

2026 / 3 / 8 知の協奏: AI x 物理

# 物理のためのAI、AIのための物理

## AI for Physics and Physics for AI

岡野原 大輔 / Daisuke Okanohara

Preferred Networks Inc.

Matlantis Corp.



# 自己紹介: 岡野原大輔 / Introduction: Daisuke Okanohara

Preferred Networks 共同創業者 代表取締役社長

Matlantis 代表取締役社長

X (Twitter): @hillbig



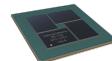
LLM PLaMo



原子レベルシミュレーター



AI半導体



MN-Core



MN-Core L1000  
for LLM inference



# 生成能力の驚異的な進化速度

## Remarkable Pace of Progress in Generative Capability

わずか10年間で生成能力は驚異的に進化した  
(テキスト、画像、動画、音声、化合物・ロボット制御 など)

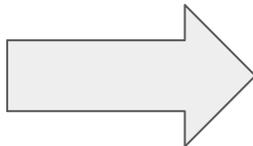
(生成データ) (学習データ)



数字の生成



動物の画像生成  
(2013年頃の生成技術)



### 進化の要因

- ・計算資源・学習データが**数百倍**に増加
- ・AI研究の進展
- ・年間10万報の研究論文



群衆の画像生成 \*  
**拡散モデル** / 2023年

10年前は、簡単な数字でさえ生成が難しく  
複雑な構造を持った対象の生成は困難だった

10年で非常に複雑なシーンを誰でも生成できるように

\* Yuki Homma @y\_\_homm

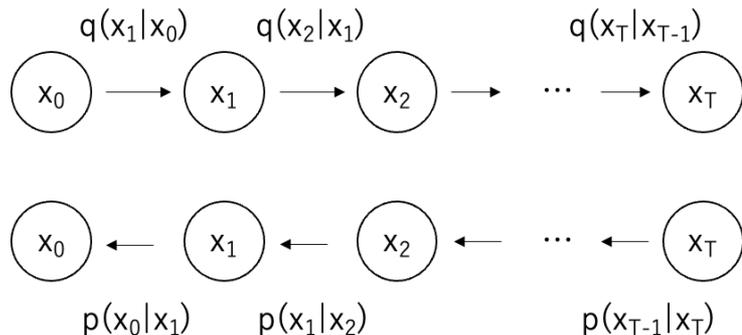
[https://twitter.com/y\\_\\_homm/status/1636186478899494912](https://twitter.com/y__homm/status/1636186478899494912)

# 拡散モデル / Diffusion Models [Sohl-Dickstein+ 2015]

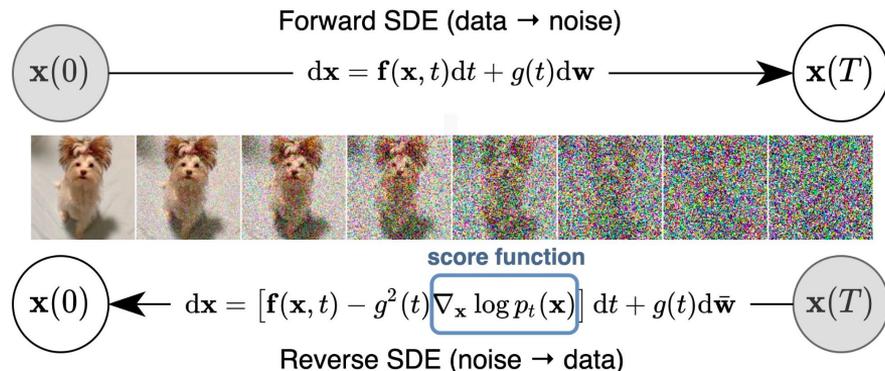
物理とAIが  
融合した例

- 非平衡熱力学を源流に持つ、深層生成モデルの一種
  - 深いVAE [Max Welling+ 2013]
- データにノイズを徐々に加えていく拡散過程を逆向きに辿る逆拡散過程（生成過程）によって生成モデルを定義する
- 画像、動画、ロボット制御、化合物の生成手法の中心

拡散過程 / 推論過程



逆拡散過程 / 生成過程



# 物理のための AI

## AI for Physics

# AIは科学の構造を再編する

## AI is Reshaping the Structure of Science

AIは表現形式、推論方式、探索空間を再編する

近代科学のループ

理論

実験

計算

3. 探索空間の再編



2. 推論方式の再編



1. 表現形式の再編



AI

### 量子多体系

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) \in L^2(\mathbb{R}^{3N})$$

波動関数は3N次元空間上の関数

### 統計力学

$$Z = \int_{\mathbb{R}^{3N}} e^{-\beta H(x)} dx$$

分配関数は3N次元積分

### 場・流体

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{N}[u]$$

状態空間は関数空間  
(本質的に無限次元)

物理の困難性の源は次元の爆発にある

# 1. 表現の再編

## Reconfiguration of Representation

量子多体系

→ニューラル波動関数

$$\Psi_{\theta}(x_1, \dots, x_N)$$

ヒルベルト空間の  
圧縮表現

統計力学

→暗黙的な分布表現

$$x \sim p_{\theta}(x)$$

サンプリング関数で  
分布を表現

場・流体

→ニューラル作用素

$$\mathcal{G}_{\theta} : u \mapsto \mathcal{N}[u]$$

場を直接学習した関数  
で表現

AIは高次元問題を有効自由度に応じた新しい表現を与える

## 2. 推論の再編

# Reconfiguring Inference

推論の簡約化

Schrödinger (1926)

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

固有値問題とし波動関数を求める

**計算量**  $\sim \exp(N)$   
**N~10の問題しか現実的に解けない**

密度汎関数法 DFT  
(1964,1965)

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{\text{eff}}[\rho]\right)\psi_i = \epsilon_i\psi_i$$

電子状態を反復的に解く

**計算量**  $\sim O(N^3)$   
**N~数百 が数時間**

機械学習原子間ポテンシャル  
(2010s~)

$$E_{\theta}(R) \approx E_{\text{DFT}}(R)$$

学習されたモデルで評価する

**計算量**  $\sim O(N)$   
**N~数千 がミリ秒**

## 2. 推論の再編 Matlantisの例

### Reconfiguring Inference - The case of Matlantis

- 単一の学習済み関数で96元素を統一的に扱う
- 6000万構造データから学習
- 材料種に依存依存しない統一的なエネルギー表現を実現
- 空間・時間スケール拡張
  - 数千原子
  - 長時間MD・希少イベント探索が可能に

A periodic table of elements where supported elements are highlighted in orange and unsupported elements are in white. The supported elements include H, He, Li, Be, B, C, N, O, F, Ne, Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl, Ar, K, Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Ge, As, Se, Br, Kr, Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd, In, Sn, Sb, Te, I, Xe, Cs, Ba, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au, Hg, Tl, Pb, Bi, Po, At, Rn, Fr, Ra, Rf, Db, Sg, Bh, Hs, Mt, Ds, Rg, Cn, Nh, Fl, Mc, Lv, Ts, Og, La, Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Ac, Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No, Lr. A blue plus sign icon is located at the bottom right of the table.



**1ns MDシミュレーション (10k原子)**

**DFT: 1000年 → MLIP: 30日**

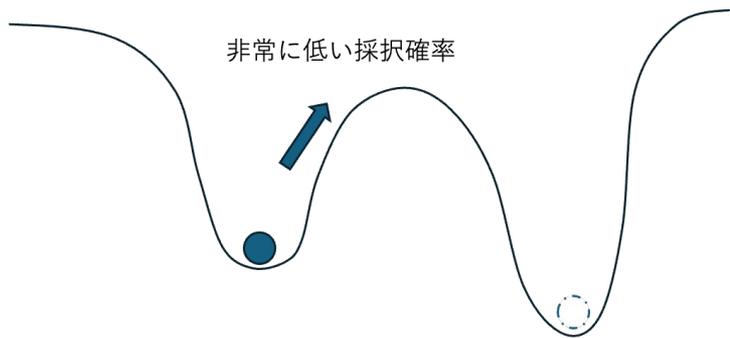
# 3. 探索の再編

## Reconfiguring Exploration

### 従来の探索

- 高次元エネルギー地形上の探索
- MCMC・MDは局所解にトラップ
- 目的や制約は事後評価

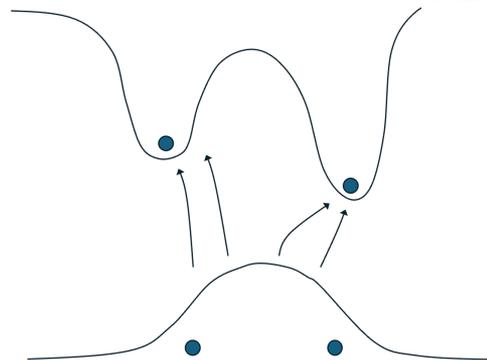
$$R \sim e^{-\beta E(R)}$$



### 生成モデルによる探索

- 潜在空間から構造を生成
- さらに条件付けの場合、探索空間を事前に制約できる

$$R = G_{\theta}(z | c)$$



生成モデルは探索問題を条件付け生成問題に帰着する

# AIは科学の三層構造を再編する

## AI reconfigures the Three-Layer Architecture of Science

1. 表現の再編

$$f(x) \rightarrow f_{\theta}(x) \quad \text{学習した表現で近似}$$



2. 推論の再編

$$\text{Solve } f \rightarrow \text{Learn } f_{\theta} \quad \text{学習された関数}$$



3. 探索の再編

$$R \sim e^{-\beta E(R)} \rightarrow R \sim p_{\theta}(R | c) \quad \text{空間探索} \rightarrow \text{条件付き生成}$$

表現の再編は推論を変え、推論の再編は探索を変える

# AIのための物理 Physics for AI

本発表は以下を元にしていきます

D. Okanohara “A Thermodynamic Theory of Learning I: Irreversible Ensemble Transport and Epistemic Costs”, arXiv:2601.17607

D. Okanohara “A Thermodynamic Theory of Learning Part II: Critical Period Closure and Continual Learning Failure”, arXiv:2602.07950

# 学習はパラメータ空間の非平衡過程である

## Learning as a Nonequilibrium Process in Parameter Space

$\theta$  : モデルの内部状態 (重み)

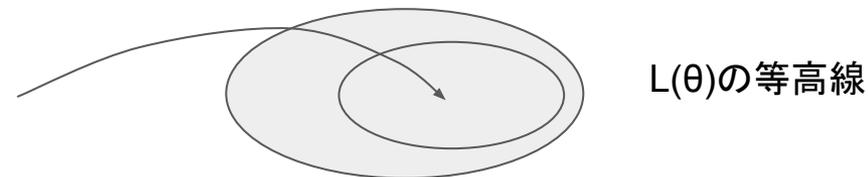
$L(\theta)$  : 目的関数 (予測誤差など)

学習は $\theta$ を更新して、 $L(\theta)$ の低い領域へ  
流す操作とみなせる

$$d\theta_t = \underbrace{-\nabla L(\theta_t) dt}_{\text{ドリフト}} + \underbrace{\sqrt{2T} dW_t}_{\text{ノイズ}}$$

第1項: 勾配に沿った緩和(ドリフト)

第2項: 学習ノイズによる揺らぎ(有効温度 $T$ )



AIは大きく成功しているが、学習の仕組みはまだ理解できていない

何が起きているか・なぜ継続学習が難しいか・原理・原則は？

**学習の仕組みを理解するため、学習を非平衡過程として捉える**

# 単一の学習軌道から分布へ

## From a Single Learning Trajectory to a Distribution

### 通常の学習（単一軌道）

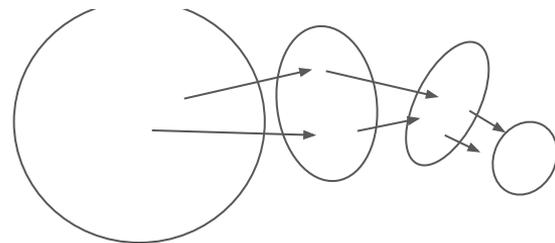
$$\theta_{t+1} = \theta_t - \eta \nabla L(\theta_t) + \text{noise}$$

1回の訓練では1本の学習軌道しかみない  
しかし、理論的にはその背後の統計集団を考えることができる

### 本研究の見方：統計集団としての学習（分布の軌道）

$$\partial_t p(\theta, t) = \nabla \cdot \left( p(\theta, t) \nabla L(\theta) \right) + T \Delta p(\theta, t)$$

パラメータ初期値 $\theta_0$ 、ノイズが異なる無数の  
学習軌道の集団を分布の時間発展として記述できる  
この分布の時間発展が、確率流として記述される



# 学習には速度限界がある

## Learning and Fundamental Speed Limits

認識論的速度限界 [Okanochara 2026a]

**学習過程で散逸が発生し、散逸は速度で決まり下限がある**

$$\mathcal{F}[q_0] - \mathcal{F}[q_1] = \Sigma_{0:1}, \quad \Sigma_{0:1} := \int_0^1 \sigma_s ds.$$

$$\Sigma_{0:1} \geq W_2(q_0, q_1)^2$$

もし学習時間を  $1/T$  にしたいなら  
損失も急速に大きくなり

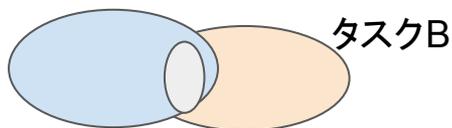
$$\mathcal{F}[q_0] - \mathcal{F}[q_1] \geq \frac{1}{T} W_2(q_0, q_1)^2.$$

**学習は無限に速くできない**

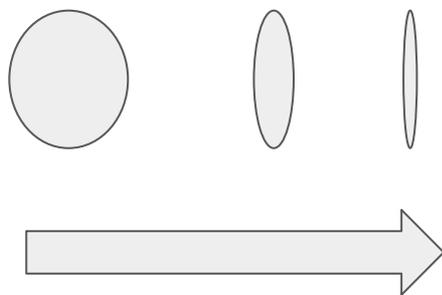
# 継続学習が困難なのは学習が非可逆だから

## Irreversibility in Learning and the Difficulty of Continual Learning

タスクAがうまくできる領域



AもBもできる領域



タスクAを学習したあと  
タスクBを学習する

実際は学習が進むにつれ、  
分布が潰れる到達可能  
領域が狭まる

なぜ継続学習が難しいか？

1. 過剰散逸で分布が潰れる
2. 一度縮んだら元に戻らない  
(学習の非可逆性)
3. 新タスクで必要な方向に進むことができない

**継続学習の困難は 学習の非可逆性で表される**

### 1. 学習ダイナミクスを分析できる

なぜ忘却が起きるのか

学習における本質的な限界は

継続学習が難しいのか

### 2. 学習設計の原理が得られる

過剰散逸を抑える設計、可到達集合を広げる設計

非平衡熱力学で培われた様々な知見を使うことができる

# AI x 物理

# 物理のための AI, AIのための物理

## AI for Physics, Physics for AI

### 物理のためのAI

表現・推論・探索空間の再編

高次元状態空間の表現

サロゲート関数による高速な推論

生成モデルによる条件付き探索

### AIのための物理

学習の熱力学的理解

学習は自由エネルギー緩和

可到達集合の制限

継続学習の幾何学的必然

AI x 物理 での様々な連携を期待される