

2025.9.9 明治学院大学  
研究会「離散的手法による場と時空のダイナミクス2025」

# 学習物理学の創成

橋本幸士

京大理  
学習物理学領域代表



# MLPhys

Foundation of "Machine Learning Physics"

## 学習物理学の創成

Grant-in-Aid for Transformative Research Areas (A)



## 物理学

自然科学で最も精密な実験場  
多階層の諸問題+数理の連携

## 機械学習

計算科学の爆発的進展分野  
社会・技術のイノベーション

# 学習物理学

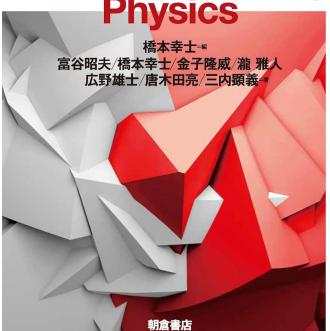
新法則の発見、新物質の開拓

機械学習と物理学の理論的手法群の統合により基礎物理学の根本課題を解決

学習**物理学**入門

Introduction to  
**Machine Learning**  
**Physics**

橋本幸士\*  
富谷昭夫 橋本幸士 金子隆威 濑 雅人  
広野雄士 唐木田亮 三内顕義\*



# 學習物理学入門

Introduction to

## Machine Learning Physics

橋本幸士=編

富谷昭夫/橋本幸士/金子隆威/瀧 雅人  
広野雄士/唐木田亮/三内頭義=著

英語版(AI翻訳)まもなく出版

朝倉書店

### 【目次】

#### A 機械学習と物理学

- A1. 線形モデル
- A2. ニューラルネットワーク(NN)
- A3. 対称性と機械学習: 置み込み・同変 NN
- A4. 古典力学と機械学習: NN と微分方程式
- A5. 量子力学と機械学習: NN 波動関数

#### B 機械学習模型と物理学

- B1. トランスフォーマー
- B2. 拡散モデルと経路積分
- B3. 機械学習の仕組み: 統計力学的アプローチ
- B4. 大規模言語モデルと科学



# 学習物理学解説bot

AKIYOSHI SANNAI が作成

学習物理学（教科書）の解説を行います。



この本の概要を  
教えてください

対称性を持つニ  
ューラルネット  
ワークとは

"PINNs"とは何か  
教えてください

拡散モデルと經  
路積分について

① 学習物理学解説bot にメッセージを送信する



ChatGPT の回答は必ずしも正しいとは限りません。重要な情報は確認するようにしてください。



# 1. 「AI × 物理学」は自然

## 1-1 機械学習と物理学の関係

## 1-2 AIは物理を解く

# 2. ノーベル賞は過去。現在何が?

## 2-1 2024年の学習物理学領域

## 2-2 研究例: 量子力学はニューラルネット

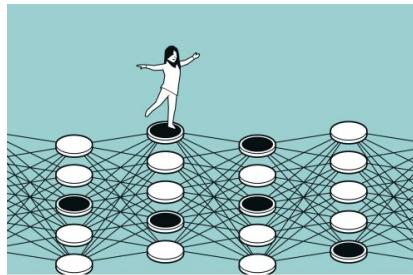
## 2-3 研究例: ニューラルネットの中の対称性

# 3. 生成科学の時代へ

# 2024年ノーベル賞がAI関連に

## ノーベル物理学賞

機械学習の  
基礎を築いた  
ことについて



John Hopfield. Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach



Geoffrey Hinton. Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach

ホップフィールド

ヒントン

## ノーベル化学賞

たんぱく質の  
構造を見破った  
ことについて



David Baker. Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach



Demis Hassabis. Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach

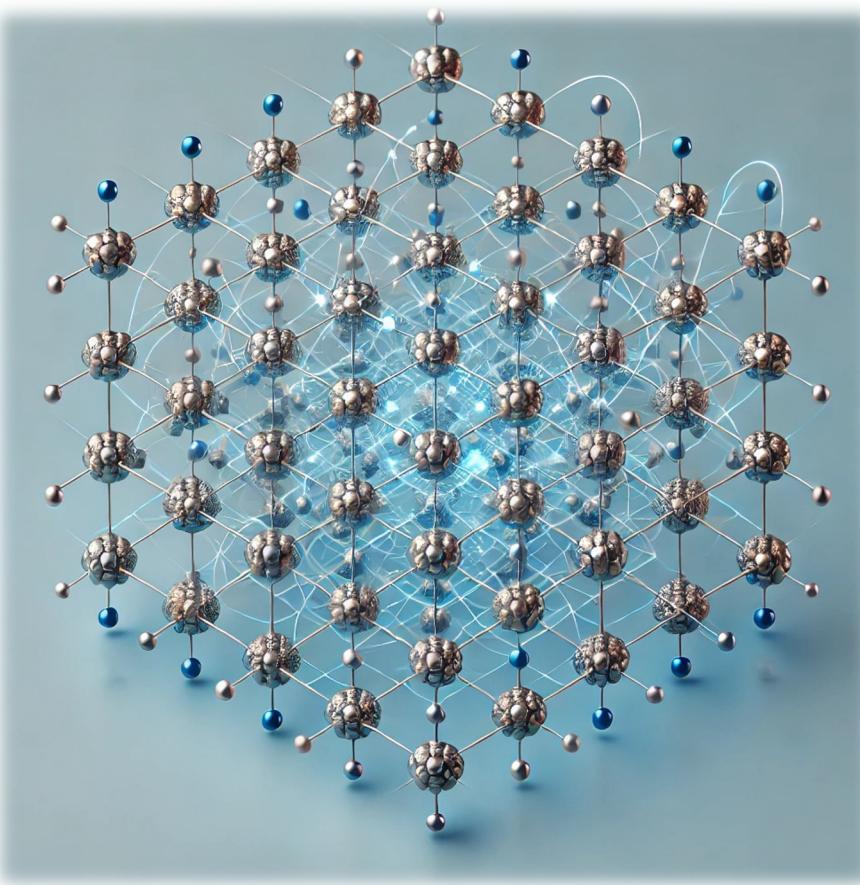
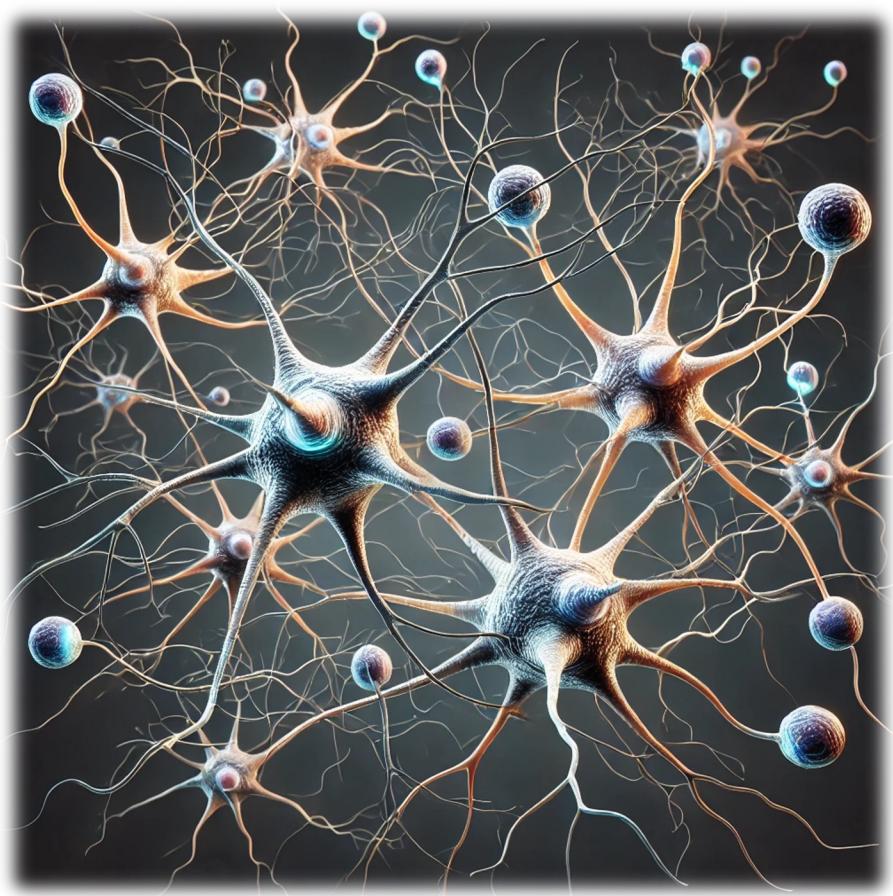


John Jumper. Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach

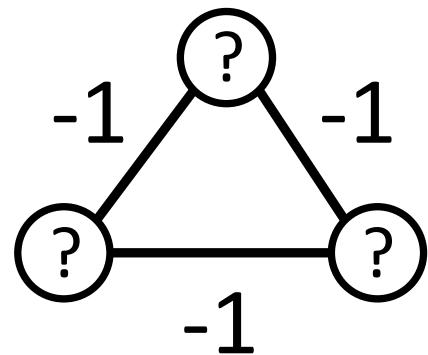
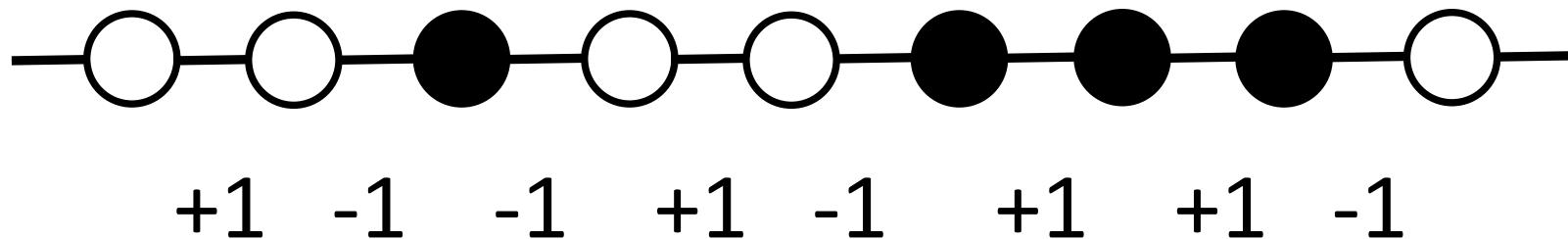
ベーカー

ハサビス

ジャンパー



# ホップフィールドモデル: 量子で記憶・想起



# 歴史を振り返る：分野別課題を数理が貫いた

物理学では分野ごとに異なる課題がある

計算物理学

: 量子経路積分実行

素粒子物理学

: 新理論探索

原子核物理学

: 精密計算、手法開発、新現象開拓

宇宙物理学

: 現象記述、宇宙史と起源解明

物性物理学

: 創發現象発見、有効自由度探索

貫けるのは  
数理体系

例) トポロジー (2016年ノーベル賞)

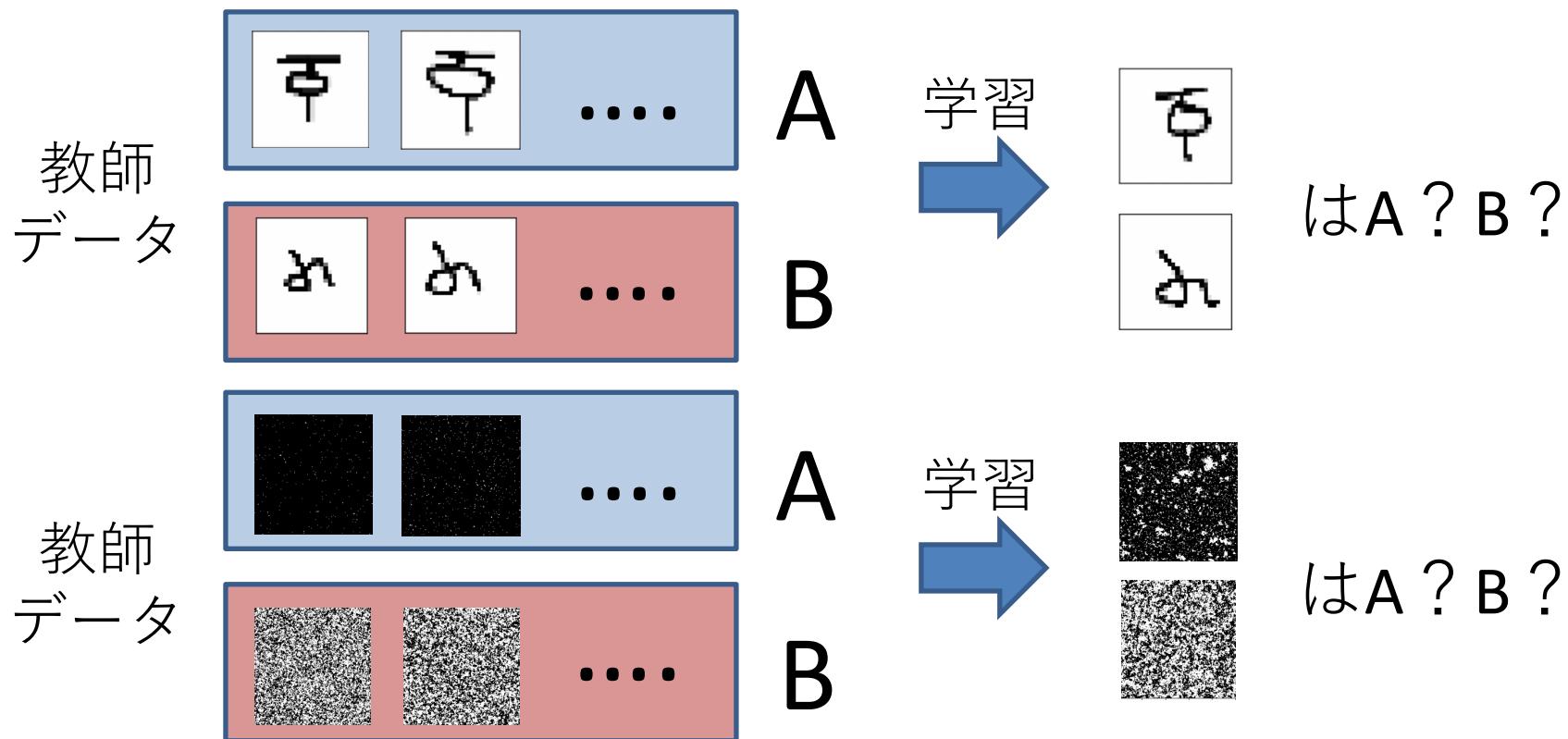
例) 量子情報 (2022年ノーベル賞)

例) 機械学習 (2024年ノーベル賞)

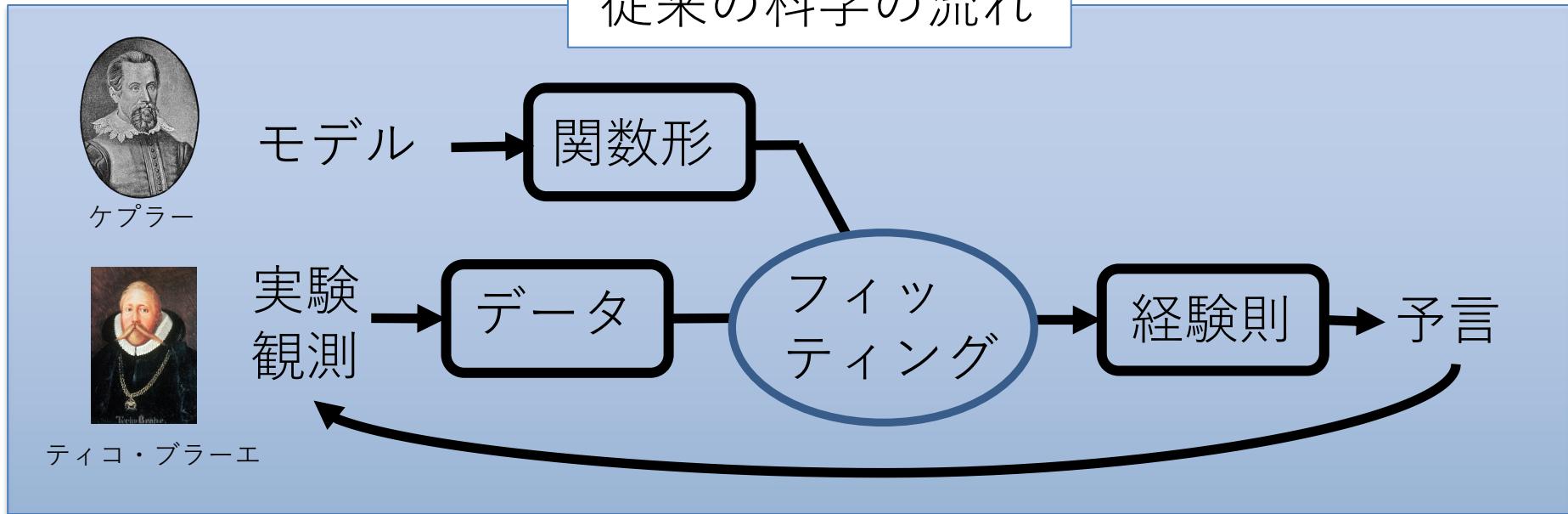
# 機械学習とは？ 最適化の数理体系

教師あり学習とは：

教師データの学習で  
関数を最適化し  
未知データを予測



# 機械学習は科学に深くフィット、加速する



AI科学

- 教師付き学習 : 関数形無制限フィッティング
- 教師なし学習 : データの自動分類
- 強化学習 : 試行錯誤プロセスの自動化
- 生成模型 : 自動モデル・自動実験・自動推論

# 1. 「AI × 物理学」は自然

## 1-1 機械学習と物理学の関係

### 1-2 AIは物理を解く

# 2. ノーベル賞は過去。現在何が?

## 2-1 2024年の学習物理学領域

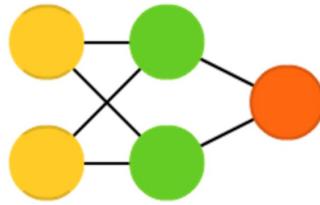
### 2-2 研究例: 量子力学はニューラルネット

### 2-3 研究例: ニューラルネットの中の対称性

# 3. 生成科学の時代へ

# 機械学習 = 未知関数を自動的に求めること

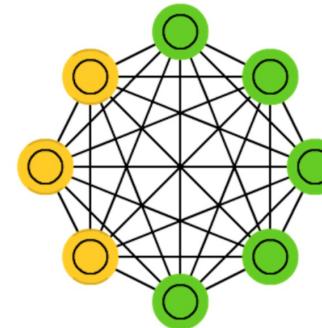
## ニューラルネットワーク = 假定される関数形



パーセプトロン 模型

[Rosenblatt 1958]

[Rumelhart, McClelland 1986]



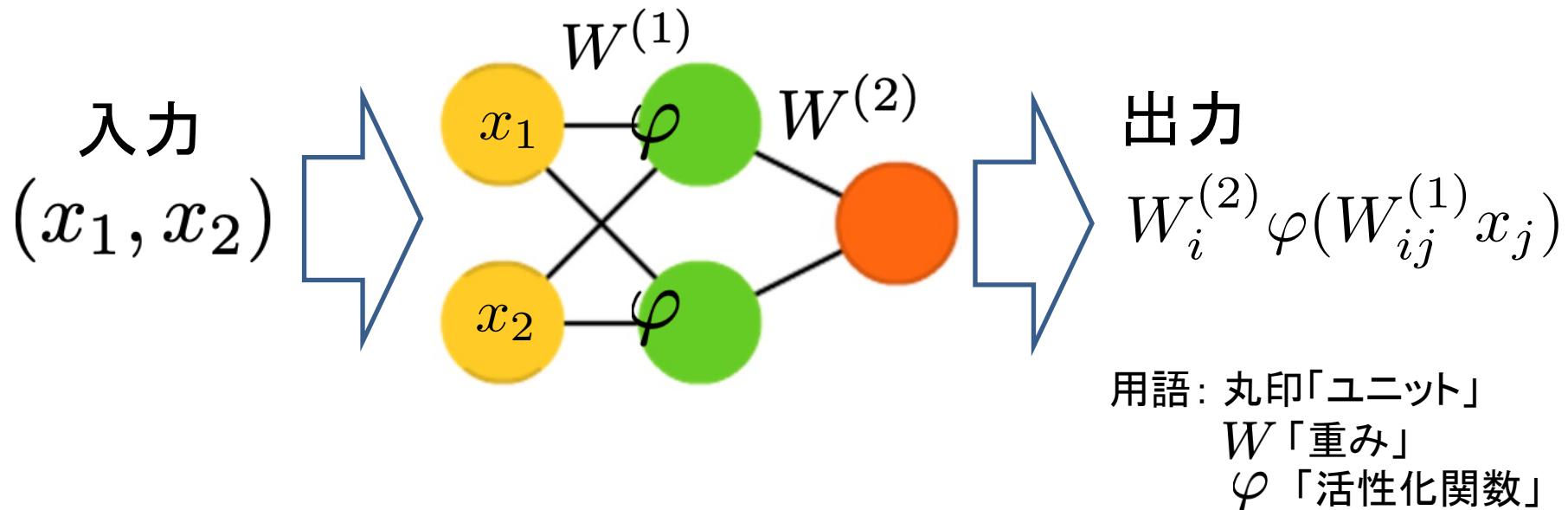
ボルツマンマシン

[Ackley, Hinton, Sejnowski 1985]

安心：万能近似定理

多層・多ユニットのニューラルネットワークは  
あらゆる関数を近似できる [Cybenko 1989] [Roux, Bengio 2008]

# ニューラルネット関数はデータで最適化される



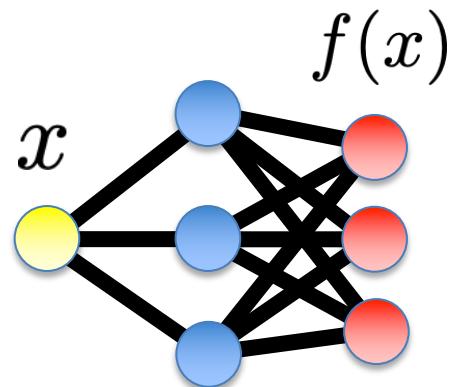
学習 = 与えられたデータを再現する関数を得ること

- 1)  $\{(入力値 X, 出力値 Y)\}$  データセットを用意
- 2)  $W$ を変更していくことで、誤差関数を減らす

$$E \equiv \sum_{\text{data}\{X, Y\}} |Y - W^{(2)} \varphi(W^{(1)} X)|$$

# ニューラルネットは物理を解く

我々は新しい関数基底を手に入れた！

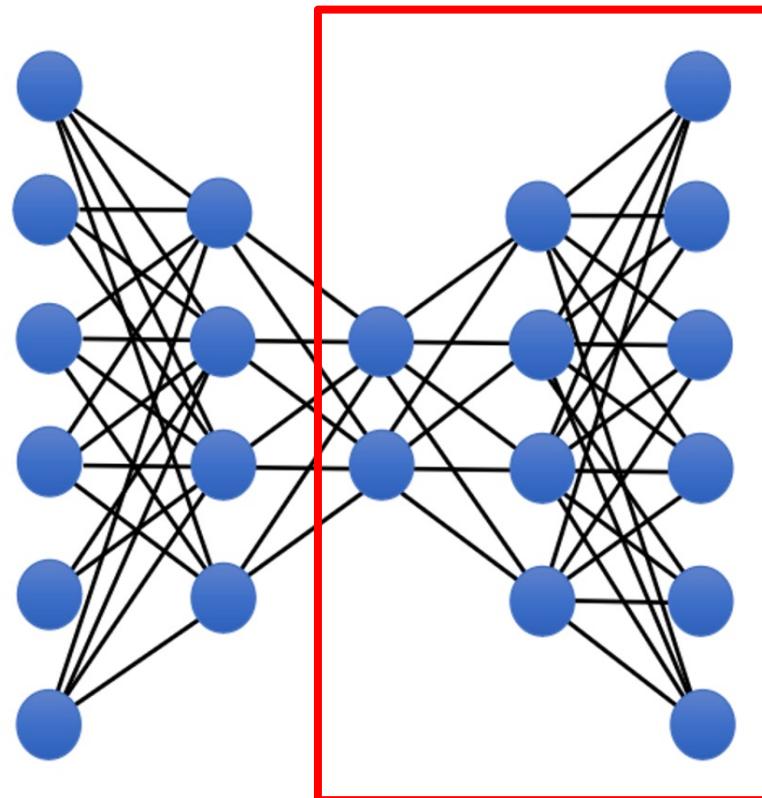


生成模型  
(言語モデル)

入力	出力	誤差関数	物理
$t$	$x(t)$	$(F(x) - m\ddot{x})^2$	古典力学
$x$	$\psi(x)$	$\langle \psi   \mathcal{H}   \psi \rangle$	量子力学
$T$	$P(T)$	(測定値との差) $^2$	熱力学
$s_i$	$\mathcal{H}(s_i)$	観測量の (期待値 - 測定値) $^2$	量子力学の 逆問題
$x(t_0)$	$x(t_1)$	(測定値との差) $^2$	古典力学の 逆問題 未来予測

# ニューラルネットは物理を抽出する

複雑な現象データから、本質的な量を取り出す



生成模型  
(画像／動画)

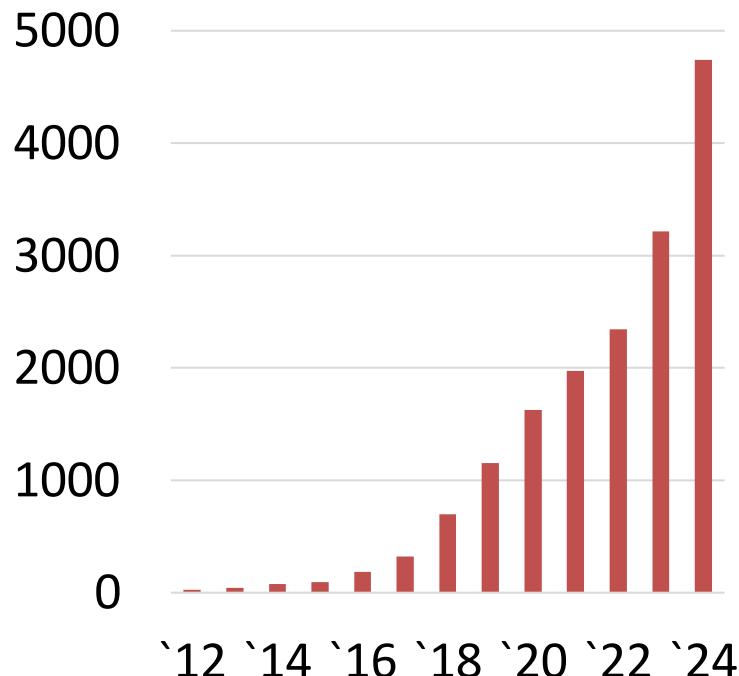
深層オートエンコーダ

# 爆発的な AI × 物理学 の研究進展

学習物理学 論文数 (プレプリントサーバArXivに基づく)

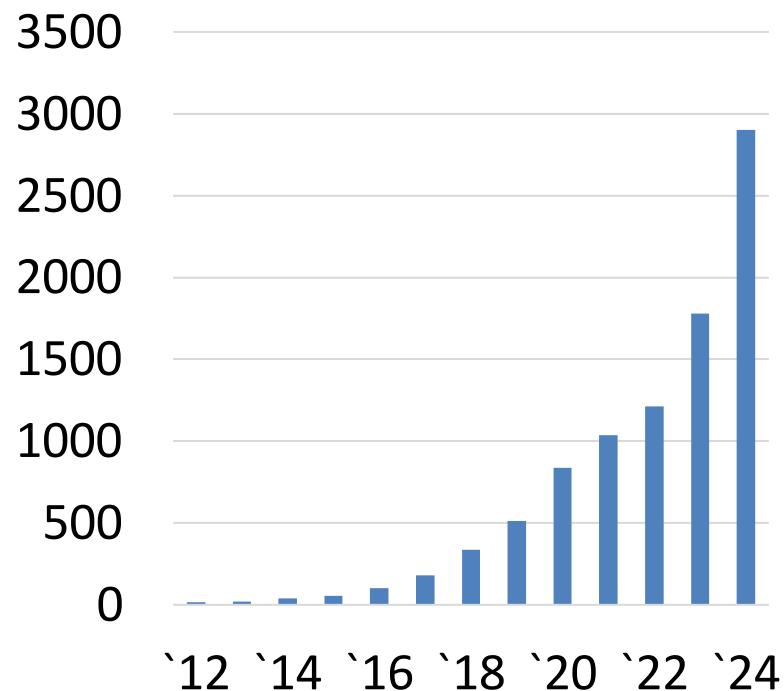
## 物理カテゴリ

(論文概要に“machine (deep) learning”を含む)



## 計算科学カテゴリ

(論文概要に“physics”と “learning”を含む)



# 1. 「AI × 物理学」は自然

1-1 機械学習と物理学の関係

1-2 AIは物理を解く

# 2. ノーベル賞は過去。現在何が?

2-1 2024年の学習物理学領域

2-2 研究例: 量子力学はニューラルネット

2-3 研究例: ニューラルネットの中の対称性

# 3. 生成科学の時代へ

# この1年で学習物理から何が生まれたか？

AI 物理

AI計算物理：ニューラルネットで量子の計算

AI素粒子物理：実験のジェットから素粒子分別

AI物性物理：高温超伝導の転移温度の再現

AI質量分析：広域窓 × スペースモデリング

物理 AI

統計力学でAI：ニューラルネットの中は液体

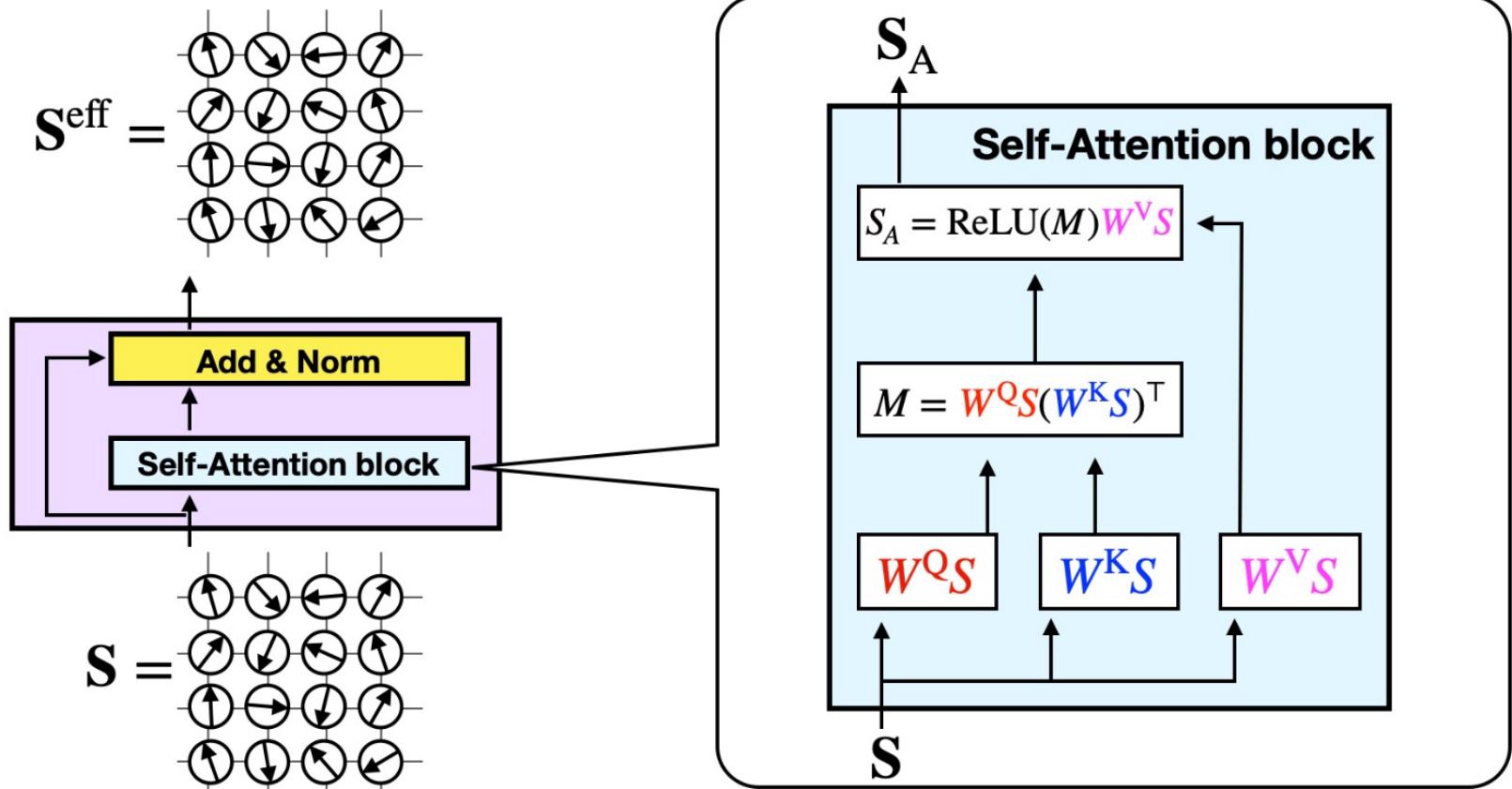
量子でAI：生成AIを量子力学で解釈

重力でAI：重力の性質がニューロンに内在

# AI計算物理：ニューラルネットで量子の計算

[富谷 永井 PoS LATTICE2023 (2024) 001] 他

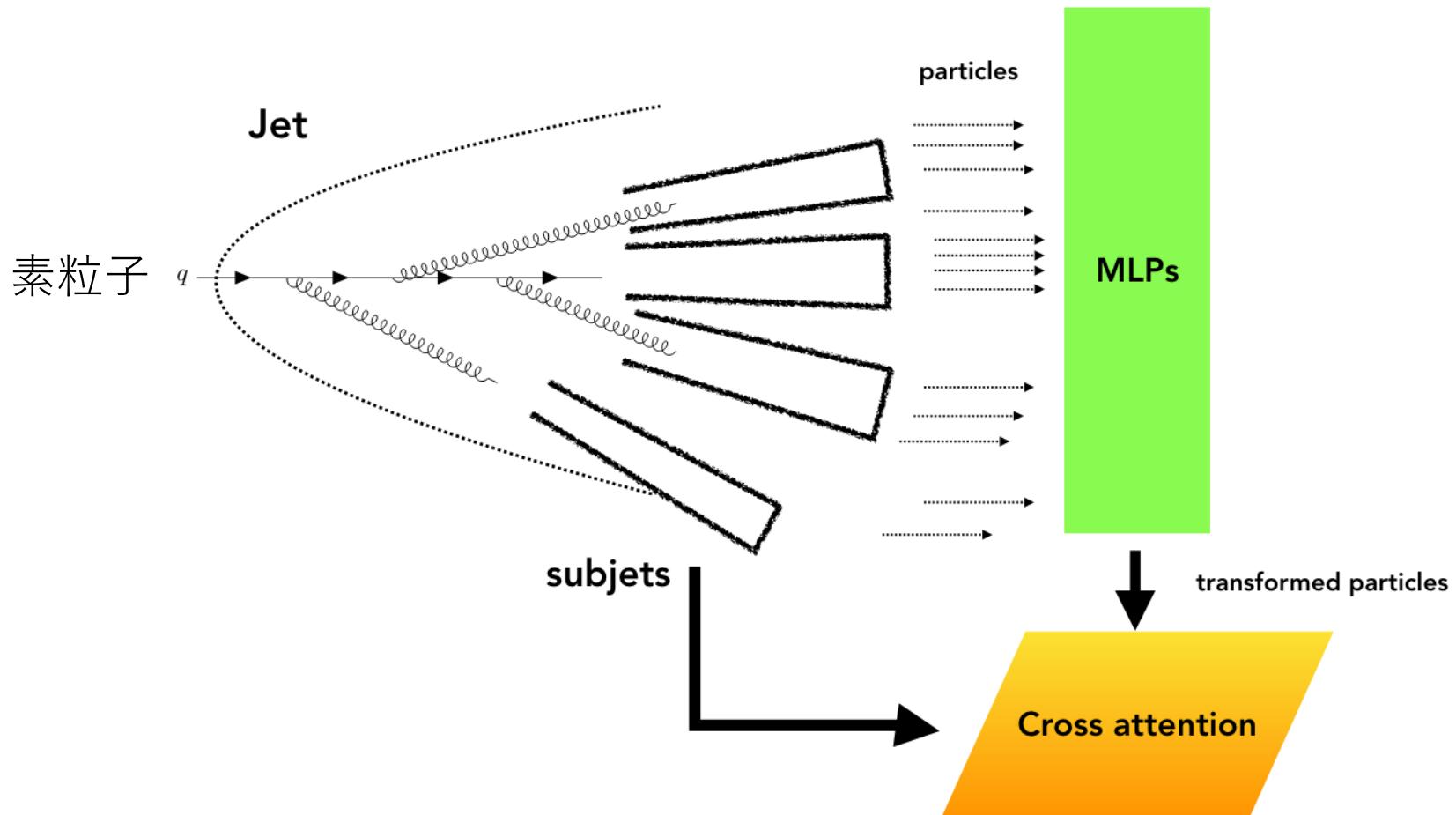
トランسفォーマーで  
計算を効率化



# AI素粒子物理: 実験のジェットから素粒子分別

トランسفォーマーで  
ジェットの正体探し

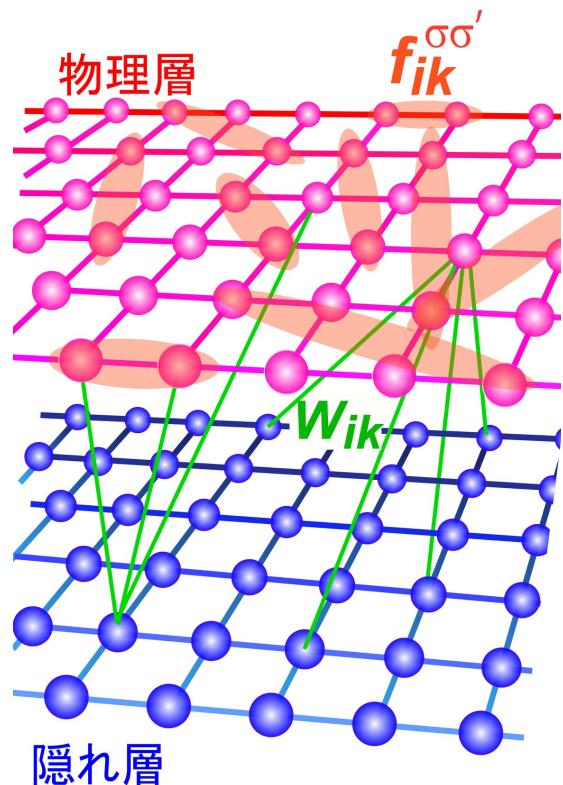
[Hammad, 野尻 JHEP 06(2024)176,  
JHEP 03 (2024) 114]



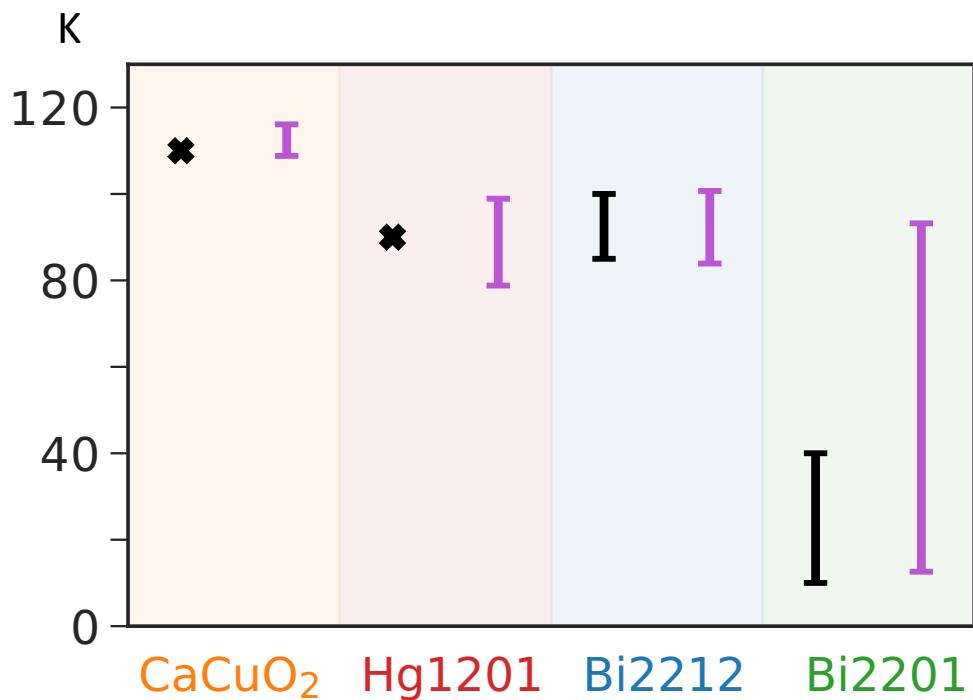
# AI物性物理：高温超伝導の転移温度の再現

ボルツマンマシンにより  
量子多体波動関数を表現

[Schmid Morée 金子 山地 今田,  
Phys. Rev. X 13, 041036 (2023)]



最適な超伝導転移温度

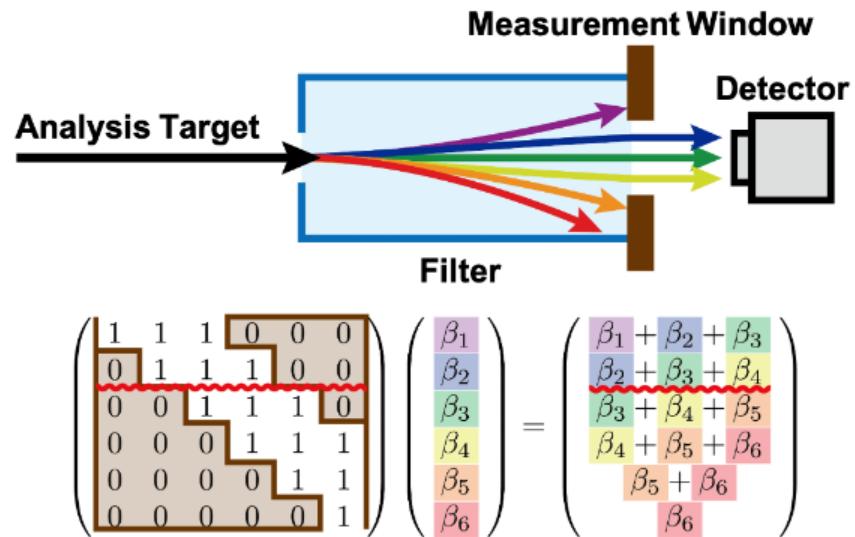
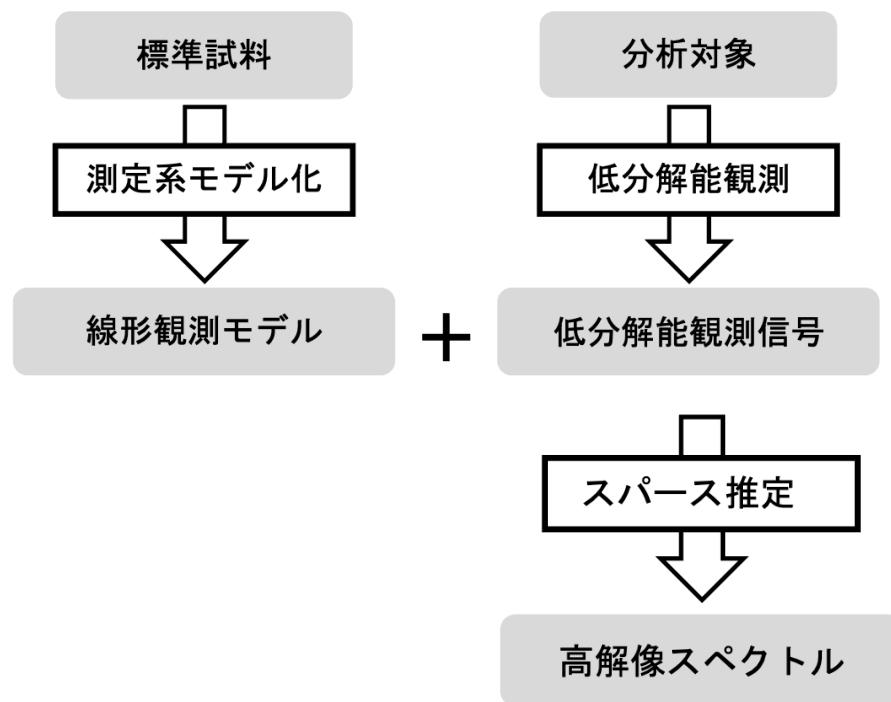


実験 vs. 計算予測

# AI質量分析：広幅窓×スパースモデリング

広い計測窓で複数成分を  
同時計測、lassoで高精度  
スペクトルを再構成

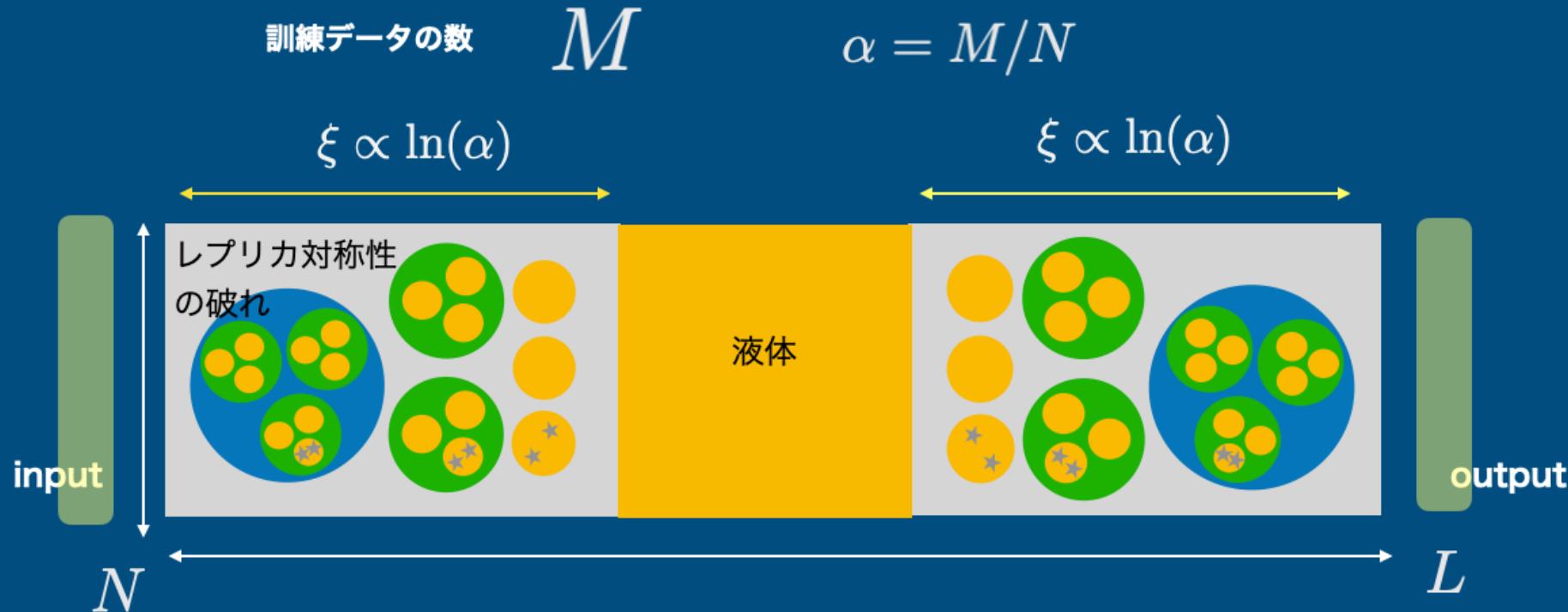
[小渕 et al., IEEE Trans. Sig. Proc., 72, 1724 (2024)]



# 統計力学でAI：ニューラルネットの中は液体

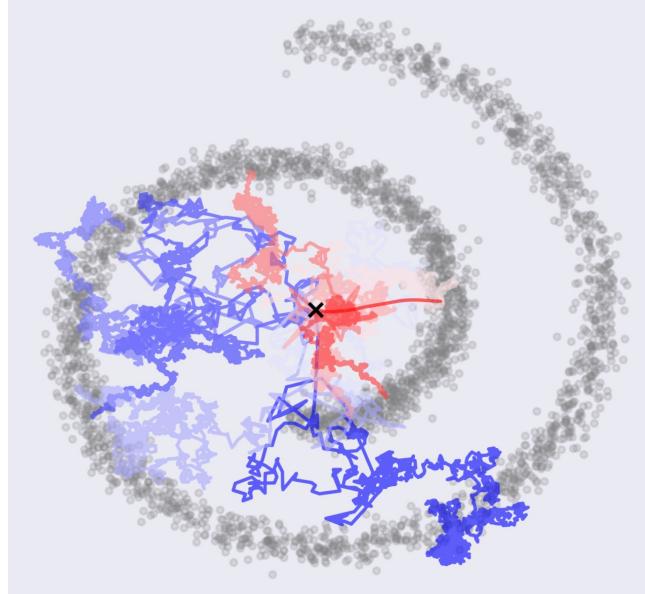
学習済み機械の集団は  
中央部で濡れている

[吉野 Phys. Rev. Research, 5, 033068 (2023),  
SciPostPhys. Core 2, 005 (2020). ]

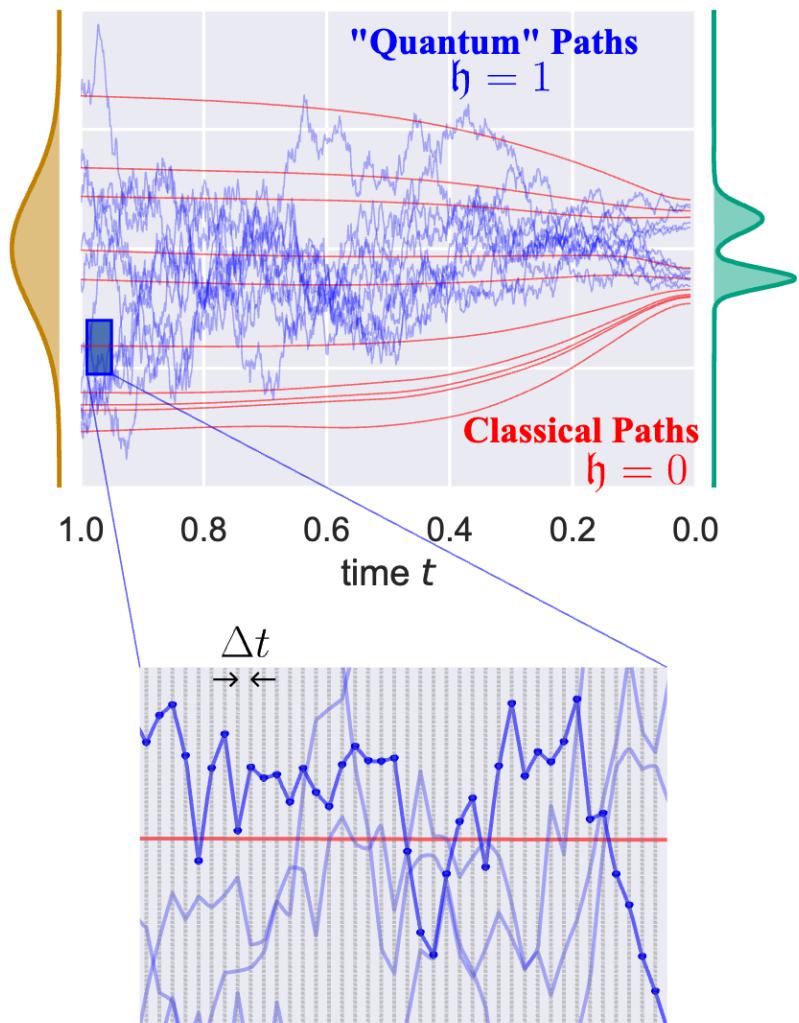


# 経路積分でAI：生成AIを量子力学で解釈

画像生成に使われる拡散モデルを、量子力学で定式化



[広野 田中 福嶋 ICML 2024, arXiv:2403.11262]

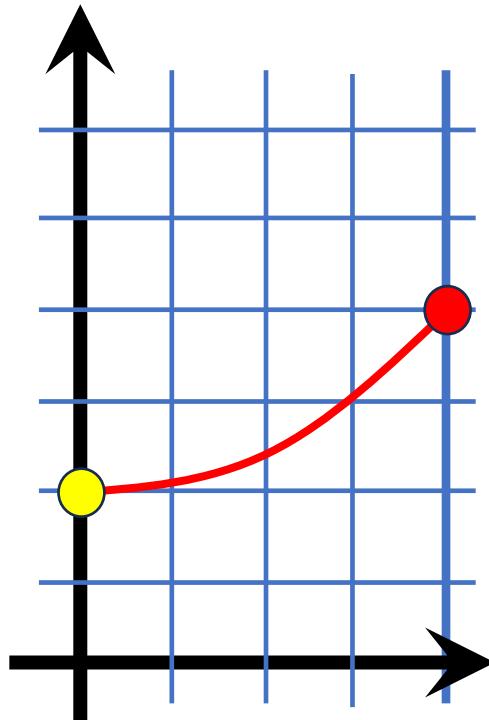


- 拡散モデルを統一的に記述
- 量子的な評価手法を開発

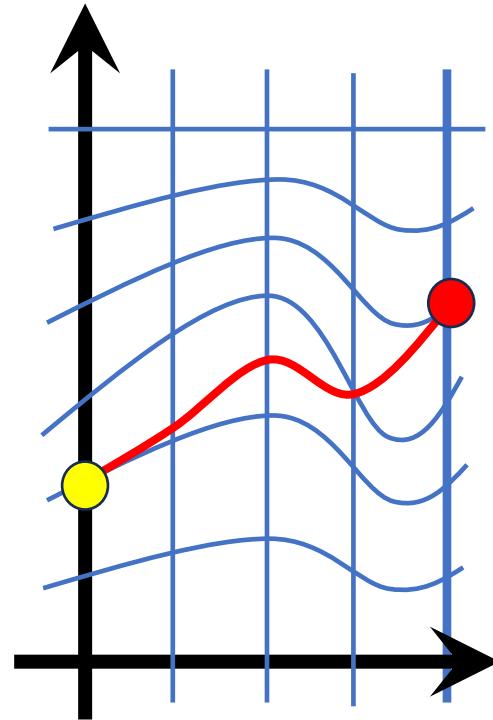
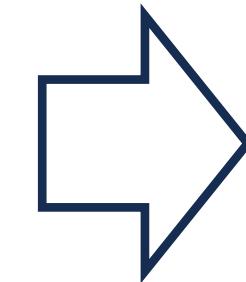
# 重力でAI：重力の性質がニューロンに内在

トランスフォーマーなどに  
重力理論の対称性がある

[橋本 広野 三内 Mach. Learn.:  
Sci. Technol. 5 025079 (2024)]



座標変換しても  
マシンは同じ



# 1. 「AI × 物理学」は自然

1-1 機械学習と物理学の関係

1-2 AIは物理を解く

# 2. ノーベル賞は過去。現在何が?

2-1 2024年の学習物理学領域

2-2 研究例: 量子力学はニューラルネット

2-3 研究例: ニューラルネットの中の対称性

# 3. 生成科学の時代へ

# Quantum matter : ground state?

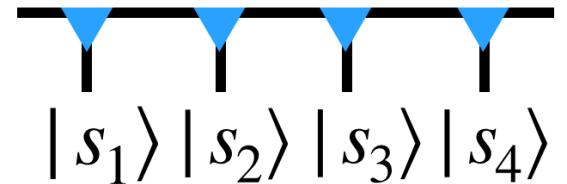
Ground state wave function for  $N$  qubits     $\psi(s_1, s_2, \dots, s_N)$

Question: minimize its energy  $E$  for a given Hamiltonian  $H$ ,

$$E = \frac{\sum_{s_1, \dots, s_N, s'_1, \dots, s'_N} \psi^\dagger(s'_1, \dots, s'_N) \hat{H}_{s'_1, \dots, s'_N, s_1, \dots, s_N} \psi(s_1, \dots, s_N)}{\sum_{s_1, \dots, s_N} \psi^\dagger(s_1, \dots, s_N) \psi(s_1, \dots, s_N)}$$

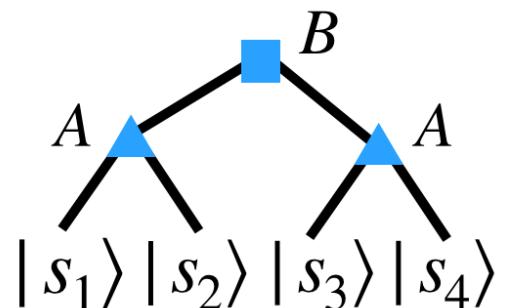
- Matrix product states

$$\psi(s_1, s_2, \dots) = \text{tr}[A^{(s_1)} A^{(s_2)} \dots]$$



- Tensor network states

$$\psi(s_1, s_2, \dots) = \sum_{m,n} B_{mn} A_{ms_1s_2} A_{ns_3s_4}$$



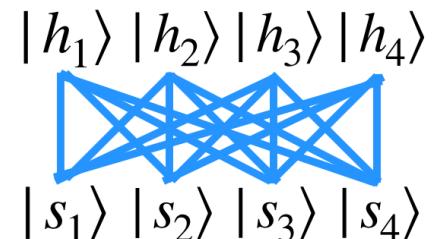
# Neural network states

- Boltzmann machine states

[Carleo Troyer '17],

[Nomura, Darmawan, Yamaji, Imada '17], ..

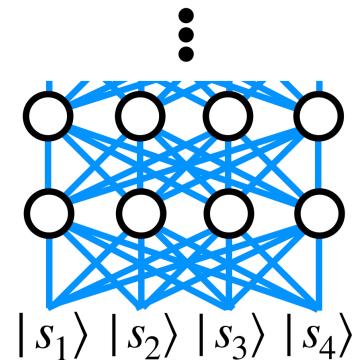
$$\psi(s_1, \dots, s_N) = \sum_{h_A} \exp \left[ \sum_a a_a s_a + \sum_A b_A h_A + \sum_{a,A} J_{aA} s_a h_A \right]$$



- Deep Boltzmann machine states

[Carleo, Nomura, Imada '18], ..

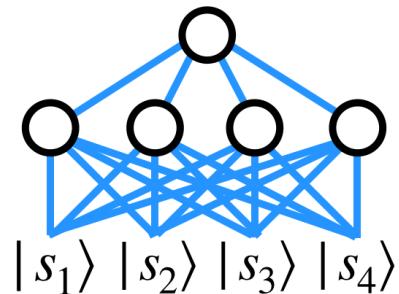
$$|\psi\rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{-\tau H} |\text{any}\rangle = e^{-\Delta\tau H} e^{-\Delta\tau H} \dots |\text{any}\rangle$$



- Feedforward network states

[Saito '18], ..

$$\psi(s_1, \dots, s_N) = \sum_i f_i \sigma \left( \sum_j W_{ij} s_j + b_i \right)$$

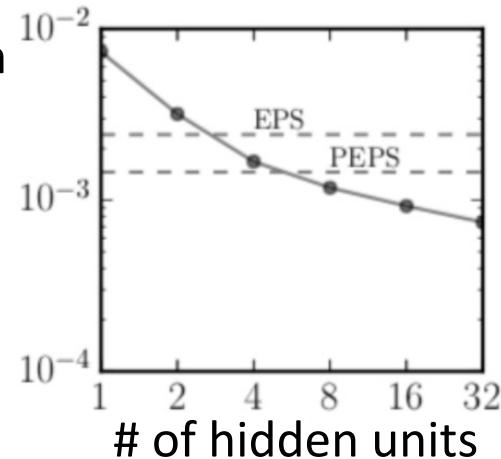


# NN is a better ansatz

Neural states may beat conventional ones.

Ex) 2-dimensional  
antiferromagnetic  
Heisenberg model  
[Carleo, Troyer '17]

Energy with  
RBM states



Relations among them:

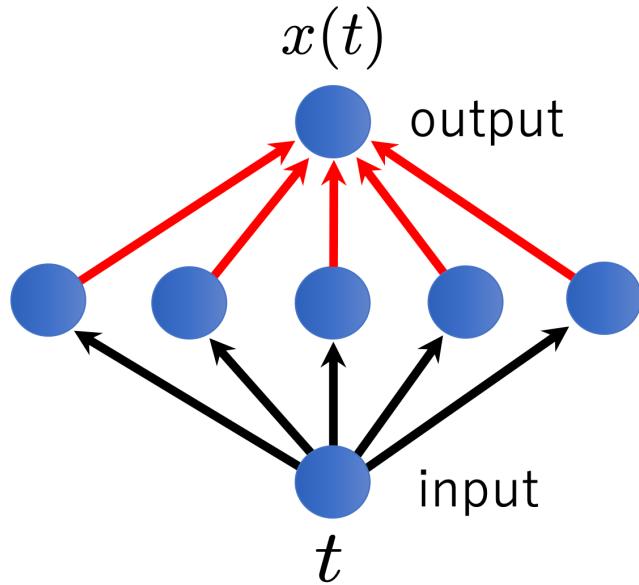
- 1) Boltzmann machine states are tensor network states  
[Chen, Cheng, Xie, Wang, Xiang '18]
- 2) Tensor states are deep Boltzmann  
[Gao, Duan '17] [Huang, Moore '17]
- 3) Tensor states are feedforward with “product pooling”  
[Cohen, Shashua '18]

# Neural network field theory

## Wide limit of NN gives Gaussian process

3-layer perceptron: [Niel 1994], [Williams 1997]

Deep NN: [Lee, Bahri, Novak, Schoenholz, Pennington, Sohl-Dickstein 2018]



Suppose “Bayesian NN” :

- Weights are random i.i.d
- Infinite width of NN

→ The central limit theorem applies.

→ Output correlators are Gaussian.

$$\langle x(t_1)x(t_2)x(t_3)x(t_4) \rangle$$

$$= \langle x(t_1)x(t_2) \rangle \langle x(t_3)x(t_4) \rangle + \langle x(t_1)x(t_3) \rangle \langle x(t_2)x(t_4) \rangle + \langle x(t_1)x(t_4) \rangle \langle x(t_2)x(t_3) \rangle$$

# Neural network field theory

## “Neural Network Field Theory (NNFT)”

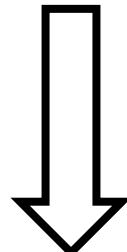
[Halverson, Maiti, Stoner 2008.08601 [cs.LG]]

[Halverson 2112.04527 [hep-th]]

[Demirtas, Halverson, Maiti, Schwartz, Stoner 2307.03223 [hep-th]]

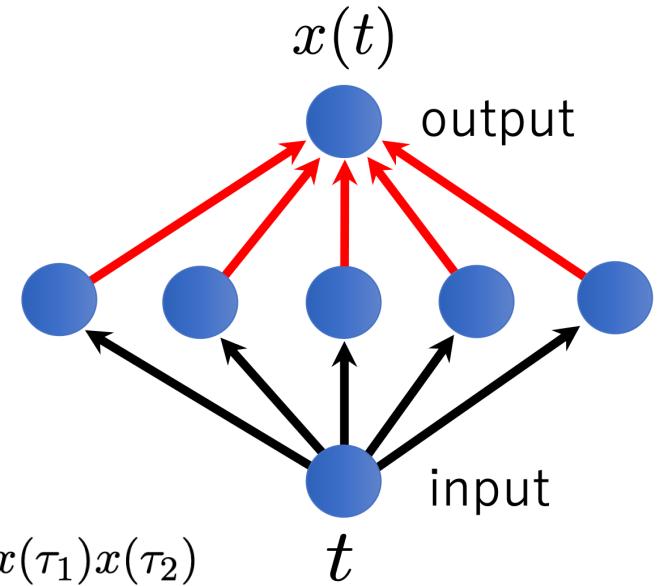
Outputs of a NN can produce quantum harmonic oscillator

$$x(\tau) = \sum_{n=1}^N a_n \frac{1}{\sqrt{b_n^2 + k/m}} \cos(b_n \tau + c_n)$$



$$\begin{aligned} a_n &\sim P(a) = \mathcal{N}(0, 1/N), \\ b_n &\sim P(b) = \mathcal{U}(-\Lambda, \Lambda), \\ c_n &\sim P(c) = \mathcal{U}(-\pi, \pi). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle x(\tau_1)x(\tau_2) \rangle &= \int \prod_n (P(a_n)da_n P(b_n)db_n P(c_n)dc_n) x(\tau_1)x(\tau_2) \\ &= \int_{-\Lambda}^{\Lambda} db \frac{\cos(b(\tau_1 - \tau_2))}{b^2 + k/m}. \end{aligned}$$



# Neural network field theory

## “Neural Network Field Theory (NNFT)”

[Halverson, Maiti, Stoner 2008.08601 [cs.LG]]

[Halverson 2112.04527 [hep-th]]

[Demirtas, Halverson, Maiti, Schwartz, Stoner 2307.03223 [hep-th]]

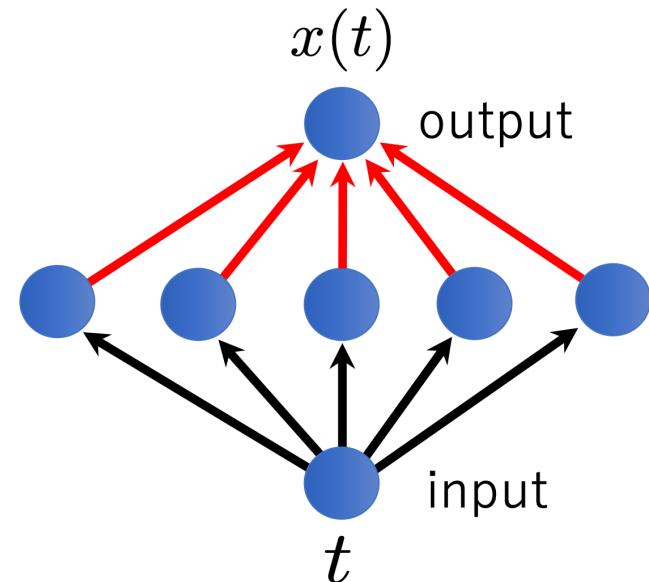
Outputs of a NN can produce quantum harmonic oscillator

$$x(\tau) = \sum_{n=1}^N a_n \frac{1}{\sqrt{b_n^2 + k/m}} \cos(b_n \tau + c_n)$$

### NN Characteristics:

- Cosine activation w/ a normalization
- Large N units at the second layer
- i.i.d. parameter samples

→ Central limit theorem is used

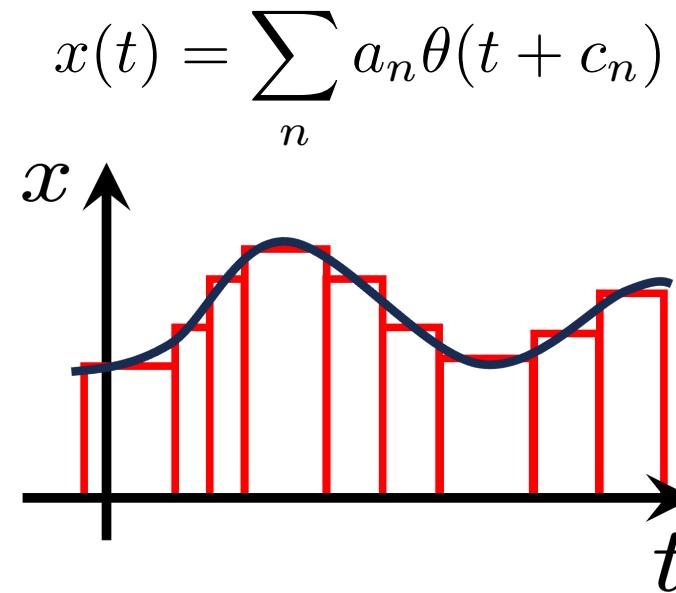
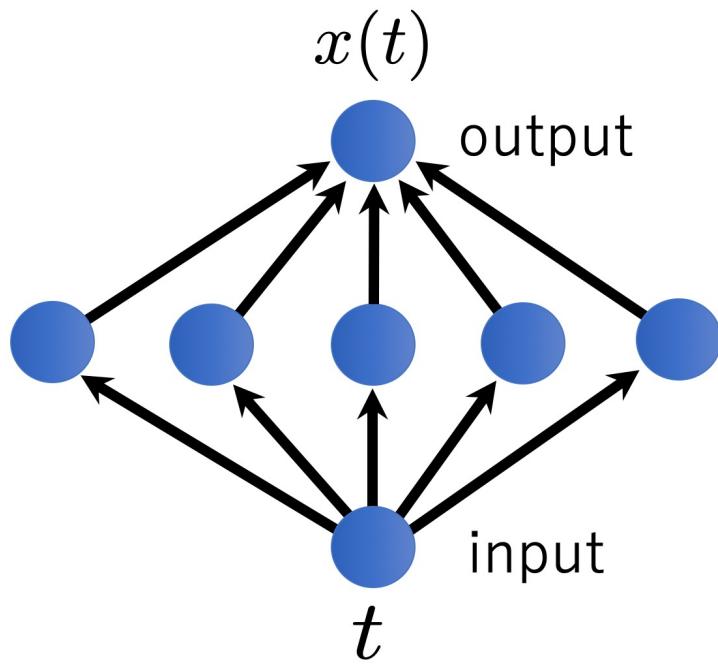


# Universal Approx. of Path Integral

## Universal approximation of NN

[Cybenko 1989],[Hornik, Stinchcombe, White 1989]  
[Hornik 1991],[Leshno, Lin, Pinkus, Schocken 1993]

Theorem: Infinitely wide NN can approximate any function

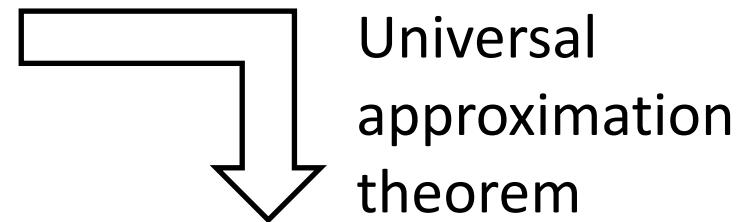
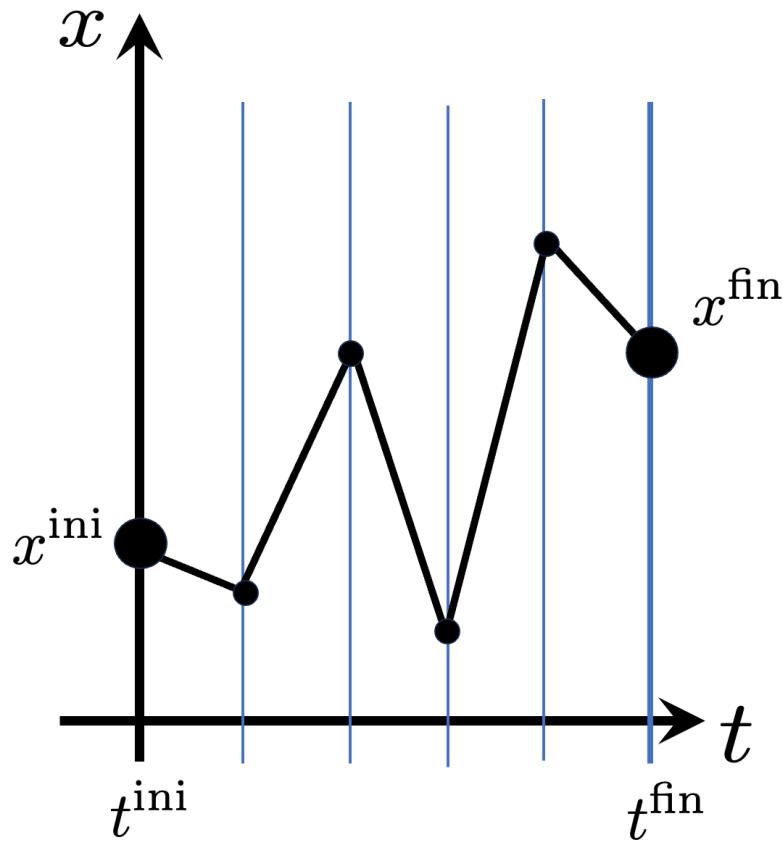


# Universal Approx. of Path Integral

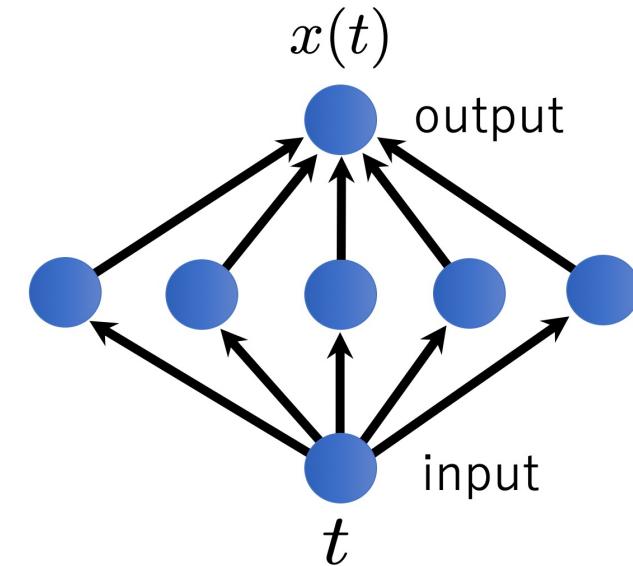
## Step 1) Universally approximate the paths

[Hirono, Maeda, Totsuka-Yoshinaka, KH 2403.11420]

Arbitrary path in path integral



$$x(t) = \sum_{n=1}^N w_n \text{ReLU}(t - t_{n-1}) + b$$



# Universal Approx. of Path Integral

## Step 2) Statistical sum over NN parameters

[Hirono, Maeda, Totsuka-Yoshinaka, KH 2403.11420]

Path integral measure  $\prod_{n=1}^{N-1} dx_n = (\Delta t)^{N-1} \prod_{n=1}^{N-1} dw_n$

Path integral weight  $\exp\left[\frac{i}{\hbar} S\right]$

$$S = \int dt \mathcal{L}[x, \dot{x}] = \Delta t \sum_{n=1}^N \mathcal{L}\left[\frac{x_n + x_{n-1}}{2}, \frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t}\right]$$

$$= \Delta t \sum_{n=1}^N \mathcal{L}\left[x^{\text{ini}} + \Delta t \sum_{k=1}^n \left(k - \frac{1}{2}\right) w_{n-k+1}, \sum_{k=1}^n w_k\right]$$

NN Characteristics:

- ReLU activation w/ time division bias
- Large N units at the second layer
- No i.i.d. parameter samples

# Universal Approx. of Path Integral

## Ex. Free particle, Harmonic oscillator

[Hirono, Maeda, Totsuka-Yoshinaka, KH 2403.11420]

Path integral  $\langle x^{\text{fin}} | x^{\text{ini}} \rangle = (\Delta t)^{N-1} \int \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S \right] \prod_{n=1}^{N-1} dW_n \quad W_n \equiv \sum_{k=1}^n w_k$

Path integral weight  $\exp \left[ \frac{i}{\hbar} S \right]$

Free particle :  $S = \int dt \frac{m}{2} \dot{x}^2 = \frac{m\Delta t}{2} \left( \sum_{n=1}^{N-1} (W_n)^2 + \left( \frac{x^{\text{fin}} - x^{\text{ini}}}{\Delta t} - \sum_{k=1}^{N-1} W_k \right)^2 \right)$

Harmonic oscillator:

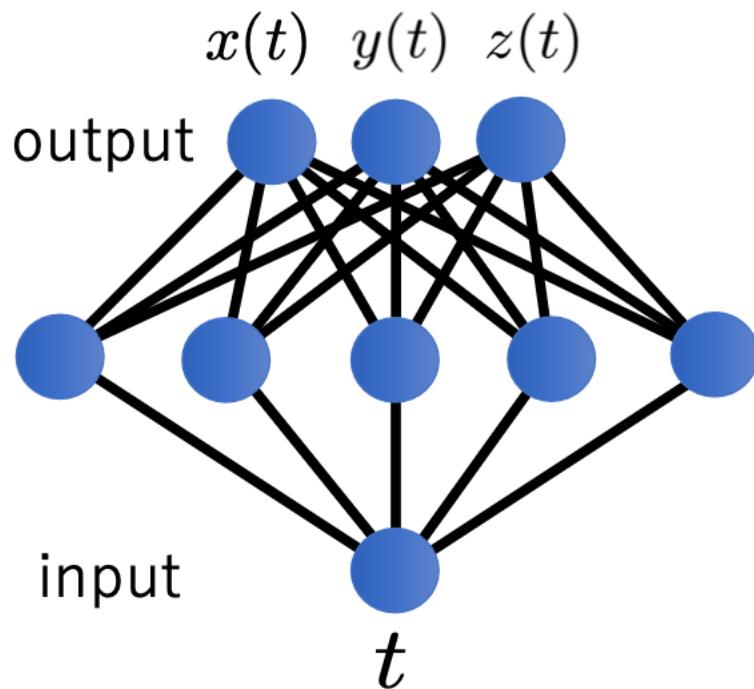
$$S = \int dt \left( \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{k}{2} x^2 \right) = \frac{m\Delta t}{2} \left( \sum_{n=1}^{N-1} (W_n)^2 + \left( \frac{x^{\text{fin}} - x^{\text{ini}}}{\Delta t} - \sum_{k=1}^{N-1} W_k \right)^2 \right) - \frac{k\Delta t}{2} \sum_{n=1}^{N-1} \left( x^{\text{ini}} - \frac{1}{2} \Delta t W_n + \Delta t \sum_{k=1}^n W_k \right)^2$$

# Universal Approx. of Path Integral

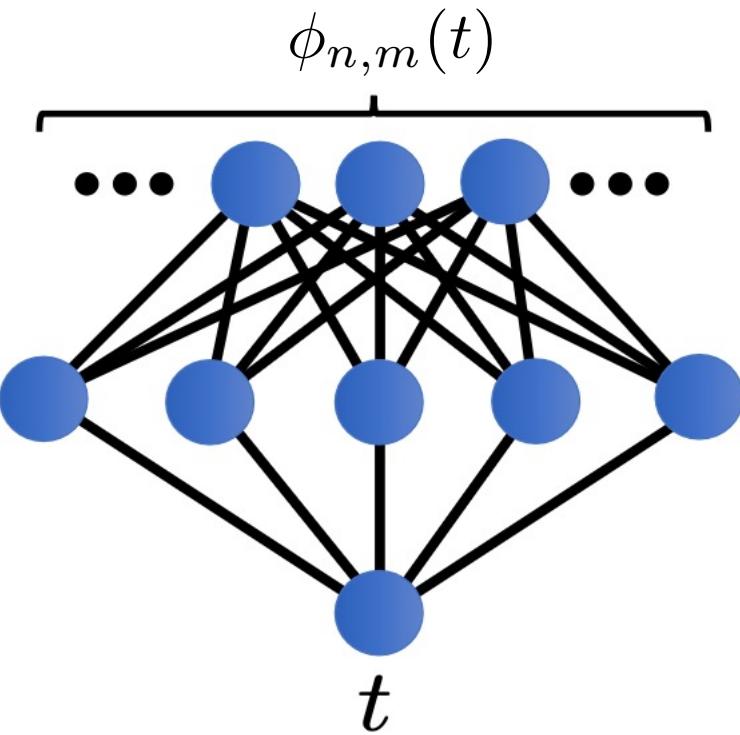
## Ex. QFT

[Hirono, Maeda, Totsuka-Yoshinaka, KH 2403.11420]

Quantum mechanics  
In multi dimensions



Quantum field theory  
on a lattice



# 1. 「AI × 物理学」は自然

1-1 機械学習と物理学の関係

1-2 AIは物理を解く

# 2. ノーベル賞は過去。現在何が?

2-1 2024年の学習物理学領域

2-2 研究例: 量子力学はニューラルネット

2-3 研究例: ニューラルネットの中の対称性

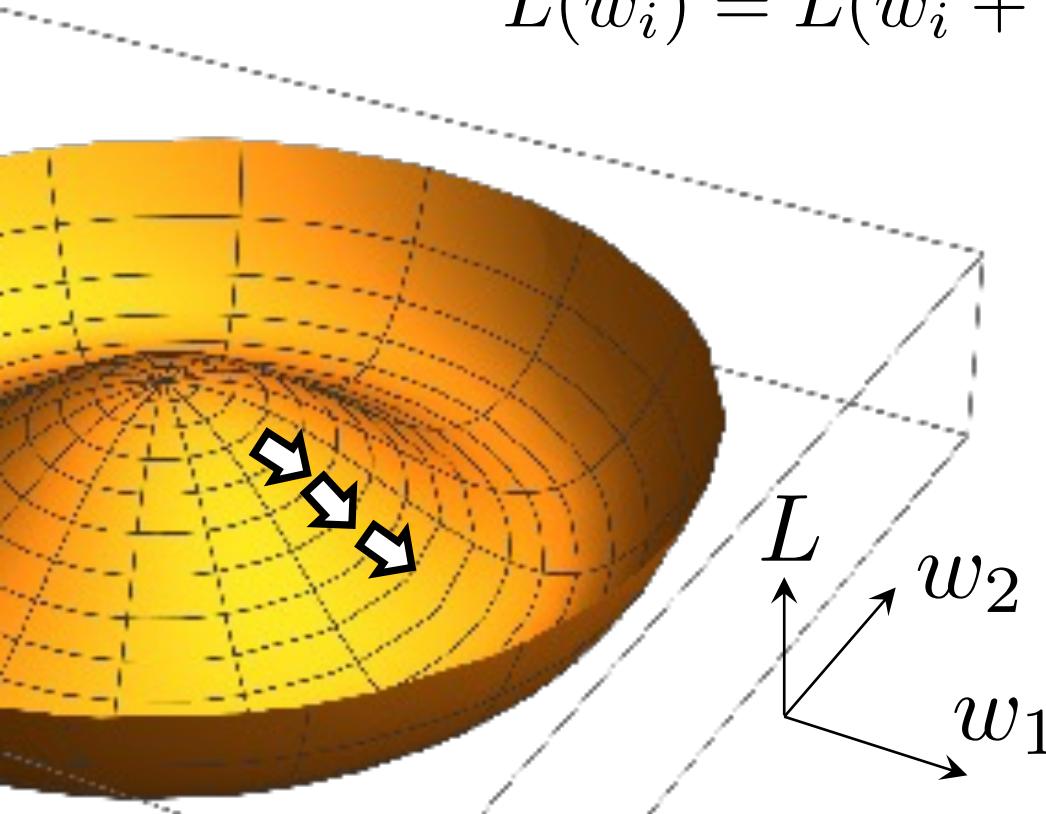
# 3. 生成科学の時代へ

# Motivation: gauge sym in NN

**Symmetries = redundancy → trainability**

NN symmetry : Invariance of loss function  $L(w_i)$  under a transformation on weights  $w_i$

$$L(w_i) = L(w_i + \delta_i(w))$$



Learning dynamics may depend on symmetries.

[Amari] [Amari Ozeki Karakida Yoshida Okada]  
[Badrinarayanan Mishra Cipolla]  
[Neyshabur Salakhutdinov Srebro]  
[Ziyin 2023] ...

# Motivation: gauge sym in NN

AdS/DL : NN = Physical spacetime?

Quantum  
gravity  
in  $(d+1)$ -dim.

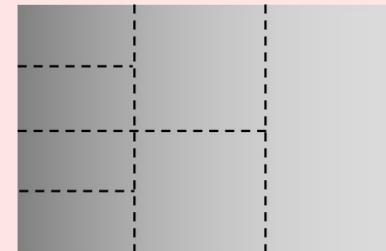
'tHooft '93  
Susskind '94  
Maldacena '97

Quantum  
mechanics  
in  $d$ -dim.

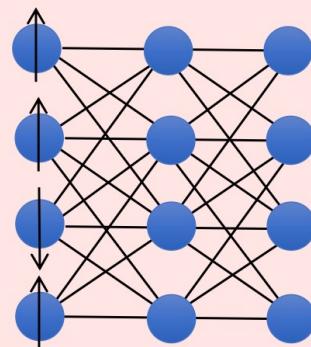
General  
spacetime



Anti de Sitter  
spacetime



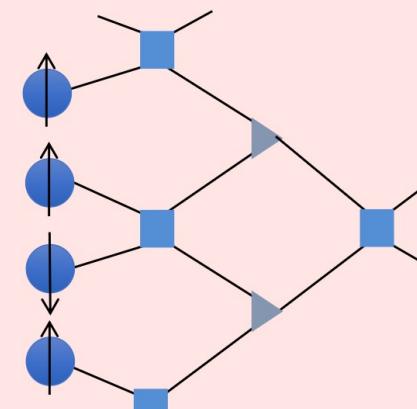
|| ?



Carleo,  
Troyer '17

Neural network

|| Swingle '10



Tensor network

## Our group papers include

- “Machine-learning emergent spacetime from linear response in future tabletop quantum gravity experiments” 2411.16052 w/ K.Matsuo, M. Murata, G.Ogiwara (Saitama Tech), D.Takeda (Kyoto)
- “Spacetime-emergent ring toward tabletop quantum gravity experiments” 2211.13863 w/ D.Takeda, K.Tanaka, S.Yonezawa (Kyoto)
- “Deriving dilaton potential in improved holographic QCD from chiral condensate” 2209.04638 w/ K.Ohashi (Keio), T.Sumimoto (Osaka u)
- “Deriving dilaton potential in improved holographic QCD from meson spectrum” 2108.08091 w/ K.Ohashi (Keio), T.Sumimoto (Osaka u)
- “Neural ODE and Holographic QCD” 2006.00712 w/ H.Y.Hu, Y.Z.You (UCSD)
- “Deep Learning and AdS/QCD” 2005.02636 w/ T. Akutagawa, T. Sumimoto (Osaka u)
- “Deep Boltzmann Machine and AdS/CFT” 1903.04951
- “Deep Learning and Holographic QCD” 1809.10536 w/ S. Sugishita (Kentucky), A. Tanaka, A. Tomyia (RIKEN)
- “Deep Learning and AdS/CFT” 1802.08313 w/ S. Sugishita (Kentucky), A. Tanaka, A. Tomyia (RIKEN)

## AdS/DL method explored by many friends:

- Yi-Zhuang You, Zhao Yang, and Xiao-Liang Qi. Physical Review B, 97(4):045153, 2018.
- Romain Vasseur, Andrew C Potter, Yi-Zhuang You, and Andreas WW Ludwig. Physical Review B, 100(13):134203, 2019.
- Jing Tan and Chong-Bin Chen. International Journal of Modern Physics D, 28(12):1950153, 2019.
- Hong-Ye Hu, Shuo-Hui Li, Lei Wang, and Yi-Zhuang You. Physical Review Research, 2(2):023369, 2020.
- Yu-Kun Yan, Shao-Feng Wu, Xian-Hui Ge, and Yu Tian. Physical Review D, 102(10):101902, 2020.
- Jonathan Lam and Yi-Zhuang You. Physical Review Research, 3(4):043199, 2021.
- Mugeon Song, Maverick SH Oh, Yongjun Ahn, and Keun-Young Kim. Chinese Physics C, 45(7):073111, 2021.
- Emad Yaraie, Hossein Ghaffarnejad, and Mohammad Farsam. Iranian Journal of Astrophysics and Astronomy, 10(4):335, 2023.
- Kai Li, Yi Ling, Peng Liu, and Meng-He Wu. Physical Review D, 107(6):066021, 2023.
- Byoungjoon Ahn, Hyun-Sik Jeong, Keun-Young Kim, and Kwan Yun. Journal of High Energy Physics, 2024(3):1–30, 2024.
- Mahdi Mansouri, Kazem Bitaghirs Fadafan, and Xun Chen. arXiv preprint arXiv:2406.06285.
- Rong-Gen Cai, Song He, Li Li, Hong-An Zeng. arXiv preprint arXiv:2406.12772.

And many more...

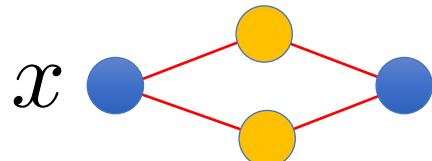
## Other AI bulk reconstruction includes:

- Xun Chen and Mei Huang. Physical Review D, 109(5):L051902, 2024.
- Ou-Yang Luo, Xun Chen, Fu-Peng Li, Xiao-Hua Li, and Kai Zhou. arXiv preprint arXiv:2408.03784.
- Xun Chen and Mei Huang. arXiv preprint arXiv:2405.06179.
- Byoungjoon Ahn, Hyun-Sik Jeong, Keun-Young Kim, and Kwan Yun. arXiv preprint arXiv:2406.07395.
- Zhuo-Fan Gu, Yu-Kun Yan, and Shao-Feng Wu. arXiv preprint arXiv:2401.09946.
- Yago Bea, Raul Jimenez, David Mateos, Shuheng Liu, Pavlos Protopapas, Pedro Tarancón Alvarez, and Pablo Tejerina-Pérez. arXiv preprint arXiv:2403.14763.

And many more...

# Candidates for diffeo in NN

## 1. Permutation symmetry



Multi-Layer  
Perceptron

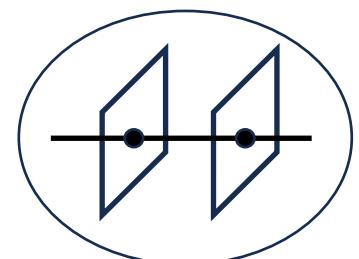
$$f(x) = w_1 \varphi(\tilde{w}_1 x + \tilde{b}_1) + w_2 \varphi(\tilde{w}_2 x + \tilde{b}_2) + b$$

NN symmetry : swapping of neurons

$$w_1 \leftrightarrow w_2, \quad \tilde{w}_1 \leftrightarrow \tilde{w}_2, \quad \tilde{b}_1 \leftrightarrow \tilde{b}_2$$

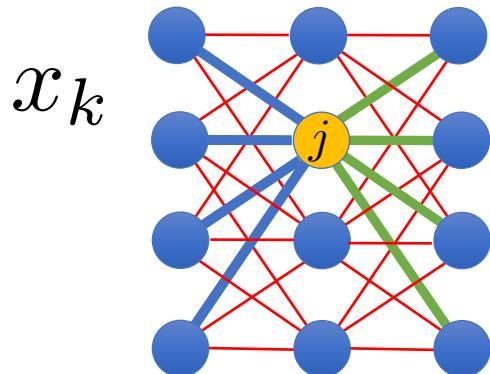
Note : this  $Z_2$  sym enhances at singularity

[Amari Ozeki Karakida Yoshida Okada 2016]



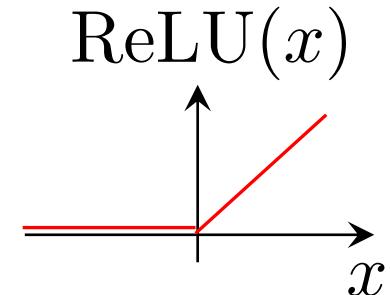
# Candidates for diffeo in NN

## 2. Rescaling symmetry



$$f_i = w_{ij}\varphi(\tilde{w}_{jk}x_k + \tilde{b}_j) + b_i$$

ReLU activation  
 $\varphi(x) = \text{ReLU}(x)$



NN symmetry : For any fixed  $j$ , rescale

$$w_{ij} \mapsto \alpha w_{ij}, \quad \tilde{w}_{jk} \mapsto \alpha^{-1} \tilde{w}_{jk}, \quad \tilde{b}_j \mapsto \alpha^{-1} \tilde{b}_j$$

due to ReLU scaling property

$$\text{ReLU}(\alpha^{-1}x) = \alpha^{-1}\text{ReLU}(x)$$

# Candidates for diffeo in NN

## 3. Self-attention in transformers



$$h_i = \sum_{j=1}^n \text{ReLU} \left( (xw^{(q)})_i (xw^{(k)})_j^T \right) (xw^{(v)})_j$$

$x \in \mathbf{R}^{n \times d}$  : set of data  $x_i \in \mathbf{R}^d (i = 1, 2, \dots, n)$

$w^{(q),(k),(v)} \in \mathbf{R}^{d \times d}$  : query, key and value weights

NN sym 1 : rescaling  $w^{(a)} \mapsto \alpha^{(a)} w^{(a)}, \quad \alpha^{(q)} \alpha^{(k)} \alpha^{(v)} = 1$

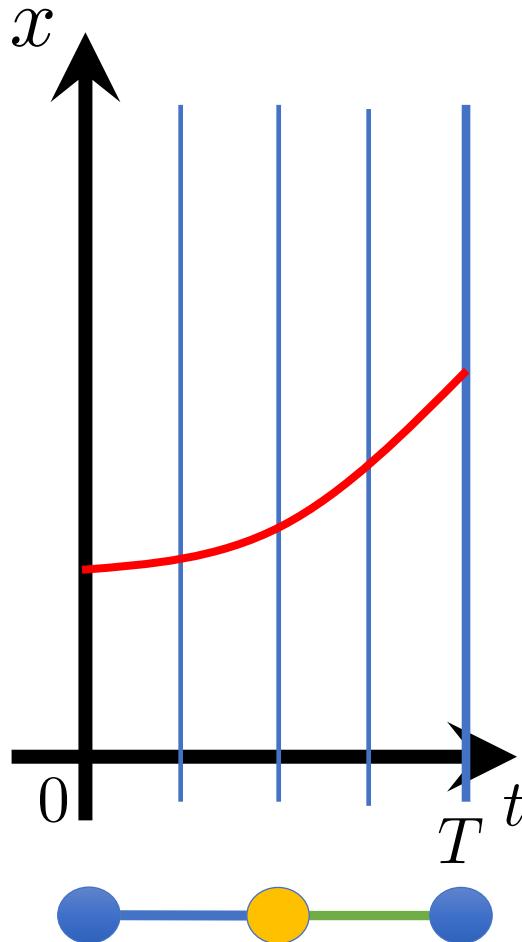
NN sym 2 : Internal sym

$$w^{(q)} \mapsto w^{(q)} A, \quad w^{(k)} \mapsto w^{(k)} (A^{-1})^T, \quad A \in SL(d, \mathbf{R})$$

# Diffeos in neural ODEs

**Neural ODEs = continuous ver. of NN**

[Hirono, Sannai, KH 2402.02362]



$$\dot{x}(t) = F(t, x(t))$$

Training : train  $F(t, x)$  such that  
the relation  $(x(0), x(T))$  reproduces  
given set of data  $\{(x_i, x_f)\}$ .

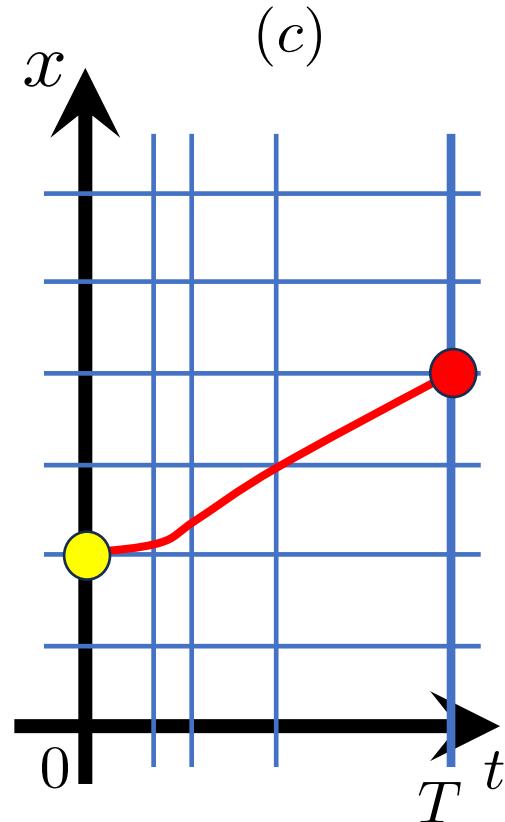
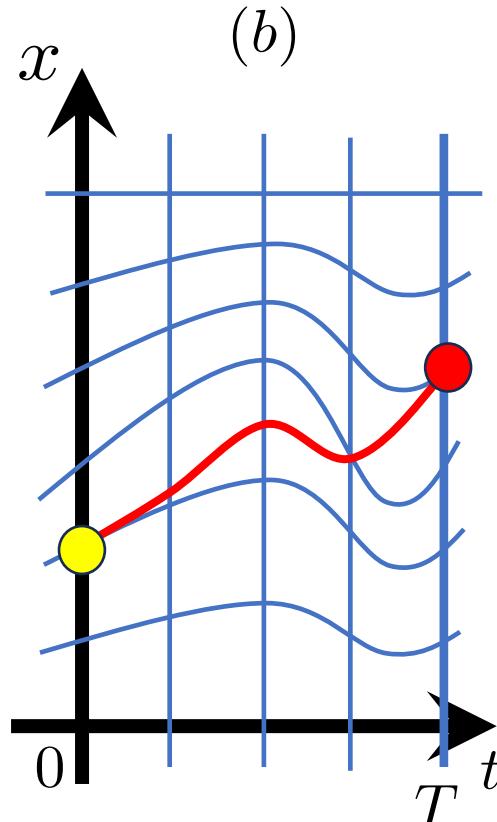
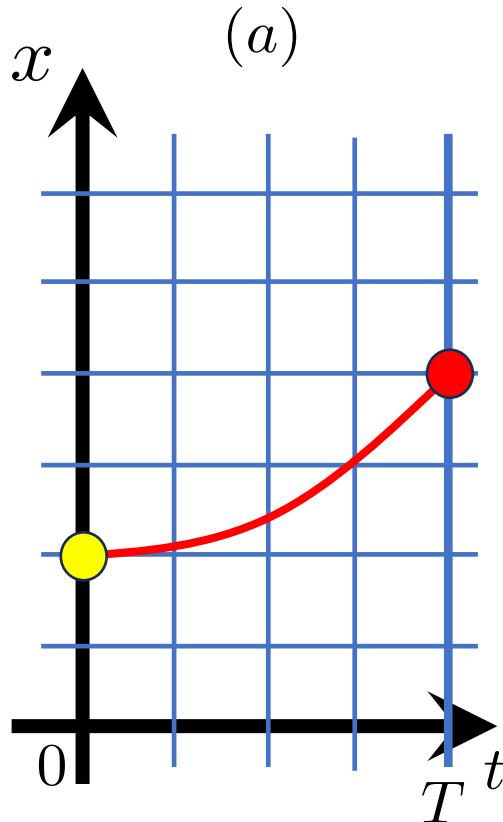
Discretizing it gives a residual NN :

$$x(t + \delta t) = x(t) + F(t, x(t))\delta t$$

# Diffeos in neural ODEs

## Diffeos in ADM-like decomposition in neural ODE

[Hirono, Sannai, KH 2402.02362]



$$x(t) \mapsto x(t) + \epsilon(t, x(t))$$

$$t \mapsto t + f(t)$$

# Diffeos in neural ODEs

**Linear neural ODE can be solved**

[Hirono, Sannai, KH 2402.02362]

Linear neural ODE :  $\dot{x}(t) = w(t)x(t) + b(t)$

Explicit solution of the ODE

$$x(T) = e^{\int_0^T w(t') dt'} x(0) + \left( \int_0^T e^{-\int_0^{t'} w(t'') dt''} b(t') dt' \right) e^{\int_0^T w(t'') dt''}$$

“Wilson loop”

Spatial diffeo  $x(t) \mapsto x(t) - g(t)x(t)$  is a weight transf.

$$w(t) \mapsto w(t) + \dot{g}(t), \quad b(t) \mapsto e^{g(t)-g(t=0)} b(t)$$

“Gauge field”

“Higgs field”

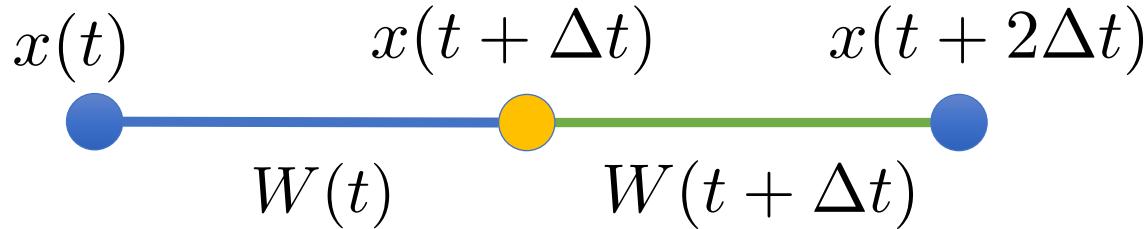
Time reparam.  $t \mapsto t + f(t)$  is a weight transf.

$$w(t) \mapsto w(t) - \frac{d}{dt}(w(t)f(t)), \quad b(t) \mapsto b(t) - \frac{d}{dt}(b(t)f(t))$$

# Diffeos in neural ODEs

**Rescaling = a spatial diffeo**

[Hirono, Sannai, KH 2402.02362]



Spatial diffeo : Integrated weight transforms as Wilson line

$$W(t) \mapsto e^{-g(t)} W(t) e^{g(t+\Delta t)}$$

$$W(t + \Delta t) \mapsto e^{-g(t+\Delta t)} W(t) e^{g(t+2\Delta t)}$$

which reproduces the rescaling symmetry

$$w_{ij} \mapsto \alpha w_{ij}, \quad \tilde{w}_{jk} \mapsto \alpha^{-1} \tilde{w}_{jk}$$

# 1. 「AI × 物理学」は自然

1-1 機械学習と物理学の関係

1-2 AIは物理を解く

# 2. ノーベル賞は過去。現在何が?

2-1 2024年の学習物理学領域

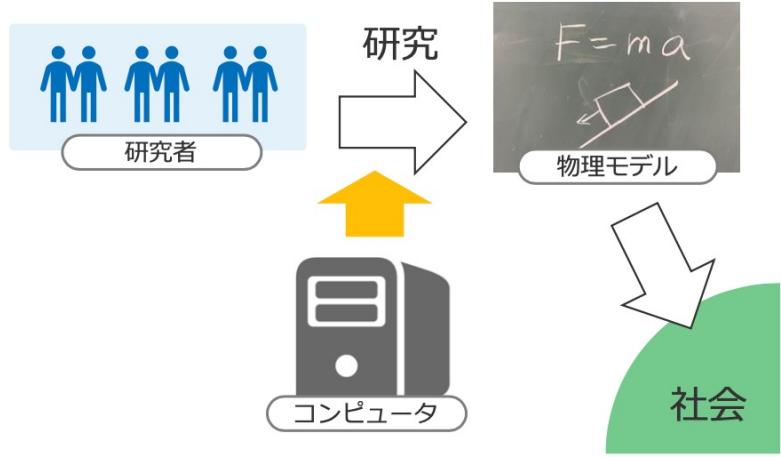
2-2 研究例: 量子力学はニューラルネット

2-3 研究例: ニューラルネットの中の対称性

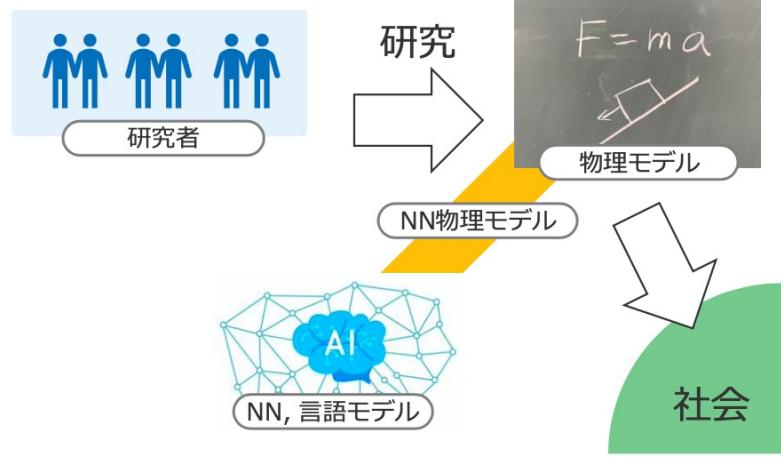
# 3. 生成科学の時代へ

# 理論物理学研究の推移

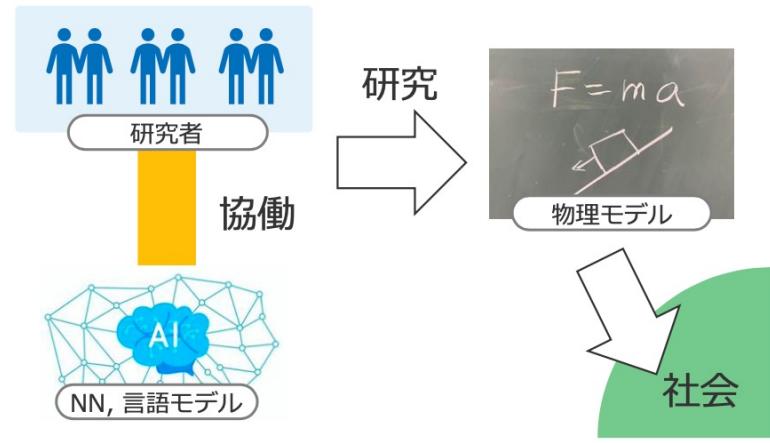
## 1990年頃～ 計算物理学



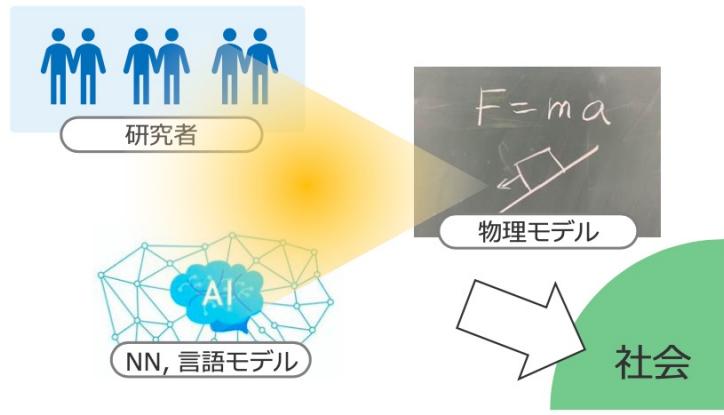
## 2017年～ 学習物理学



## 2024年～



## 2026年～ 生成科学



## 物理学

物理法則で世界を認知



宇宙の根源を解明

## 哲学

言語で世界を認知



心・世界の根源を解明

# 生成科学

生成AIと科学の合流による新しい学理  
理学と人文の融合母体

## 数学

論理で世界を構築



現在までの科学の基盤

## 生成AI・機械学習

コンピューティングで世界を構築



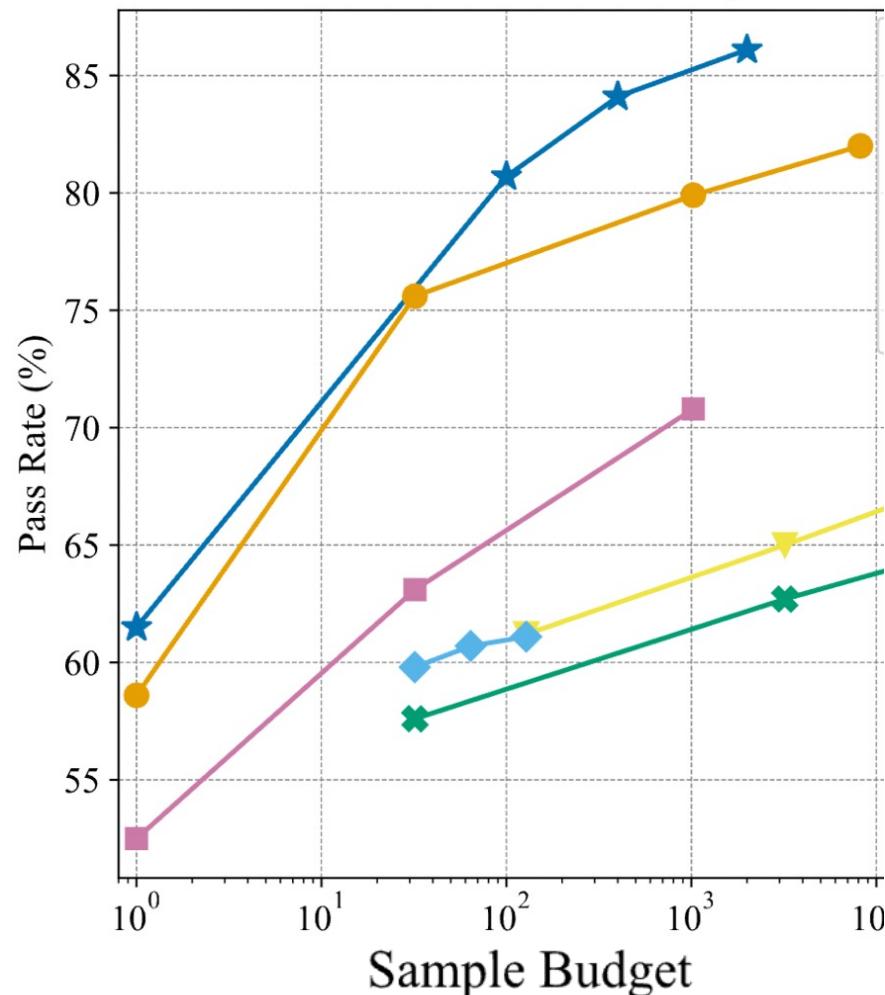
社会・技術のイノベーション

# 自動数学の世界最高AI

“Prover Agent: An Agent-based Framework for Formal Mathematical Proofs”  
 [ ICML workshop paper 2025, ArXiv:2506.19923 Baba, Liu, Kurita, Sannai]

AIエージェントで  
 大規模言語モデルと  
 証明支援言語を統合

- ★ Prover Agent (Ours)
- DeepSeek-Prover-V2
- Kimina-Prover-Preview-Distill
- ▽ STP
- △ Leanabell-Prover-GD-RL
- ◆ Goedel-Prover-SFT
- ◆ BFS-Prover
- ▲ InternLM2.5-StepProver + BFS + CG



# 1. 「AI × 物理学」は自然

1-1 機械学習と物理学の関係

1-2 AIは物理を解く

# 2. ノーベル賞は過去。現在何が?

2-1 2024年の学習物理学領域

2-2 研究例: 量子力学はニューラルネット

2-3 研究例: ニューラルネットの中の対称性

# 3. 生成科学の時代へ