

# 生成 AI 基盤技術「トランスフォーマー」を用いた物理モデル

## [1] 要旨

生成 AI は、文章や画像生成など幅広い分野で応用が進む人工知能・機械学習技術であり、近年、科学研究においてもその有用性が注目されている。生成 AI を物理学のシミュレーションに導入するにあたって、機械学習の前に物理学の常識である対称性に関する部分を AI に組み込んでしまうことで、訓練パラメータ数を劇的に減らし軽量高速な AI モデルを作成することに成功したことが報告された。スケーリング則はこのモデルでも成り立ち、大規模化することで精度も高められる。本研究は、物理学分野に適した生成 AI モデルの設計手法を示し、今後の研究や応用に新たな可能性をもたらすものと期待されている。

## [2] 本文

生成 AI は、文章や絵や音楽などを自動で作りに出す人工知能の技術である。私たちが言葉で伝えたイメージやアイデアを形にすることができ、創作活動や問題解決の新しい手助けとなっている。近年、OpenAI 社の ChatGPT や Google 社の Gemini などの登場によって、日常生活や勉強、仕事など、さまざまな場面で活用が広がっている。このような生成 AI をはじめとした人工知能・機械学習技術はここ数年で爆発的な進展を見せており、科学技術分野における研究開発の現場においても欠かすことのできないツールの一つとなりつつある。

人工知能・機械学習技術は、紙と鉛筆とコンピュータに続く新しい道具として受け入れられつつある。例えば、第一原理電子状態計算に基づいた原子間力を用いた分子動力学シミュレーションでは、スパコンを用いても非常に時間がかかるが、計算の重たい部分をニューラルネットワークに置き換えた機械学習分子動力学を使えば 1000 倍以上高速になり、3 年かかる計算が 1 日で終わる。これを用いて、より性能の良い電池材料の候補を高速なシミュレーションによって前もってスクリーニングすることで、実際に合成・実験する時間とコストを減少させることができる。

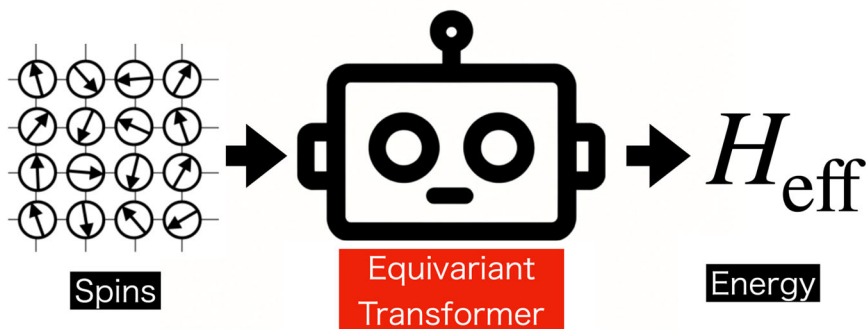


図 1. スピンの情報を入力としてエネルギーを出力する同変トランスフォーマー

生成 AI は人工知能の技術として最も成功を収めている技術の一つである。したがって、この手法を物理学の分野に適用することで物理学に新しい分野を切り拓くことが期待できる。しかしながら、通常よく利用されている自然言語に対する生成 AI のモデルには数億、数十億以上のパラメータがあり、物理学のシミュレーションにそのまま使うと計算コストが高すぎる可能性があった。また、数十億以上のパラメータを持つモデルの場合、得られたモデルが物理学的に何を意味しているのかを人間が理解できないブラックボックス化と呼ばれる状態になる可能性もあった。一方、物理

学で使うような機械学習モデルはシンプルすぎてパラメータ数が少なすぎる場合があり、高精度なモデルを作る方法が模索されていた。

最近、東京大学と東京女子大学の研究グループは、生成 AI のモデルが利用している「トランスフォーマー」というモデル構造に、物理学において非常に重要な概念である「対称性」を埋め込むことで、パラメータが劇的に少ない（数十パラメータ程度）新しいタイプのトランスフォーマー（同変トランスフォーマー）の構築とそのスピン系への適用に成功した。この成果は JPSJ の 2024 年 11 月号に掲載された。

今回提案された「同変トランスフォーマー」は、電子スピンの反転、回転、空間並進に関する対称性を持つように全ての内部演算が考慮されており、本来対称性を学習するために必要であった内部訓練パラメータが不要となることで劇的にパラメータ数が減少した。そして、このモデルを、電子と古典スピンからなる二重交換模型の有効模型として採用することで、厳密なマルコフ連鎖モンテカルロ法の一つである自己学習モンテカルロ法的高速化に成功した。さらに、通常の生成 AI と同様に、モデルの規模を順次拡大していくと性能が上がっていく「大規模言語モデルにおけるスケールリング則」が、同変トランスフォーマーによる物理系のモデルでも同様に成り立つことが示された。これは、求めたい精度に応じてモデルを順次改良することができることを意味しており、軽量で高速かつ高精度な物理学用生成 AI モデルを作る手段を得たことを意味している。

本研究成果は、計算科学分野や実社会において非常に効果を発揮している生成 AI の基礎テクノロジーを物理学へ応用した成果であり、対称性を考慮することで物理学に適したモデル構築の方法が示された例として、多くの研究者の注目を集めている。今後、「対称性を考慮する」という新しいコンセプトによって、内部構造を把握できるモデルの開発や、より高速に高精度に動作する機械学習シミュレーション手法が開発されるほか、物理学分野における「信頼される AI」（対称性によって間違った外挿をしない）の候補にもなりうる。そして、それらの手法によって、新しい物理学分野の探索や新奇現象の発見が期待される。

原論文（2024 年 10 月 31 日公開済）

[Self-Learning Monte Carlo with Equivariant Transformer](#)

Y. Nagai and A. Tomiya, *J. Phys. Soc. Jpn.* **93**, 114007 (2024).

< 情報提供：永井佑紀（東京大学情報基盤センター学際情報科学研究部門） >