変わりゆく機械学習と変わらない機械学習

神嶌敏弘 〈産業技術総合研究所　mail@kamishima.net〉

数年前から，人工知能や機械学習について目立った成果が取り上げられるようになった．日本では，バブル崩壊後あたりから撤退する企業が相次ぎこの分野は長く冬の時代であったのに対し，海外では堅実な研究が続けられていた．その研究が実り，コンピュータ囲碁は人間のトッププロに勝つようになったり，機械翻訳や音声認識がその精度を大幅に向上させるといった成果に繋がった．一方で，マスコミの情報では，機械学習があたかも魔法の杖であるかのような過剰な印象を与えているとも思う．以下では，現状の機械学習はどのようなもので，何が今までと違い，何が変わっていないのかを論じる．

1. はじめに

マスコミでは，コンピュータ囲碁が人間のトッププロに勝てるようになったことや，機械翻訳の大幅な精度向上など，人工知能や機械学習について目立った成果が取り上げられている．そのため，人工知能・機械学習技術が，あたかも魔法の杖であるかのような，行き過ぎた印象を与えているかもしれない．そこで本稿では，現状の機械学習はどのようなもので，何が今までと違い，何が変わっていないのかを伝えたい．

2章で機械学習の定義とデータ分析の処理について簡単に紹介する．3章では，人工知能に関連する計算機科学の中で，データ分析に関連した研究分野である，学習理論，機械学習，データマイニング，およびニューラルネットがどのような位置づけにあるかを紹介する．その後，妥当性，有効性，および効率性の三つの観点について，データ分析関連の4分野がどの観点を重視しているのかを紹介する．

4章では，変わりゆく機械学習として，現在に至るまでの進展の過程と，ここ20年での変化を紹介する．その前に，人間のトッププロに勝利した囲碁ソフトAlpha GOを例にとり，この成果が，大きなブレイクスルーによって成されたのではなく，いくつもの地道な研究成果の積み上げの結果なしえたものであることを紹介したい．その後，2000年まで，2000年代，そして2010年代の三つの時期に分けて機械学習の進展の様子を紹介する．2000年まででは，データ分析に関連する各分野の起源を紹介し，1980年代に生じた演繹から帰納へのパラダイム転換について述べる．2000年代では，ビッグデータというキャッチフレーズが実業界では用いられたが，実際の学術的には何が変わったのかを述べたい．2010年代では，現在も話題になっている深層学習について紹介し，その可能性と限界について論じる．

5章では，変わらない機械学習として，機械学習の本質に関わる三つの基本概念を紹介する．一つ目は，まだ見たことのない事柄について予測を正確にするという汎化誤差という規準，二つ目は，ただ一つの機械学習手法で，ありとあらゆる状況に対応できる方法は存在しないというノーフリーランチ定理，最後は，ものごとをある概念に分けるというときには，何か特定の側面を重視し，他を無視することを伴うという醜いアヒルの子の定理である．

前節の理論面の制限をふまえ，6章では，機械学習を用いて問題解決を行うことの難しさについて述べる．一つ目は，本当に達成すべき目標を定式化することの難しさ，二つ目は，問題自体が明確に定義できないという不良設定に伴う難しさ，そして最後は，問題を解決するのに必要なデータを過不足なく集めることの難しさである．これらの難しさはずっと残ってはいるが，それでも4章で紹介した技術の進展によって，その応用範囲は広がっている．これらの自然科学への応用事例を7章で紹介する．自然科学分野での機械学習技術の利用についての私見を最後に8章で述べて締めくくりとしたい．

2. 機械学習とは

機械学習の定義はいろいろ試みられているが，サミュエル（A. L. Samuel）が1959年に一般紙に対するインタビューとして述べたものはよく引用されている．

> The field of study that gives computers the ability to learn without being explicitly programmed.
> 明示的にプログラミングすることなく，コンピュータに学ぶ能力を与えようとする研究分野

コンピュータの動作をすべて人手で作り上げたプログラムによって決定する代わりに，問題に合わせて選んだ手法と，データを例示として与えることにより，利用者が望む動作を引きだそうとする試みである．

本稿で扱う機械学習がどのようなものかを示すために，教師あり学習の枠組みを簡単に紹介する．教師あり学習（supervised learning）とは，各訓練データごとに，その判断結果である教師情報を付加する問題設定である．図1の左枠の最初の訓練データでは，リンゴであるかどうかの判断結果として「はい」の教師情報を，次のデータでは「いいえ」の教師情報を与えている．この訓練データから，入力と予測結果の間の規則性，すなわち写像を獲得することが学習段階の目標である．そして，判断結果が与えられて

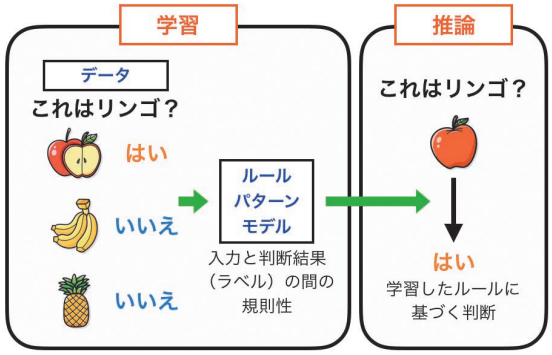

図1　教師あり学習.

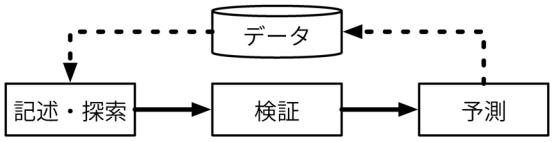

図2　データ分析の処理.

いない入力が与えられると，学習段階で得た写像を利用して，判断結果を得る．この図では，ある果物について写像を適用すると「はい」という判断結果が予測されている．このように，機械学習は予測という段階を主に扱う．

ここでは，データ分析の処理を図2のように，記述・探索，検証，および予測の三つに分けて考えてみよう．最初の記述・探索は，取得してきたデータを俯瞰して把握するためのものである．データの平均を計算するといった記述統計と呼ばれるものを計算したりする単純なもの，グラフなどを描画する可視化手法，そして一定の条件を満たす記述，例えば，データ中で高頻度で現れるパターンを列挙するという複雑なものまでが含まれる．これらの処理によって，後の検証や予測の段階での処理を容易にしたり，データの表す事象についての仮説を立てたりする．データに特定の性質があるかどうかといった仮説を検証するのが次の段階である．各種の統計的仮説検定は検証の中心的な存在であり，他にも因果推論がこの役割を担う．最後の機械学習は主に最後の段階である予測を担当する．統計分野の回帰分析などの手法でも予測は行うが，それよりデータ分析の観点からはさらに予測に特化したものといってよい．重要な点は，これらの三つの段階に応じて適切な処理手法を選ぶ必要があり，機械学習は万能なデータ処理手法というわけではないことに留意されたい．

3.　研究分野としての機械学習

ここでは，研究分野としての機械学習を概観する．前半では，機械学習を含む人工知能分野がどのような研究分野で構成されているかを述べる．後半では，特に機械学習に関連した分野に関し，どのような違いがあるのかを紹介する．

3.1　人工知能分野における機械学習研究の位置づけ

ここでは，広範囲にわたる人工知能技術のうち，機械学習と呼ばれる分野についてその概要を述べる．最初に，各種の人工知能技術の中で機械学習がどのような位置にあるかを紹介しておこう．図3は，人工知能技術に関連する国際会議を分野ごとにまとめたものである．分野の重複を枠で囲って示してあり，各分野の名前は斜体で示してある．基礎・理論に関する分野を上方に，これらの基礎分野に依存した応用分野を下方におおまかに配置してある．この図中で機械学習に関連する分野は学習理論（learning theory），機械学習（machine learning），データマイニング（data mining），およびニューラルネットワーク（neural network）の4分野である．人工知能技術の中で機械学習関連分野は他の分野で利用される基礎技術を扱うことと，様々な応用的な人工知能技術は機械学習技術に依存していることが見て取れるだろう．

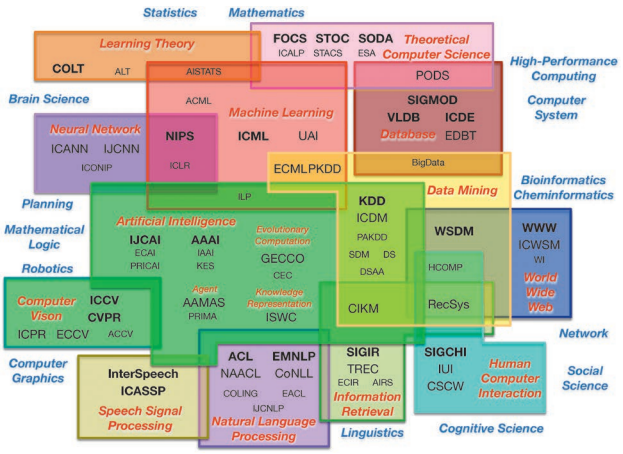

図3　人工知能・機械学習分野の国際会議マップ.[*1]

機械学習関連の4分野についてもう少し詳しく見てみよう．これらの分野は，データを例示することで所望の動作を得ようとする点では共通している．しかし，いろいろな問題に一般的に成立する性質に関心がある数学のような形式科学と，特定の具体的な問題についてその効率を向上させることに関心がある工学のような応用科学の両方の側面が機械学習にはある．そして，学習理論，機械学習，そしてデータマイニングの順に応用科学への関心が強くなる．学習理論では，機械学習がはたして可能なのか？　できるとすればその条件は？　といったことを数理的に記述して厳密に議論する．機械学習分野では，学習理論での保証に基づいて，抽象化された問題を解く計算手法であるアルゴリズムを開発する．データマイニング分野では，実世界の問題を，機械学習分野で開発されたアルゴリズムを適用できるような問題に抽象化したり，またより効率的にしたりすることに関心がある．残るニューラルネットワーク分野は，歴史的経緯から他の機械学習関連分野とは異なり，理論面から応用面までがニューラルネットという手法を通じてコミュニティを形成している．

[*1] 配布先：http://www.kamishima.net/jp/kaisetsu/

3.2　機械学習関連各分野の研究指向

前節のように機械学習研究はいくつかの分野に細分化されている．おそらくどの学問の分野においても，細分化された分野の指向の違いは，他分野の研究者には分かりにくいものと思う．そこで，やや私見も入るが，これらの指向の違いを述べてみたい．

図4は，文献19から知見を得て，データ分析で重視する三つの観点を示し，これらのデータ分析の各分野との関係を著者が示したものである．妥当性とは予測の根拠がいかに確かであるか，有効性とは予測がいかに正確であるか，そして効率性とはいかに大規模なデータを高速に処理できるかということを表す．

自然科学にも理論と実験があるのと同様にデータ科学にもこの二つの側面がある．理論面では妥当性を重視し，たとえば何ができれば予測できたといえるのか，予測するとはそもそも何をすることなのかといった原理的な事柄に関心がある．実験面では有効性や観測データを重視し，将来のデータをよりうまく予測することに関心がある．前者の立場の方がより多くの場合で確実な予測，すなわち大きくは外れないことを重視するが，後者の立場の方がより多くの場合で正確な予測をすることに重きをおく．

さらに，計算機科学には，原理を明らかにしようとする科学の側面と，効率化をめざす工学の側面もある．データ分析では，予測に関して数式などを用いた形式的な表現で議論を進めるのが前者の立場である．一方で，理論上はすぐれた性質を備えた化学物質があっても，それを実際に合成できるわけではないのと同様に，数式があっても，実際の計算機で計算できるわけではない．大量のデータを扱ったり，複雑な計算をするには工学的な工夫が必要である．科学の側面では妥当性・有効性を，工学の側面では有効性・効率性を重視することになる．

図4に戻り，妥当性，有効性，および効率性の三つの観点のうち，各分野がどれを重視しているかを示した．統計や学習理論は予測や検証の確実性に関心があり妥当性を重視する．データマイニングは実用上の効果に関心がある．ニューラルネットワークは歴史的に実験的な成果が先行しており，有効性を重視している一方で，近年ではこれらの目的を達成するために大規模化が必要になり，結果として効率性も考慮する．分野としての機械学習は有効性と妥当性の中間的な立場にあり，データを扱う基盤となるデータベース分野では効率性を重視する．

以上のように，多くの分野に細分化されてはいるが，データ分析研究のめざすところは究極的には同じである．ただ，そこに至るまでの道筋として異なるものを思い描いていると見るのが適切だろう．妥当性・有効性・効率性の三つは，一つを重視した設計をすると，他の点は悪化するというトレードオフの関係があり，なかなか同時には改善することはできていない．自然科学が，理論と実験の二つの側面から一つの自然の原理を追求するように，これら三つのいずれの観点でも優れた結果を得られるようにできるようにすることが，データ分析研究の究極の目標といえるだろう．

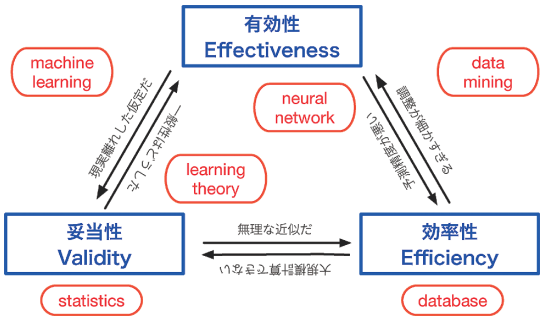

図4　機械学習・ニューラルネットワーク分野の指向．

4.　機械学習の進展

この節では，変わりゆく機械学習として，この分野がどのように進展してきたのかを紹介する．機械学習関連研究の大まかな流れを図5に示した．大きな転換点は80年代にあるが，その前後を含めた2000年末まで，2000年代のビッグデータ時代，2010年代の深層学習の隆盛に分けて紹介する．

4.1　Alpha GO への道のり

機械学習の歴史について述べる前に，機械学習が急速に注目を集めてはいるが，その研究は長い間の積み上げによるものであることを少し述べておきたい．そこで，機械学習・人工知能の大きな成果として計算機科学の関係者のみならず，一般のニュースなどでも広く注目を集めたAlpha GOを例として取り上げたい．[13)]

Alpha GOはコンピュータ囲碁ソフトであり，2016年に人間のトッププロに勝利した．囲碁のような対戦ゲームは，ルールが明確であるため，人工知能技術に比較的向いている．そのため，いろいろな人工知能技術の実験台となってきた．こうした経緯から，生物学でハエが代表的な実験動物であることになぞらえて「人工知能研究のハエ」などとも呼ばれる．チェッカー，バックギャモン，チェスなど様々な対戦ゲームがあるが，その中でも囲碁は群を抜いて複雑で，ゲームを対象とした研究の究極の目標の一つとされてきた．

囲碁はおおまかにいうと，互いに盤上に石を並べてゆき，

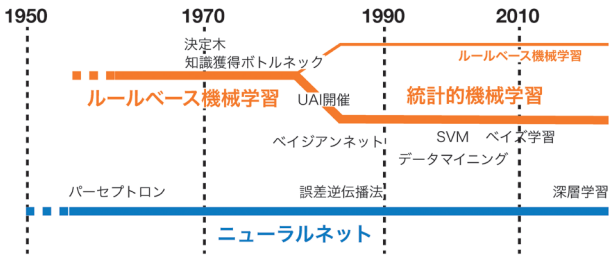

図5　機械学習・ニューラルネットワーク分野の進展．

自身の石で囲った領域の多い方が勝ちになるゲームである．計算機に囲碁をさせるには二つの課題がある．一つは，今の状態が，自身にとってどれくらい有利かという形勢判断である．盤上の領域をどちらの陣営が囲みつつあるのかは不明瞭なので，他の対戦ゲームと比べて囲碁の形勢判断は難しい．もう一つの課題は，互いに手を打っていったその先の展開を予想する先読みである．囲碁は他のゲームより各手番での選択肢は多いため，2手，3手と先読みをしようとすると膨大な数の局面を考えなければならなくなる．この二つの課題にどう取り組んでいったかを見てみよう．

形勢判断は，最初のころは，人間が内省に基づいて得た知見を計算機に組み込むことが一般的だったが，その知見が複雑になりすぎて人間では対処できなくなった．そこで，形勢の有利不利の判断と盤面との対のデータを大量に準備することで，複雑な形勢判断の規準を自動的に機械学習で獲得するようになった．しかし，今度はデータを大量に準備することは難しく，形勢の有利不利が曖昧な序盤では特に問題となった．これには，テサウロ（G. Tesauro）が1995年に考案した，計算機上で自身の分身と対戦を続けることでデータを集める自己対戦が強力であった．Alpha GOが行った自己対戦は，3000年の囲碁の歴史上で行われた人間同士の対戦数を圧倒的に凌駕している．そして最後に，局地的なせめぎ合いと同時に，盤面全体を見渡すことを同時に扱える畳み込みニューラルネットワークの採用により，正確さは人間を上回るようになった．

1997年にチェスの世界チャンピオンに勝利したDeep Blueでは，高速な計算機が，先読みに関して重要な役割を果たしたが，囲碁は非常に複雑なため他にも対策が必要であった．その対策は意外なもので，決着が付くまでサイコロを振って適当な所に打ち続けてみるというモンテカルロ碁という方法であった．しかし，さすがにこれではあまりに非効率的なため，より効率的に探索できるバンディットという枠組みを取り込んだ手法が登場した．さらにAlpha GOでは，どの手筋を深く先読みすべきかどうかの判断についても，自己対戦で集めたデータに機械学習で獲得した規則性を活用している．

以上のように，何か大きなブレイクスルー一つで，トッププロレベルの囲碁ソフトができたわけではない．何段も巨人の肩に乗りながら，成果を積み上げることで注目される結果に繋がったという見方が適切である．

4.2　2000年までの経緯

それでは，機械学習の進展に話題を戻し，まず2000年までの大まかな流れを述べておく．図5では，ニューラルネットとそれ以外を二つの流れとして示したが，その源流が異なっているためである．ニューラルネットの理論的基盤は1943年のMcCulloch-Pittsモデルの提案にまでさかのぼれるが，これは最初のコンピュータであるENIACの登場よりも前である．名前の「ニューラル」が示すように，脳の神経細胞を参考にした数理モデルである．もう一方の機械学習は，その起源が人工知能分野にある．1953年のダートマス会議で「人工知能」という名称を考案したマッカーシー（J. McCarthy）によれば，アナログ・フィードバックに基づくサイバネティクスなどとは異なり，生体のモデル化ではないという意図が「人工」という語には込められている．[10] 同様に，ニューラルネットワークのように生体を模倣するというより，機械学習は論理・数学・統計を基盤に発展してきた．

50年代後半〜70年代のニューラルネットワークでは，1958年にはローゼンブラット（F. Rosenblatt）によるパーセプトロンが開発され，第1次のニューラルネット黄金期が始まる．しかし，1969年にミンスキー（M. Minsky）らによりパーセプトロンの限界が示され，その研究は下火になった．一方の人工知能分野では，蓄えた知識から新たな結果を導く演繹による問題解決がこの時期には重視されていた．それでも，チェッカーというゲームについて，データから規則性を導き出し，帰納的な機械学習の有用性を示した，サミュエルによる結果はあった．[12]

その後80年代中頃まで，演繹を中心とした人工知能研究は進展するが，そこで使う知識を集めたり記述したりすることが難しいという知識獲得ボトルネックという問題が生じた．この問題に対処するため，人間が与えた知識に基づく演繹から，データから帰納的に知識を獲得する機械学習へのパラダイム転換が生じた．別の言い方をすれば，明確に定義されていない問題を解決するプログラムを作成する代わりに，明確に定義された数学的タスクを解くアルゴリズムの設計をするようになった．[5] 同時期に不確実な実世界に対応するためUncertainty AIという会議が始まるなどして，機械学習は統計学の要素を取り込んで統計的機械学習へとその主流が移っていった．

この時期のニューラルネットは，1986年のラメルハート（D. E. Rumelhart）らのバックプロパゲーションの開発を契機として，多層化による非線形性を獲得した．このため，パーセプトロンの限界は弱点とはならなくなり，2度目の黄金期を迎えた．しかし，最適化の困難さの問題は依然として存在しており，1990年代中頃には，非線形性を備えつつも最適化が容易なヴァプニック（V. Vapnik）らによるサポートベクトルマシンにとって代わられていった．

4.3　2000年代のビッグデータ時代

2000年代には「ビッグデータ」という言葉と共に機械学習が注目された．ビッグデータという語は実業界でのキャッチフレーズであるため，学術的な定義はなく，文脈によって様々な使い方をされている．元来は1997年に当時の32 bitという規模の計算機ではなく，さらに大きなデータを扱える64 bitの計算機が必要になるといった意味で使われ始めた．それが，2000年代になると，計算機上のメモリでは処理できないほど大きなデータ，そしてそれほど大規模なデータの代表としてWebを通じて収集されるデータという意味で使われるようになった．

ビッグデータという語自体はただのキャッチフレーズにすぎないが，この時期には大規模なデータを扱う技術の進展があった．この時期の計算機は，単体での性能向上に限界がみられるようになり，より大規模で高速な計算を望むには複数の計算機を使う必要が生じた．そのため，複数の計算機を利用して計算を行うためのデータ管理技術であるMapReduceが開発された．だが，前回の計算結果を繰り返し改良するという逐次的な計算は，単純に複数の計算機を使うだけでは処理できなかった．これに対しては，確率的勾配法と呼ばれる以前から存在する方法が，予測と最適化の誤差をまとめて扱うというアイデアにより，大規模データを扱う手法として脚光を浴びることとなった．この方法により，データをまとめて計算機上に読み込む必要がなくなり，記憶容量の制限が大幅に緩和されて，飛躍的に大規模なデータを扱えるようになった．

また，機械学習が処理できるデータの規模の拡大は，分析の質にも影響を与えた．このことを表す国際会議KDD2012でのパネルでのファルトス（S. Faloutsos）の言葉を紹介する．

signal＋noise→signal＋weaker signal＋noise

非常におおまかな見方をすれば，データ分析とは，データを説明できるsignalと，説明できないnoiseにより分けることである．すなわち，確定的にその挙動を記述できる部分と，確率的な挙動を確率分布で表現する部分とに分けるものである．現在では大規模データを十分に処理できるようになったことにより，今までsignalと明確には分からなかったためnoiseとみなしていたweaker signalも取り出せるようになった．典型的なビッグデータとされるWebの閲覧履歴などは，従来の規模では性別ごとなどグループの挙動は検出できたが，個人ごとの挙動は検出できなかった．これが大規模データの処理技術により変わったというのが，この時期のデータ分析の変化といえよう．

さらには，大規模データを扱えるようになったこと以外にも，様々な技術の進展があった．ベイズ推定という手法は，予測の不確実性を扱えるという大きな利点があったが，複雑な計算が必要であったためその適用範囲は限られていた．だがこの時期，グラフィカルモデルの一般的な解法，変分ベイズ，マルコフ連鎖モンテカルロ法，ノンパラメトリックベイズなどに多くの成果があり，比較的簡潔な方法で分析モデルを指定すれば計算が可能となり，ベイズ推定は広く用いられるようになった．また，多数の予測器を組み合わせてより高精度の予測を行うアンサンブル学習は，90年代末に理論面で大きな飛躍があり，2000年代には広く普及した．一部のデータにのみ教師情報がある状況を扱う半教師あり学習や半教師ありクラスタリング，またデータが少ないときに類似した分野のデータを活用する転移学習，対象の順序関係を予測するランキング学習などの，機械学習の適用範囲を広げる枠組みの開発もあった．さらには，個々の利用者の個人情報を暗号化して秘匿したままプライバシーを保護して学習する方法や，スパムメールのフィルタを突破するなど敵対的な行動があるときの機械学習の安全性など，社会的要請に対応する枠組みも考案された．

4.4　2010年代の深層学習の登場

2010年代は深層学習（deep learning）と呼ばれる手法が注目されている．[6] 1990年代中頃のサポートベクトルマシンの登場により，急速にニューラルネットは注目されなくなった．しかし，ヒントン（J. Hinton）やベンジオ（Y. Bengio）らは，この不遇の時代にも忍耐強く改良を続け，様々な要素技術により深層学習という手法を実用化し，現在の隆盛をもたらした．2006年にヒントンらが提案した事前訓練という手法をその端緒とすることが多いが，現在はあまりこの方法は用いられていない．2011年には音声認識で顕著な成果を示し，2012年では画像認識の性能を競うコンペティションで他の手法に対し圧倒的な性能を示し，一気に注目された．

深層学習の特徴は，その名が示すように，既存のニューラルネットと比べて，神経細胞を模した関数を超多層に構成していることである．理論的には3層あれば任意の関数の写像を学習できることが証明されていたことや，超多層のニューラルネットはその学習が困難と信じられていたため，このような超多層ニューラルネットは用いられてこなかった．しかし，超多層の方が実際には学習が容易であり，またその実験的な予測精度も優れていることが発見された．その他，バッチ正規化，ReLU活性化関数，確率的勾配法の改良など要素技術の改良もあり，数百～数千層のモデルを扱えるようになった．画像処理では1980年の福島らの畳み込みニューラルネット，音声認識や自然言語処理では1997年のシュミットヒューバー（J. Schmidhuber）らによる，時系列予測用のLSTMという既存のネットワーク構造が，超多層モデルを取り込んで活躍するようになった．

さらには，モデルの新しい利用方法も開発された．一つは，サツケバー（I. Sutskever）らによるend-to-endやencoder-decoderと呼ばれる方法で，入力とそれに対する出力の対を大量に準備できれば，その対応関係を獲得できる．例えば，日本語文とその英語翻訳文を大量に準備することで，日本語文を対応する英文に変換できるようになり，日英の機械翻訳の精度は大きく向上した．他にも，グッドフェロー（I. Goodfellow）らによる敵対的生成ネットワークもよく研究されている．例えば，ゴッホ風の絵などをいろいろ生成するといったことに利用されるもので，実際のゴッホの絵と区別の付きにくい画像を生成しようとする生成器と，実際のゴッホと生成器の作った偽ゴッホを見分けようとする識別器を競わせるという仕組みである．

これらのモデルを計算する基盤技術にも変革があった．一つは，GPUと呼ばれる元々はコンピュータ・グラフィックス用に開発された装置を数値計算に利用するGPGPUである．2007年にその基盤技術が公開されていたが，反復

計算の多い深層学習には欠かせないものとなり，急速に広まった．また，計算グラフや自動微分と呼ばれる技術も普及した．計算グラフは，ある量Xを計算するにはYとZが計算済みである必要があるといった依存関係を記述したもので，これを計算機に与えれば複雑な計算が高速にできるようになった．さらには，計算グラフで示した数式を解析的に微分した導関数の，ある入力に対する出力値を自動的に計算するのが自動微分という技術で，複雑な関数の勾配を容易に計算できるようになった．

数々の成果と共に，深層学習には不向きな問題も明らかになってきている．深層学習は画像処理や音声認識などパターン認識と呼ばれる分野では非常に得意である一方で，機械翻訳もその精度を非常に向上させはしたが，言外に示される状況は扱えないなどの問題が見つかっている．また，うまく動作させるには不確定な要素があり結果の再現性が問題になったり，挙動に説明を与えることができなかったりもする．また，なぜ深層にすることで学習が容易になるのかという現象を解明するといった理論面の研究は応用面ほど進んでいない．いずれにせよ，深層学習は有力な技術であり，深層学習自体の改良や，他の技術との組み合わせが進んでゆくであろう．

5. 機械学習の基本概念

ここでは，変わらない機械学習として，機械が学習するとはどういうことかという普遍的な問いについての研究に関して述べる．物理でいえば光速以上では運動できないといったことと同様の不可能性に関わる三つの根源的な機械学習の概念として，汎化誤差，ノーフリーランチ定理および，醜いアヒルの子の定理を紹介する．この汎化誤差という規準を目標として機械学習の手法を設計するのだが，直接的にはこの汎化誤差を測ることはできない．ノーフリーランチ定理は，機械学習の手法にはただ一つのあらゆる状況に対処できる完全な方法はないことを示す．醜いアヒルの子の定理は，ものごとをある概念に分けるというときには，必然的にそのものごとの特定の側面を重視し，他を無視することを伴うというものである．注意すべきは，ここで述べる性質は，形式的証明に基づく不可能性であり，帰納的推論の枠組み全般に及ぶものであるため，計算機だけではなく人間にもあてはまるものである．

5.1 汎化誤差

まず汎化誤差について述べる．機械学習では，分析しようとする対象についてのデータから，そのデータの元となったものの性質を予測する．例として，図1にあるリンゴの識別問題を再び考えよう．今までのデータにあった，見たことのあるリンゴを与えられたなら，これはリンゴとして識別できる．しかし，データにあったリンゴと形状は同様だが，色が全く異なる青いリンゴではどうだろうか？このように見たり，経験したりしたこともない場合にも対処することが「汎化」である．そして，リンゴでないものをリンゴと識別してしまったりする誤りの程度のことを機械学習での「誤差」という．すなわち，汎化誤差とは見たこともない場合についての誤りの程度ということである．

この汎化誤差をできるだけ小さくすることが機械学習の目標であるのだが，これは容易ではない．なぜなら，機械学習の扱う問題が不良設定問題と呼ばれるものだからである．この逆は良設定問題といい，例えば素数を見つけるといった問題であり，見つけた数が素数かを検証する規準が明確である．それに対し，リンゴであるということは，全てのリンゴのデータを集め尽くすことはできないので，規準が不明確で形式的に厳密には検証できない．機械学習を利用する場合には，その結果になんらかの不確実性があることを念頭におく必要がある．

このことは，観測した事実を一般的な知識に拡大解釈する帰納論法の限界であるため人間でも問題になる．例えば，ニュートン力学ではほぼ光速である場合や量子の振る舞いを説明できないので，相対性理論や量子力学が必要になったのは，この限界によるものである．

5.2 ノーフリーランチ定理

ノーフリーランチ定理[17]は，ある予測問題について手法AがBより汎化誤差に関して性能が良かったとしても，手法BがAより良くなるような別の予測問題が必ず存在することを示す．どの手法も他の手法より常によいということはあり得ないことになり，多くの機械学習手法を考案する必要が生じる．逆に，解こうとする予測問題について事前に情報があれば，それを活かした手法が有利になるので，問題に合わせて手法を構築したり選択することが重要になる．

このノーフリーランチ定理のため，機械学習を用いるには，解こうとする問題についての専門的な知識も必要になる．例えば，日本語で文を単語に分ける問題のことを形態素解析という．この形態素解析は，当初は専門家が言語学上の知見を計算機で処理できるように手作業で変換していた．しかし，様々な文脈に対応できるようにしていく過程で，この作業は人手で行うには複雑になりすぎてしまった．そこで，専門家が知見を計算機に直接与えるのではなく，知見に基づいて文を単語に分けたデータを準備し，機械学習技術を適用する方法が新たに開発された．このように，機械学習でも専門的な知見は依然として必要になる．しかし，その知見を発見的で経験的な手段により直接的に適用するのではなく，データの整備や結果の分析といった形で機械学習を通じて活用することになる．

5.3 醜いアヒルの子の定理

醜いアヒルの子の定理[16]は，ノーフリーランチ定理とならんで，機械学習の適用範囲に重要な示唆を与える．この定理は，対象を表現している全ての特徴を同等に重要とみなす限り，純粋に形式的な観点のみだけでは，他より類似している対象の集まりというものは存在しえないことを示す．逆にいえば，類似した対象が集まったクラスという

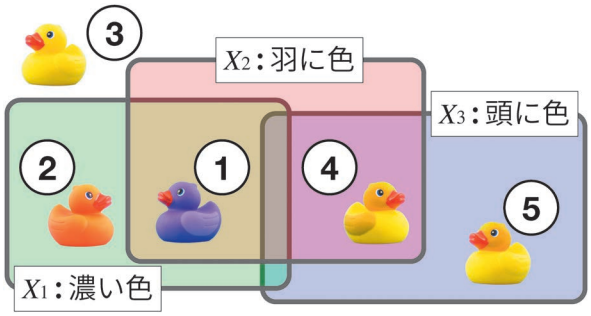

図6　アヒルの子の表現例.

ものを実世界で見いだしているならば，対象のある特徴を重視したり，軽視したりしているということであり，どの特徴を重視したり軽視したりするかは形式的な判断の範疇の外で決めているということである.

ここでは定理の概要を直感的に記す．図6において，①は醜いアヒルの子であり，他は普通のアヒルである．アヒルの子は，三つの特徴，X_1：濃い色か，X_2：羽は違う色か，X_3：頭は違う色かという3種類の特徴で表現するものとする．もし一対の対象が，他の対より似ているのであれば，より多くの特徴が共通であると仮定しよう．ここで，①と②では一方が醜いアヒルの子でもう一方は普通のアヒルの子であるが，X_2が異なるだけである．一方で，どちらも普通のアヒルの子同士である④と⑤もやはりX_2のみが異なるだけである．すなわち，これら二つの対は特徴の点からすると同じくらい似ているということである．このことはどのアヒルの子の対についても成り立つ，すなわちどの対象対の間の類似度も同じになってしまう．このように，純粋に形式的な観点からはどの対象の対も同様に類似していることを述べている.

この定理により，対象のある側面を重視し他を無視するという主観的規準なくしては，分類などの判断はコンピュータも人間もできない．また，特徴選択や次元削減など，一部の特徴を特に重視する操作が機械学習にとって本質的であることをこの定理は示唆している.

6.　機械学習活用の難しさ

ここでは機械学習手法を用いた問題解決という工学的側面についてふれたい．前節で紹介した基本概念は，当然ながら手法を使う場合にも制限をもたらすため，機械学習は銀の弾丸とはならず，その利用には困難を伴う．そうした，機械学習を活用する上での難しさをここでは3種類挙げる.

基本的なこととして，人間が達成したい課題を機械学習で良くしたい指標と一致させなくてはならない．しかし，利用者が達成したい目標を明示的に把握できていない場合が多いなどの理由で，一致させるのは難しい．これが一つ目の問題である．利用者が問題を明確に把握できていないと述べたが，そもそも問題が解消できたかどうかが不明瞭な問題を扱うのが機械学習でもある．この，解くべき問題の不明確さが二つ目の問題である．三つ目は，機械学習を適用するにはデータを集める必要があるが，利用者が解決したい問題を解くのに必要なデータを過不足なく集めるのは難しいという問題である．これらの点について順に紹介しよう.

一つ目は，目標の定式化の難しさである．機械学習は，実際に解決したい課題の達成度指標を良くするものである．このため，機械学習の利用者は，解決したい問題の目標を十分に把握し，その目標が達成されたときに良くなるような指標を形式的に定める必要がある．推薦システムの例を挙げよう．推薦システムは，ネットで買い物をするときに，顧客が好みそうなものを予測して提示したりするために用いられている．しかし，推薦システムの提示する商品が不可解であったりなど，何かしら不満を感じることはないだろうか？　システムの内部では，過去の購買や閲覧の記録に基づき，購入する可能性の高さを機械学習を用いて予測している．本来は顧客の満足度を最大化したいが，これを直接的に形式的指標で表すことはできないため，購入の可能性というやや違う量で代用しているわけである.[9] これを本来の目標である満足度により近づくように，データをさらに検証しつつ調整してゆくのは容易な作業ではない．こうした調整を行うのが狭義のデータ・サイエンティストという職業である.

二つ目は，問題が不良設定であることに由来する難しさである．形式的な問題は，公理を定めれば，解くべき問題は明確に定義できる．それに対し，5.1節で述べたように，機械学習が扱うのは，明確には定義できない不良設定問題と呼ばれる問題である．例えば，画像を見せたときに，そこにチーズが写っているかどうかは，「チーズっぽさ」という量を扱う必要がある.[2] 点でしか見えないほど遠方に写っているチーズをチーズといえるのかとか，既にピザの一部となったチーズはここでチーズに含めるのかといった曖昧な条件が無限に存在し，「チーズっぽさ」は明確には定義できない．このような不良設定問題では，明確な定義の代わりに例示をするしかなく，機械学習を用いて問題を解いたとしても何らかの不確実性が残ることは避けられない．この不確実性を前提とした利用には，やはり困難が伴う.

三つ目は，適切な訓練データを集めることの難しさである．機械学習は，基本的にデータからの帰納にほぼ完全に依存しているため，利用者が解決したい問題にとって過不足のない情報を含んだデータを準備しなくてはならない．不適切なデータとなってしまう原因としてleakageと標本選択バイアスを紹介しよう．leakageとは，実際に運用するときには使えない情報を機械学習の訓練データに含めてしまうことである.[11] 例えば，マンモグラフィデータからの癌予測のコンペティションで，状態に応じて患者にID番号を割り振る医療機関が多く，このID番号を利用することで好成績を得ていた．しかし，このID番号から得た医療機関の情報は実際にこの手法を使うときには得られな

い情報であった．標本選択バイアスは，これから予測したい対象と，訓練データを集めた対象の集団が異なっているため，的確に予測できなくなる問題である．[18] 例えば，ローンの可否を予測する場合には，実際にローンを認めた人に関してのみ，ローンを返せたかどうかの情報が得られる．これを訓練データとして用いると，ローンを認めなかった人の情報は欠落しており，的確な予測ができなくなる．こうした問題を回避するには，関連する状況や，実際に解決したい問題に応じた対応が要求される．

機械学習を新しい問題に適用するには，以上のような難しさがあるのである．機械学習の特性，解決すべき問題の目標，そしてデータの状態を十分に把握して，適切に問題解決に利用しなくてはならない．そのため，機械学習はソフトウェアにデータを入力すれば何でも問題を解決できるというものではない．

7. 機械学習の自然科学での活用

前節で述べたように，機械学習の適用には考慮すべき点がいくつもあるが，それでも，4章で紹介したここ20年の進展によりその応用範囲は広がっている．計算機を用いたデータ分析技術を活用すると，多くのデータや多様な要素を考慮できることと，非常に膨大な情報の中から目的の情報を素早く発見できるという利点がある．こうした利点を活かした，自然科学における機械学習・データ分析の活用事例をここでは紹介したい．機械学習研究者ドミンゴ（P. Domingos）は著書 *The Master Algorithm*[4] で，自然科学の研究をブラーエ，ケプラー，ニュートンの三つに分けた見方を紹介している．実験データを集めるブラーエの段階，経験則を発見するケプラーの段階，そしてその経験則の背後の理論を見つけ出すニュートンの段階である．これらの段階について順に見て行こう．

実験データを集めるブラーエの段階は最も機械学習の利用が進んでいるといってよいであろう．まずは，南極点のニュートリノ観測施設 IceCube についてである．[1] 観測データの量は膨大であり全てのデータを通信回線で送信することはできない．そこで，信号が含まれている可能性の高い部分だけを機械学習を活用して高速により分けて通信回線で転送し，残りはハードディスクを船で輸送している．材料工学では，所望の性質を備えた物質を見つけ出すのに，試験的な材料を生成し，その性能を計測することを繰り返す必要がある．これを効率化するために，ベイズ最適化と呼ばれる方法が使われ始めている．[14] これは，状況の不確実性と有望さのバランスを考慮しつつ，試験材料を選択することを可能にするものである．

実験データにあてはまる経験則を見つけるのが次のケプラーの段階である．こうした探索は計算機に適した作業であるため，経験則の発見の研究は比較的古くから行われている．例えば，文献15は，物理学でいう次元の制約を考慮しつつ，データを説明する経験則を発見する研究である．実験データが理論に当てはまるかを検証するのにも，もちろんデータ分析技術はかかせない．ヒッグス粒子の質量特定にまつわる事例を紹介しよう．[3] 10^8 個ものS/N比の悪いセンサーのデータから，粒子の質量などを特定するのは容易な作業ではない．予測を扱う機械学習というより，検証のための技術ではあるが，2000年代のサンプリングや変分推定の機械学習技術が広く利用されている．もし仮にデータが10年前に存在しても，これらの検証技術がなかったため，ヒッグス粒子の確認はできなかったのではないかと私は考えている．

最後は経験則を統一的に説明する理論の構築であるニュートンの段階である．この部分は，ミクロからマクロまでのどの視点に立脚するのかといった選択の問題もあり，機械学習で完全に自動化するというのは無理であろう．しかし，4色問題の証明において，非常に多数の場合分けを扱うために計算機が利用されたように，理論構築の過程で様々な機械学習技術を活用していくことは避けられないのではないだろうか．例えば，生命科学では膨大な文献から知識を抽出し，体系的に人間に提示する技術などが研究されている．いずれにせよ，機械学習を含めた情報技術を活用することで，中心となる思索により労力を集中できるようになるだろう．

8. おわりに

自然科学での拡大した観測規模や膨大な学術情報を扱うには計算機科学，中でもデータ分析技術の利用は欠かせないものとなるのは確かだろう．だが，機械学習を用いた分析を受け入れるのに何かしら抵抗感がある人々がいるかもしれない．締めくくりとして，自然科学とデータ分析の関わりについて，私の戯言にお付き合いいただきたい．

まず，機械学習で見つけた対応関係は，物理法則による系の記述とは違って，納得できないと思うかもしれない．確かに，統計学者ボックス（G. E. P. Box）の著名な言葉“Essentially, all models are wrong, but some are useful”にあるように，全ての仮説は，それが真であるとはいえない．一方で，これらの仮説が系の何かしらの記述といえることも確かである．これで納得してもらえるのかは分からないが，このように考えてはどうだろうか．例えば，摩擦について，マクロな立場からは摩擦係数で記述できるが，ミクロな立場からは分子間力などを考慮した記述もできる．こうした記述の一つと機械学習の結果を捉えて，利用できるところで利用していけばよいのではないだろうか．例えば，7節の IceCube の例において，ニュートリノの信号とそうでないものを分離する手法は物理法則を反映したものではないが，実際にデータをより分けて実験を進めるためには有用である．このように，それぞれの研究で受け入れられる部分で，有用な新技術として役立ててもらえばと，私は考えている．

また，観測データを集める人たちと，データを分析する

人たちの間にもすれ違いがあるように思う．データを集める人たちはデータ自体に愛着があり，興味深い結果をなんとしても得たいと思うだろう．一方で，データを分析する人たちは，分析手法に愛着があり，より適切に手法を適用すべきと考えるだろう．しかしながら，適切な手法で興味深い結果が得られることが，自然科学の進展には重要である．興味深い結果がでなくても，データ分析の過程で得た知見をデータを集める人たちにフィードバックすることはできる．逆に，データの実験条件などの情報を綿密に聞き出しモデルに反映させていくことは，興味深い結果に近づくためには重要である．データがなければ分析はできないし，分析しなければデータは自然科学の知識とはならないので，自然科学の進展という共通の目的に向かって協力していかなければならない．

締めくくりとして，機械学習の現状を俯瞰し，今後を展望するための資料を挙げておく．機械学習や人工知能の現在に至るまでの経緯についてはニルソン（N. J. Nilsson）の文献10がオンライン上で電子版が公開されている．機械学習の長期的展望については文献4があり，また国際会議の基調講演[2,7,8]も興味深い．以上，本稿が機械学習について知るための一助となれば幸いである．

参考文献

1）M. Boerner, T. Ruhe, K. Morik, and W. Rhode, in *Proc. of the ECML PKDD 2015*, *Part III*（2015）pp. 208–212—Discovering neutrinos through data analytics.
2）L. Bottou, Two high stakes challenges in machine learning, The 32nd Int'l Conf. on Machine Learning, Invited Talk, 2015.
3）K. Cranmer, Machine learning and likelihood-free inference in particle physics, The 30th Annual Conference on Neural Information Processing Systems, Keynote, 2016.
4）P. Domingos, *The Master Algorithm*（Basic Books, 2015）.
5）H. Geffner, Model-free, model-based, and general intelligence, The 27th Int'l Joint Conf. on Artificial Intelligence, Invited Talk, 2018.
6）I. Goodfellow, Y. Bengio, and A. Courville, *Deep Learning*（MIT Press, 2016）.
7）R. Kohavi, Online controlled experiments: Lessons from running a/b/n tests for 12 years, The 21st ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining, Keynote, 2015.
8）Y. LeCun. Predictive learning, The 30th Annual Conference on Neural Information Processing Systems, Keynote, 2016.
9）S. M. McNee, J. Riedl, and J. A. Konstan, in *Proc. of the SIGCHI Conf. on Human Factors in Computing Systems*（2006）pp. 1097–1101—Accurate is not always good: How accuracy metrics have hurt recommender systems.
10）N. J. Nilsson, *The Quest for Artificial Intelligence*（Cambridge Univ. Press, 2010）.
11）C. Perlich, S. Kaufman, and S. Rosset, in *Proc. of the 17th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining*（2011）pp. 556–563—Leakage in data mining: Formulation, detection, and avoidance.
12）A. L. Samuel, IBM J. Res. Dev. **3**, 211（1959）—Some studies in machine learning using the game of checkers.
13）D. Silver, Mastering the game of go with deep neural networks and tree search, The 25th Int'l Joint Conf. on Artificial Intelligence, Invited Talk, 2016.
14）津田宏治，人工知能技術による機能分子・物質設計，第19回情報論的学習理論ワークショップ，2016.
15）鷲尾　隆，元田　浩，人工知能学会誌 **15**, 681（2000）—スケールタイプ制約に基づく科学的法則式の発見.
16）S. Watanabe, *Knowing and Guessing–Quantitative Study of Inference and Information*（John Wiley & Sons, 1969）.
17）D. H. Wolpert, Neural Computation **8**, 1341（1996）—The lack of a priori distinctions between learning algorithms.
18）B. Zadrozny, in *Proc. of the 21st Int'l Conf. on Machine Learning*（2004）pp. 903–910—Learning and evaluating classifiers under sample selection bias.
19）Z.-H. Zhou, Artificial Intelligence **143**, 139（2003）—Book review: Three perspectives of data mining.

著者紹介

神嶌敏弘氏： 推薦システム，データマイニング，機械学習に関する研究に従事．現在は機械学習による予測に公平性の観点を導入する研究に取り組む．

（2018年8月10日原稿受付）

Machine Learning: What's Changing and What's Unchanged

Toshihiro Kamishima

abstract: This article introduces the recent changes of machine learning and the unchangeable principles of machine learning. First, after showing the definition of machine learning（ML）, we describe the research area of ML. We overview these sub-areas from the viewpoints of validity, effectiveness, and efficiency. Then, as a changing part of ML, we briefly show the recent progress of ML. And, we describe three basic principles of ML. Finally, we show the difficulty of using ML techniques, and examples of application of the ML techniques to the natural science area.