

Science 2.0: AI 와 과학적 방법론의 공진화

Lior Horesh (IBM Research) 기조강연 요약 – SIAM Annual Meeting (2025.07.29)

정리: 김재경 (KAIST)

Lior Horesh (IBM Research) 박사가 "Science 2.0 - Evolving the Scientific Method Through Learning and Reasoning Symbiosis" 주제로 첫 기조 강연을 하였습니다.

이 강연의 핵심은 전통적인 연역적 과학 방법론과 현대적인 데이터 중심 AI 기술의 간극을 좁히는 것에 있었습니다.

- 전통적 방식: 깊은 통찰력과 전문성이 필요했지만, 수작업으로 이루어져 시간 소모적이고 확장성이 떨어졌습니다. 결과물은 해석 가능하고 보편적이었죠.
- 데이터 중심 AI: 빠르고 자동화된 모델 개발이 가능하지만, 종종 '블랙박스' 모델로 해석이 어렵고, 방대한 데이터가 필요하며, 학습되지 않은 상황에서는 예측력이 떨어지는 한계가 있었습니다.

Lior Horesh 박사님은 이러한 한계를 극복하고 과학적 발견을 가속화하기 위한 새로운 방법론을 제시했습니다.

- 자유 형식 심볼릭 모델 발견: AI 가 정해진 구조 없이 새로운 수학적 공식이나 물리 법칙과 같은 '심볼릭 모델'을 직접 찾아내도록 합니다. 이는 "AI-Descartes" 연구의 핵심입니다.
- 자동화된 정리 증명: 발견된 가설이나 모델이 기존의 과학 이론이나 원칙과 일관성을 유지하는지 수학적으로 검증하는 기술을 활용합니다. 이를 통해 모델의 신뢰성을 높입니다.
- 통계적 AI 와 상징적 AI 의 통합: 궁극적으로 "AI-Hilbert" 연구처럼, 데이터 기반의 통찰력과 형식적인 논리적 추론을 매끄럽게 결합하여 과학적 방법론 자체를 진화시키는 것을 목표로 합니다.

[AI-Descartes]

Combining data and theory for derivable scientific discovery with AI-Descartes

Cristina Cornelio, Sanjeeb Dash, Vernon Austel, Tyler R. Josephson, João Gonçalves, Kenneth L. Clarkson, Nimrod Megiddo, Bachir El Khadir, Lior Horesh

Nature Communications

Published online: 12 April 2023

DOI: [10.1038/s41467-023-37236-y](https://doi.org/10.1038/s41467-023-37236-y)

AI-Descartes.github.io/

Abstract:

Scientists aim to discover meaningful formulae that accurately describe experimental data. Mathematical models of natural phenomena can be manually created from domain knowledge and fitted to data, or, in contrast, created automatically from large datasets with machine-learning algorithms. The problem of incorporating prior knowledge expressed as constraints on the functional form of a learned model has been studied before, while finding models that are consistent with prior knowledge expressed via general logical axioms is an open problem. We develop a method to enable principled derivations of models of natural phenomena from axiomatic knowledge and experimental data by combining logical reasoning with symbolic regression. We demonstrate these concepts for Kepler's third law of planetary motion, Einstein's relativistic time-dilation law, and Langmuir's theory of adsorption. We show we can discover governing laws from few data points when logical reasoning is used to distinguish between candidate formulae having similar error on the data.

[AI-Hilbert]**Evolving scientific discovery by unifying data and background knowledge with AI Hilbert**

Ryan Cory-Wright, Cristina Cornelio, Sanjeeb Dash, Bachir El Khadir, Lior Horesh

Nature Communications **Published online:** 14 July 2024

DOI: [10.1038/s41467-024-50074-w](https://doi.org/10.1038/s41467-024-50074-w) AI-Hilbert.github.io/

Abstract:

The discovery of scientific formulae that parsimoniously explain natural phenomena and align with existing background theory is a key goal in science. Historically, scientists have derived natural laws by manipulating equations based on existing knowledge, forming new equations, and verifying them experimentally. However, this does not include experimental data within the discovery process, which may be inefficient. We propose a solution to this problem when all axioms and scientific laws are expressible as polynomials and argue our approach is widely applicable. We model notions of minimal complexity using binary variables and logical constraints, solve polynomial optimization problems via mixed-integer linear or semidefinite optimization, and prove the validity of our scientific discoveries in a principled manner using Positivstellensatz certificates. We demonstrate that some famous scientific laws, including Kepler's Law of Planetary Motion and the Radiated Gravitational Wave Power equation, can be derived in a principled manner from axioms and experimental data.

이러한 접근 방식은 단순히 데이터에 모델을 맞추는 것을 넘어, 새로운 과학적 법칙을 발견하고, 모델의 견고성과 해석 가능성을 높이며, 필요한 데이터의 양을 줄이는 데 기여합니다.

Lior Horesh 박사님의 강연은 AI가 단순한 분석 도구를 넘어, 우리가 우주를 이해하고 법칙을 공식화하는 근본적인 과정에서 강력한 파트너가 될 수 있음을 보여주는 비전을 제시했습니다. 미래의 과학적 발전이 기대됩니다.

p.s. Symbolic regression의 문제점은 너무 느리다는 것인데... 이분은 Algebraic geometry의 기본 개념들을 이용해서 searching 공간을 제약함으로써 효율성을 극대화하는 점이 재밌었습니다.