立ち上げた国際会議 ALT (International Conference on Algorithmic Learning Theory) は 2019 年で 30 回を迎え, 学習理論に関する主要国際会議の一つとして Google やヘッジファンド Two Sigma がスポンサーにつくまでに定着している*1。人工知能技術がさまざまな出口研究で広く使われれば使われるほど, その仕組みの深い理解への関心は高くなり, 拠り所としての「基本問題」に立ち戻ってくるように思う。結局のところ, 私達が「人工知能」という曖昧で多義的な概念に抱く根本的な不安や懐疑は, ジンクピリチオン効果にあふれた喧伝や, 場当たりの対処の繰返しでは, ほんの一つも減ってはいかないのである。

2. その上に物の建たないものは基礎とはいわない

「基本」とは物事の拠り所となるおおもとである。私達の科学には再現性が必要であり, 真に一回性の現象は扱うことができない。「科学というものには, 本来限界があって, 広い意味での再現可能な現象を, 自然界から

抜き出して, それを統計的に究明していく, そういう性質の学問なのである」[中谷 58]。翻って, 「人工知能」について再現性をもつ現象とは果たして何であろうか。再現性のある現象に対する事実は「幾度も役立つ事実, すなわち繰り返して起こる機会のある事実」[Poincaré 53] である。こうして, 複数の個別的事象に通底する一般化と形式化による拠り所としての基礎研究がある。論理, 学習, 知識の表現と獲得, 言語, パターン理解などは「知能性の実現」のための基本問題である。

一方で, 「どんな事実でも, これを一般化するやり方は無限にあることは明らかであって, ここに選択が問題になる」[Poincaré 59]。Chomsky の言う「プラトンの問題」も, 人間は経験できることが非常に限られているのに, なぜ経験したこと以上のことを知ることができるのだろうか, という素朴な疑問であった。帰納推論においては, 与えられたデータの集合を汎化することが基本であるが, 過剰な汎化は避けなければならない。例えば, オッカムの剃刀を信ずるなら, その指針は, Plotkin の最小汎化 (LGG) や Rissanen の最小記述長原理 (MDL) であったかもしれない。何にせよ, 「ごくわずかな経験 (データ) からの一般化」のためには, 何らかの事前バイアスつまり, 何らかの先験的な機構が必要になる。

しかし, このことは, 扱いやすいところだけ取り出した無数のオレオレ理論が生まれる予兆でもあったかもしれない。「古き良き人工知能 (GOFAI)」では, 知識表現上で推論や学習が探求された。そこで生まれた, 探索, 制約充足, 最適化などの技術は今ももう「人工知能」と切り離され, 情報科学の中に確立している [新田 19]。しかし, 基礎論と言うと, 役に立たない理論研究と受け止められる雰囲気は SIG-FAI 当初にもすでに見られたようである [石田 96]。有川節夫先生は SIG-FAI の設立趣旨に「その上に物の建たないものは基礎とはいわない」という思いを込められたそうである。とは言え, 推論や学習の前提は記号的世界 [横井 89] であり, Newell と Simon の PSSH であり, 知識ベースの完全性を前提とした閉世界仮説であり, サーカムスクリプション [中川 87]

*1 北海道大学の Thomas Zeugmann 先生の Web サイト (<https://www-alg.ist.hokudai.ac.jp/~thomas/ALTARCH/altarch.jsp>) にアーカイブされている。

であり、厳密な論理を展開するための閉じた系であった。

現実には「系は開いている」ことが根本的な難しさの原因であり、GOFAIの閉塞感の源であったかもしれない。いわゆる「知識獲得のボトルネック」は、機械学習やデータマイニングの技術を生んだものの、本質的には解決されなかった。

けれども、記号や論理への単純な懐疑主義は皮相的である。いわゆる論理的思考とは、言語による表象の操作であり、「人工知能」を考える際、けっして無視できない側面である。本を読んだり、数学をしたり、旅行の計画を立てたり、蓄積・記録された事実やすでに明示的にもっている知識に基づく意識的な認知行動は日常的にある。定食屋の定休日を経験から推定しているわけではないのである。記号主義研究者を一概に悩ませた非言語的で直感的なパターン認識が実用的なレベルで解けるようになってきた現在、論理性や記号による表象の問題は私達の前に再び姿を現している。そして、地道な基礎研究は今も脈々と続いているのである。

2004年、SIG-FAIは現在のSIG-FPAIに改称した。1990年代後半は、新世代コンピュータ技術開発機構(ICOT)が終了し、エキスパートシステムの開発に湧いた企業のシステム開発も停止し、過度な期待が急激に冷めていった厳しい時代であった。応用を失った基礎研究は、すでに定式化された理論を対象とするタコソボ化した枝葉末節に向かっていったようで「基礎論研究会では内容が理論的になればなるほど議論が噛み合わないというジレンマが生じた」[石田 96] そうである。統計学や統計的学習の分野でも、意味のない数学の濫用が非常に問題視された時期でもある[Breiman 95, Hand 98]。

人工知能研究の低迷とは裏腹に、ICT基盤の急激な発展やインターネットの日常生活への浸透*2に伴い、情報科学の応用分野はますます多方面へ拡大した。改称の趣旨には、新たな応用分野で生じる問題が、やはり人工知能で根幹となるメカニズムに関わるであろうこと、そしてそれを一般的に解く主要な方法の一つは理論的アプローチであることを宣言したうえで、「しかし、より深い解決のためには、すでに定式化された理論に関する研究だけでなく、その定式化に至る知的処理に関する深い洞察も重要」という説明が書かれている[山本 10]。さまざまな応用分野の実問題を見て、理論的に議論可能な「問題」として切り取る定式化の段階から熟考しなければならない。こうして、基礎論研究会を基礎問題研究会とする案がまとまり、日本語の語感を考え、現在の「基本問題」研究会として改称され、今に至る。単に基礎研究=理論研究と捉えず、「そもそも論」を思い出せ、という意味が「基本問題」という語に込められているよう

にも思う。

3. 変わるもの、変わらないもの

2019年2月15日、北海道大学大学院の情報科学研究科の教室には、原口誠先生の最終講義を聴きに多くの人が集まっていた。講義は「変わるもの、変らないもの」と題されていた。聴講者には講義スライドのハンドアウト

表1 人工知能基本問題研究会 歴代幹事

年度	主査	主幹事	幹事
※人工知能基礎論研究会 (SIG-FAI) として発足			
1987-1989	有川節夫	後藤滋樹	佐藤泰介, 原口誠
1990-1991	佐藤泰介	元田浩	久野巧, 横森貴
1992-1993	西田豊明	櫻井彰人	西野哲朗, 三浦欽也
1994-1995	石田亨	大沢英一	赤埴淳一, 麻生英樹
1996-1997	國藤進	西野哲朗	山田誠二, 鷺尾隆
1998-1999	元田浩	榊原康文	櫻井彰人, 鷺尾隆
2000-2001	櫻井彰人	松原仁	大澤幸生, 榊原康文, 月本洋
2002-2003	松原仁	大澤幸生	有村博紀, 小野哲雄
※人工知能基本問題研究会 (SIG-FPAI) に名称変更			
2004	佐藤健	鈴木譲	市瀬龍太郎, 庄司裕子, 平田耕一, 吉岡真治
2005	佐藤健	鈴木譲	赤石美奈, 市瀬龍太郎, 平田耕一, 吉岡真治
2006	有村博紀	佐藤健	赤石美奈, 喜田拓也, 坂本比呂志, 村上知子, 山本章博
2007	有村博紀	山本章博	相原健郎, 伊藤公人, 喜田拓也, 坂本比呂志, 村上知子
2008	山本章博	平田耕一	相原健郎, 伊藤公人, 植野真臣, 久保山哲二
2009	山本章博	平田耕一	伊藤公人, 植野真臣, 久保山哲二
2010	平田耕一	久保山哲二	赤石美奈, 磯崎隆司, 伊藤公人, 鍋島英知
2011	平田耕一	久保山哲二	赤石美奈, 磯崎隆司, 中村篤祥, 鍋島英知
2012	久保山哲二	坂本比呂志	河原吉伸, 川前憲章, B. Chakraborty, 中村篤祥
2013	久保山哲二	坂本比呂志	大久保好章, 鍛冶伸裕, 河原吉伸, 川前憲章, B. Chakraborty
2014	坂本比呂志	河原吉伸	大久保好章, 鍛冶伸裕, 越村三幸, 田部井靖生
2015	坂本比呂志	河原吉伸	越村三幸, 瀧川一学, 田部井靖生
2016	河原吉伸	瀧川一学	石島正和, 西郷浩人, 宋剛秀, 田部井靖生
2017	河原吉伸	瀧川一学	石島正和, 西郷浩人, 宋剛秀, 戸田貴久
2018-2019	瀧川一学	大久保好章	井智弘, 杉山磨人, 戸田貴久, 西野正彬

*2 2007年に発売されるiPhone前夜であり、スマートデバイスにより、さらに日常生活が注意散漫になっていく以前であった。

トとともに、人工知能学会第1回論文賞受賞論文[原口86]も配布された。SIG-FAIの初代主査の有川節夫先生、SIG-FPAIの初代主査の佐藤健先生をはじめ、原口先生、有村博紀先生、小野哲雄先生、吉岡真治先生、大久保好章先生、喜田拓也先生、中村篤祥先生、と北海道大学の歴代幹事も一堂に会し、他には宮野悟先生をはじめ、関係の先生方も多く見えた。北大関係者には古くからなじみの小さな居酒屋で夜に開かれた懇親会は熱気一杯であった。

講演で語られたように、大規模データを想定した今日的な学習に対して、言語や記号の役割とは、必ずしも大規模とはいえない事例から作業仮説をつくり、推論や計画立案を行うことにある。「論理学が昔に戻る……？」と付記されたとおり、データと一体化した記号とその操作系、記号の解釈とデータの理解、という根本問題は、現在の深層学習ブームの先に形を少し変えて、再び立ち上がるように思う。その意味では「基本問題」はそう変わらないものかもしれない。棚上げされているだけで、解決しておらず、この解けない問いをまだ生きなければならぬ。

SIG-FAI時代(1987～2003)は、次は第四世代かというときにその一歩先の「第五世代コンピュータ」を掲げ、11年500億円を費やしたICOTの国家プロジェクト(1982～92)[松尾14]の熱狂や終焉、そして、日本全体に高揚感があふれたバブル時代とその崩壊に重なる。また、有川先生の科研費特定領域「巨大学術社会情報からの知識発見に関する基礎研究(略称:発見科学)」(1998～2001)は日本のデータマイニング分野の研究者に多大な影響を与えた[有川00, 森下01, 元田00]。米NSFは2012年になりDiscovery Informaticsと題したWorkshop[Gil12]を開催したが、領域が1998年に立ち上げた国際会議International Conference on Discovery Science(DS)は今も続いている。

坂田美子は「変わりゆくもの変わらないもの」と、平井堅は「変わりゆく変わらないもの」と歌う。原口先生はどっちが良かったかなあ、と問うた。SIG-FAI/SIG-FPAIの話題は人工知能分野の変容とともにあるが「基礎」の探求という芯は変わらない。学会誌では度々特集が組まれたが、例えば、機械学習[山田94, 今井03]、科学応用[山本09]、計算論的学習[安倍99]、発見科学[元田00]、離散構造処理系[鷺尾12]、SAT[井上10]、制約充足[山田97]、論理推論[坂間10]、定理証明[岩沼01]、知識獲得[沼尾97]、ベイジアンネットワーク[佐藤02]などが関心である。学会誌は「AI書庫」*3にて、なんと創刊号から電子的に無料で読めるので、当時の雰囲気とともに楽しんでいただきたい*4。また、研究会で発表された論

文も1年後にはオープンアクセスとなり誰でも読むことができる。研究会登録会員は、最新の研究論文も読むことができるので、関心がある方はご支援いただければ幸いです。

4. The Hard Thing about Hard Things

「基礎」をつなぎりとした集まりというのは難しい。そのうえ、何の基礎かといえば、「人工知能」などという、いまだ想像上の産物のままで、実現の手掛かりもそこはかとなく覚束ない対象である。難しい基本問題はたくさんある。人工知能分野は多角化した総合科学であり、学際領域であり、無数の細分化したテーマも出口研究もある。出版される論文の数は年々増加し、専門分野の論文を全部読んでいる専門家はもはや存在し得ない。トップカンファレンスだけに限っても数千もの論文が出て、題目を追うだけで目が回る。そこに皆で共有できる「基本問題」などあり得るのだろうか、と思うかもしれない。

これは逆説的であるが、さまざまな手法や難しい実問題を発見すればするほど、私達は根源的に「基本問題」を探してしまうように思う。そして「その上に物が建つ基礎」をつくるには、多様さと多角的な視野が、つまり、できるだけさまざまな専門の方々に参加いただくことが必要かと思う。実際に、SIG-FPAIでは実問題や境界分野にも積極的に関心を持ち、さまざまな招待講演を企画している。

対象が問題にせよ、手法やアルゴリズムにせよ、理論的アプローチは依然として一つの基軸である。しかし、GOFAIや計算論的学習理論の多数の忘れ去られた定理を眺めていると、あれは一体何だったのかと問わずにはいられない。その反省のうえで、また「基礎」を考える。何にせよ、私達の精神は複雑な世界を複雑なまま生きることはできないのである。

「もし数学が演繹的なのはただ見掛けに過ぎないならば、誰も夢にも疑おうとしないこの完全な厳密性はどこから来るのか。もし反対に数学で述べられている命題全部が形式論理学の規則によって次から次へ引き出すことができるならば、どうして数学は大規模な同語反復に帰しないのであろうか。三段論法は我々に何も本質的に新しいことを教えることはできないし、もしすべてが同一律から出てくるべきものだとすれば、すべてはまたそこに帰着するはずである。それではこんなに多くの書物を満たしている全部の叙述は「AはAである」というのを、まわりくどい方法でいったものに過ぎないということを承認するものがあるだろうか」[Poincaré 59]。

5. 機械学習と自動プログラミング: 選択と学習の間

人工知能における基本問題の多くが部分性から生ずる[橋田95, 松原89]。時間は絶え間なく流れ続けるため、

*3 <https://jsai.ixsq.nii.ac.jp/>

*4 出版後2年までは人工知能学会員のみアクセスとなる。

行為や思考に現状の全詳細を反映することは不可能であり、「経験則」や「惰性」による擬似解決の中を生かされている。経験から「学習」することは知能性の一つの要件である。

学習する機械というのは Turing をはじめ多くの人を魅了してきた永遠のテーマである。しかし、これは今日的な「機械学習」だけを意味しない [沼尾 92, 沼尾 14, 山田 94]。人工知能分野においては、まず帰納推論や文法推論 (言語の帰納学習) の問題があり、機械学習とは、Gold の極限同定 [Gold 67] であり、Angluin の帰納推論 [Angluin 83] や質問学習 [Angluin 88] であり、Shapiro のモデル推論 [Shapiro 81] であり、Valiant の PAC 学習 [Valiant 84] であり、論理プログラミングや制約プログラミングであった。現在も国際会議が続いている帰納論理プログラミング (ILP) は 1 分野を形成し、Prolog などホーン節によるプログラミング言語は一世を風靡した。また、機械学習に関する理論的研究では計算量の考慮が必須であった。無限の計算時間や計算コストが許されるならば「学習」は発生しない。ALT やその先輩格の COLT などの場を軸に「計算論的学習」も 1 分野を形成している。

XGBoost や LightGBM などの決定木アンサンブル学習が Kaggle などを契機にデータサイエンティストの道具箱に定着して久しい [Ulyanov 17] が、その始祖の一つ Quinlan の ID3 は命題論理の学習機構であり、C4.5 はプロダクションルール (If-Then 型ルール) の学習機構であった。同じ決定木でも Breiman や Friedman ら統計学者の CART, Random Forest, Gradient Boosted Trees などとは元々は視点がかなり違う。一方、その統計学でも、その有用性とは裏腹に決定木はさまざまな角度から批判を浴びた。曰く、それはアルゴリズムに過ぎず伝統的な意味では統計的推定ではない。Breiman はこれら異なる二つのスタイル (データモデリング型とアルゴリズム型) の分断を C. P. Snow の「Two Cultures」になぞらえた [Breiman 01]。また、ニューラルネットワーク (コネクショニズム) も当時の伝統的な機械学習の文脈では低評価であったようである。

こうした議論は今もある。言語の機械学習に関する The Norvig-Chomsky debate [Katz 12, Norvig 12] はあまりに有名であるし、NIPS 2017 の Test-of-Time Award 講演で、Ali Rahimi [Rahimi 17] が理論的厳密さを失った機械学習を Alchemy と呼び、「Let's take machine learning from alchemy to electricity」と結び拍手を呼んだが、この主張に対する Yann LeCun の反論はインターネット上でも随分と論争になった*5。Rahimi が懐かしんだように、あの頃の NIPS (NeurIPS) にはポスター

発表を巡回する「Rigor Police」がいたのだ。

一方で、さまざまな帰納学習戦略は「プログラム合成 (program synthesis)」を提供する自動プログラミングの実践的手段でもあった*6。現在の深層学習も、入出力関数を「コントローラブルな部品」でプログラムする。計算グラフの形で関数の in-out をデザインすれば、自動微分アルゴリズムでパラメータはデータに合うよう調整される。計算グラフの配線芸と入出力見本例を与えることで行う、柔軟で汎用性のある新しいプログラミングスタイルである [Howard 14, Karpathy 17]。あるいは、統計モデリングで用いられる確率的プログラミング (PP) も、想定する潜在構造を含めてデータの生成過程をユーザがデザインし、確率分布の計算は加速化 MCMC や自動 VI がやってくれる [Hardesty 15]。マニュアルで行うプログラミングには見落としが付きものであり、複雑なプロセスを隅から隅まで完全に一つのミスもなくプログラムするのは大変骨が折れる。機械学習はこうした自動化テクノロジーの源泉としても長らく機能してきた。最近でも「Program Induction」については、Science 誌に掲載された Bayesian Program Learning (BPL) [Lake 15] が話題を呼んだり、Neural program induction の Workshop*7 が ICML や IJCAI で開催されている。

環境相互作用 [國吉 95] も歴史の長い基本問題である。環境は学習者にとってオラクルであり情報源であるが、同時に制約でもある。ごく最近になって物理的世界における機械学習の成功例を契機に、こうした基本問題もまた新しい様相を見せている。ラジコンヘリコプタの曲芸飛行を機械学習で教える Abbeel と Ng のデモは衝撃的であった [Abbeel 10]。通常機械学習には負例も必要であるが、高価なラジコンヘリが壊れては大変困る。飛行を機械学習するというのは高いハードルである。彼らの方法は、逆強化学習に基づく徒弟学習 (Apprenticeship Learning) [Abbeel 04] と名付けられたものであったが、こうした教示による学習や模倣学習 (Imitation Learning) も機械学習に新しい側面を加えている。最近も、ロボットの学習のため、事前にシミュレータで学習させた結果をメタ学習 [Finn 17] を用いて実機へ適応させる Sim2Real [Christiano 16, Tobin 17] や、Open AI による GraspGAN [Bousmalis 18]、複数ロボット間でのハードウェア制約を考慮した転移学習 [Chen 18] など、楽しい結果が報告されている。

蛇足であるが、著者自身の出自も機械学習といえるが、SIG-FAI/FPAI の機械学習とは直交していたように思う。本稿はあくまでアウトサイダーの視点である。

*5 NeurIPS 2018 では議論・批評の Workshop も開かれた。
<https://ml-critique-correct.github.io>

*6 関係は不明だが、Plotkin も Shapiro も帰納推論に関する美しい理論的結果をつくり上げた後、並行プログラミングの分野へ転向した (Shapiro はご存じのどおり大金持ちになった)。

*7 Neural Abstract Machines & Program Induction, <https://uclmr.github.io/nampi/>

長岡浩司先生は北海道大学を去った後であったが情報幾何の勉強会があり、当時出版された甘利・長岡 [甘利 98], Devroye [Devroye 96], Vapnik [Vapnik 98], 韓 [韓 98] などの本で勉強した。合宿形式で開かれていた第3回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS 2000) や、甘利俊一先生が開催したワークショップ Bernoulli-RIKEN BSI 2000 Symposium on Neural Networks and Learning も札幌から自費で聴きに行った*8。甘利先生や江口真透先生をはじめ、Vladimir Vapnik, Leo Breiman, Jerome Friedman, Yoram Singer, Michael Kearns, Bernhard Schölkopf, Steffen Lauritzen など錚々たる顔ぶれで、世紀末から2000年に突入し、ニューラルネットワークが彼らの手法 (SVM などのカーネル法, Random Forest や Boosting などのアンサンブル法, 階層的なベイジモデルなど) に移っていくタイミングであった。その後、アルバイトで貯めた自費で参加した MLSS (Machine Learning Summer School) Canberra 2003*9 とともに著者の基礎形成に多大な影響を与えた。

6. 組合せの汎化：離散と連続の間

私達の世界は観測される範囲では有限離散的であり、思考に用いる言語や表現も有限離散的である。表象のための「記号」は単独で使われることは少なく組合せ構造をとる。NP-Hard 問題が計算機科学的意味で難しいのも組合せの爆発に起因する。その意味で基礎論における多くの問題が、組合せ的に巨大な可能性の中からの選択に関係する。組合せの部分的観測からの一般化は可能性も含めて非自明である。

DeepMind が発表した論文 [Battaglia 18] は「グラフ構造」を入力にとる深層学習モデルが、この「組合せの汎化 (combinatorial generalization)」を解くための有効な枠組みになると主張し、既存のさまざまな手法を Graph Networks という汎用ユニットとして捉え直した。こうしたグラフの深層学習は近年のホットトピックの一つである [Bronstein 17, Wu 19, Zhang 18, Zhou 19]。ここで言う「グラフ構造」は、頂点と辺からなるトポロジーに加え、各頂点、各辺、そしてグラフそのものに多次元の潜在変数が付与されたものである。1組の多次元ベクトルの間に「グラフ構造」で表された関係による帰納バイアスを導入する意味をもつ。この論文の著者で、この分野のスター研究者の一人でもある Oriol Vinyals は NIPS 2017 のチュートリアル [de Freitas 17]

で、この「帰納バイアス」という観点でさまざまな深層学習モデルを整理しており、それが論文タイトルにも込められている。

ここ数年、こうした深層学習を用いて NP-Hard 問題を解くヒューリスティクスを例から学習する研究が国際会議を賑わせている。SAT [Selsam 19], TSP [Prates 19], モデル検査 [Si 18], グラフの組合せ問題 [Dai 17, Johnson17] などが続々と報告され、物理エンジンの代理モデル [Sanchez-Gonzalez 18] などへも応用されている。深層学習の入門チュートリアルにしれっと出てくる「足し算の学習」*10 の例も組合せ汎化に関係する。1層の LSTM でも 99% 正答できるが、「足し算の概念」の学習ではない (1% は間違う) 点は興味深い。ほかにも、分子構造からの機能予測において、訓練データとして低分子だけ学習して訓練データにないサイズの分子に適用可能なのは、組合せ汎化の問題であり、まだまだ怪しさ満点のこうしたアプローチの今後の議論や発展は楽しみである。確かに私達は日常行動では組合せ爆発に悩まない。そこそこ有効な経験則は獲得できるのかもしれない。

なお、著者が離散構造や組合せに関心があるのは、一つには生命科学で現れるデータがかなりの程度こうした構造で与えられるからであるが、もう一つには SIG-FPAI とも関係の深い湊 真一先生の「離散構造処理系プロジェクト」との関わりからである*11。湊先生の研究対象である BDD (二分決定グラフ) や ZDD などの派生系 xDD は、論理関数や組合せ集合をコンパクトに保持するデータ構造であり、同時に演算を備えた代数系にもなっている。論理関数 (ブール関数) は入出力ともに多次元の 0/1 を取る回路設計に由来しているが、指示変数や one-hot encoding や二値化モデルを介して機械学習や言語処理にも現れる (例えば [Anthony 87])。また、xDD は複雑な制約を満たす対象の列挙にも広く活用できることから、列挙アルゴリズムや機械学習・データマイニングを巻き込んだ楽しいコミュニティとなっている。湊先生の研究歴のお話 [湊 16] も大変面白いのでご一読いただきたい。湊研究室ではプロジェクトの発端ともなった Knuth の TAOCP [Knuth 68] を輪読していたが、Newell と Simon がチューリング賞受賞講演 [Newell 76] で記号と探索について高らかに語ったその前年、Knuth はチューリング賞受賞講演 [Knuth 74] でプログラミングは「Art」であると言っていた。そしてこれは技法やテクノロジーを意味すると同時に、審美的な意味での「アート」のニュアンスも含むのである。

*8 シンポジウムの前日に池袋で開かれた Vapnik を囲む小さな懇親会にも偶然参加でき、甘利先生にご馳走していただいた。

*9 メインの長編講義は Information Geometry (Shun-ichi Amari), Concentration Inequalities (Gábor Lugosi), Unsupervised Learning (Zoubin Ghahramani) であり、輪読していた本 [Devroye 96] の著者 Lugosi 先生の話聴きに行くのが最初の目的だった。

*10 例えば、https://keras.io/examples/addition_rnn/

*11 2015年4月～2019年3月まで北海道大学で研究室 (大規模知識処理研究室) を共にし、研究・教育を大変勉強させていただいた。

7. 機械発見と自動化の夢：学習と発見の間

3歳の娘を観察していると日々発見がある。知らない間に言葉を巧みに使うことも驚きだが、意識的な認知行動を上手に使うことで環境から情報を集め、「新しいこと」をすばやく発見・学習しているようにも思える。「発見」は「学習」の発展的な形としても研究されてきた。

Feigenbaumが知識工学を標榜し、数多くのエキスパートシステムが構築された際、最大のボトルネックとなったのは「知識獲得」であった。有川先生の「発見科学」[有川 96, 有川 00, 丸岡 96, 森下 01, 元田 00]や、そこで研究されたデータマイニング技術もこの問題に端を発しており、いわゆる「データベースからの知識発見 (KDD)」は国際会議の名前としても今も残る [Fayyad 96, Piatetsky-Shapiro 94]。機械学習においては、Pat Langleyの経験的発見の研究 [Langley 86, Langley 89]も「発見科学」の形成に影響を与えた。また、帰納論理プログラミングでも「述語発見の問題」がボトルネックとなった。もし与えられた背景知識が不十分であるとき、学習システムが例から自分で必要とする述語とその定義を（新たな学習問題を解くことによって）つくり出すことができれば、飛躍的に実用的な技術になる。

近年、創薬や新材料・新物質の探索において「発見」を自動化しようとする試みが始まっている。10年ほど前からロボット合成とデータマイニングを組み合わせて探索を自動化する試みはあった [King 09]。近年は、例えば、ベイズ最適化、逐次実験計画、進化計算など「知識の利用と探索のトレードオフ」を考慮するメカニズムを備えた最適化と機械学習を組み合わせ、より現代的な探索が試みられている [Butler 18, Gromski 19, Maryasin 18, Saikin 19, Sanchez-Lengeling 18, Schneider 18, Szymkuć 16]。

8. 表現と介入：経験論と合理論の間

ビッグデータという少々脱力的なキーワードが蔓延した頃、観察データ至上主義のような雰囲気を感じるころがあった。曰く、「人間が恣意的に考えるよりも、データ自身に語らせろ」と [Anderson 08]。確かに、意識的にせよ、無意識的にせよ、私達一人一人は自分のうちに世界観を蔵していて、容易にこれを捨てることはできない。また、私達の思考に必要な「言葉」は、ほかならぬ先入見からこね上げたものに過ぎない。できるだけ客観的に、観察したままデータに語らせるほうがよほど安全で魅力的に聞こえる。

しかし、Poincaréも警告したように、これは実際には可能ではない。「人が事実を用いて科学をつくるのは、石を用いて家を造るようなものである。事実の集積が科学でないことは、石の集積が家でないのと同じこと

である。」 [Poincaré 59]。KDD'18の基調講演で David Handは伝統的な科学の Theory-driven なアプローチと異なり、Data-driven なアプローチはデータの背後の真のメカニズムを反映しようとするものではないと述べた [Hand 18]。Handは繰り返しこうした誤用・濫用を警告している [Hand 98, Hand 09, Hand 11]。

コンピュータが初めて卓近な存在になり、そこへさまざまなデータが蓄積されるようになった1960年代、人々は回帰分析を何にでも適用し始めた。大統計学者 George Boxは短い論文 [Box 66] で回帰分析の適用範囲についてやんわりと釘を刺し、有名な一文「To find out what happens to a system when you interfere with it you have to interfere with it (not just passively observe it)」で論文を締めくくった。IBM Watson Healthがユーザを落胆させた [Strickland 19] のも一つには観察研究の本質的な限界であり、「発見」に至るためには、問題を適切に「表現」する作業仮説と言語、そして、対象へ「介入」して結果を観察する実験研究が必要である [Hacking 15]。

近代科学の方法は「仮説演繹法」であり、検証すべき作業仮説や理論モデルそのものは経験や直観からつくり、それが演繹的に検証される [野家 15]。観察や帰納に根ざす「経験論 (empiricism)」と、論理と演繹に根ざす「合理論 (rationalism)」を組み合わせたものである。辻井潤一先生は非常に示唆に富む論考 [辻井 12] で、これからの課題を経験主義と合理主義の狭間に位置付けされた。経験論と合理論の対立は紀元前にさかのぼれるほど根が深く、ChomskyとNorvigの論争も基本的にはこの二律背反によるものである。

最近では、両者をうまくつなげる新しい方法論が研究され始めている。一つには、気象現象など複雑な現象の予測において、シミュレーションモデルに存在する不確かなパラメータを機械学習でデータに合うよう調整するデータ同化的な方法である。第一原理において残されている恣意的な要素を機械学習でモデル化する方法も同じ方向性である。例えば、電子状態計算における密度汎関数法 (Kohn-Sham 方程式) の交換相関項あるいは汎関数を機械学習で近似する研究は近年盛んに行われている。ただし、シミュレーションのパラメータをデータに合うよういじり始めたら、もはや理論や仮説の正しさの検証には使えない。もう一つの方法として、シミュレーションを外部オラクルとして使い (シミュレーションモデルをある種の帰納バイアスとして使い)、不確かさをモデルベース最適化や強化学習で補う方法も盛んに研究されている。いずれにせよ、有限の事例から一般則を得るには、作業仮説や理論として何らかの事前バイアスは必要である。

「少しでも反省したものは、仮説の占める領分が、どんなに広いかということに気がついた。数学者は仮説なしではすまされず、実験科学者はなおさらだという

ことがわかった。そこで、果たしてこれらのすべての構築が極めて堅固なものであるかどうか疑われ、わずかの微風にあっても打ち倒されてしまうと信ずるようになった。こういうふうに懐疑的になるのは、これもまた表面的な考えである。すべてを疑うか、すべてを信ずるかは、二つとも都合の良い解決方法である、どちらでも我々は反省しないですむからである。」 [Poincaré 59]

9. 過程と実在：有限と無限の間

これを書いている前の週、著者は隠岐の島にある島根大学隠岐臨海実験所にいた。船に乗って海へ出てプランクトンネットを投げ海水を集める。実験所に戻って、それを顕微鏡でのぞいて観察してみると、きらびやかで多種多様な無数の浮遊生物が見えた。無数の新種もまだまだいるであろう、とのことであった。その体験は、無限の宇宙を有限な言語的表現で把握しようとした Whitehead が言う「点-閃光 (point-flash)」のようであった。

多すぎる可能性を前にすると、私達はそこに何か共通点を探さずにはいられない。それは複雑な世界をうまく生きるのに必要な根源的な欲求とも思われる。Poincaré は、もし元素が 600 億種類あり一様な量で存在したとしたら、拾う石ごとに未知元素が含まれ共通点が見いだせず、科学は成り立たないと言い、私達の精神と世界から生じる「選択の問題」について語った [Poincaré 53]。

基礎論や基本問題とは、著者にとって「捨象」であり「選択」の問題である。奥田民生先生も「手を抜け、気を抜くな」と言っている。機械学習は「上手にサボる」ための、一つのやり方に過ぎない。パターン認識も記号着地も詳細情報を捨て「パターン」や「記号」という名の同値類にしてしまうことである [渡辺 78]。世界のすべてを、モデル化することは、その定義からして不可能なのである。

理論計算機科学者 Papadimitriou^{*12} が描くということでも業界でも話題を読んだ Logicomix [Doxiadis 15] は数学基礎論の探求と挫折をドラマチックに描いたグラフィックノベル^{*13} であるが、人工知能の基礎論について思いを巡らせるとき、その情熱と落胆について同情と既視感を感じずにはいられない。精神を病んだり家庭が荒れたりする人が続出する点が少々気がかりになりながら。

SIG-FPAI は抽象的で大層な研究会名のせいで敬遠してしまう方もいるかもしれない。しかし、他の分野でも

こういうことであるかも、という基本問題があれば何でもありなのである。ある技術的な難問が、全く違う分野でも研究されており知見を活用できる、ということは、ままある。また、異なる分野の話を書くことで発見やヒントやインスピレーションが得られることもある。知識獲得には知識の利用とともに探索が欠かせないのである。その意義からして、できるだけ多様な方々を歓迎している。常連はアルゴリズムや手法に関心のある人が少々多めではあるかもしれないが、「Rigor Police」はいないし、Open-Minded な集まりである。もし分野によらず通底しそうな基本問題をお持ちなら参加を検討いただければ幸いである。お時間が許せば懇親会にも (point-flash でも探しに)。

◇ 参考文献 ◇

- [Abbeel 04] Abbeel, P. and Ng, A. Y.: Apprenticeship learning via inverse reinforcement learning, *Proc. 21th Int. Conf. on Machine Learning (ICML'04)* (2004)
- [Abbeel 10] Abbeel, P., Coates, A. and Ng, A. Y.: Autonomous helicopter aerobatics through apprenticeship learning, *Int. Journal of Robotics Research*, Vol. 29, No. 13, pp. 1608-1639 (2010)
- [安倍 99] 安倍直樹: 特集「計算学習理論の進展と応用可能性」にあたって, 人工知能学会誌, Vol. 14, No. 5, p. 762 (1999)
- [甘利 98] 甘利俊一, 長岡浩司: 情報幾何の方法 (岩波講座応用数学), 岩波書店 (1998)
- [Anderson 08] Anderson, C.: The end of theory: The data deluge makes the scientific method obsolete, <https://www.wired.com/2008/06/pb-theory/> (2008)
- [Angluin 83] Angluin, D. and Smith, C. H.: Inductive inference: Theory and methods, *ACM Computing Surveys*, Vol. 15, No. 3, pp. 237-269 (1983)
- [Angluin 88] Angluin, D.: Queries and concept learning, *Machine Learning*, Vol. 2, No. 4, pp. 319-342 (1988)
- [Anthony 87] Anthony, M.: *Discrete Mathematics of Neural Networks: Selected Topics*, SIAM (1987)
- [有川 90] 有川節夫: 人工知能基礎論研究会と関連分野の動向, 人工知能学会誌, Vol. 5, No. 1, pp. 110-111 (1990)
- [有川 96] 有川節夫: 機械学習から機械発見へ, 人工知能学会誌, Vol. 11, No. 6, pp. 865-873 (1996)
- [有川 00] 有川節夫, 佐藤雅彦, 佐藤泰介, 丸岡章, 宮野悟, 金田康正: 発見科学の構想と展開, 人工知能学会誌, Vol. 15, No. 4, pp. 595-607 (2000)
- [Battaglia 18] Battaglia, P. W., Hamrick, J. B., Bapst, V., Sanchez-Gonzalez, A., Zambaldi, V., Malinowski, M., Tacchetti, A., Raposo, D., Santoro, A., Faulkner, R., Gulcehre, C., Song, F., Ballard, A., Gilmer, J., Dahl, G., Vaswani, A., Allen, K., Nash, C., Langston, V., Dyer, C., Heess, N., Wierstra, D., Kohli, P., Botvinick, M., Vinyals, O., Li, Y. and Pascanu, R.: Relational inductive biases, deep learning, and graph networks, *arXiv:1806.01261* (2018)
- [Bousmalis 18] Bousmalis, K., Irpan, A., Wohlhart, P., Bai, Y., Kelcey, M., Kalakrishnan, M., Downs, L., Ibarz, J., Sampedro, P. P., Konolige, K., Levine, S. and Vanhoucke, V.: Using simulation and domain adaptation to improve efficiency of deep robotic grasping, *Proc. Int. Conf. on Robotics and Automation (ICRA'18)* (2018)
- [Box 66] Box, G. E. P.: Use and abuse of regression, *Technometrics*, Vol. 8, No. 4, pp. 625-629 (1966)
- [Breiman 95] Breiman, L.: Reflections after refereeing papers for NIPS, *The Mathematics of Generalization* (D. H. Wolpert, ed.), pp. 11-15 (1995)
- [Breiman 01] Breiman, L.: Statistical modeling: The two cultures,

* 12 ALT'19 の Tutorial Speakers の一人でもあった。

* 13 主人公は Whitehead とともに金字塔「Principia Mathematica」をつくり上げた Russell である。Whitehead, Cantor, Frege, Hilbert, Wittgenstein, Gödel, von Neumann, そして, Poincaré が登場する。

- Statistical Science*, Vol. 16, No. 3, pp. 199-215 (2001)
- [Bronstein 17] Bronstein, M. M., Bruna, J., LeCun, Y., Szlam, A. and Vandergheynst, P.: Geometric deep learning: Going beyond euclidean data, *IEEE Signal Processing Magazine*, Vol. 34, No. 4, pp. 18-42 (2017)
- [Butler 18] Butler, K. T., Davies, D. W., Cartwright, H., Isayev, O. and Walsh, A.: Machine learning for molecular and materials science, *Nature*, Vol. 559, No. 7715, pp. 547-555 (2018)
- [Chen 18] Chen, T., Murali, A. and Gupta, A.: Hardware conditioned policies for multi-robot transfer learning, *Advances in Neural Information Processing Systems*, Vol. 31, pp. 9333-9344 (2018)
- [Christiano 16] Christiano, P., Shah, Z., Mordatch, I., Schneider, J., Blackwell, T., Tobin, J., Abbeel, P. and Zaremba, W.: Transfer from simulation to real world through learning deep inverse dynamics model, *arXiv:1610.03518* (2016)
- [Dai 17] Dai, H., Khalil, E. B., Zhang, Y., Dilkina, B. and Song, L.: Learning combinatorial optimization algorithms over graphs, *Proc. 31st Int. Conf. on Neural Information Processing Systems (NeurIPS'17)*, pp. 6351-6361 (2017)
- [de Freitas 17] de Freitas, N., Reed, S. and Vinyals, O.: Deep learning: Practice and trends, <https://neurips.cc/Conferences/2017/Videos> (NeurIPS'17)
- [Devroye 96] Devroye, L., Györfi, L. and Lugosi, G.: *A Probabilistic Theory of Pattern Recognition*, Springer (1996)
- [Doxiadis 15] Doxiadis, A. and Papadimitriou, C. H.: ロジ・コミックス: ラッセルとめぐる論理哲学入門, 筑摩書房 (2015)
- [Fayyad 96] Fayyad, U., Piatetsky-Shapiro, G. and Smyth, P.: From data mining to knowledge discovery in databases, *AI Magazine*, Vol. 17, No. 3, pp. 37-54 (1996)
- [Finn 17] Finn, C., Abbeel, P. and Levine, S.: Model-agnostic meta-learning for fast adaptation of deep networks, *Proc. 34th Int. Conf. on Machine Learning (ICML'17)*, pp. 1126-1135 (2017)
- [Gil 12] Gil, Y. and Hirsh, H.: Final report on the 2012 NSF Workshop on Discovery Informatics, *National Science Foundation Workshop Report* (2012)
- [Gold 67] Gold, E. M.: Language identification in the limit, *Information and Control*, Vol. 10, No. 5, pp. 447-474 (1967)
- [Gromski 19] Gromski, P. S., Henson, A. B., Granda, J. M. and Cronin, L.: How to explore chemical space using algorithms and automation, *Nature Reviews Chemistry*, Vol. 3, pp. 119-128 (2019)
- [Hacking 15] Hacking, I. 著, 渡辺博 訳: 表現と介入: 科学哲学入門 (ちくま学芸文庫), 筑摩書房 (2015)
- [韓 98] 韓太舜: 情報理論における情報スペクトル的方法, 培風館 (1998)
- [Hand 98] Hand, D.: Breaking misconceptions — Statistics and its relationship to mathematics, *J. Royal Statistical Society: Series D*, Vol. 47, No. 2, pp. 245-250 (1998)
- [Hand 09] Hand, D.: Mismatched Models, Wrong Results, and Dreadful Decisions, http://videlectures.net/kdd09_hand_mmwrdd/ (KDD'09)
- [Hand 18] Hand, D.: Data Science for Financial Applications, http://videlectures.net/kdd2018_hand_data_science/ (KDD'18)
- [Hand 11] Hand, D.: Learning in the Real World, http://videlectures.net/colt2011_hand_world/ (COLT'11)
- [原口 86] 原口 誠, 有川節夫: 類推の定式化とその実現, 人工知能学会誌, Vol. 1, No. 1, pp. 132-139 (1986)
- [Hardesty 15] Hardesty, L.: Probabilistic programming does in 50 lines of code what used to take thousands, <https://phys.org/news/2015-04-probabilistic-lines-code-thousands.html> (2015)
- [橋田 95] 橋田浩一: 人工知能における基本的問題, 人工知能学会誌, Vol. 10, No. 3, pp. 340-346 (1995)
- [Howard 14] Howard, J.: The wonderful and terrifying implications of computers that can learn, TED Talks, <https://www.ted.com/talks/> (2014)
- [今井 03] 今井むつみ: 特集「機械学習, それが人に及ぼさる理由」の企画にあたって, 人工知能学会誌, Vol. 18, No. 5, pp. 517-518 (2003)
- [井上 10] 井上克巳, 田村直之: 特集「最近の SAT 技術の発展」にあたって, 人工知能学会誌, Vol. 25, No. 1, p. 56 (2010)
- [石田 96] 石田 亨: 人工知能基礎論研究会の歩み, 人工知能学会誌, Vol. 11, No. 3, pp. 365-366 (1996)
- [岩沼 01] 岩沼宏治, 佐藤 健: 特集「定理証明, 推論関係の新技術」にあたって, 人工知能学会誌, Vol. 16, No. 5, p. 635 (2001)
- [Johnson 17] Johnson, D. D.: Learning graphical state transitions, *Proc. Int. Conf. on Learning Representations (ICLR'17)* (2017)
- [Karpathy 17] Karpathy, A.: Software 2.0, <https://medium.com/@karpathy/software-2-0-a64152b37c35> (2017)
- [Katz 12] Katz, Y.: *Noam Chomsky on Where Artificial Intelligence Went Wrong — An Extended Conversation with the Legendary Linguist*, The Atlantic (2012)
- [King 09] King, R. D., Rowland, J., Oliver, S. G., Young, M., Aubrey, W., Byrne, E., Liakata, M., Markham, M., Pir, P., Soldatova, L. N., Sparkes, A., Whelan, K. E. and Clare, A.: The automation of science, *Science*, Vol. 324, No. 5923, pp. 85-89 (2009)
- [Knuth 68] Knuth, D. E.: *The Art of Computer Programming*, Addison-Wesley (1968)
- [Knuth 74] Knuth, D. E.: 1974 ACM Turing award lecture: Computer programming as an art, *Commun. ACM*, Vol. 17, No. 12, pp. 667-673 (1974)
- [國吉 95] 國吉康夫: 実世界エージェントにおける注意と視点: 情報の分節・統合・共有, 人工知能学会誌, Vol. 10, No. 4, pp. 507-514 (1995)
- [Lake 15] Lake, B. M., Salakhutdinov, R. and Tenenbaum, J. B.: Human-level concept learning through probabilistic program induction, *Science*, Vol. 350, No. 6266, pp. 1332-1338 (2015)
- [Langley 86] Langley, P. and Michalski, R. S.: Editorial: Machine learning and discovery, *Machine Learning*, Vol. 1, No. 4, pp. 363-366 (1986)
- [Langley 89] Langley, P. and Zytkow, J. M.: Data-driven approaches to empirical discovery, *Artificial Intelligence*, Vol. 40, No. 1, pp. 283-312 (1989)
- [丸岡 96] 丸岡 章, 古川康一, 安倍直樹, 沼尾正行, 有川節夫: 「AI マップ—機械学習から機械発見へ」へのコメントと回答, 人工知能学会誌, Vol. 12, No. 2, pp. 231-241 (1996)
- [Maryasin 18] Maryasin, B., Marquetand, P. and Maulide, N.: Machine learning for organic synthesis: Are robots replacing chemists?, *Angewandte Chemie International Edition*, Vol. 57, No. 24, pp. 6978-6980 (2018)
- [松原 89] 松原 仁, 橋田浩一: 情報の部分性とフレーム問題の解決不能性, 人工知能学会誌, Vol. 4, No. 6, pp. 695-703 (1989)
- [松尾 14] 松尾 豊, 栗原 聡, 山川 宏: 特集「第五世代コンピュータと人工知能の未来」にあたって, 人工知能, Vol. 29, No. 2, p. 114 (2014)
- [湊 16] 湊 真一: 私は何がしたかったのか, そしてどのように進んできたのか, 人工知能, Vol. 31, No. 3, pp. 452-463 (2016)
- [森下 01] 森下真一, 宮野 悟: 発見科学とデータマイニング, 共立出版 (2001)
- [元田 00] 元田 浩: 論文特集「発見科学」にあたって, 人工知能学会誌, Vol. 15, No. 4, pp. 592-594 (2000)
- [中川 87] 中川裕志: 論理+サーカムスクリプション=常識推論, 人工知能学会誌, Vol. 2, No. 1, pp. 14-21 (1987)
- [中谷 58] 中谷宇吉郎: 科学の方法 (岩波新書), 岩波書店 (1958)
- [Newell 76] Newell, A. and Simon, H. A.: 1975 ACM Turing award lecture: Computer science as empirical inquiry: Symbols and search, *Commun. ACM*, Vol. 19, No. 3, pp. 113-126 (1976)
- [新田 19] 新田克己, 小野 功: 問題解決, 探索, 最適化の基礎と展開, 人工知能, Vol. 34, No. 3, pp. 370-380 (2019)
- [野家 15] 野家啓一: 科学哲学への招待 (ちくま学芸文庫), 筑摩書房 (2015)
- [Norvig 12] Norvig, P.: Noam Chomsky on where artificial intelligence went wrong, <https://norvig.com/chomsky.html> (2012)
- [沼尾 92] 沼尾正行: 機械学習の主なパラダイムと現状, 人工知能学会誌, Vol. 7, No. 1, pp. 6-9 (1992)

- [沼尾 97] 沼尾雅之：特集「大規模データベースからの知識獲得」にあたって，人工知能学会誌，Vol. 12, No. 4, p. 496 (1997)
- [沼尾 14] 沼尾正行：機械学習技術から見た第五世代コンピュータと未来，人工知能，Vol. 29, No. 2, pp. 142-148 (2014)
- [Piatetsky-Shapiro 94] Piatetsky-Shapiro, G., Matheus, C., Smyth, P. and Uthurusamy, R.: KDD-93: Progress and challenges in knowledge discovery in databases, *AI Magazine*, Vol. 15, No. 3, pp. 77-82 (1994)
- [Poincaré 53] Poincaré, H.: 科学と方法—改訳 (岩波文庫)，岩波書店 (1953)
- [Poincaré 59] Poincaré, H.: 科学と仮説 (岩波文庫)，岩波書店 (1959)
- [Prates 19] Prates, M. O. R., Avelar, P. H. C., Lemos, H., Lamb, L. and Vardi, M.: Learning to solve NP-complete problems — A graph neural network for decision TSP, *Proc. 33rd AAAI Conf. on Artificial Intelligence (AAAI' 19)* (2019)
- [Rahimi 17] Rahimi, A.: NIPS 2017 Test-of-Time Award presentation, <https://neurips.cc/Conferences/2017/Videos> (NeurIPS'17)
- [Saikin 19] Saikin, S. K., Kreisbeck, C., Sheberla, D., Becker, J. S. and Aspuru-Guzik, A.: Closed-loop discovery platform integration is needed for artificial intelligence to make an impact in drug discovery, *Expert Opinion on Drug Discovery*, Vol. 14, No. 1, pp. 1-4 (2019)
- [坂間 10] 坂間千秋, 井上克巳: 特集「論理に基づく推論研究の動向」にあたって，人工知能学会誌，Vol. 25, No. 3, pp. 366-367 (2010)
- [Sanchez-Gonzalez 18] Sanchez-Gonzalez, A., Heess, N., Springenberg, J. T., Merel, J., Riedmiller, M., Hadsell, R. and Battaglia, P.: Graph networks as learnable physics engines for inference and control, *Proc. 35th Int. Conf. on Machine Learning (ICML' 18)*, pp. 4470-4479 (2018)
- [Sanchez-Lengeling 18] Sanchez-Lengeling, B. and Aspuru-Guzik, A.: Inverse molecular design using machine learning: Generative models for matter engineering, *Science*, Vol. 361, No. 6400, pp. 360-365 (2018)
- [佐藤 02] 佐藤泰介, 櫻井彰人: 「ベイジアンネット」にあたって，人工知能学会誌，Vol. 17, No. 5, p. 538 (2002)
- [Schneider 18] Schneider, G.: Automating drug discovery, *Nature Reviews Drug Discovery*, Vol. 17, pp. 97-113 (2018)
- [Selsam 19] Selsam, D., Lamm, M., Bünz, B., Liang, P., Moura, de L. and Dill, D. L.: Learning a SAT solver from single-bit supervision, *Proc. Int. Conf. on Learning Representations (ICLR' 19)* (2019)
- [Shapiro 81] Shapiro, E. Y.: An algorithm that infers theories from facts, *Proc. 7th Int. Joint Conf. on Artificial Intelligence (IJCAI' 81)*, pp. 446-451 (1981)
- [Si 18] Si, X., Dai, H., Raghothaman, M., Naik, M. and Song, L.: Learning loop invariants for program verification, *Proc. 32nd Int. Conf. on Neural Information Processing Systems (NeurIPS' 18)* (2018)
- [Strickland 19] Strickland, E.: IBM Watson, heal thyself: How IBM overpromised and underdelivered on AI health care, *IEEE Spectrum*, Vol. 56, No. 4, pp. 24-31 (2019)
- [Szymkuć 16] Szymkuć, S., Gajewska, E. P., Klucznik, T., Molga, K., Dittwald, P., Startek, M., Bajczyk, M. and Grzybowski, B. A.: Computer-assisted synthetic planning: The end of the beginning, *Angewandte Chemie International Edition*, Vol. 55, No. 20, pp. 5904-5937 (2016)
- [Tobin 17] Tobin, J., Fong, R., Ray, A., Schneider, J., Zaremba, W. and Abbeel, P.: Domain randomization for transferring deep neural networks from simulation to the real world, *Proc. 30th IEEE/RSJ Int. Conf. on Intelligent Robots and Systems (IROS' 17)* (2017)
- [辻井 12] 辻井潤一：合理主義と経験主義のはざま：内的な処理の計算モデル，人工知能学会誌，Vol. 27, No. 3, pp. 273-283 (2012)
- [Ulyanov 17] Ulyanov, D., Guschin, A., Trofimov, M., Altukhov, D. and Michailidis, M.: How to win a data science competition: Learn from top kagglers, Coursera, <https://www.coursera.org/learn/competitive-data-science> (2017)
- [Valiant 84] Valiant, L. G.: A theory of the learnable, *Commun. ACM*, Vol. 27, No. 11, pp. 1134-1142 (1984)
- [Vapnik 98] Vapnik, V. N.: *Statistical Learning Theory*, Wiley-Interscience (1998)
- [鷲尾 12] 鷲尾 隆：特集「離散構造処理系—知能情報処理を支えるアルゴリズムの技法」にあたって，人工知能学会誌，Vol. 27, No. 3, p. 231 (2012)
- [渡辺 78] 渡辺 慧：認識とパタン (岩波新書)，岩波書店 (1978)
- [Wu 19] Wu, Z., Pan, S., Chen, F., Long, G., Zhang, C. and Yu, P. S.: A comprehensive survey on graph neural networks, *arXiv:1901.00596* (2019)
- [山田 94] 山田誠二, 滝 寛和：小特集「最近の機械学習」にあたって，人工知能学会誌，Vol. 9, No. 6, p. 817 (1994)
- [山田 97] 山田誠二: 特集「制約充足問題の基礎と応用」にあたって，人工知能学会誌，Vol. 12, No. 3, p. 350 (1997)
- [山本 09] 山本章博: 機械学習の科学研究への応用，人工知能学会誌，Vol. 24, No. 6, pp. 778-779 (2009)
- [山本 10] 山本章博, 平田耕一：人工知能基本問題研究会 (SIG-FPAI)，人工知能学会誌，Vol. 25, No. 4, p. 540 (2010)
- [横井 89] 横井俊夫：徹底した記号主義，人工知能学会誌，Vol. 4, No. 6, p. 623 (1989)
- [Zhang 18] Zhang, Z., Cui, P. and Zhu, W.: Deep Learning on Graphs: A Survey, *arXiv:1812.04202* (2018)
- [Zhou 19] Zhou, J., Cui, G., Zhang, Z., Yang, C., Liu, Z., Wang, L., Li, C. and Sun, M.: Graph Neural Networks: A Review of Methods and Applications, *arXiv:1812.08434* (2019)

2019年7月8日 受理

著者紹介



瀧川 一学 (正会員)

1977年香川県生まれ。2004年北海道大学大学院工学研究科博士後期課程修了。博士(工学)。京都大学バイオインフォマティクスセンター助教、北海道大学大学院情報科学研究科准教授、JST さきがけ研究員などを経て、2019年より理化学研究所革新知能統合研究センター iPS 細胞連携医学的リスク回避チーム研究員、および、北海道大学化学反応創成研究拠点(WPI-ICReDD)特任准教授。専門は離散構造を伴う機械学習および科学でのデータ駆動型手法利活用。