

2025年12月08日

加速器・ビーム物理の機械学習ワークショップ2025

AIを用いた量子現象の解読と機能創出

量子科学技術研究開発機構（QST）

高崎量子技術基盤研究所 主任研究員

大門俊介

ノーベル物理学賞

「深層学習を可能にする基礎的な発見と発明」



Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach

John J. Hopfield

Prize share: 1/2



Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach

Geoffrey E. Hinton

Prize share: 1/2

www.nobelprize.org

ノーベル化学賞

「深層学習によるタンパク質の設計と構造予測」



Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach

David Baker

Prize share: 1/2



Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach

Demis Hassabis

Prize share: 1/4

www.nobelprize.org



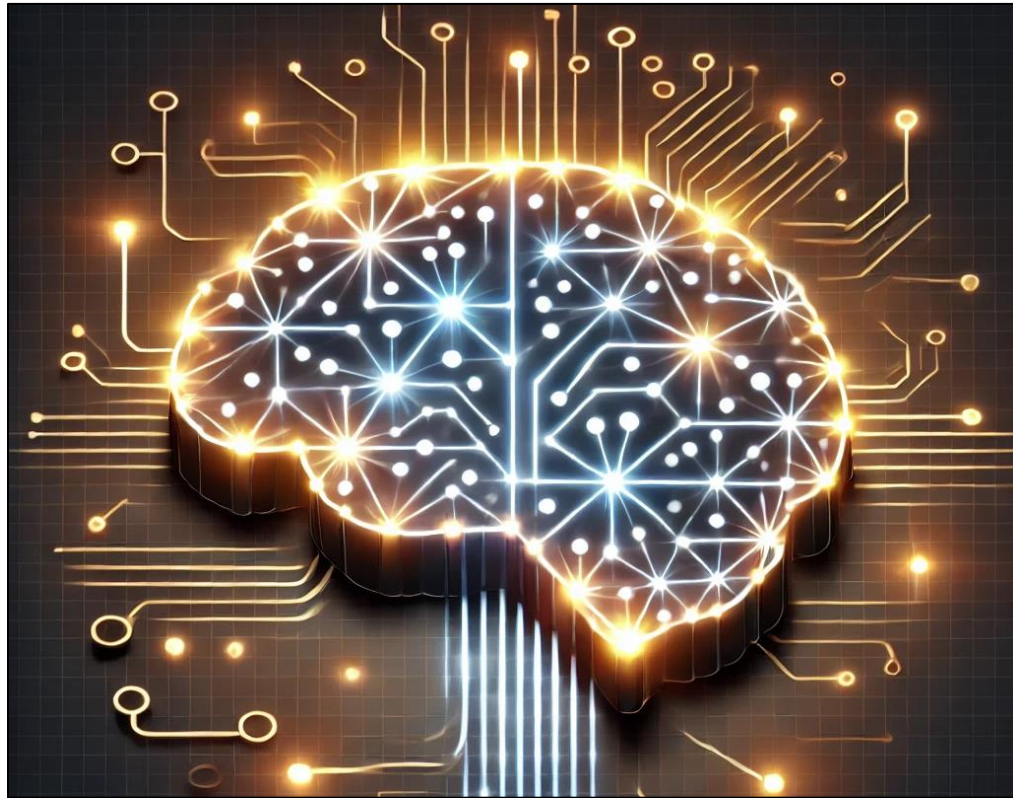
Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach

John M. Jumper

Prize share: 1/4

近年飛躍的に研究が進歩した“深層学習”に関する業績が2つの賞を独占

画像生成



chatgpt.com

- 2013年頃からVAEやGANなどの高性能な生成モデルが提案され始め、爆発的に画像生成技術が発展
 - 今では動画や音声も生成可能
 - マーケティング, 自動音声等に応用
- 画像生成モデル: VAE, GAN, Diffusion

文章生成

ChatGPT

生成AIとはなんですか？



生成AIとは、テキストや画像、音声などのコンテンツを自動的に作り出すAI技術のことです。ChatGPTや画像生成AIがその例です。

🔊 📄 📌 🔍 🔄

何に役立ちますか？

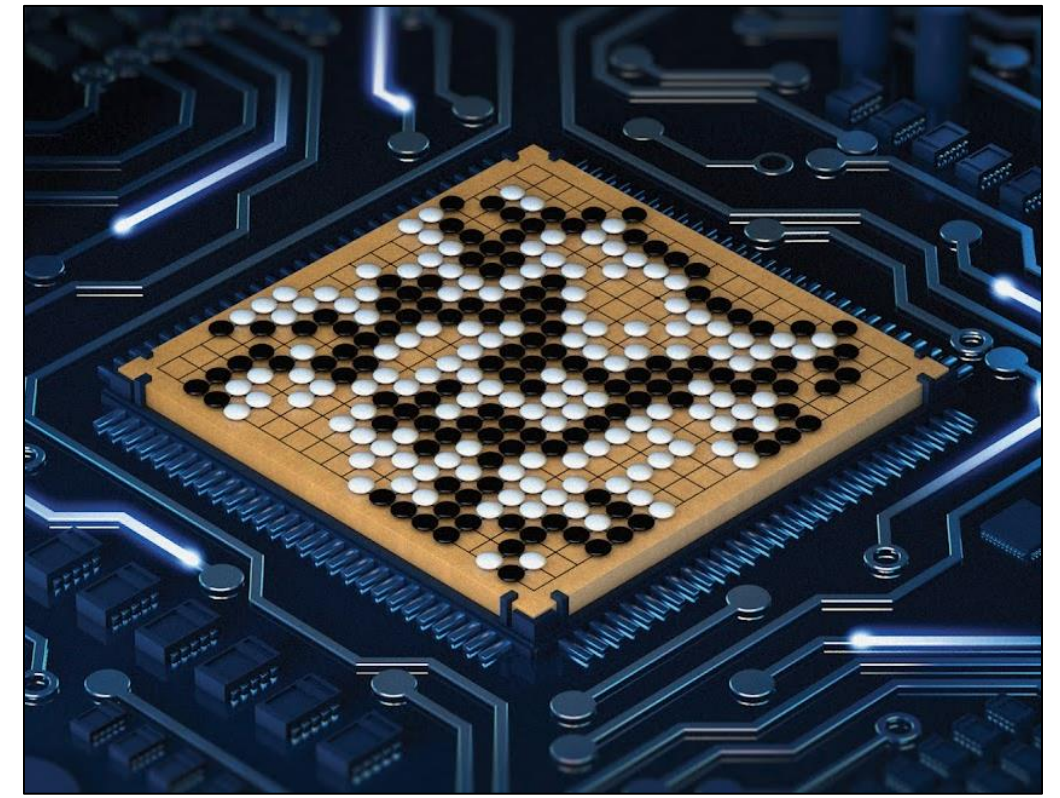


生成AIは、文章作成やデザイン、音声合成、コンテンツ制作の効率化に役立ちます。また、アイデアの発想支援や自動化など、多くの分野で活用されています。

chatgpt.com

- 2017年に基盤となるAIモデルが提案され、2022年にChatGPTがリリース
 - 日本の医師国家試験の最低合格得点を超えるほど高性能
 - 翻訳, 文章作成, 自動チャット等に応用
- 自然言語処理モデル: Transformer

戦略最適化



deepmind.google

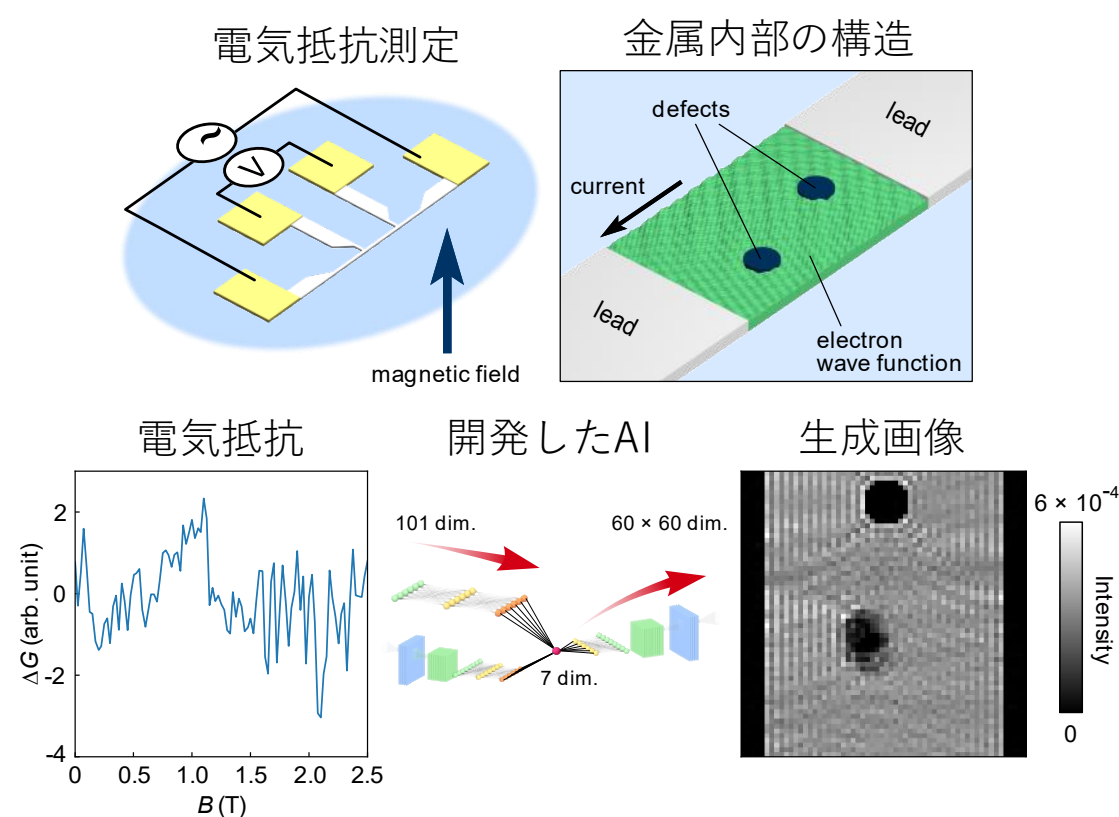
- Googleが開発した囲碁AI “AlphaGo”が2016年に囲碁の世界トップ棋士に勝利
 - 今では、囲碁だけでなく将棋やチェスも人間はAIに勝つことができない
 - 自動運転, ロボット制御などに応用
- 強化学習モデル: Deep Q network, A3C

深層学習の発展により革新的な応用技術が次々と開発されノーベル賞に繋がった

画像生成AI

AIナノ構造顕微鏡

電気抵抗を測定するだけで、金属の内部構造を可視化できるAI顕微鏡技術を開発



S. Daimon, K. Tsunekawa, S. Kawakami, T. Kikkawa *et al.*, *Nature Communications* **63**, 032003 (2022).

東大物工

齊藤教授
(元原研先端研GL)

恒川さん

川上さん

吉川助教
(現在原研先端研GL)

上智大理工

大槻教授

岩大理工

大柳助教

当時 東北大

Ramos研究員

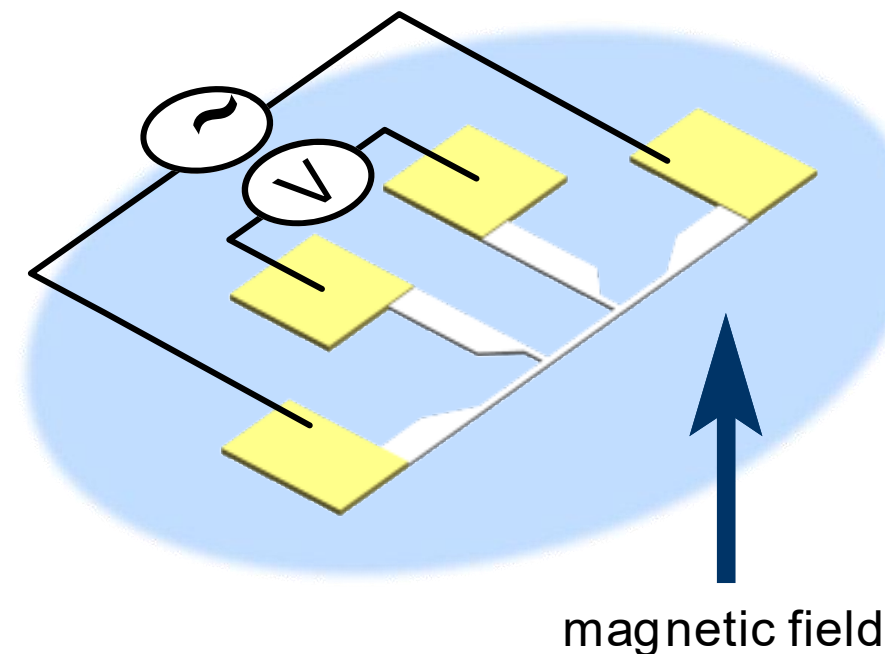
1. 量子伝導現象

2. 深層学習による量子指紋の解読

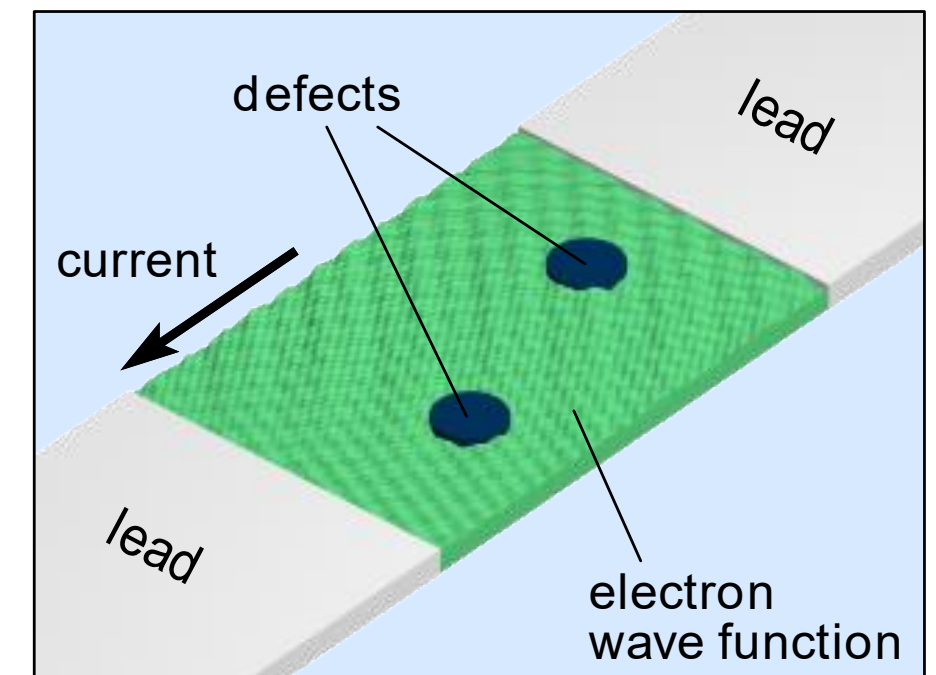
3. 量子干渉情報の抽出

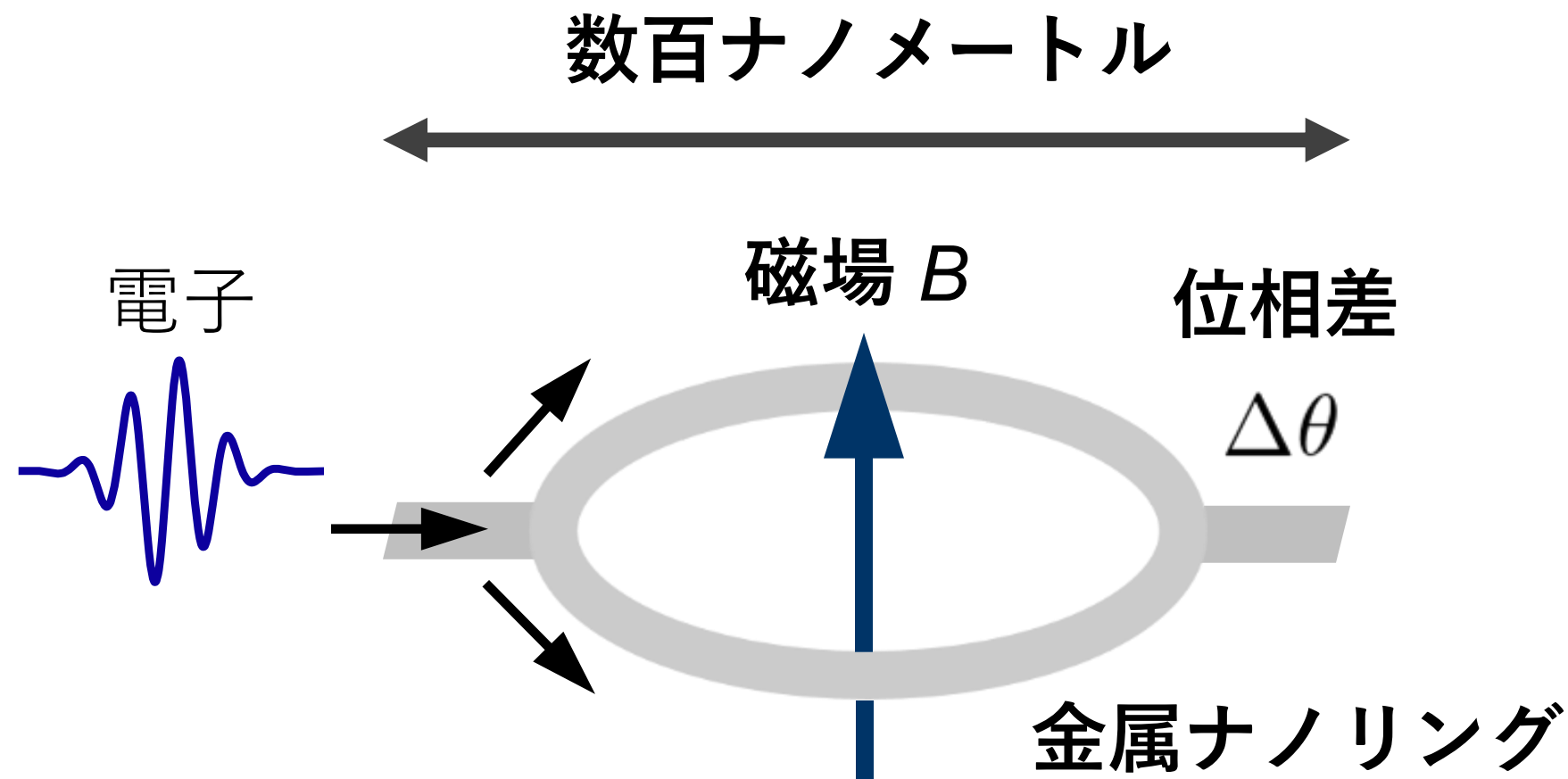
4. 極低温実験

磁気伝導度測定



金属ナノ細線



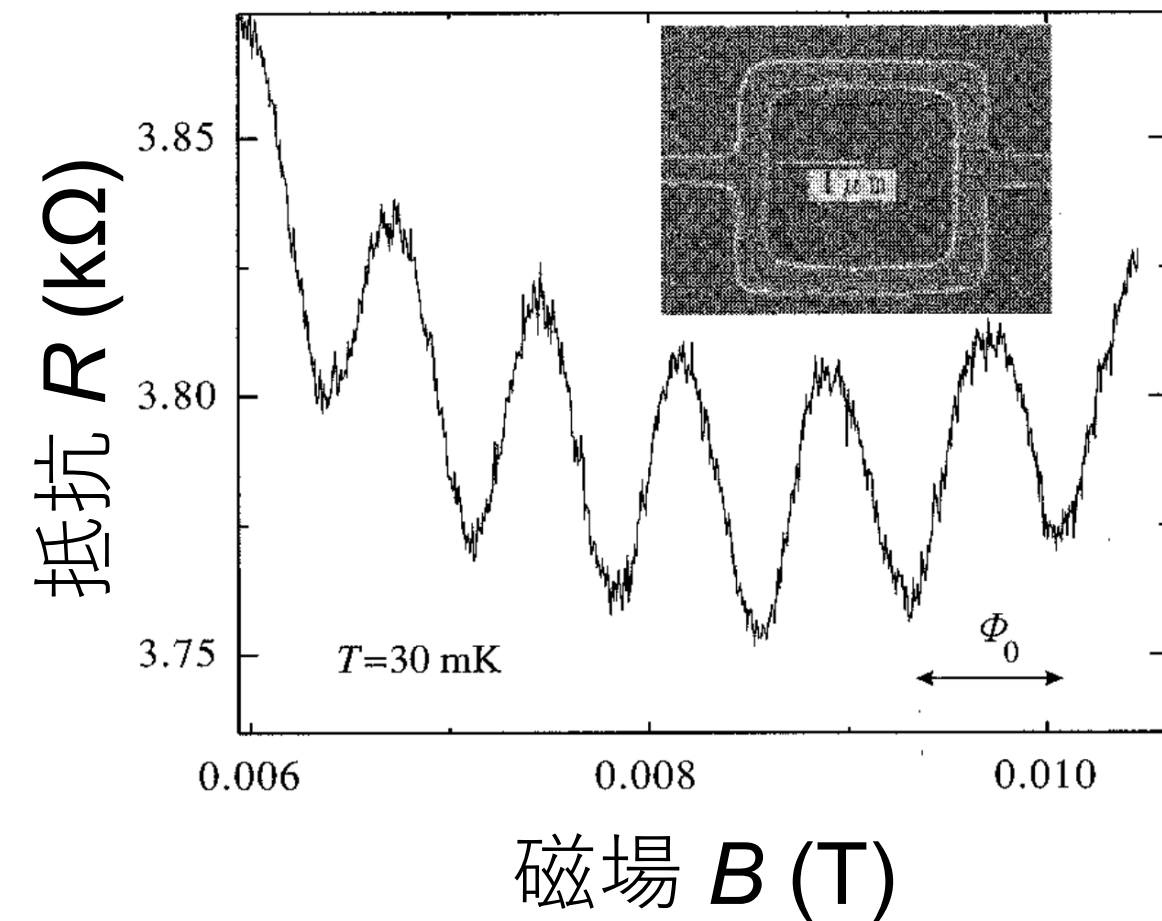


上下の経路間の位相差：

$$\Delta\theta = \frac{q}{\hbar} \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = -2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}$$

リングを貫く磁束に応じて位相干渉

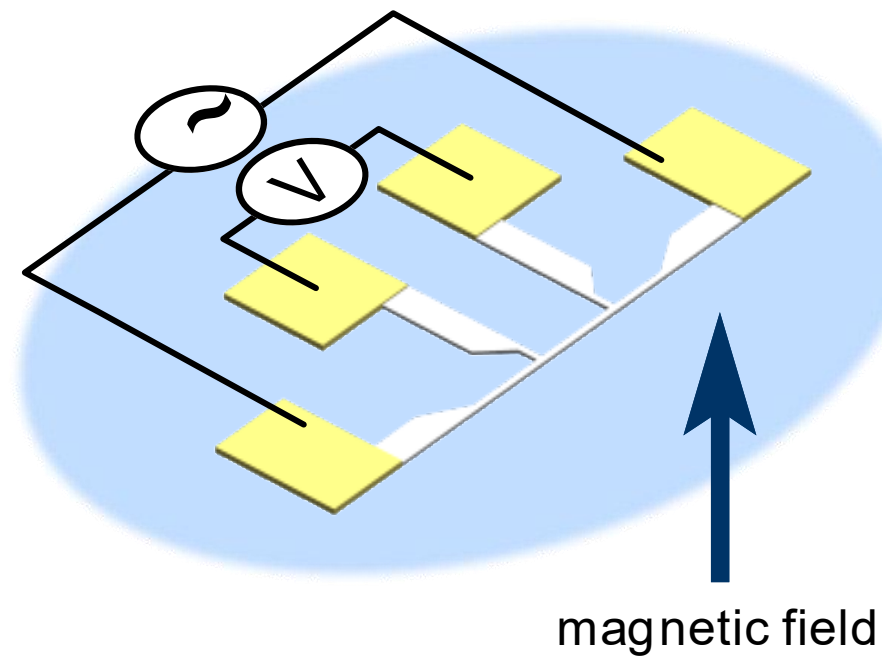
周期的な振動



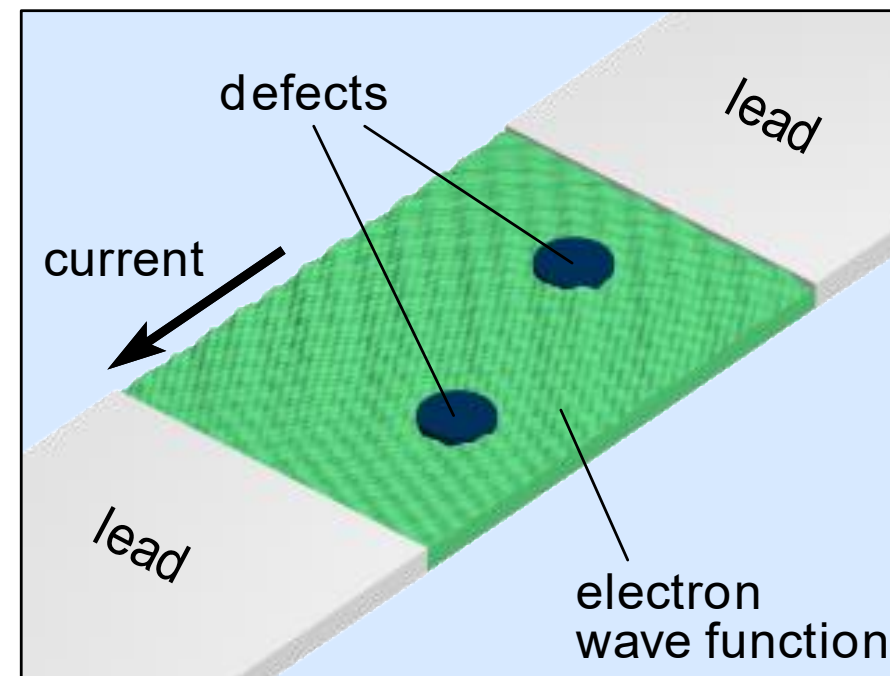
勝本信吾 著「メソスコピック系」 朝倉書店 (2003).

フーリエ解析により
サイズや形状の情報を抽出可能

磁気伝導度測定

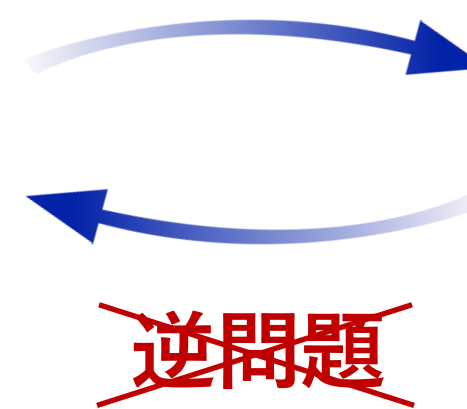


金属ナノ細線

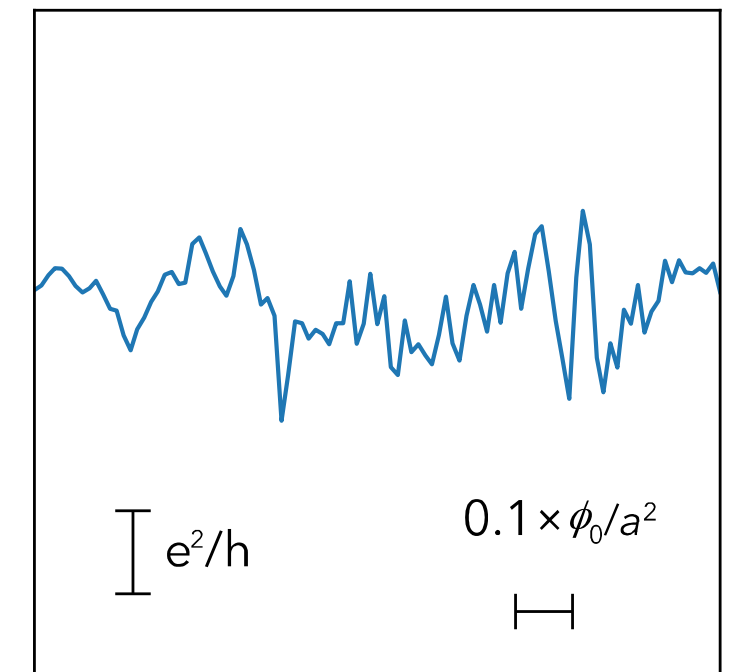


電子が欠陥で散乱
干渉が伝導度を決める

測定



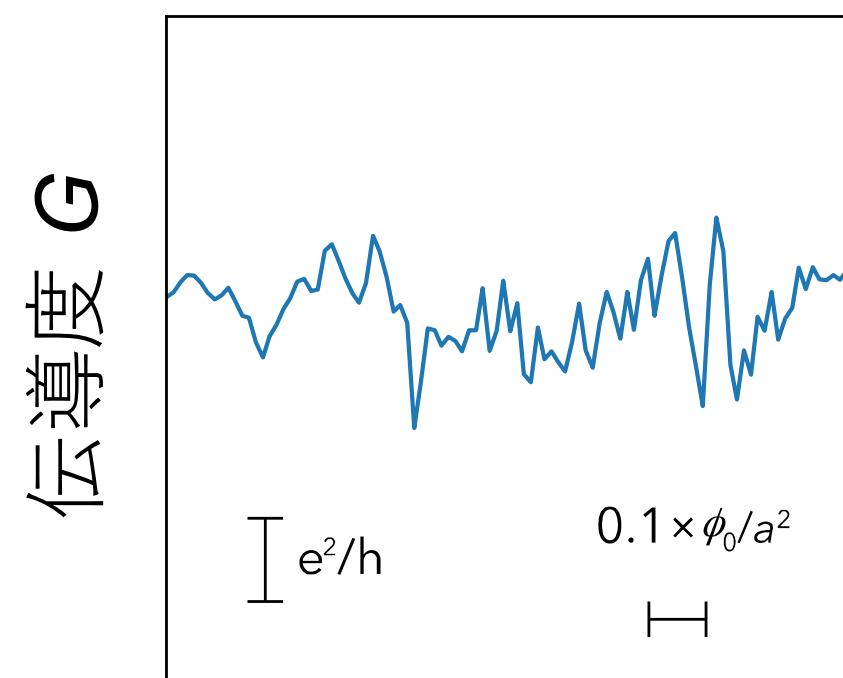
量子指紋 (試料固有の振動)



磁場 B
一般に周期性なし
ランダムな信号

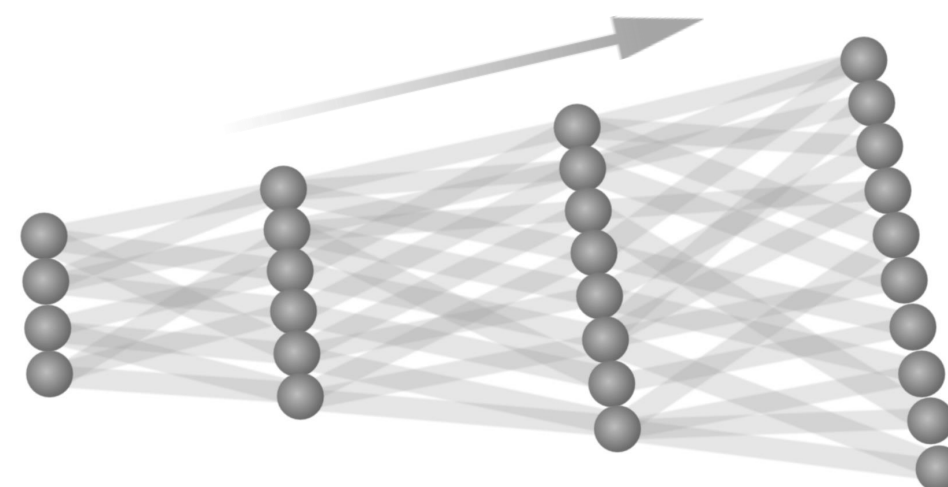
量子指紋から内部情報の抽出は不可能と考えられてきた

量子指紋



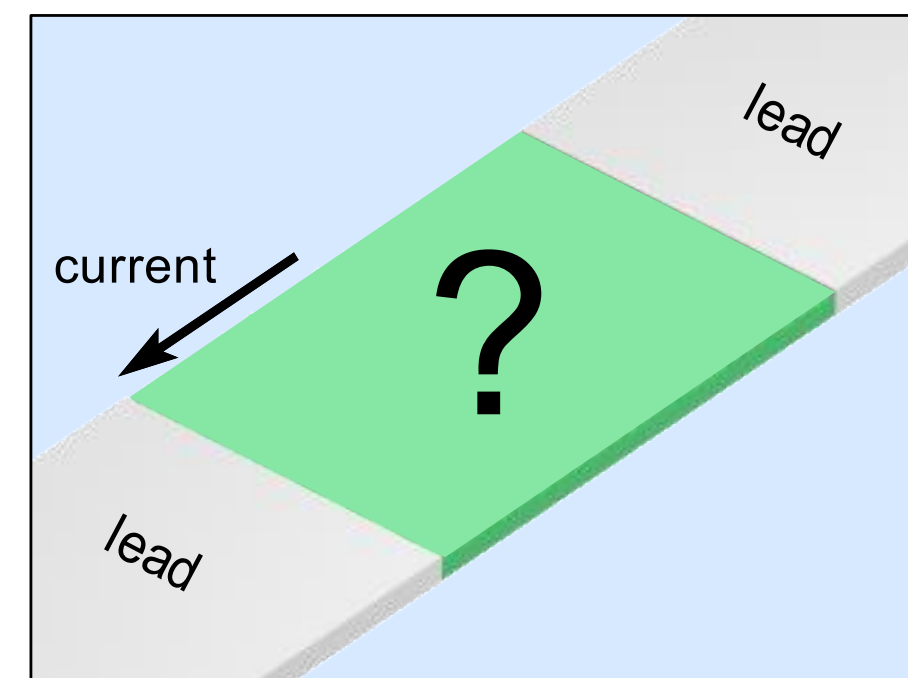
磁場 B

深層ネットワーク



ミクロ情報の復元

ミクロ構造

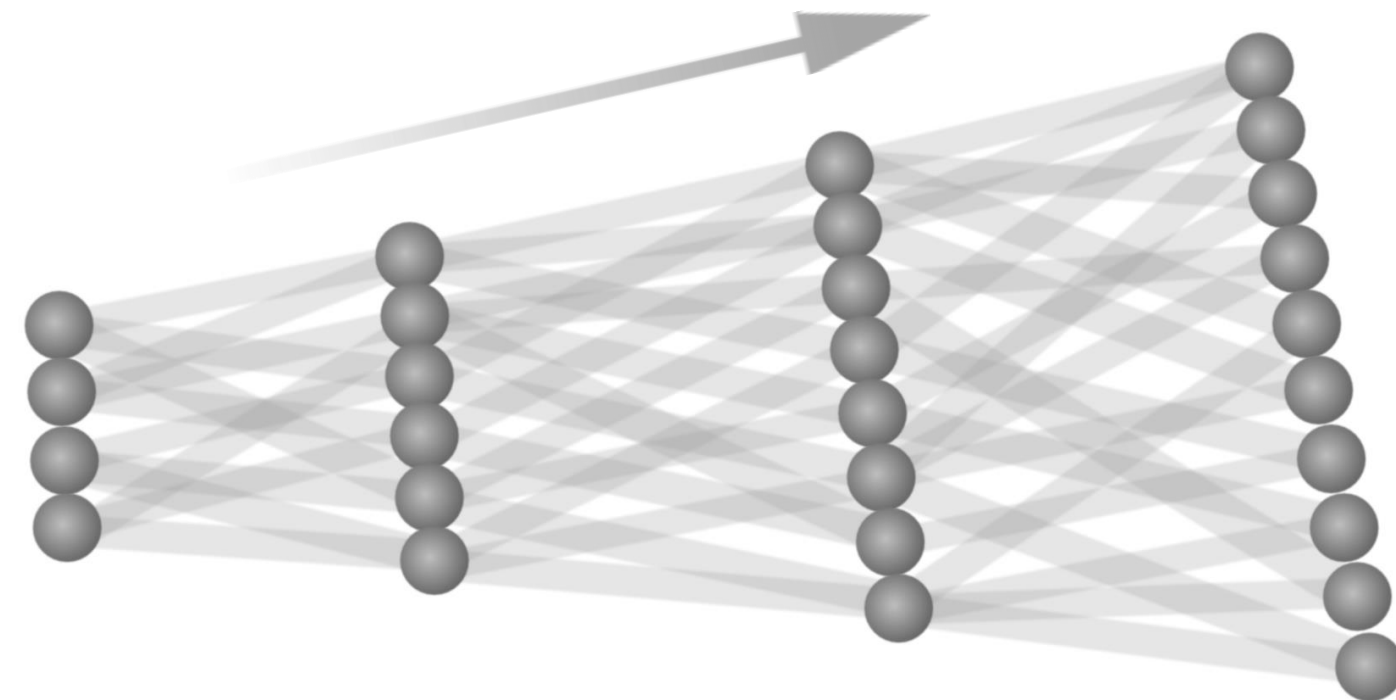
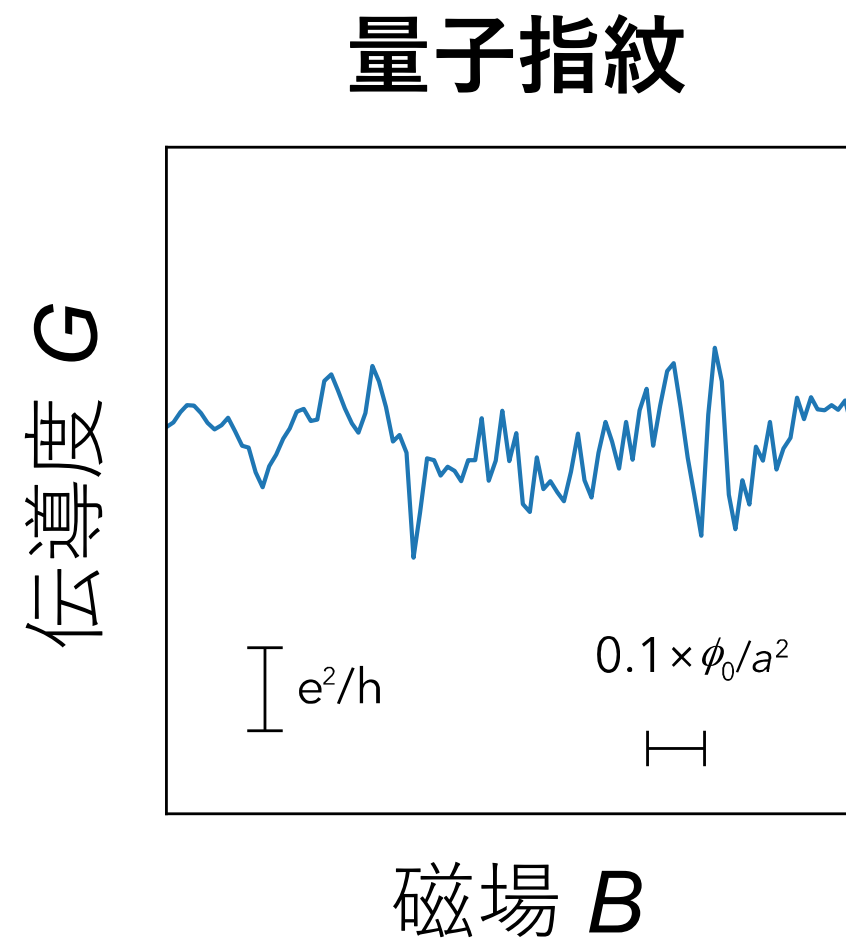


試料形状？
波動関数？

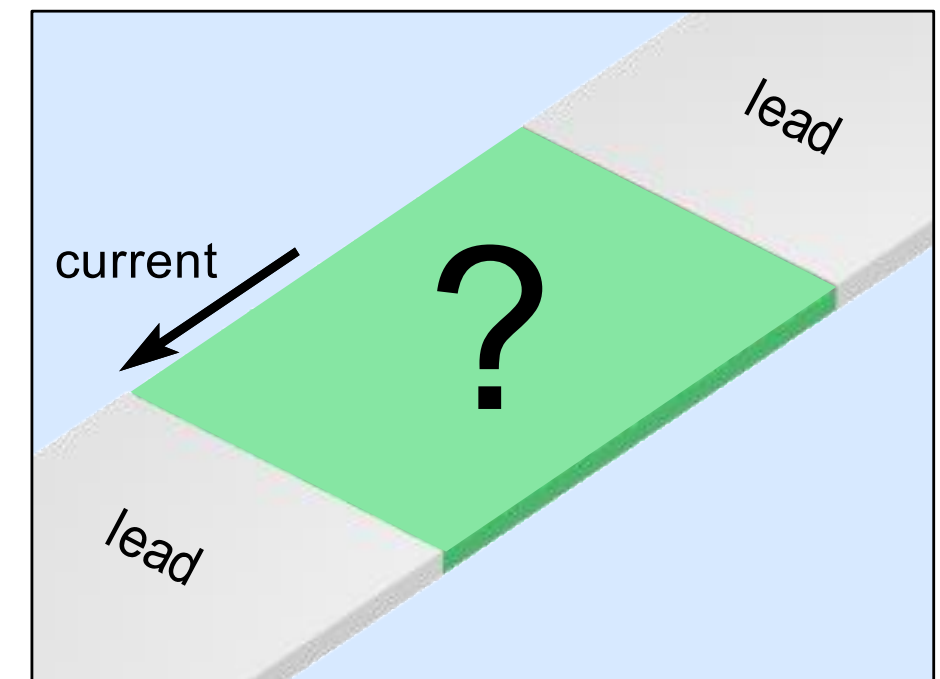
深層学習の高い表現力を駆使してミクロ構造の復元に挑戦

これまでランダムだと思われてきた量子指紋を解読し、ミクロ情報を抽出する

全結合ニューラルネットワーク

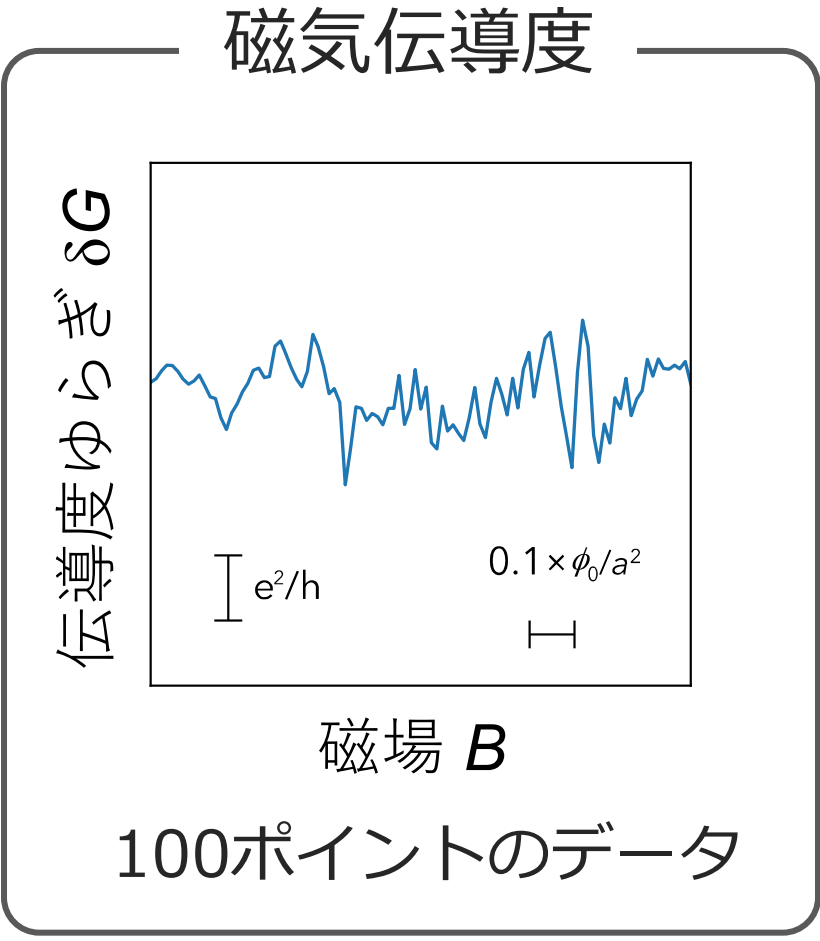
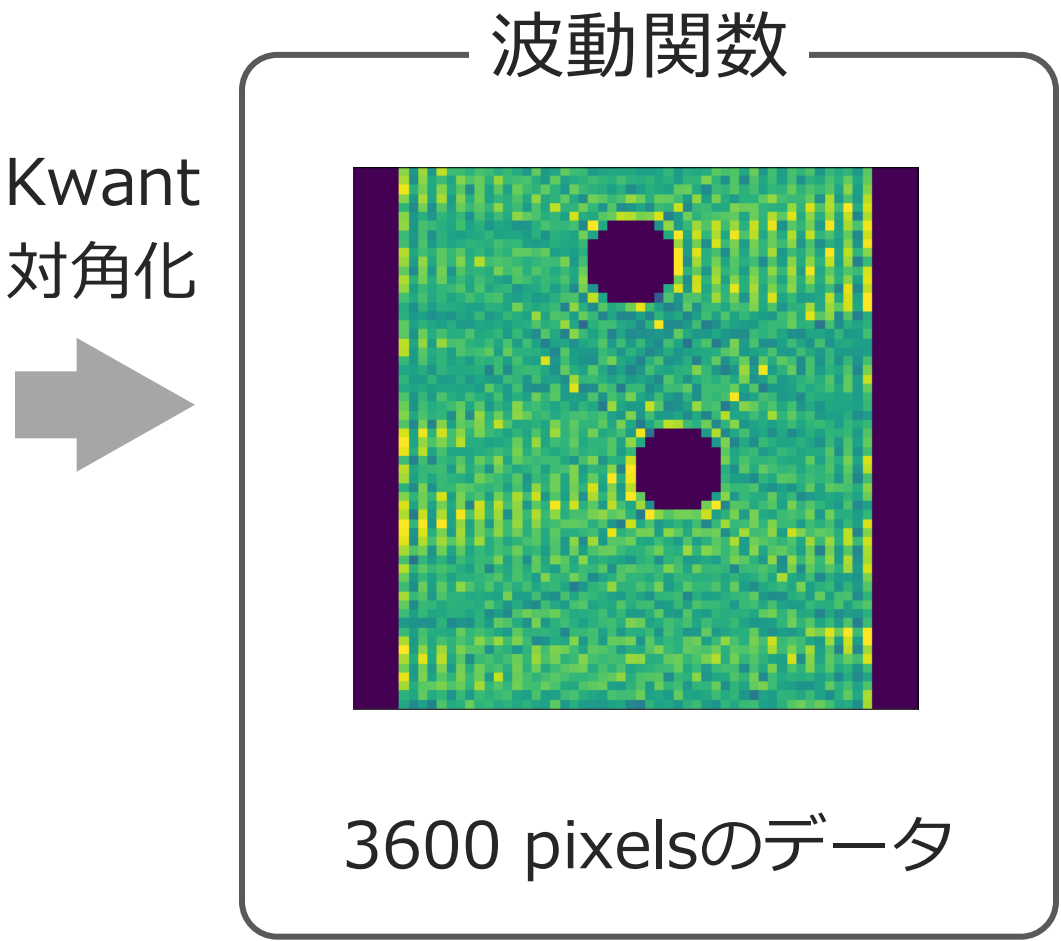
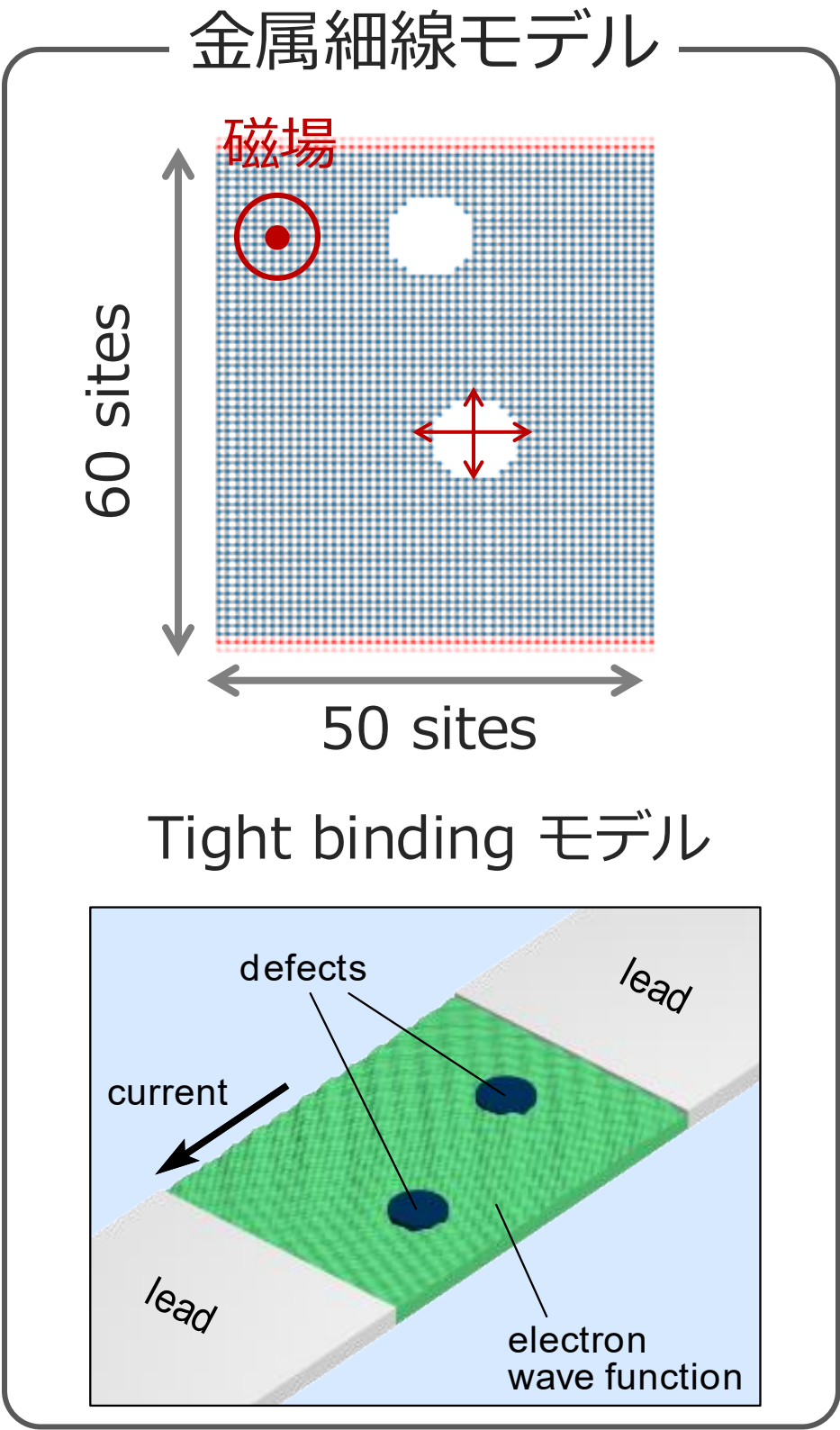


ミクロ構造



試料形状, 波動関数

単純な全結合ネットワークによるミクロ構造の復元

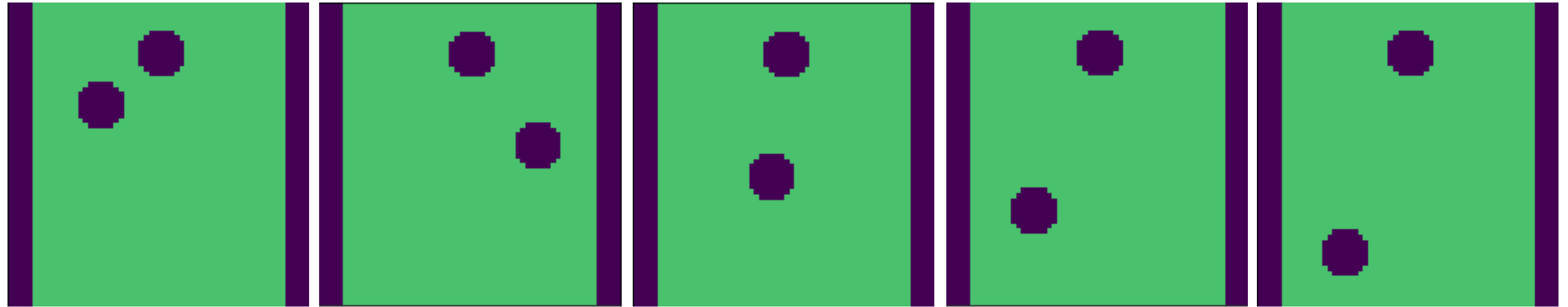


ハミルトニアン $H = \sum_i (4t + W) |i\rangle \langle i| + \sum_{\langle i,j \rangle} -t \cdot e^{i\theta} |i\rangle \langle j|$

ランダウアー
ビュティカー $G = \frac{e^2}{h} \sum_{nm} |S_{nm}|$

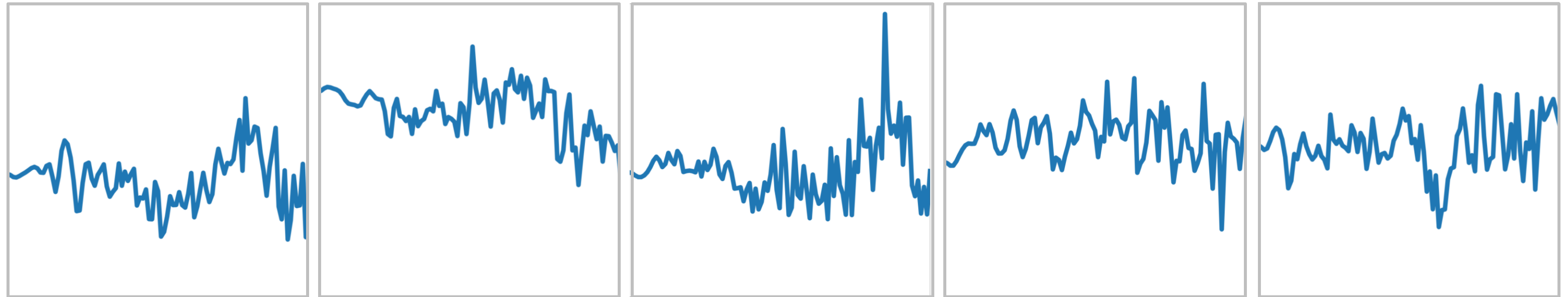
散乱行列 $S_{nm} = \int dx \phi_m^{\text{out}} \psi_n^{\text{in}}$

アンチドット配置

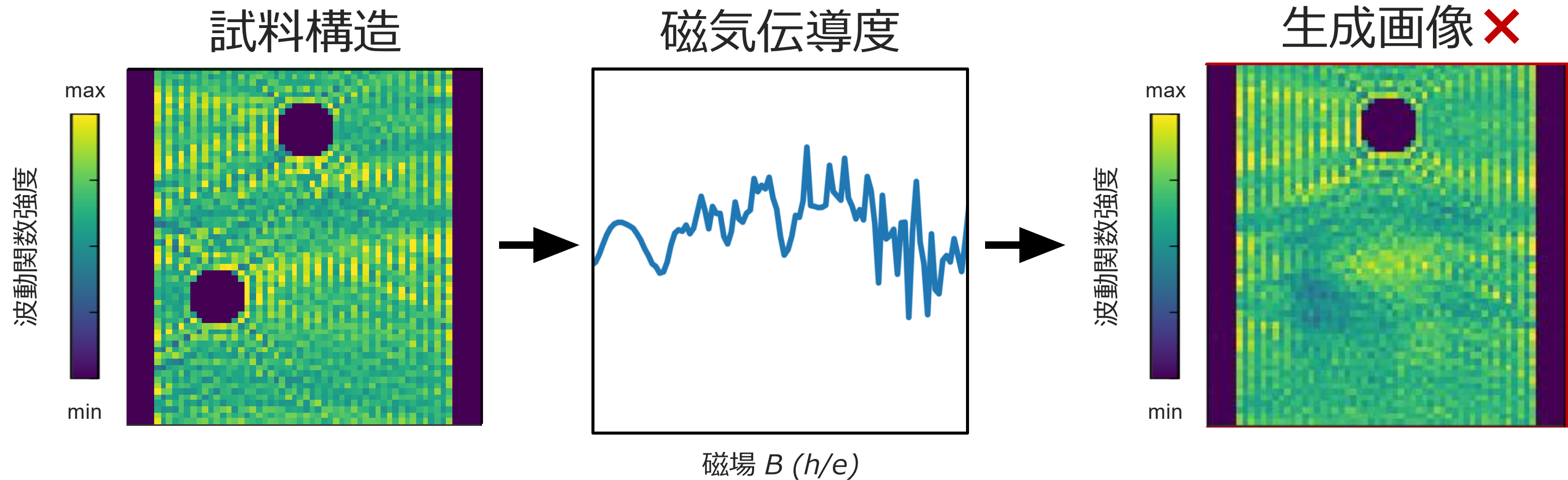
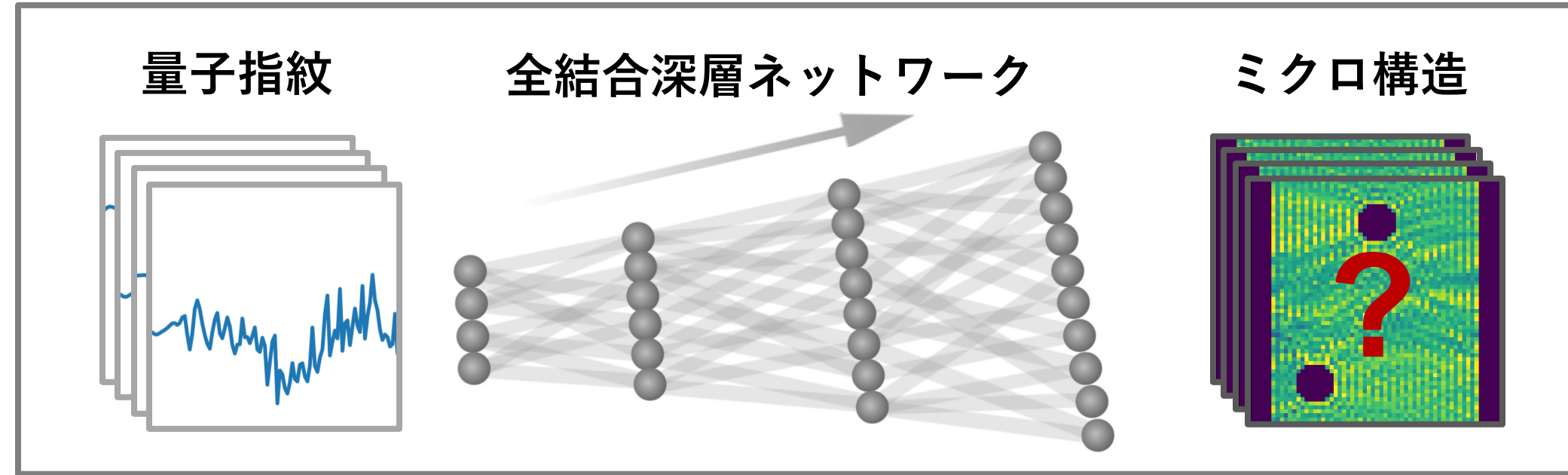


磁気伝導度

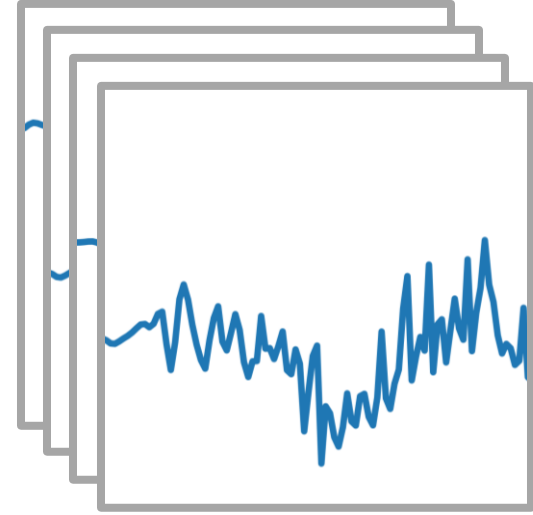
伝導度ゆらぎ δG



磁場 B

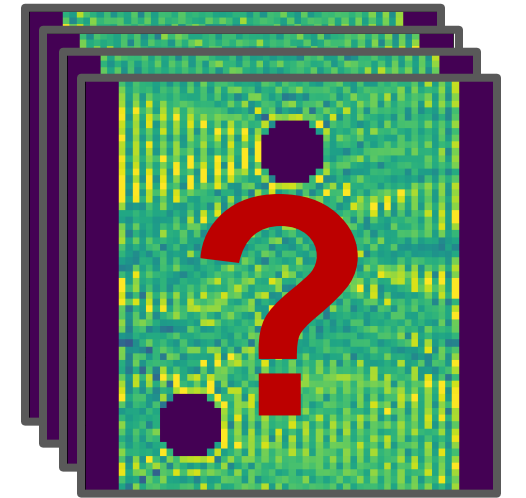


磁気伝導度

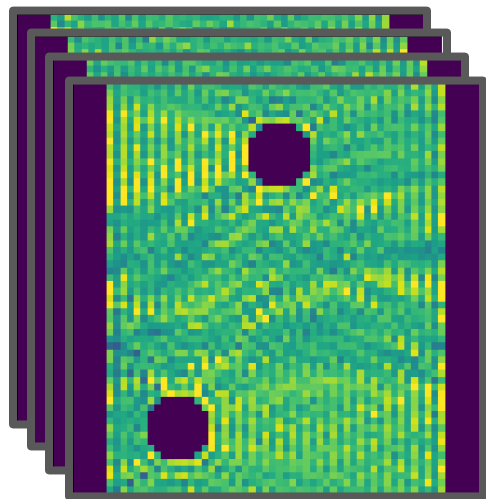


深層生成ネットワーク

生成画像



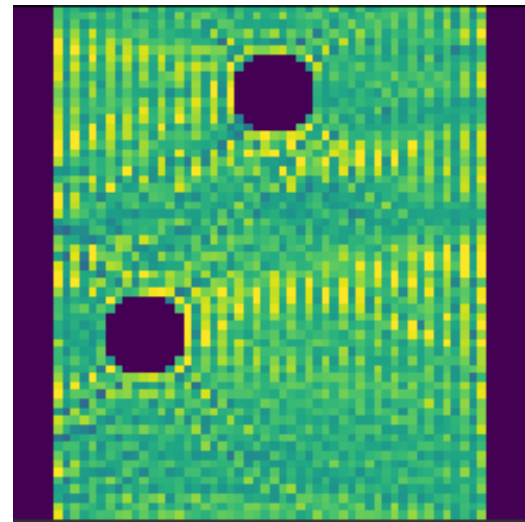
波動関数像



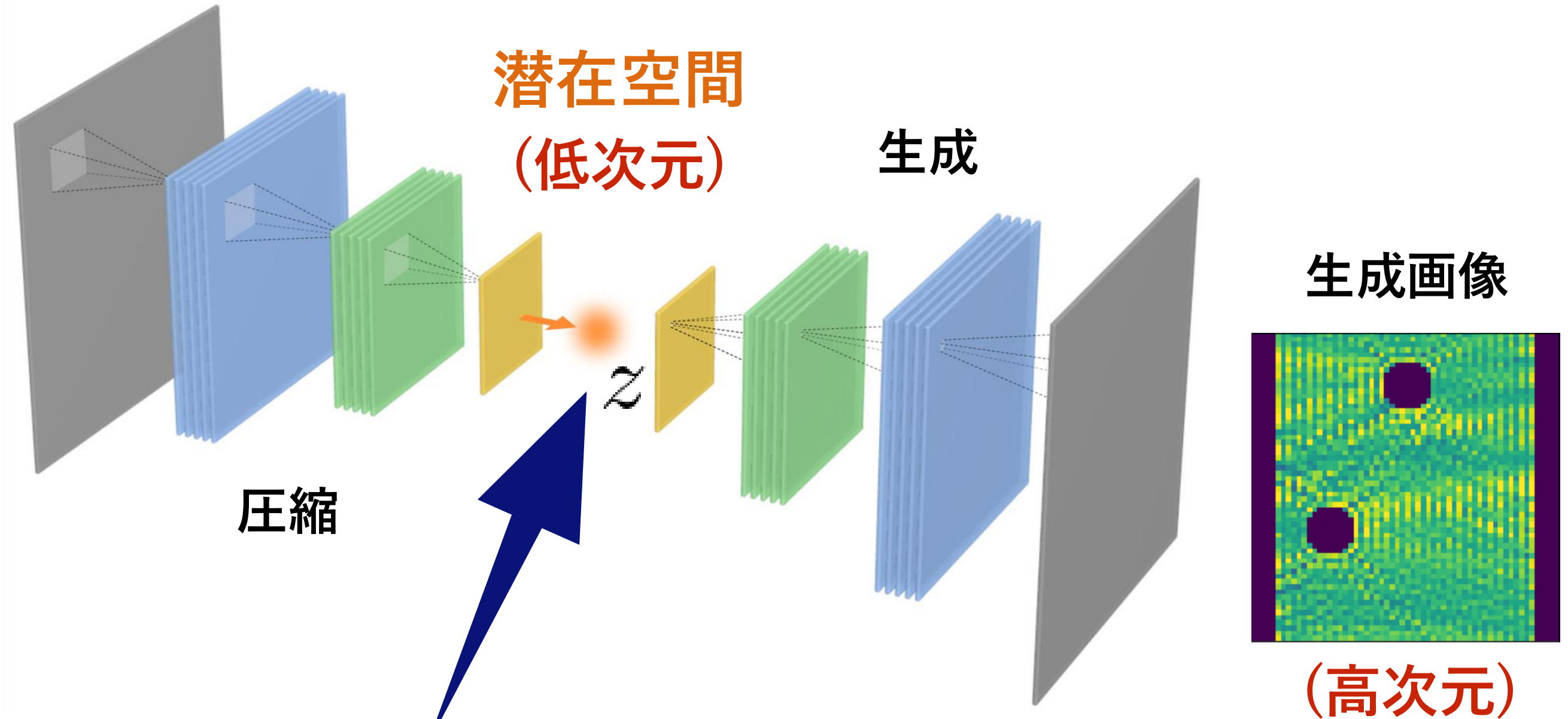
特徴抽出に特化したネットワーク

Variational Autoencoder (VAE)

入力：波動関数像

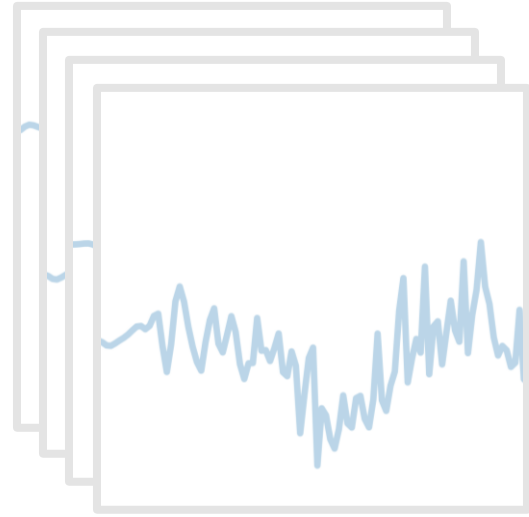


(高次元)



入出力が一致 = 重要な情報が抽出

磁気伝導度

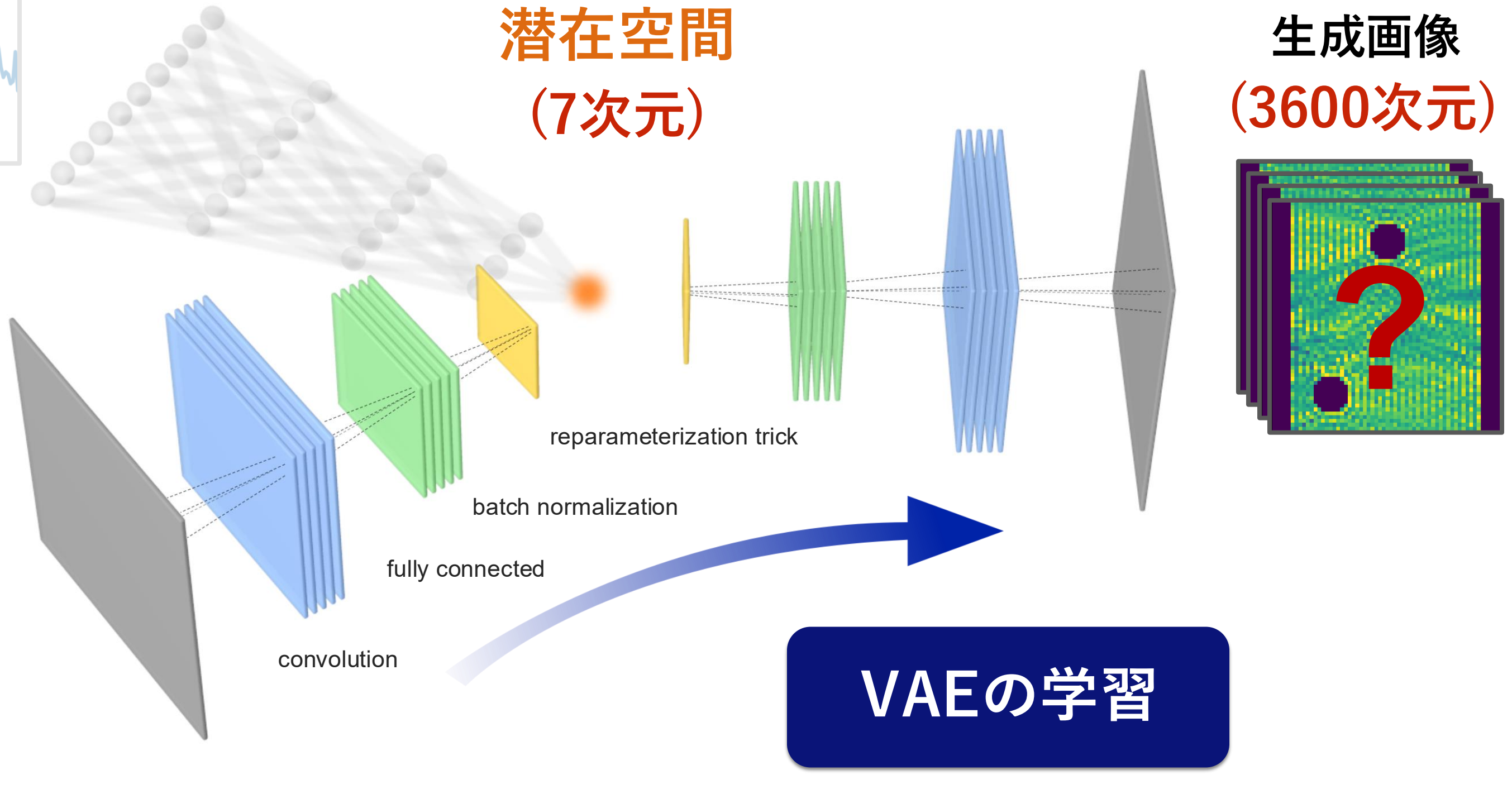
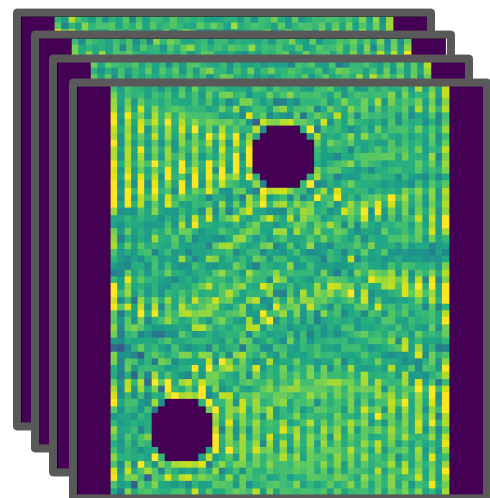


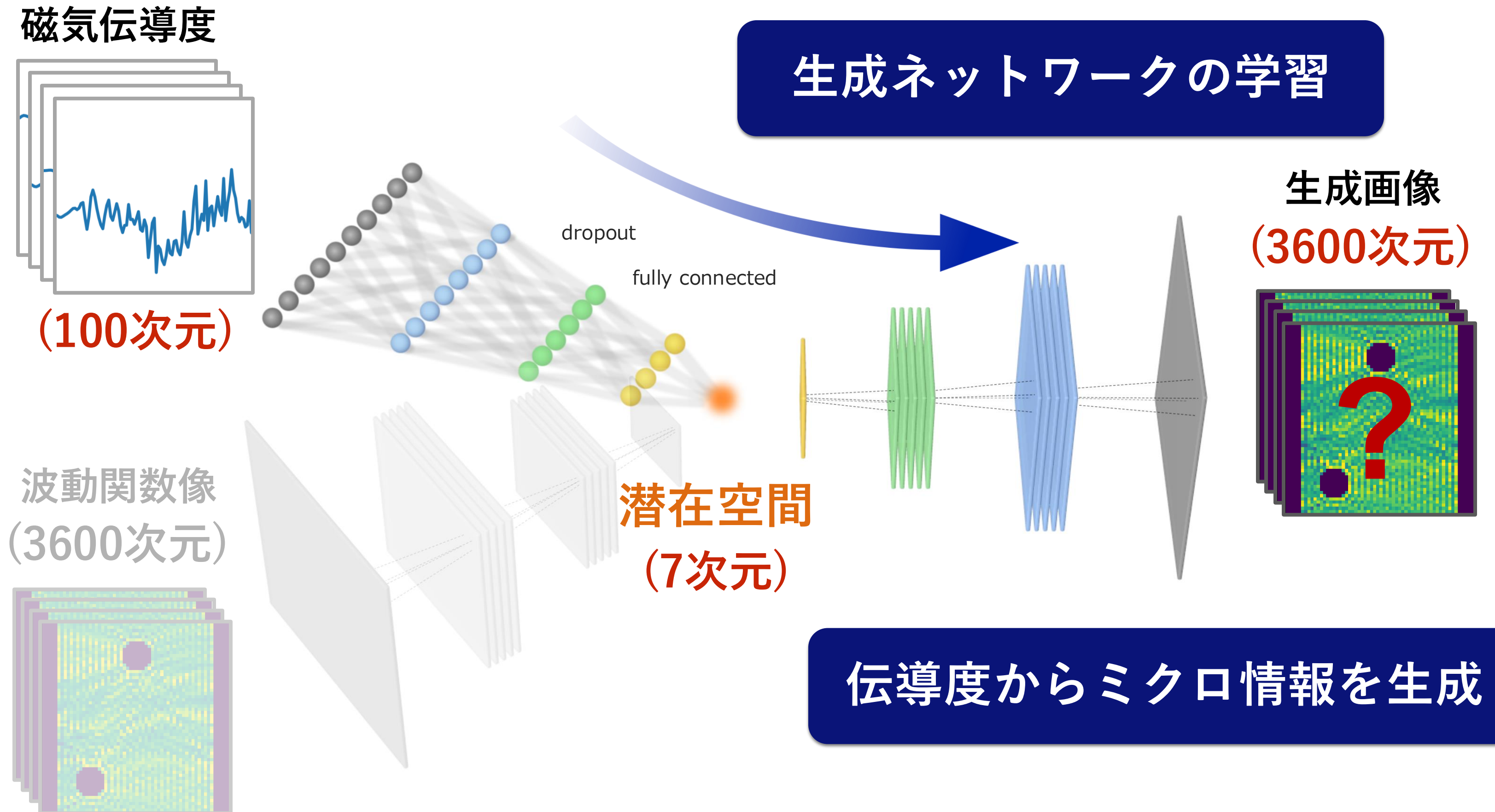
波動関数の情報を抽出

潜在空間
(7次元)

生成画像
(3600次元)

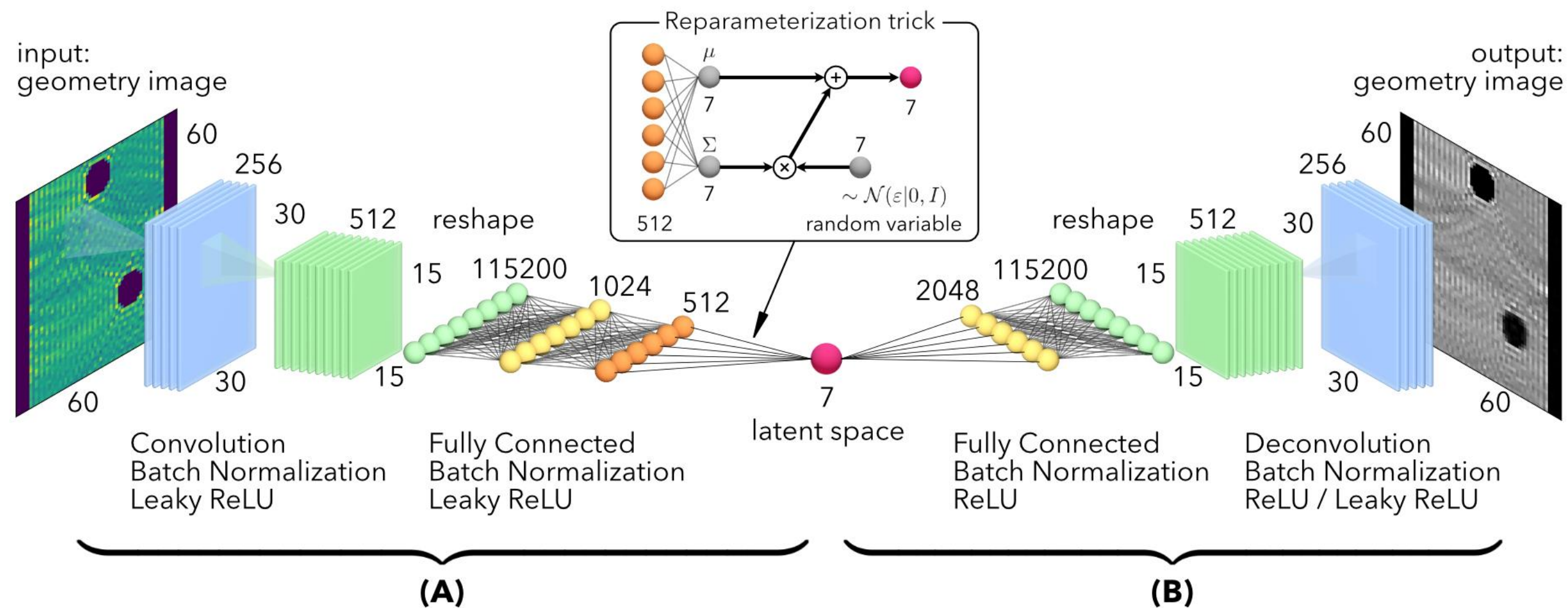
波動関数像
(3600次元)





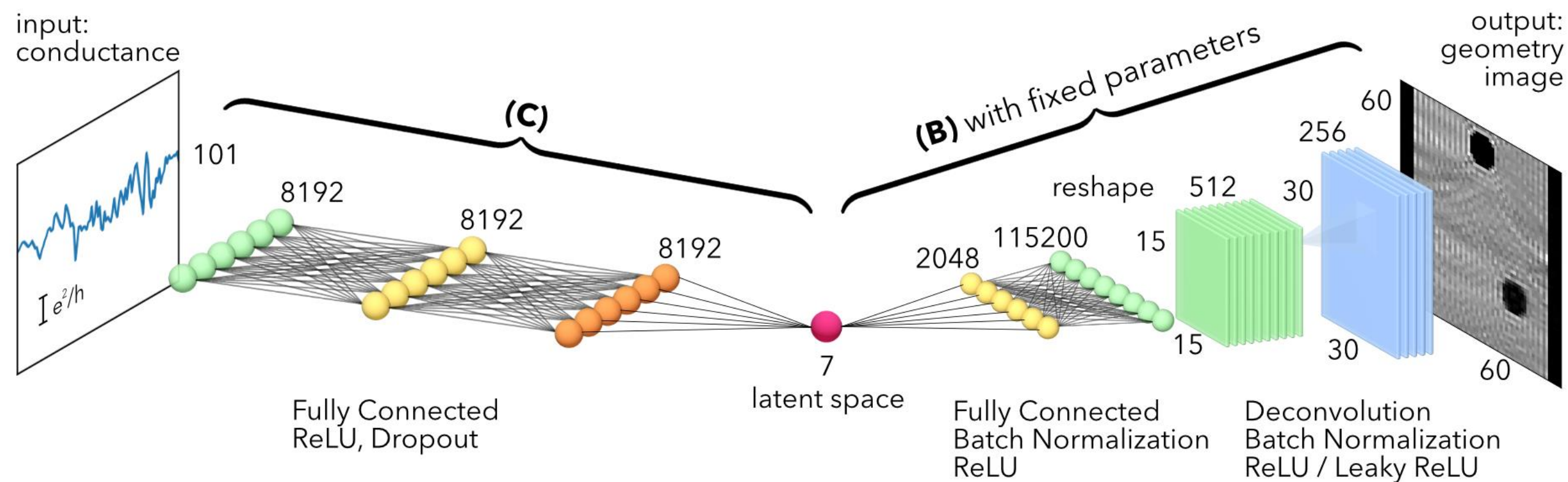
VAE

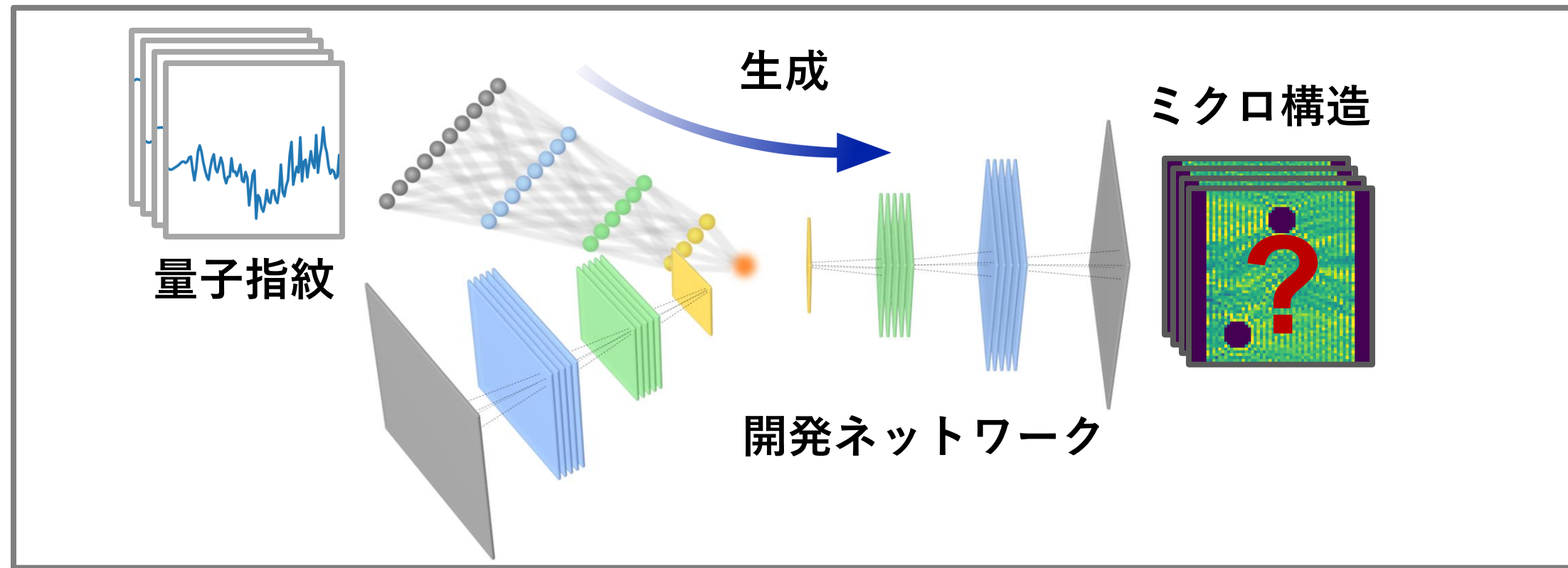
特徴抽出



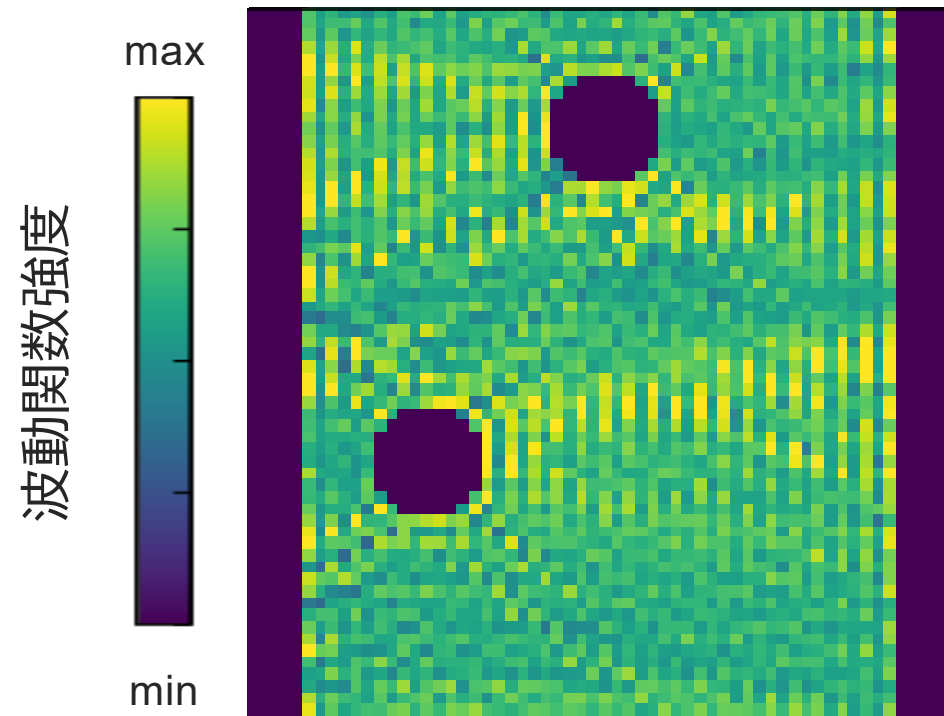
量子指紋解読

画像生成

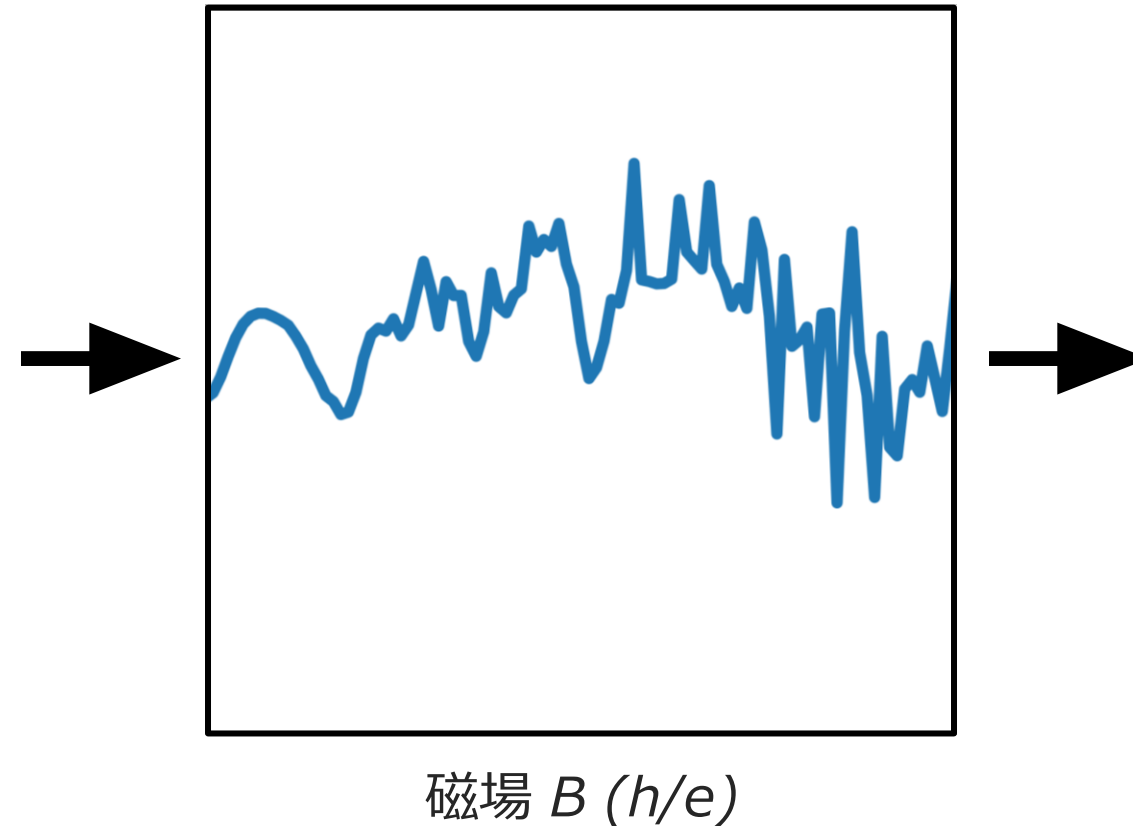




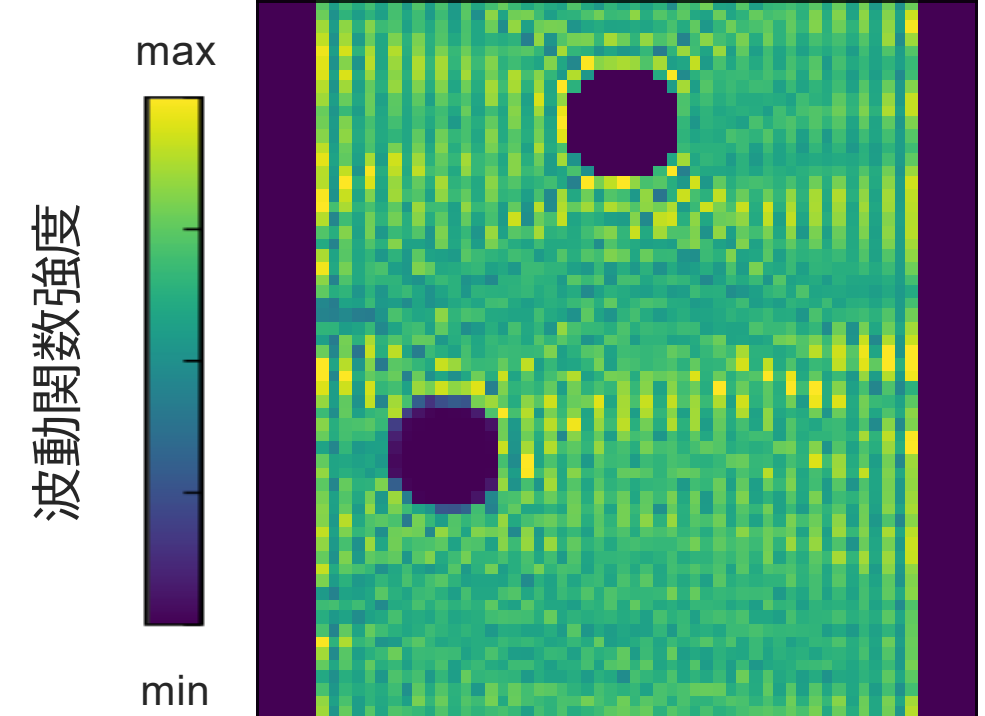
試料構造



磁気伝導度

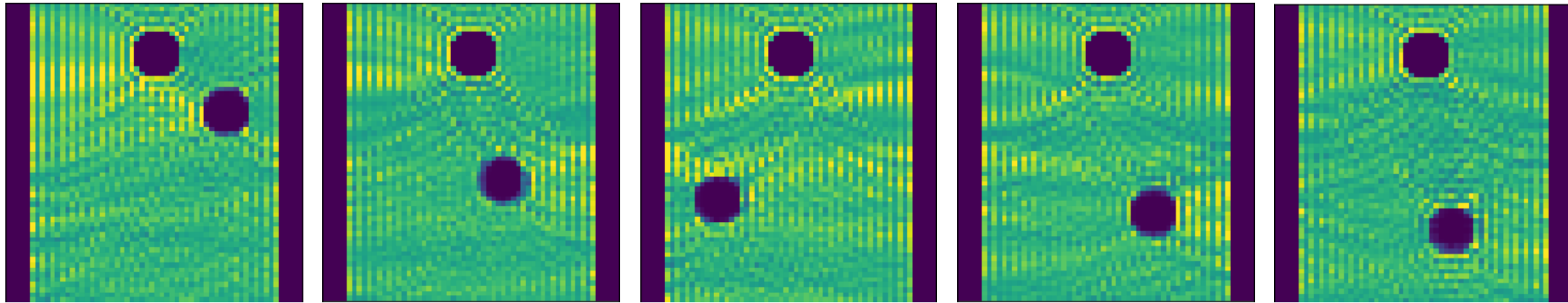


生成画像

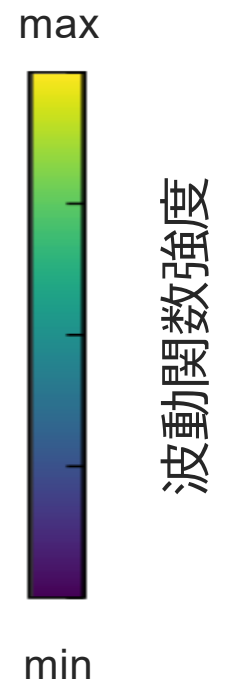
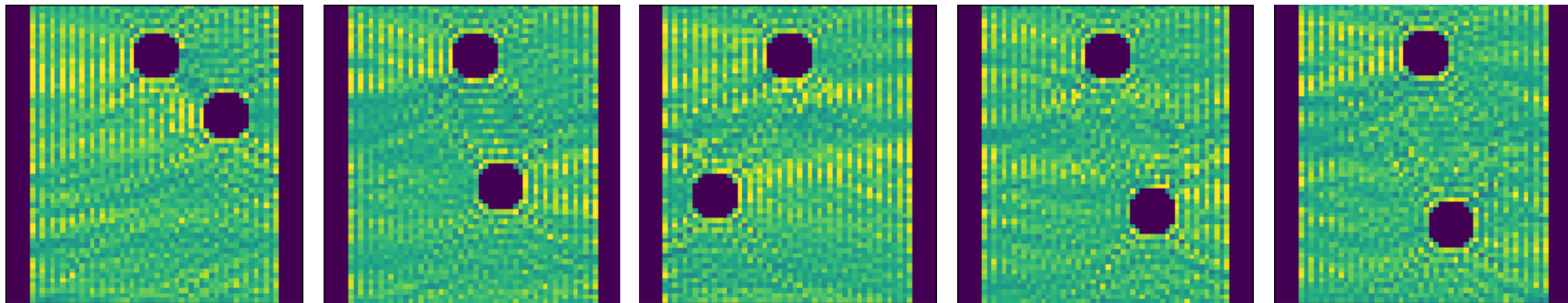


複数のテストデータに対する出力と答えの比較

生成画像

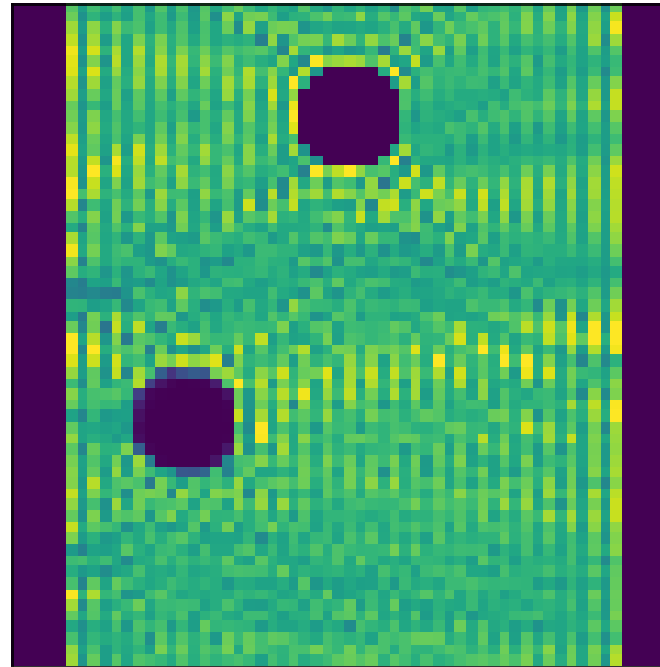


答え画像

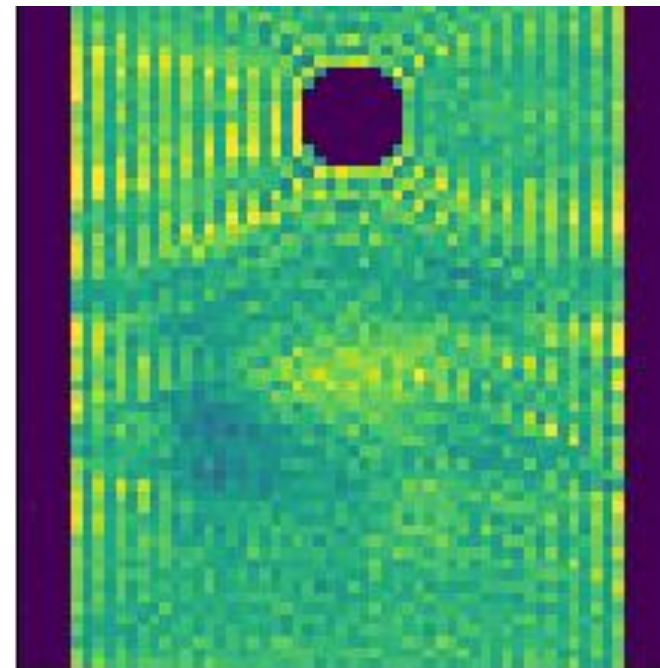


未知のデータに対しても高い予測精度

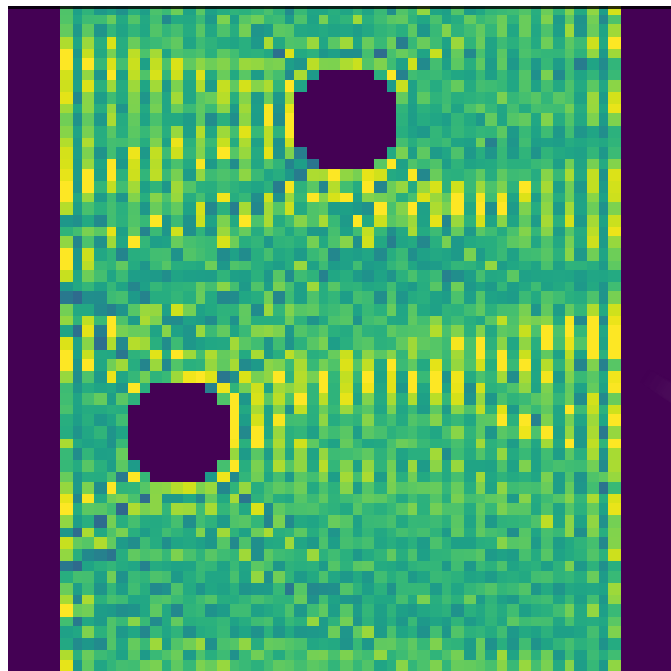
生成画像



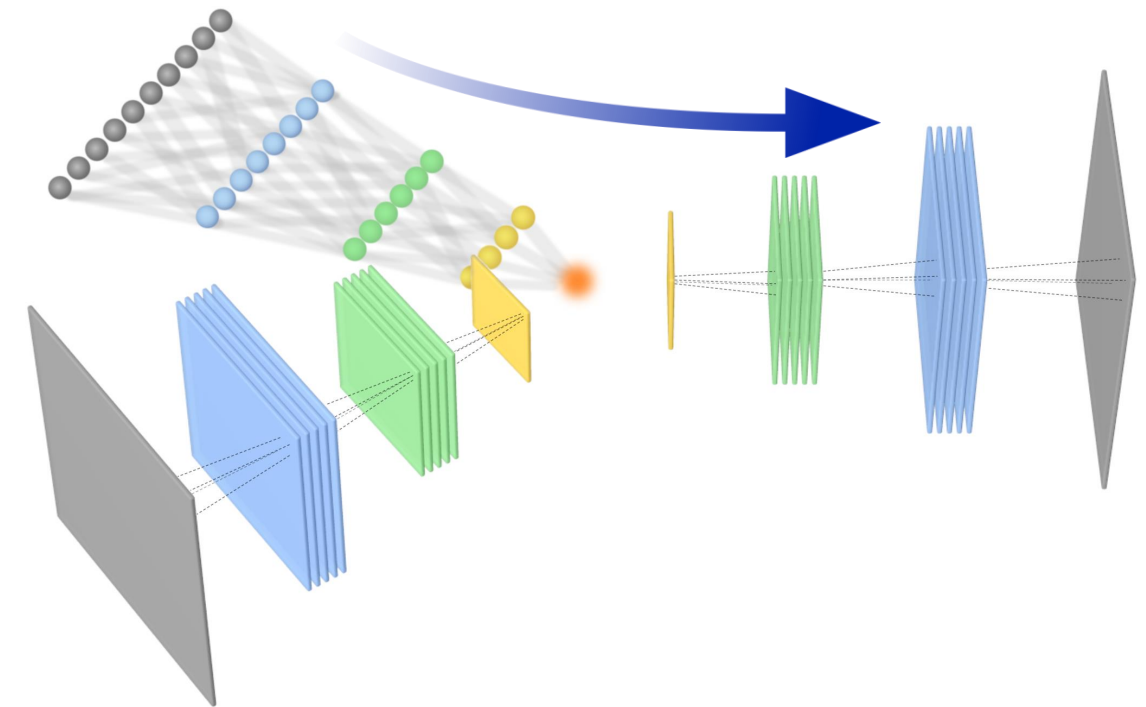
生成画像



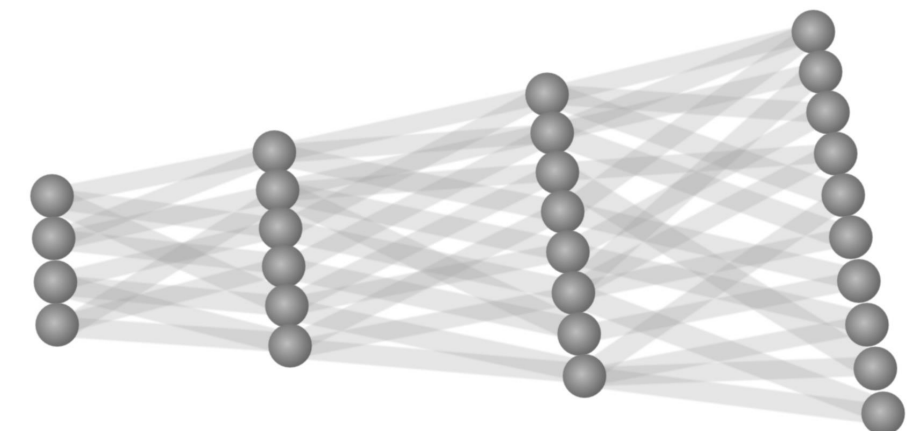
波動関数像



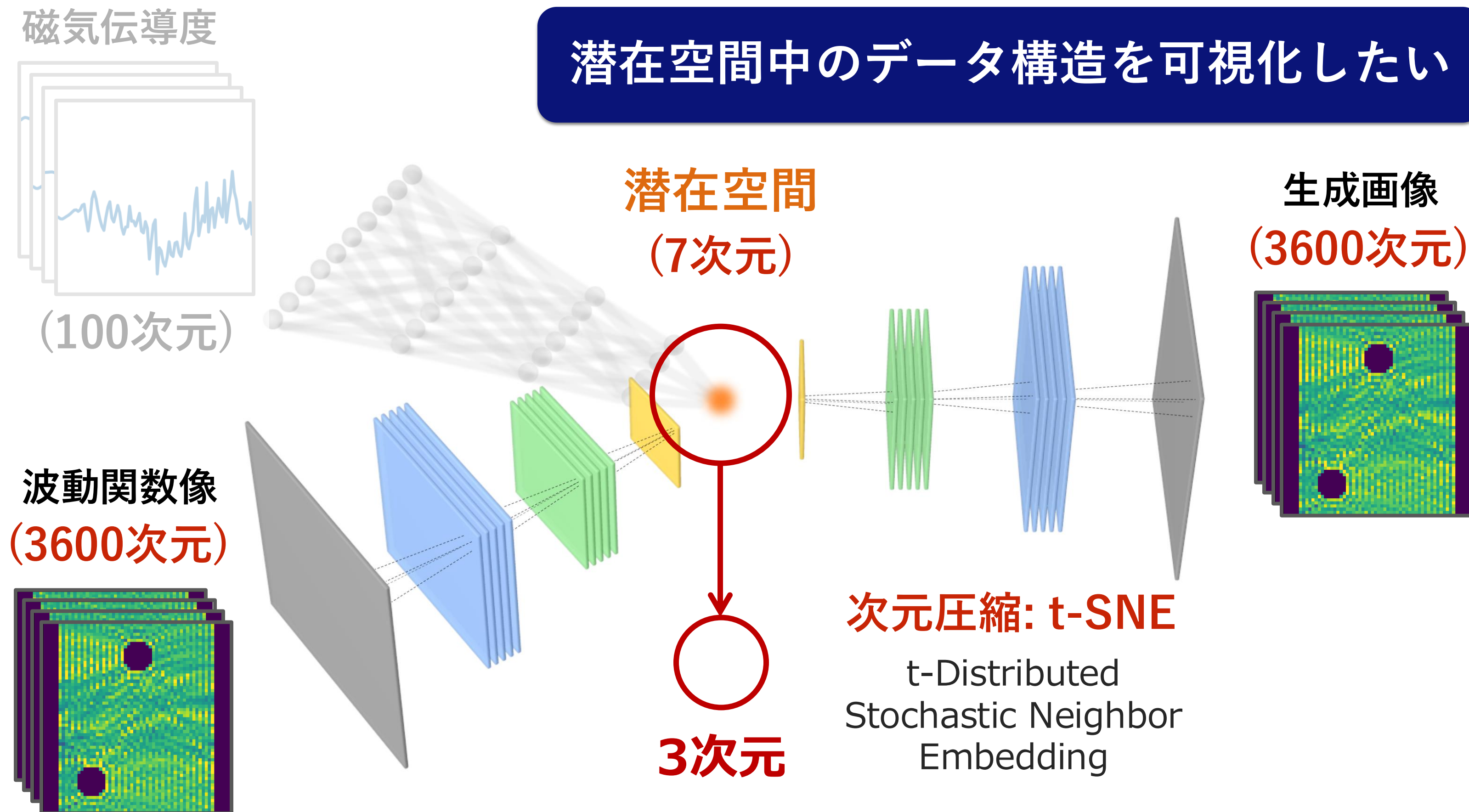
VAEを駆使した開発ネットワーク



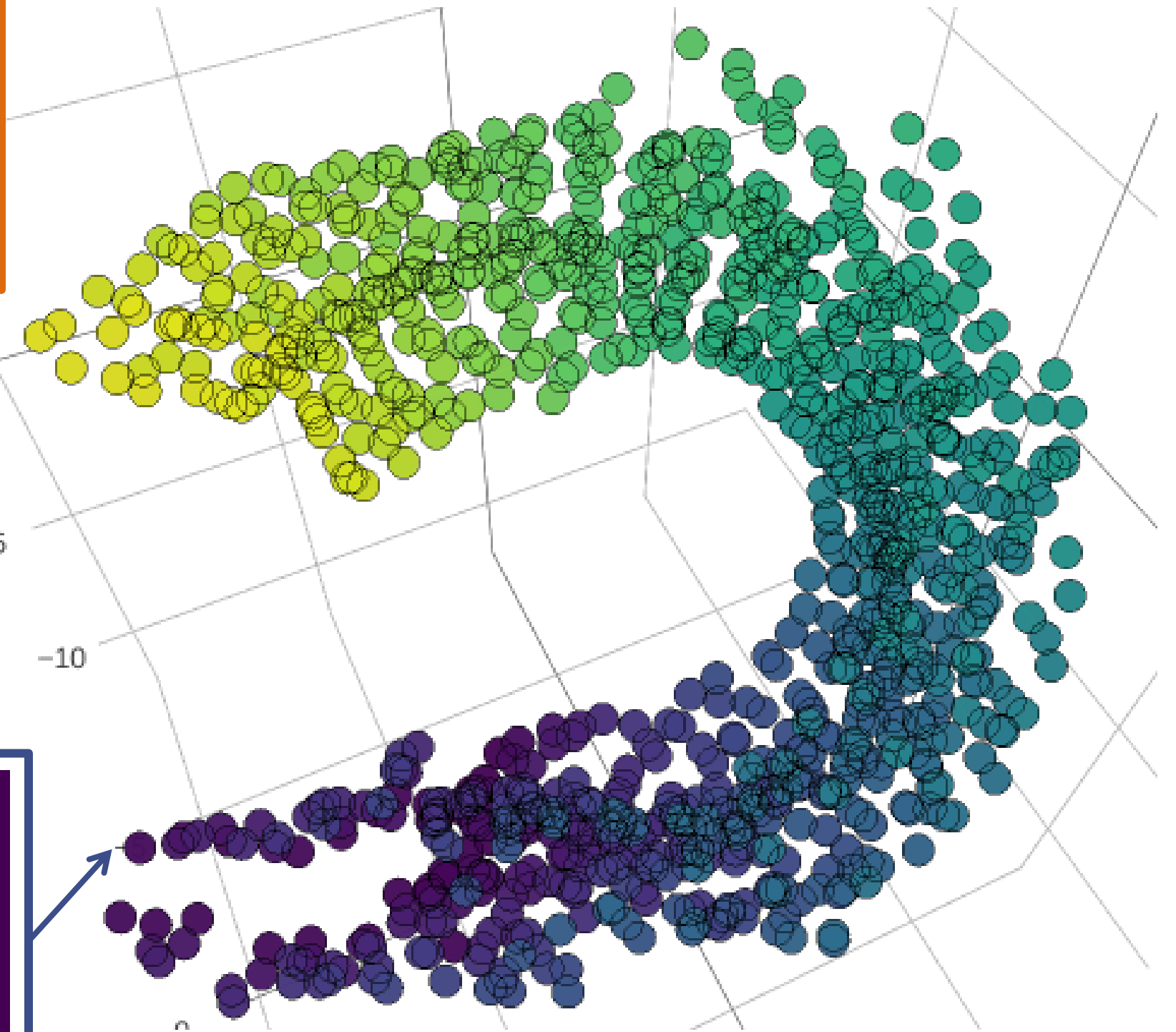
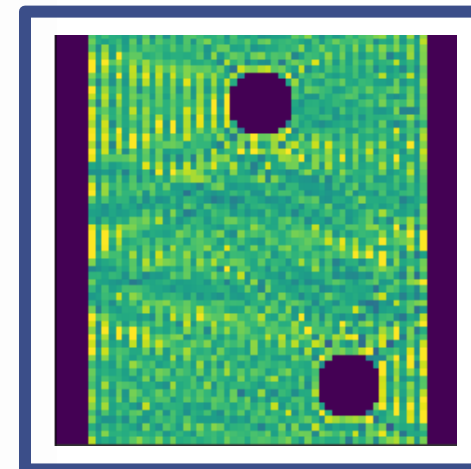
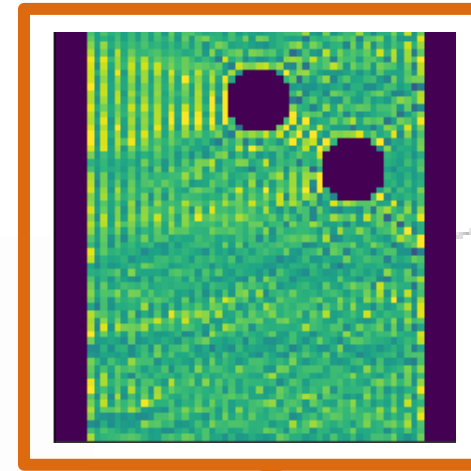
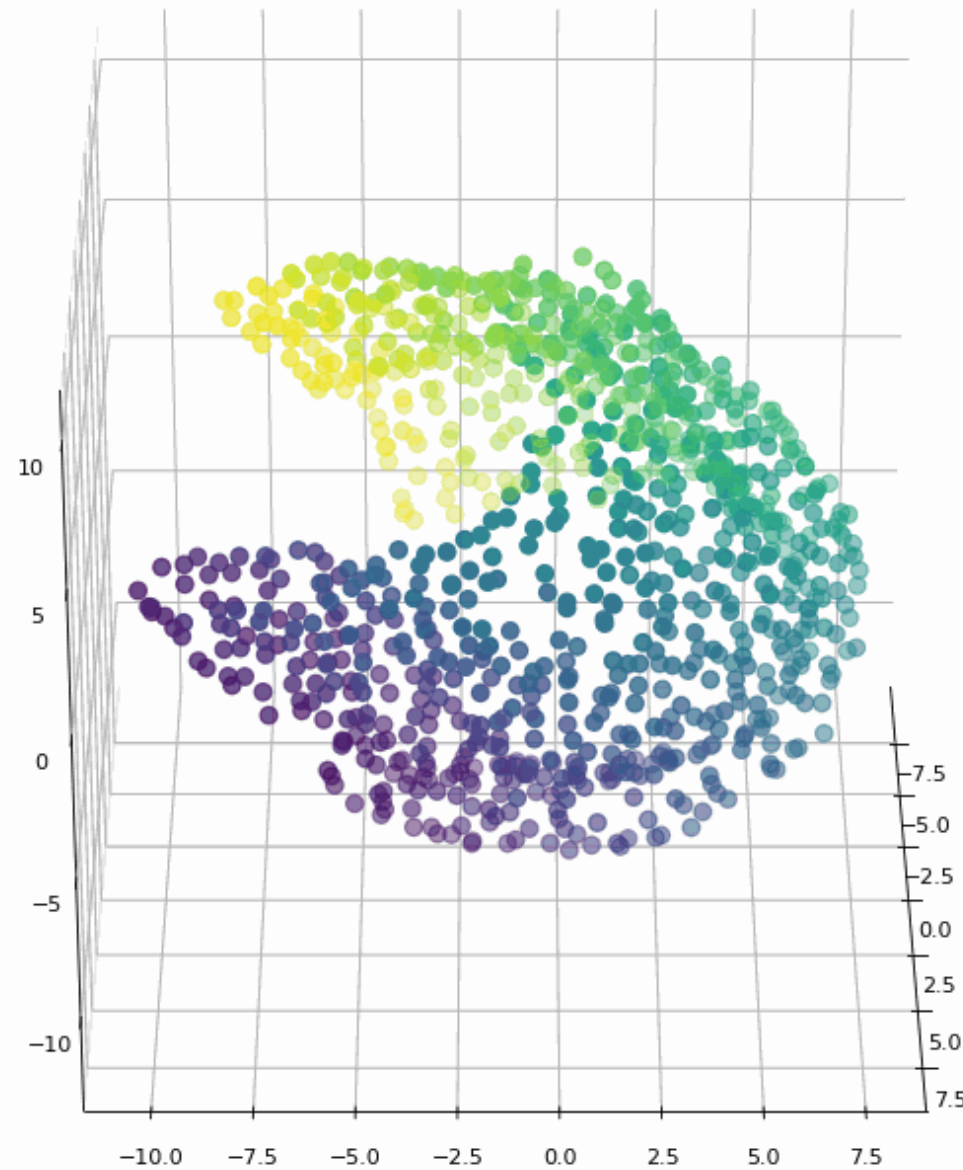
単純な全結合ネットワーク



潜在空間中のデータ構造を可視化したい

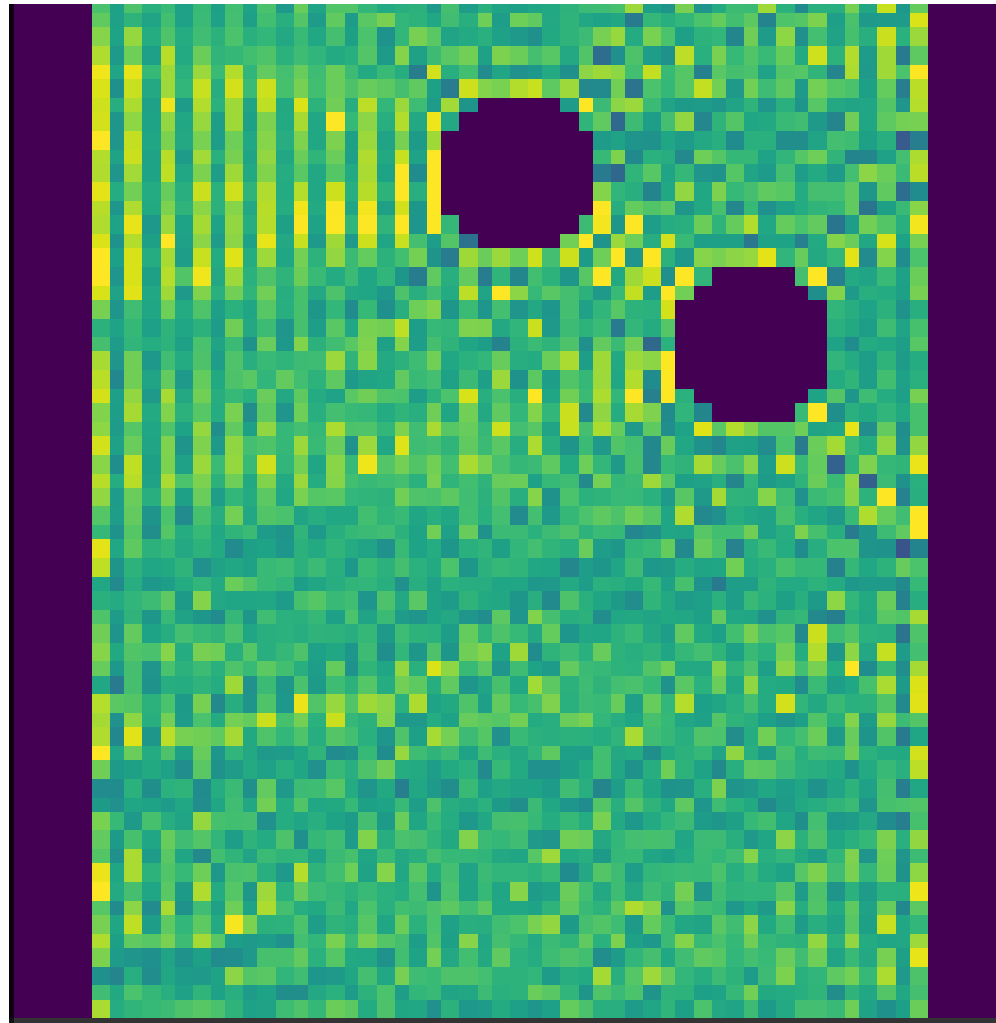


厚さのある層構造



スナップショット

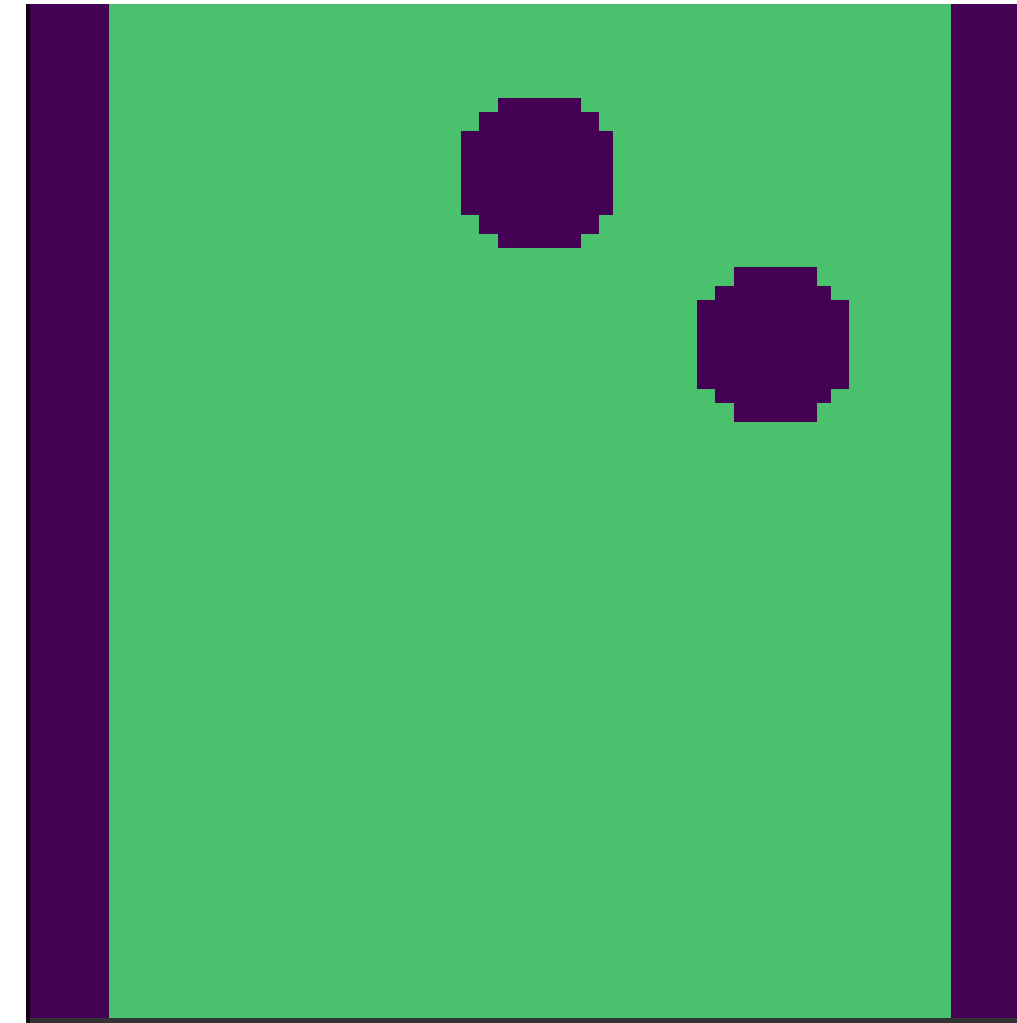
波動関数あり



配置：古典

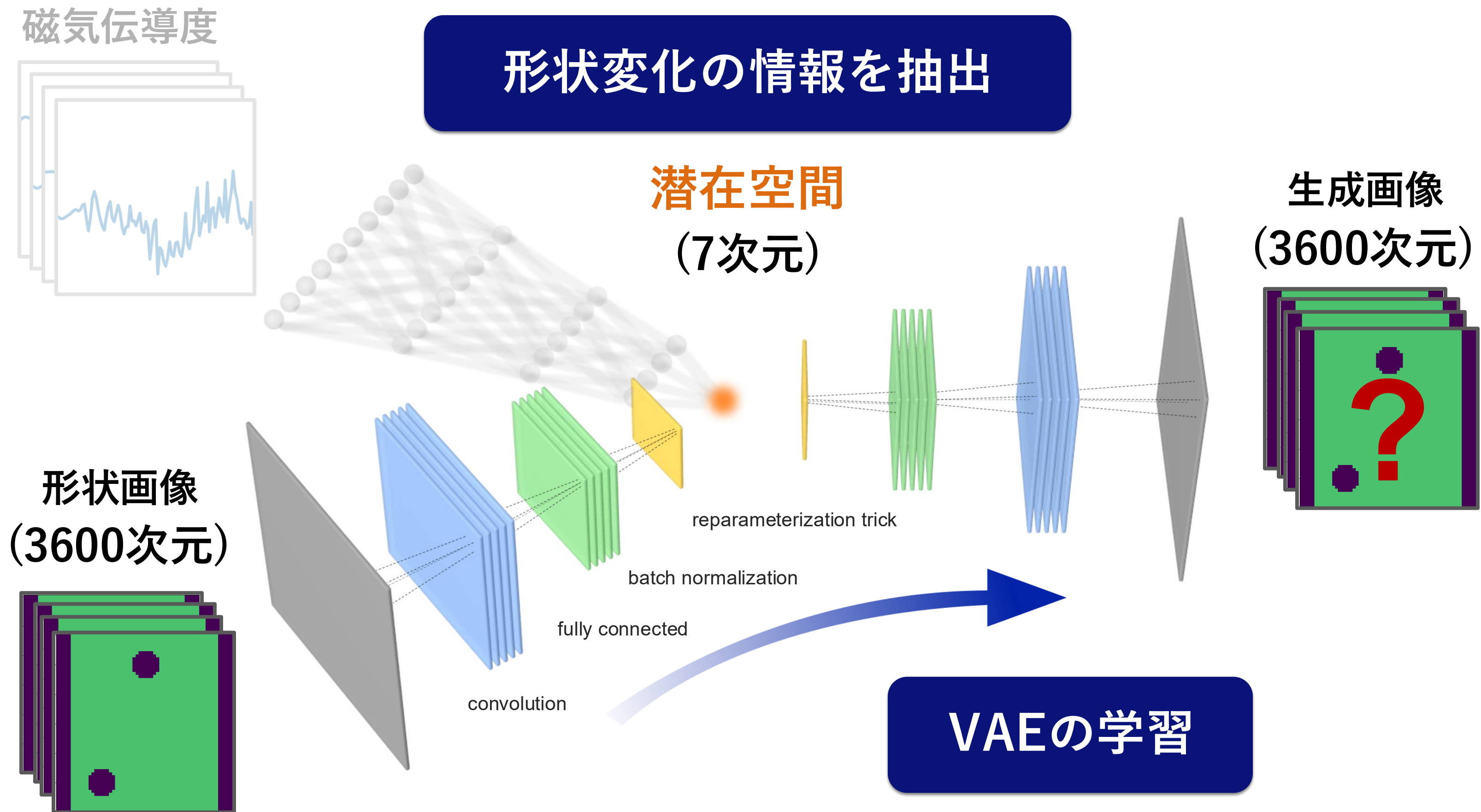
波：量子

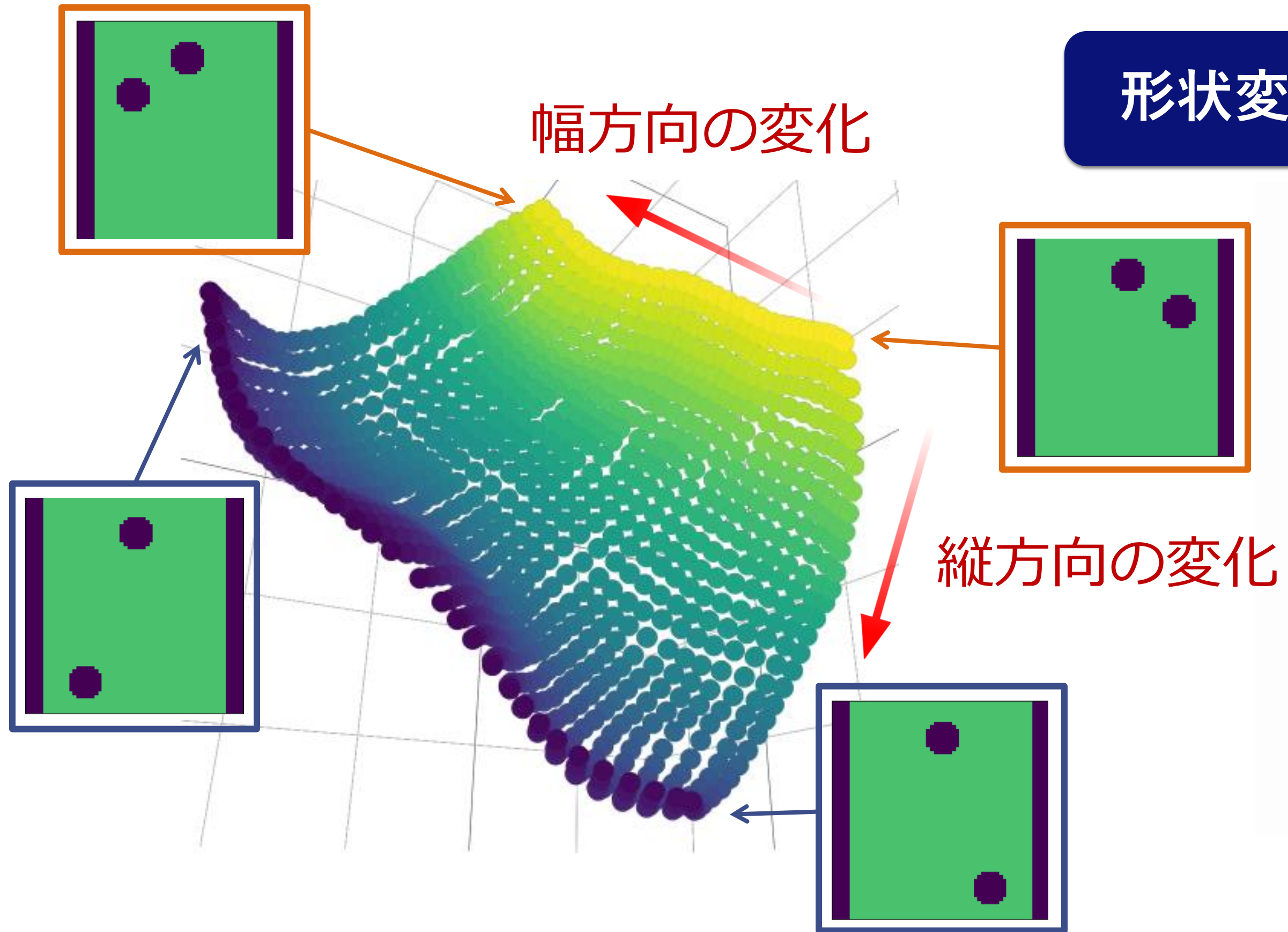
波動関数なし



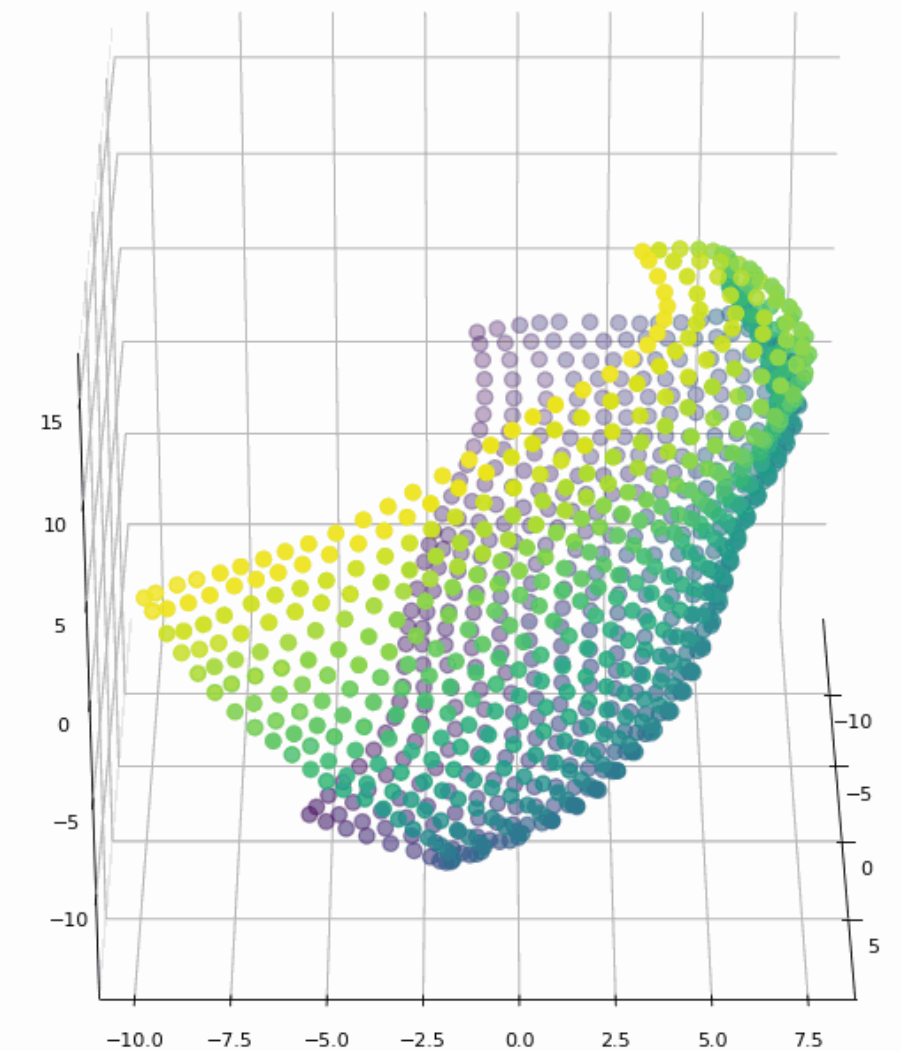
配置：古典

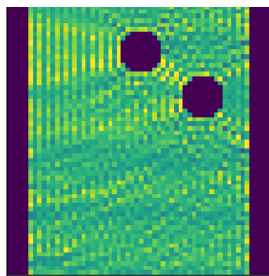
~~波：量子~~



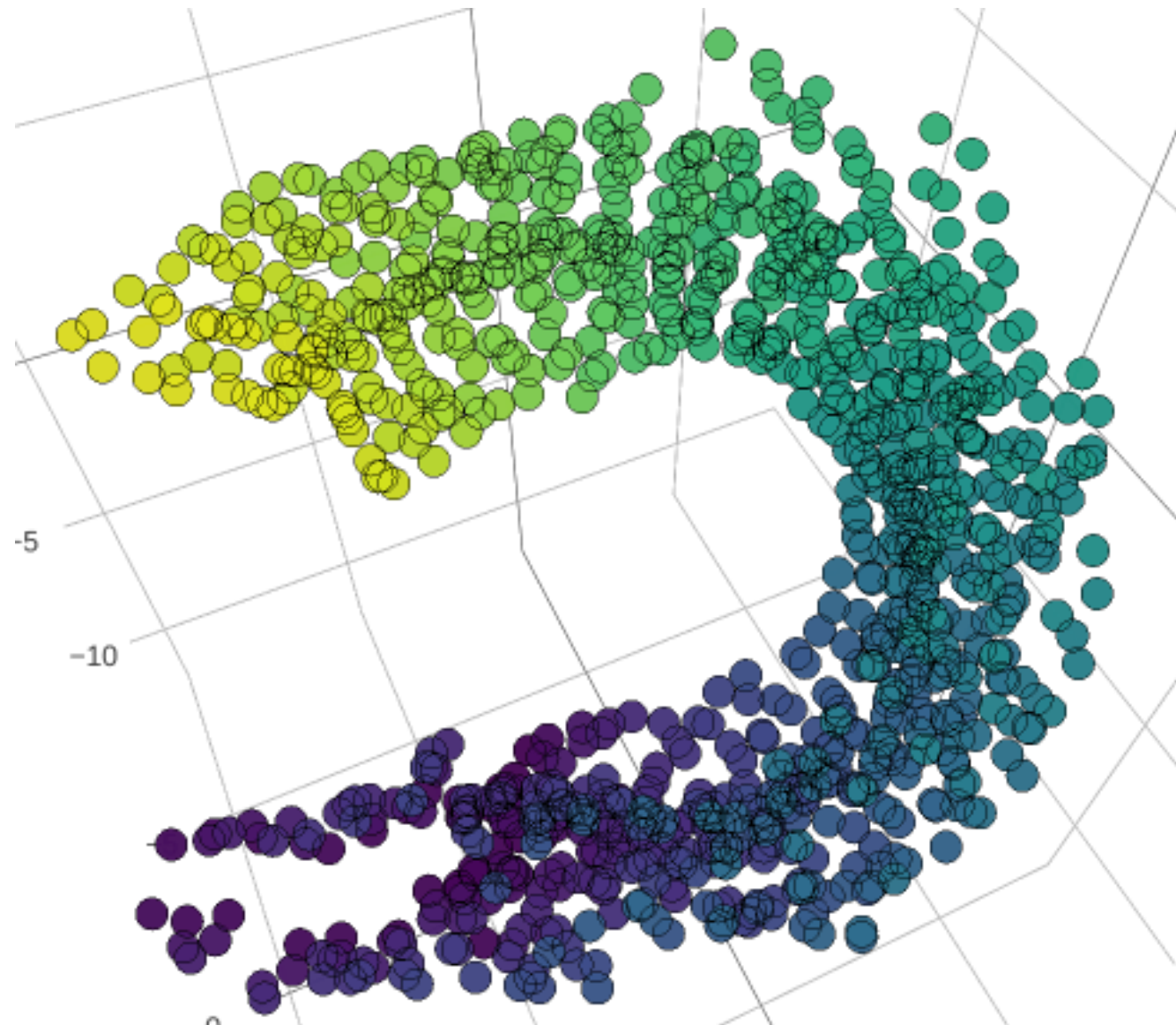


形状変化に対応する1層構造



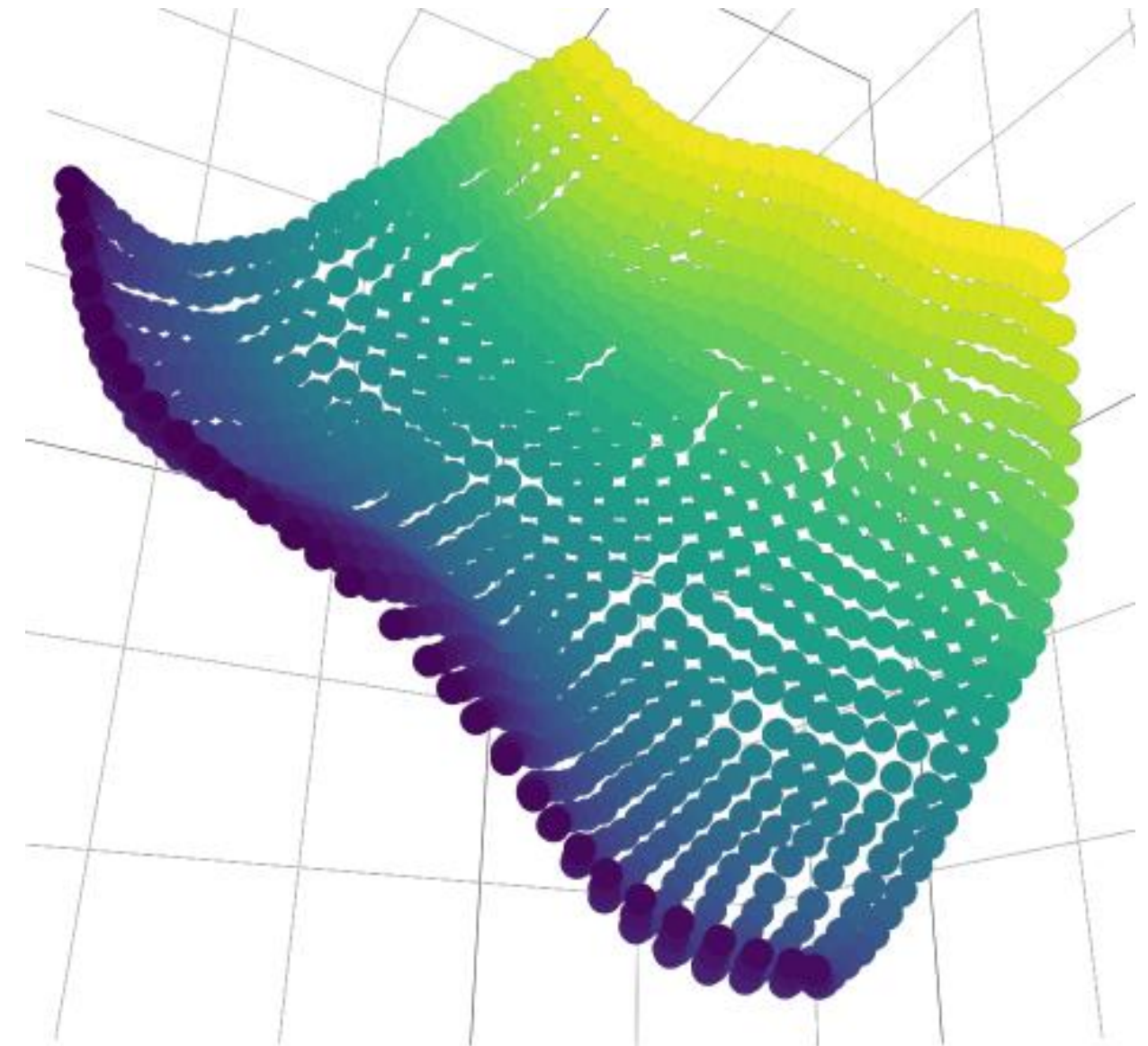
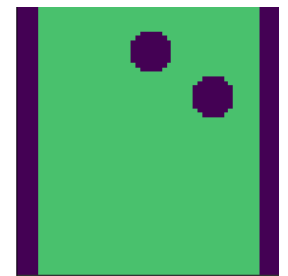


波動関数あり

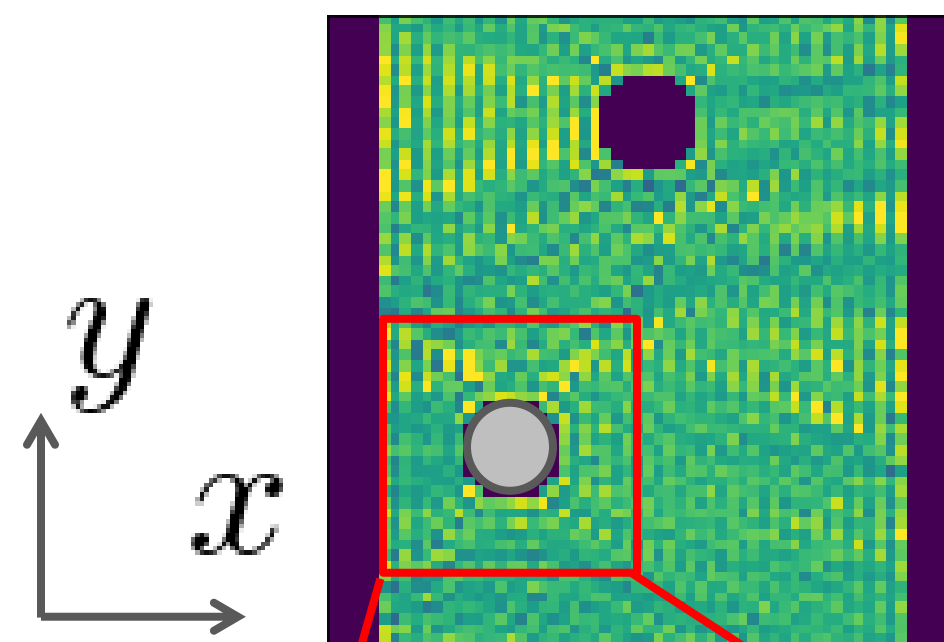


厚さのある層構造

波動関数なし



厚さのない1層構造



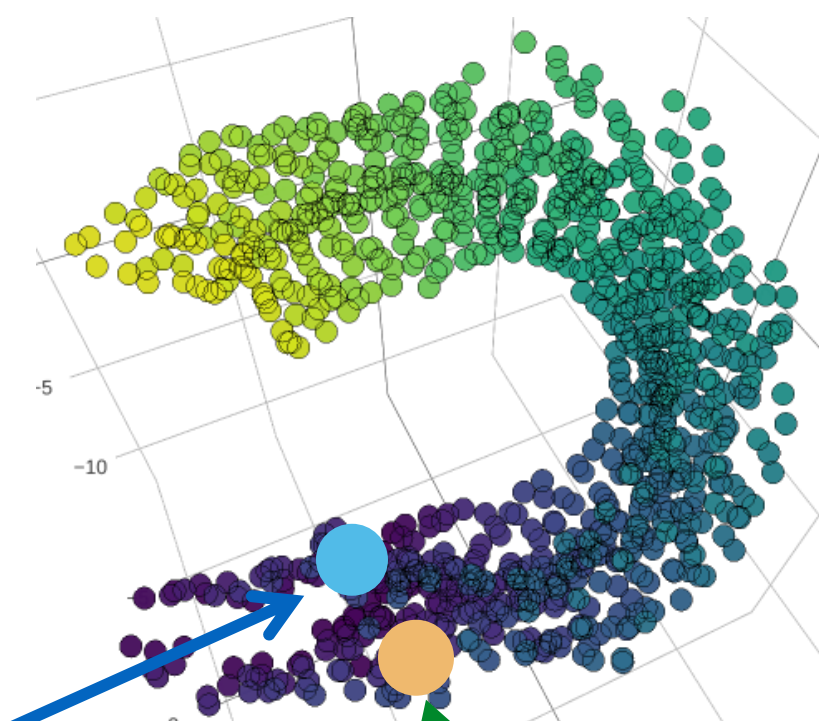
拡大

左端を基準

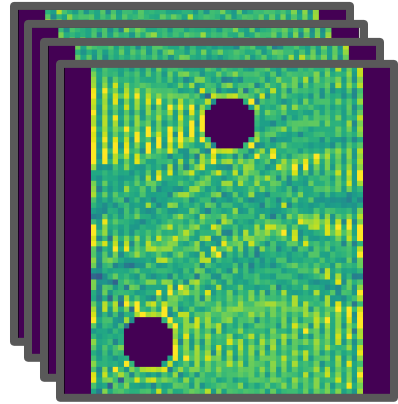
$x =$ 偶数 は ●

$x =$ 奇数 は ●

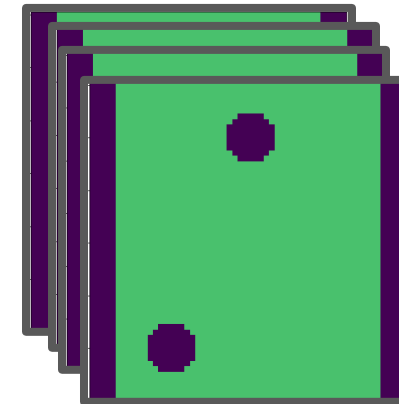
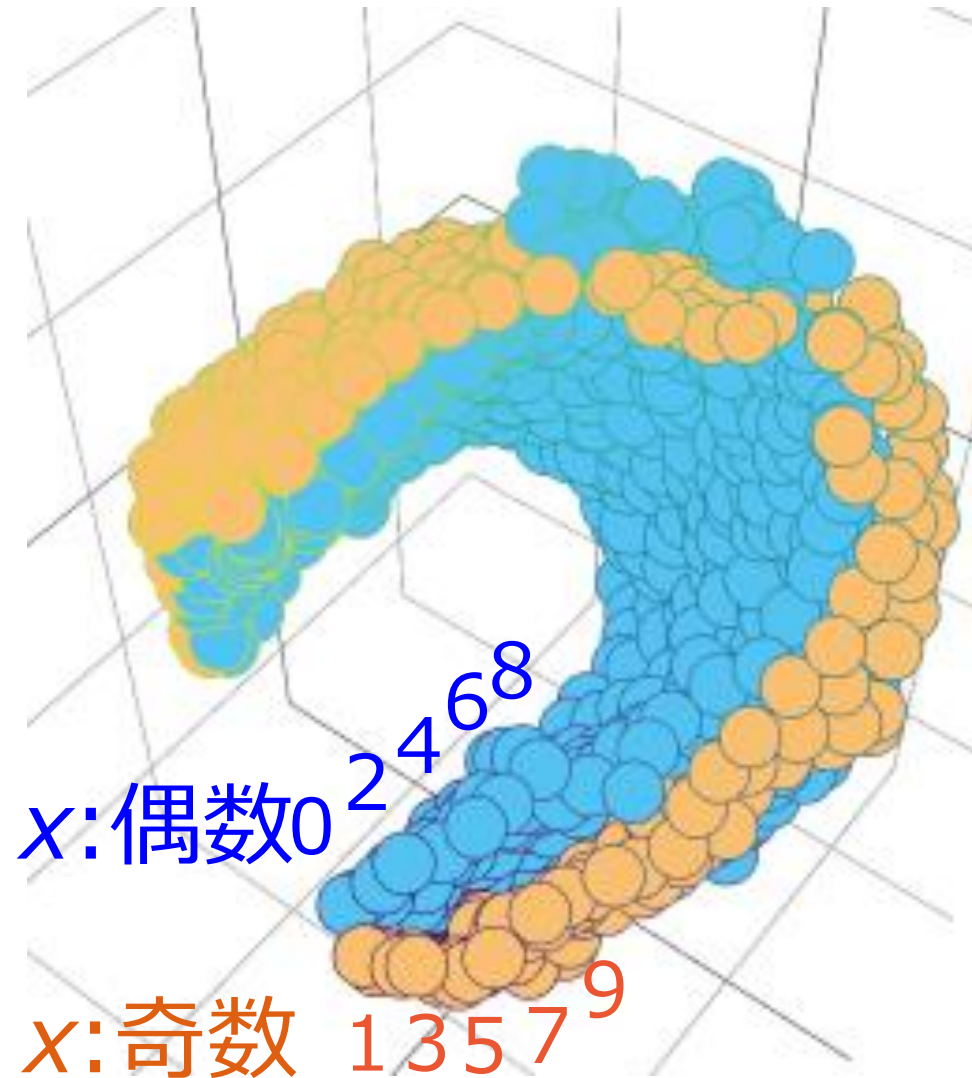
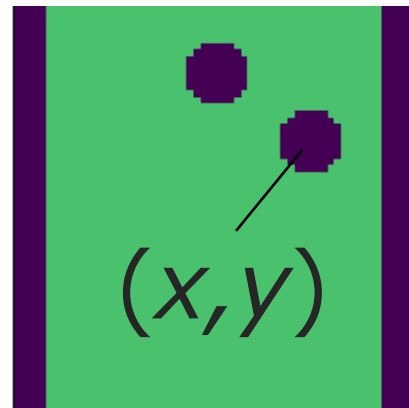
潜在空間を色分け



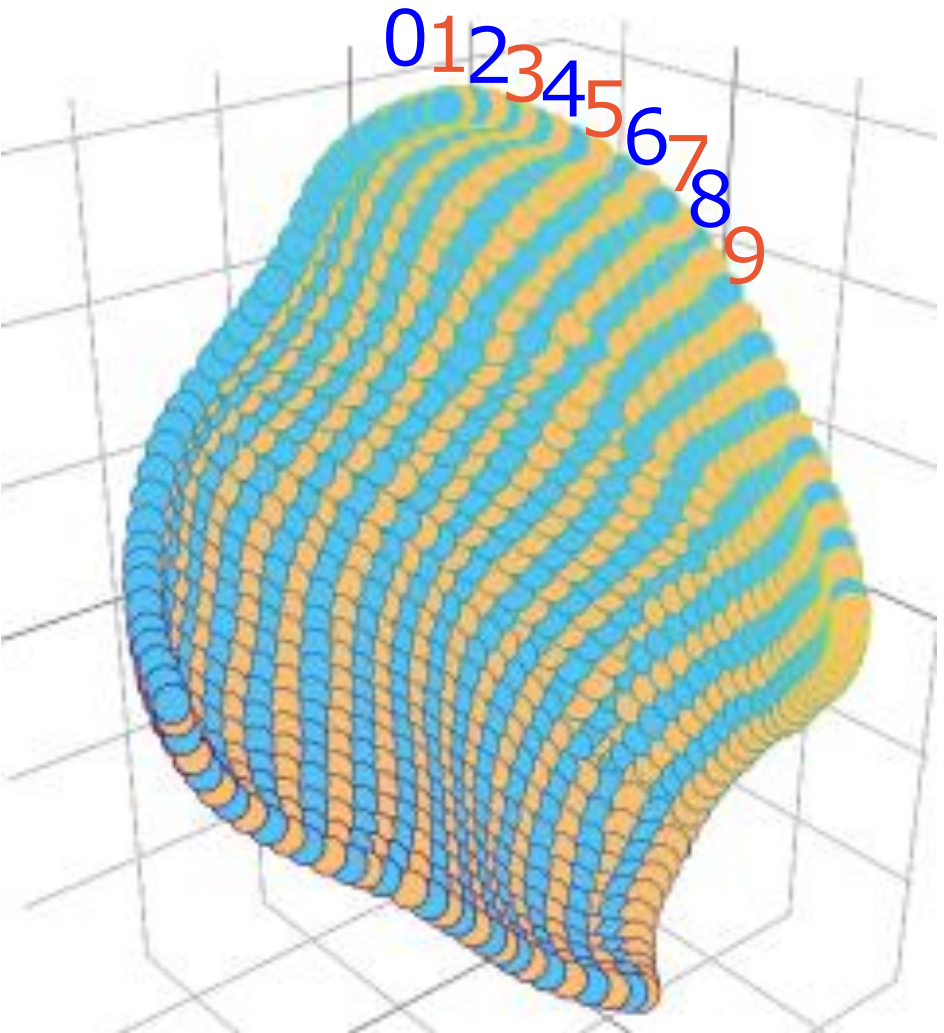
基準 $x = 0$ ● $x = 1$ ● $x = 2$ ● $x = 3$ ●



波動関数あり



波動関数なし

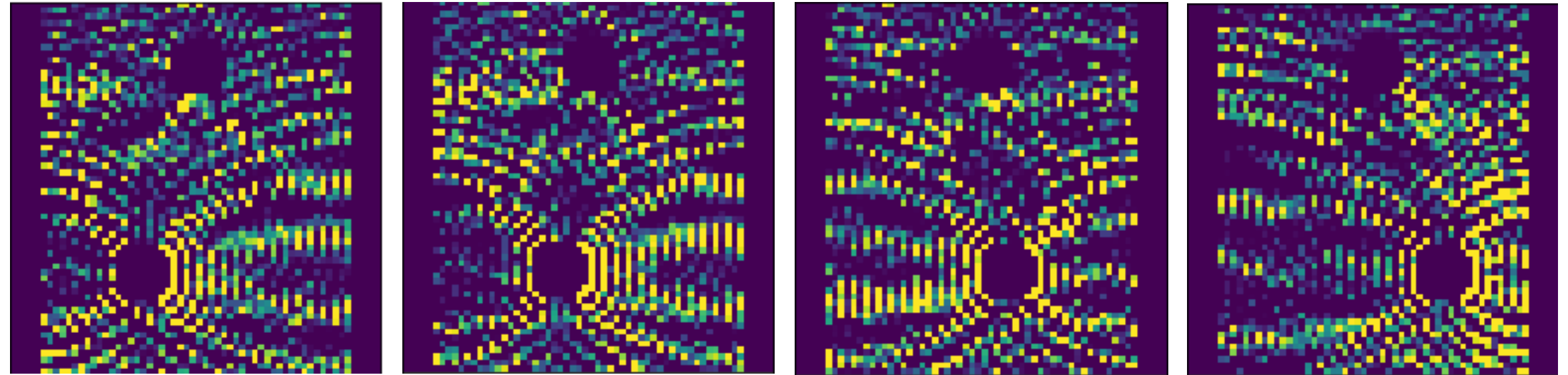
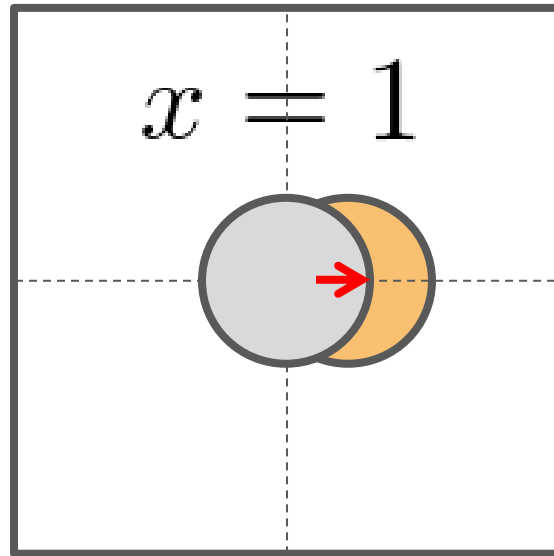


厚さのある層構造 = アンチドット欠陥周りの量子干渉

2つの波動関数の差分

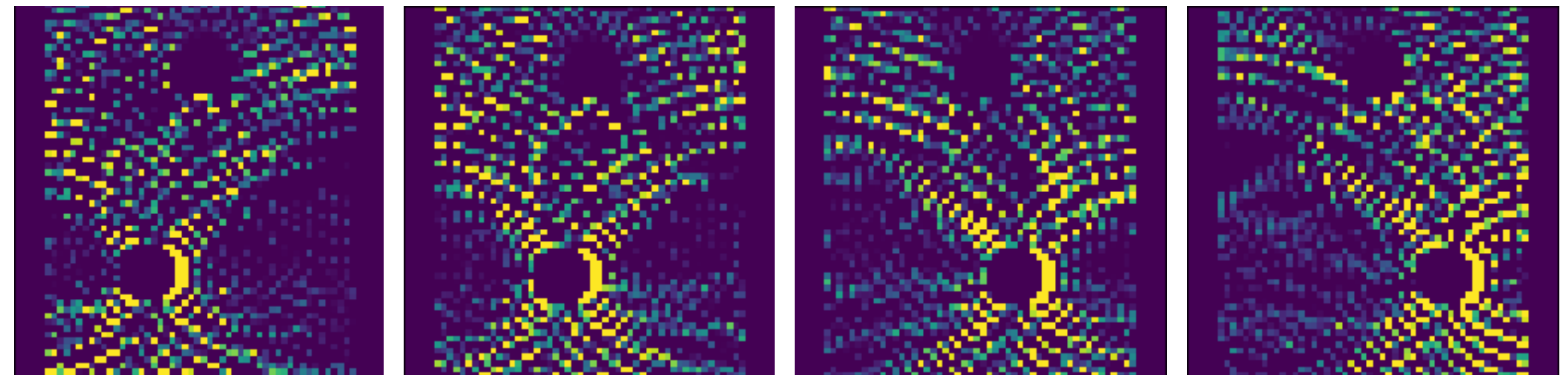
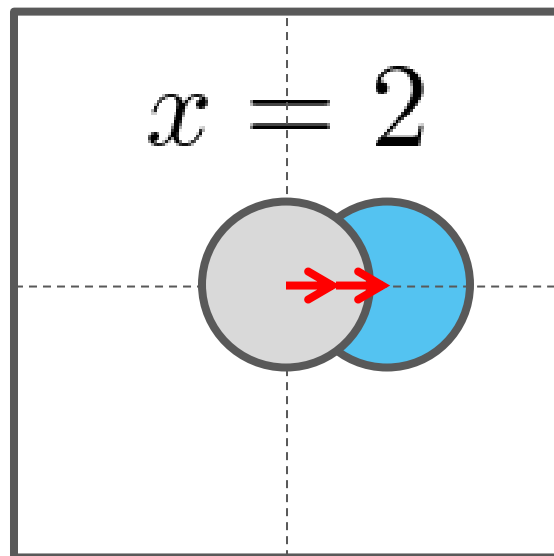
1サイト変化

平均二乗誤差 0.052

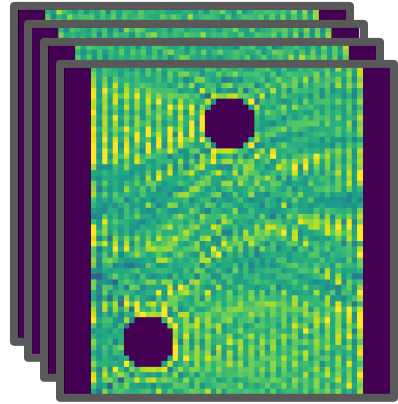


2サイト変化

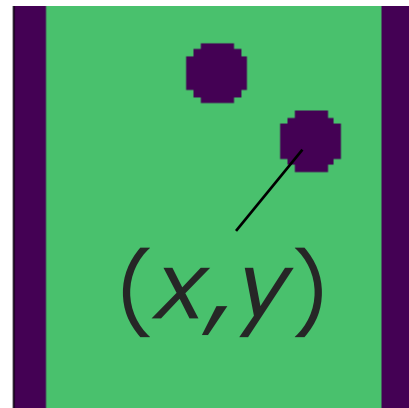
平均二乗誤差 0.046



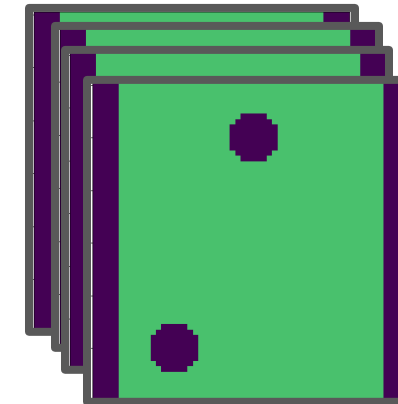
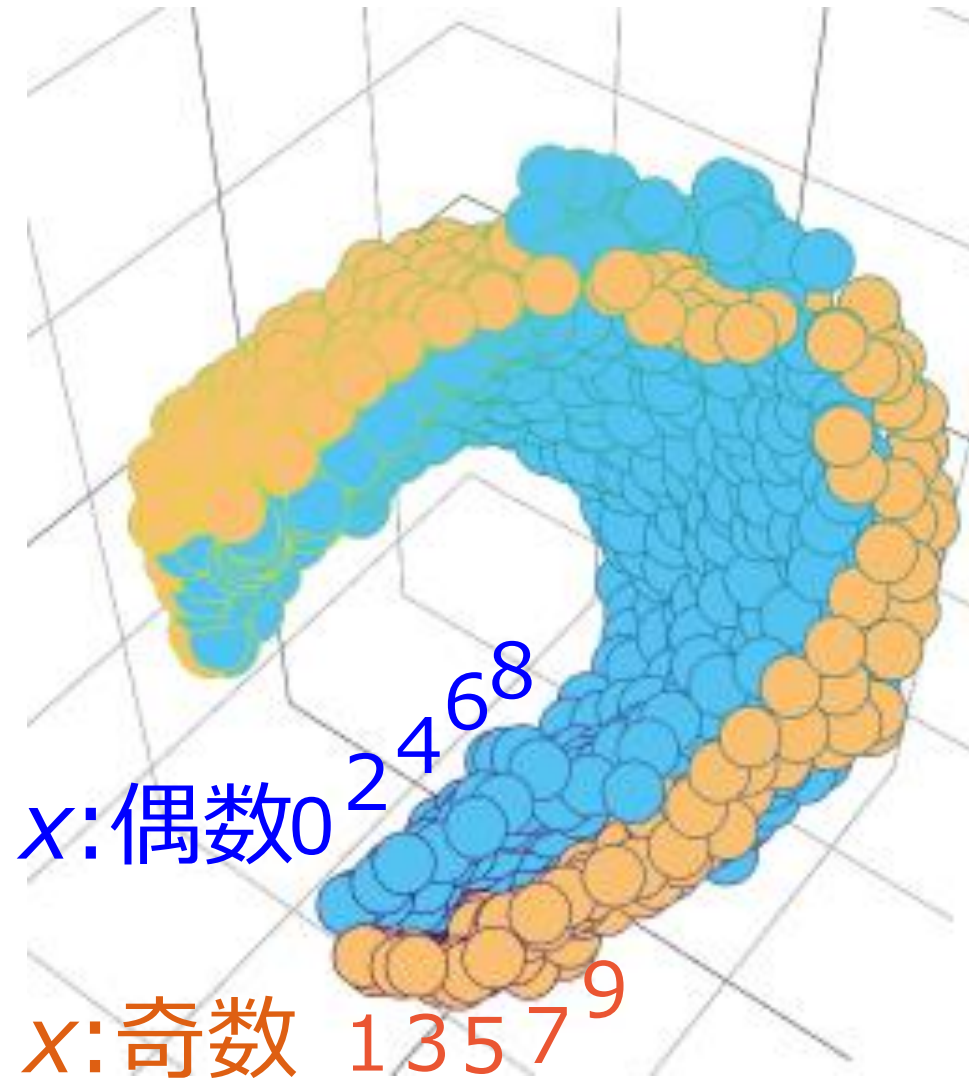
小さな誤差



波動関数あり

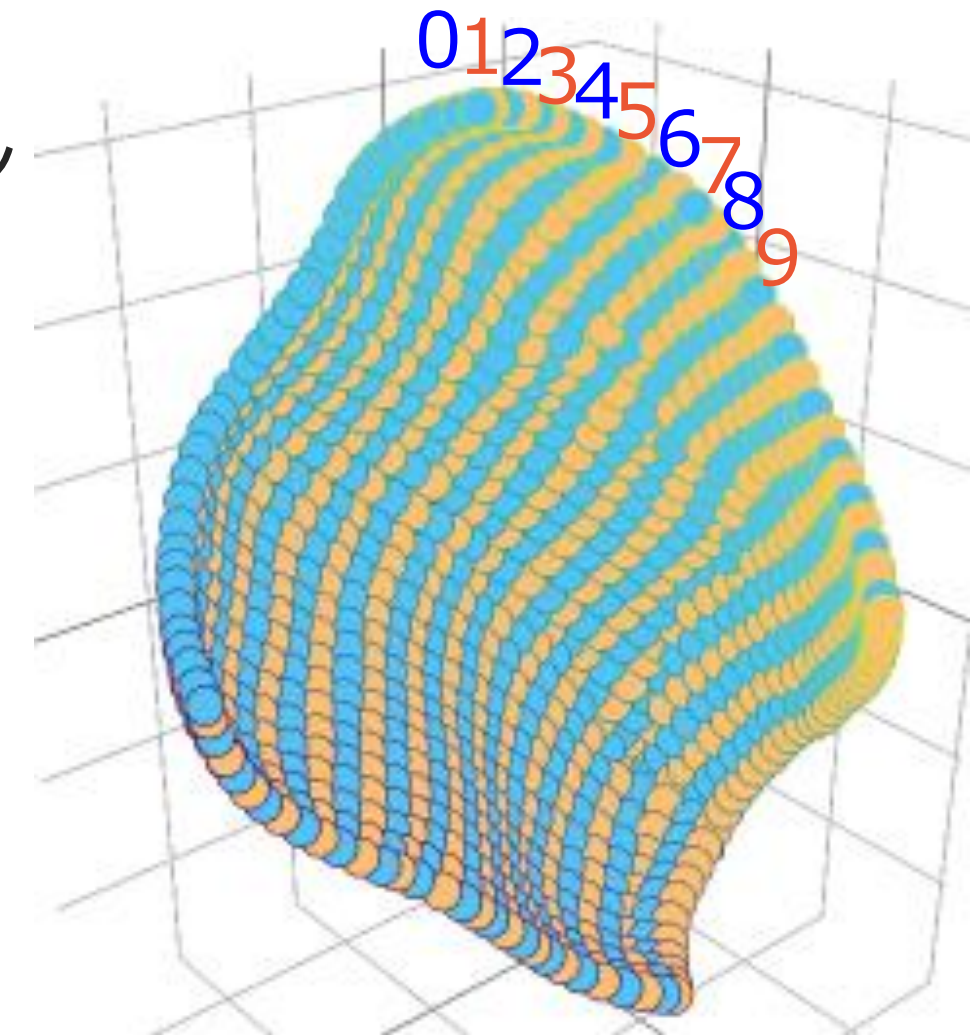


厚さのある層構造



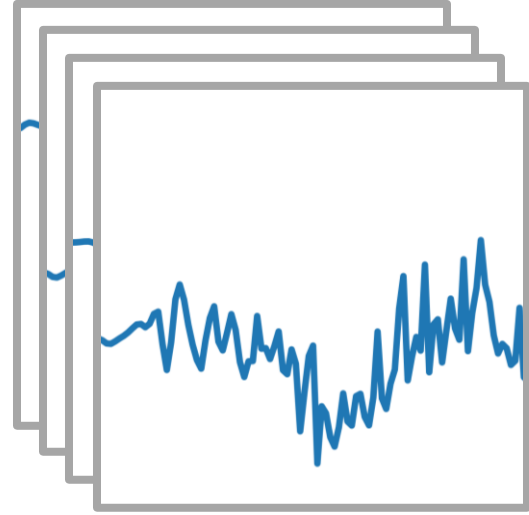
波動関数なし

厚さのない1層構造



量子干渉の空間分布を反映して厚さが形成

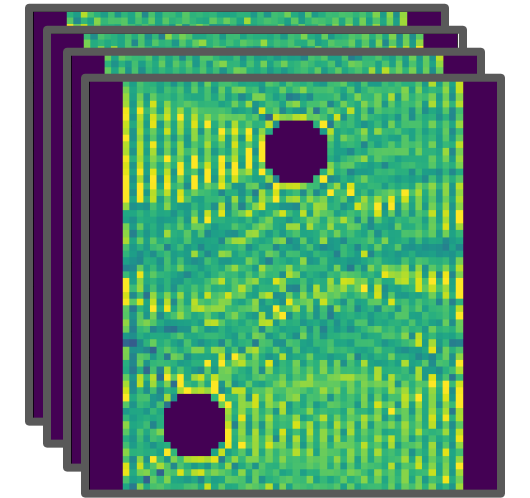
磁気伝導度



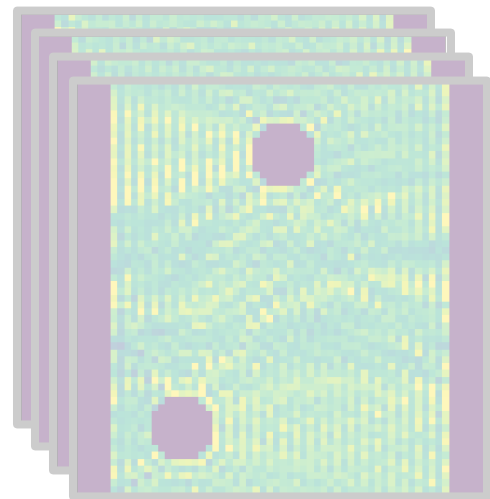
伝導度のもつマイクロ情報

潜在空間

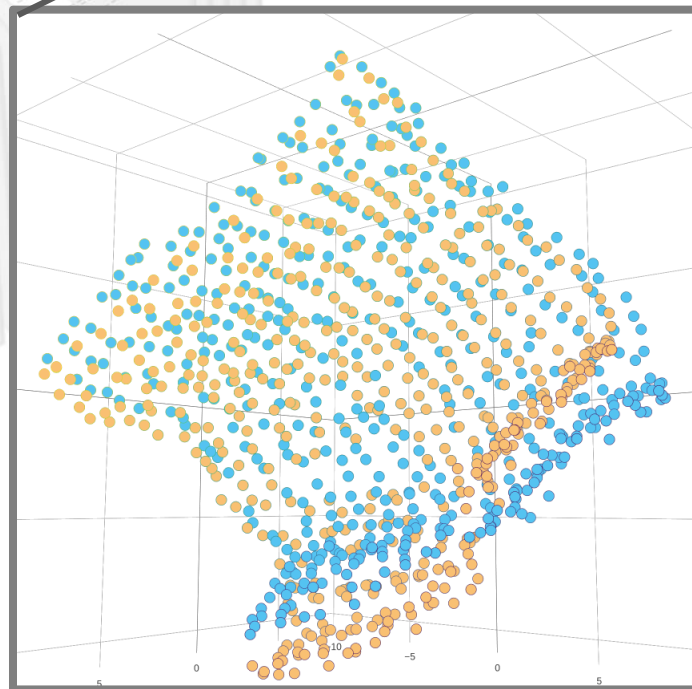
生成画像
(3600次元)



形状画像
(3600次元)

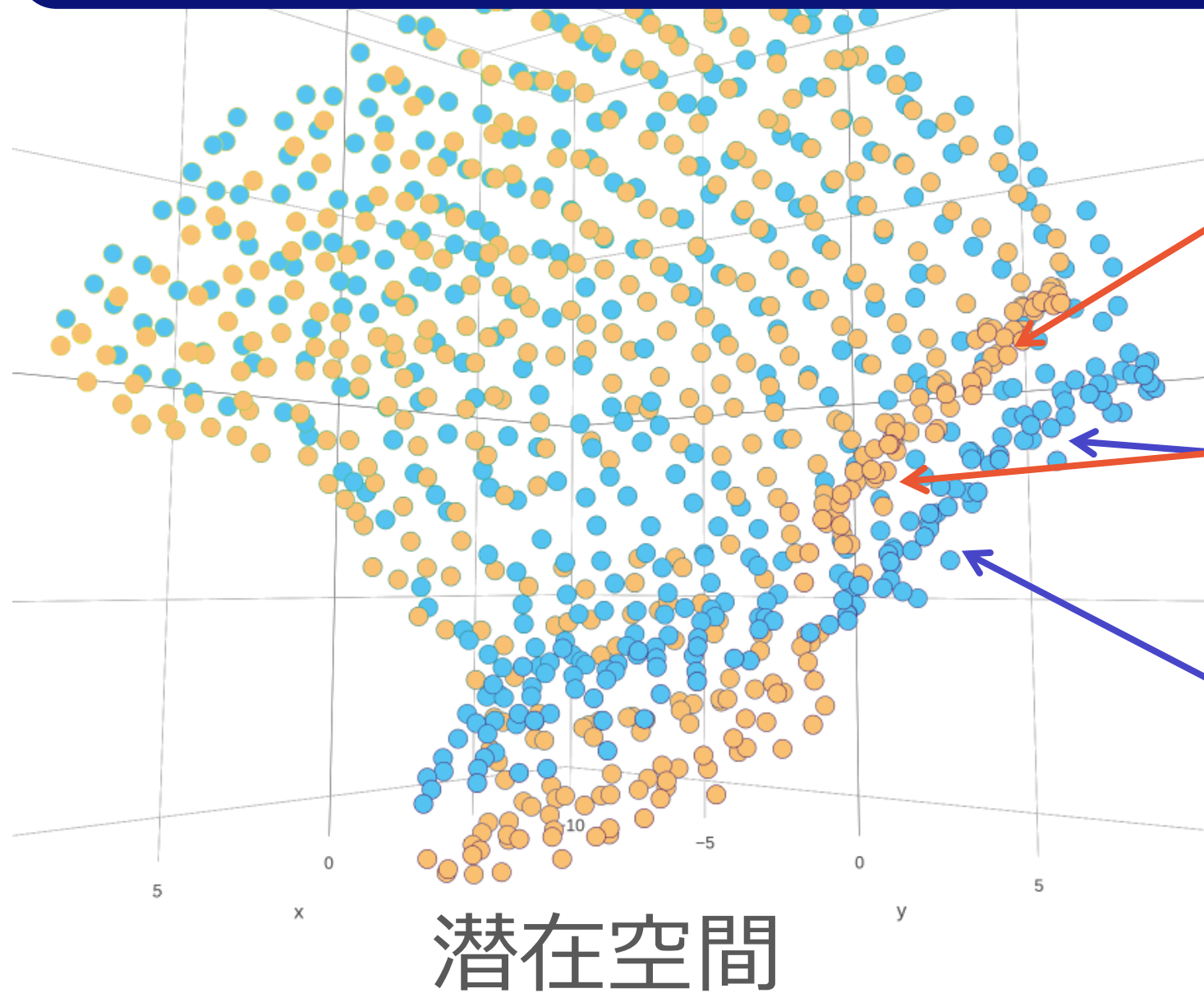


磁気伝導度は潜在空間の
層構造を理解できるか

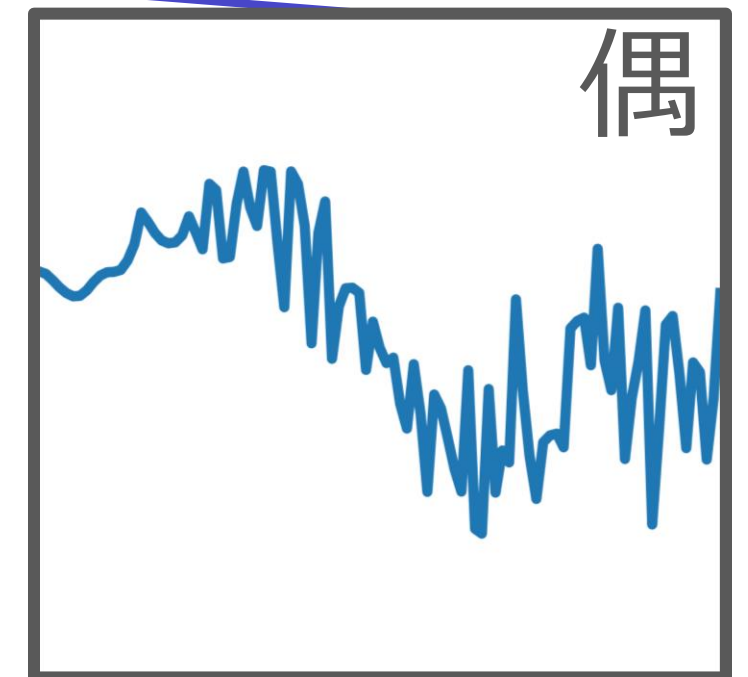
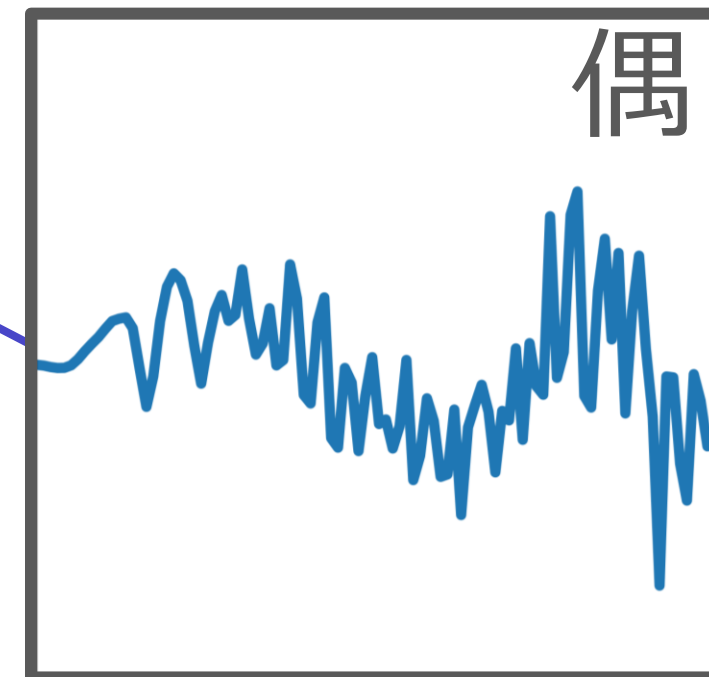
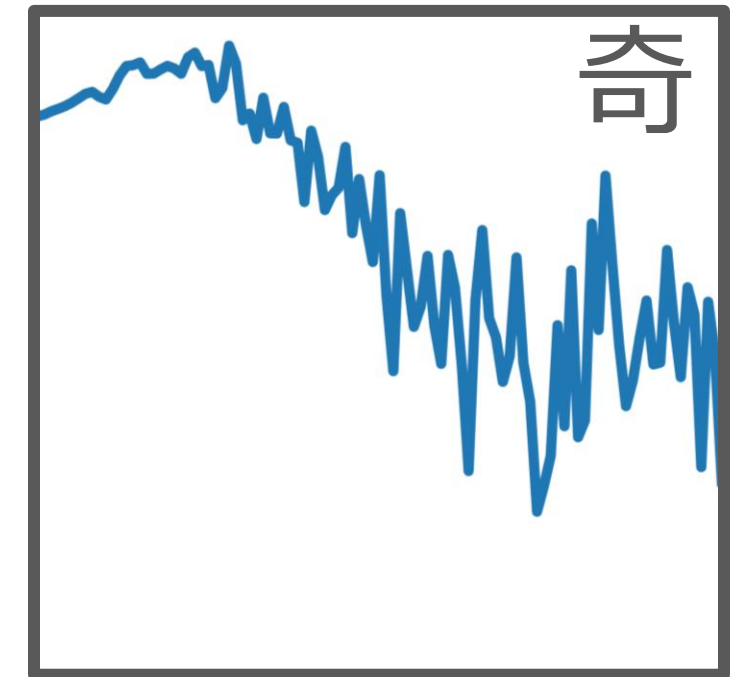
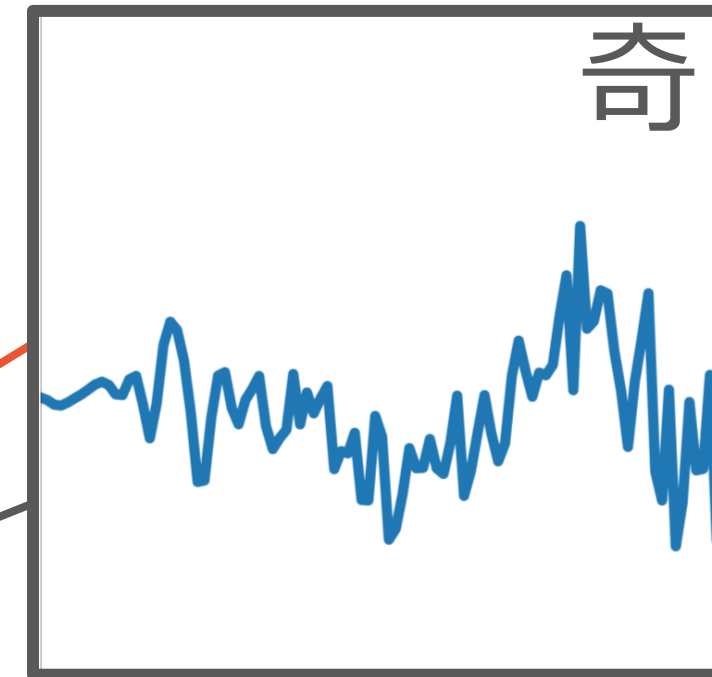


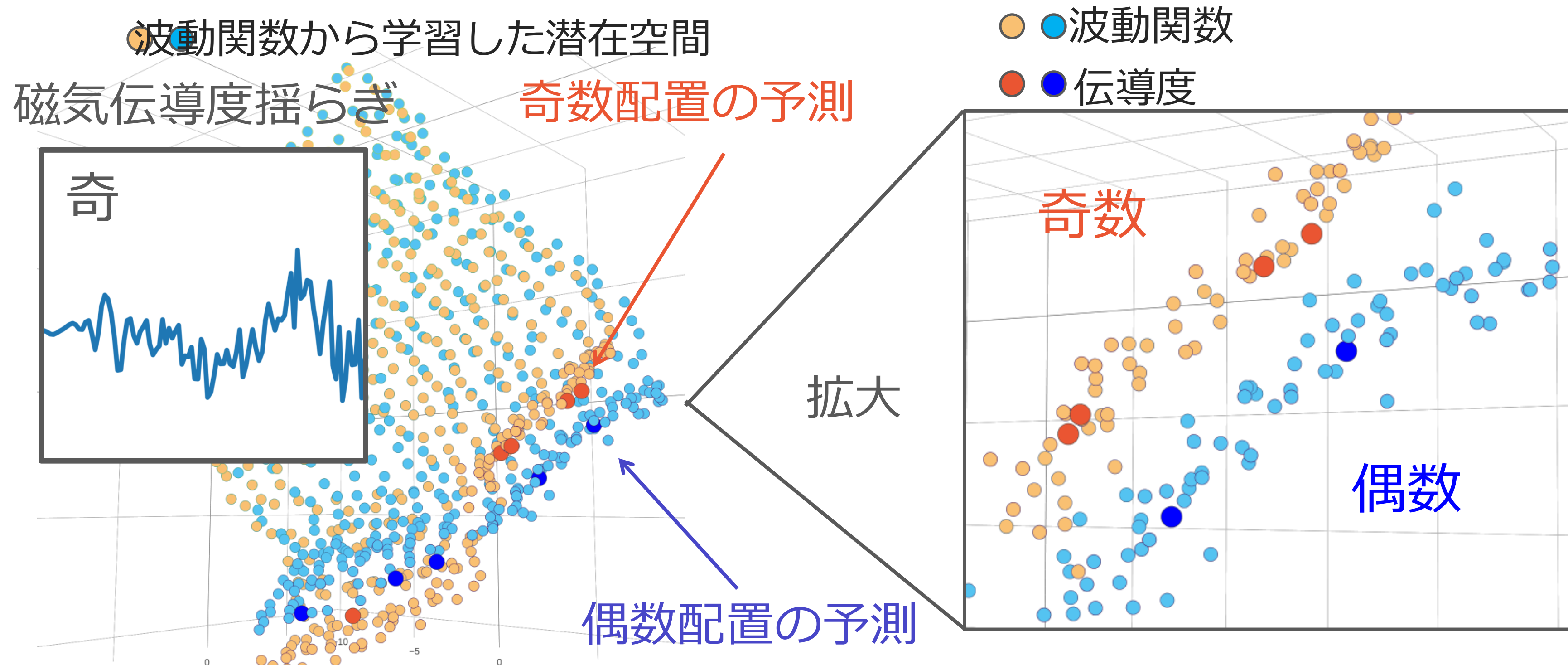
● ● 波動関数から学習した潜在空間

層の特定は一見不可能



伝導度揺らぎの磁場依存性

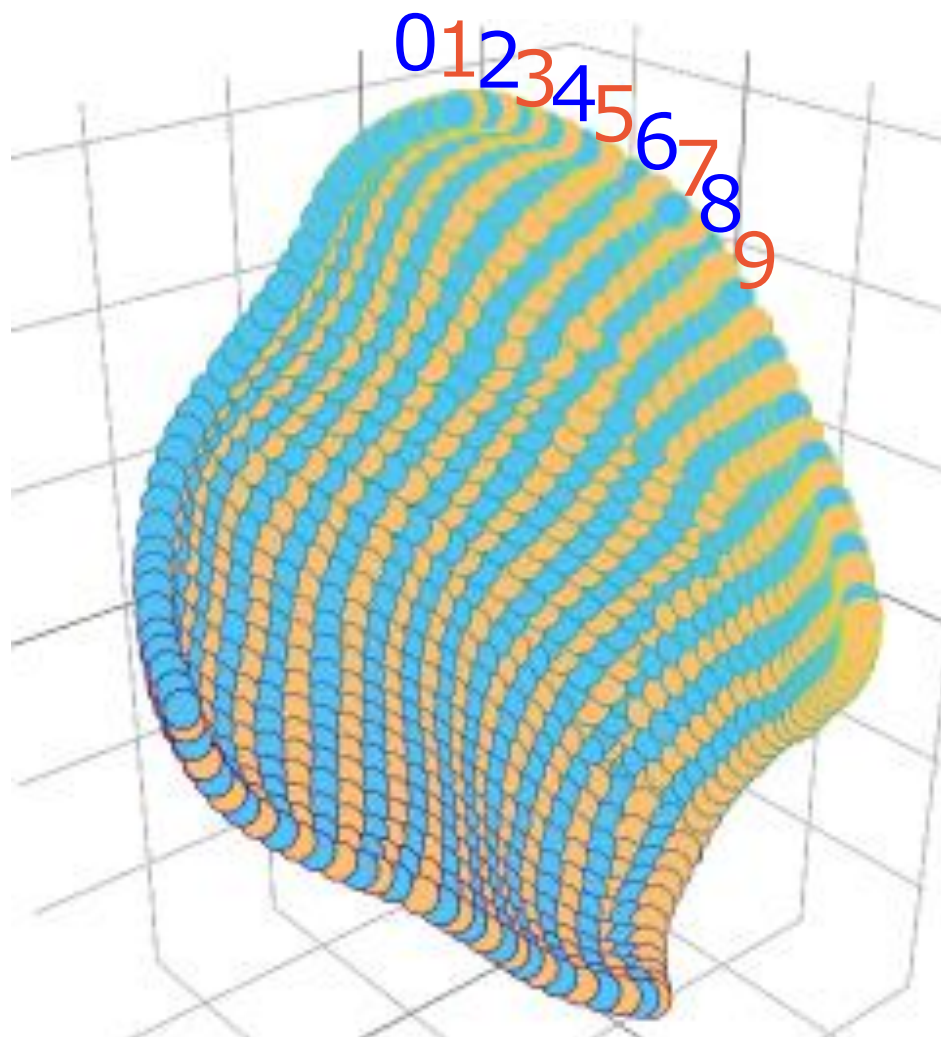




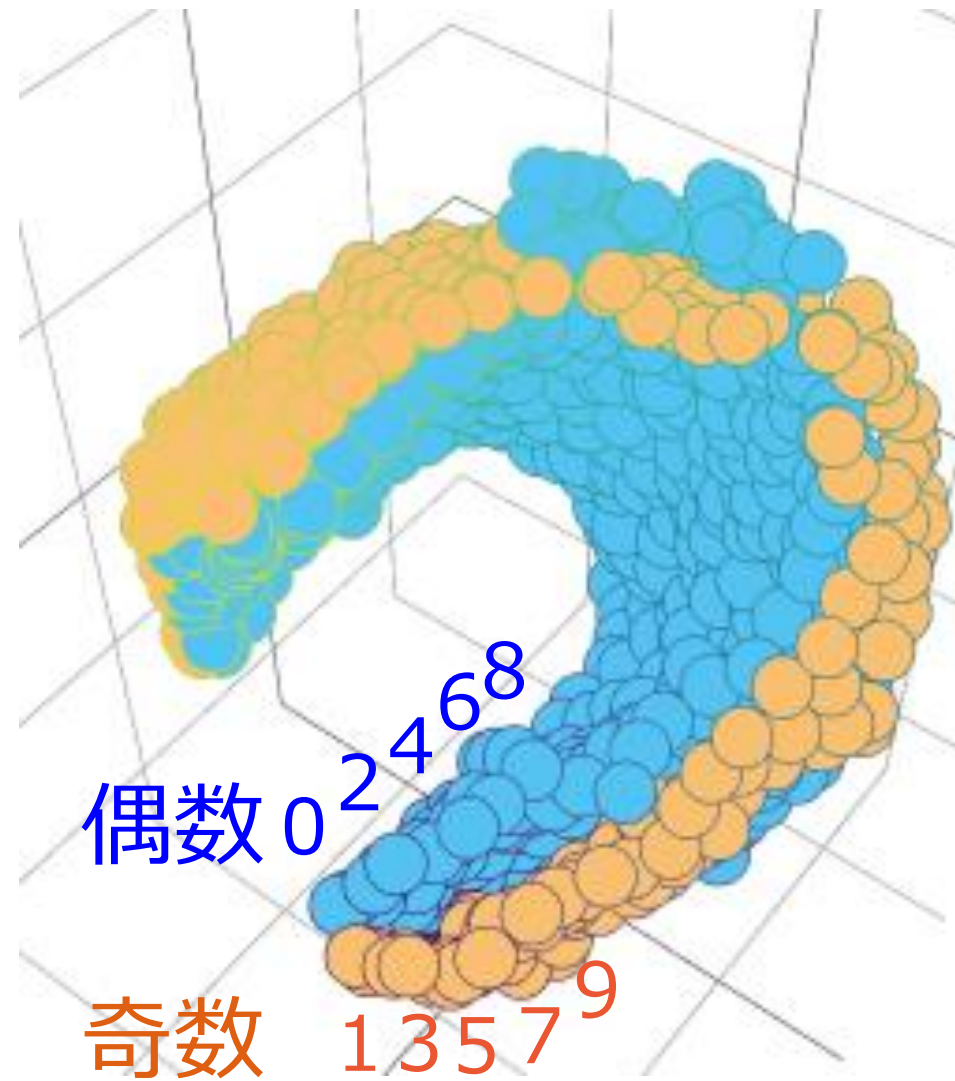
磁気伝導度の揺らぎは波動関数の干渉情報を内在している

波動関数像のデータ構造

古典層構造

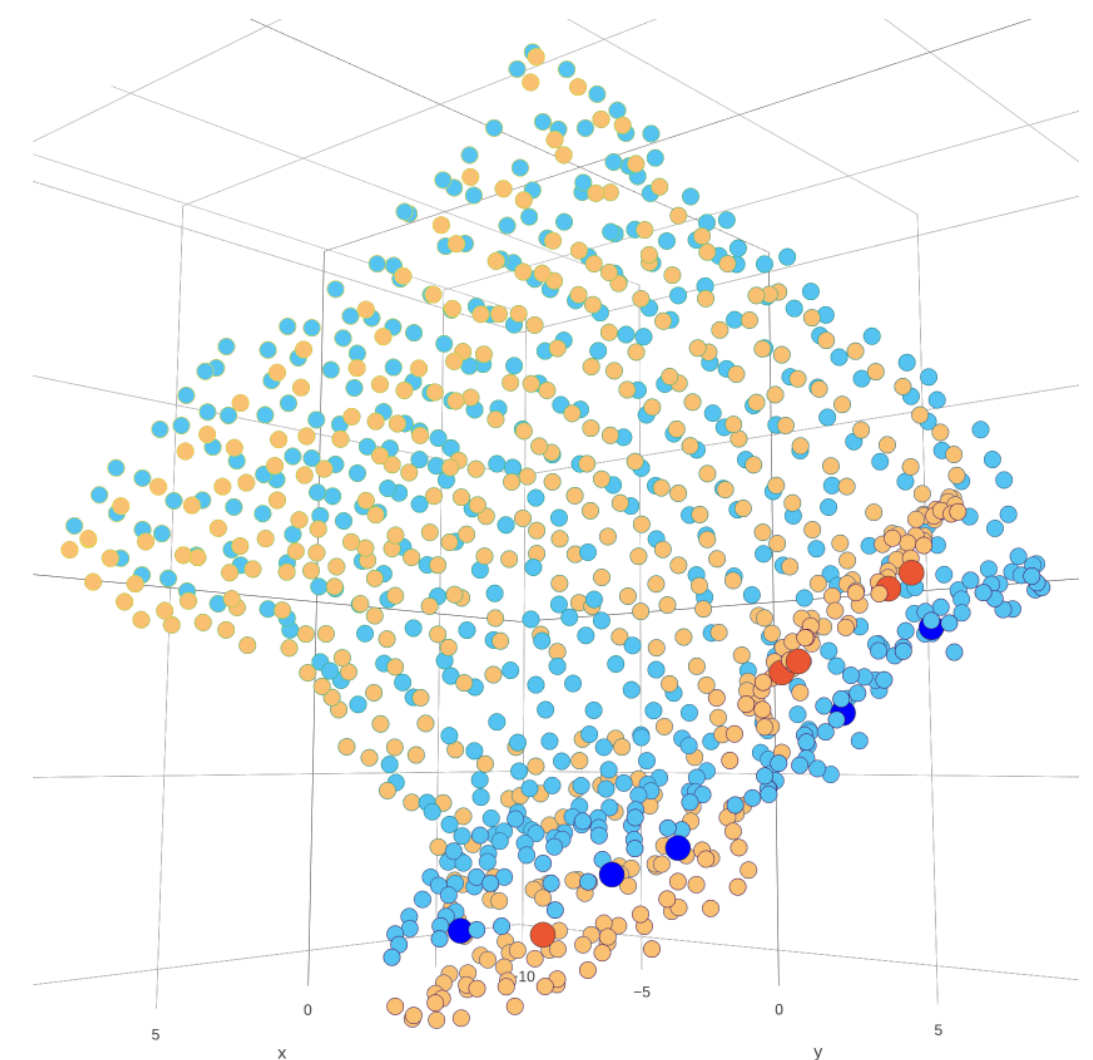


量子層構造



磁気伝導度の情報

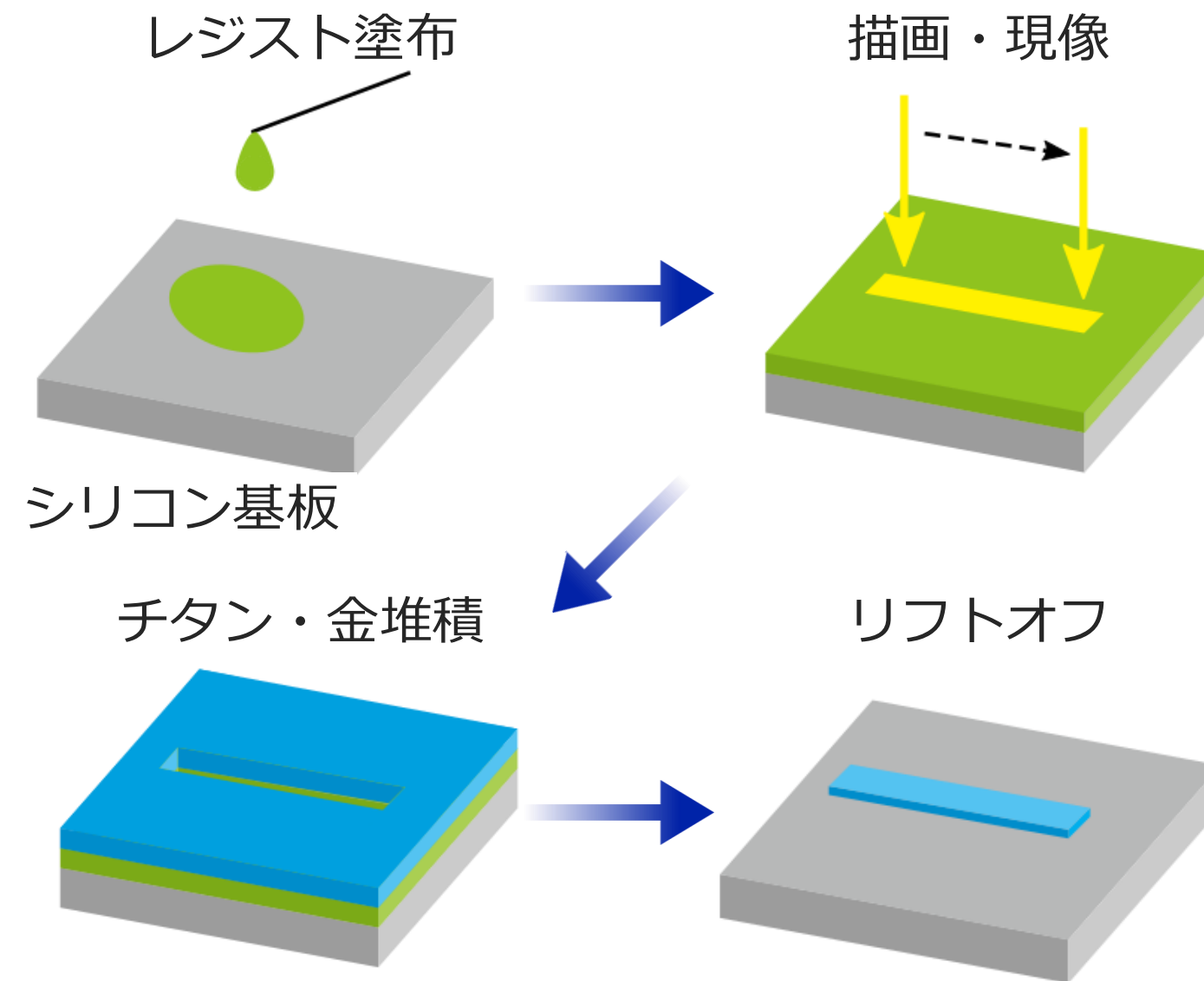
量子干渉の予測



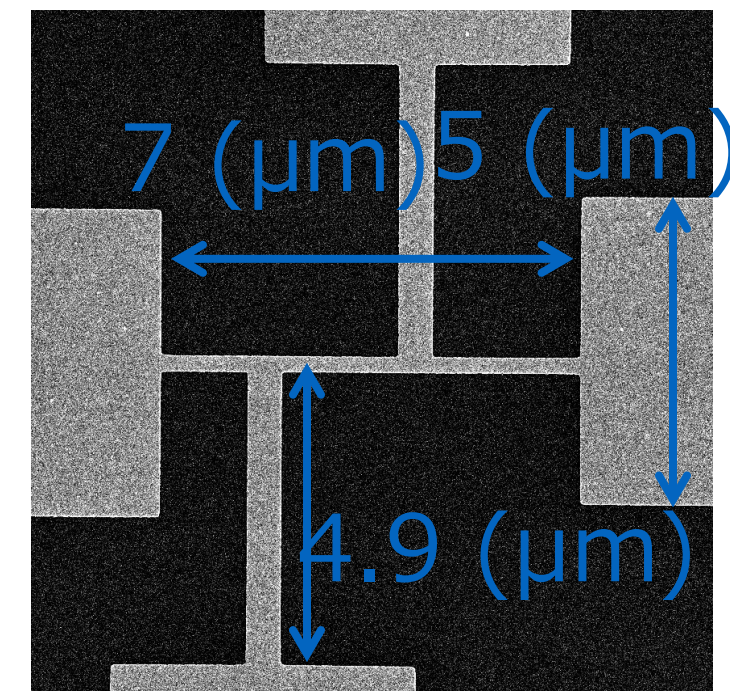
電子線描画装置



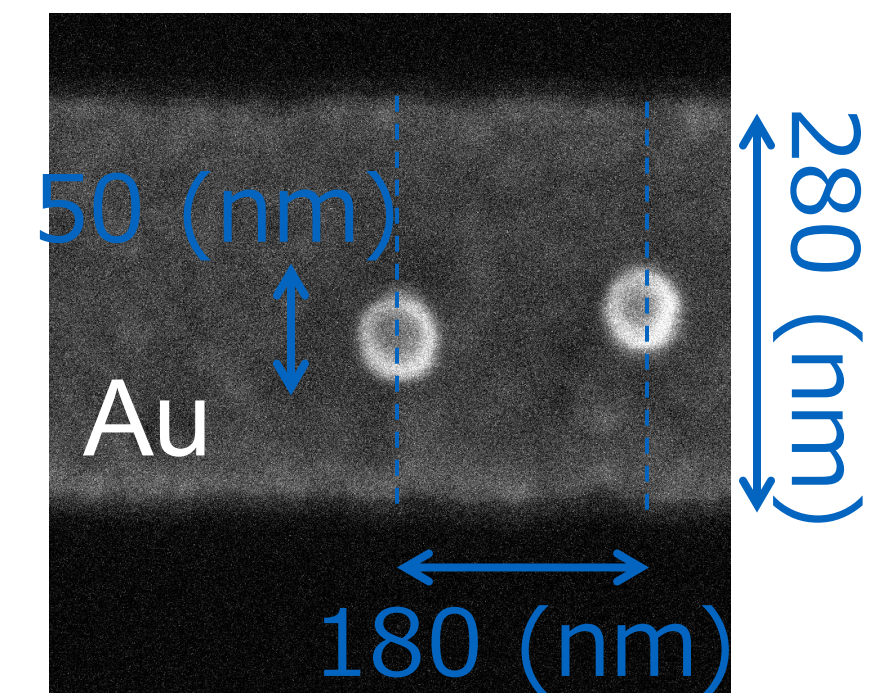
リフトオフ法



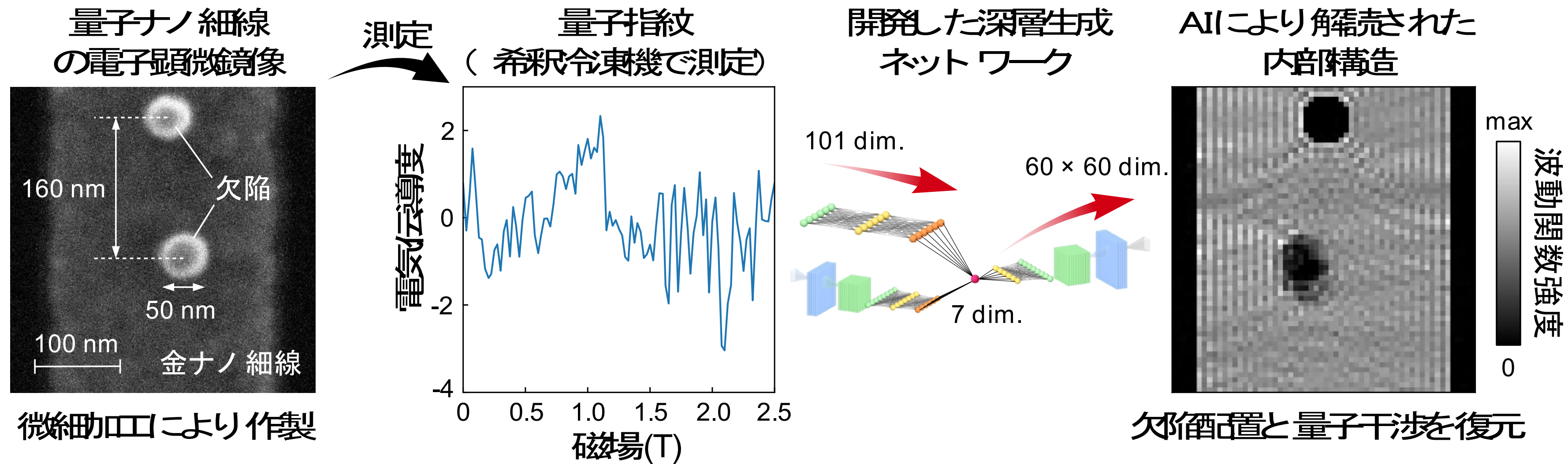
量子細線



アンチドット欠損

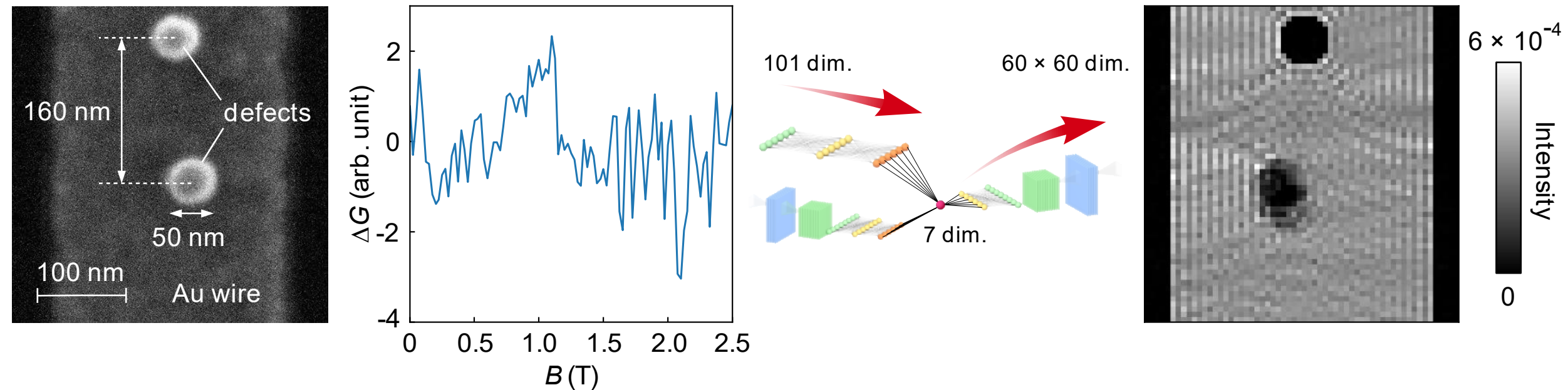


- リフトオフ法により幅280 nm の量子細線を作成
 - 厚さ25 nm の金とチタンを成膜
 - 直径50 nm のアンチドット欠損



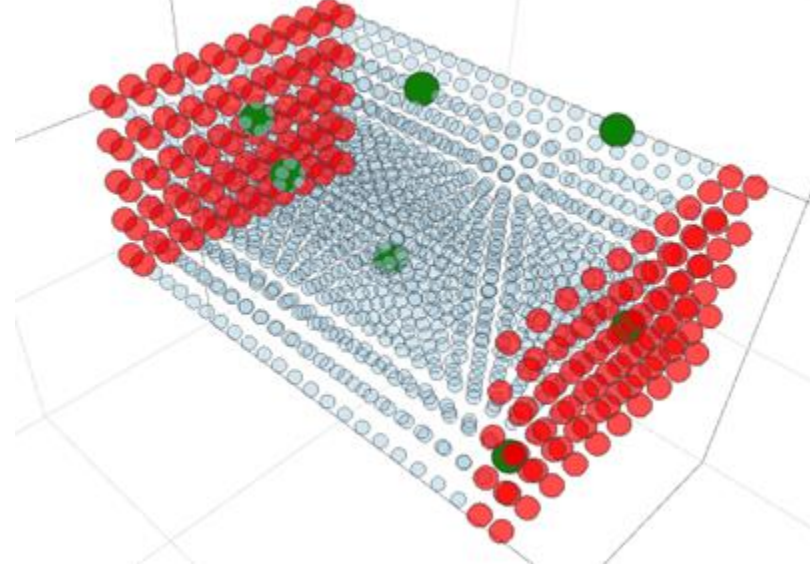
実験データからのミクロ情報復元にも成功

（今回の研究）2次元系の非破壊ナノ構造顕微鏡

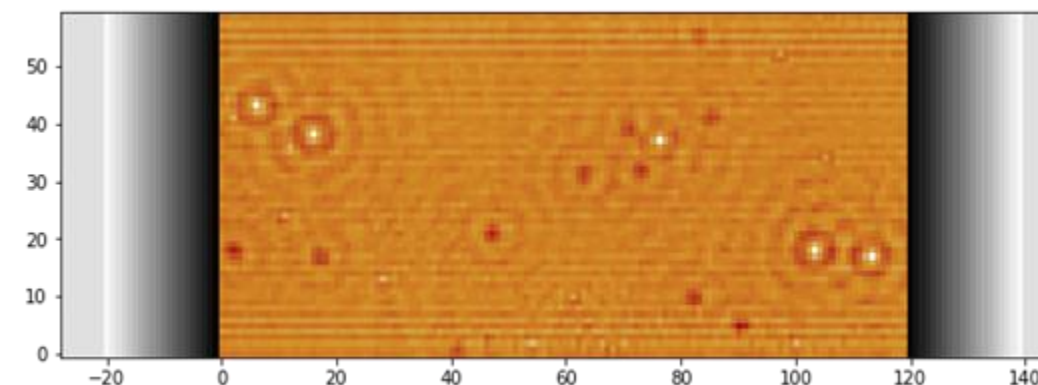


（将来展望）3次元系の非破壊ナノ構造顕微鏡

不純物を含む3次元系



不純物分布の可視化

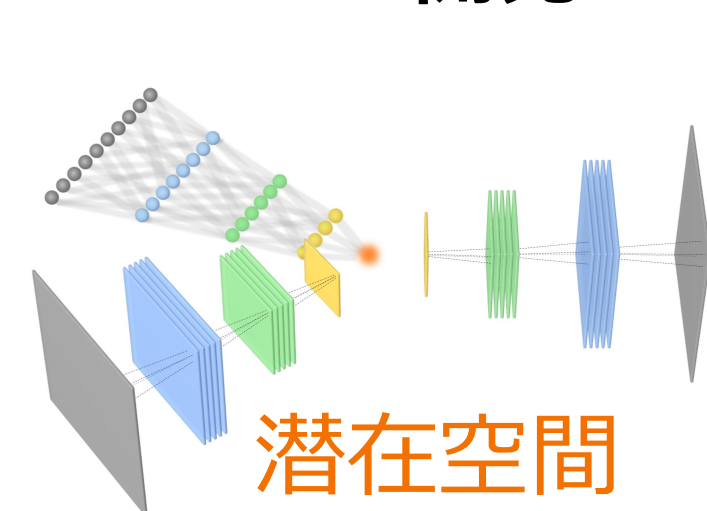


量子指紋からミクロ構造を復元するAIの開発に成功

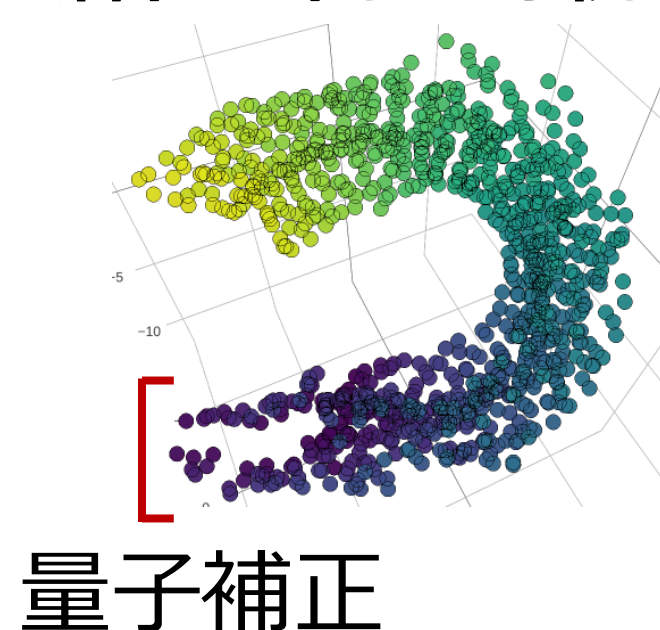
次元圧縮手法を用いたデータ構造の可視化と解析

現実の量子細線を用いた実験的な原理実証に成功

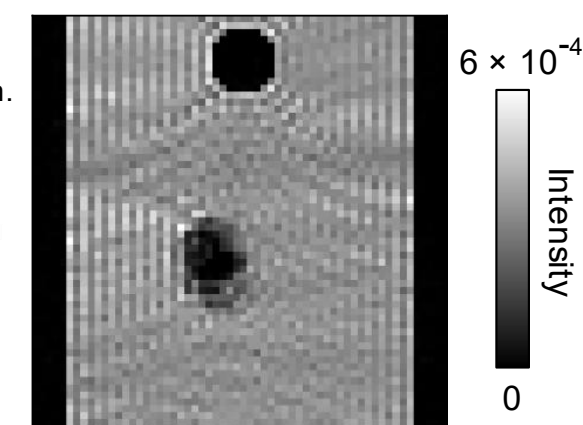
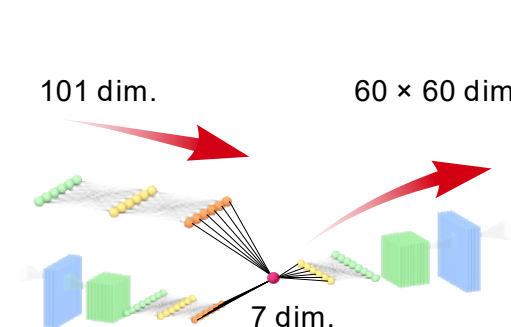
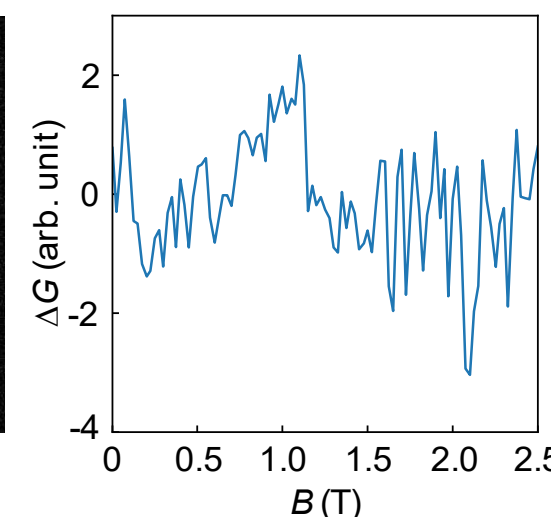
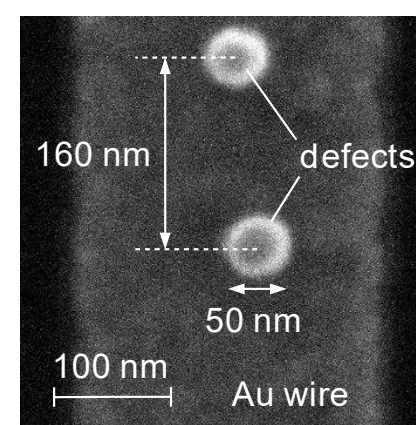
AIの開発



潜在空間の可視化



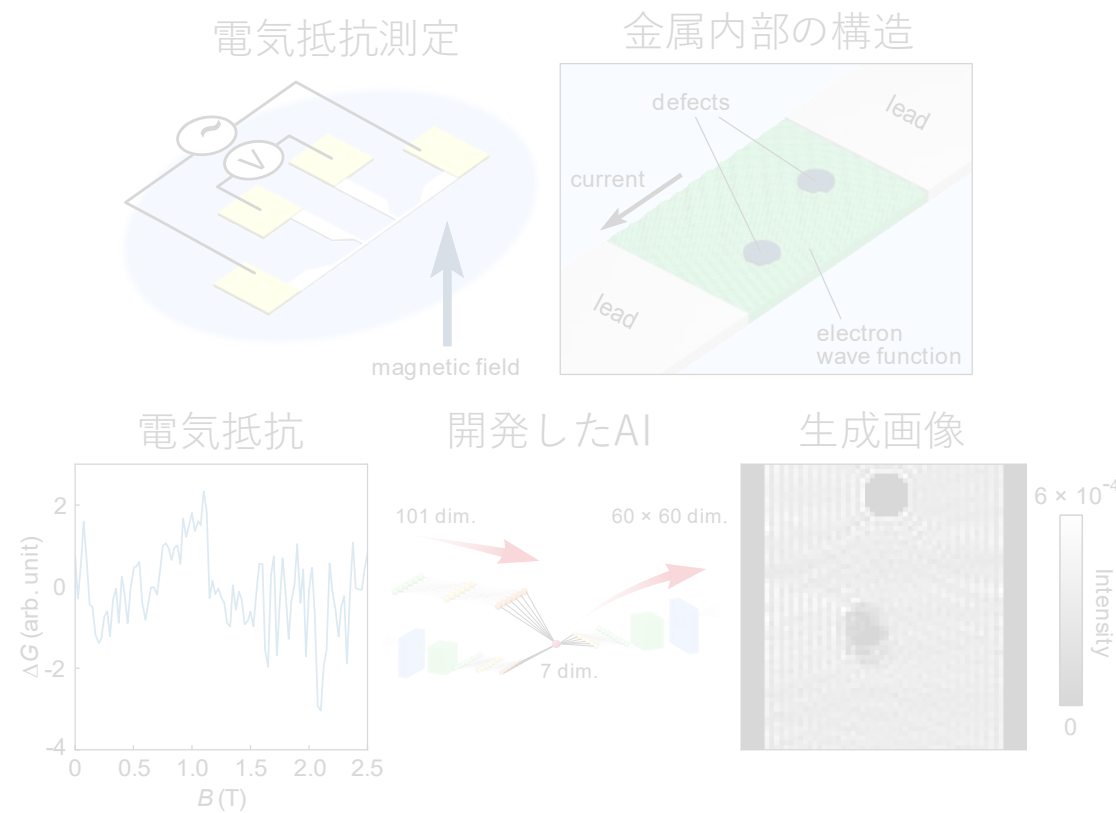
実験的な原理実証



画像生成AI

AIナノ構造顕微鏡

電気抵抗を測定するだけで、金属の内部構造を可視化できるAI顕微鏡技術を開発



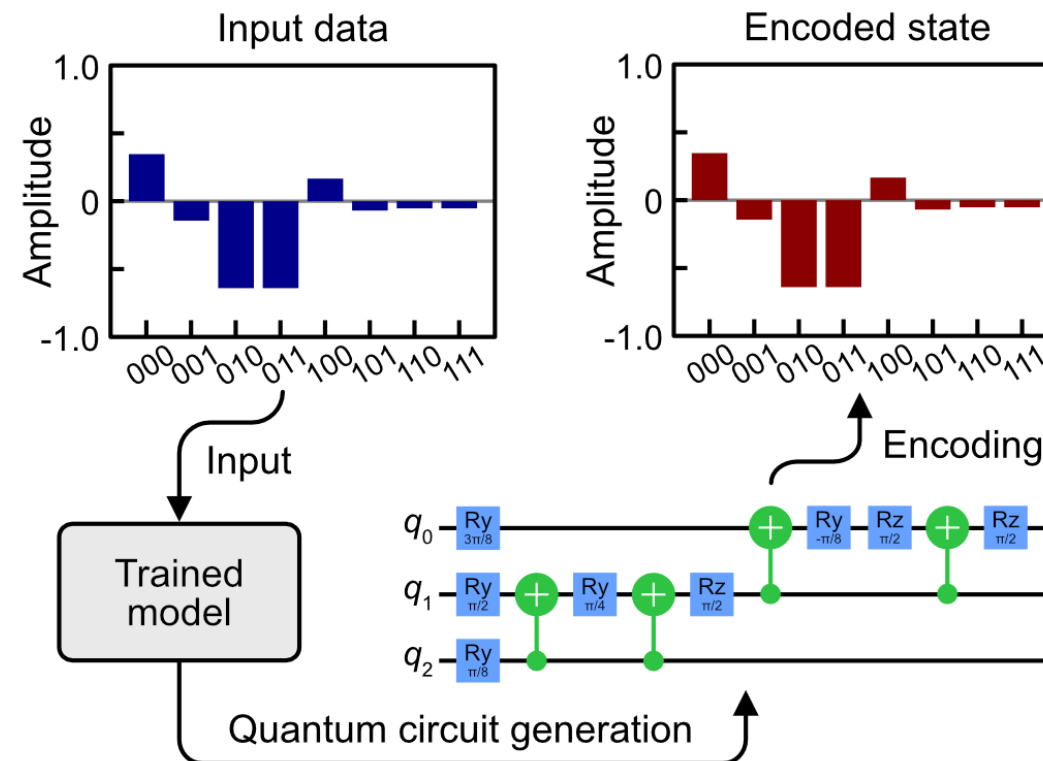
S. Daimon, K. Tsunekawa, S. Kawakami, T. Kikkawa *et al.*, *Nature Communications* **63**, 032003 (2022).

文章生成AI

東大
松下先生

量子コンピュータの制御

ChatGPTが文章を生成する機構を応用し、量子操作を自動生成するAIを開発

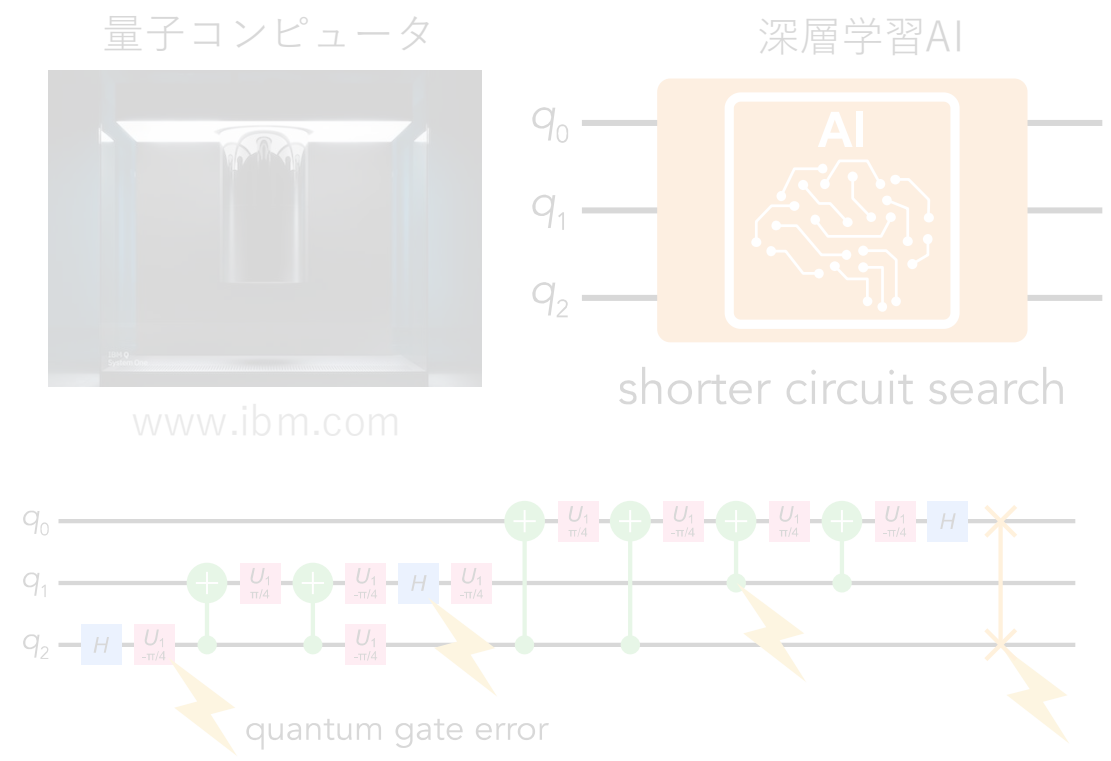


S. Daimon and Y. Matsushita, *Physical Review Applied* **22**, L041001 (2024).

戦略最適化AI

量子計算の最適化

最適な量子操作を探索するAIを開発し、エラーの少ない量子アルゴリズムを発見



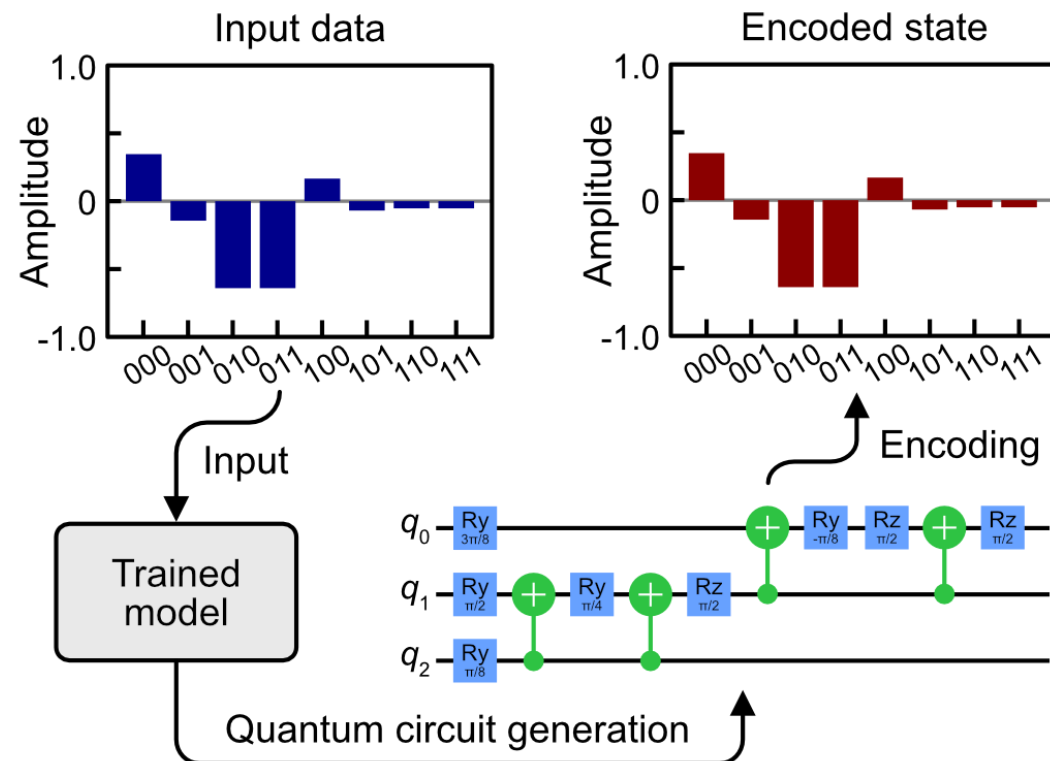
S. Daimon, K. Tsunekawa, R. Takeuchi *et al.*, *Japanese Journal of Applied Physics* **63**, 032003 (2024).

深層学習の高い解析能力を利用すれば、量子物理学の複雑な問題を解決できる

文章生成AI

量子コンピュータの制御

ChatGPTが文章を生成する機構を応用し、量子操作を自動生成するAIを開発

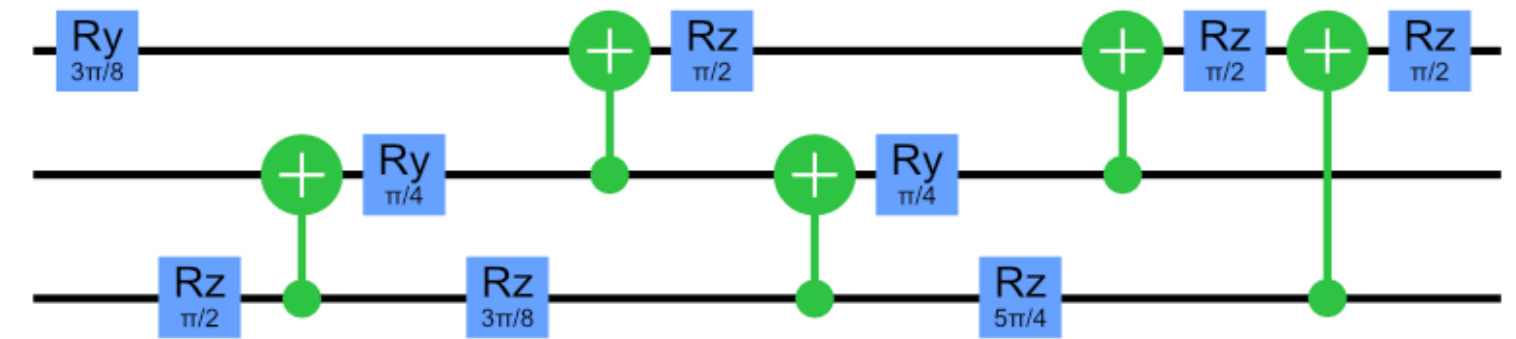


S. Daimon and Y. Matsushita, *Physical Review Applied* **22**, L041001 (2024).

➤ 量子コンピュータにおける量子計算



生成



(量子アルゴリズムに従って量子操作が並ぶ)

➤ 自然言語における文章



生成

私 は 人工 知能 です

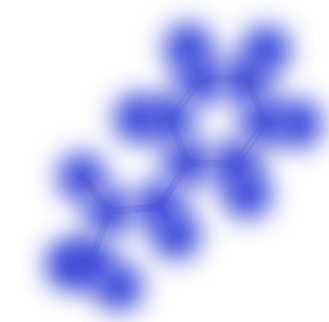
(文法に従って単語が並ぶ)

自然言語の文章と量子計算の類似性に着目し、AIによる量子操作の自動生成に挑戦

1. 量子コンピュータの計算原理



2. 量子計算の必要性（創薬研究の例）



3. AIによる量子操作の自動生成

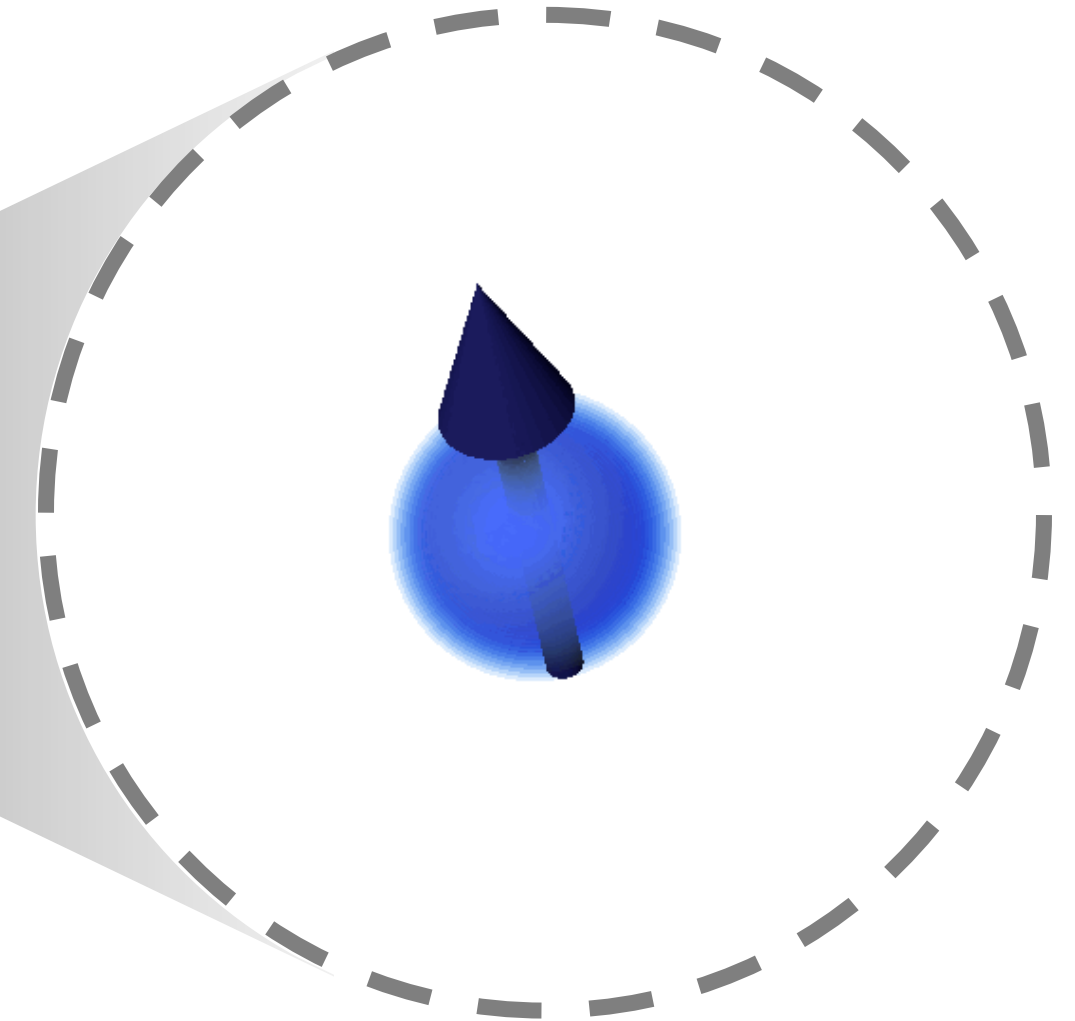
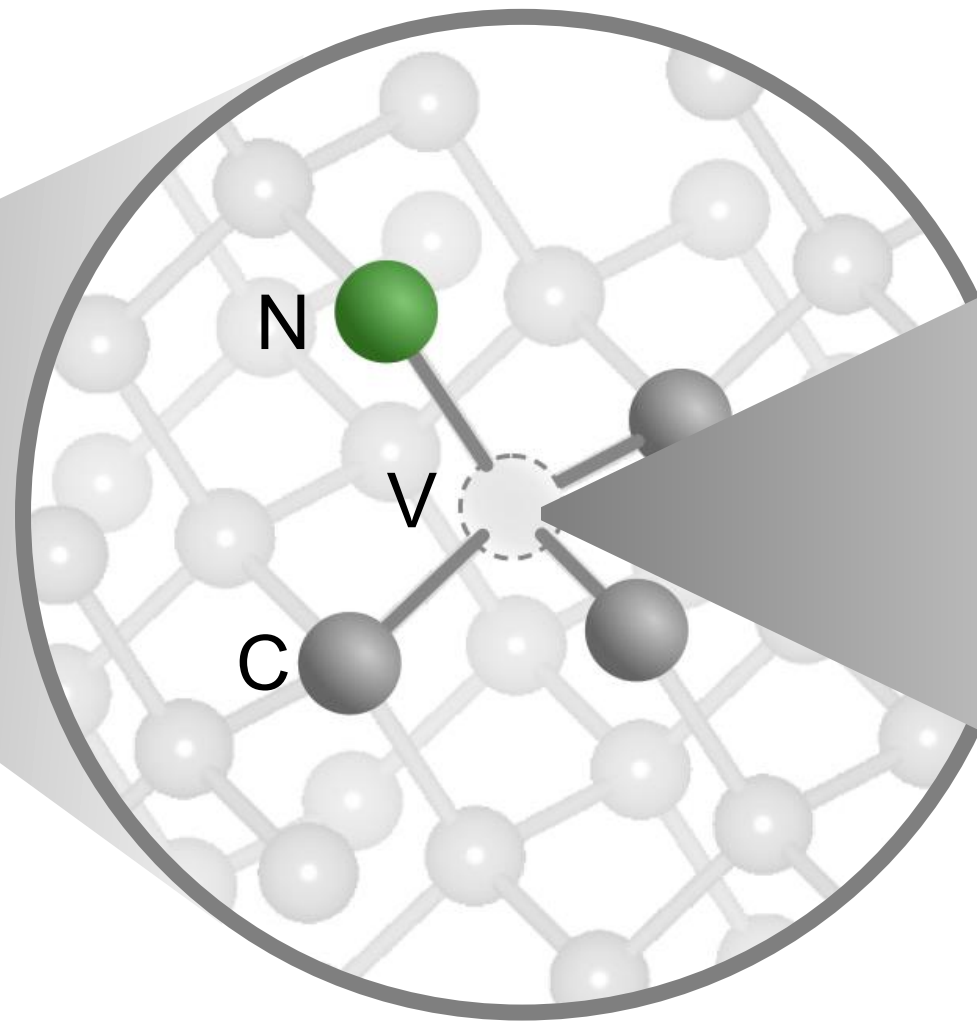


4. まとめ

ダイヤモンド

窒素-空孔中心
(Nitrogen-Vacancy Center)

空孔に電子がトラップ



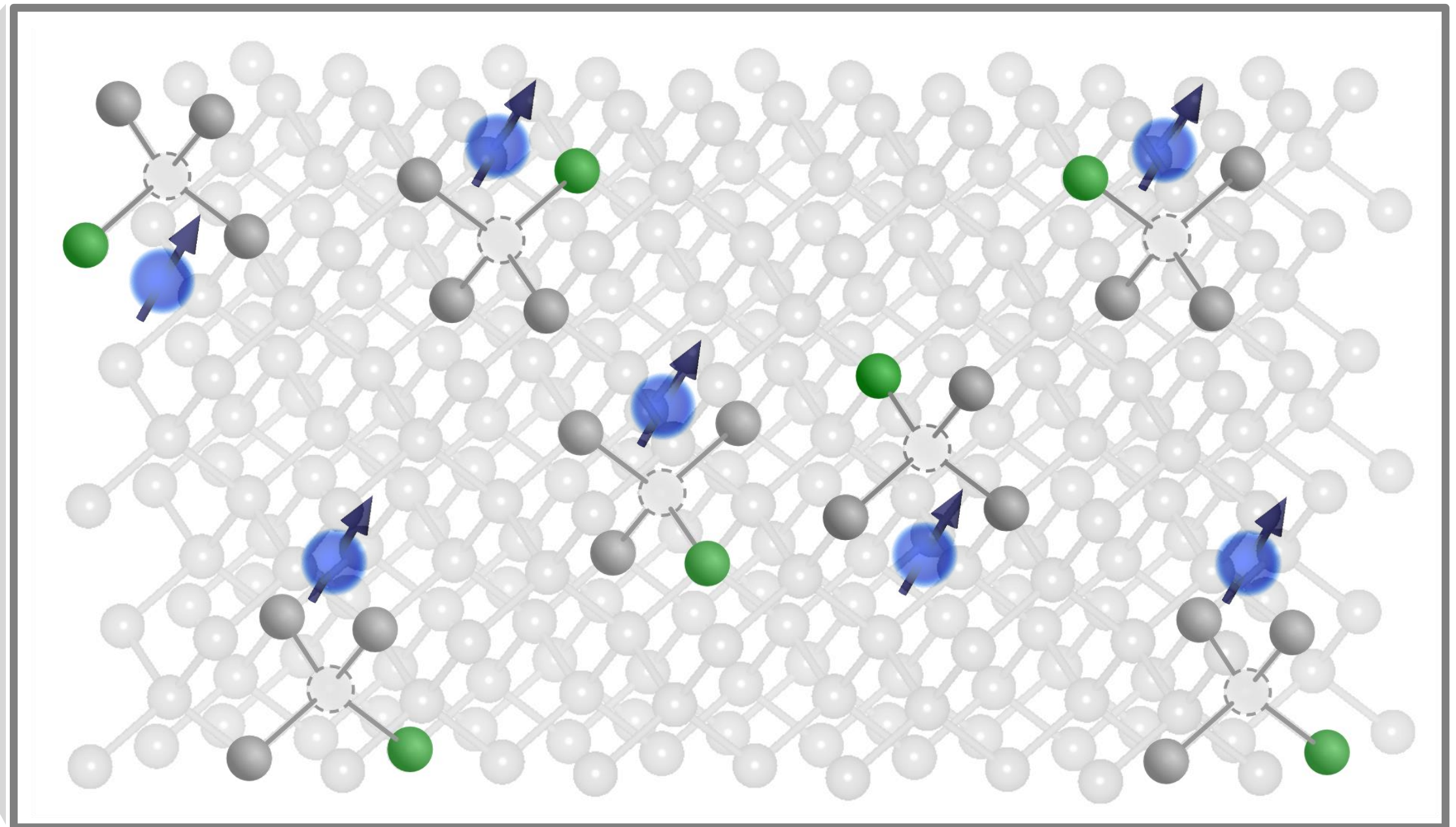
- テトラポット型の構造
- 中心の炭素原子が欠損
- 窒素原子が炭素原子を置換

周りからの影響を受けづらく
量子の性質を長時間保持

量子ビットとして利用

ダイヤモンド

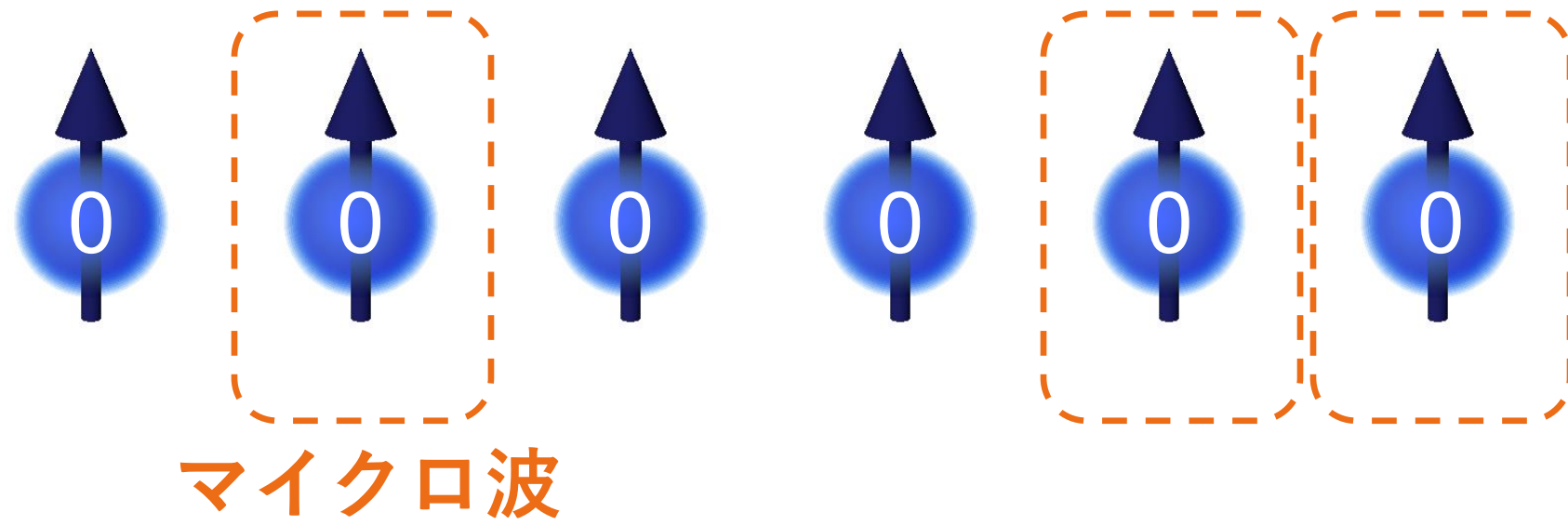
複数の窒素-空孔中心 = 多数の量子ビット



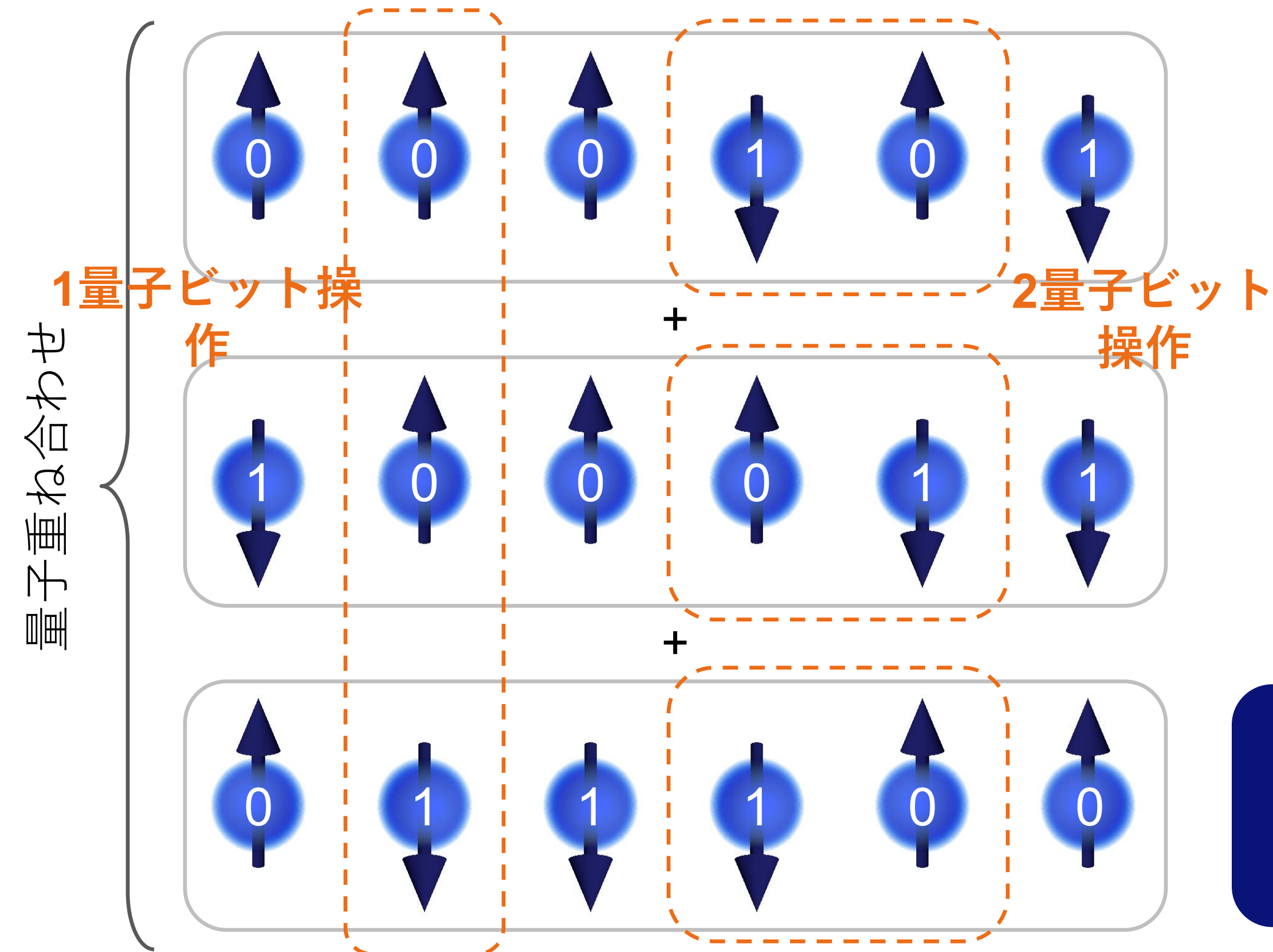
高崎研は量子ビームを用いて
窒素-空孔中心を導入する
世界トップクラスの技術をもつ

ダイヤモンドを量子コンピュータとして応用可能

複数の量子ビットがつくる量子状態



複数の量子ビットがつくる量子状態



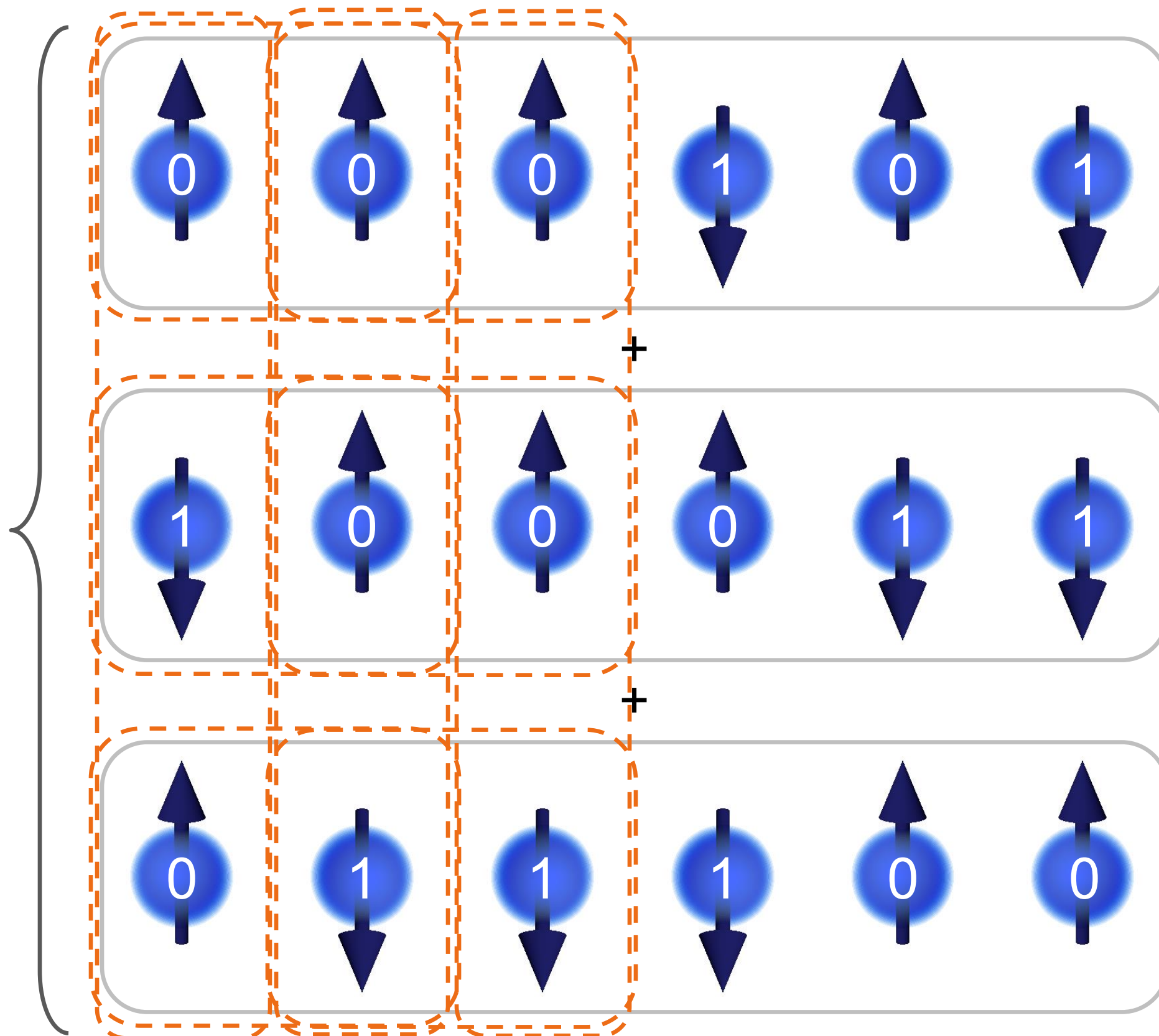
超並列計算

重ね合った複数の状態
を同時に計算

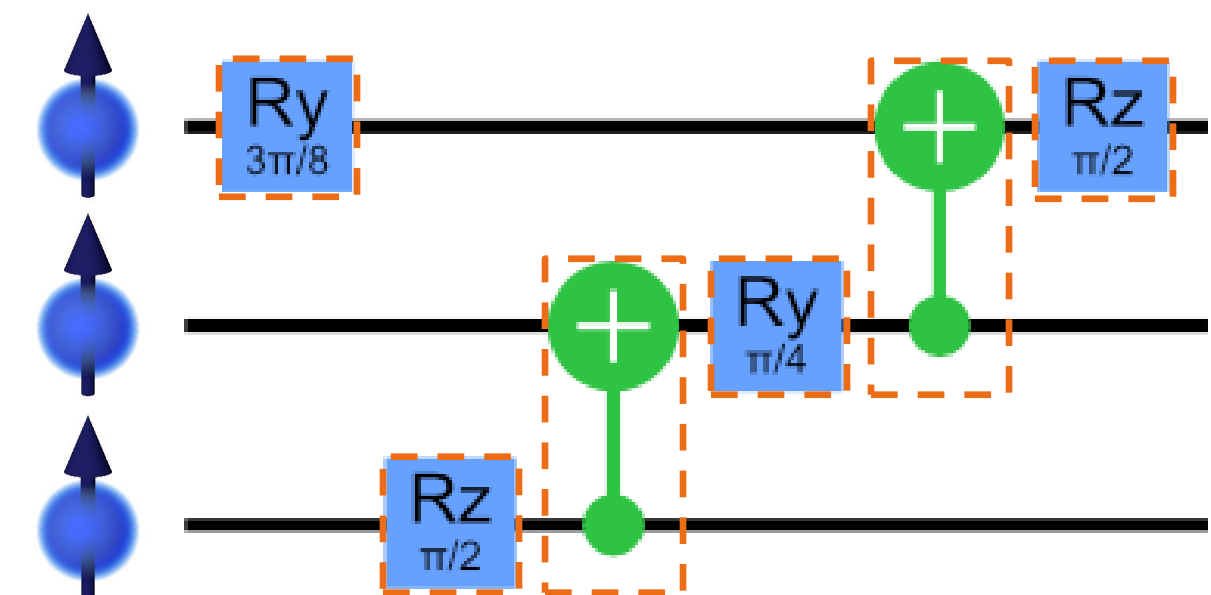
量子ビット操作を繰り返して
量子状態を変化させていく過程
= 量子計算

複数の量子ビットがつくる量子状態

量子重ね合わせ



量子計算の設計図（量子回路）

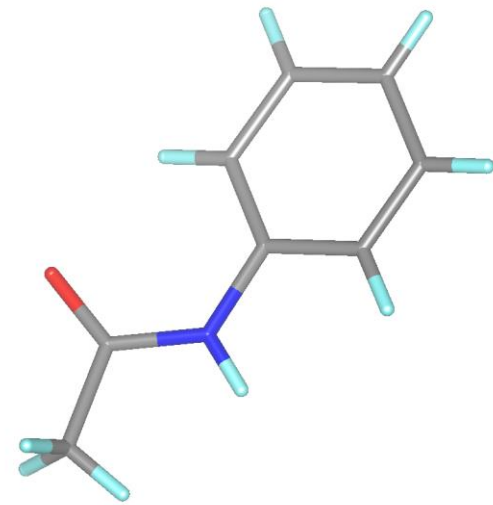


複雑な量子状態を用意できる

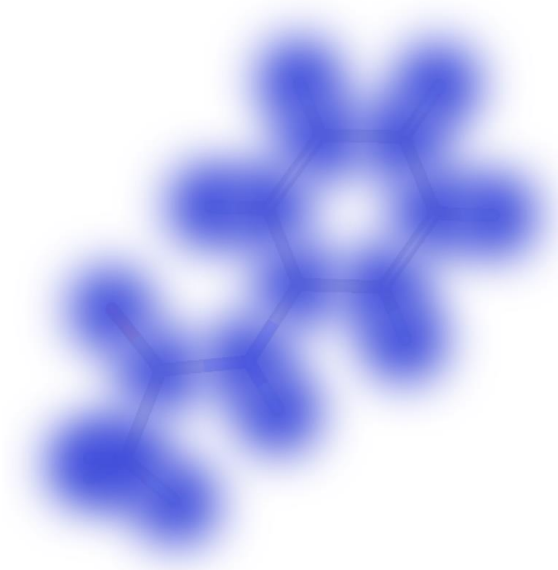
量子ビット操作を繰り返して
量子状態を変化させていく過程
= 量子計算

薬を構成する分子

薬の分子構造の例



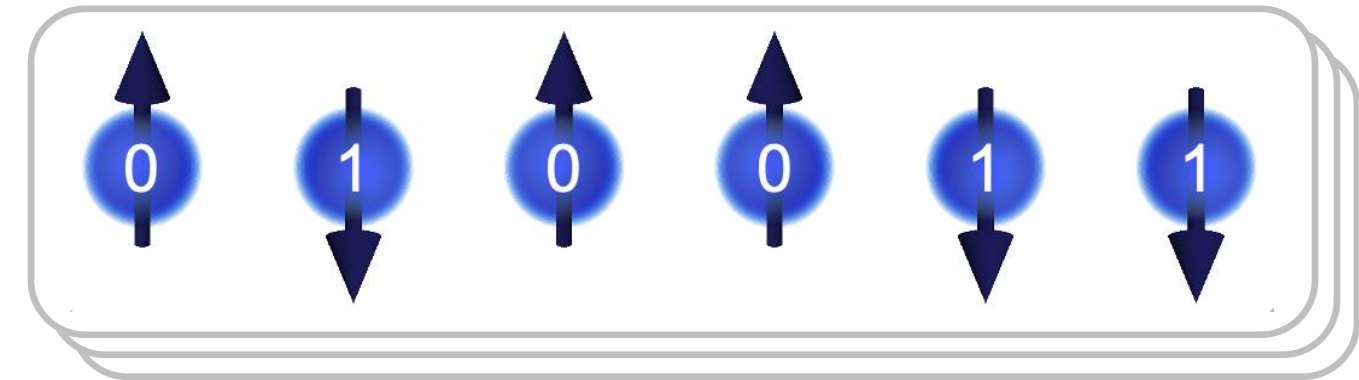
電子の雲
(複雑な量子状態)



- 電子の性質を解明できれば、薬の作用や安全性がわかる
- 量子状態は複雑で従来のコンピュータでは計算が難しい

量子コンピュータ

量子ビットの量子状態

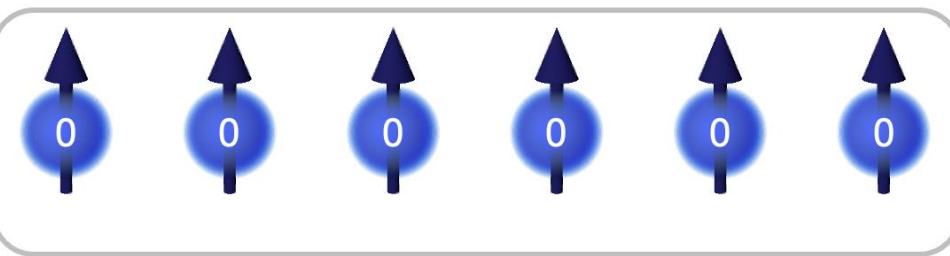


- 量子状態を表現するのに適したプラットフォーム
- 量子ビットを使って電子状態を模倣し、反応や安定性を解析

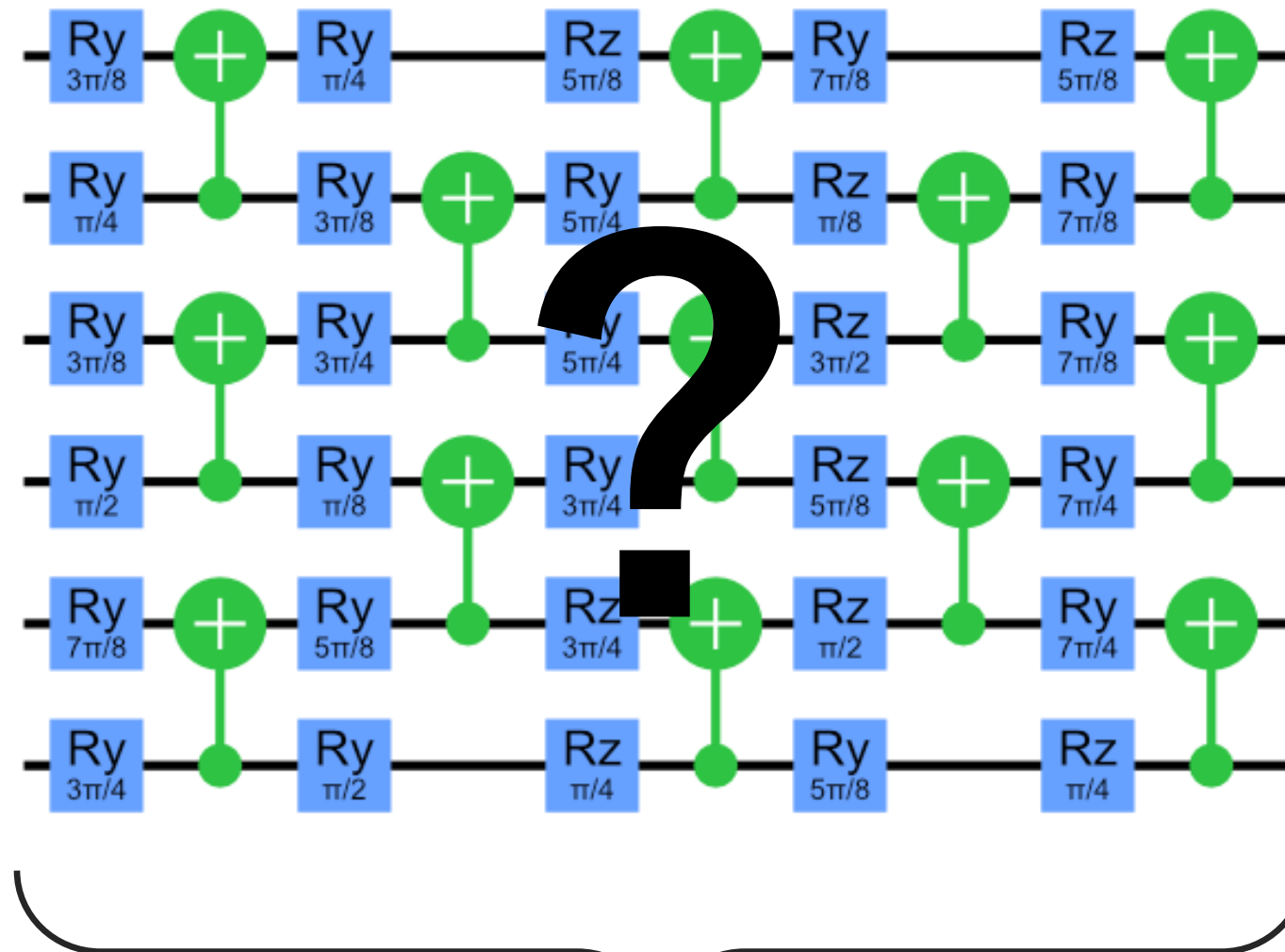
薬などを構成する分子の電子状態を量子ビットで表現できれば
薬の効果の検証や新しい薬の開発が可能

なぜ複雑な量子状態が必要か（創薬の例）

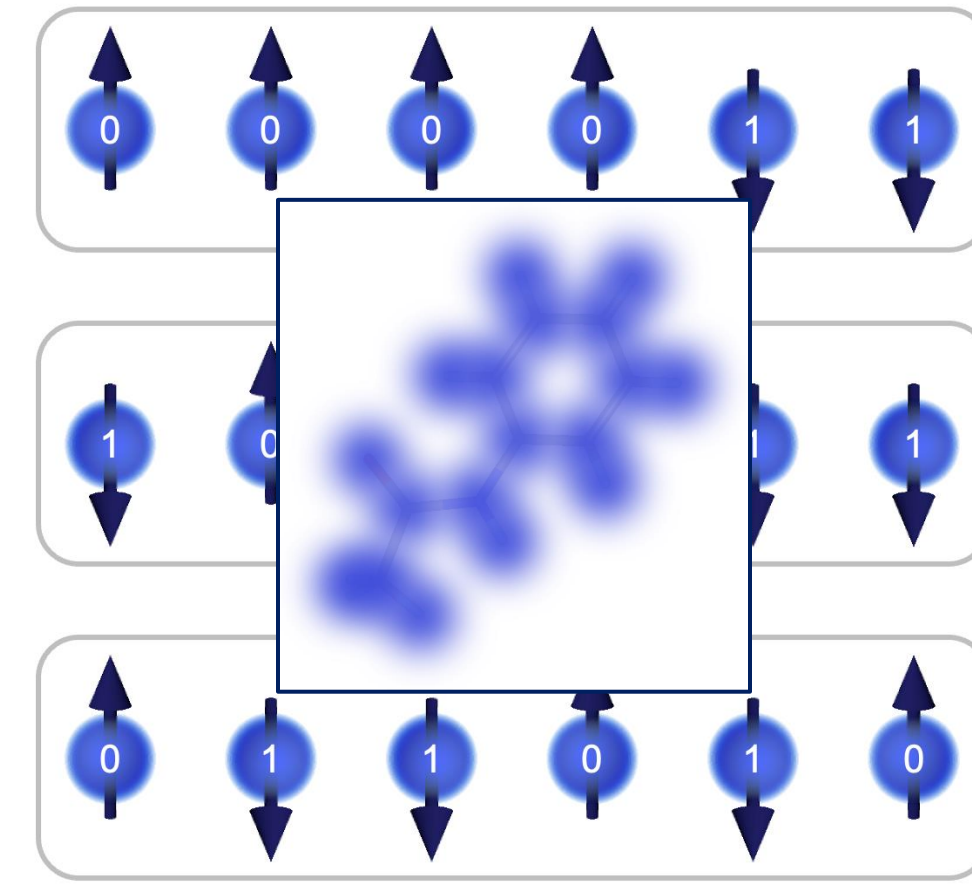
0に初期化された状態



量子計算（量子回路）



分子の電子状態



量子操作の組み合わせの数は極めて膨大
 どのような操作で電子状態を模倣できるか
 を見つけることが困難という問題

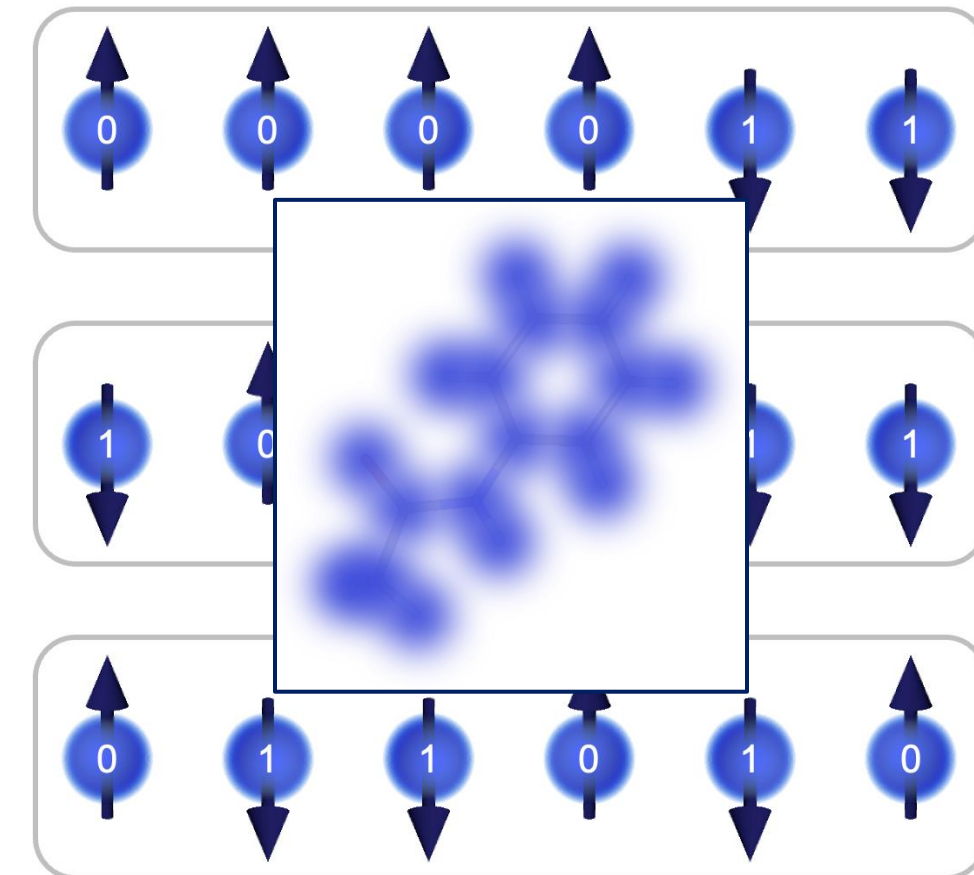
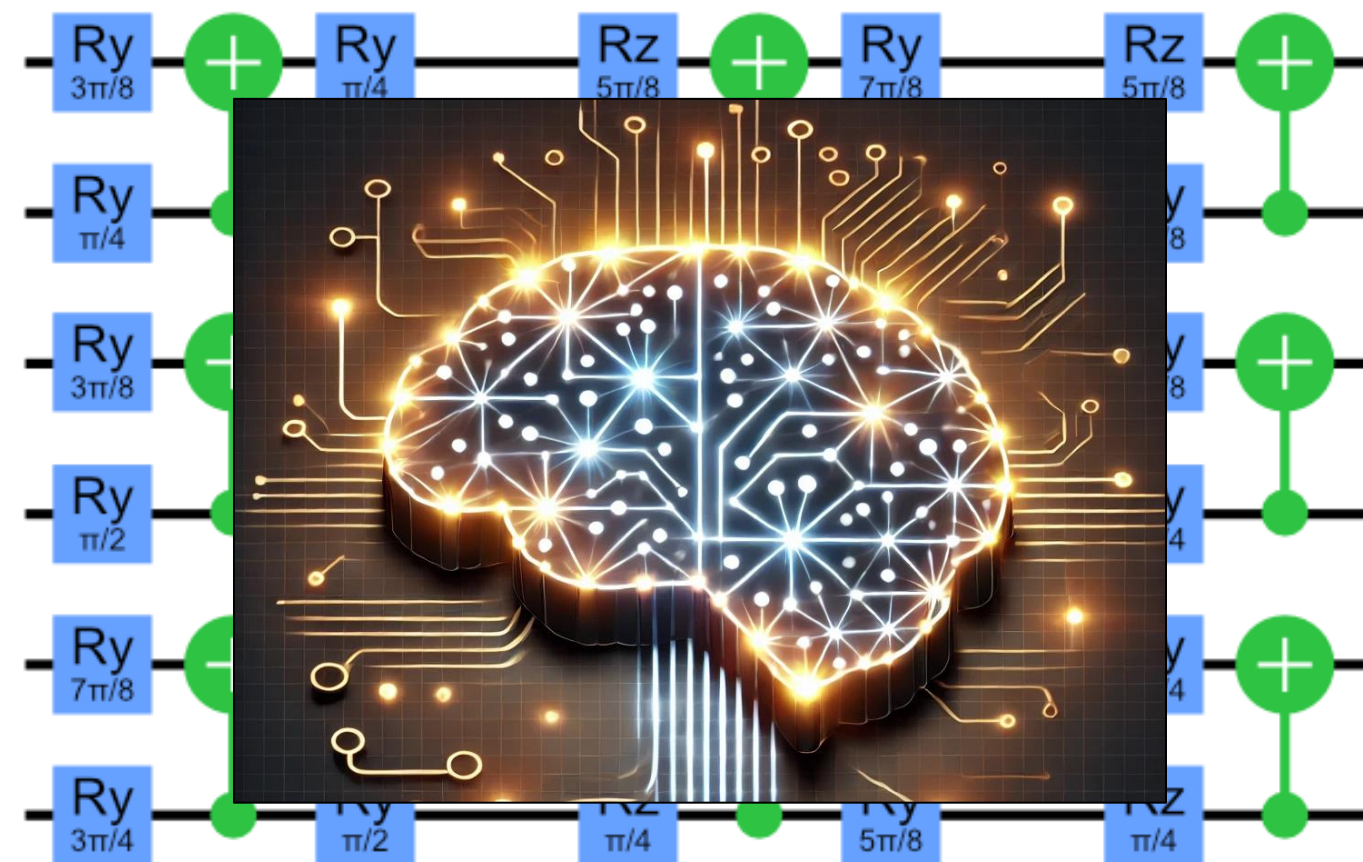
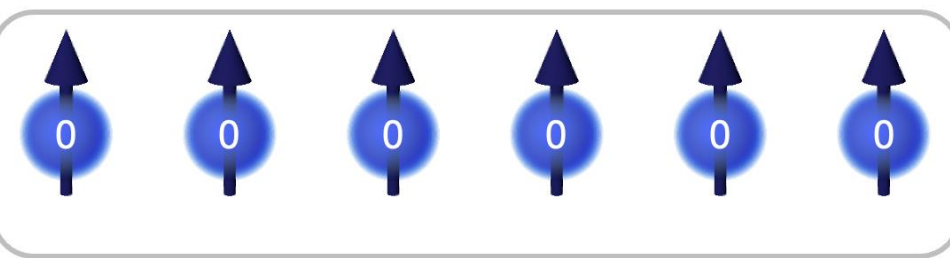
分子の反応

分子の安定性

量子計算（量子回路）

分子の電子状態

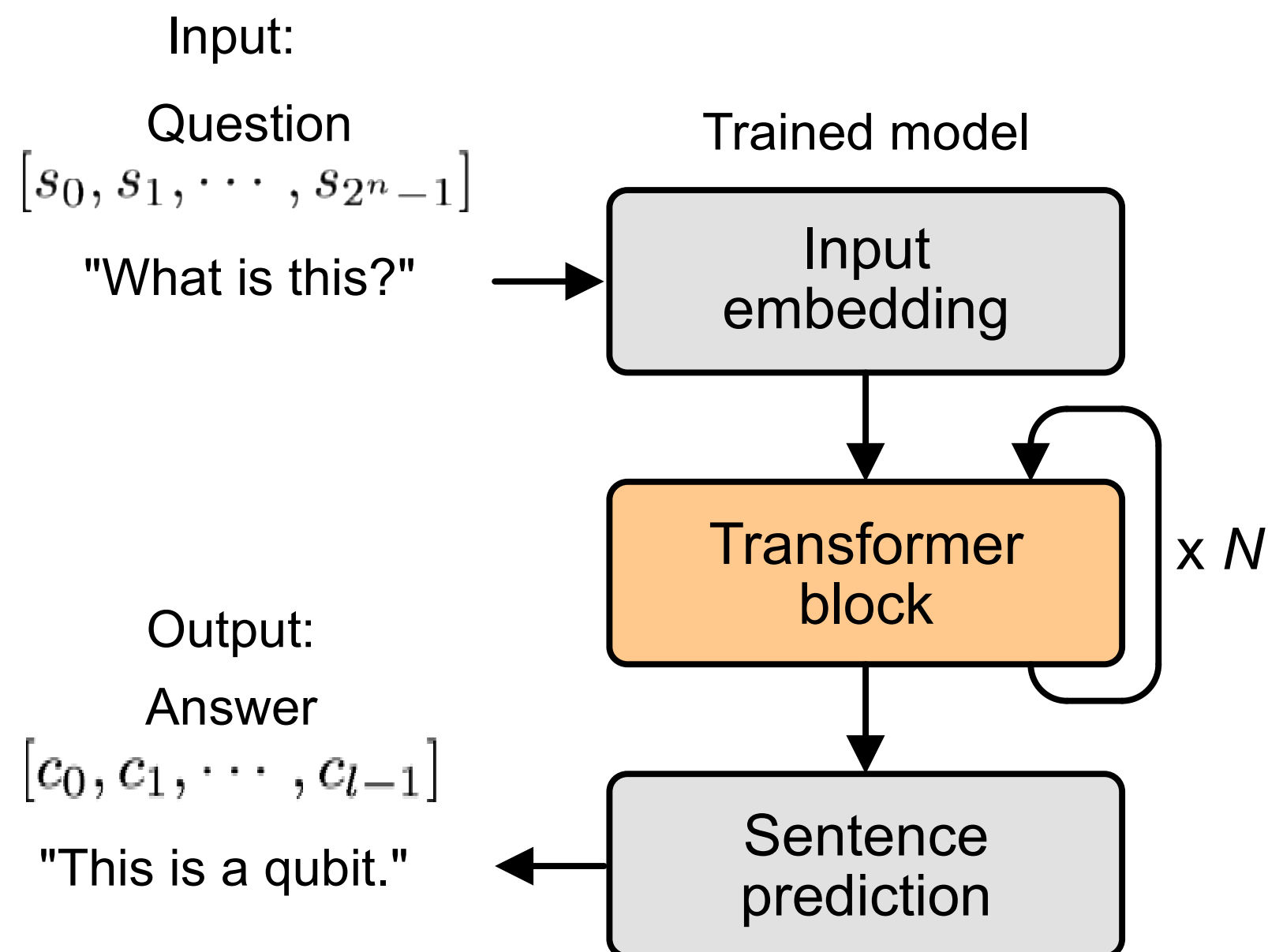
0に初期化された状態



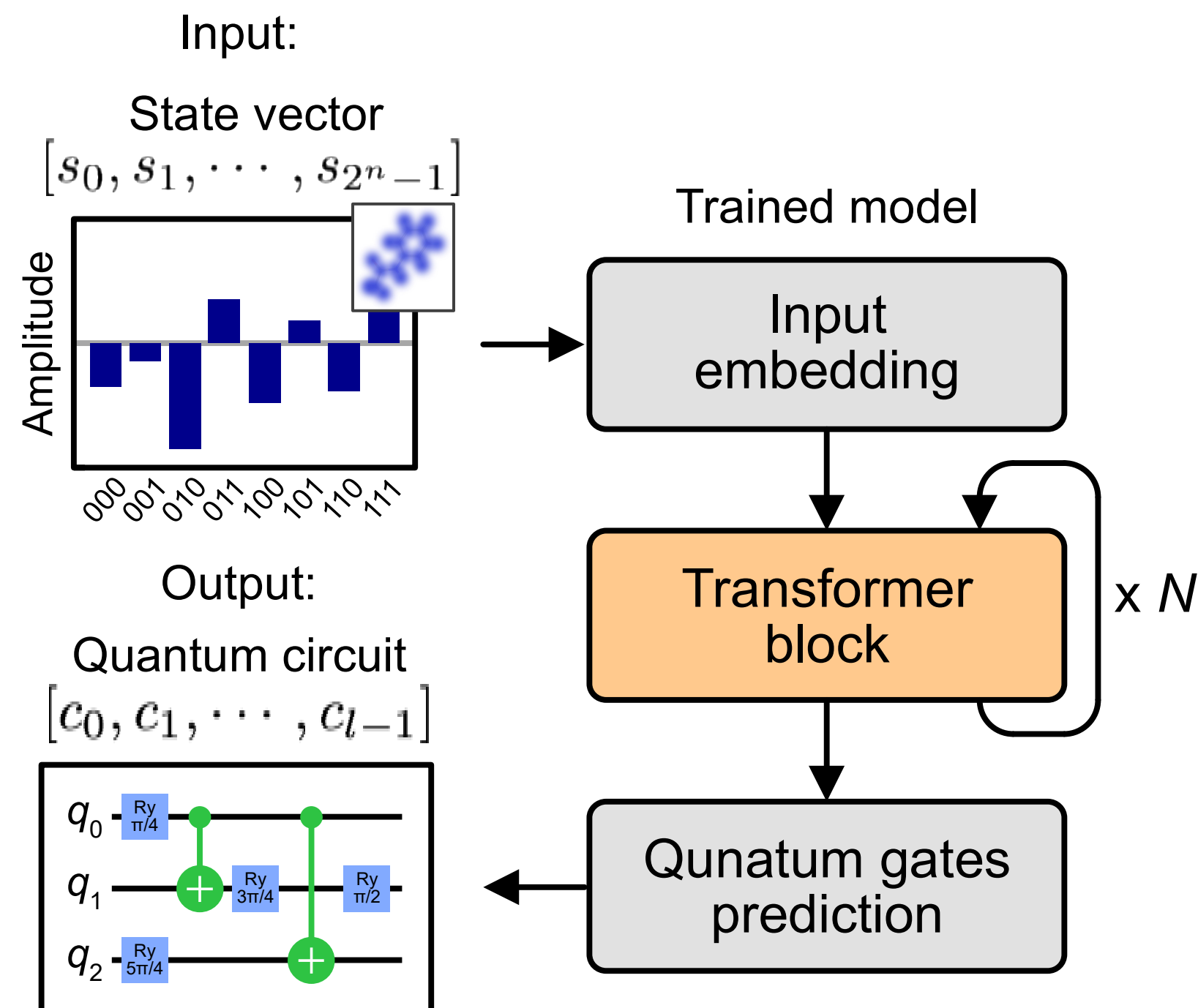
組み合わせの処理を得意とするAIに量子回路を生成させることで問題を解決

文章生成AIの技術を応用して、量子計算プロセスを自動生成するAIを開発

自然言語処理

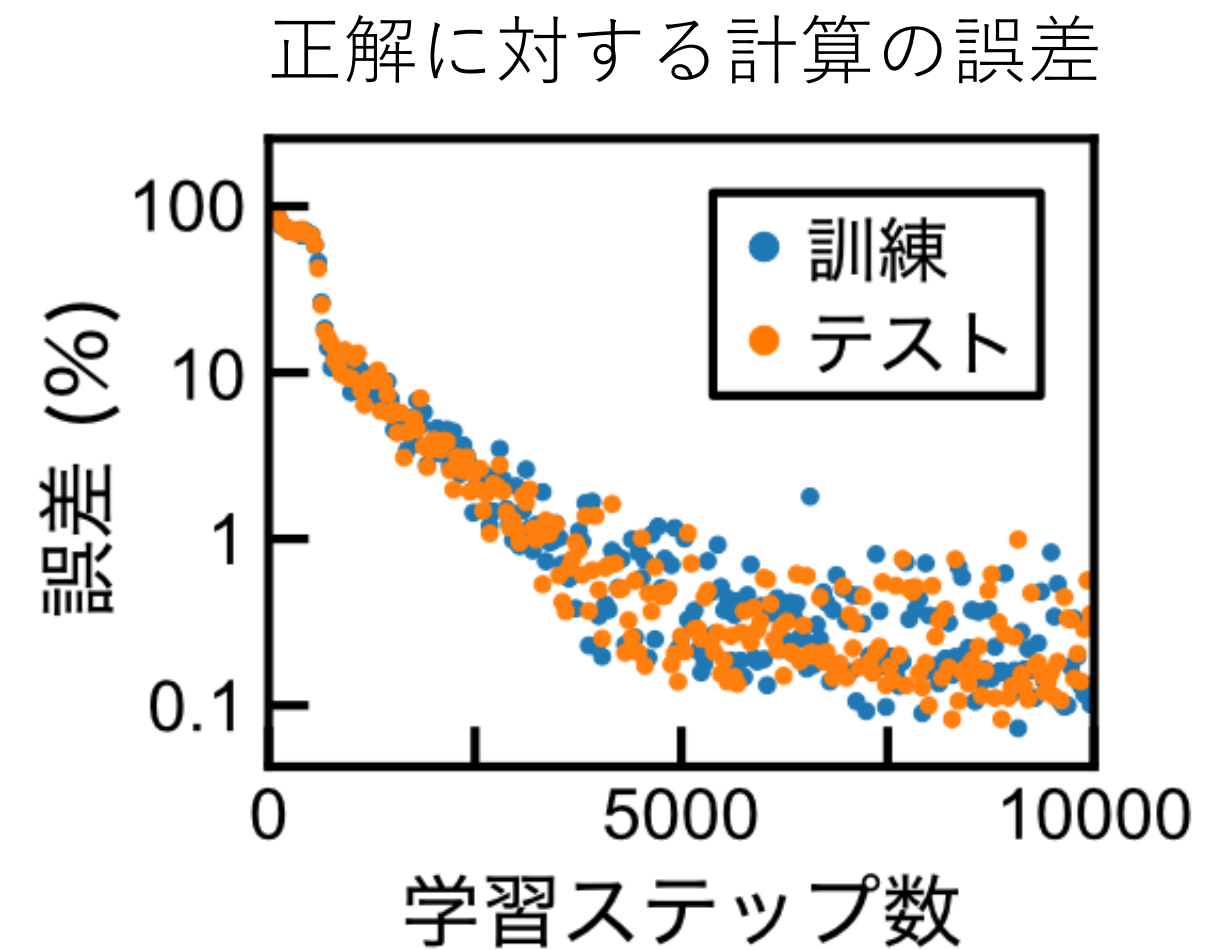
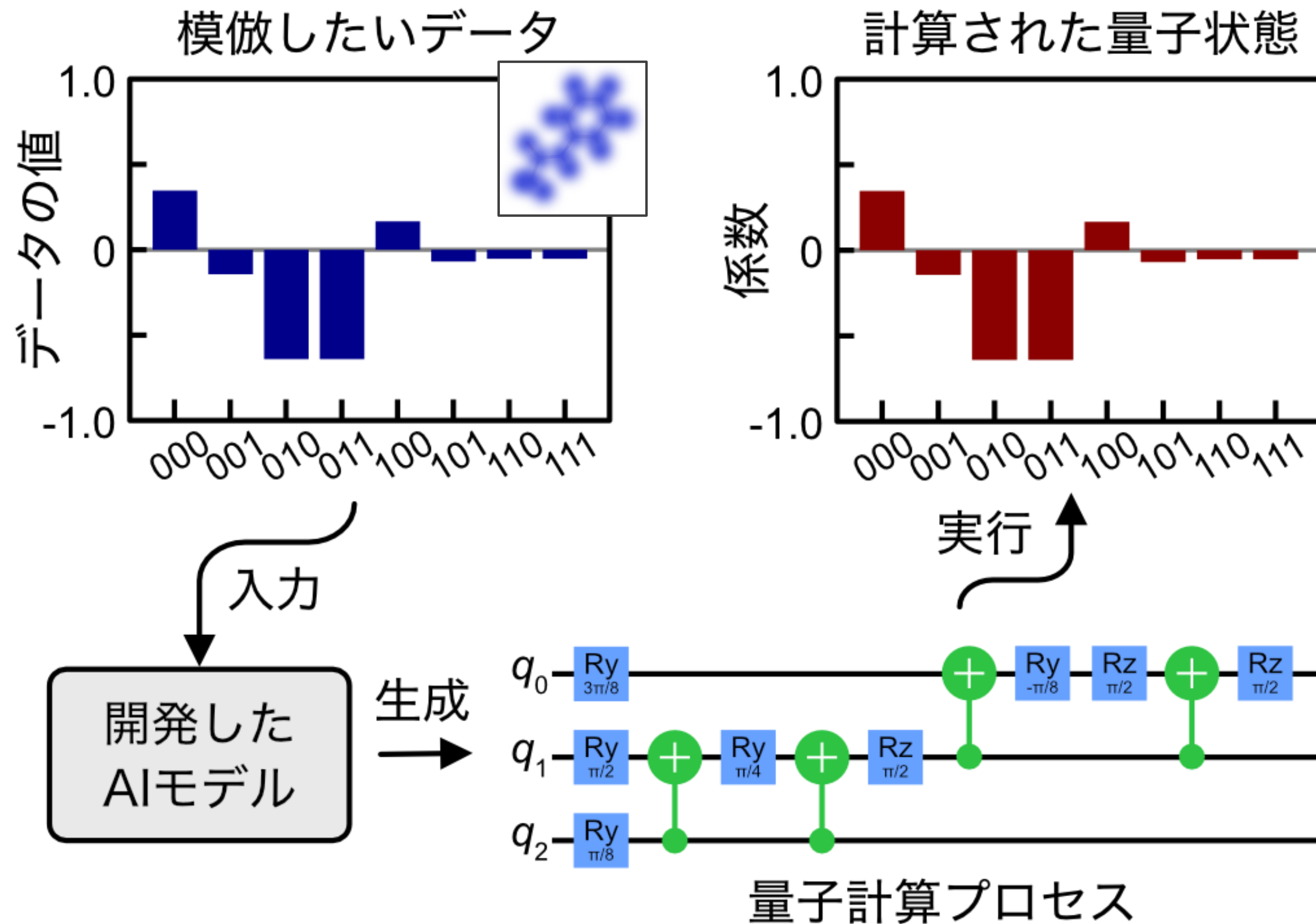


本研究：振幅エンコーディング



振幅エンコードする量子回路を生成可能なTransformerモデルを開発

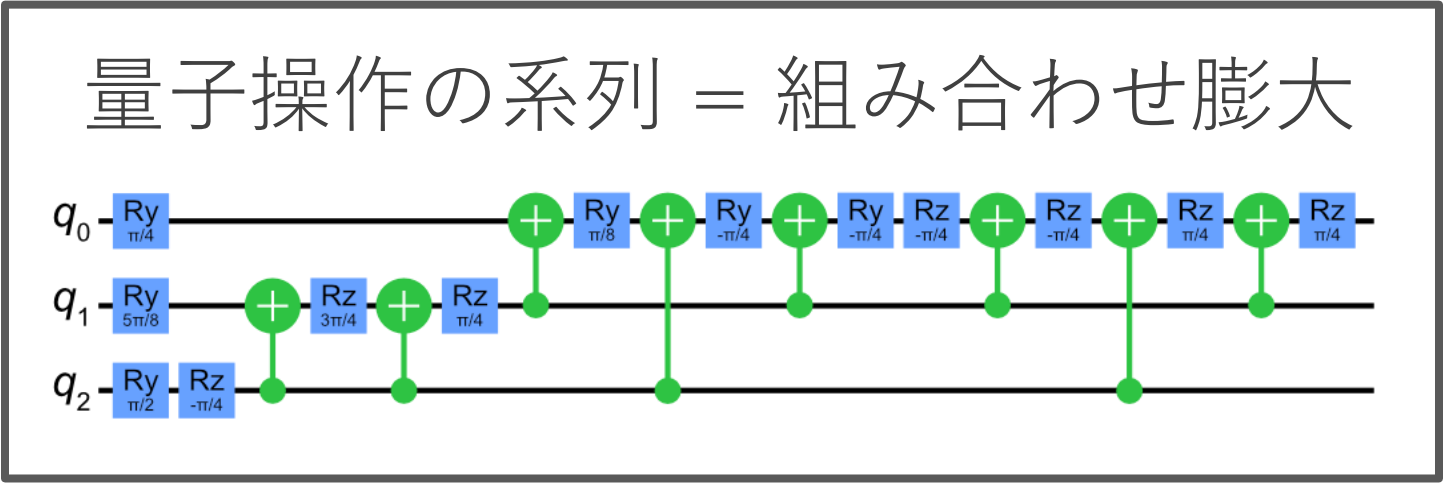
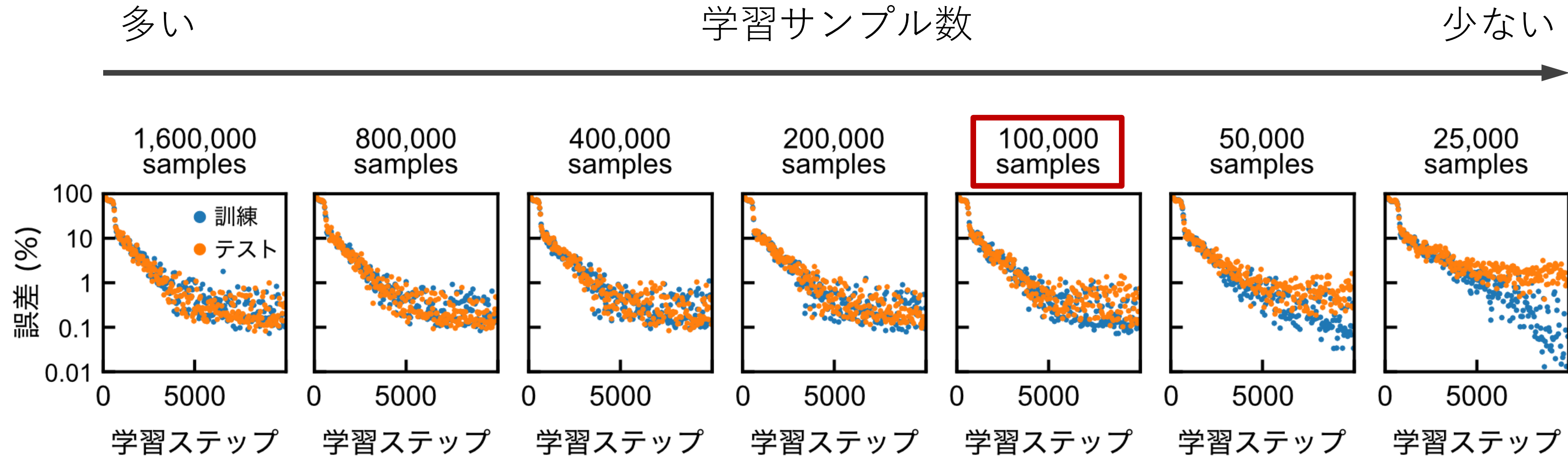
開発したAIによる量子計算プロセスの生成



- 正解データに対して0.1%程度の誤差で正確に量子状態を生成
- 学習に用いた訓練データだけでなく、未知のテストデータに対しても正しく状態を生成

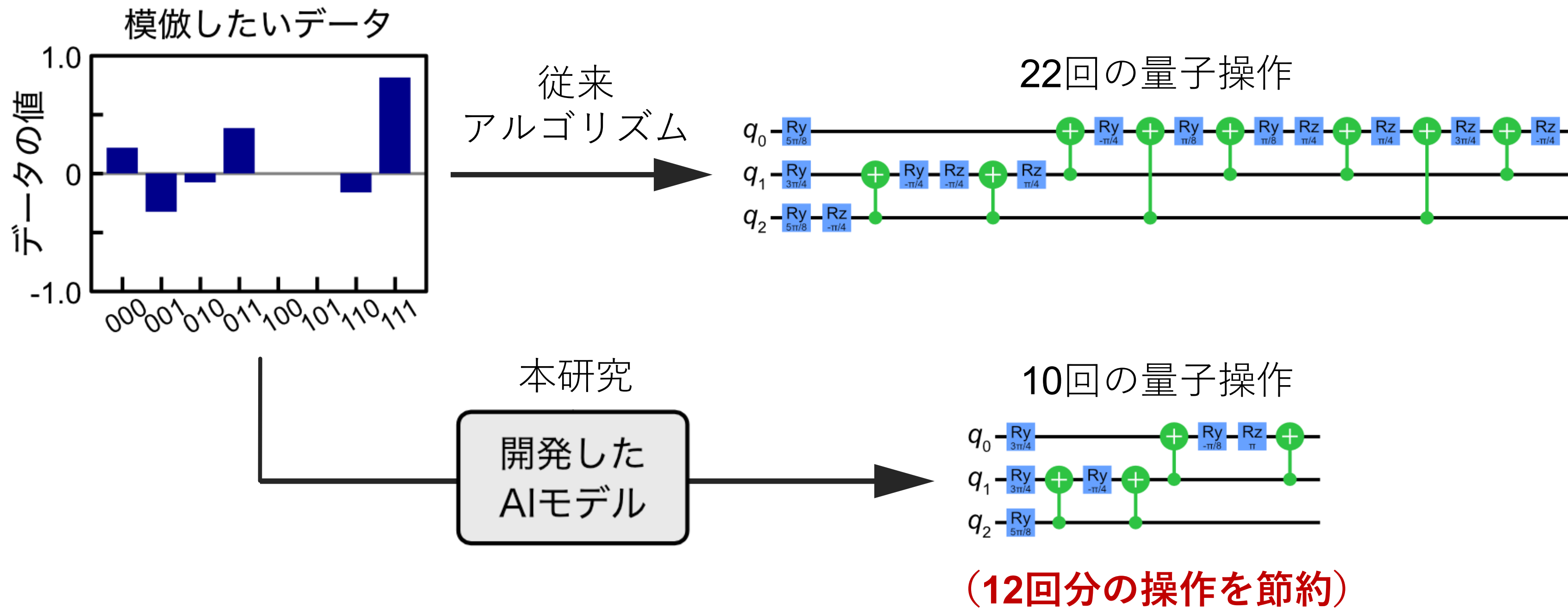
所望の量子状態を実現する深層学習AIの開発に成功

開発したAIの高い汎化性能

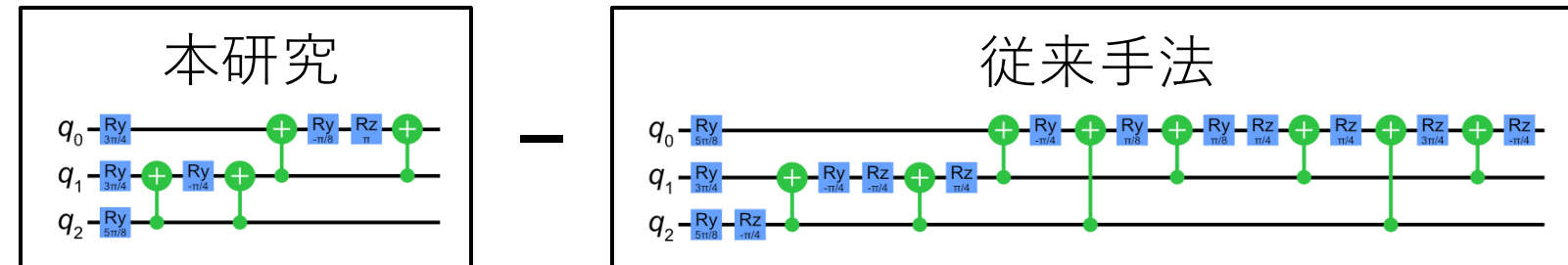


少ないデータを学習するだけで、学習していない膨大なデータに対しても高い精度で予測可能

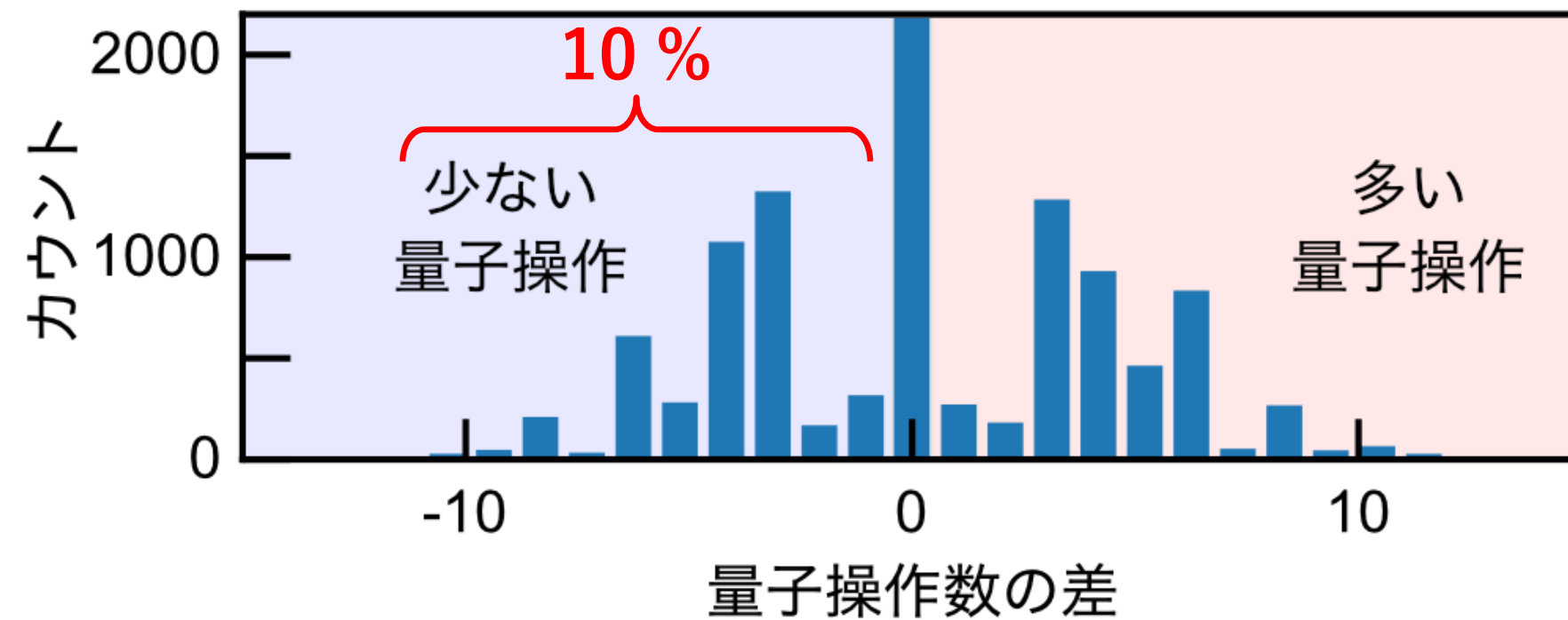
開発したAIが量子アルゴリズムを理解、再構築



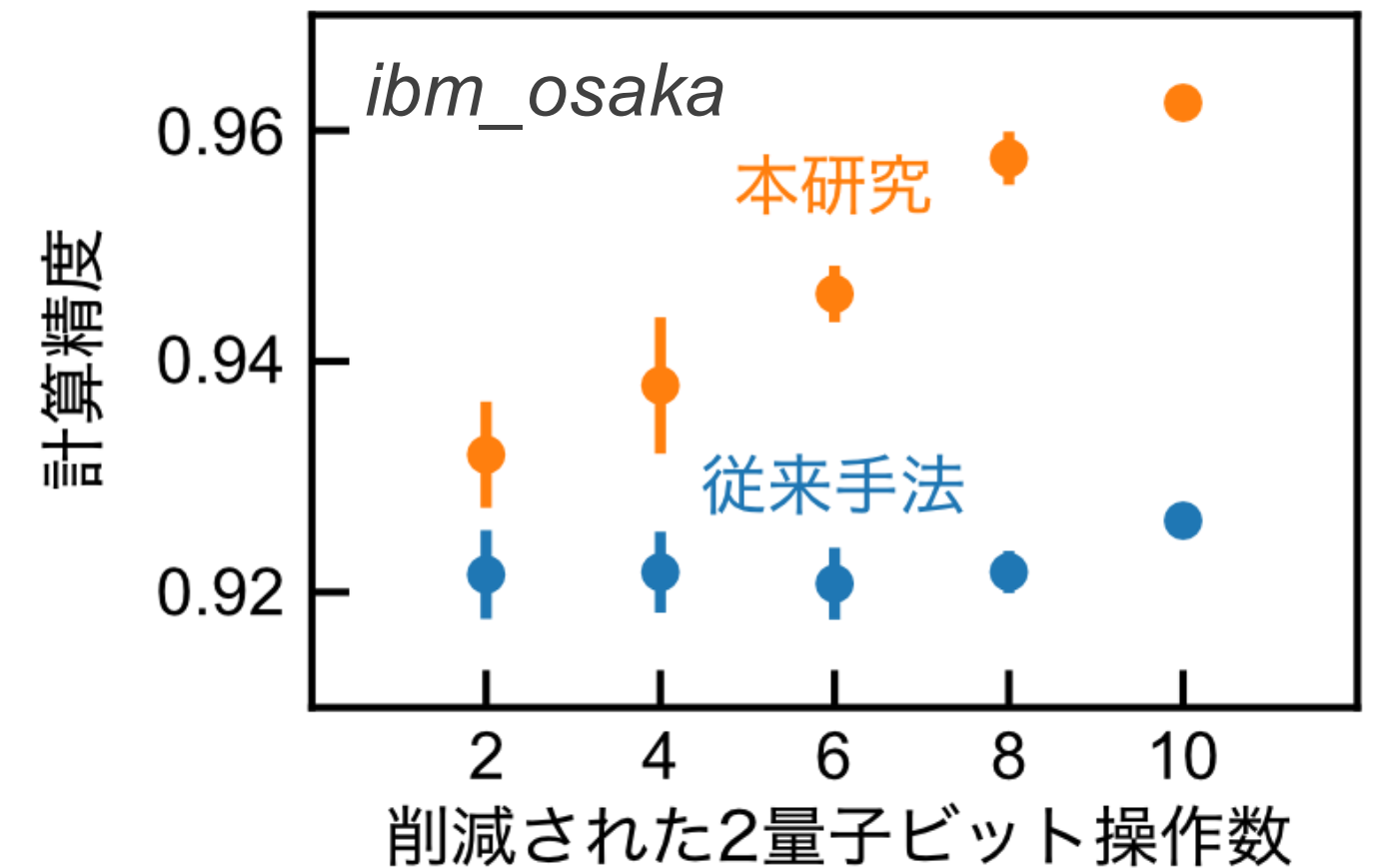
少ない量子操作の数で所望の量子状態を生成 → 高速かつエラーを抑えて量子計算可能



量子操作数の差のヒストグラム



IBMが提供する量子コンピュータ
のノイズパラメータを利用した
数値シミュレーション

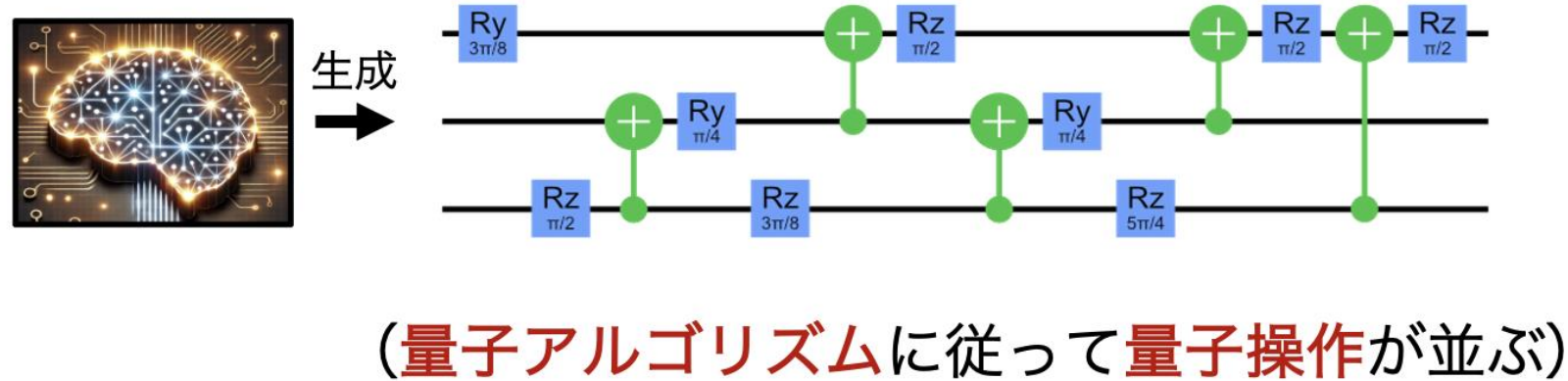


操作数の減少により、現実の量子コンピュータで計算エラーを低減できることを実証

文章生成の技術を用いた量子計算プロセスの自動生成

- ✓ 自然言語の文章と量子計算の構造の類似性に着目
- ✓ 量子操作を自動生成する深層学習AIを開発

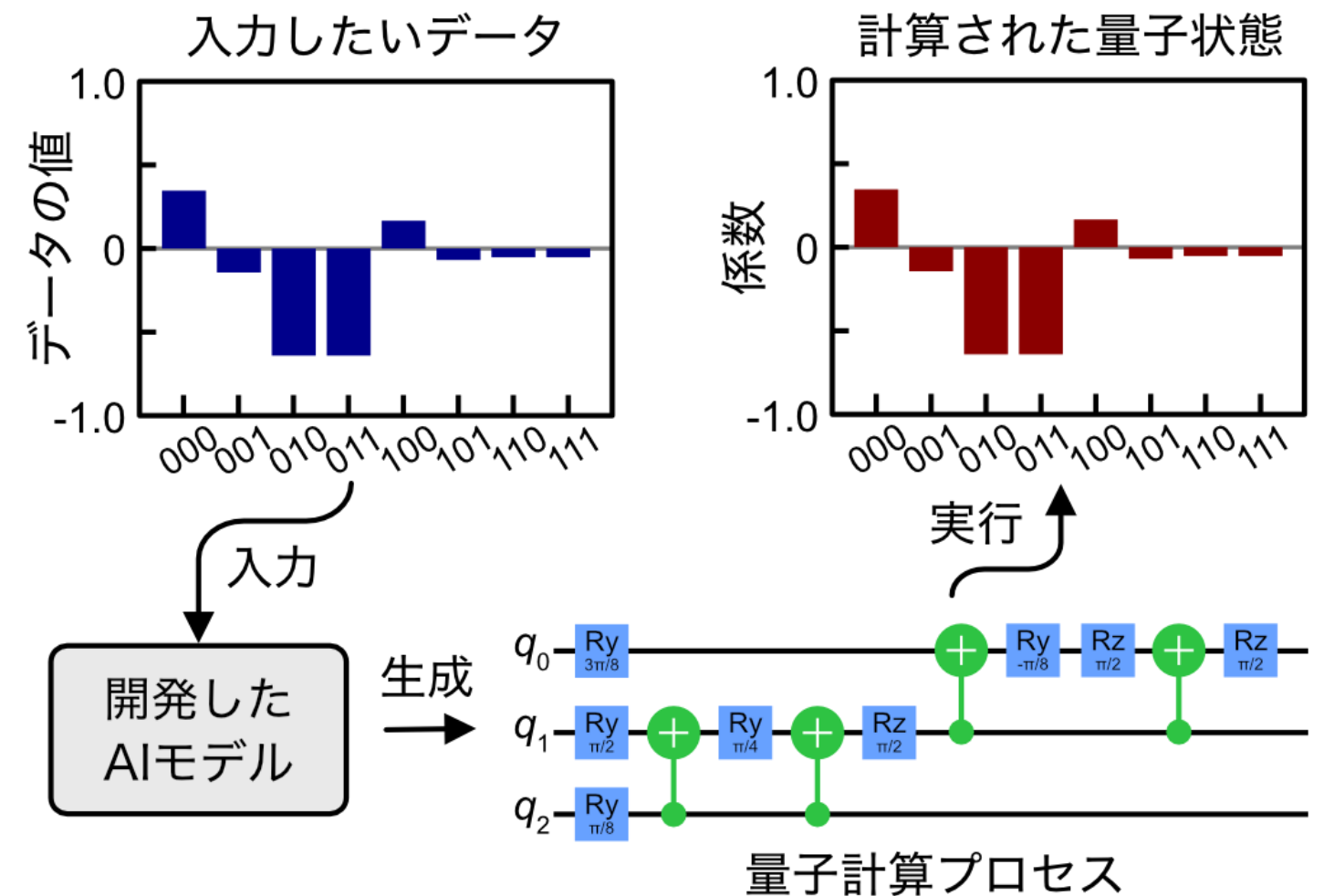
➤ 量子コンピュータにおける量子計算



➤ 自然言語における文章



- ✓ AIが生成した量子操作により所望の量子状態を実現
- ✓ AIが量子アルゴリズムを創発することを実証



所望の量子状態を実現する深層学習AIの開発に成功、量子計算のエラー低減を実現

