

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

2024年のノーベル賞

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

www.nobelprize.org



Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach
Geoffrey E. Hinton

Prize share: 1/2



Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach
David Baker

Prize share: 1/2

ノーベル化学賞

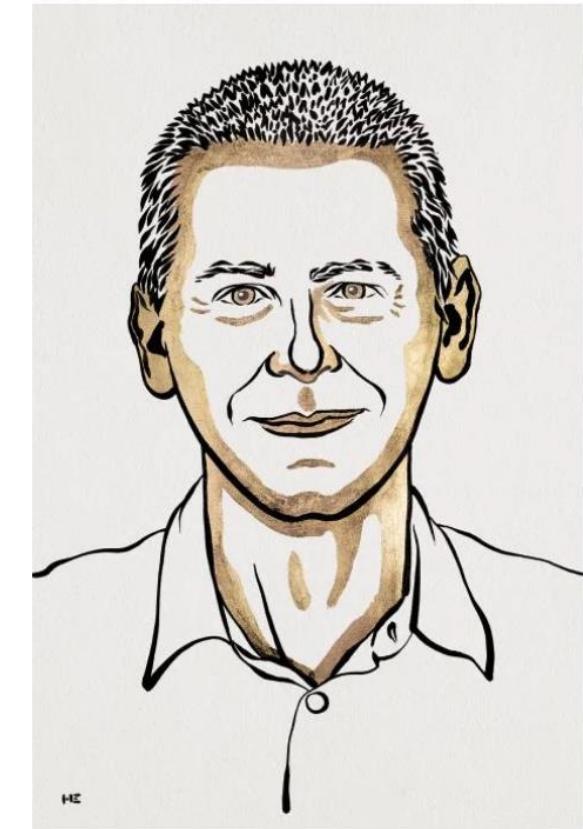
「深層学習によるタンパク質の設計と構造予測」



Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach
Demis Hassabis

Prize share: 1/4

www.nobelprize.org



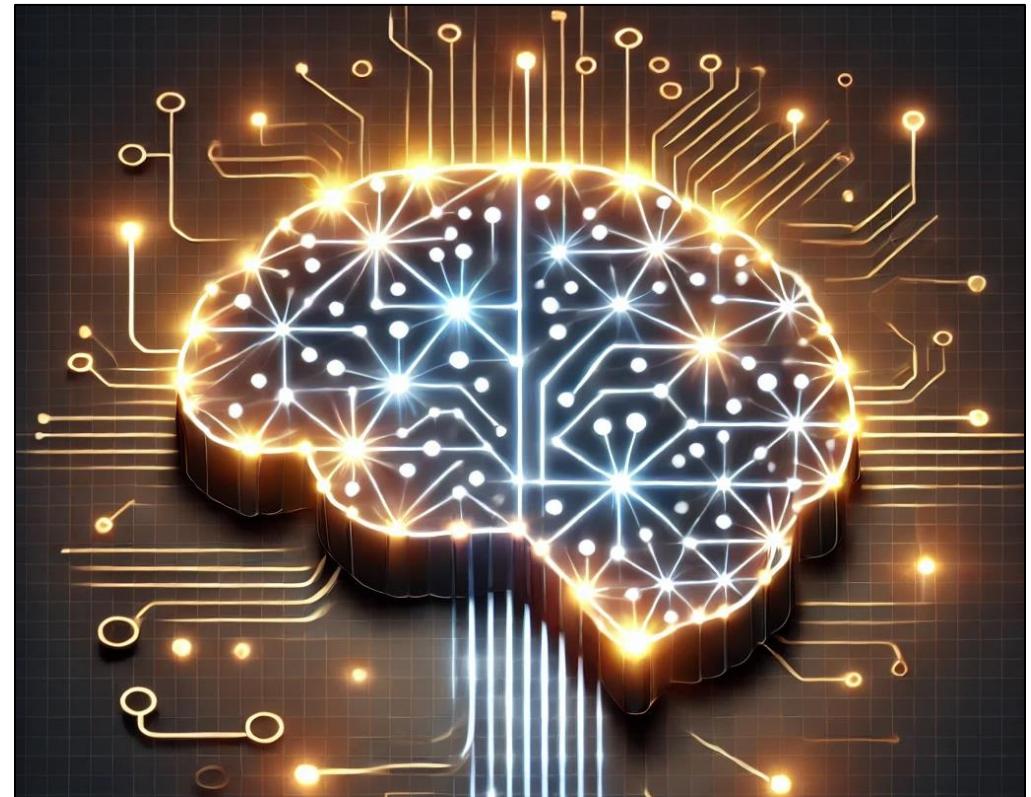
Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach
John M. Jumper

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

深層学習の応用技術

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。

生成AIとはなんですか？

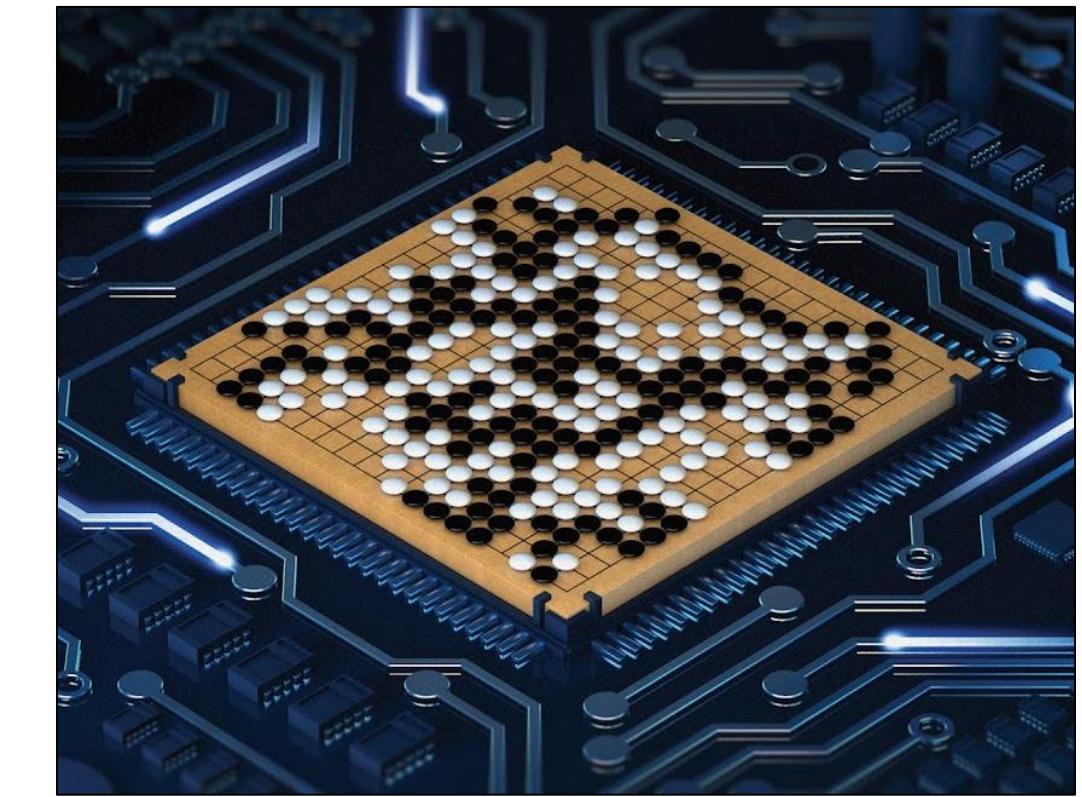


生成AIは、文章作成やデザイン、音声合成、コンテンツ制作の効率化に役立ちます。また、アイデアの発想支援や自動化など、多くの分野で活用されています。

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

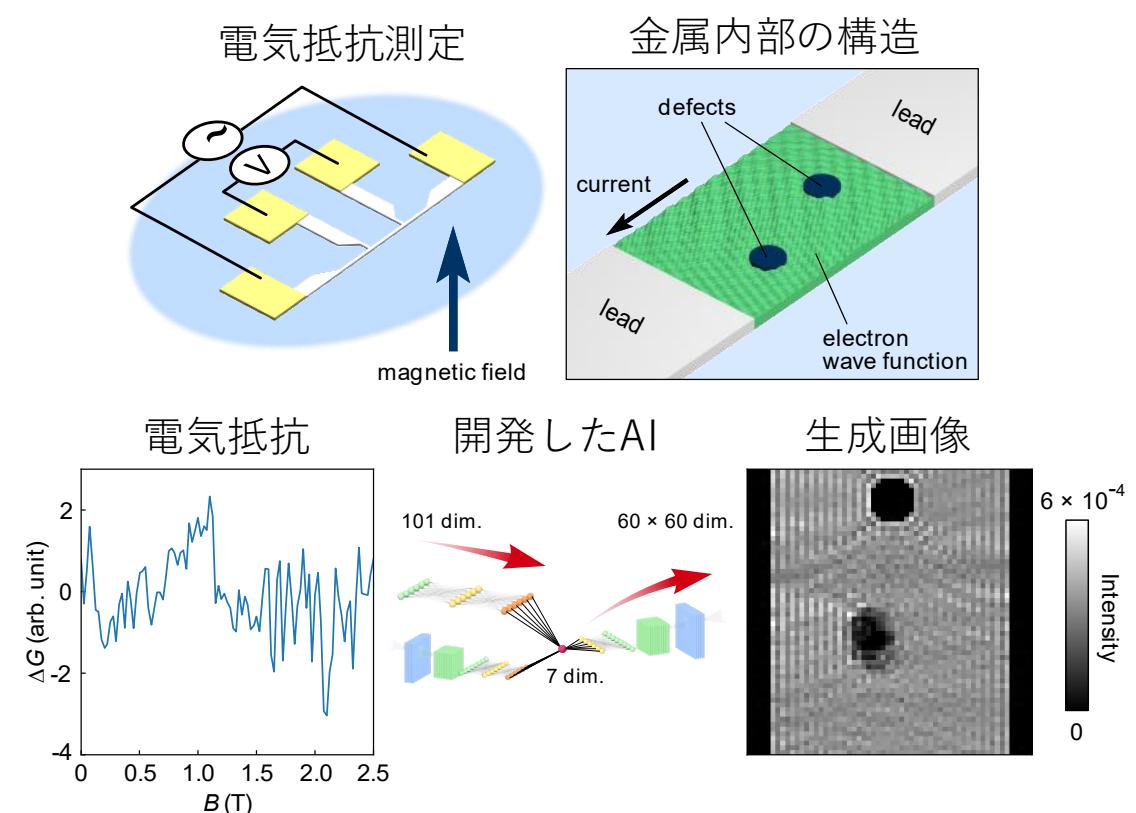
深層学習の発展により革新的な応用技術が次々と開発されノーベル賞に繋がった

私の研究 – 最先端AIを量子物理学へ応用 –

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

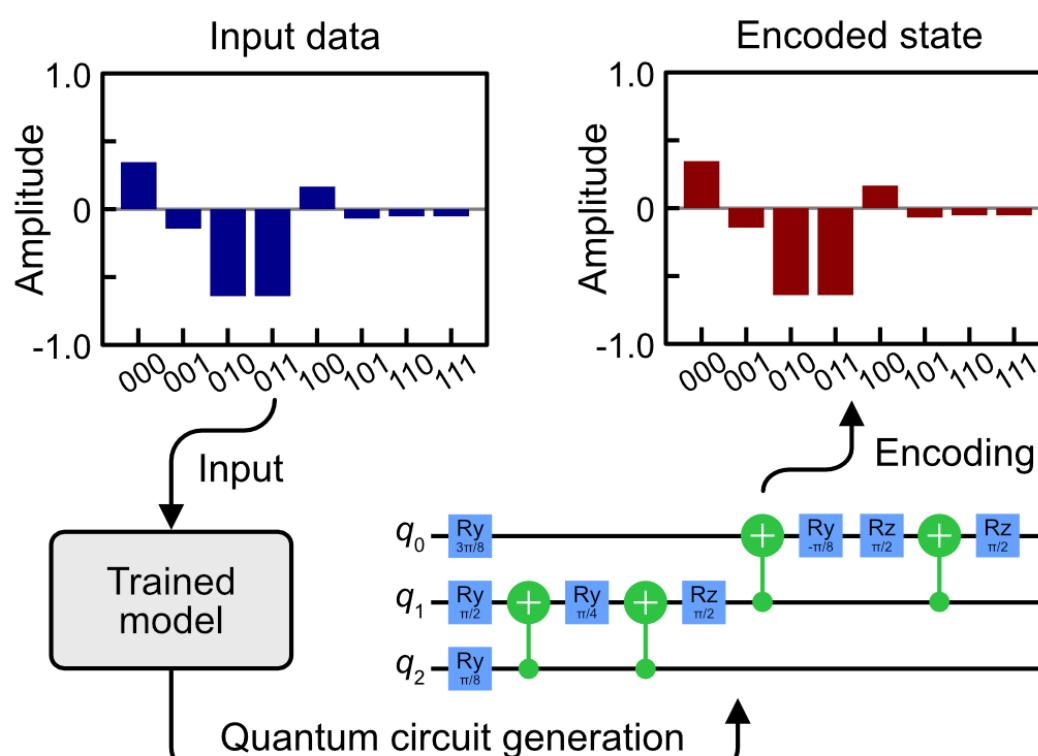


S. Daimon, K. Tsunekawa, S. Kawakami, T. Kikkawa *et al.*, *Nature Communications* **63**, 032003 (2022).

文章生成AI -

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

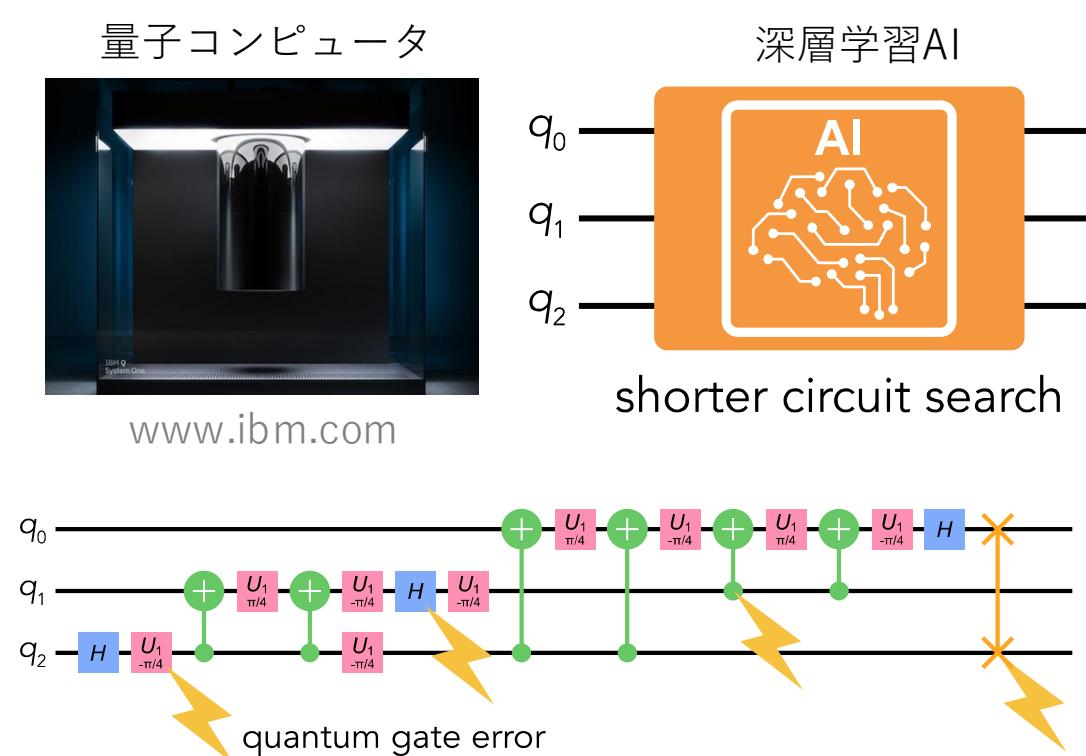


S. Daimon and Y. Matsushita, *Physical Review Applied* **22**, L041001 (2024).

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見つける



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

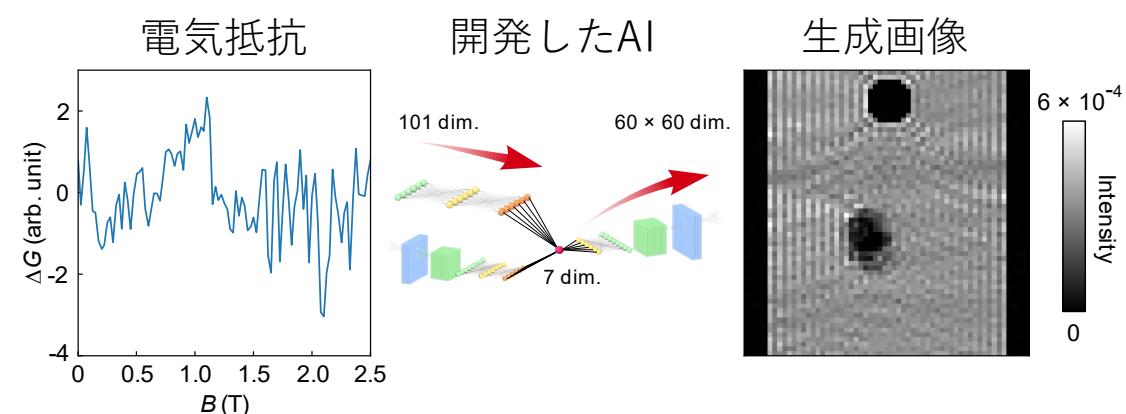
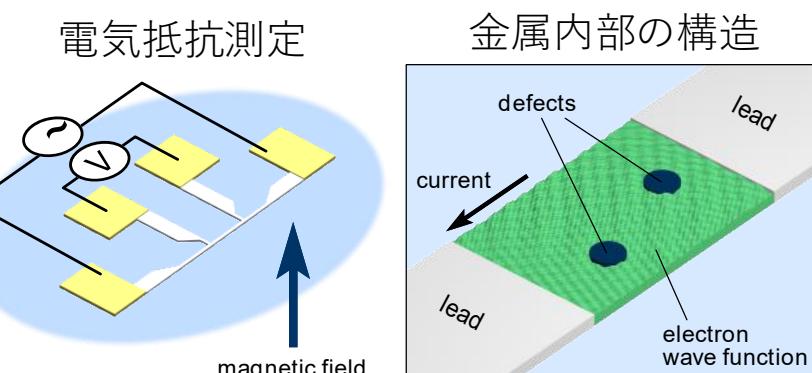
深層学習の高い解析能力を利用すれば、量子物理学の複雑な問題を解決できる

1つ目の話題：画像生成AIを応用したAIナノ構造顕微鏡

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つ目の話題：画像生成AIを応用したAIナノ構造顕微鏡

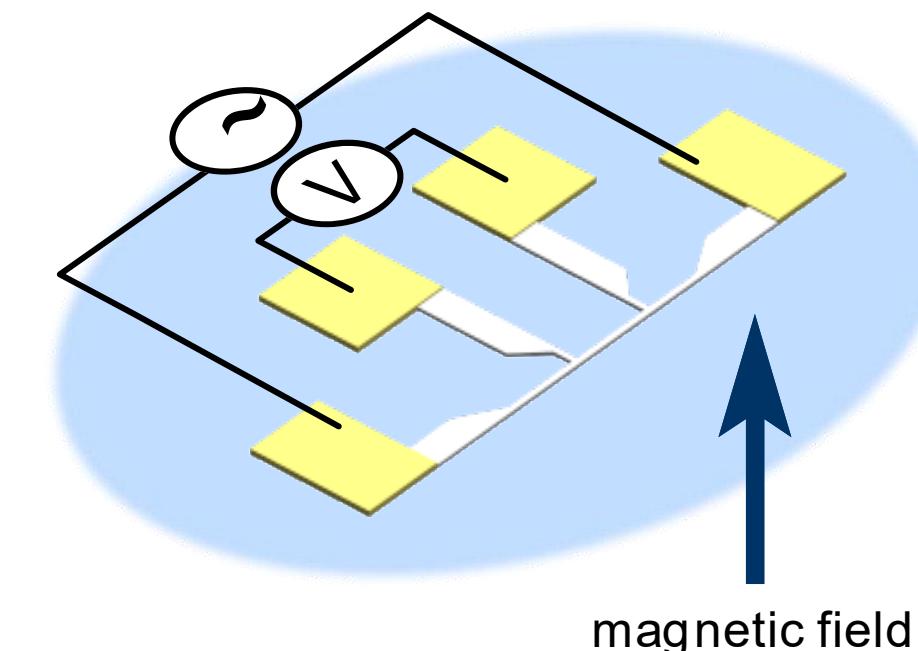
1. 量子伝導現象

2. 深層学習による量子指紋の解読

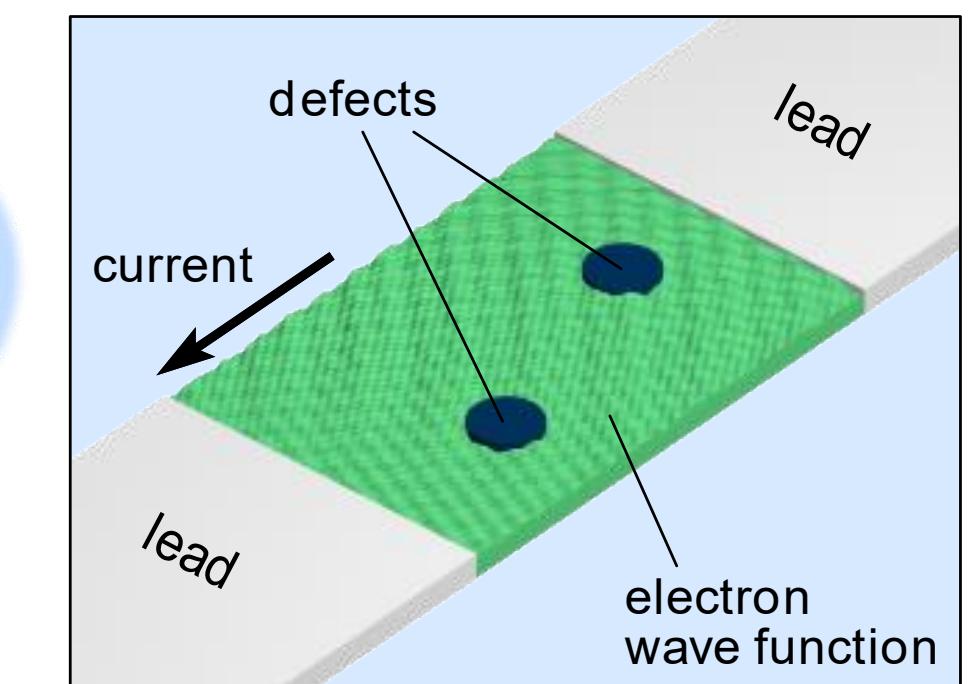
3. 量子干渉情報の抽出

4. 極低温実験

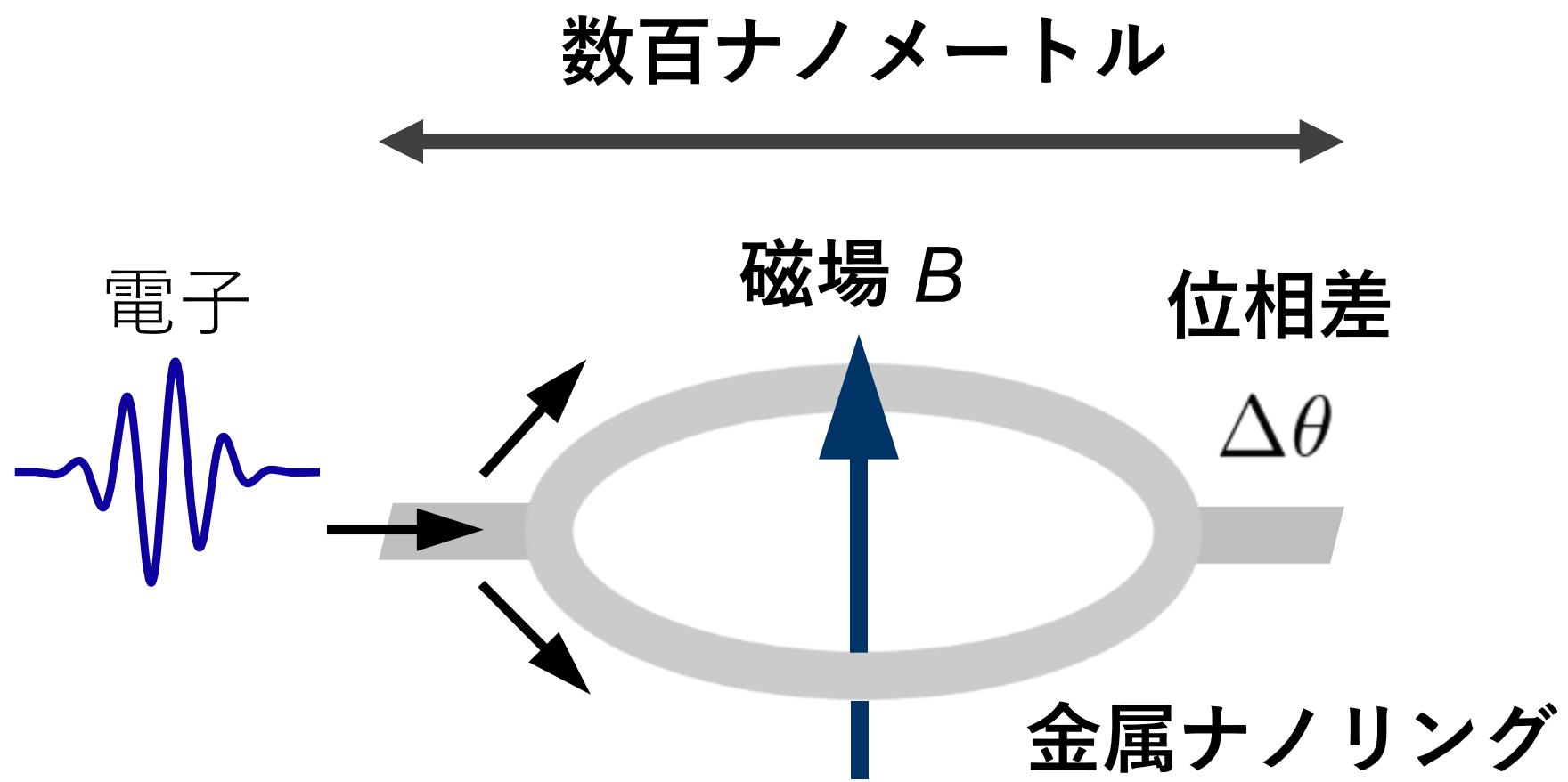
磁気伝導度測定



金属ナノ細線



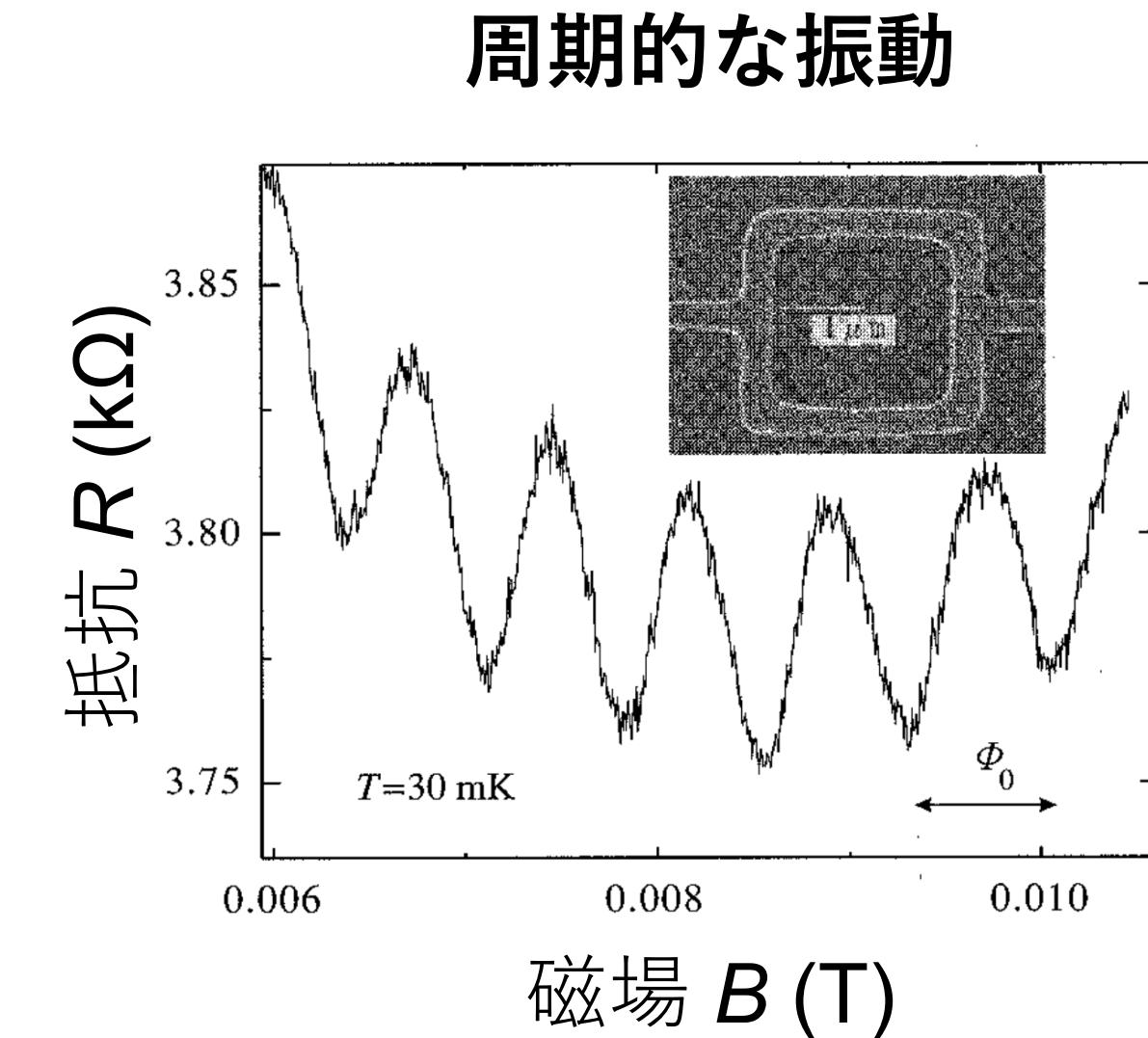
金属ナノリングの量子伝導 (Aharonov-Bohm効果)



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

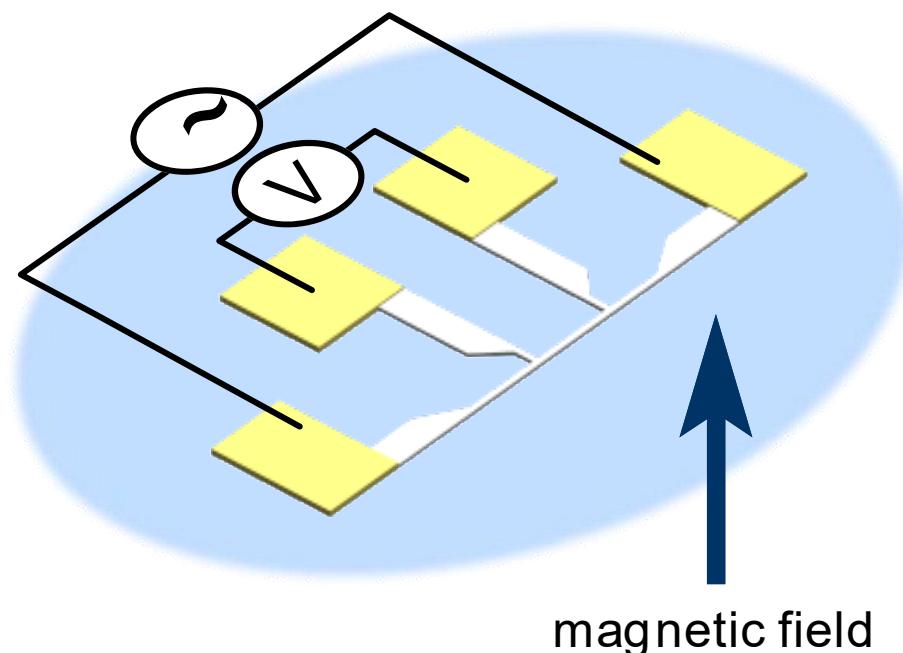


勝本信吾 著「メソスコピック系」 朝倉書店 (2003).

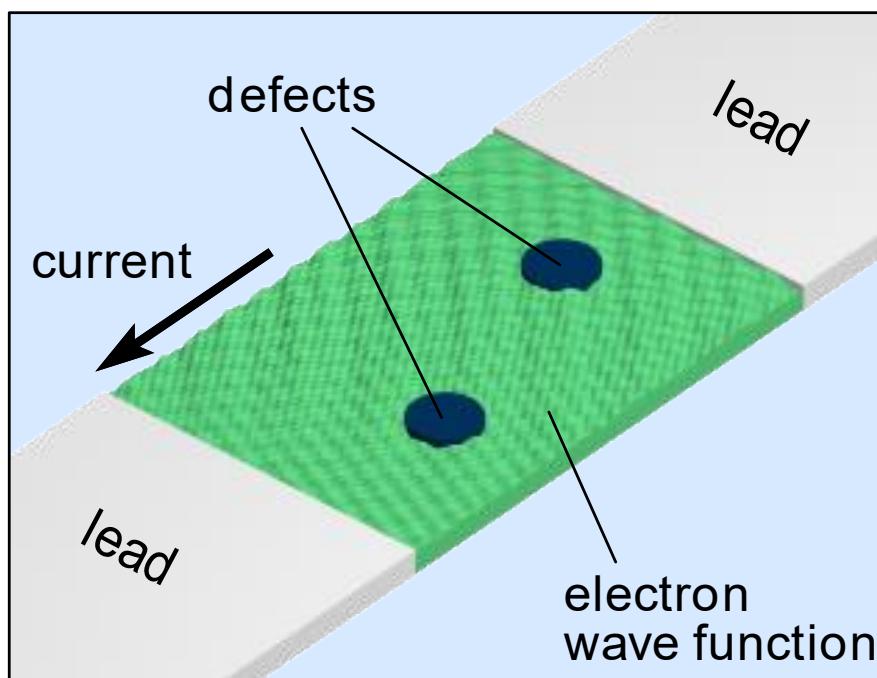
フーリエ解析により
サイズや形状の情報を抽出可能

金属ナノ細線の量子指紋

磁気伝導度測定



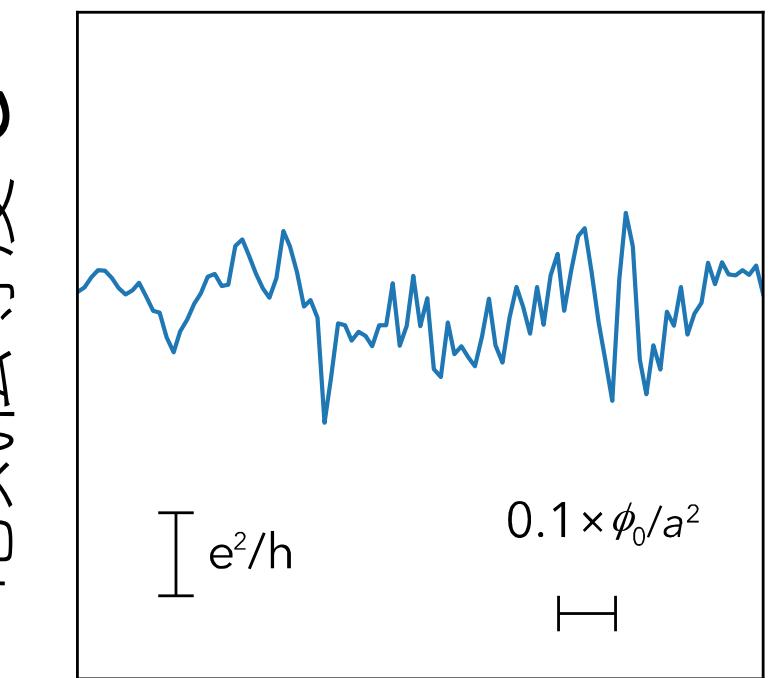
金属ナノ細線



測定

~~逆問題~~

量子指紋
(試料固有の振動)



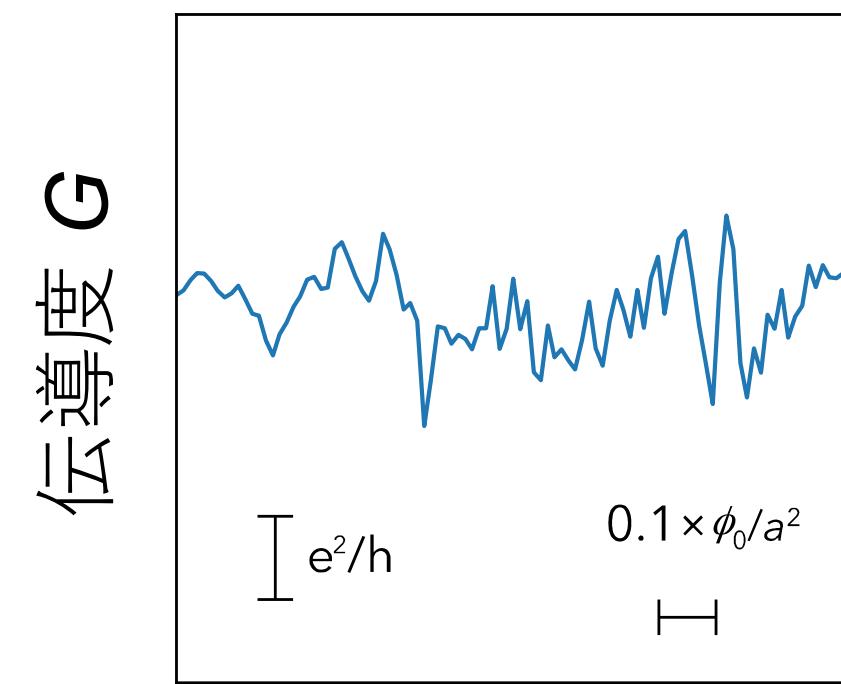
電子が欠陥で散乱
干渉が伝導度を決める

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

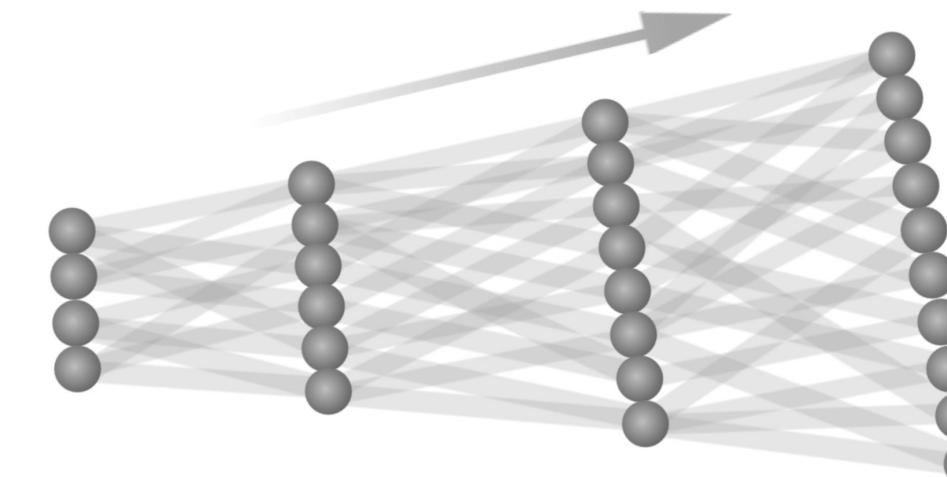
研究の目的：磁気伝導度からのミクロ情報の復元

量子指紋



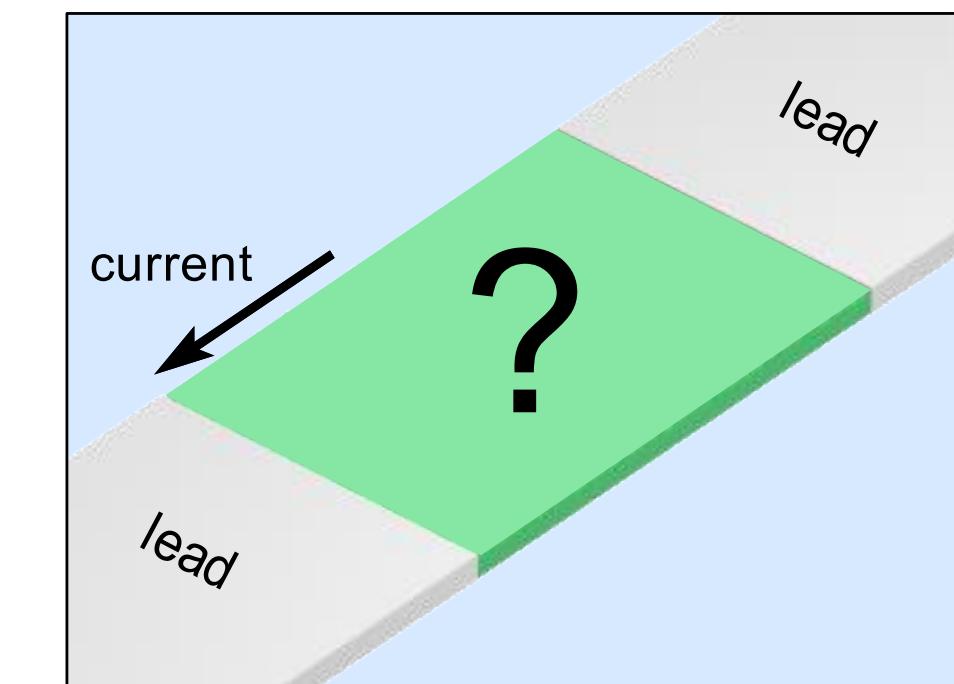
磁場 B

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

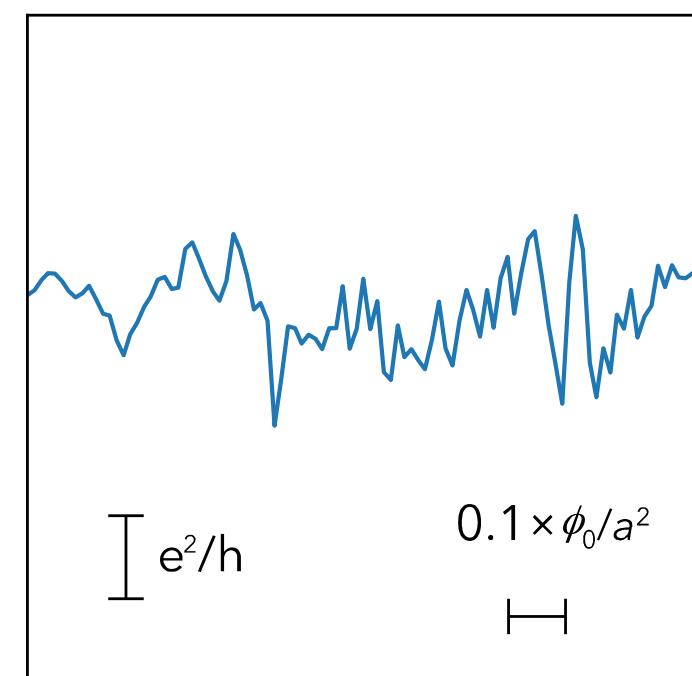
これまでランダムだと思われてきた量子指紋を解読し、ミクロ情報を抽出する

全結合深層ネットワークによる生成

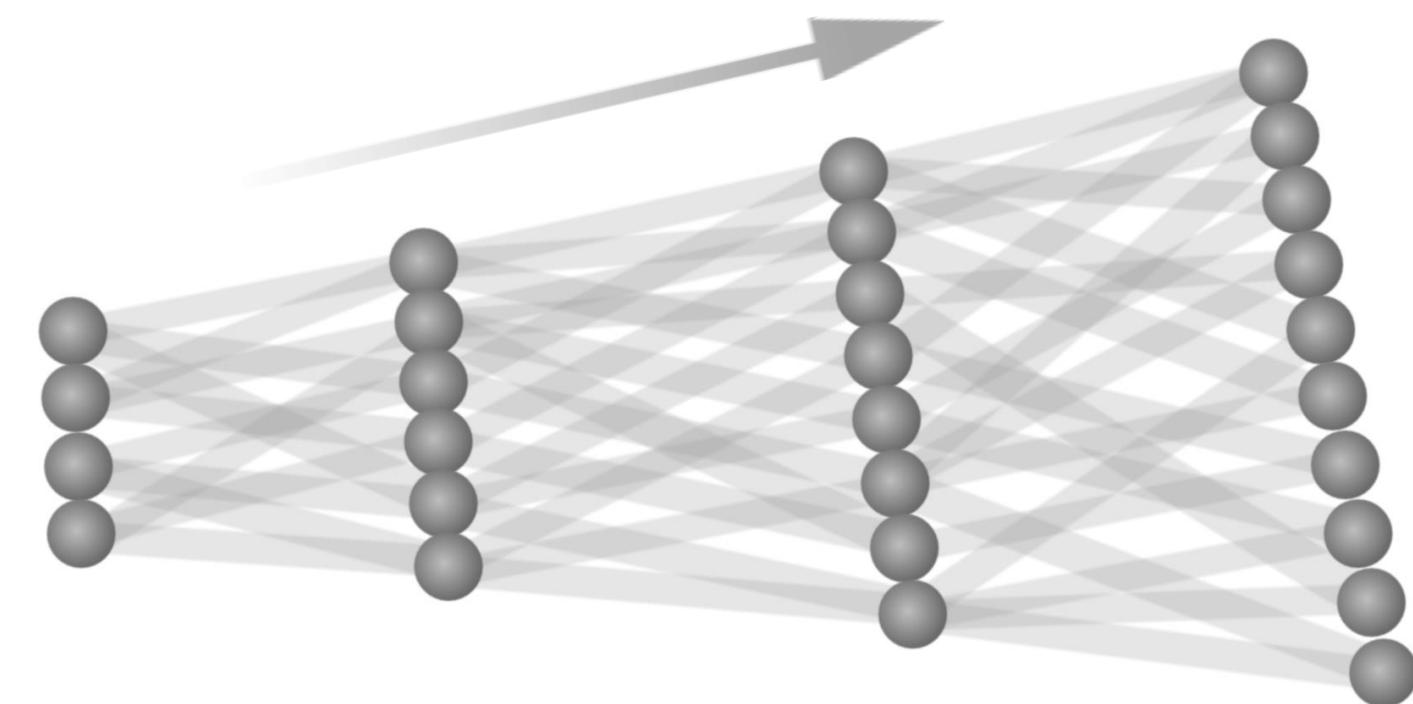
全結合ニューラルネットワーク

量子指紋

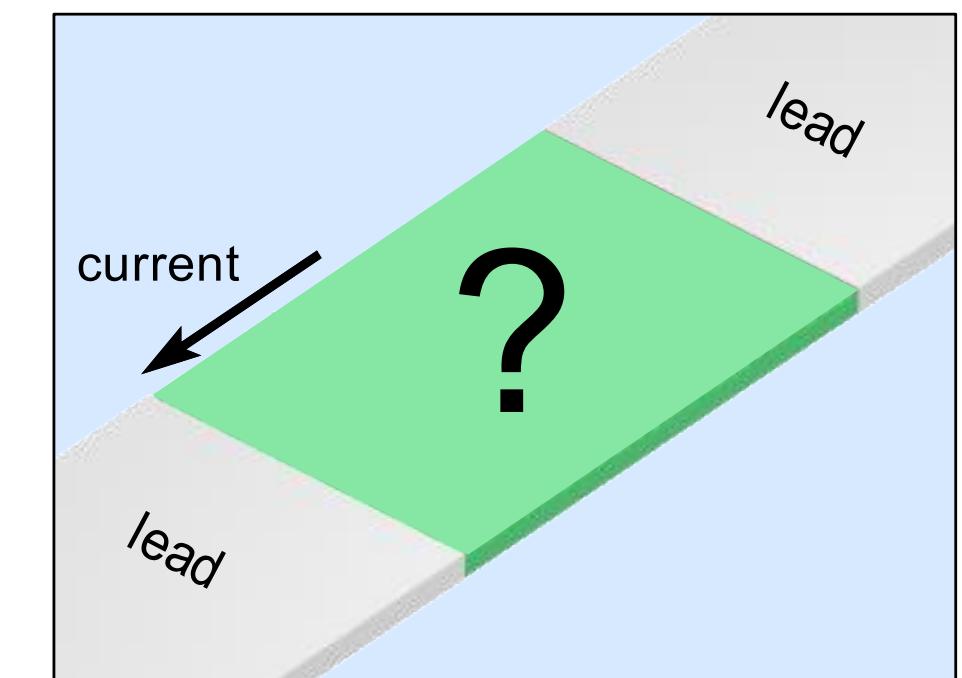
伝導度 G



磁場 B



ミクロ構造

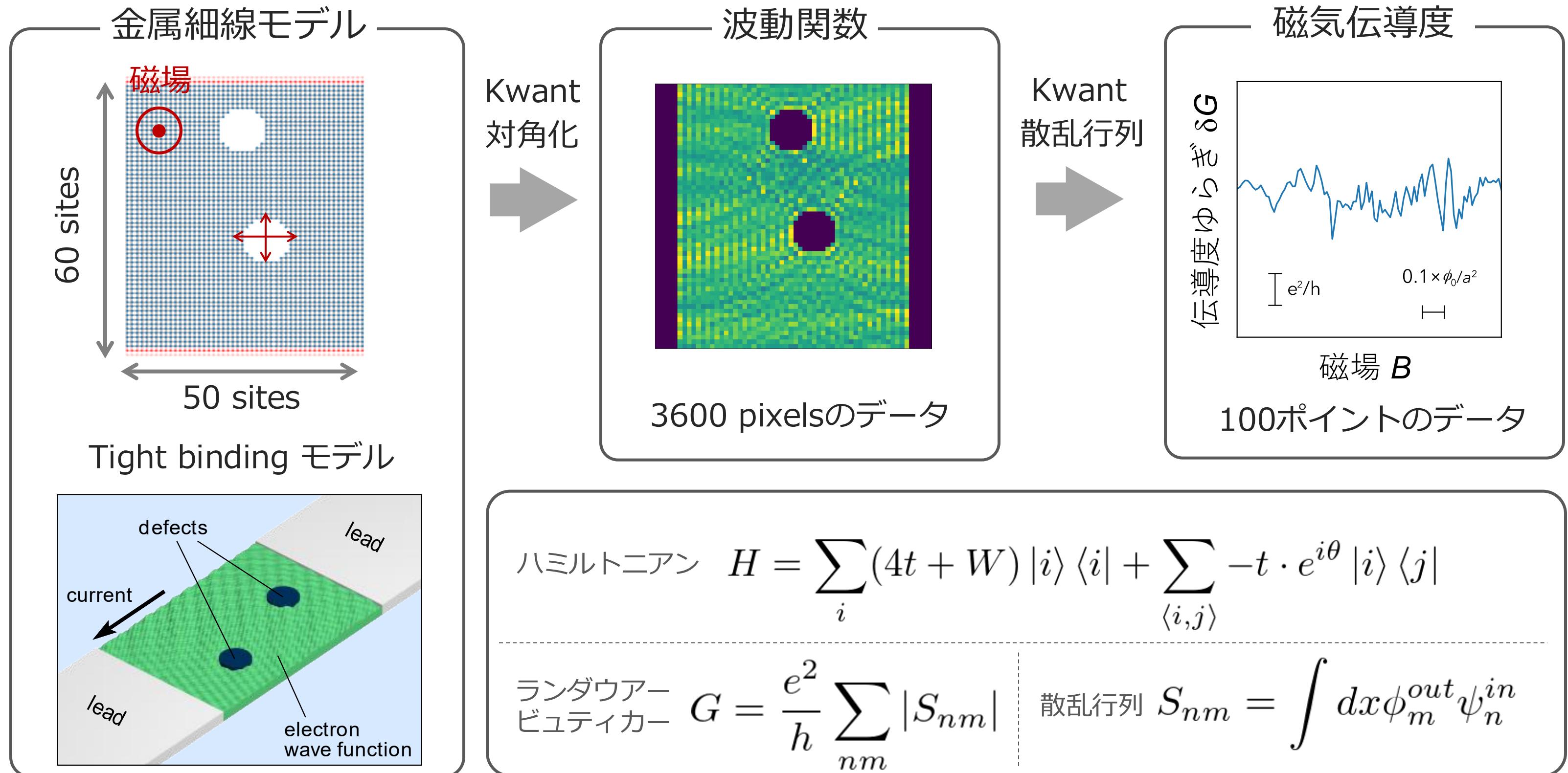


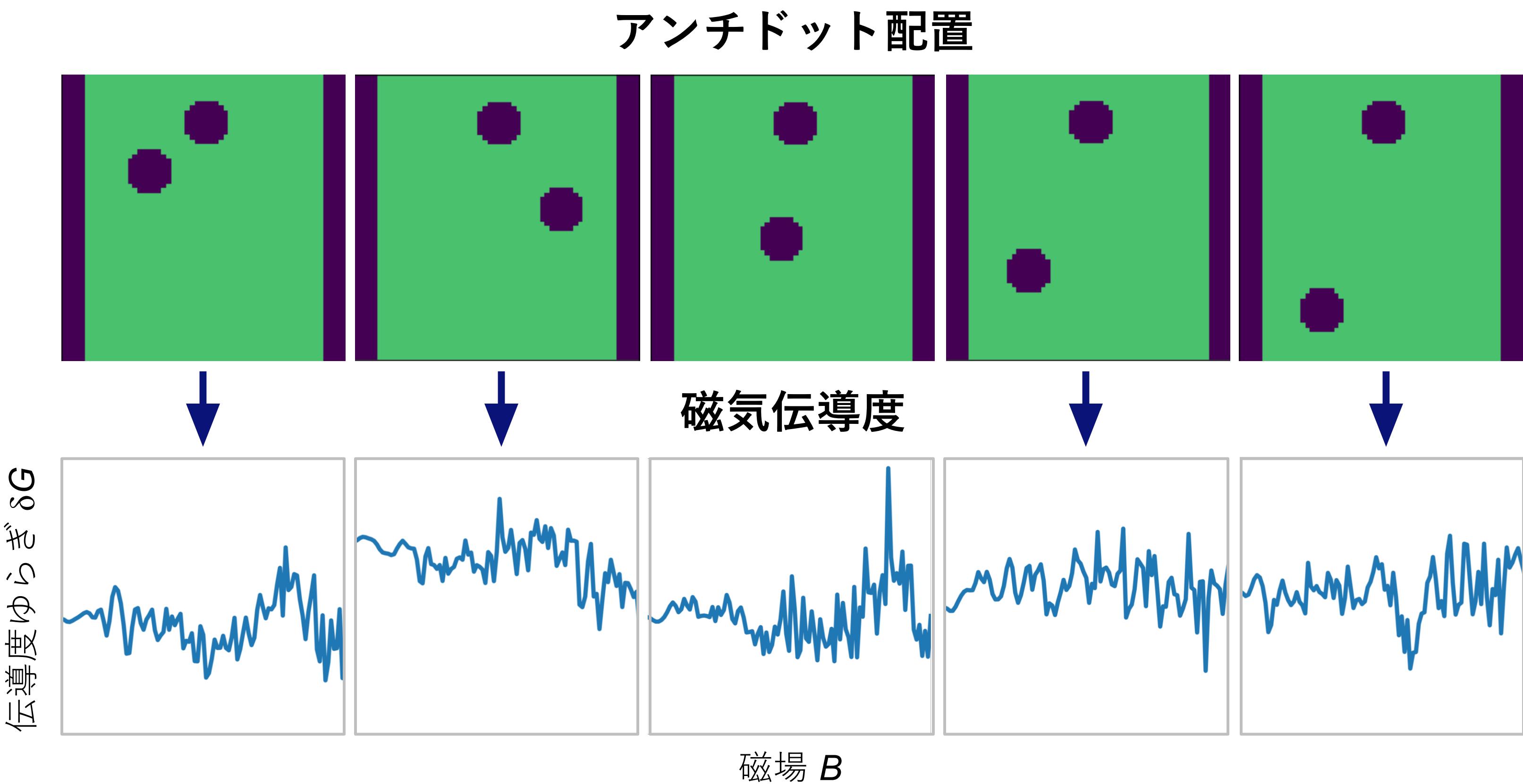
試料形状, 波動関数

単純な全結合ネットワークによるミクロ構造の復元

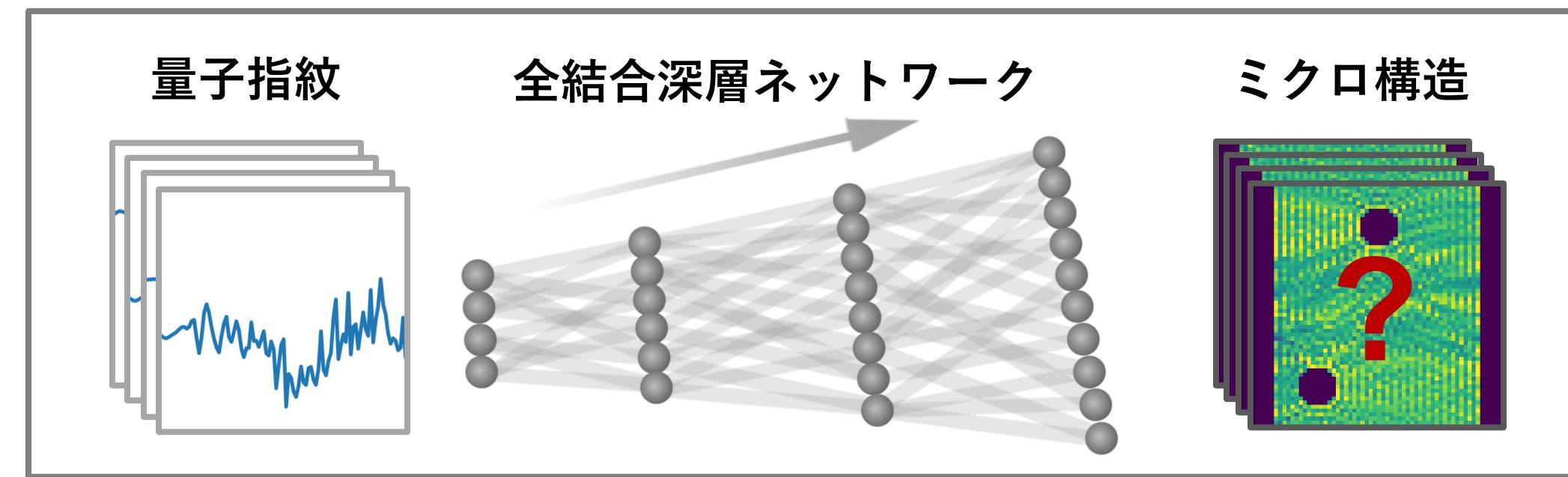
学習データの生成

10

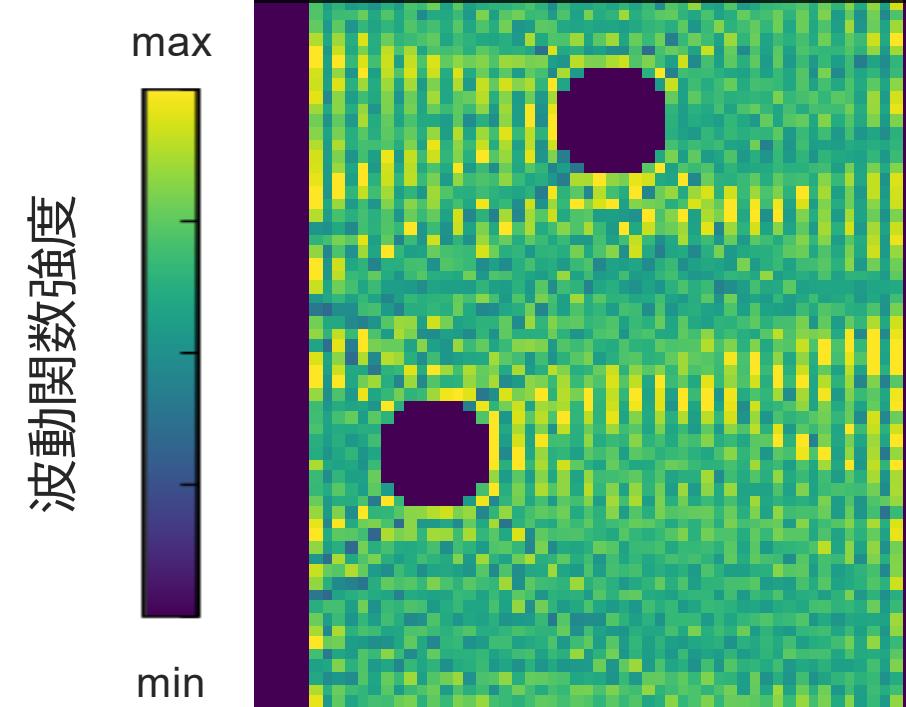




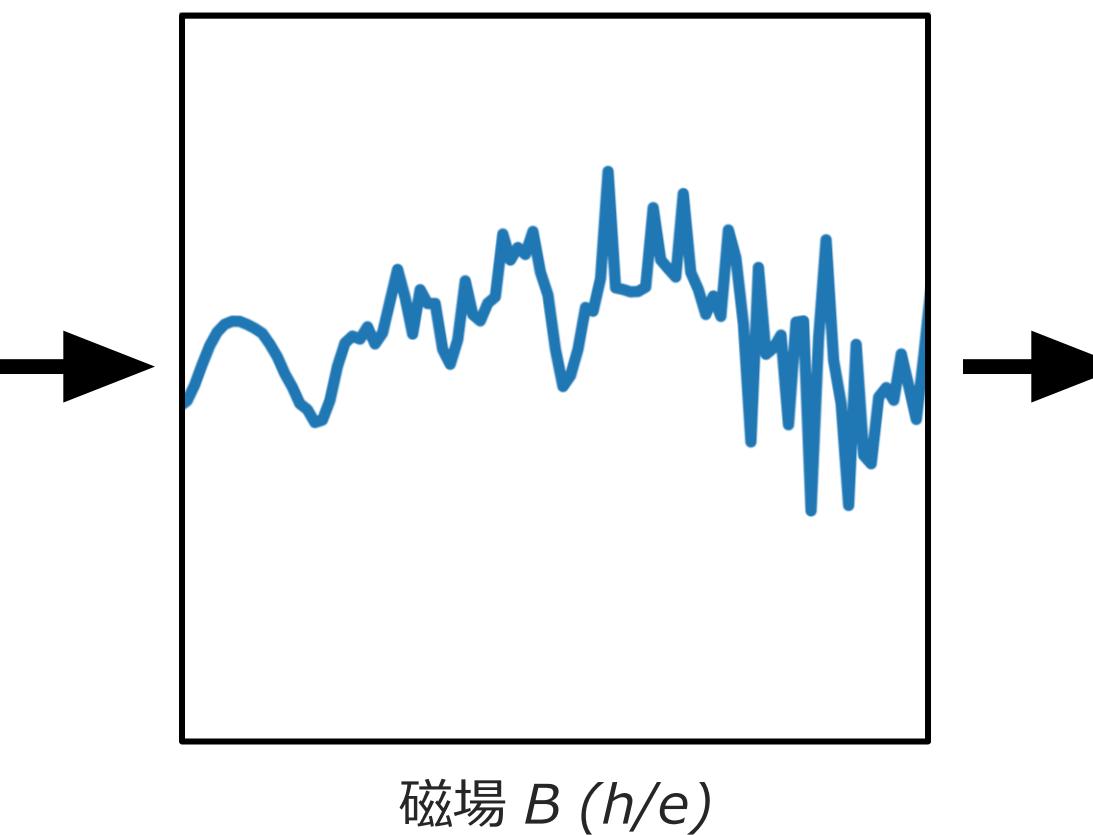
全結合深層ネットワークによる生成



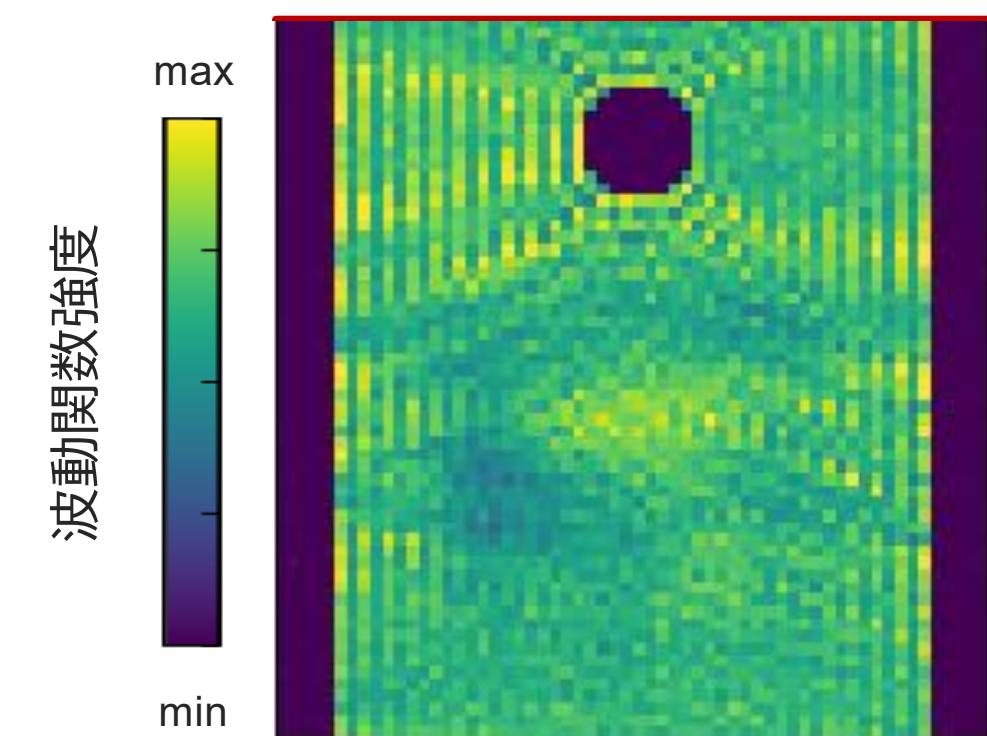
試料構造



磁気伝導度

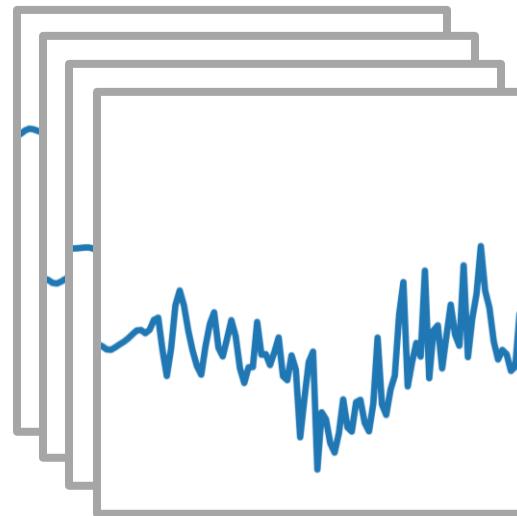


生成画像 \times

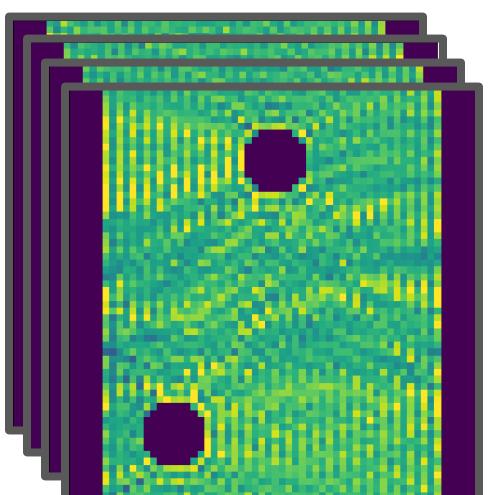


量子を解読する新規ネットワークの開発

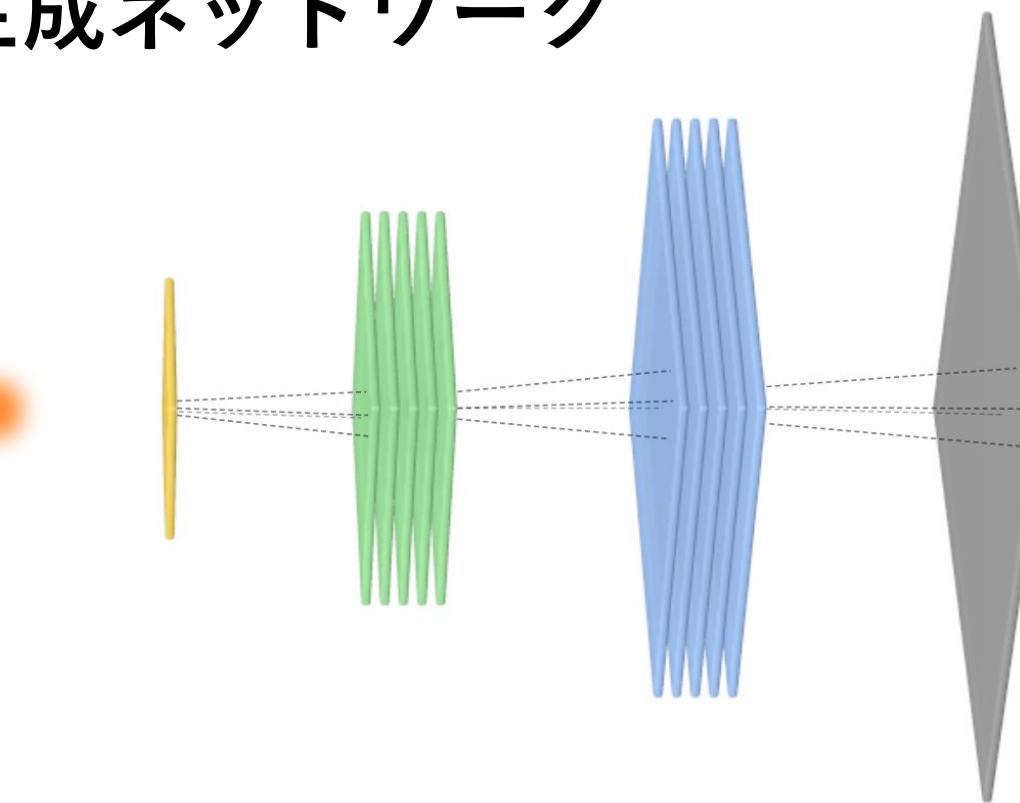
磁気伝導度



波動関数像



深層生成ネットワーク

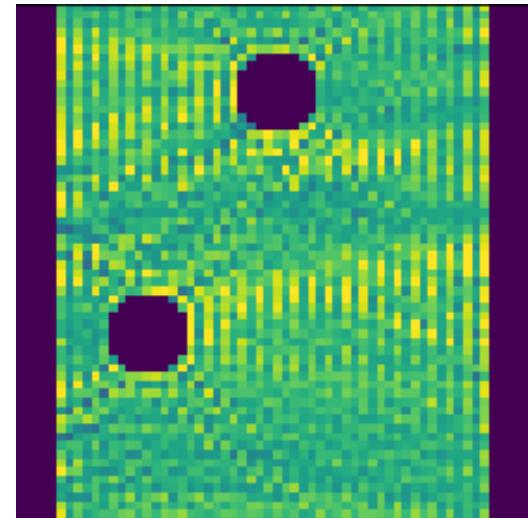


特徴抽出に特化したネットワーク

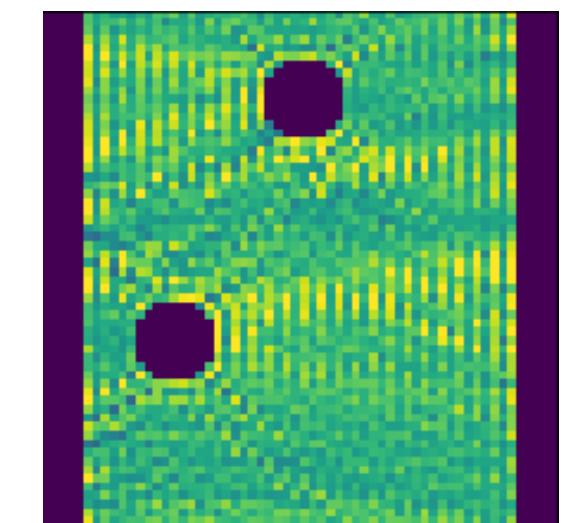
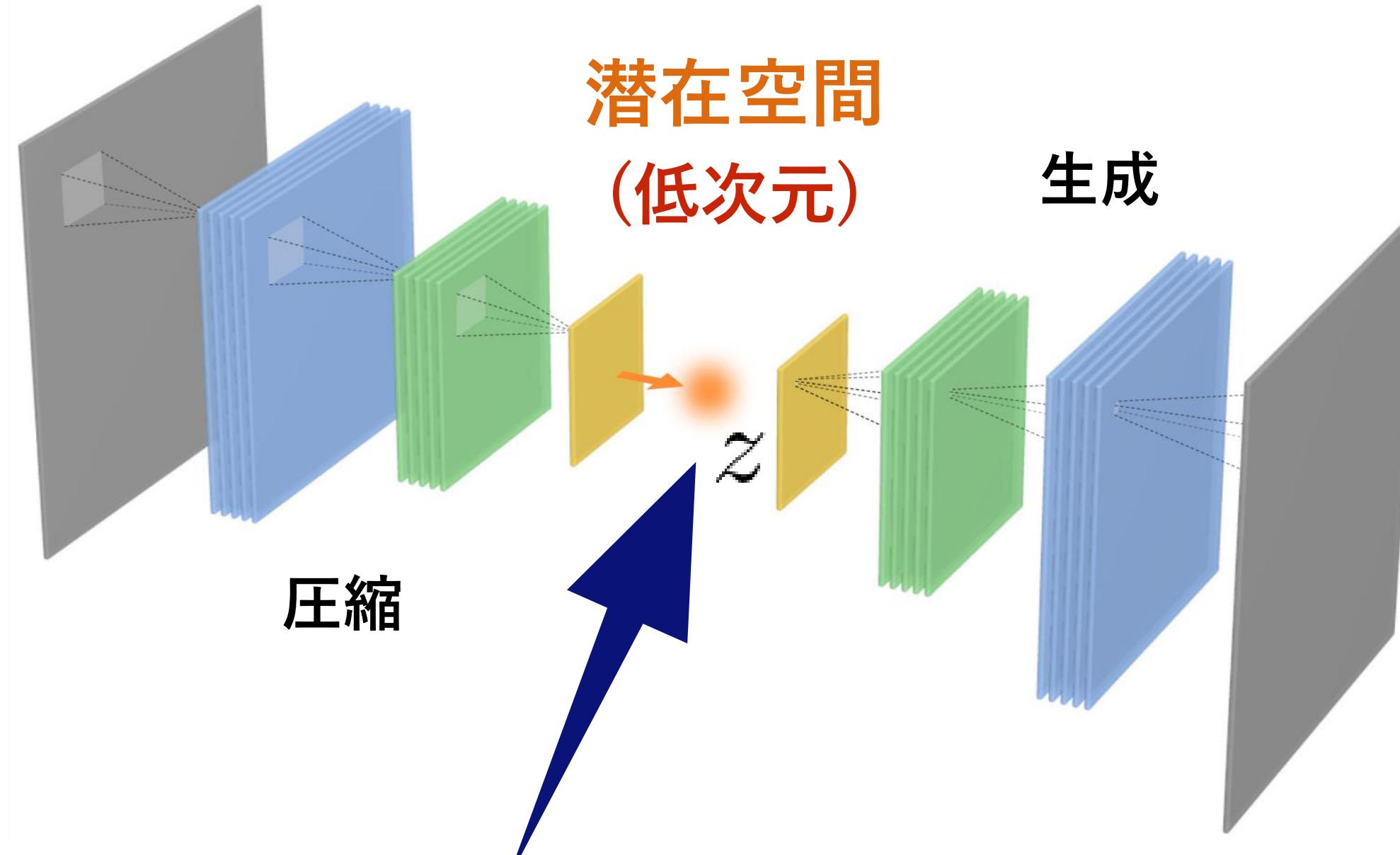
Variational Autoencoder (VAE)

Variational Autoencoder (VAE)

入力：波動関数像



(高次元)

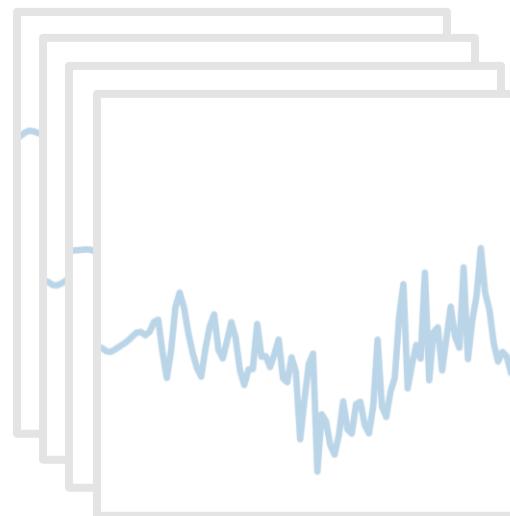


(高次元)

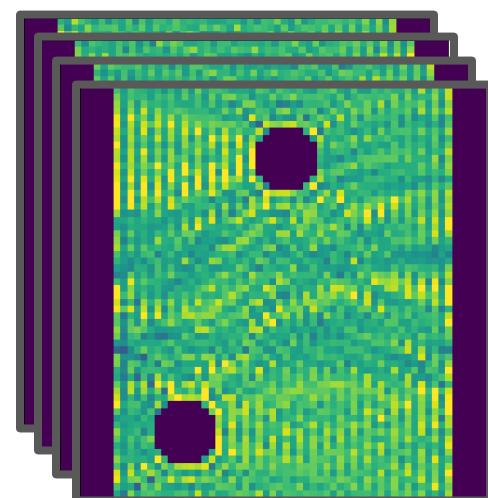
入出力が一致 = 重要な情報が抽出

開発ネットワーク

磁気伝導度



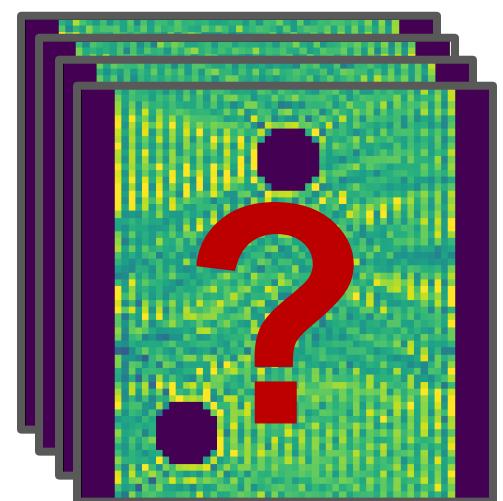
波動関数像
(3600次元)



波動関数の情報を抽出

潜在空間
(7次元)

生成画像
(3600次元)

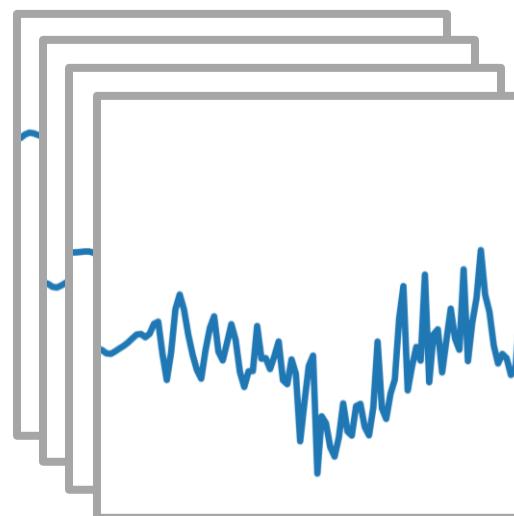


reparameterization trick
batch normalization
fully connected
convolution

VAEの学習

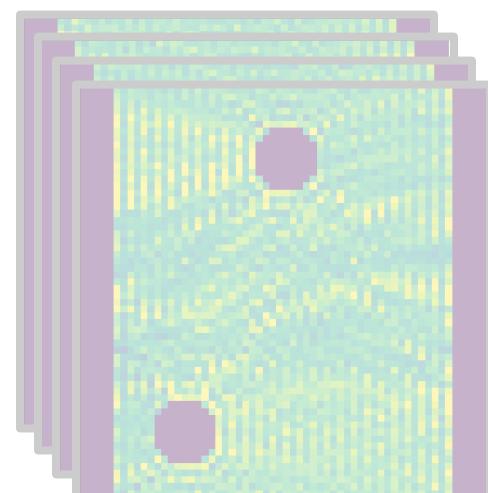
開発ネットワーク

磁気伝導度

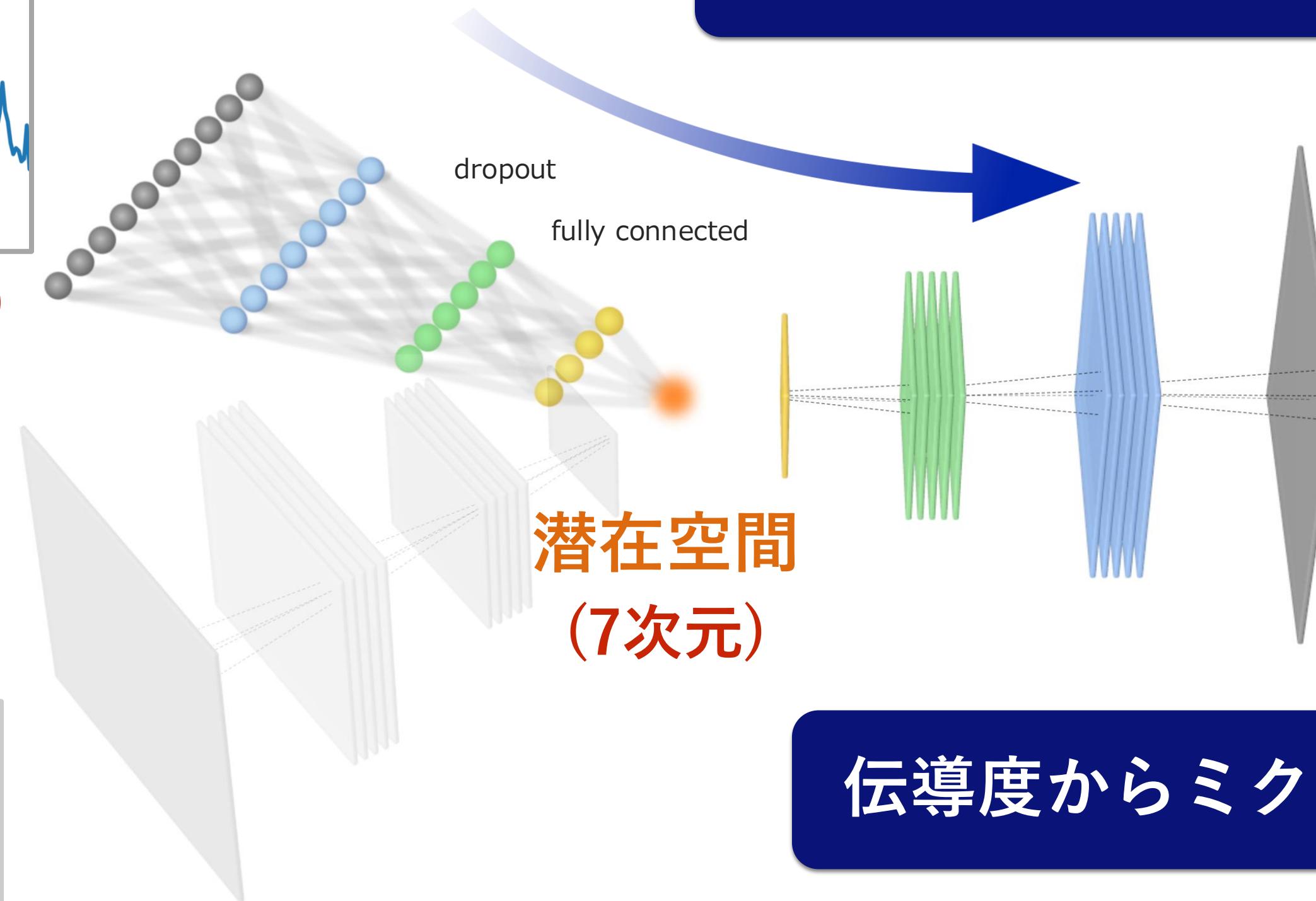


(100次元)

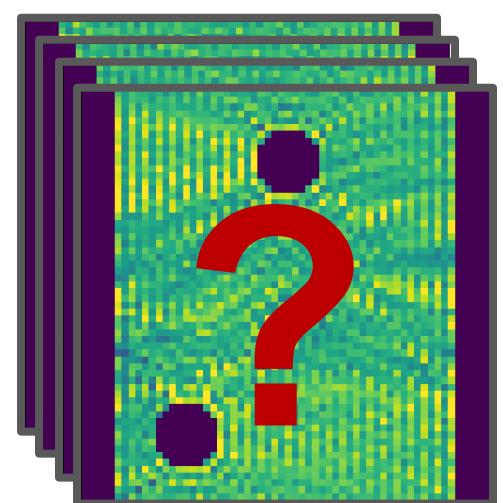
波動関数像
(3600次元)



生成ネットワークの学習



生成画像
(3600次元)

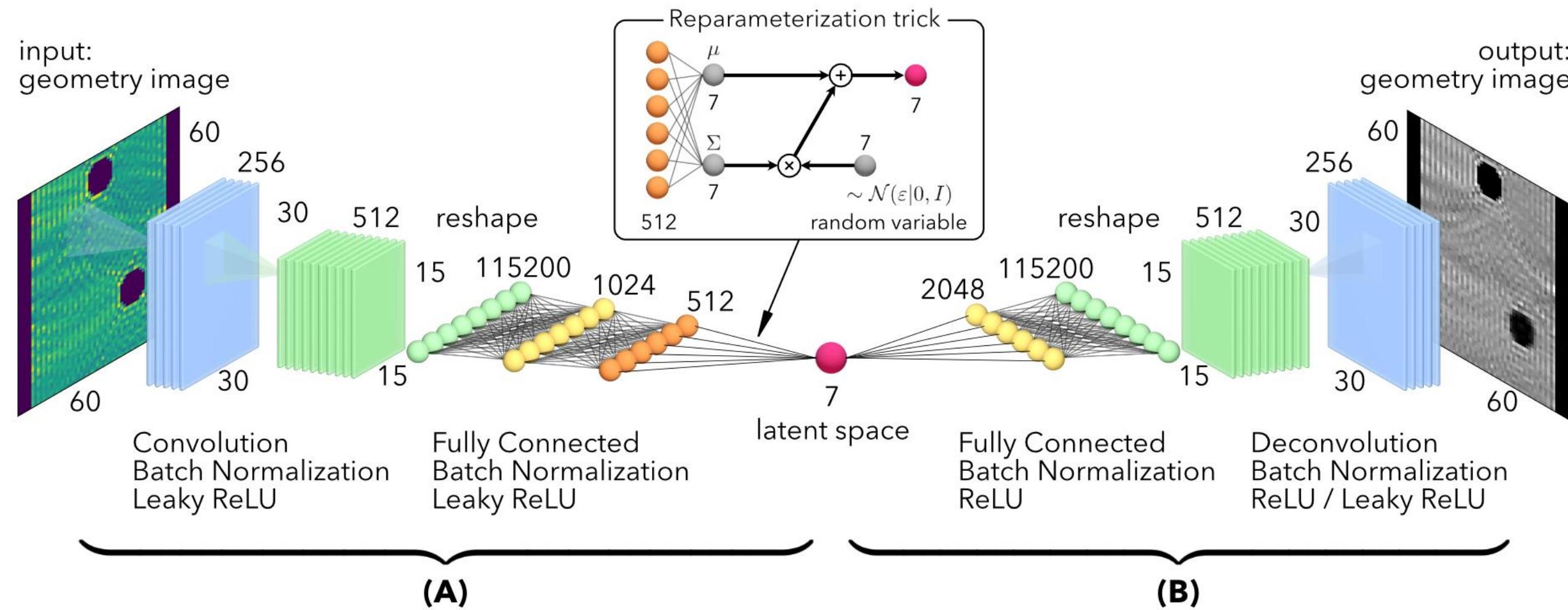


伝導度からミクロ情報を生成

開発ネットワーク

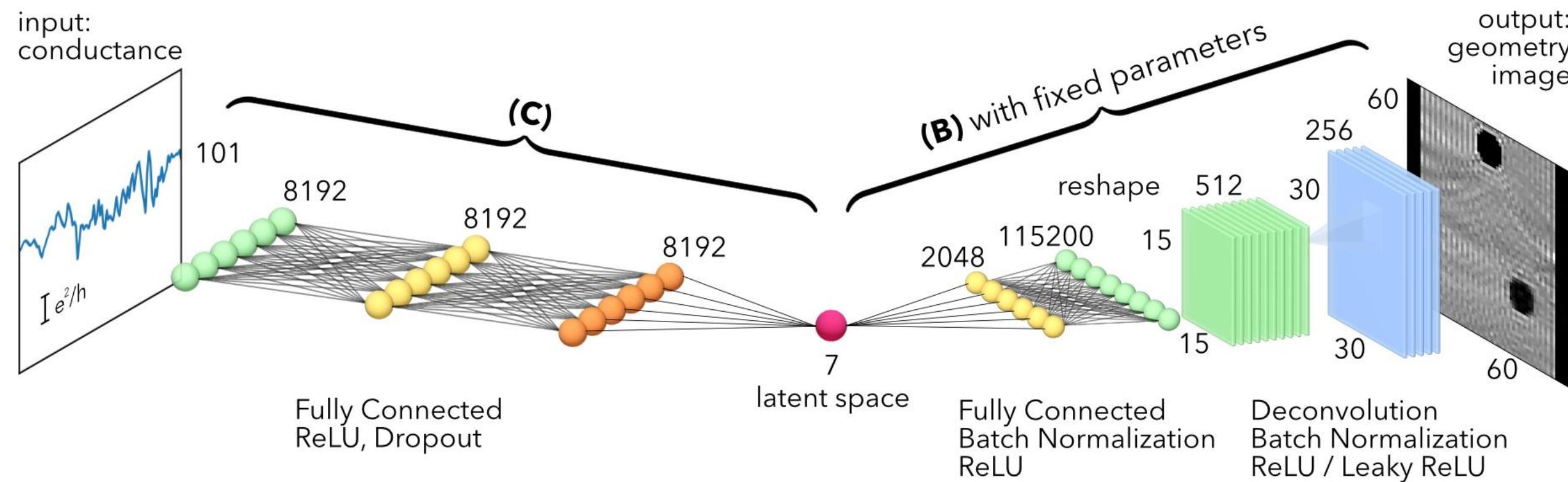
VAE

特徴
抽出

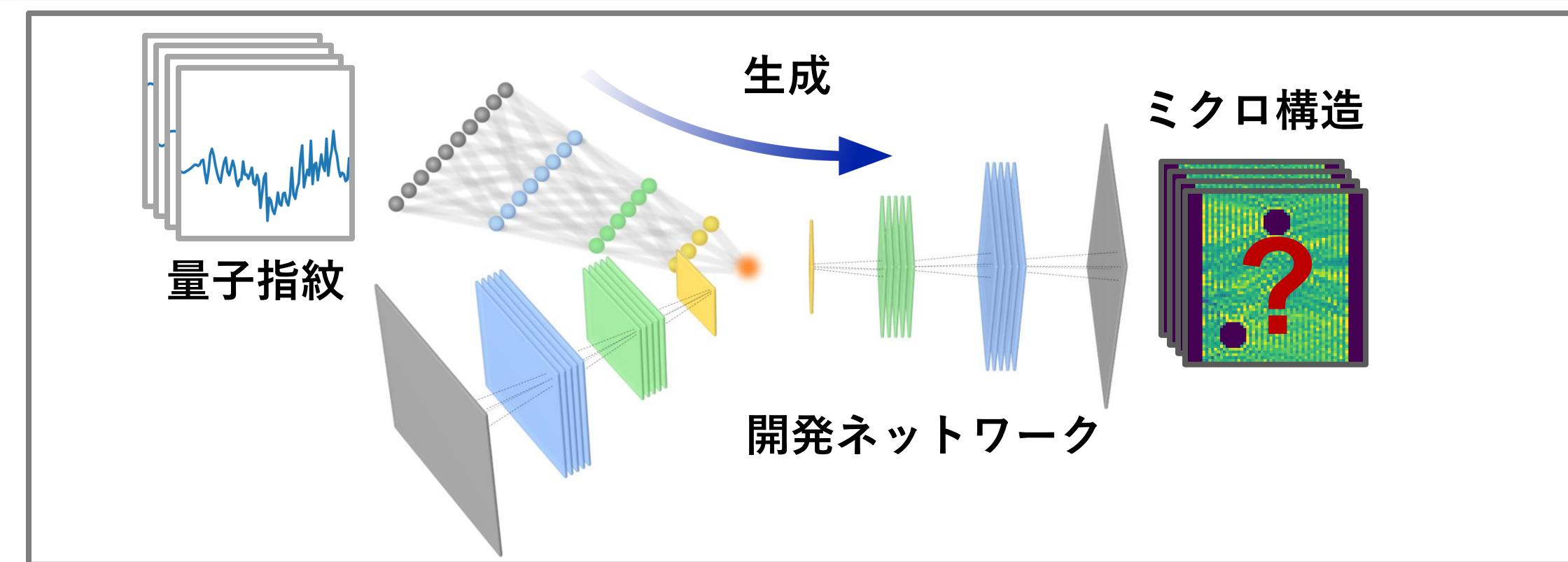


量子
指紋
解読

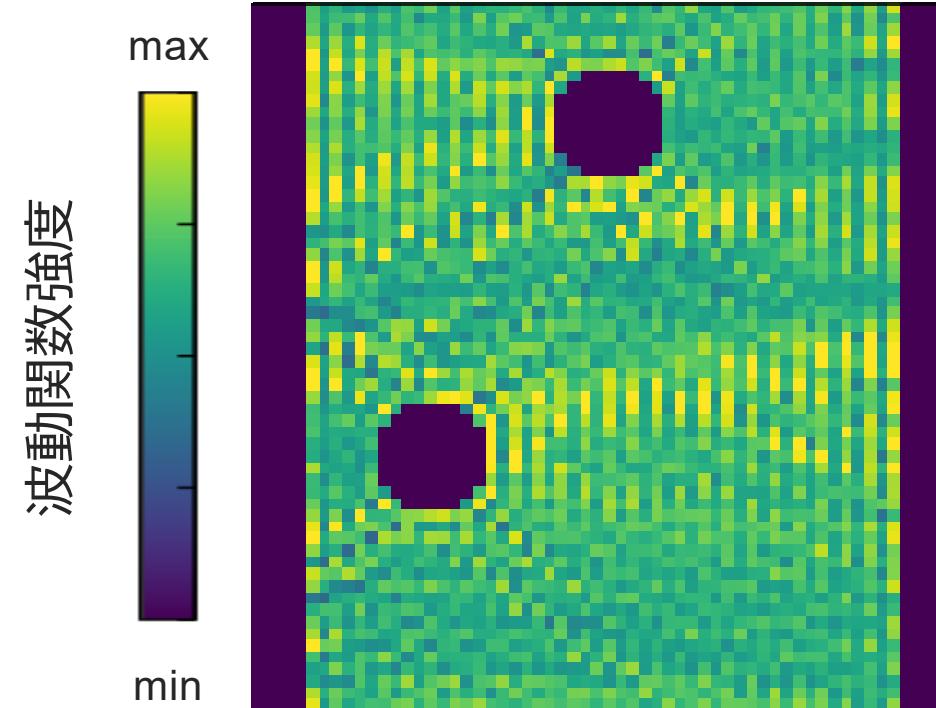
画像
生成



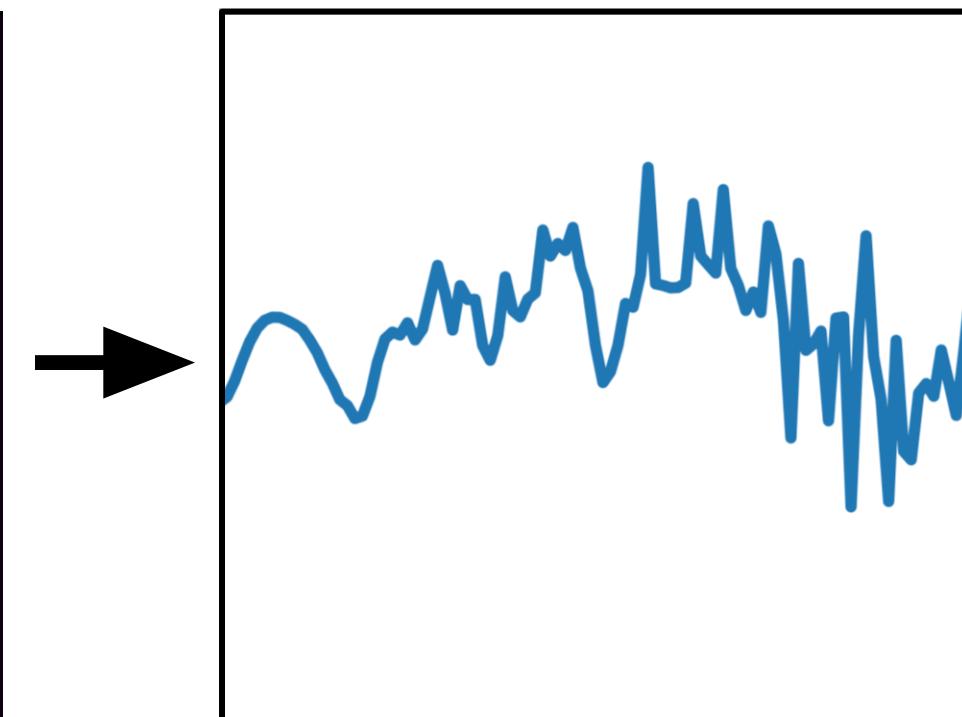
開発ネットワークによる生成



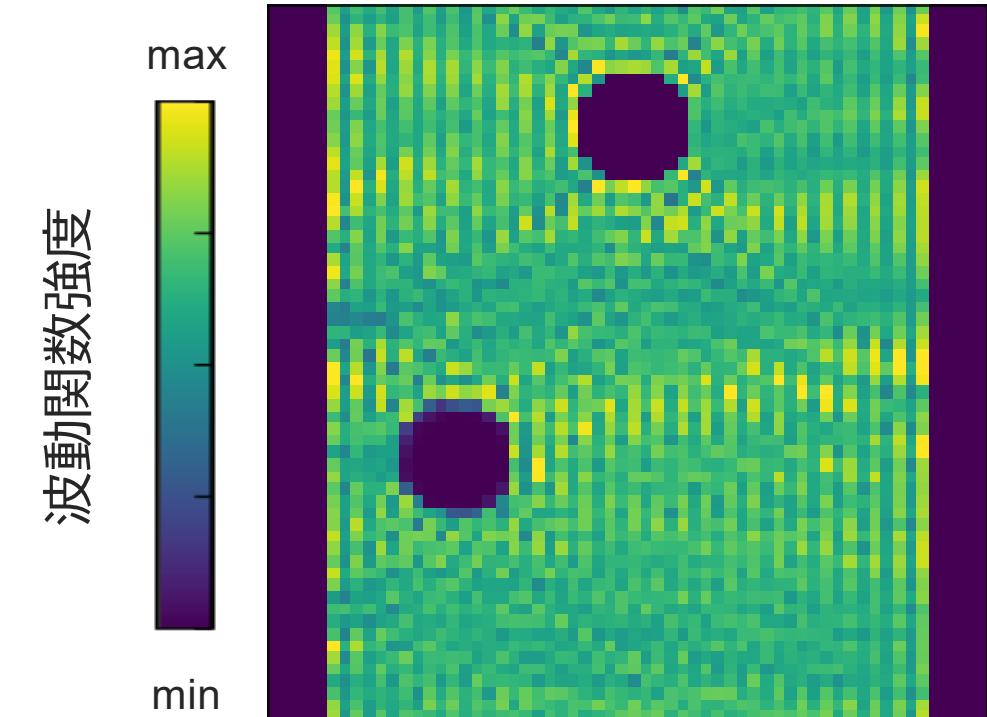
試料構造



磁気伝導度



生成画像

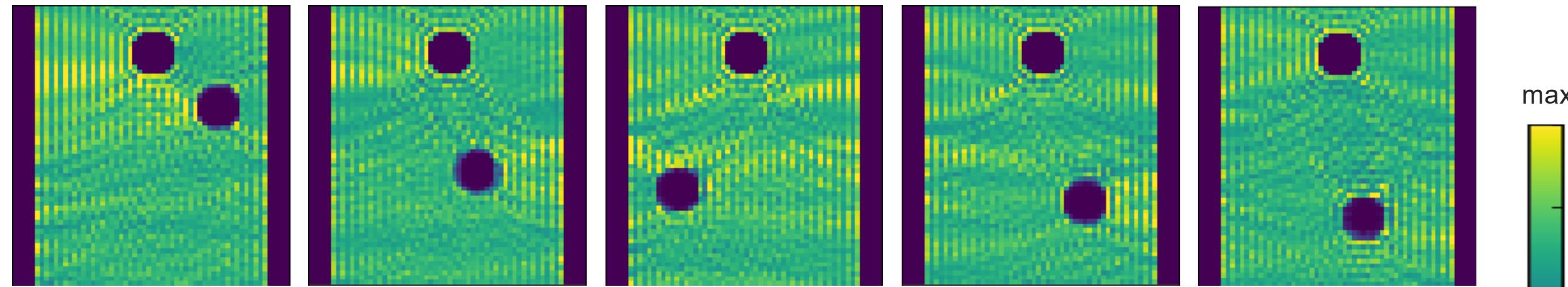


磁場 B (h/e)

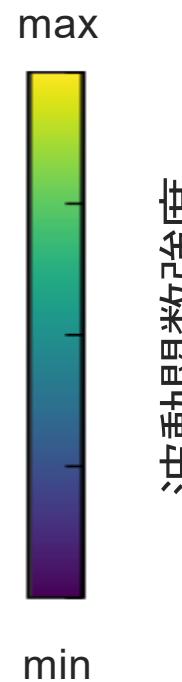
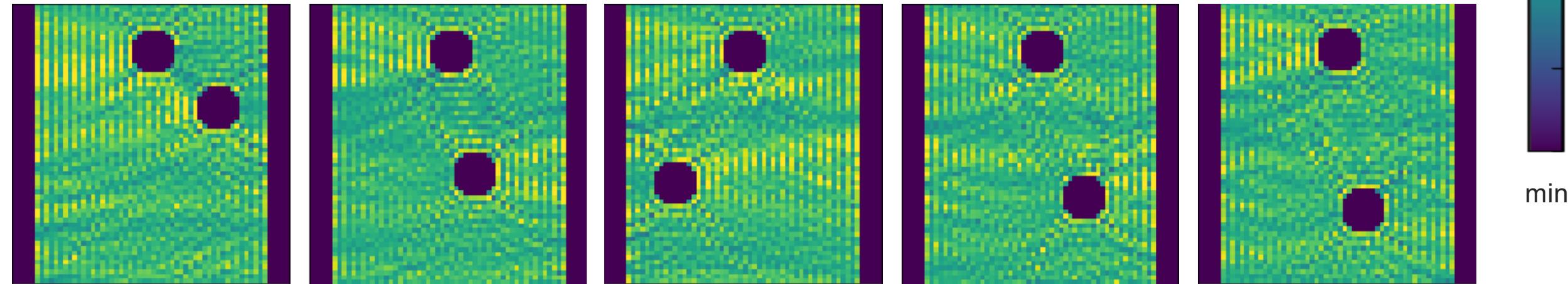
開発ネットワークの汎化性能

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



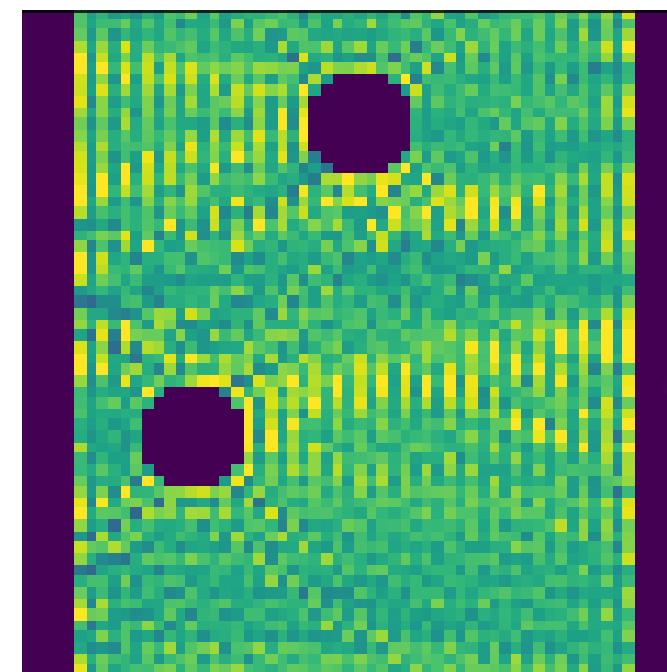
答え画像



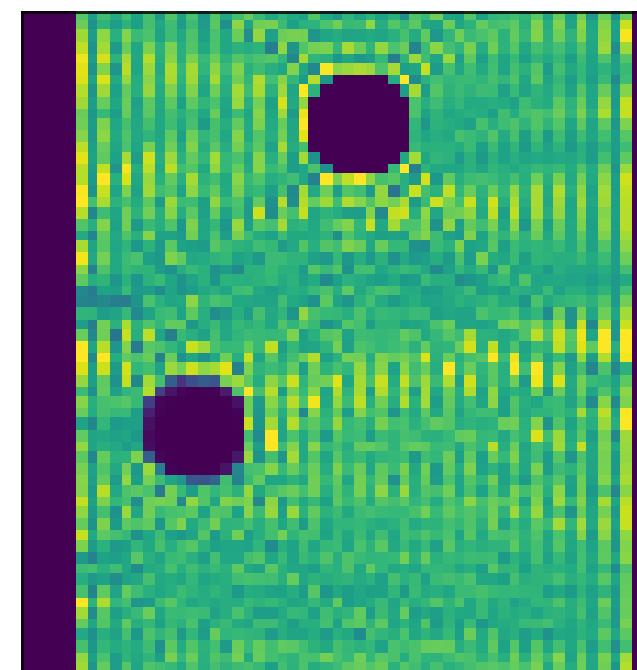
未知のデータに対しても高い予測精度

生成ネットワークの比較

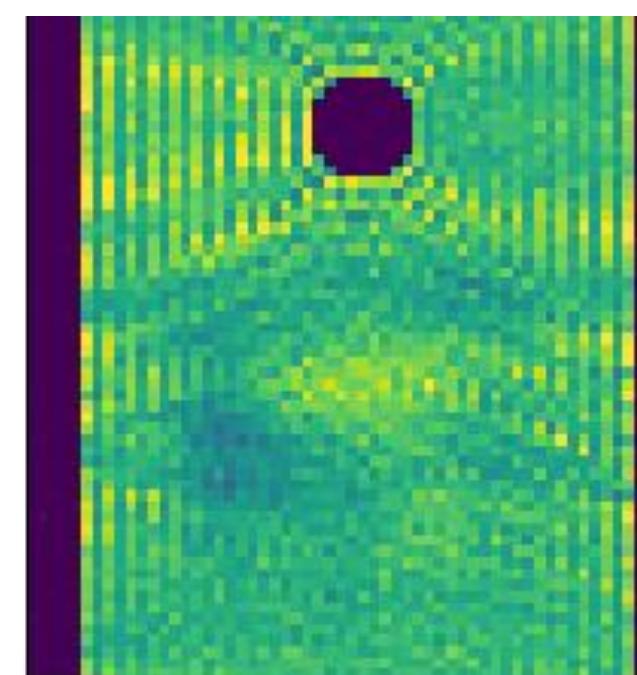
波動関数像



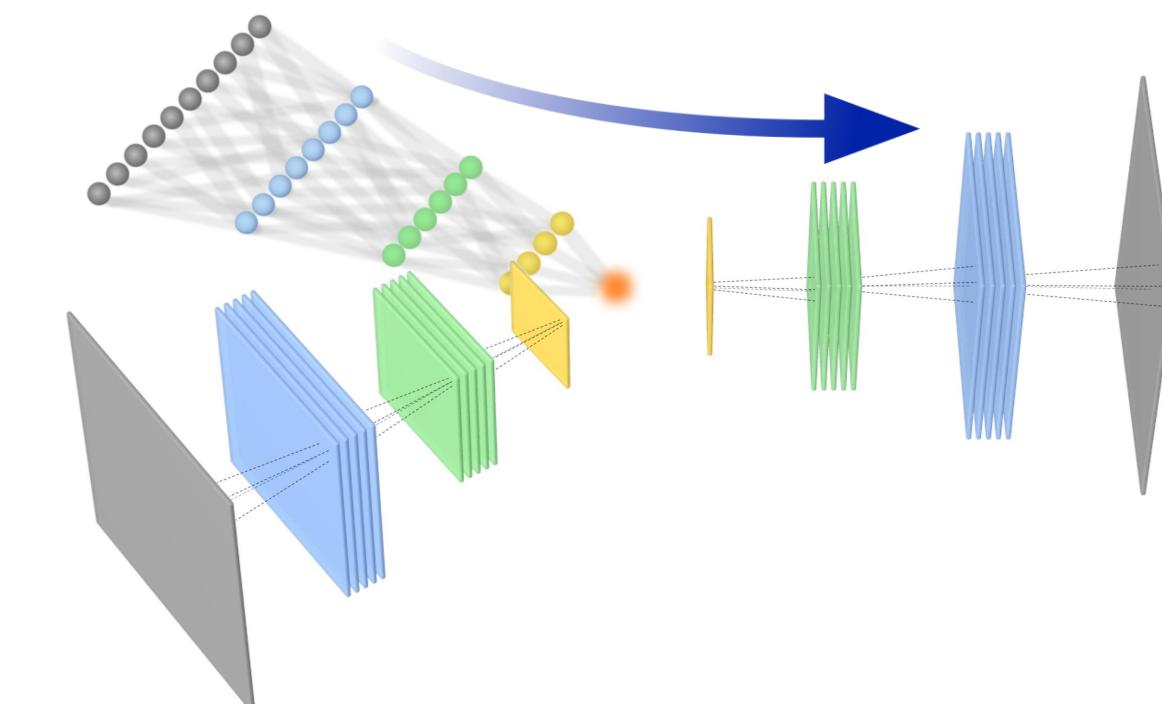
生成画像



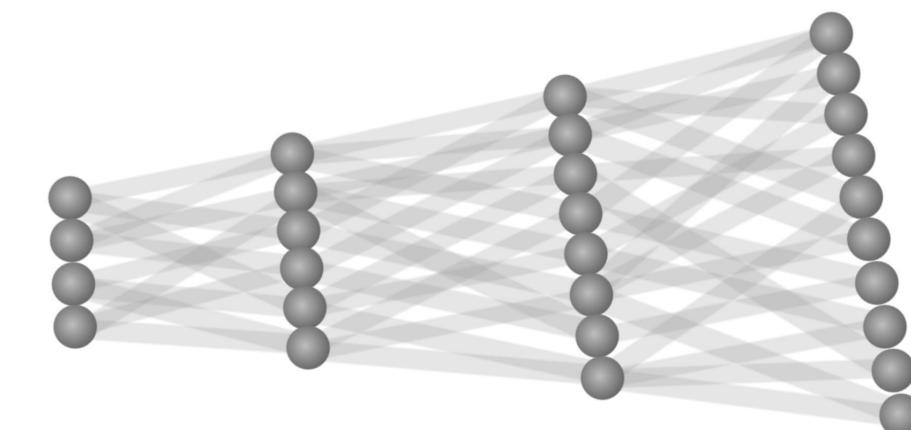
生成画像



VAEを駆使した開発ネットワーク

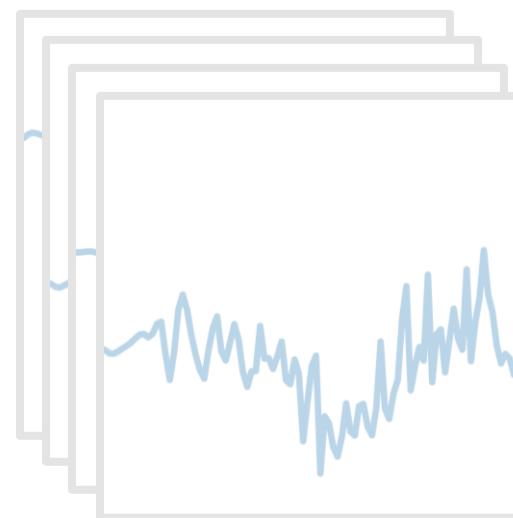


単純な全結合ネットワーク



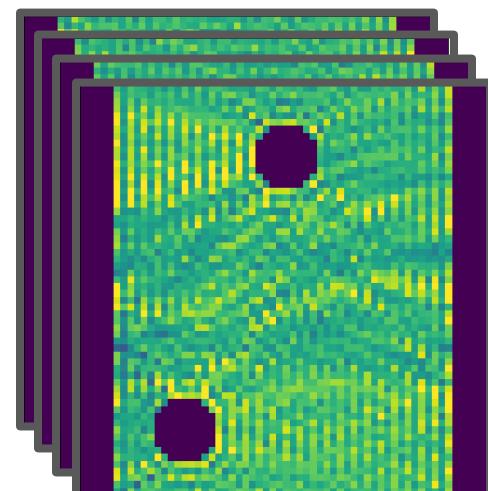
波動関数像がつくる情報幾何構造の可視化

磁気伝導度



(100次元)

波動関数像
(3600次元)



潜在空間中のデータ構造を可視化したい

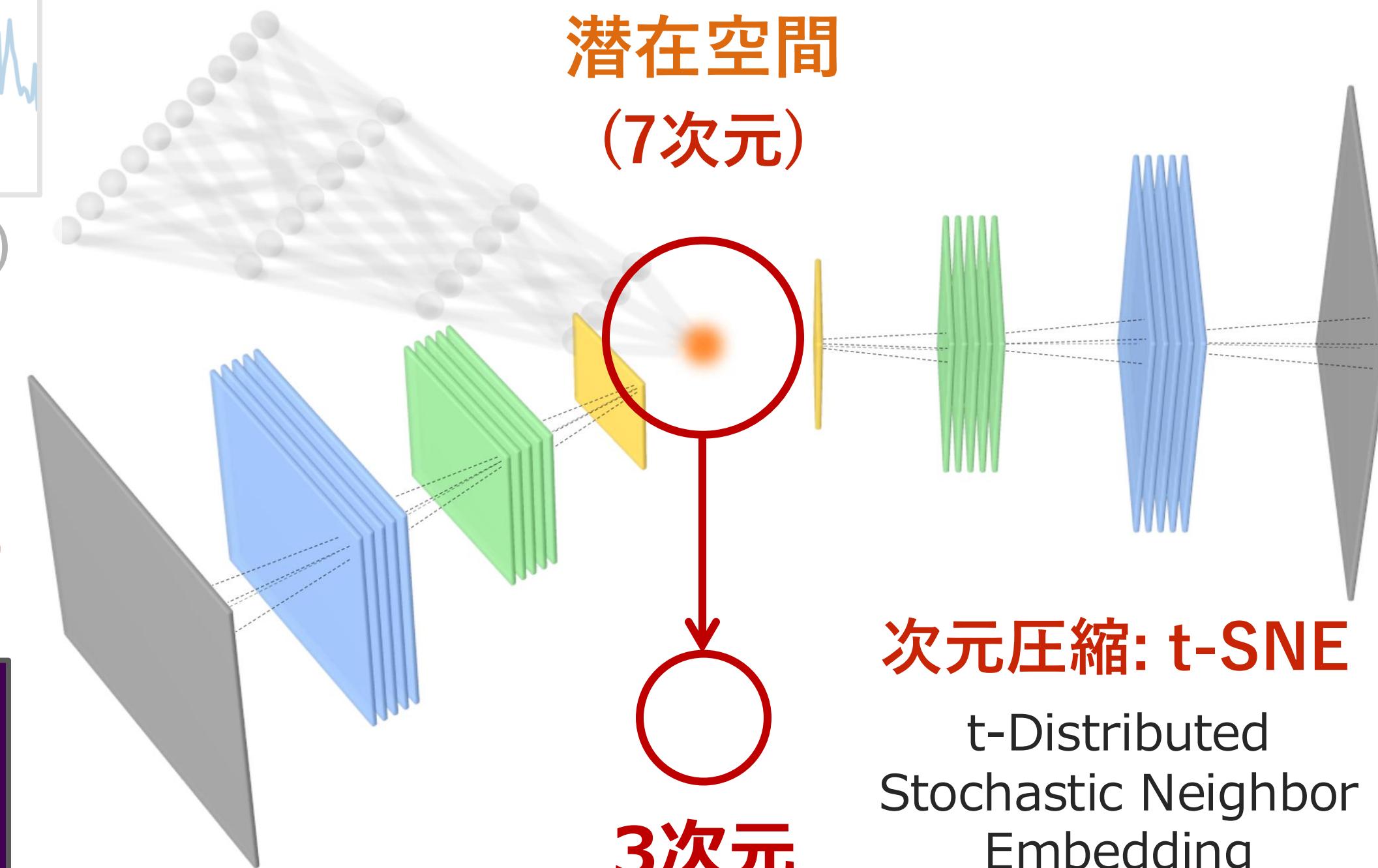
潜在空間
(7次元)

生成画像
(3600次元)

次元圧縮: t-SNE

t-Distributed
Stochastic Neighbor
Embedding

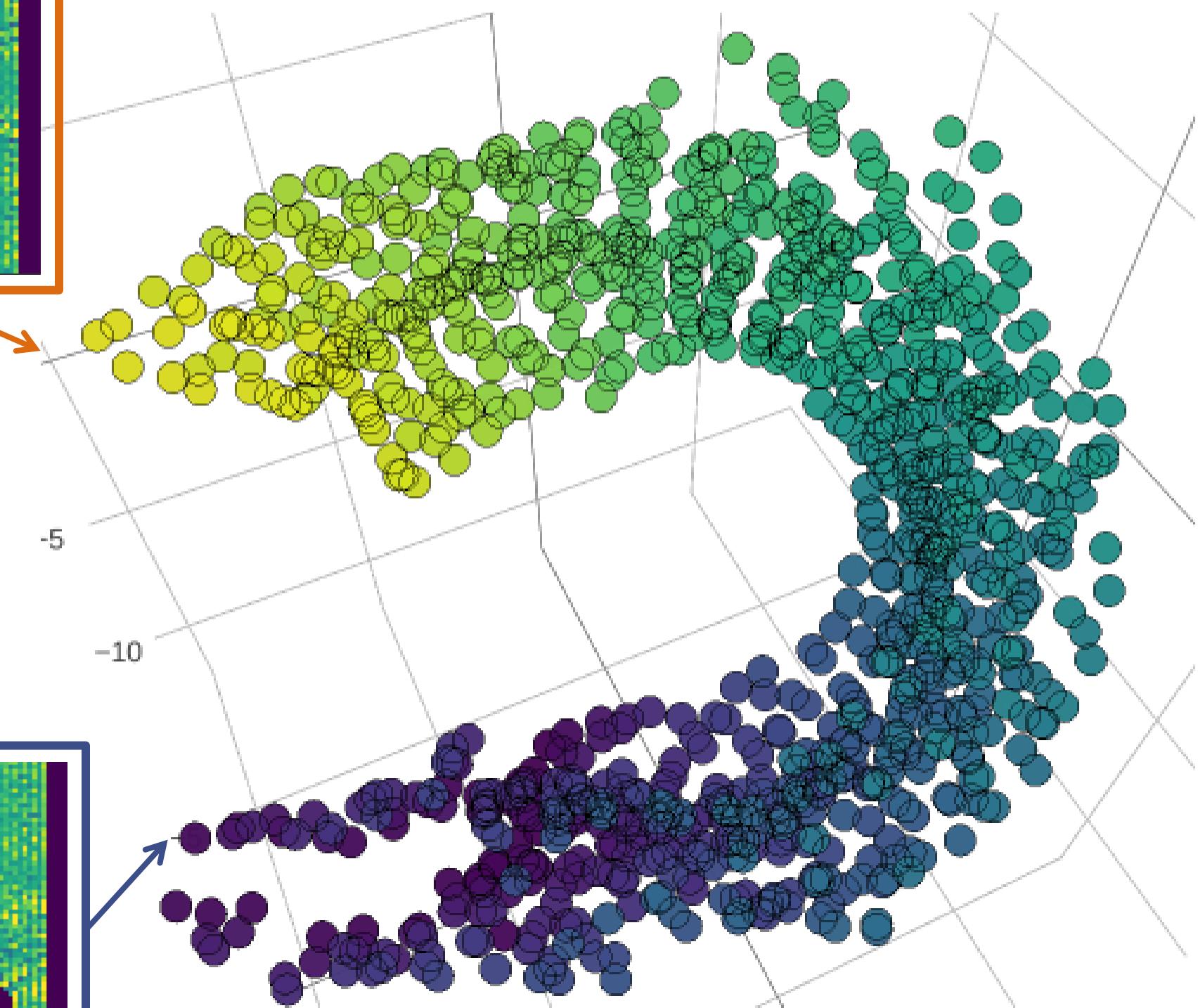
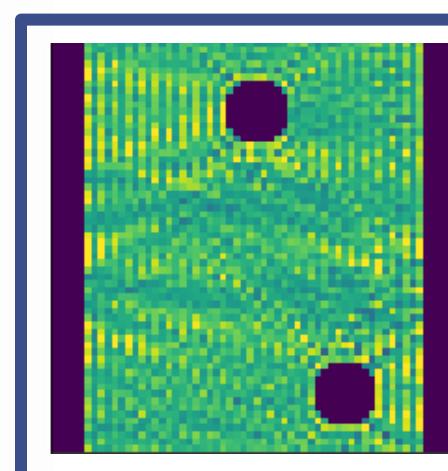
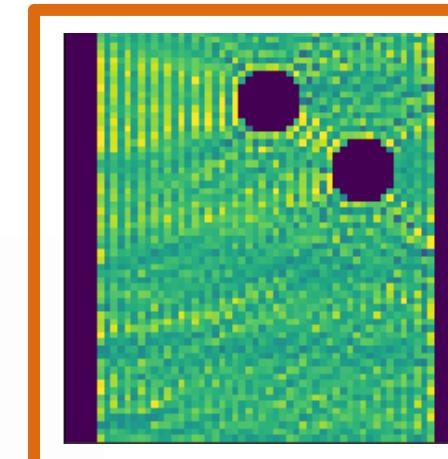
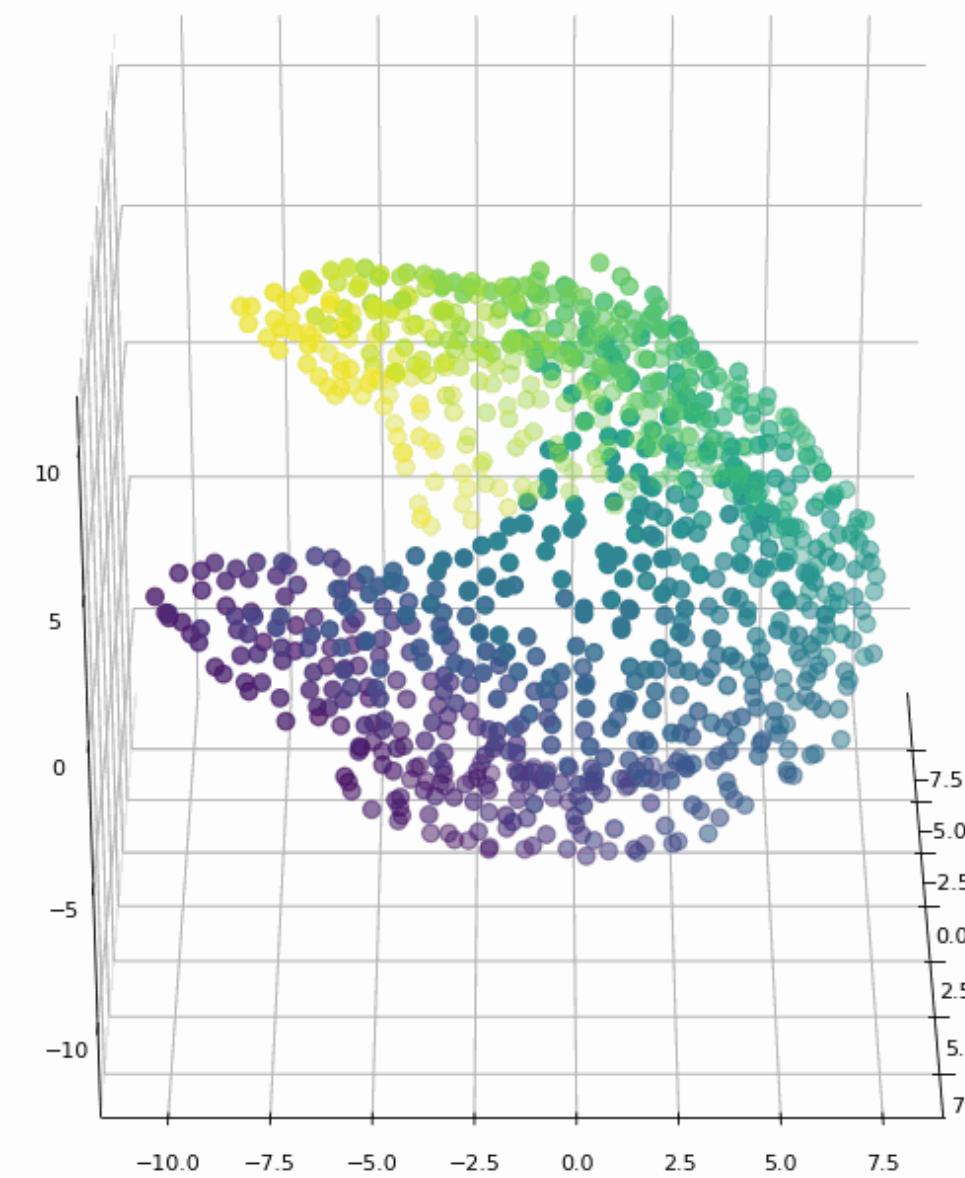
3次元



波動関数像がつくる情報幾何構造の可視化

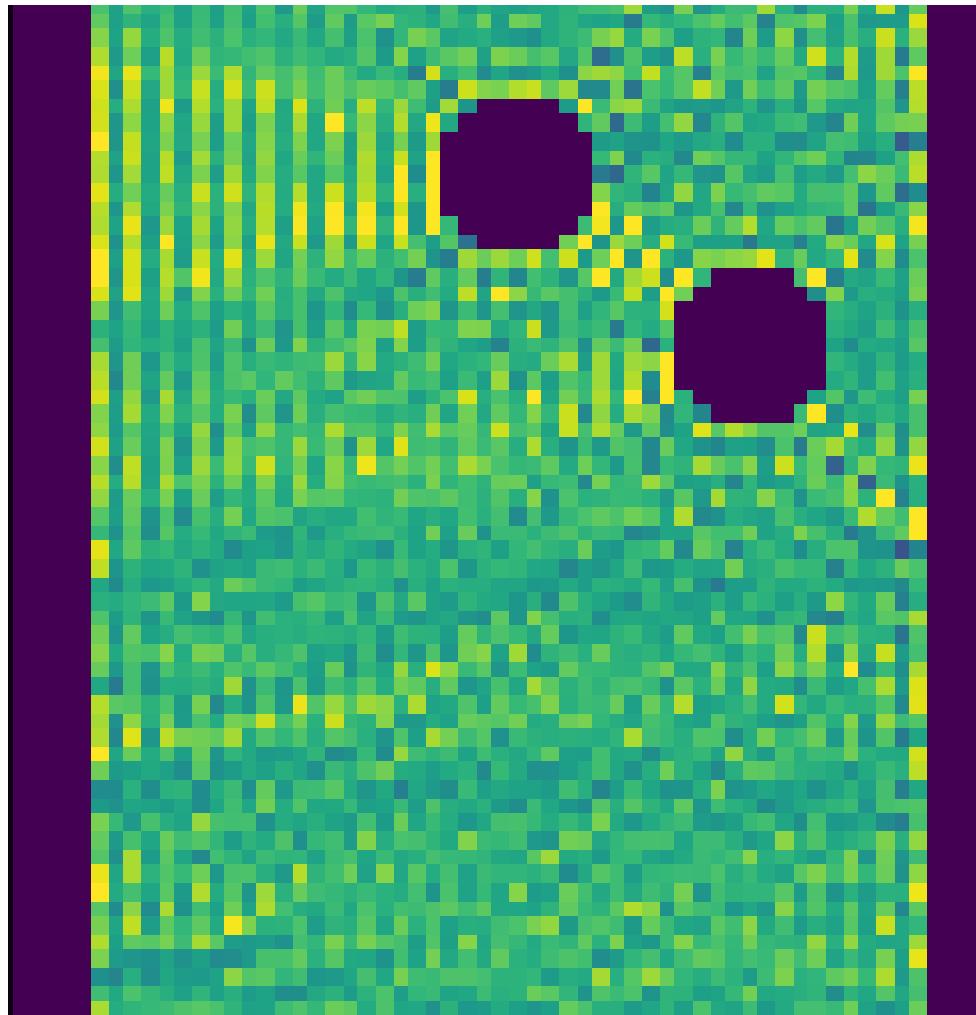
22

厚さのある層構造



スナップショット

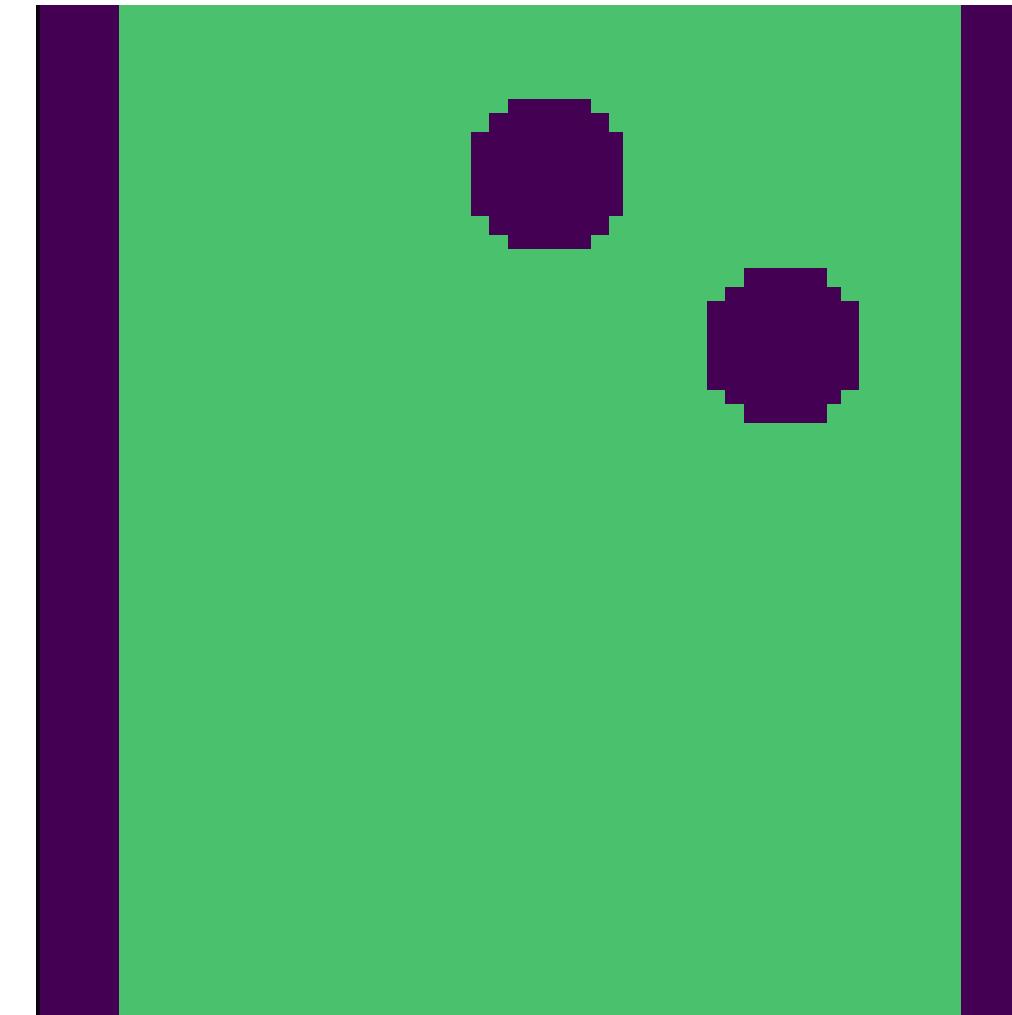
波動関数あり



配置：古典

波：量子

波動関数なし

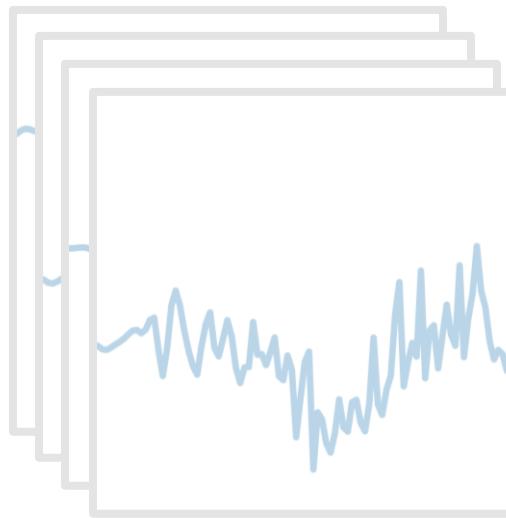


配置：古典

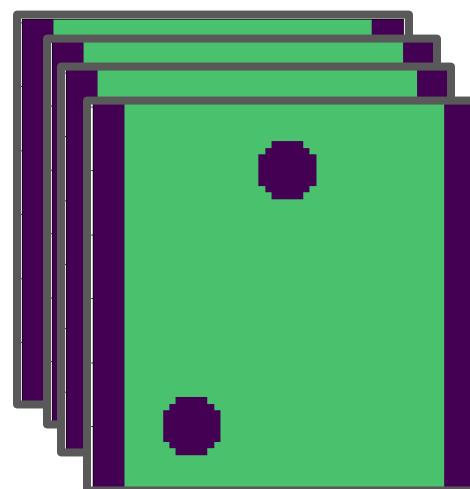
~~波：量子~~

形状変化のつくる情報幾何構造の可視化

磁気伝導度



形状画像
(3600次元)



形状変化の情報を抽出

潜在空間
(7次元)

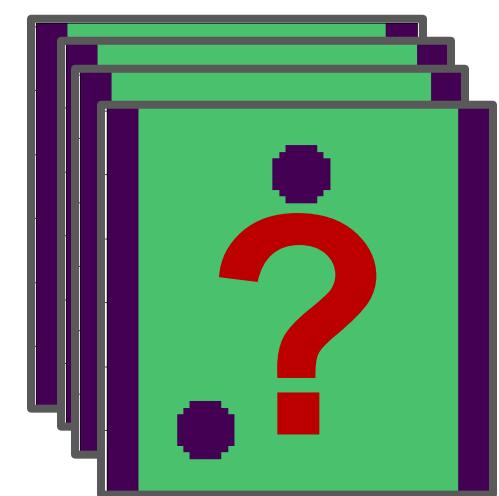
reparameterization trick

batch normalization

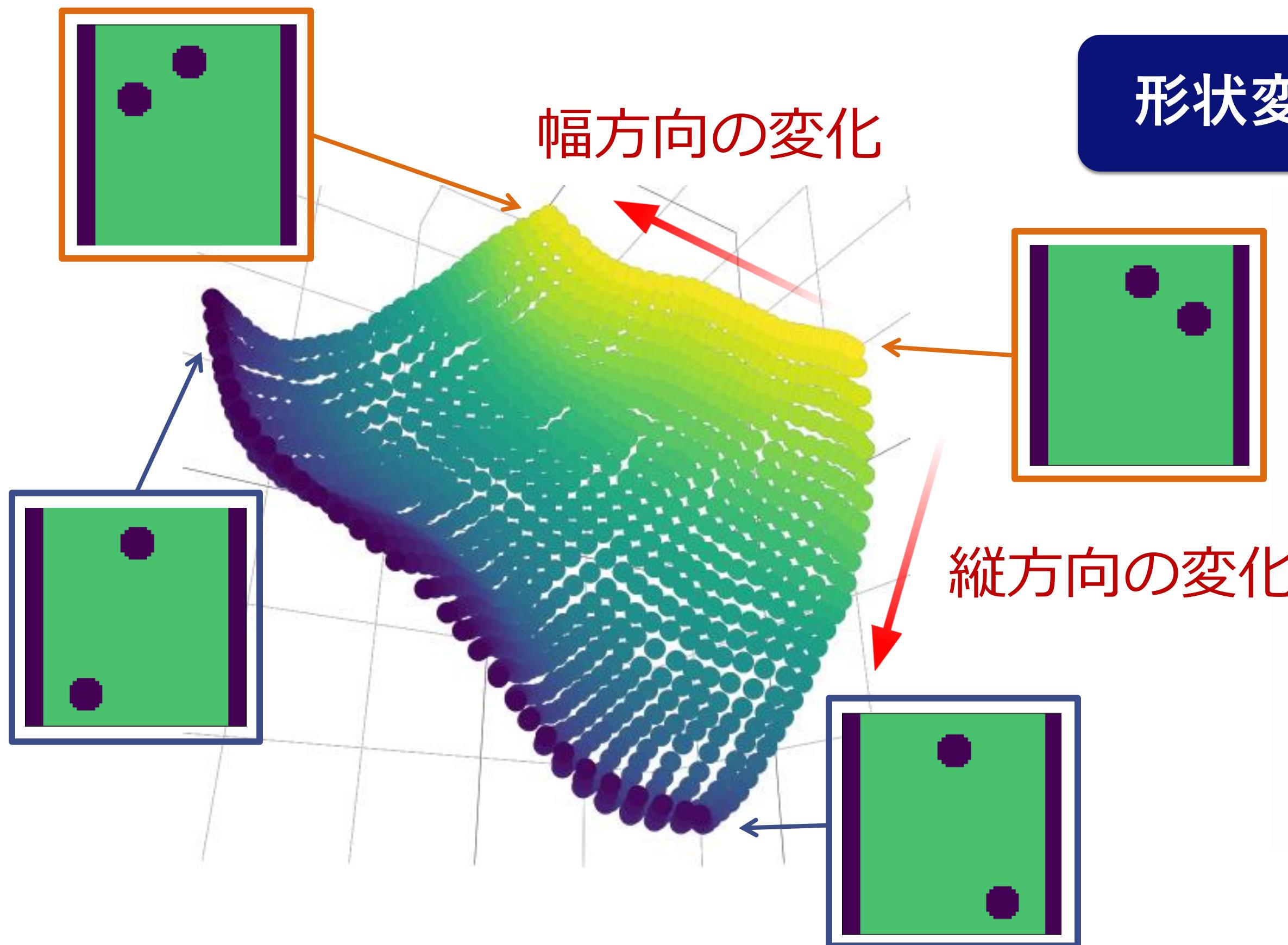
fully connected

convolution

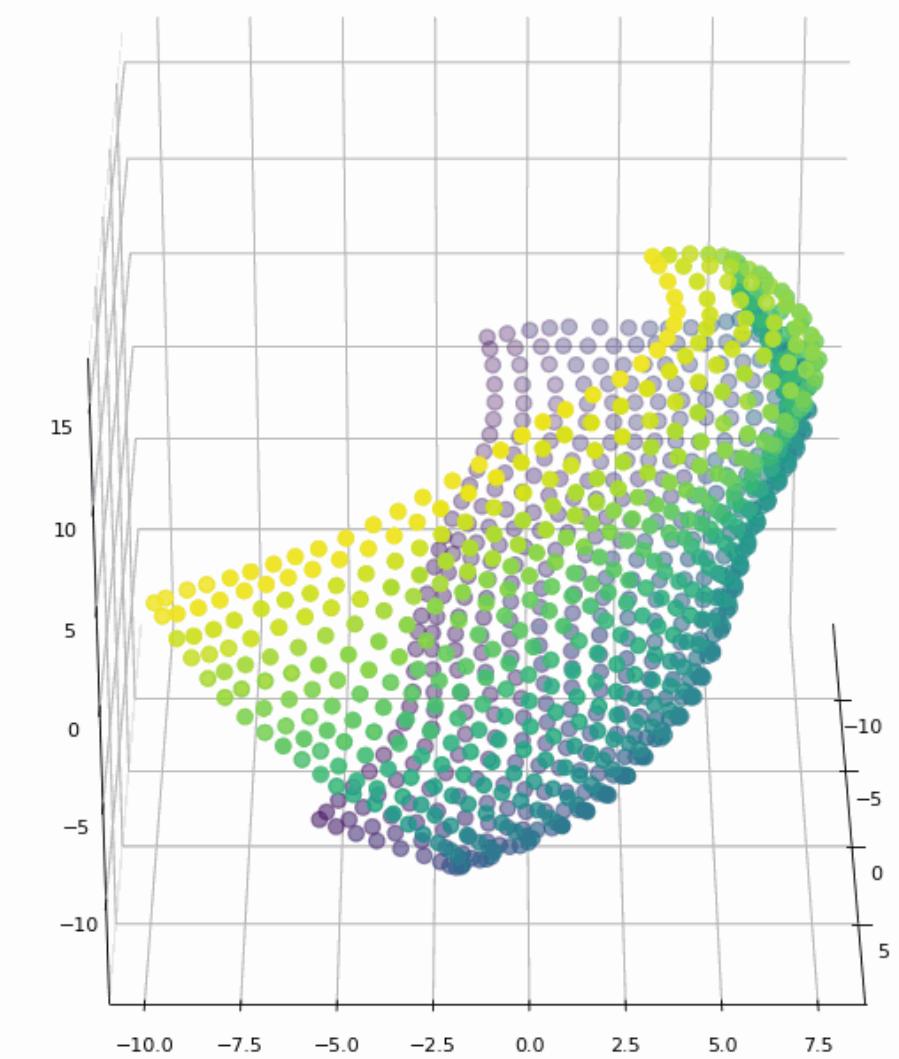
生成画像
(3600次元)



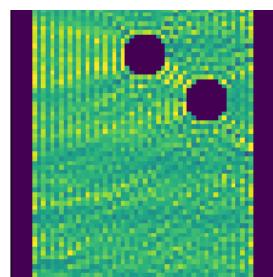
VAEの学習



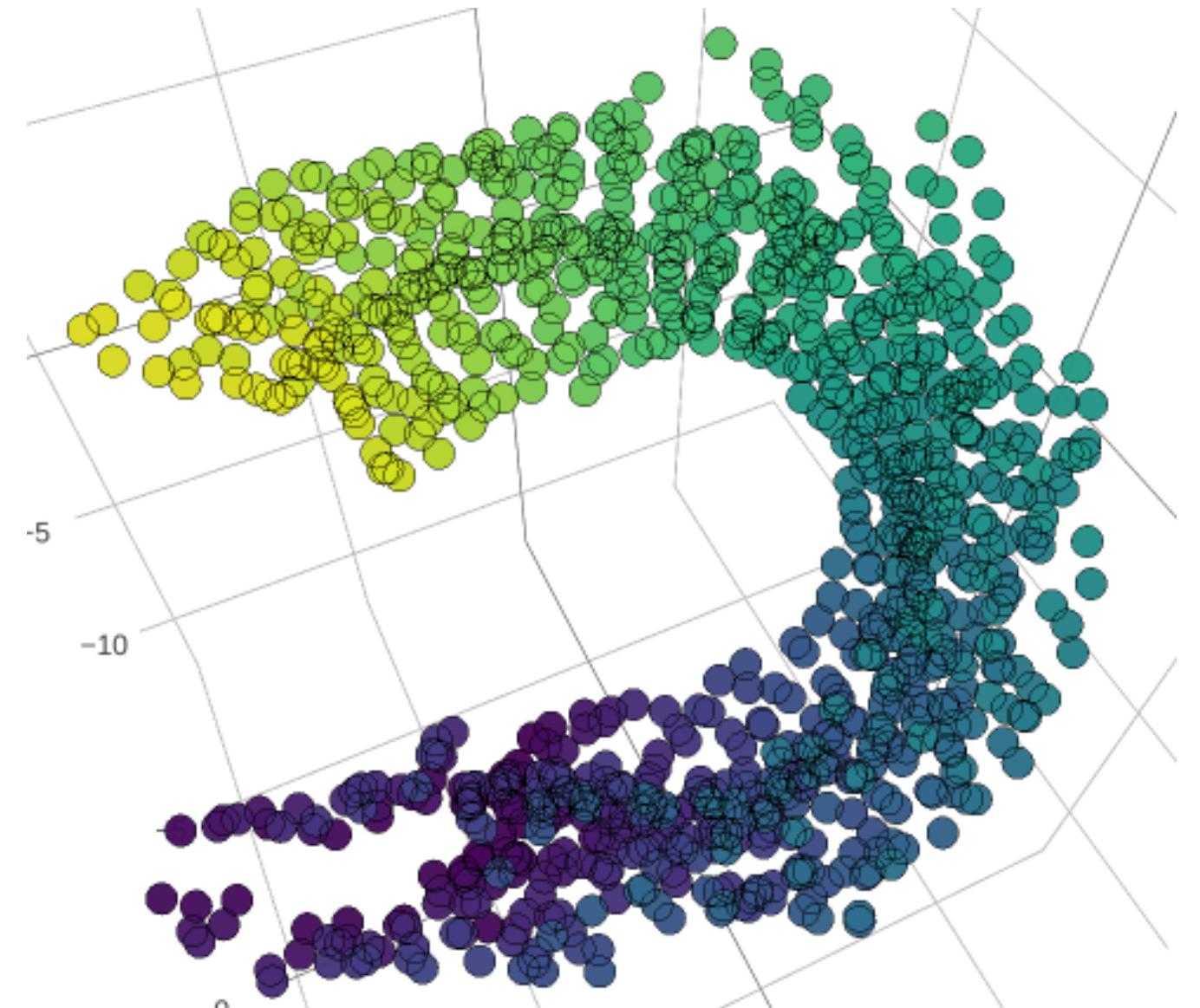
形状変化に対応する1層構造



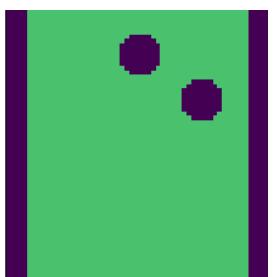
潜在空間中の幾何構造の比較



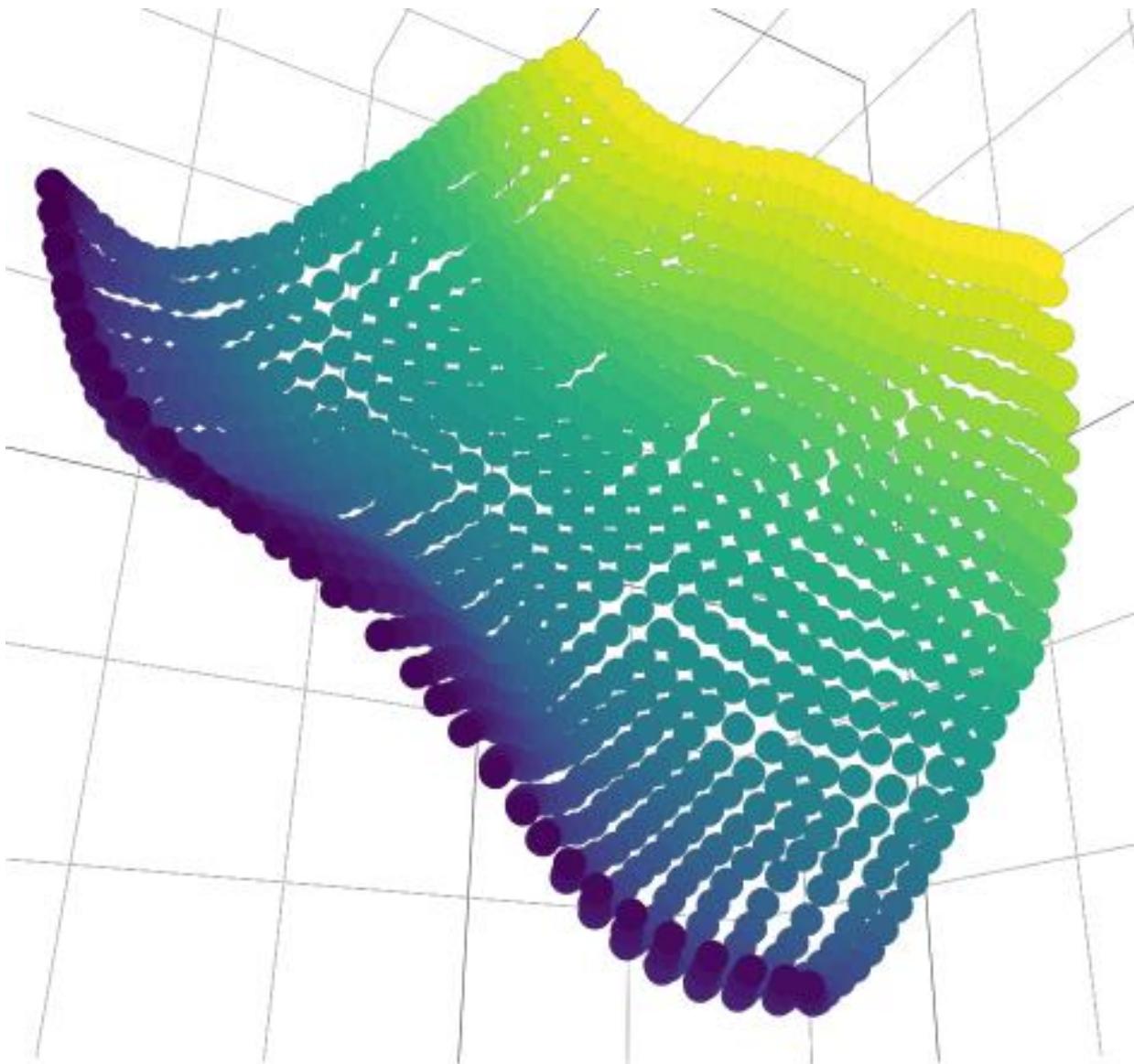
波動関数あり



厚さのある層構造

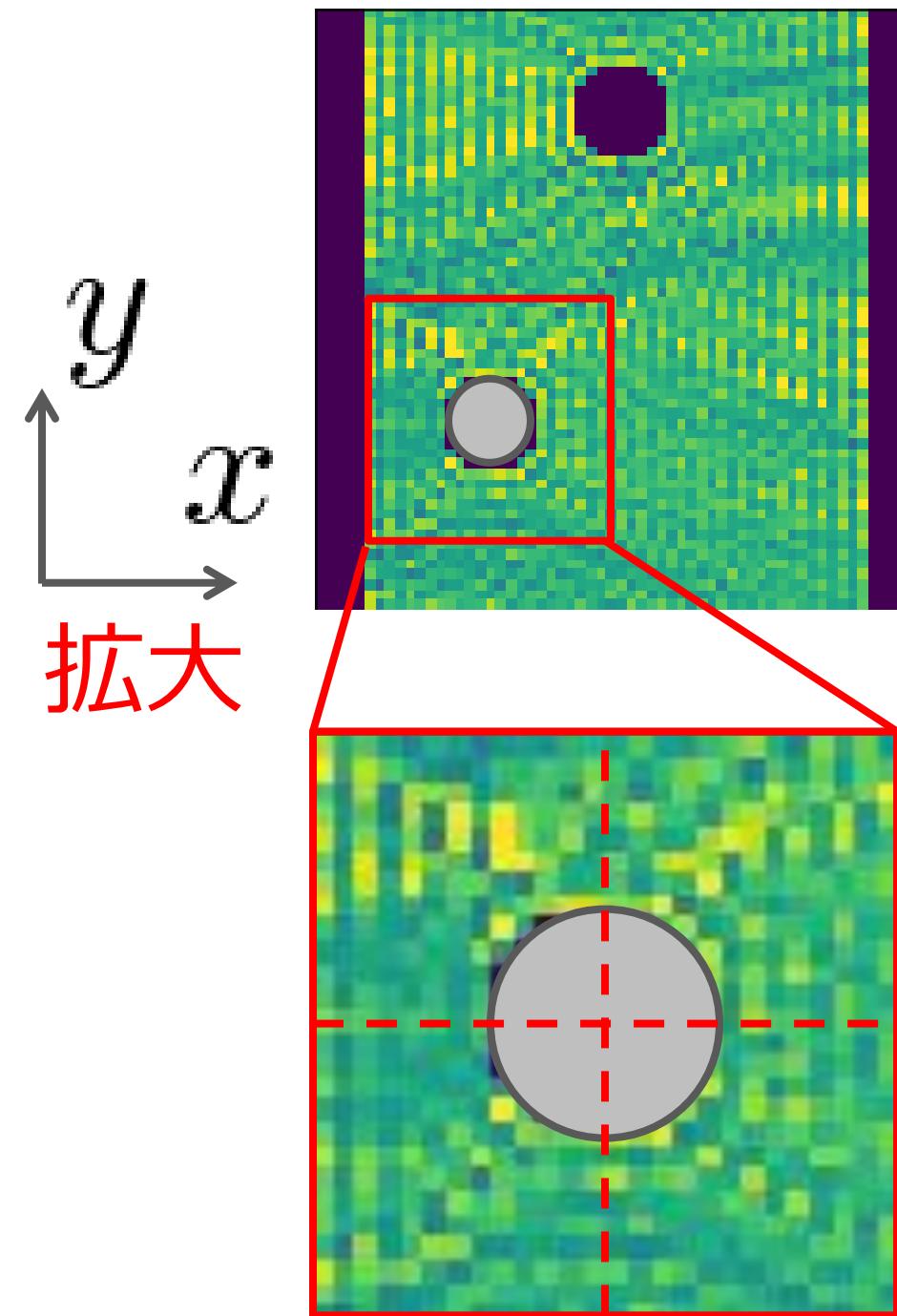


波動関数なし



厚さのない1層構造

潜在空間中の幾何構造の比較

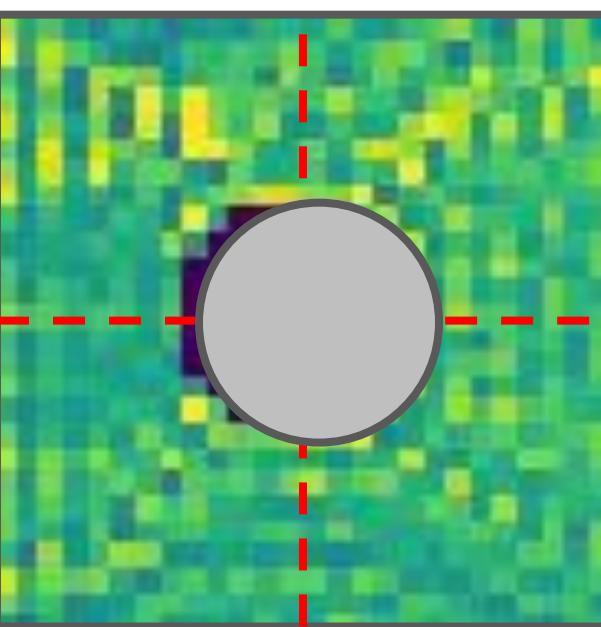


左端を基準

$x = 0$ 偶数 は ●

$x = 1$ 奇数 は ○

潜在空間を色分け



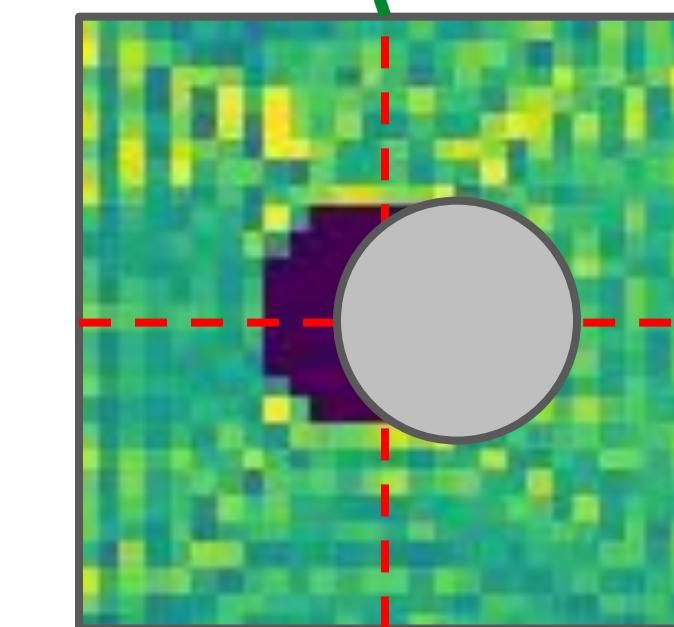
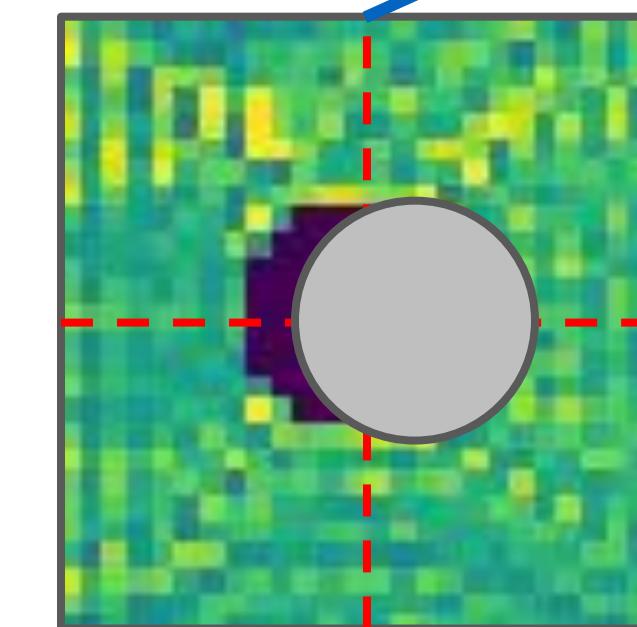
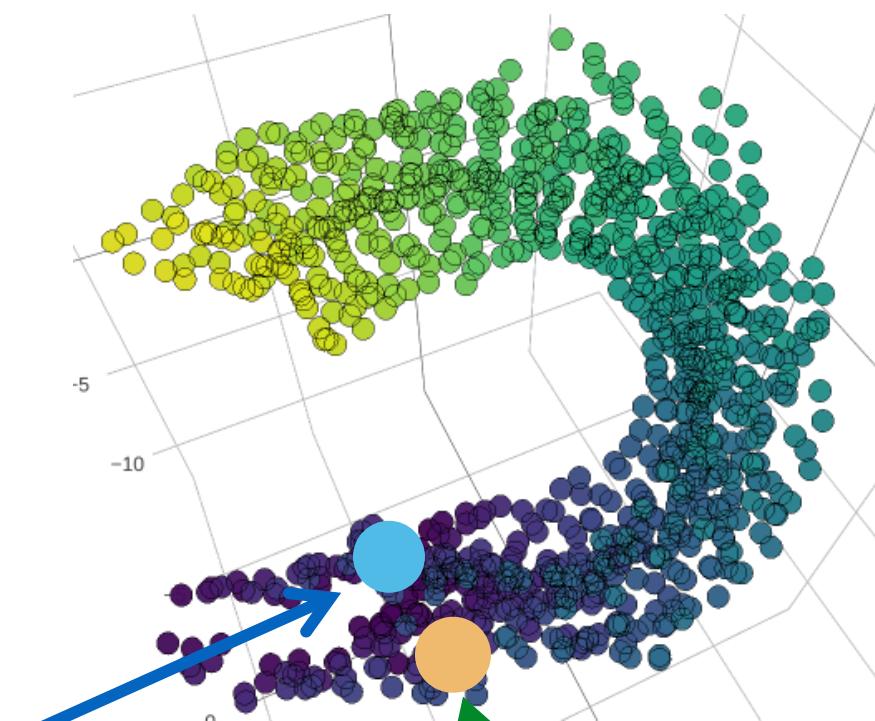
基準

$x = 0$ ●

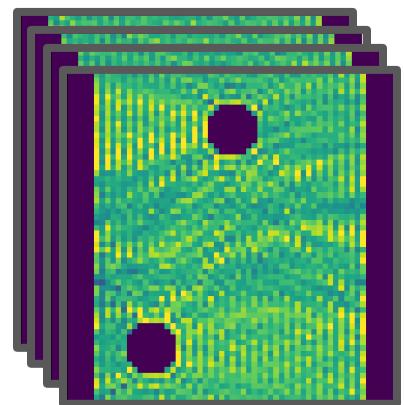
$x = 1$ ○

$x = 2$ ●

$x = 3$ ○

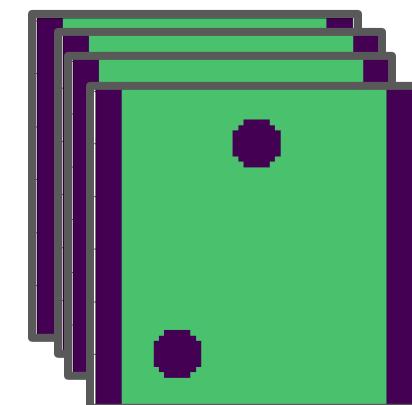
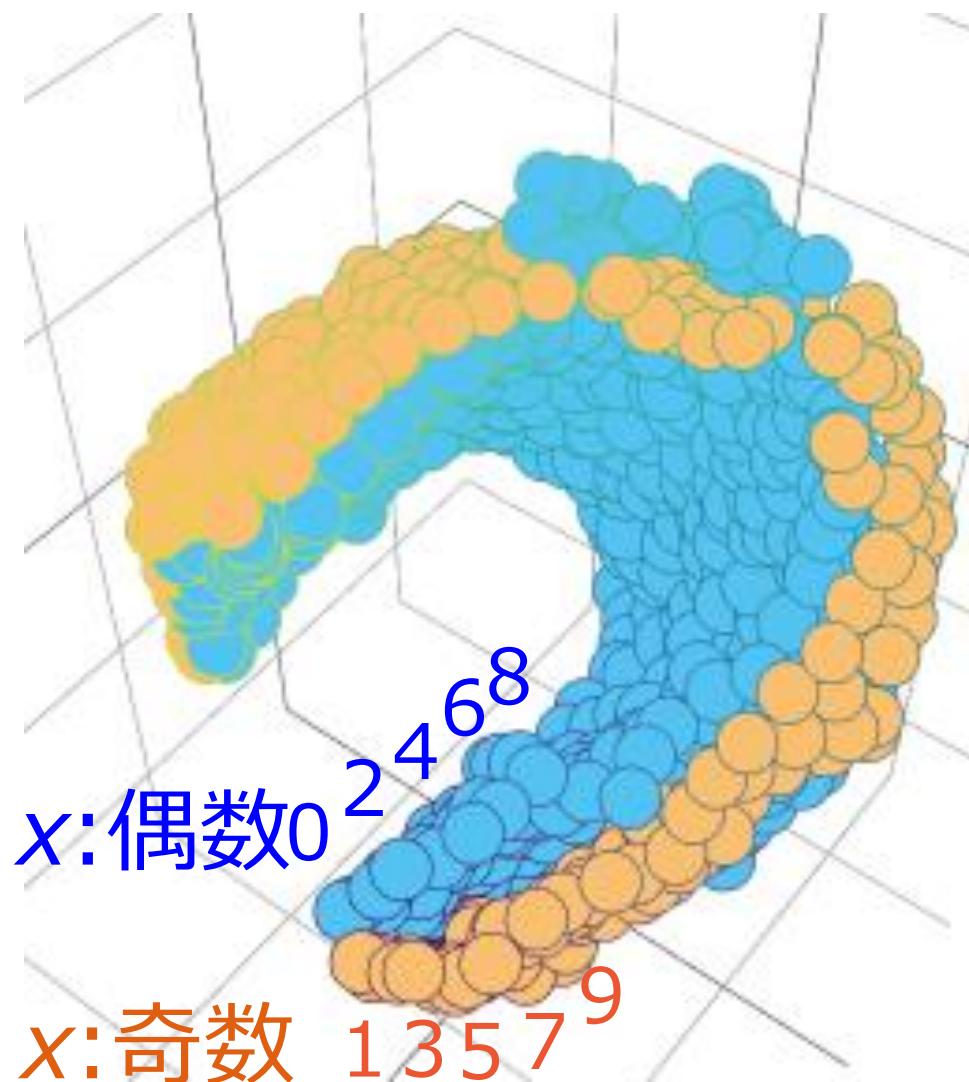


潜在空間中の幾何構造の比較



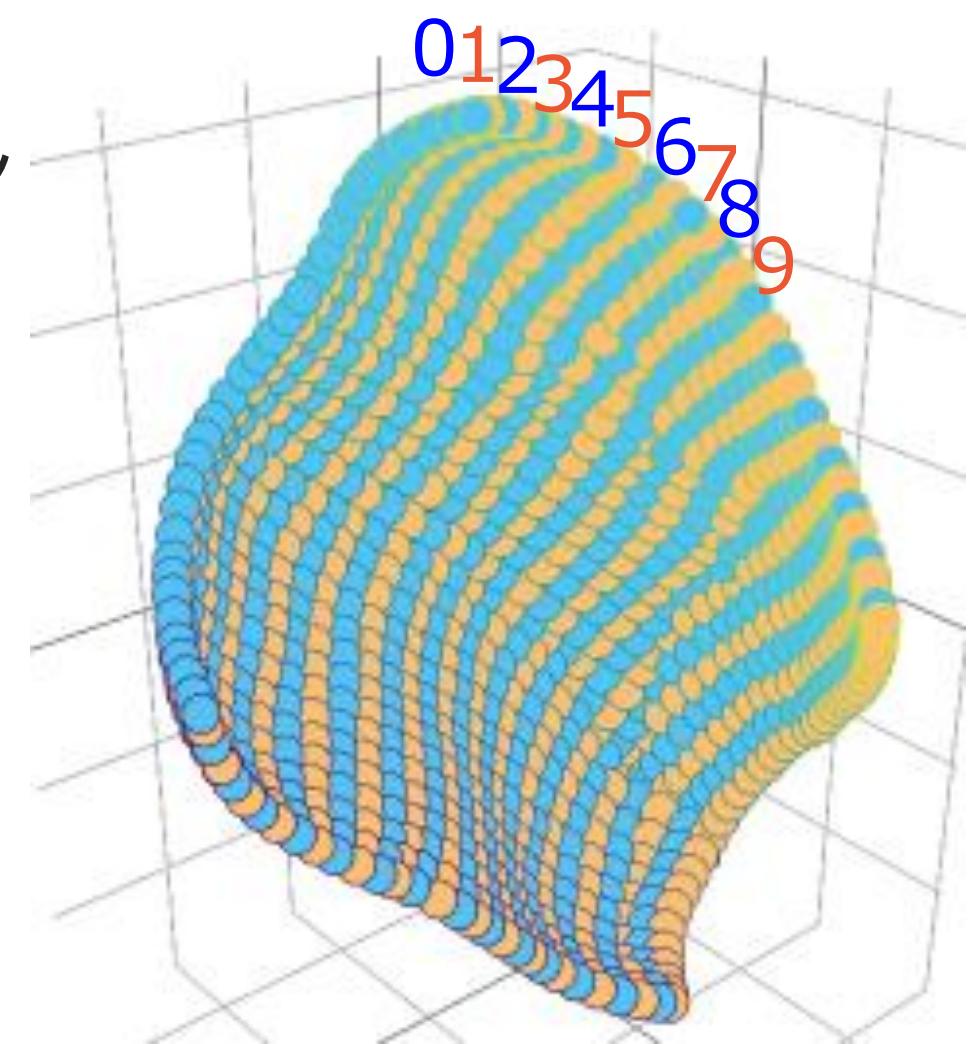
厚さのある層構造

波動関数あり



厚さのない1層構造

波動関数なし

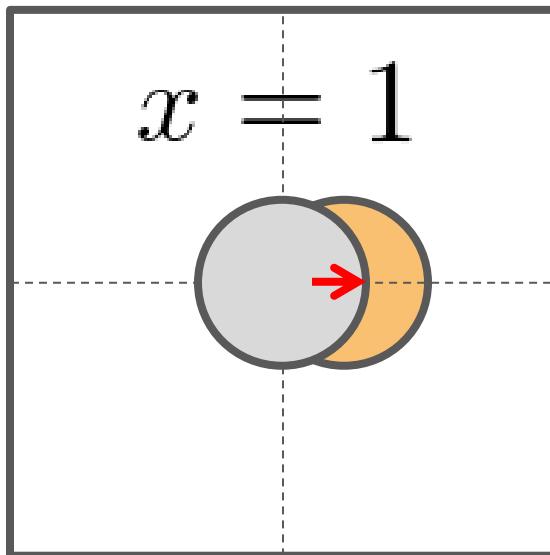


厚さのある層構造 = アンチドット欠陥周りの量子干渉

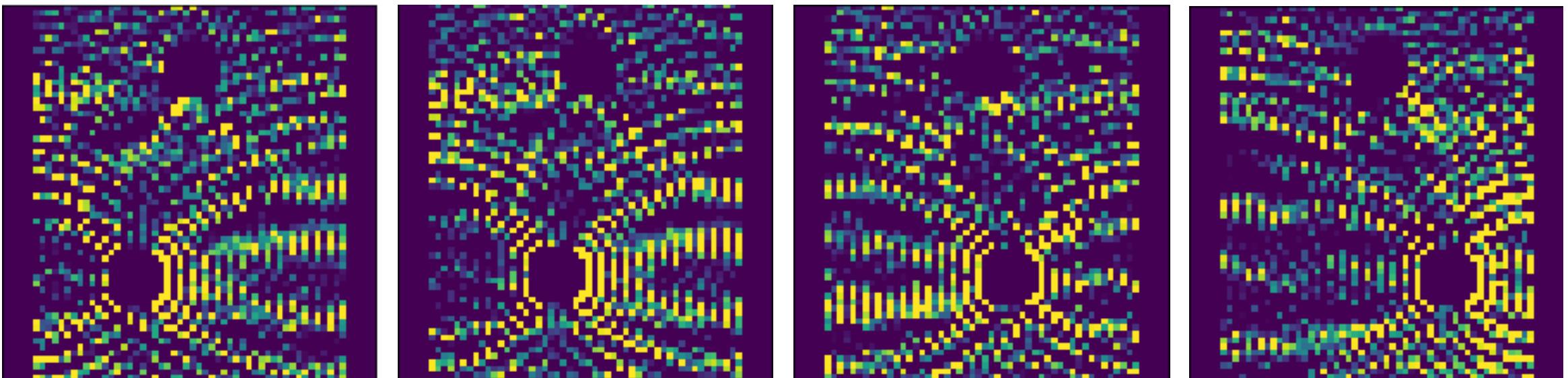
幾何構造に現れる厚さの要因

2つの波動関数の差分

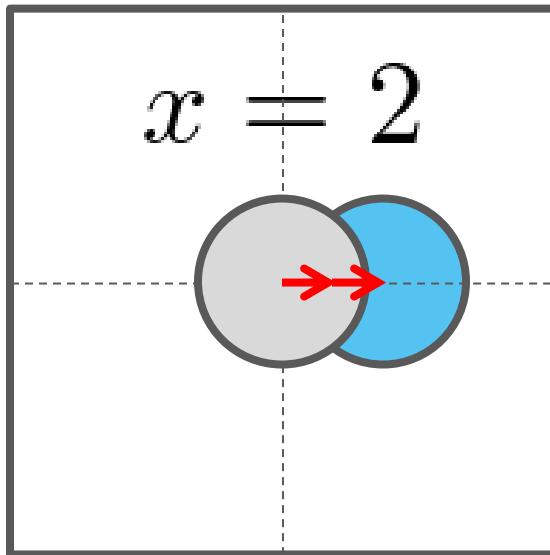
1サイト変化



平均二乗誤差 0.052

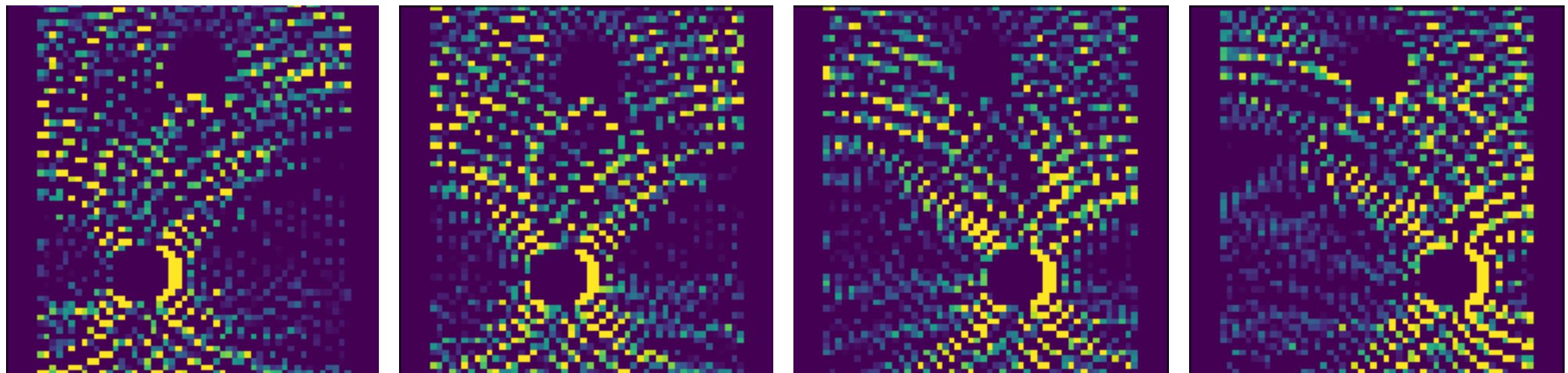


2サイト変化

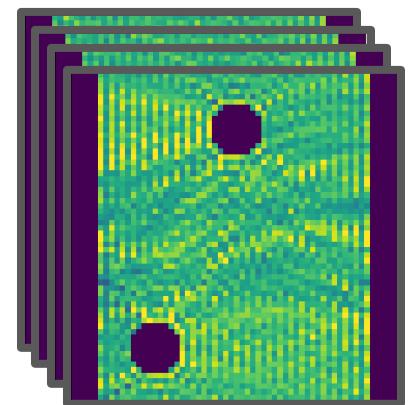


平均二乗誤差 0.046

小さな誤差

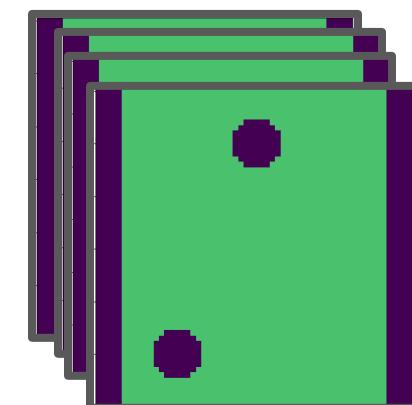
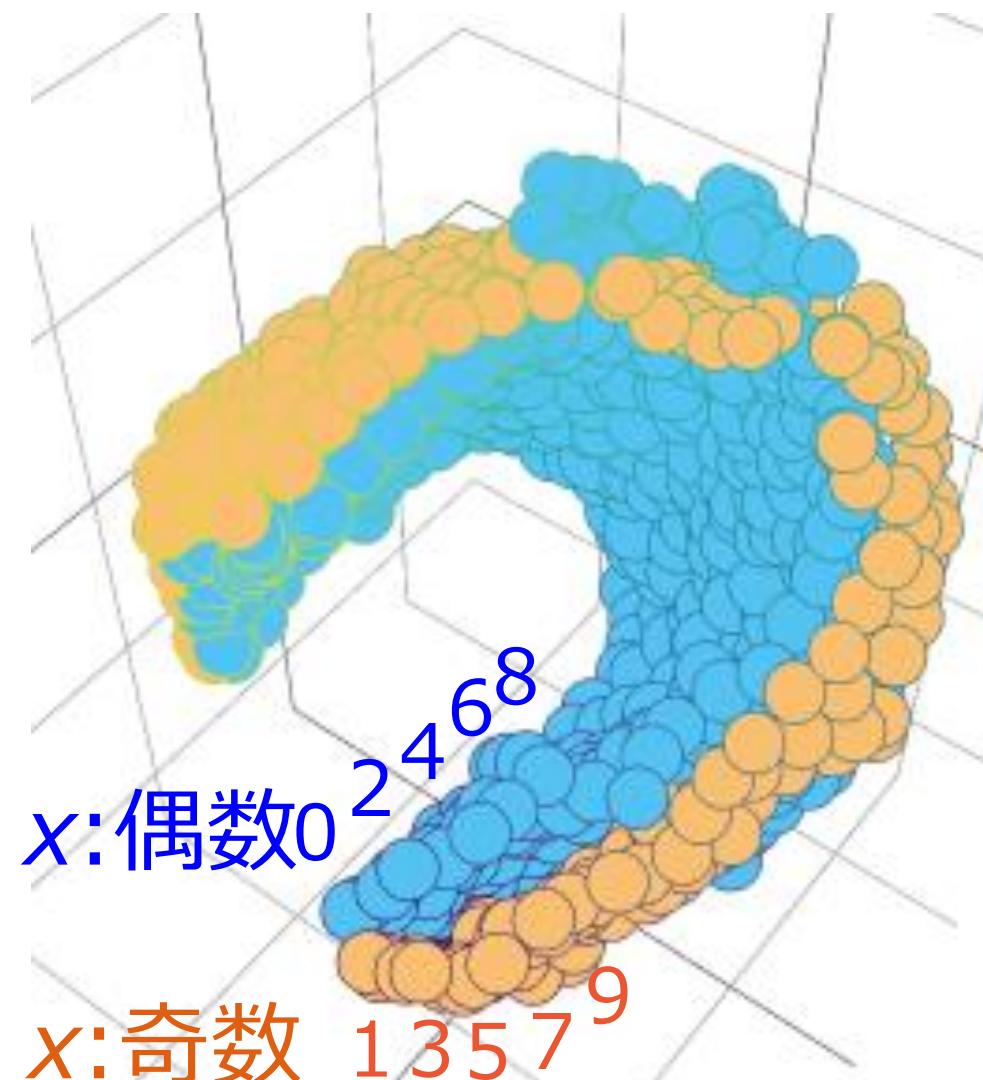


潜在空間中の幾何構造の比較



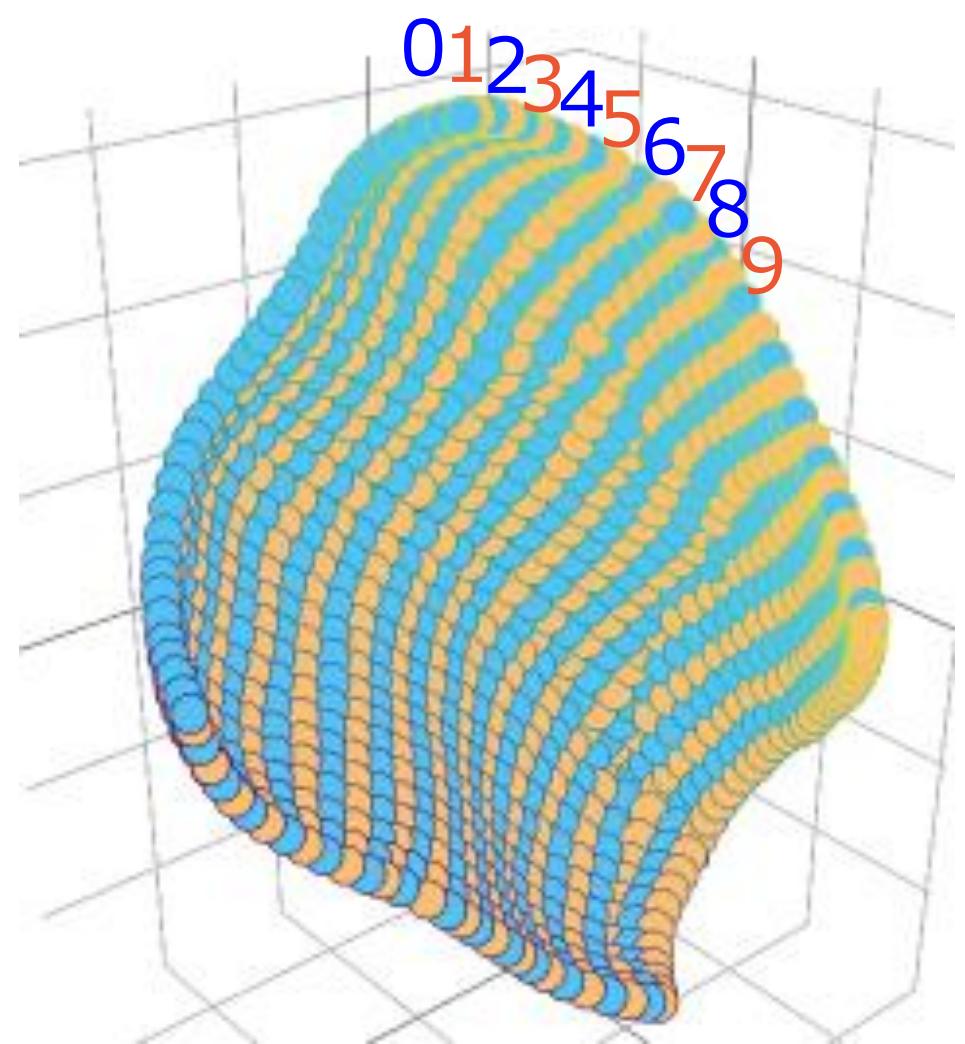
波動関数あり

厚さのある層構造



波動関数なし

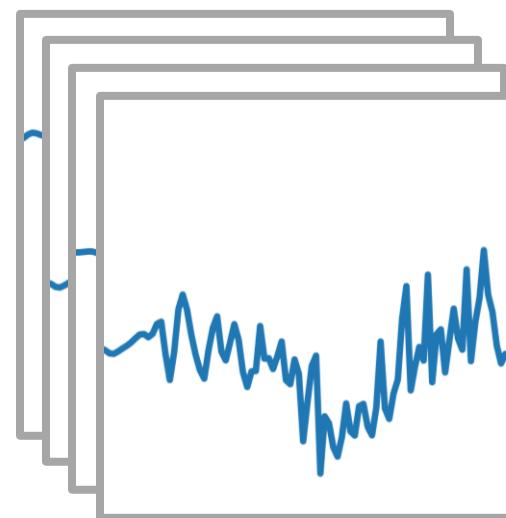
厚さのない1層構造



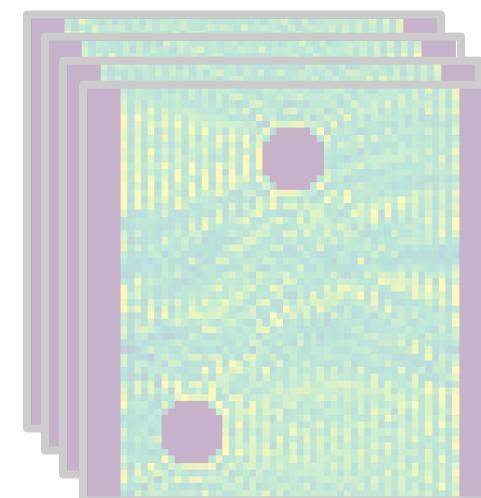
量子干渉の空間分布を反映して厚さが形成

伝導度から量子干渉情報の推定

磁気伝導度

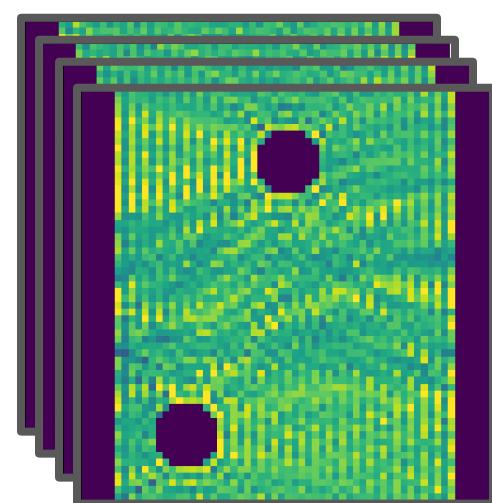


形状画像
(3600次元)



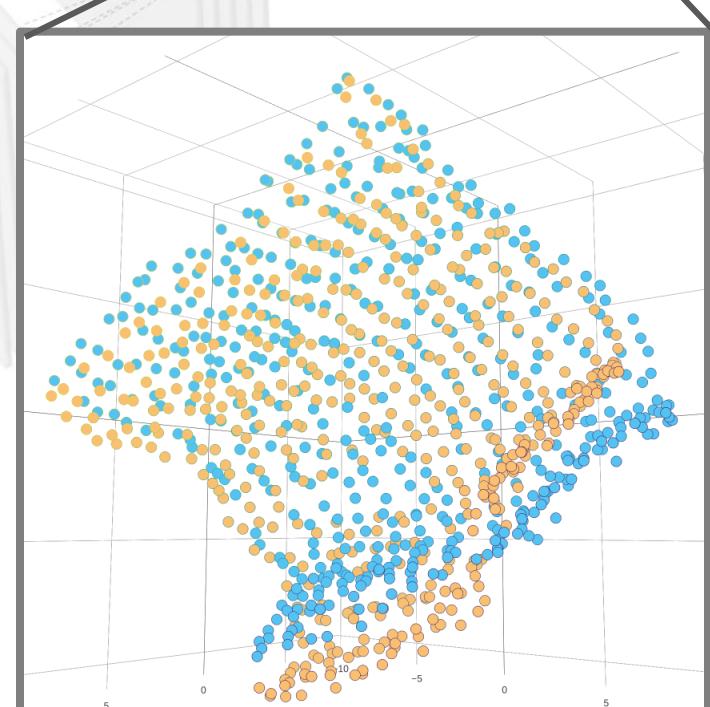
伝導度のもつミクロ情報

生成画像
(3600次元)



潜在空間

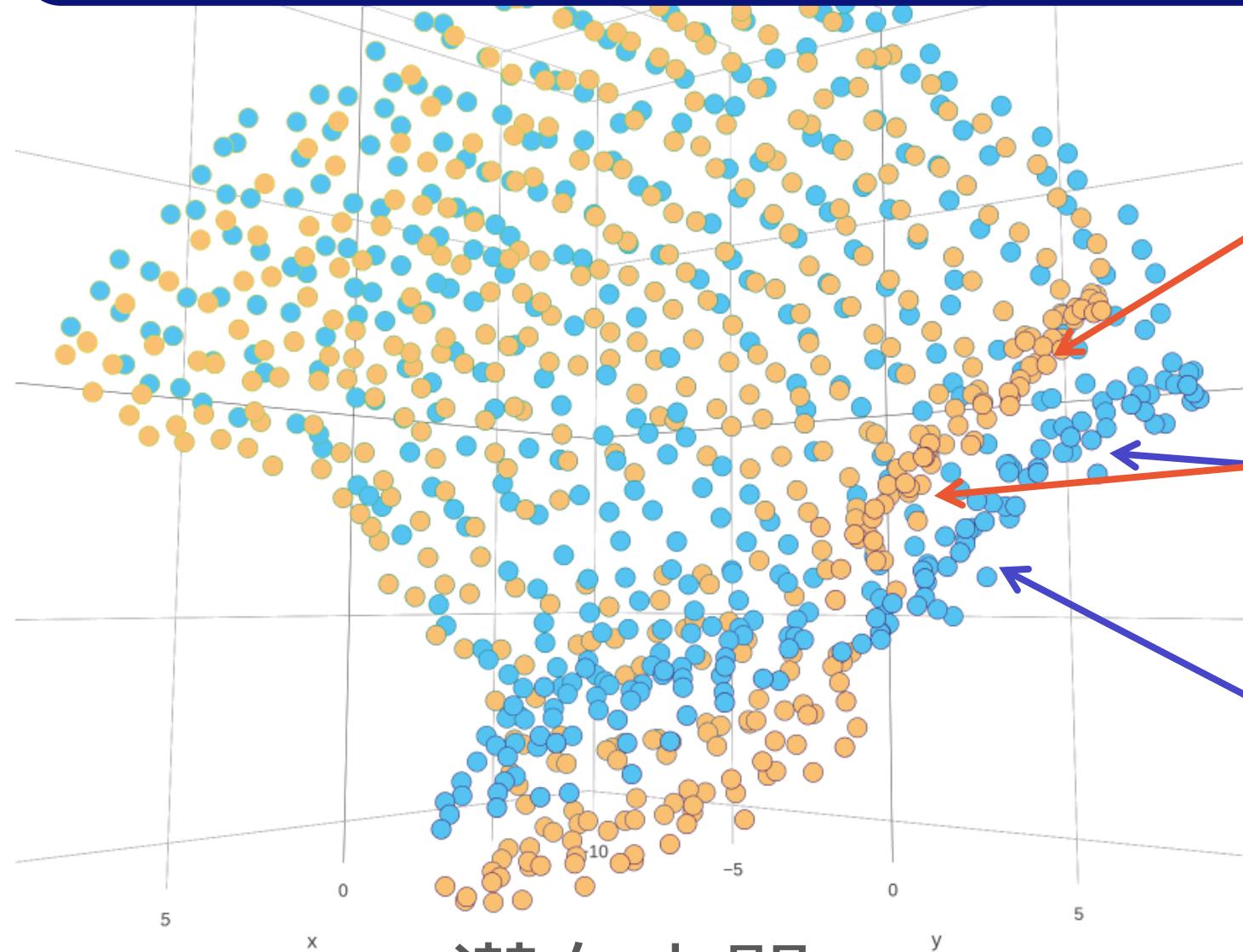
磁気伝導度は潜在空間の層構造を理解できるか



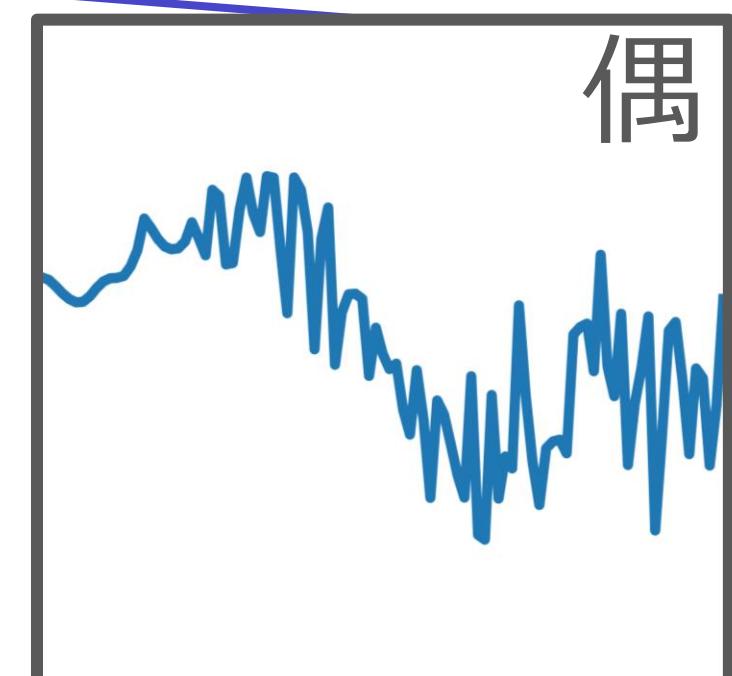
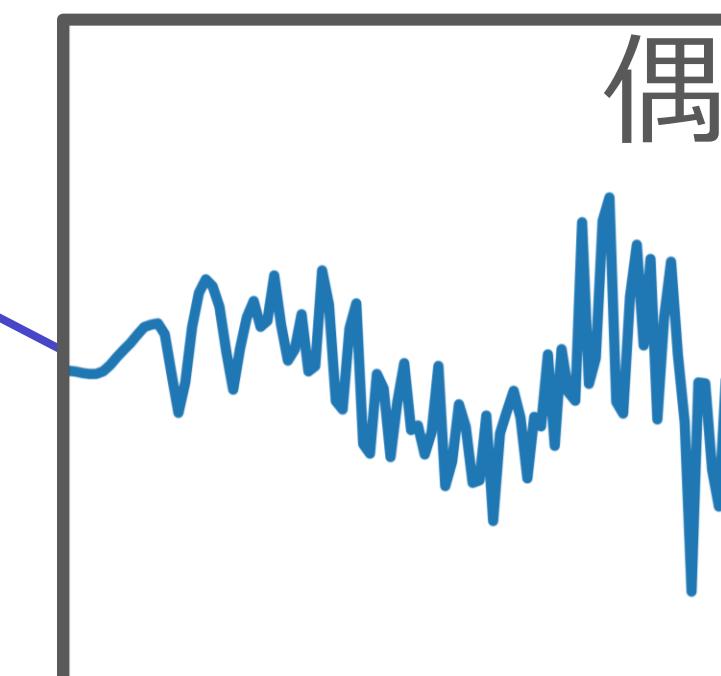
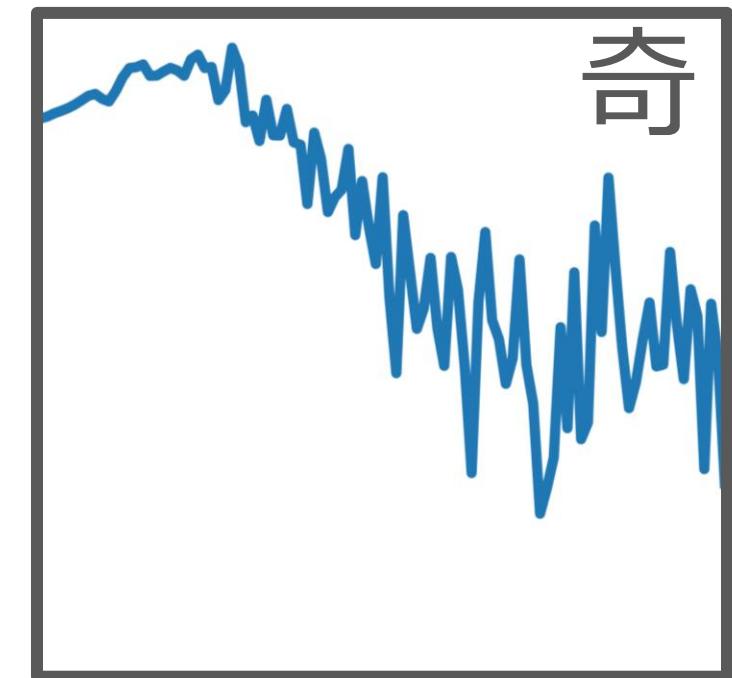
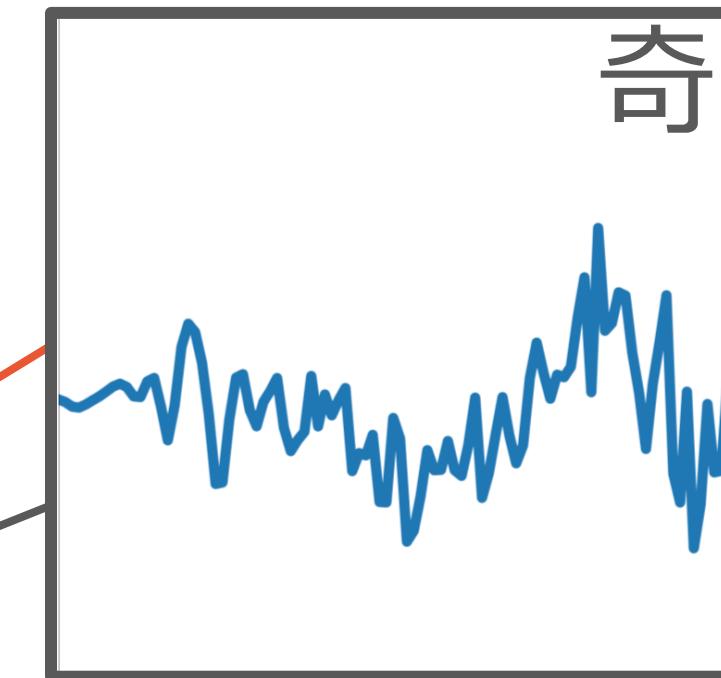
伝導度から量子干渉情報の推定

● ● 波動関数から学習した潜在空間

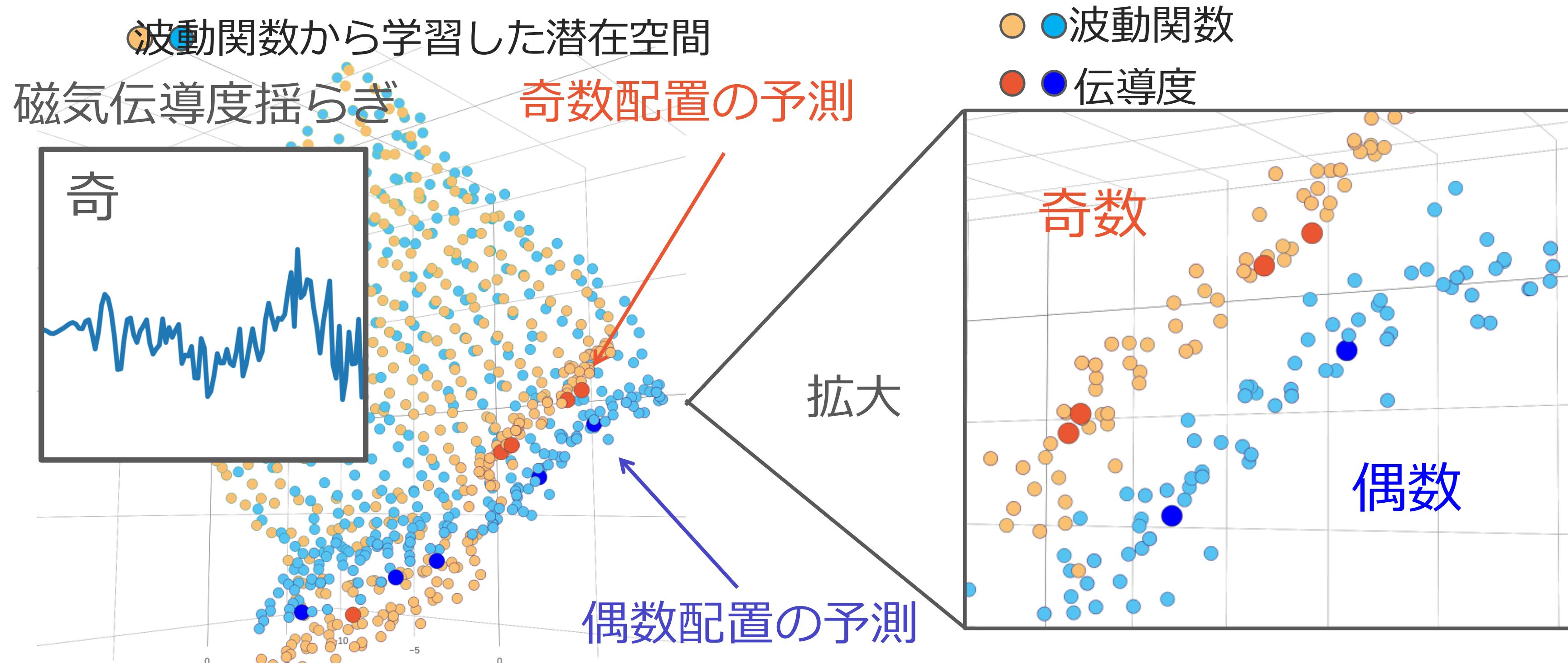
層の特定は一見不可能



伝導度揺らぎの磁場依存性



伝導度から量子干渉情報の推定

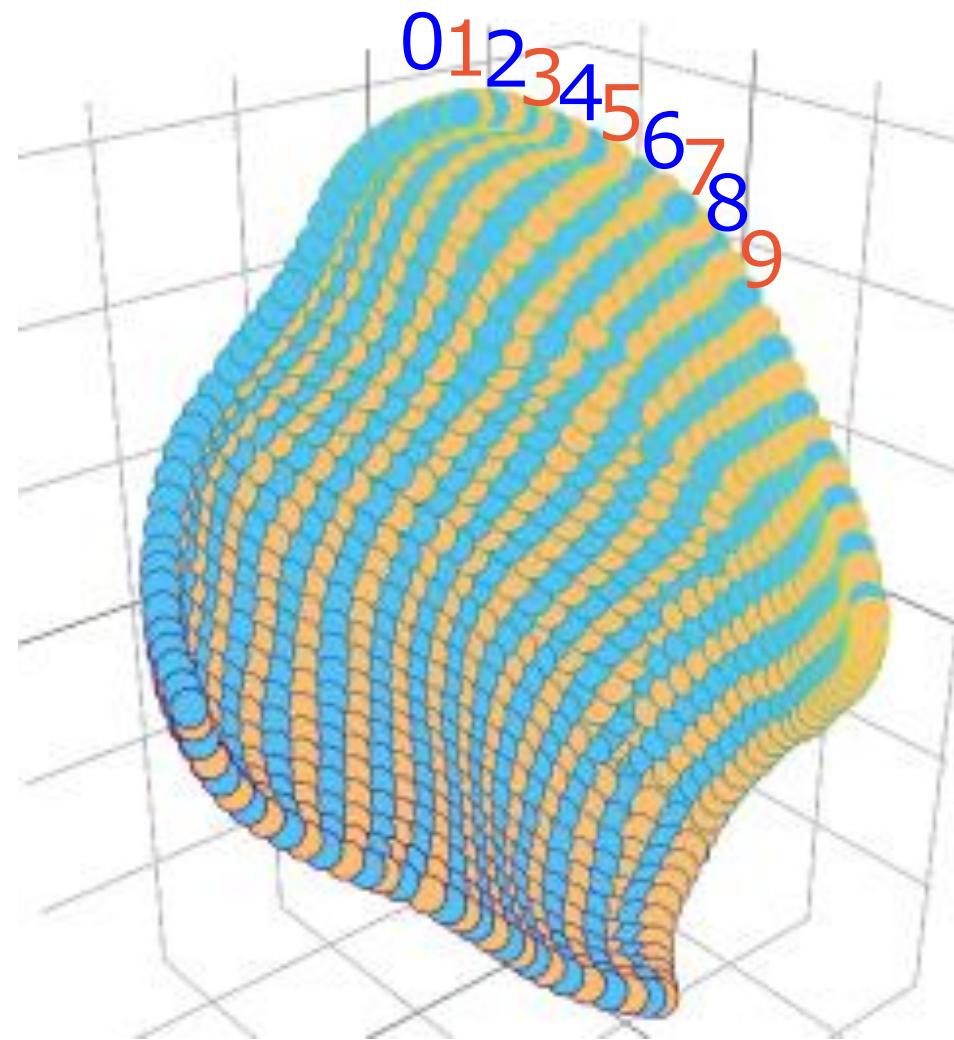


磁気伝導度の揺らぎは波動関数の干渉情報を内在している

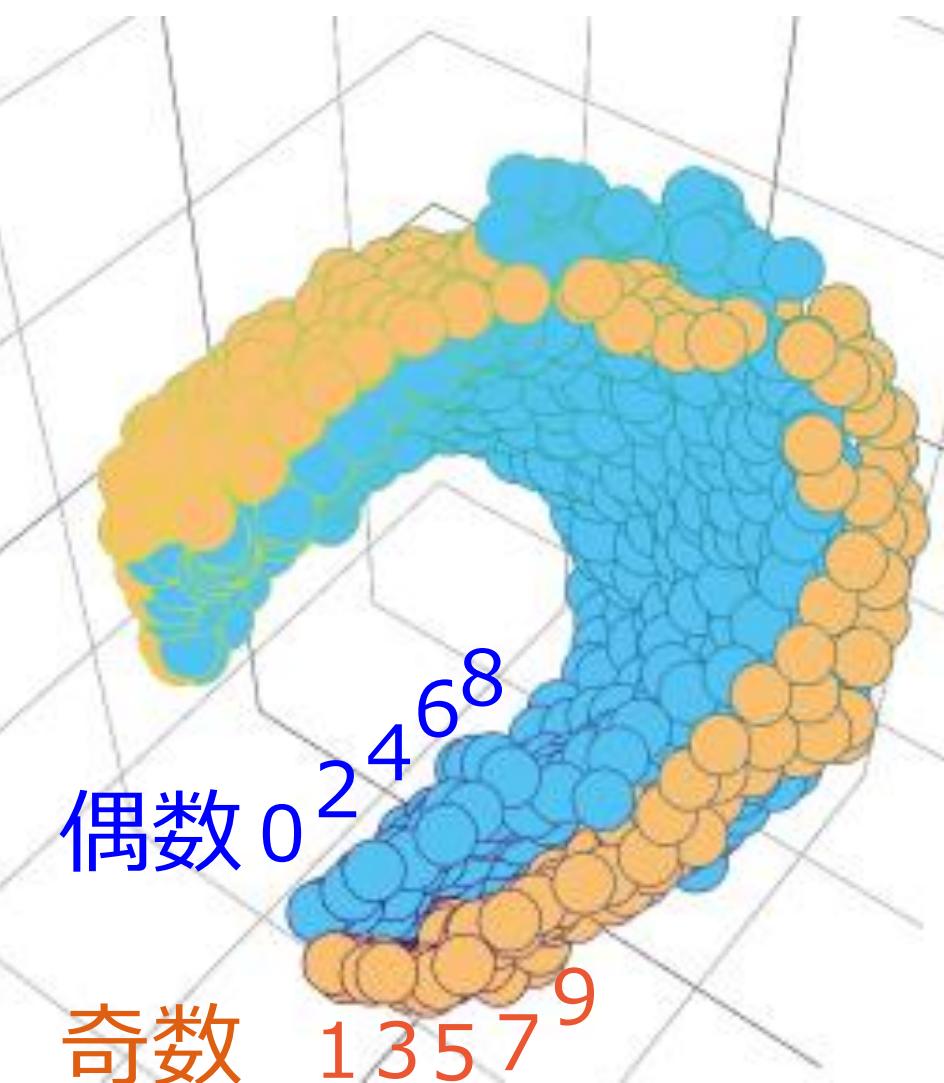
潜在空間中の幾何構造のまとめ

波動関数像のデータ構造

古典層構造

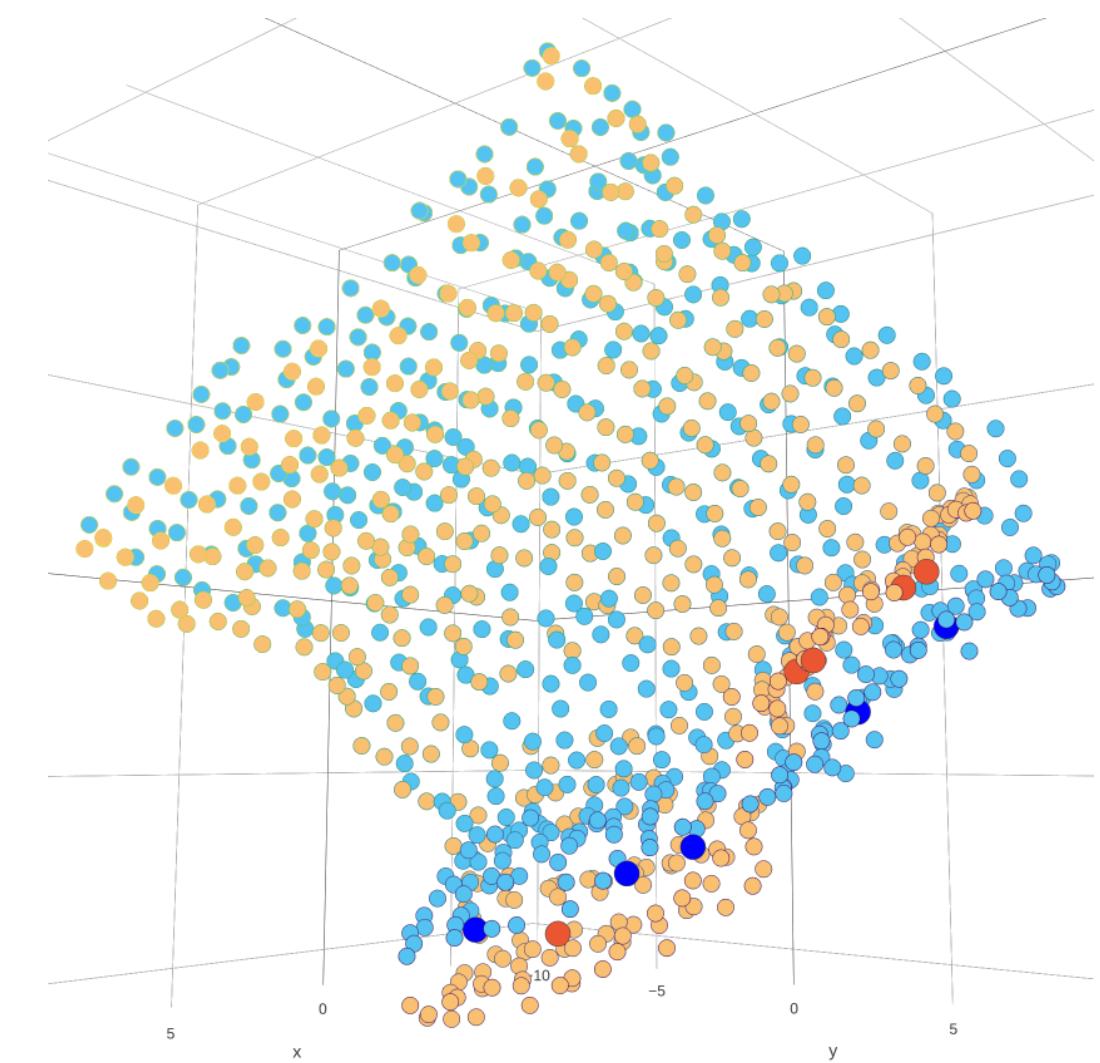


量子層構造



磁気伝導度の情報

量子干渉の予測

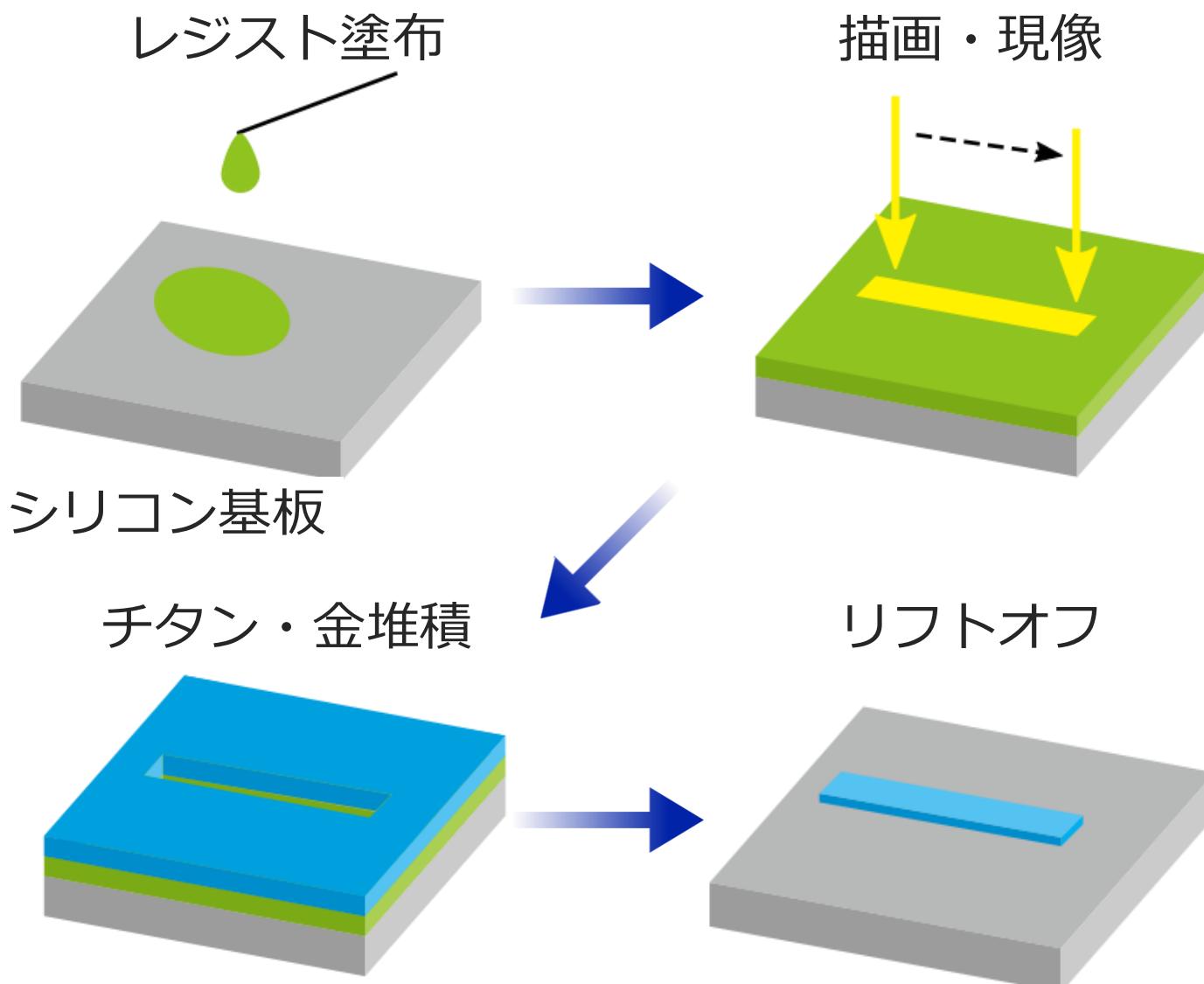


電子線描画による量子細線の作製

電子線描画装置

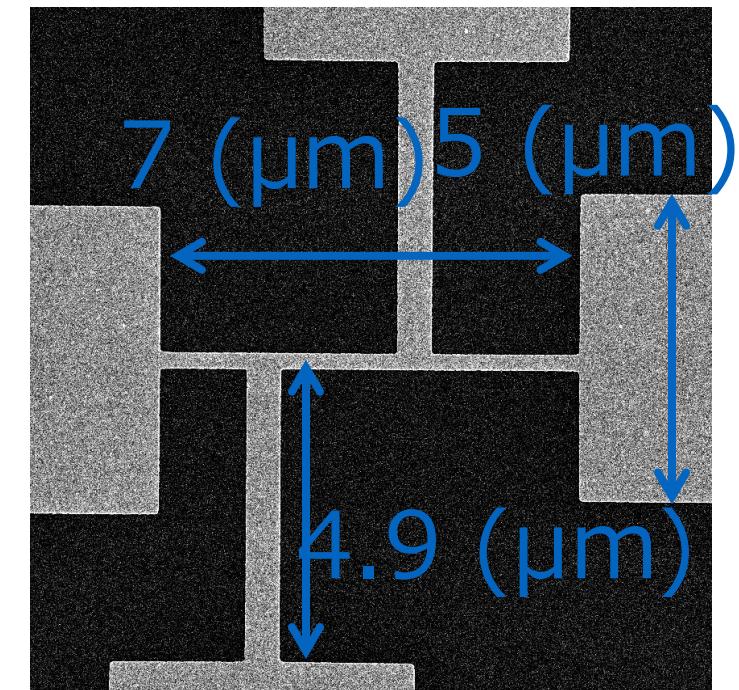


リフトオフ法

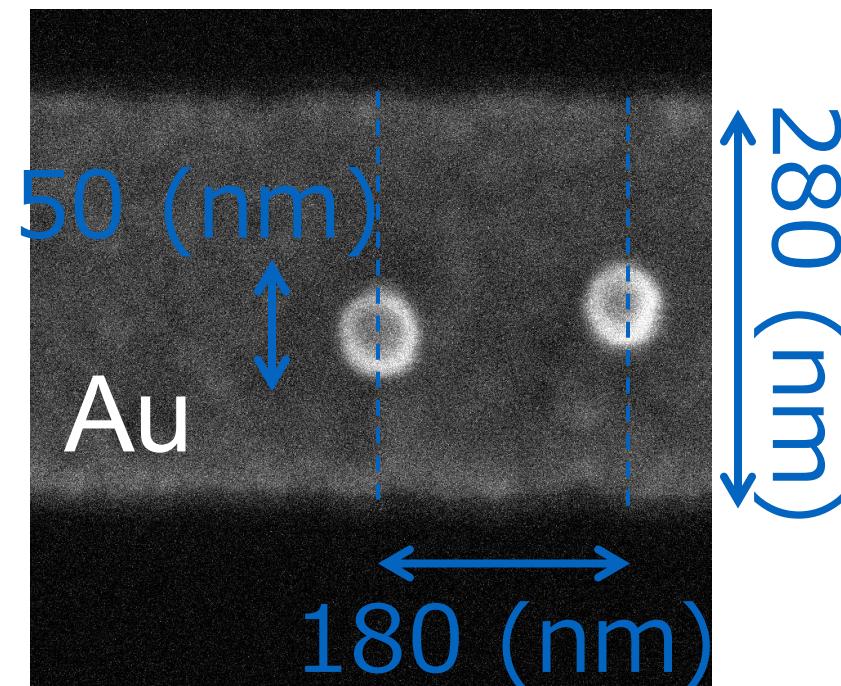


- リフトオフ法により幅280 nm の量子細線を作成
 - 厚さ25 nm の金とチタンを成膜
 - 直径50 nm のアンチドット欠損

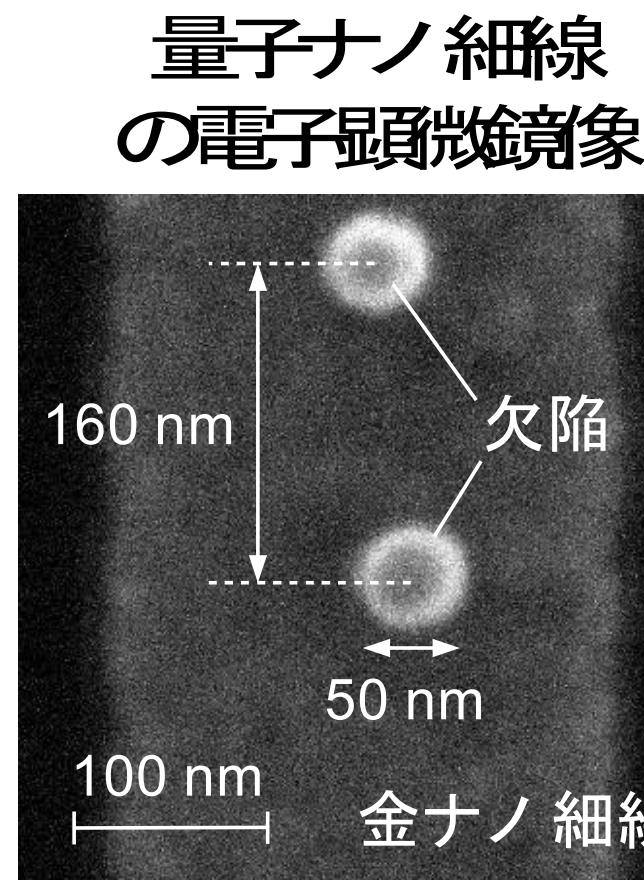
量子細線



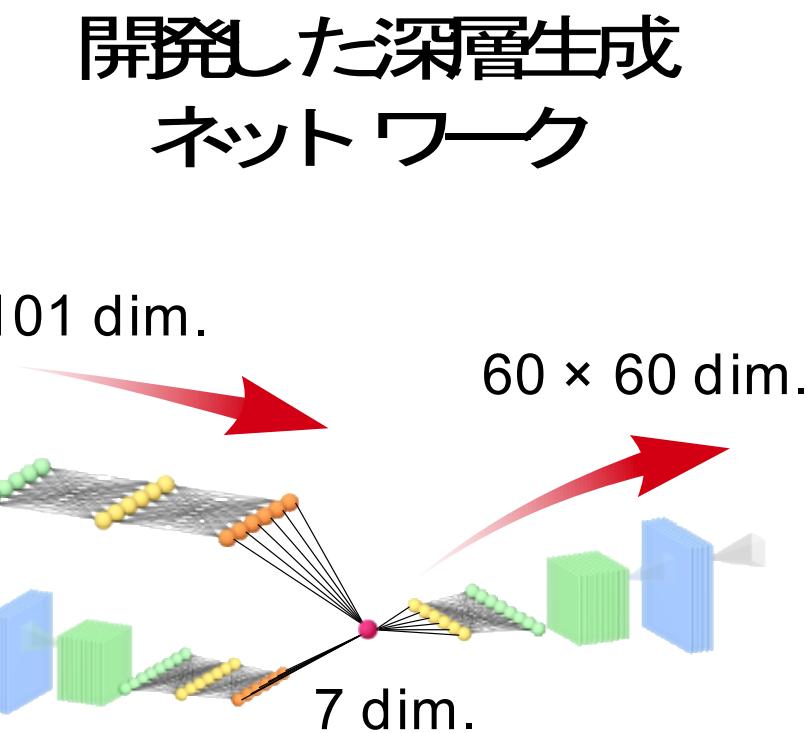
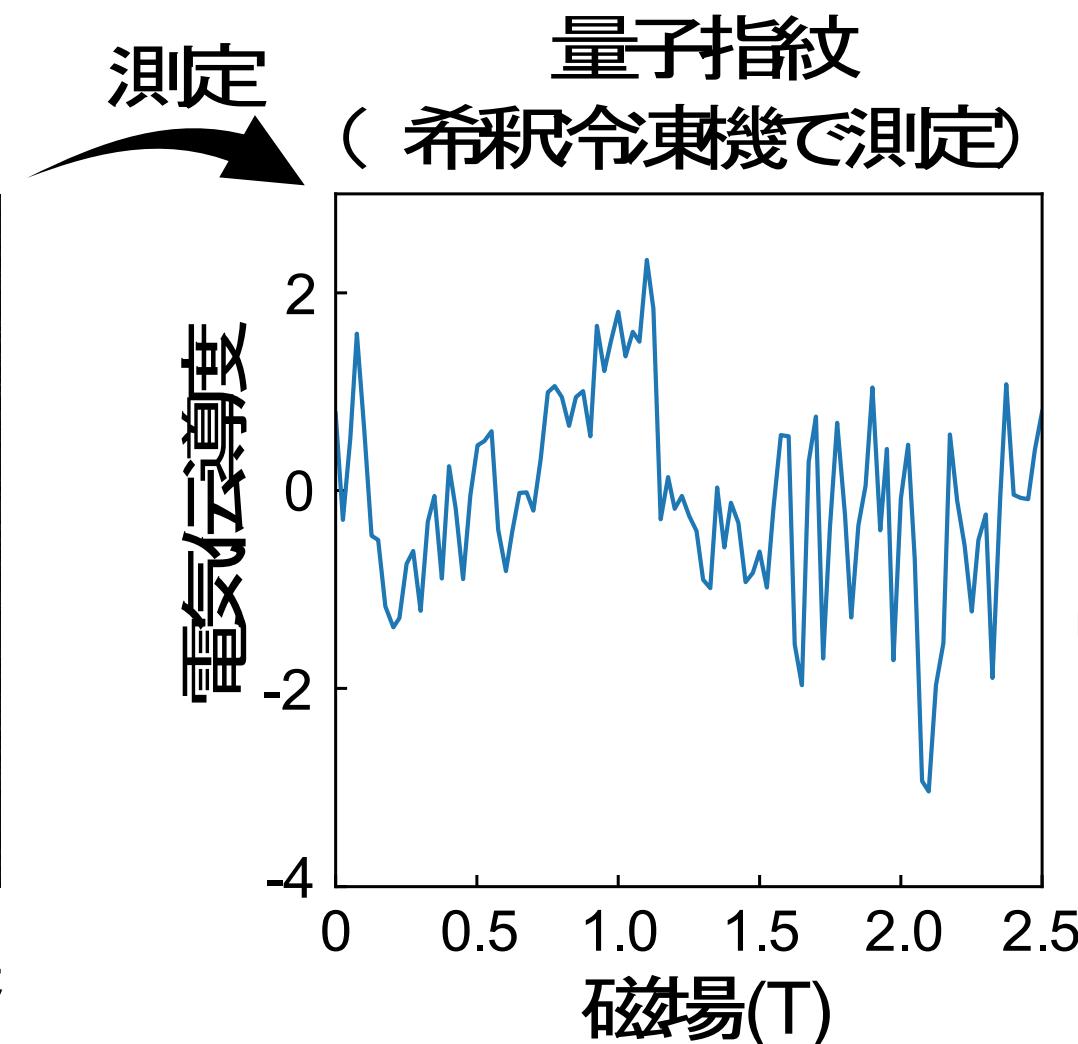
アンチドット欠損



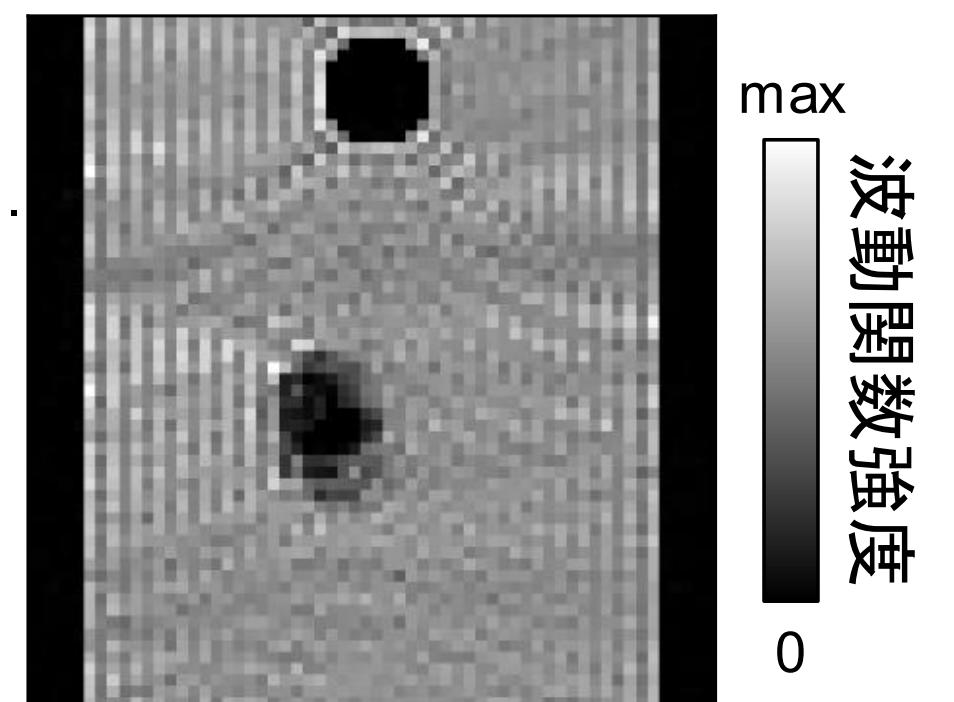
極低温実験：量子指紋の測定と解読



微細加工により作製



AIにより角張られた
内部構造

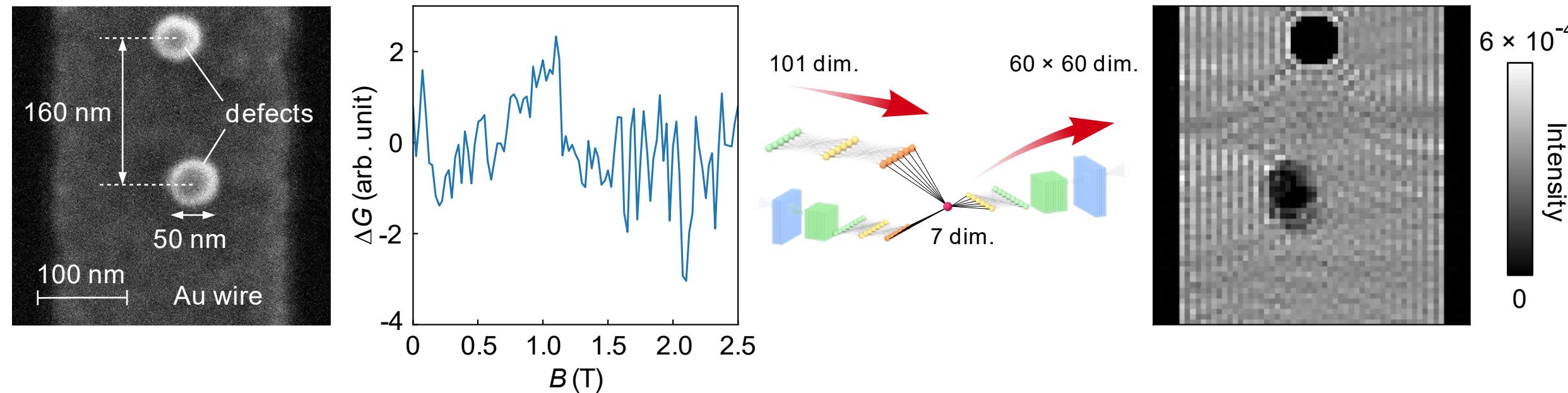


欠陥配置と量子干渉を復元

実験データからのミクロ情報復元にも成功

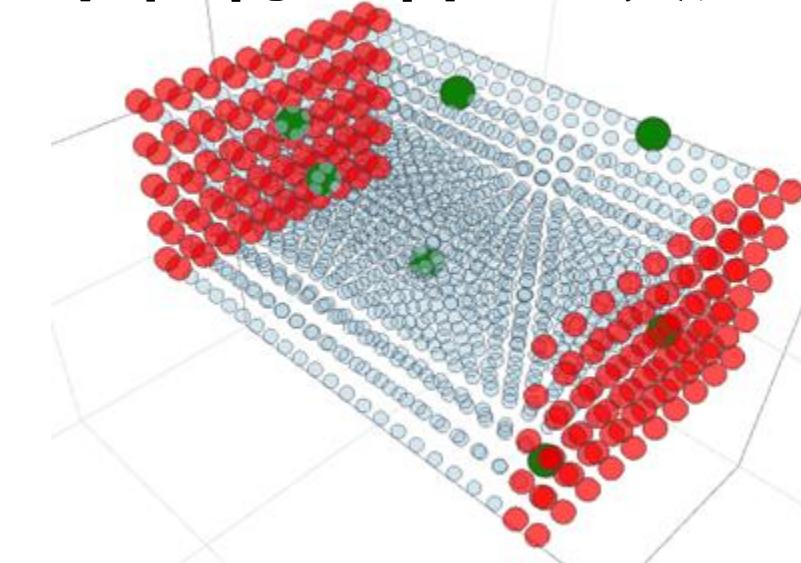
将来展望：AIによるナノ構造顕微鏡

(今回の研究) 2次元系の非破壊ナノ構造顕微鏡

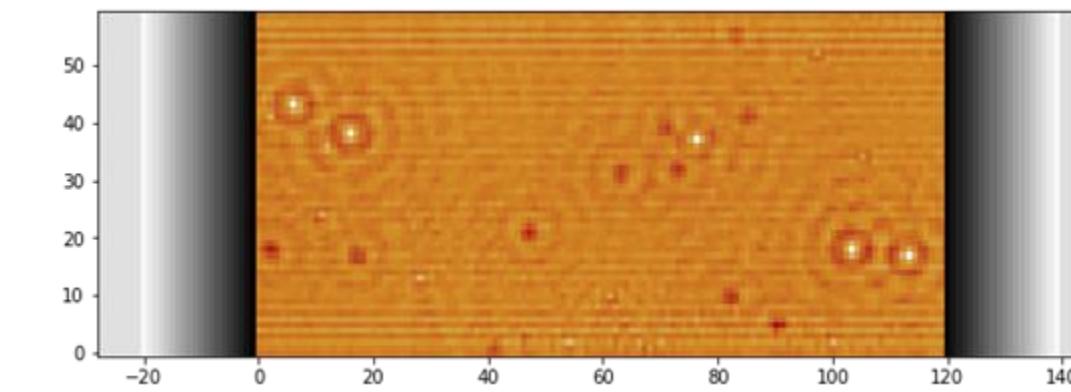


(将来展望) 3次元系の非破壊ナノ構造顕微鏡

不純物を含む3次元系



不純物分布の可視化



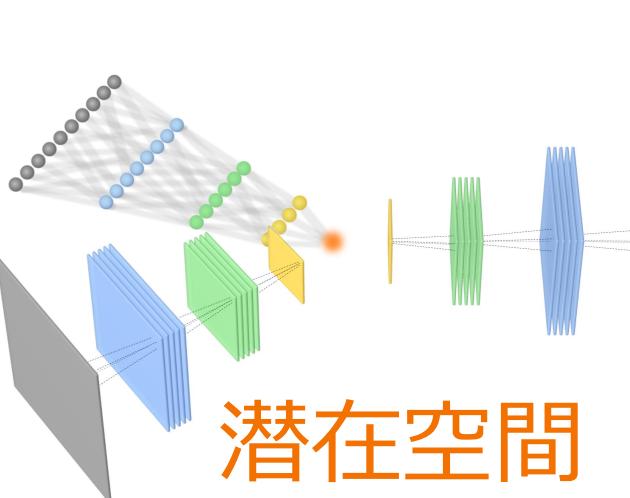
1つ目の話題：画像生成AIを応用したAIナノ構造顕微鏡

量子指紋からミクロ構造を復元するAIの開発に成功

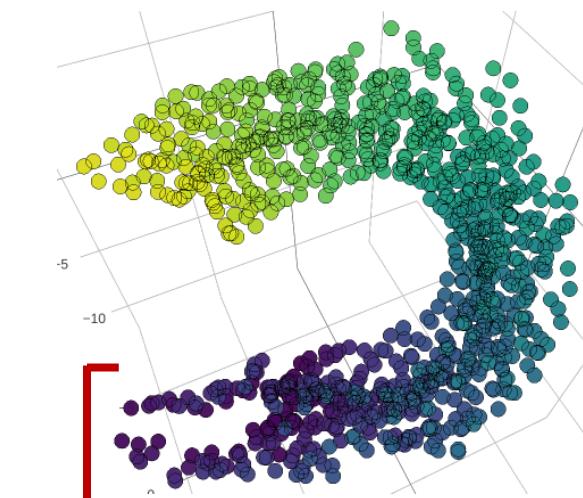
次元圧縮手法を用いたデータ構造の可視化と解析

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

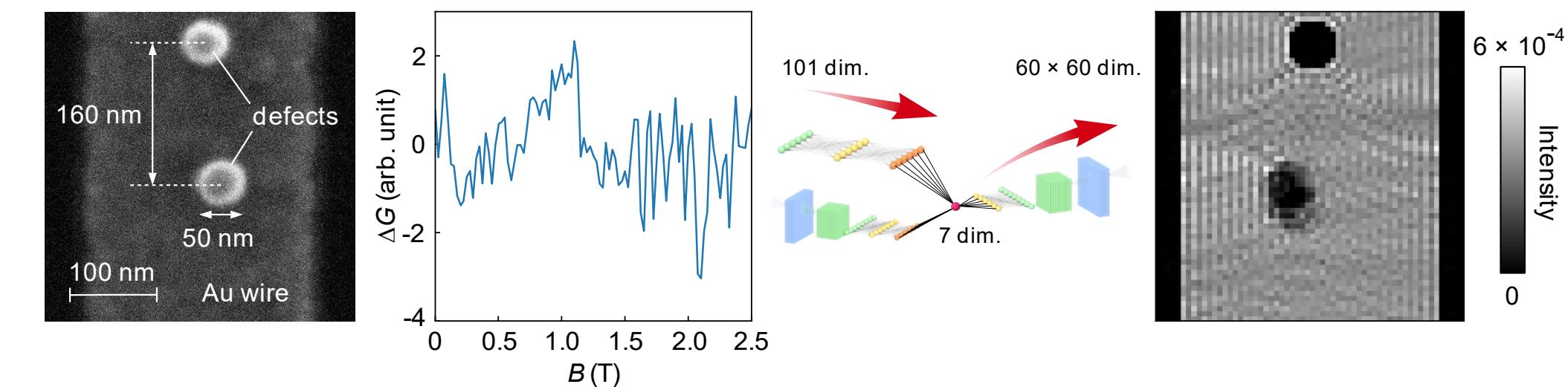


潜在空間の可視化



量子補正

実験的な原理実証



2つ目の話題：文章生成AIを応用した量子コンピュータの制御

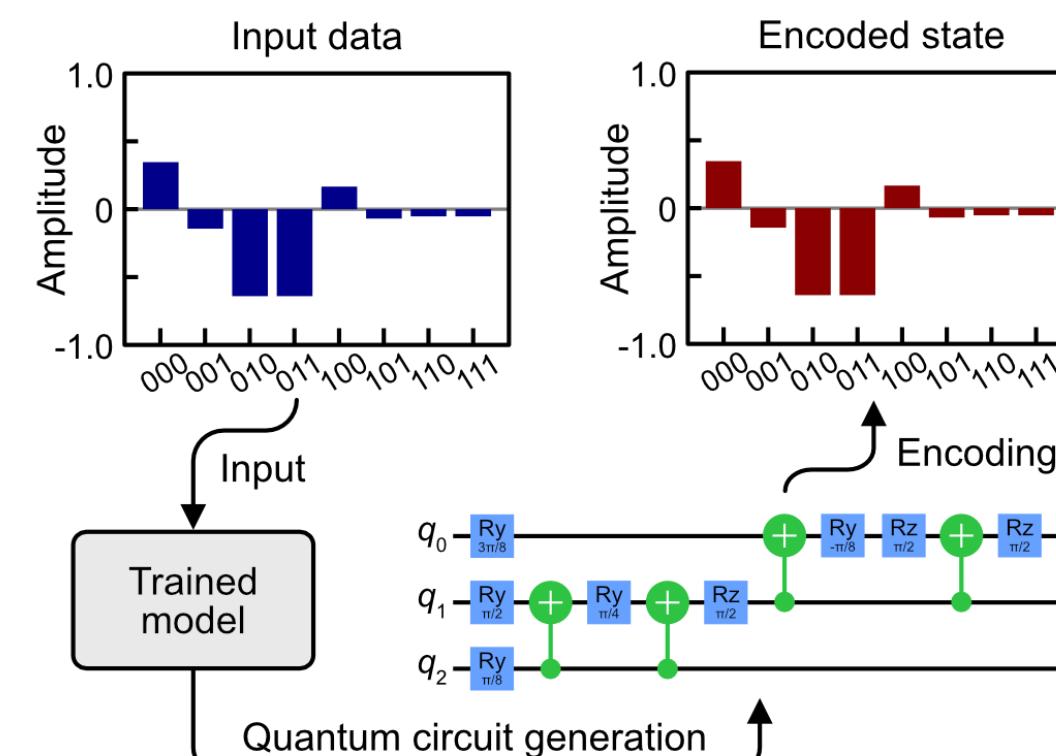
画像生成A

AIナノ構造顕微鏡

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).

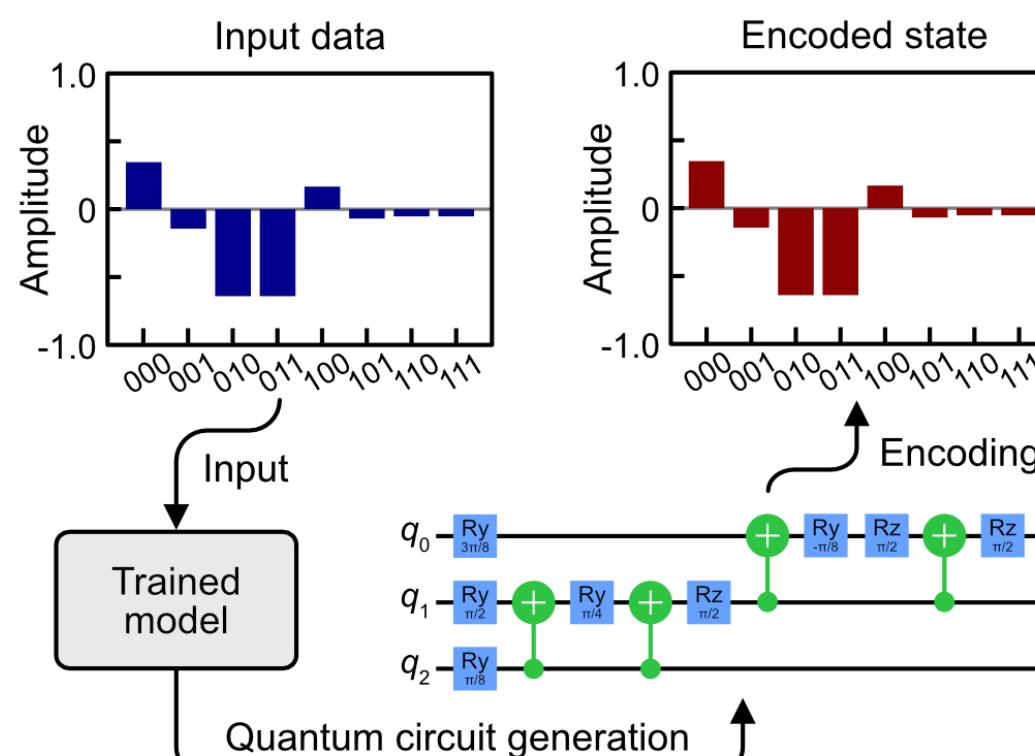
戦略最適化AI

量子計算の最適化

2つ目の話題：文章生成AIを応用した量子コンピュータの制御

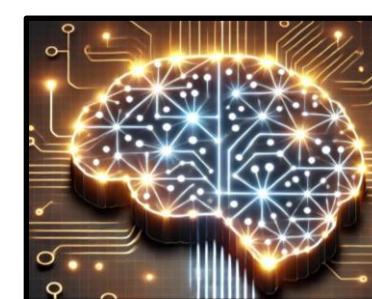
文章生成AI ▼ 量子コンピュータの制御

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

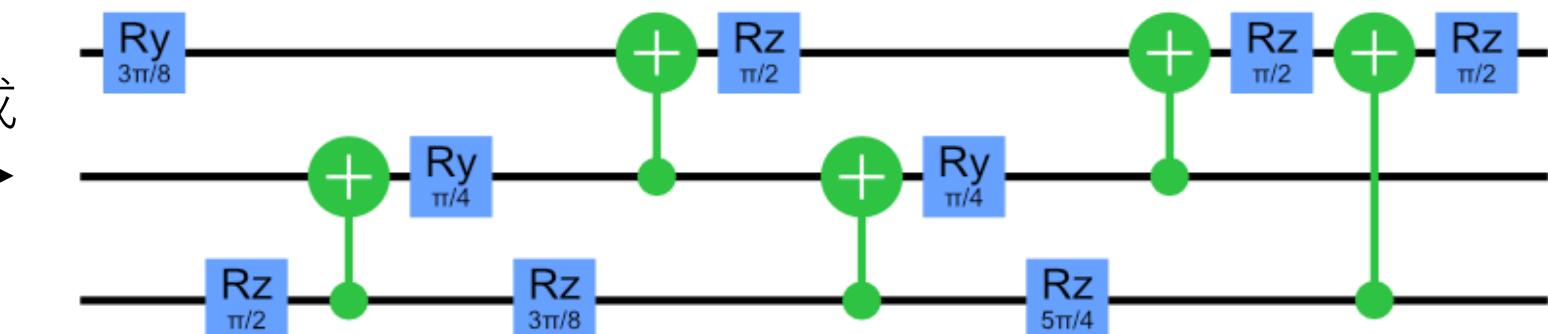


S. Daimon and Y. Matsushita, *Physical Review Applied*
22, L041001 (2024).

▶ 量子コンピュータにおける量子計算

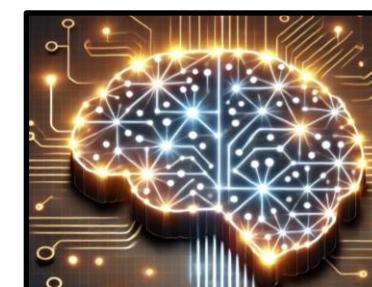


生成



(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-

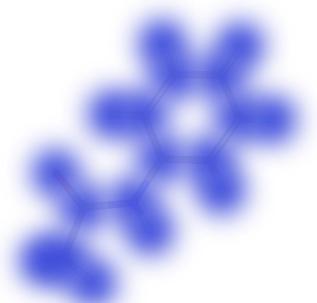
(文法に従って単語が並ぶ)

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



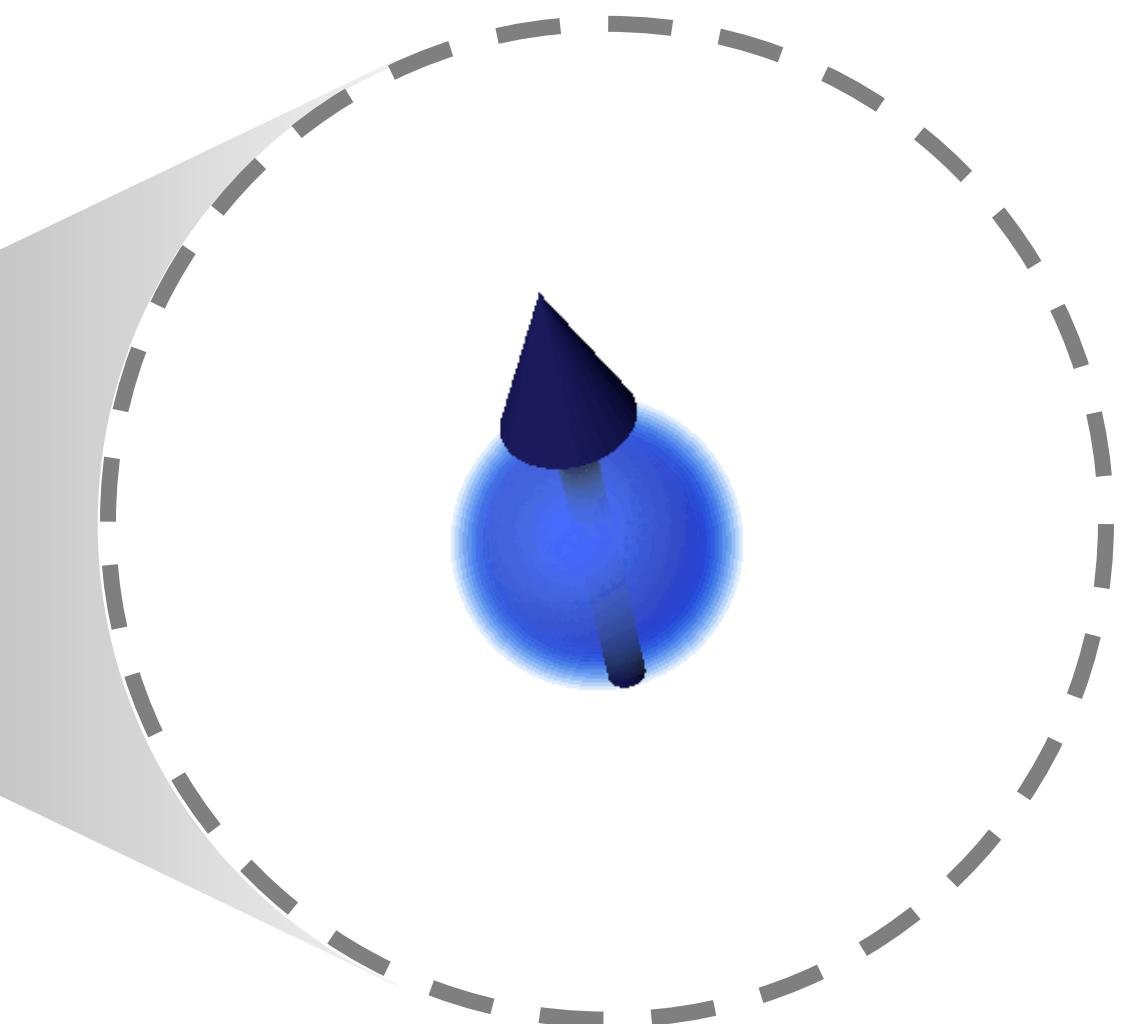
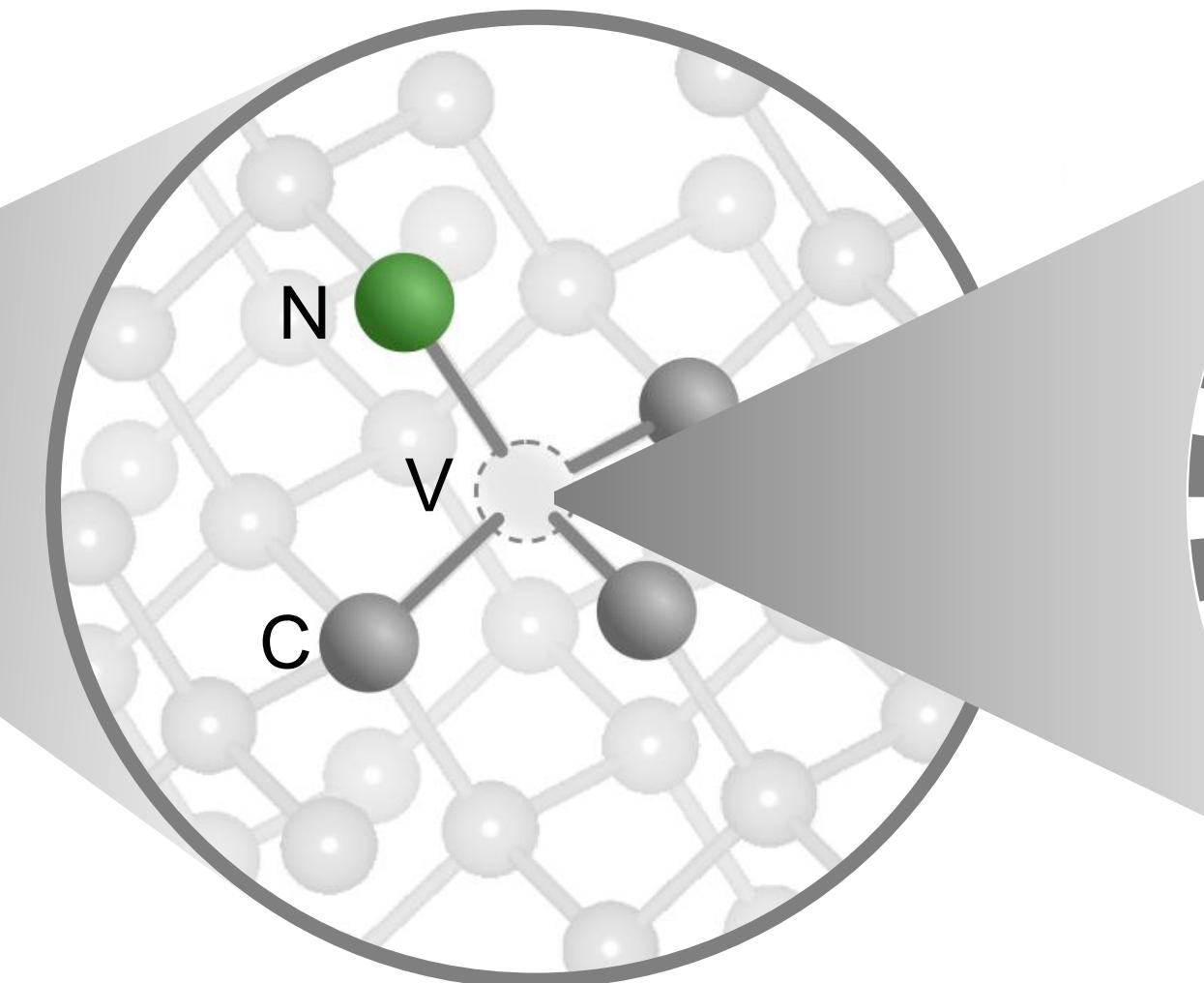
4. まとめ

量子材料を用いた量子コンピュータ

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

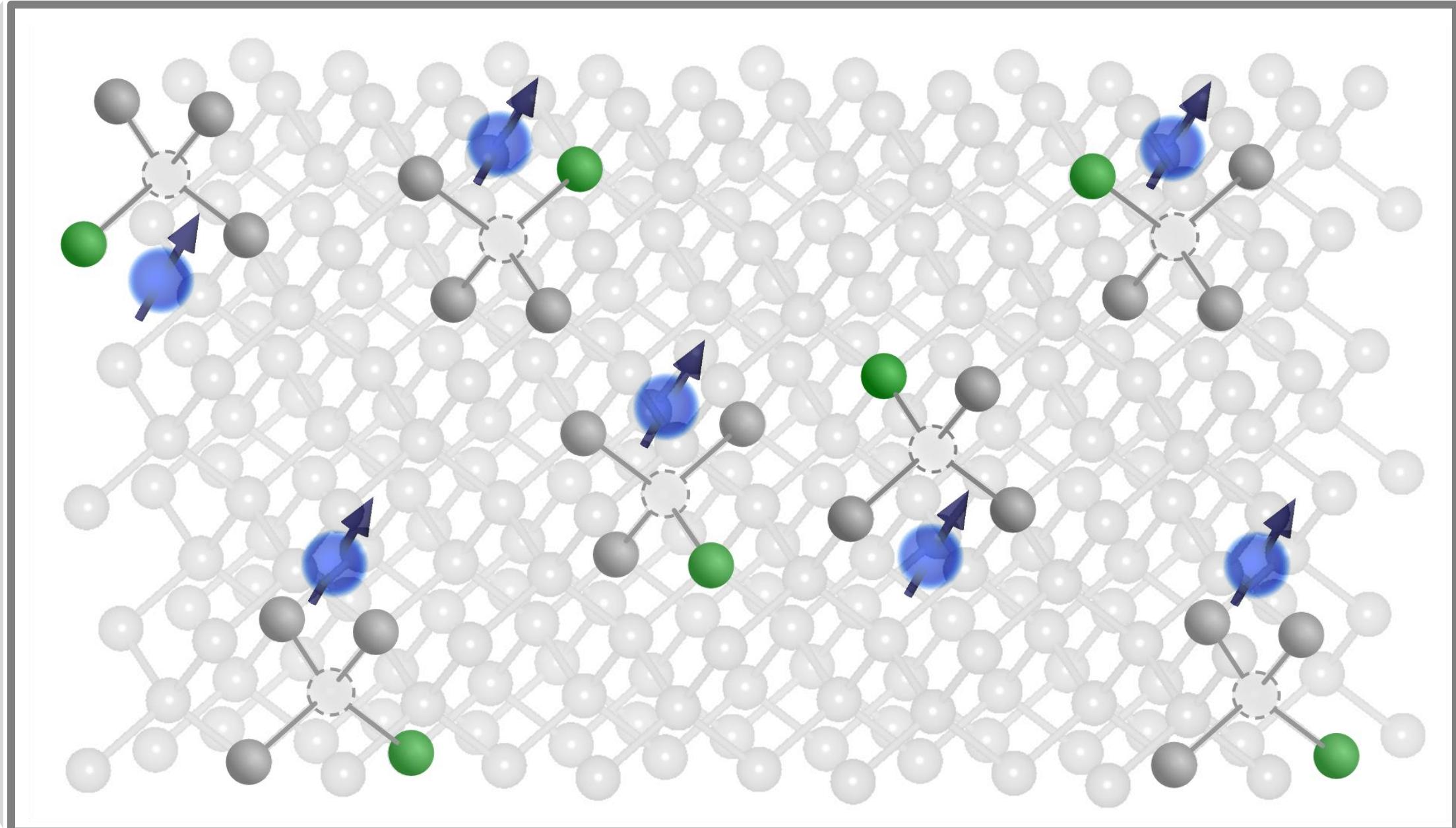
量子ビットとして利用

量子材料を用いた量子コンピュータ

ダイヤモンド



複数の窒素-空孔中心 = 多数の量子ビット

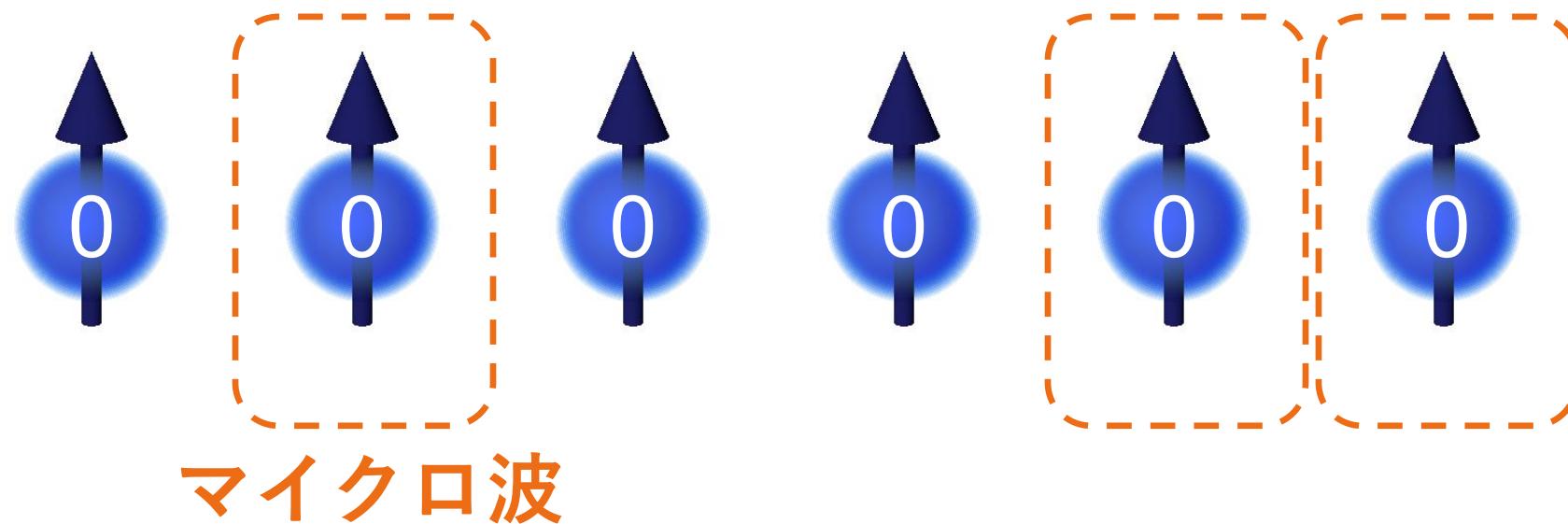


高崎研は量子ビームを用いて
窒素-空孔中心を導入する
世界トップクラスの技術をもつ

ダイヤモンドを量子コンピュータとして応用可能

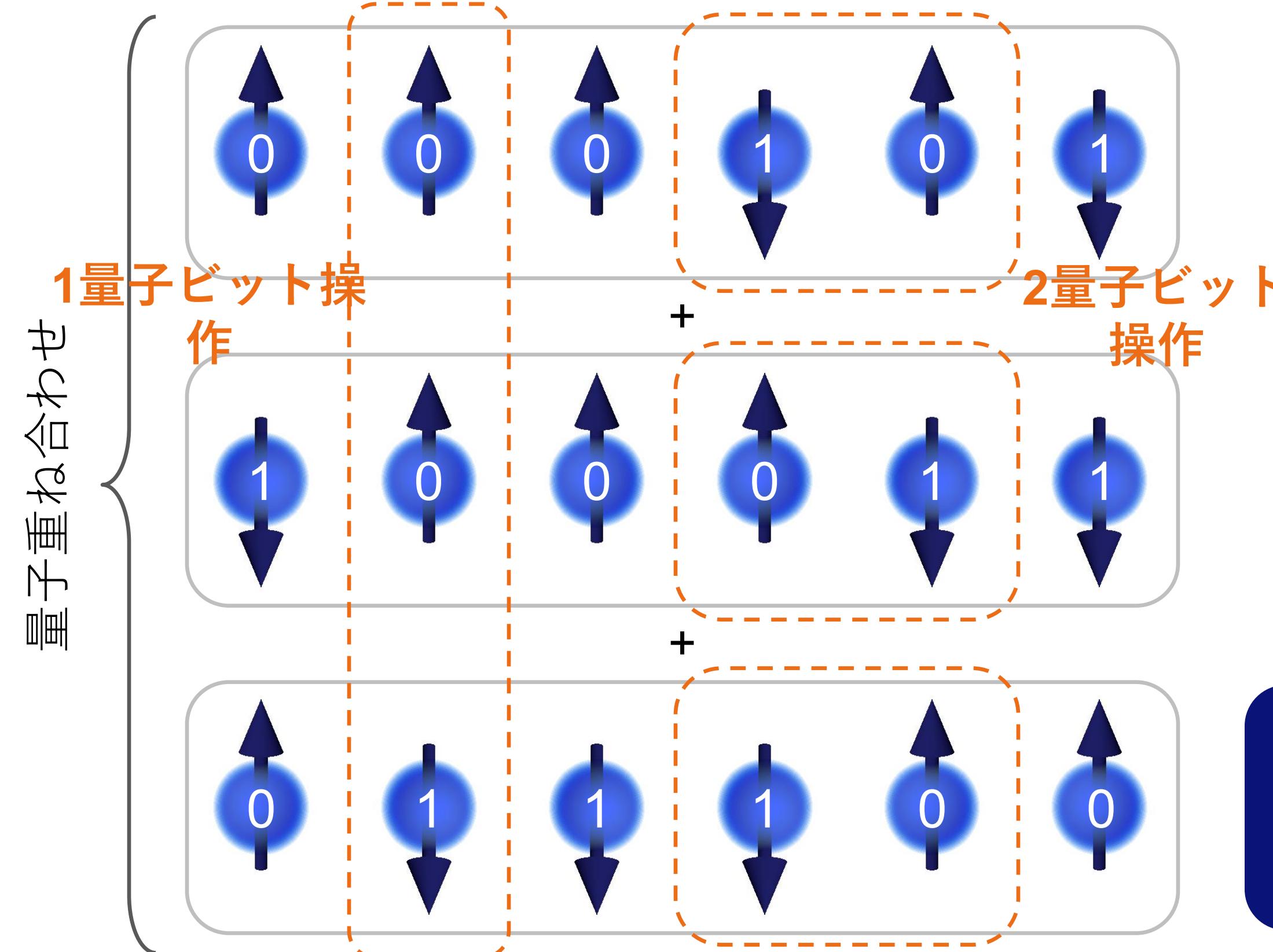
量子ビットを用いた計算

複数の量子ビットがつくる量子状態



量子ビットを用いた計算

複数の量子ビットがつくる量子状態



超並列計算

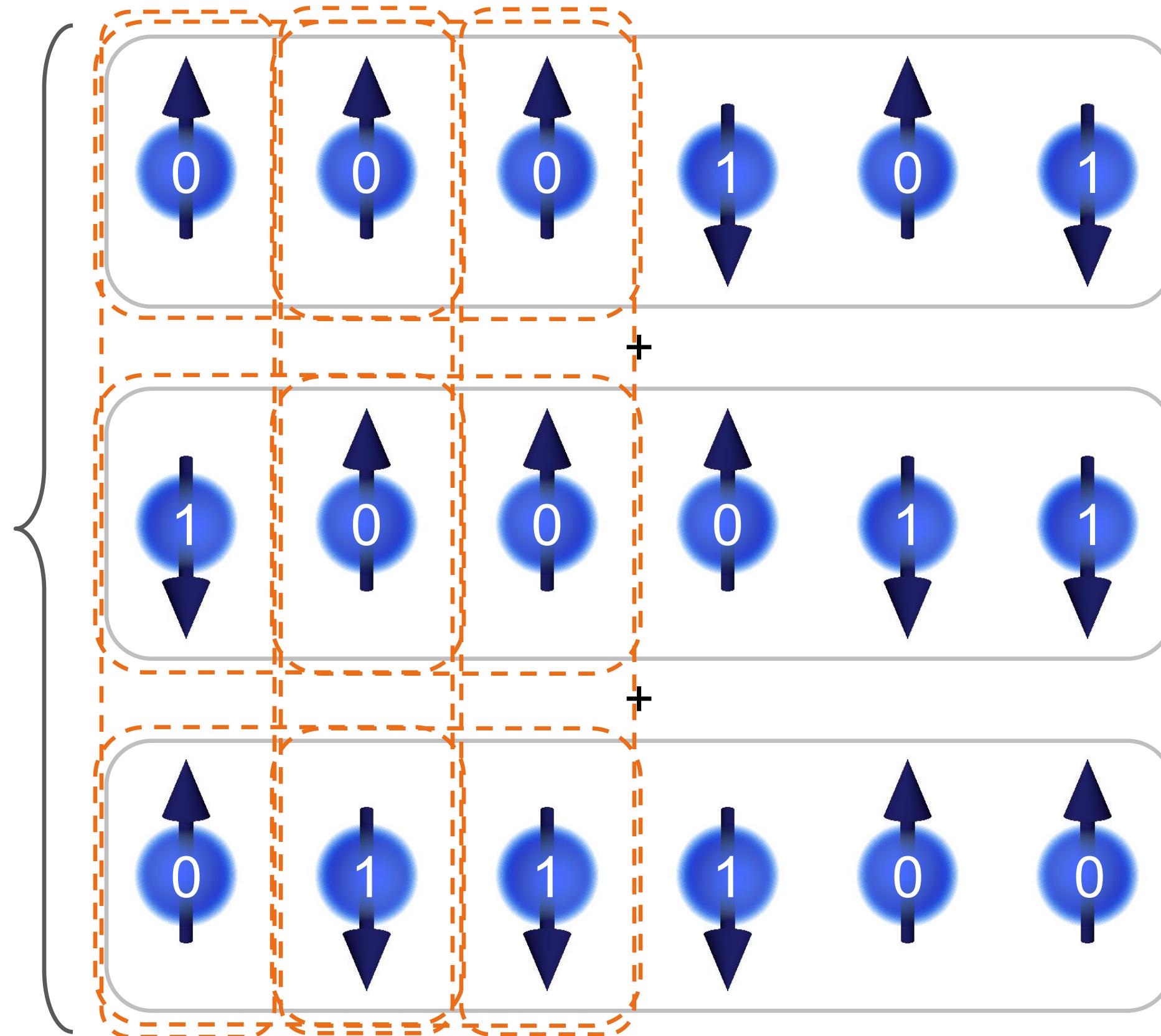
重ね合った複数の状態
を同時に計算

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

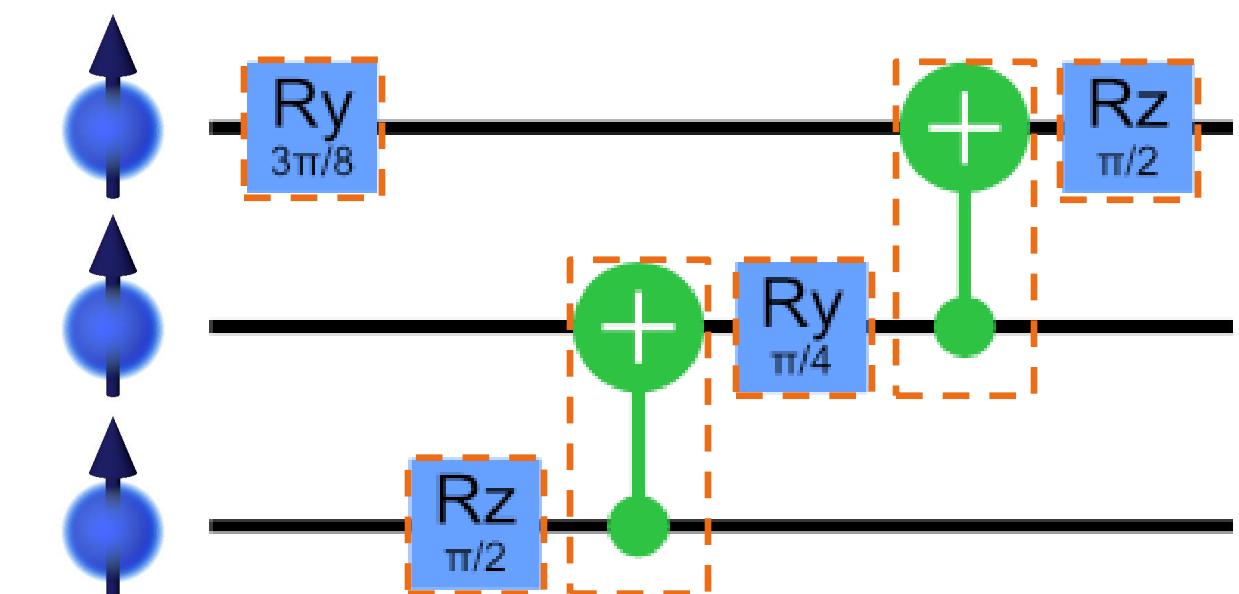
量子ビットを用いた計算

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）



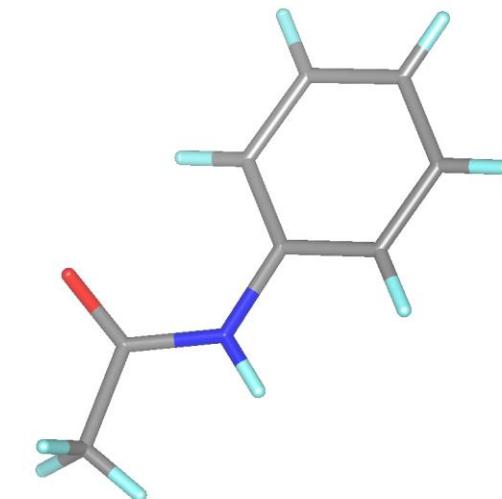
複雑な量子状態を用意できる

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

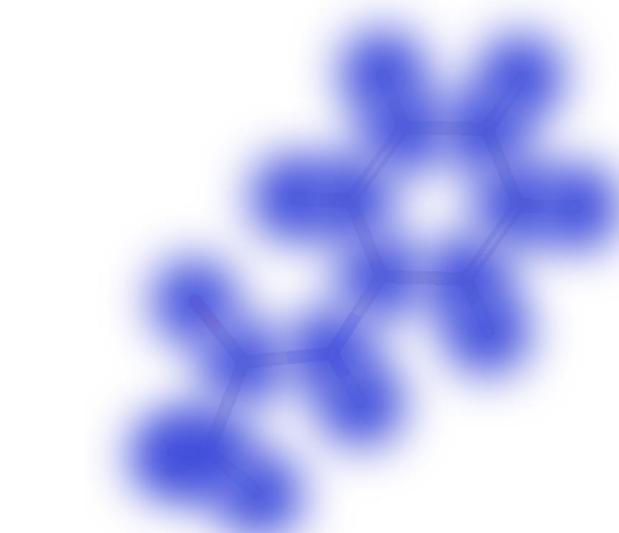
なぜ複雑な量子状態が必要か（創薬の例）

薬を構成する分子

薬の分子構造の例



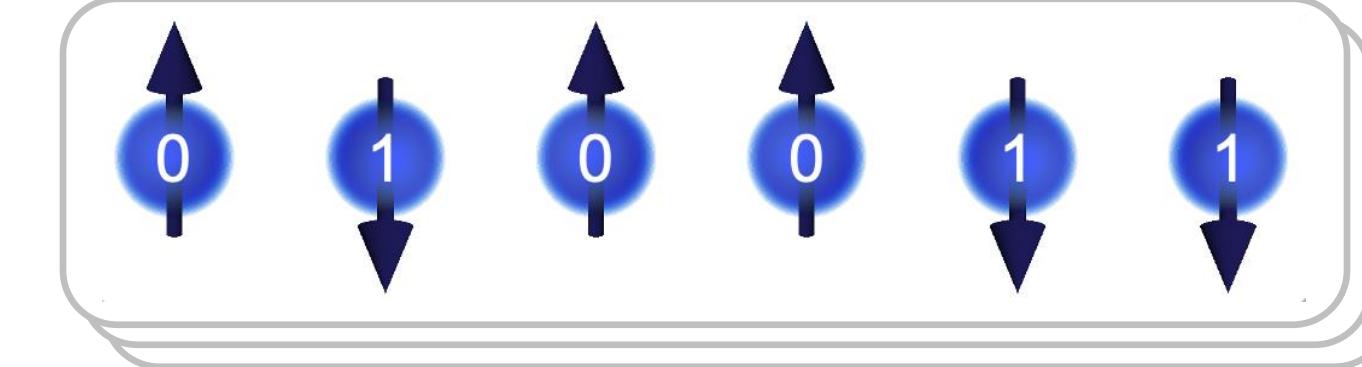
電子の雲
(複雑な量子状態)



- 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

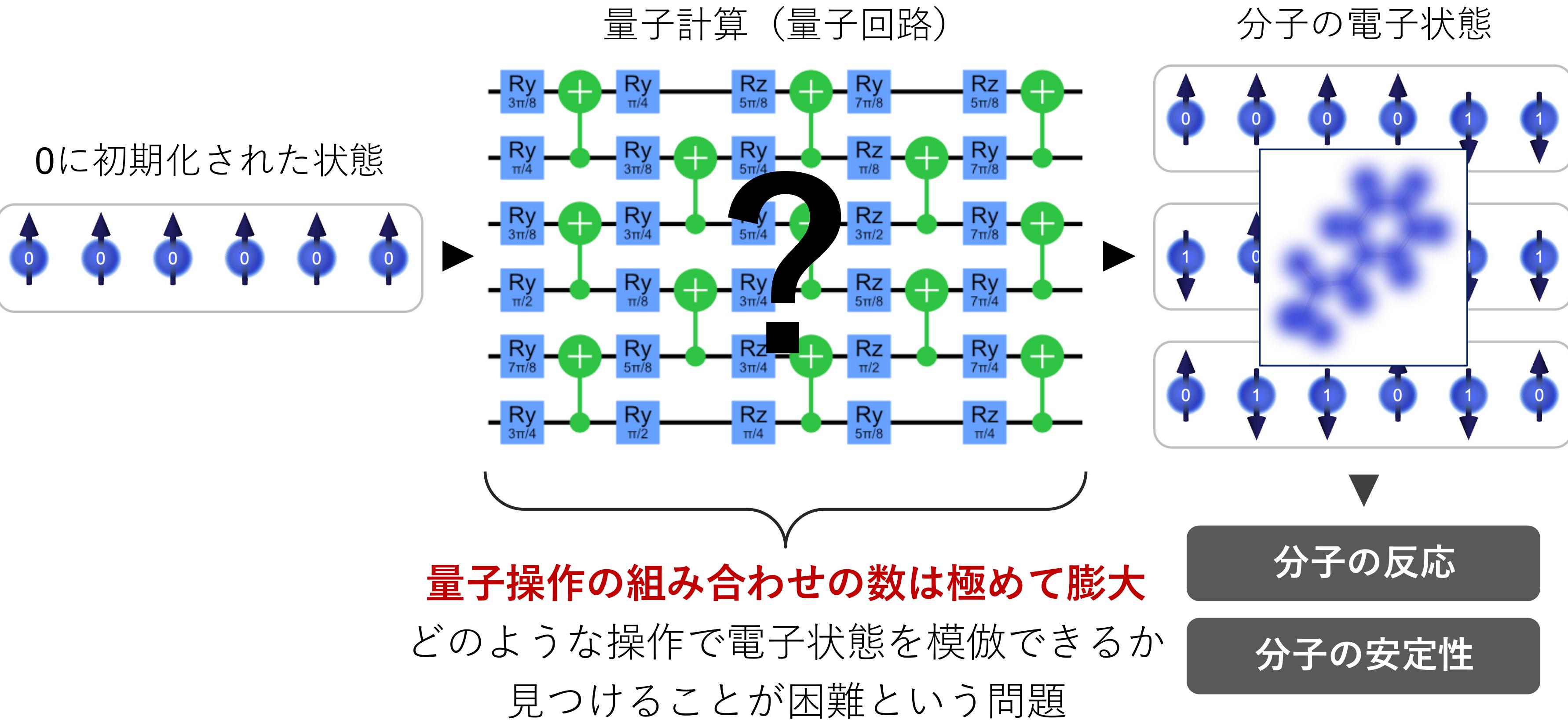
量子ビットの量子状態



- 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

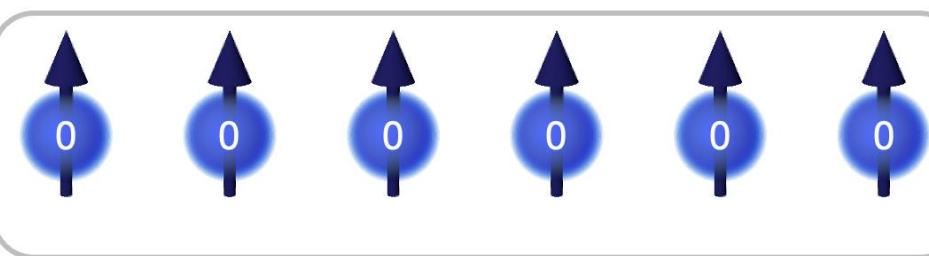
薬などを構成する分子の電子状態を量子ビットで表現できれば
薬の効果の検証や新しい薬の開発が可能

なぜ複雑な量子状態が必要か（創薬の例）

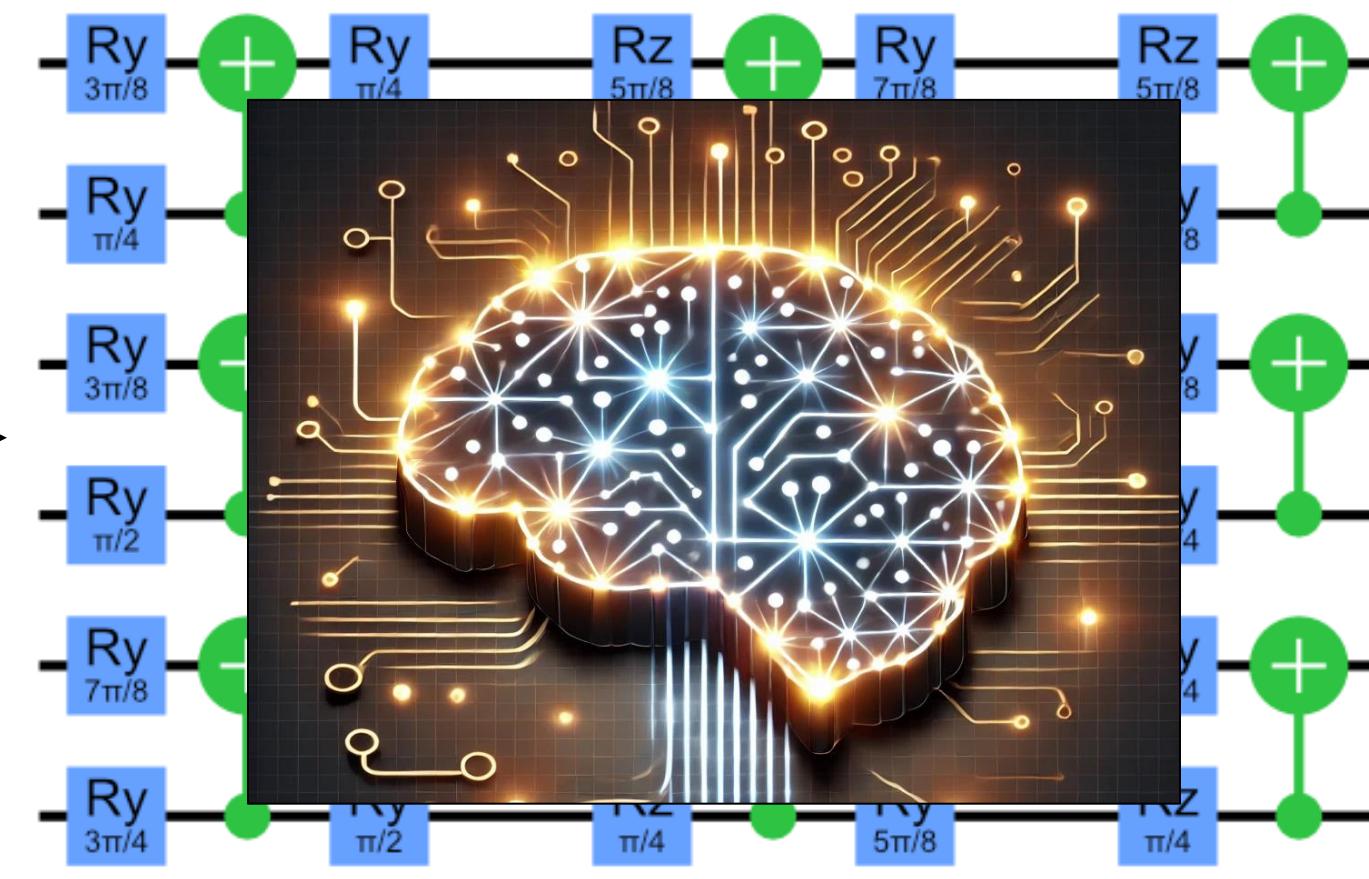


本研究：AIを用いた量子計算プロセスの自動生成

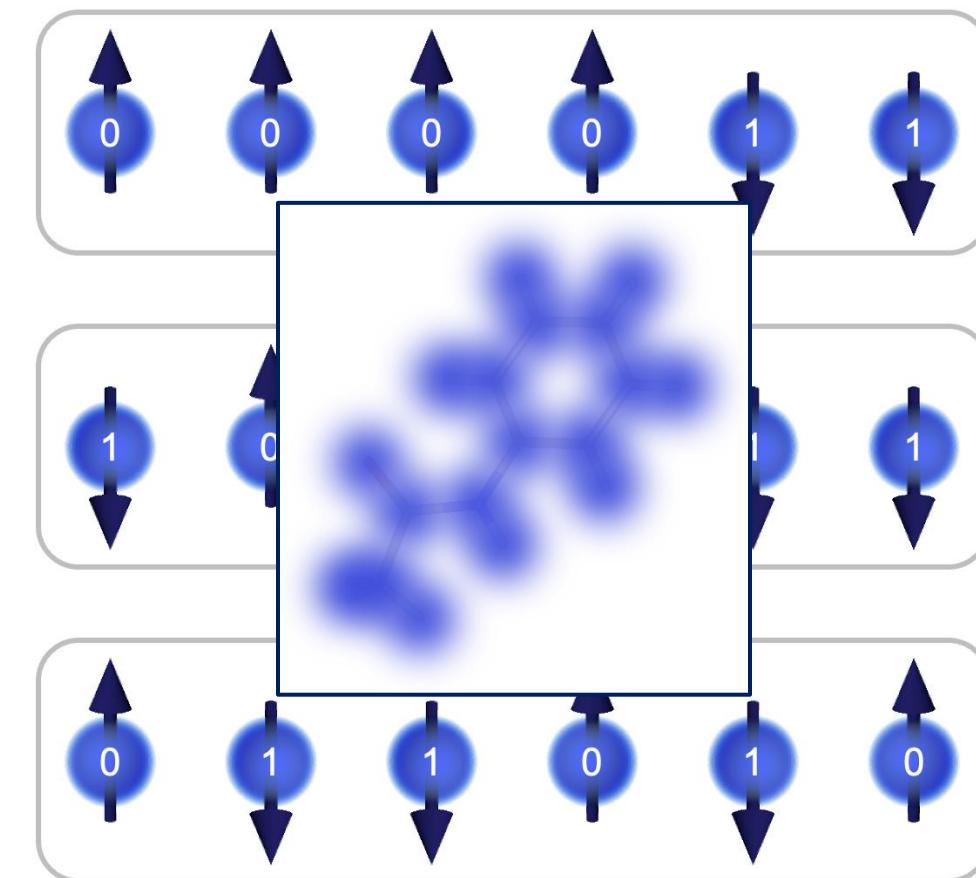
0に初期化された状態



量子計算（量子回路）



分子の電子状態

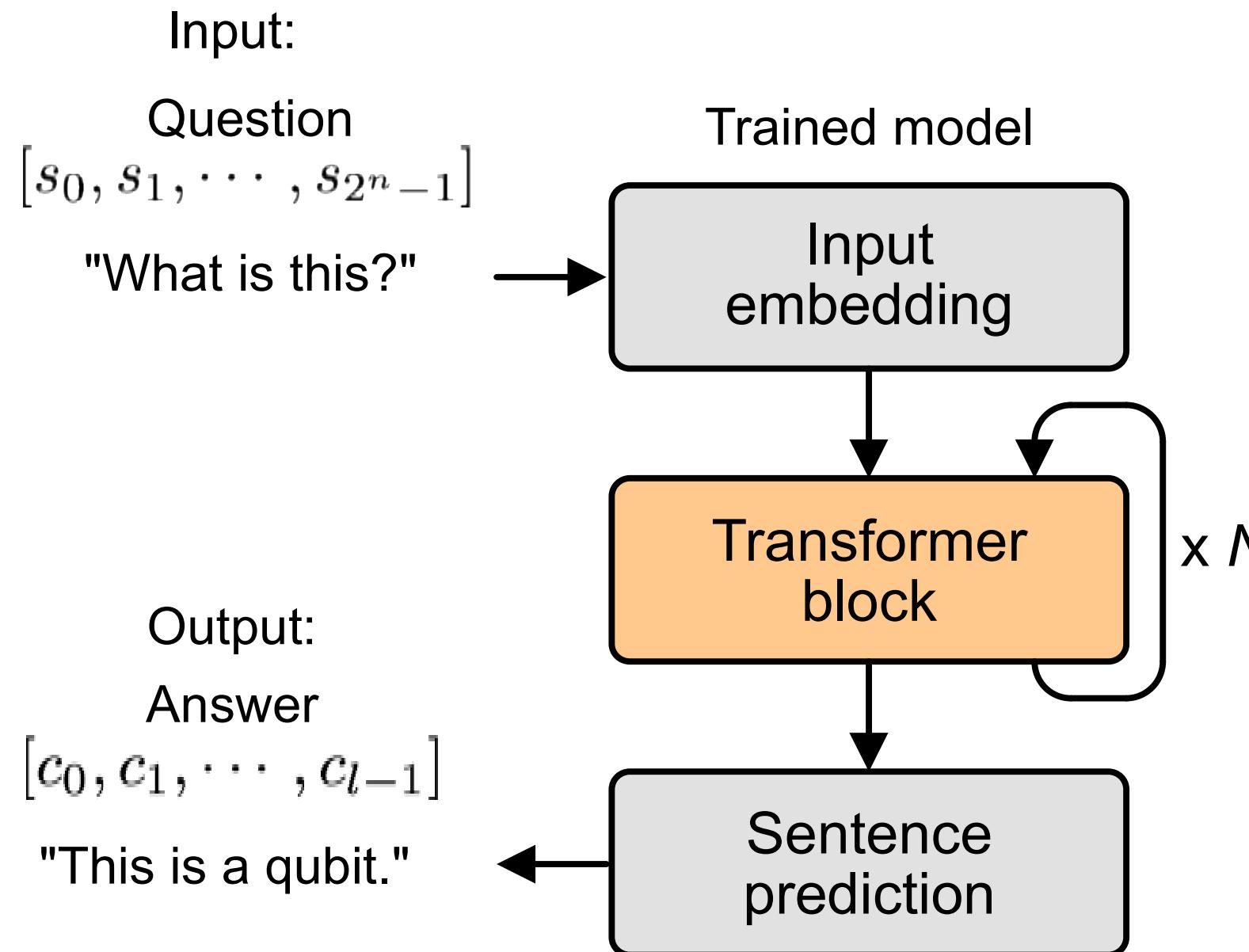


組み合わせの処理を得意とするAIに量子回路を生成させることで問題を解決

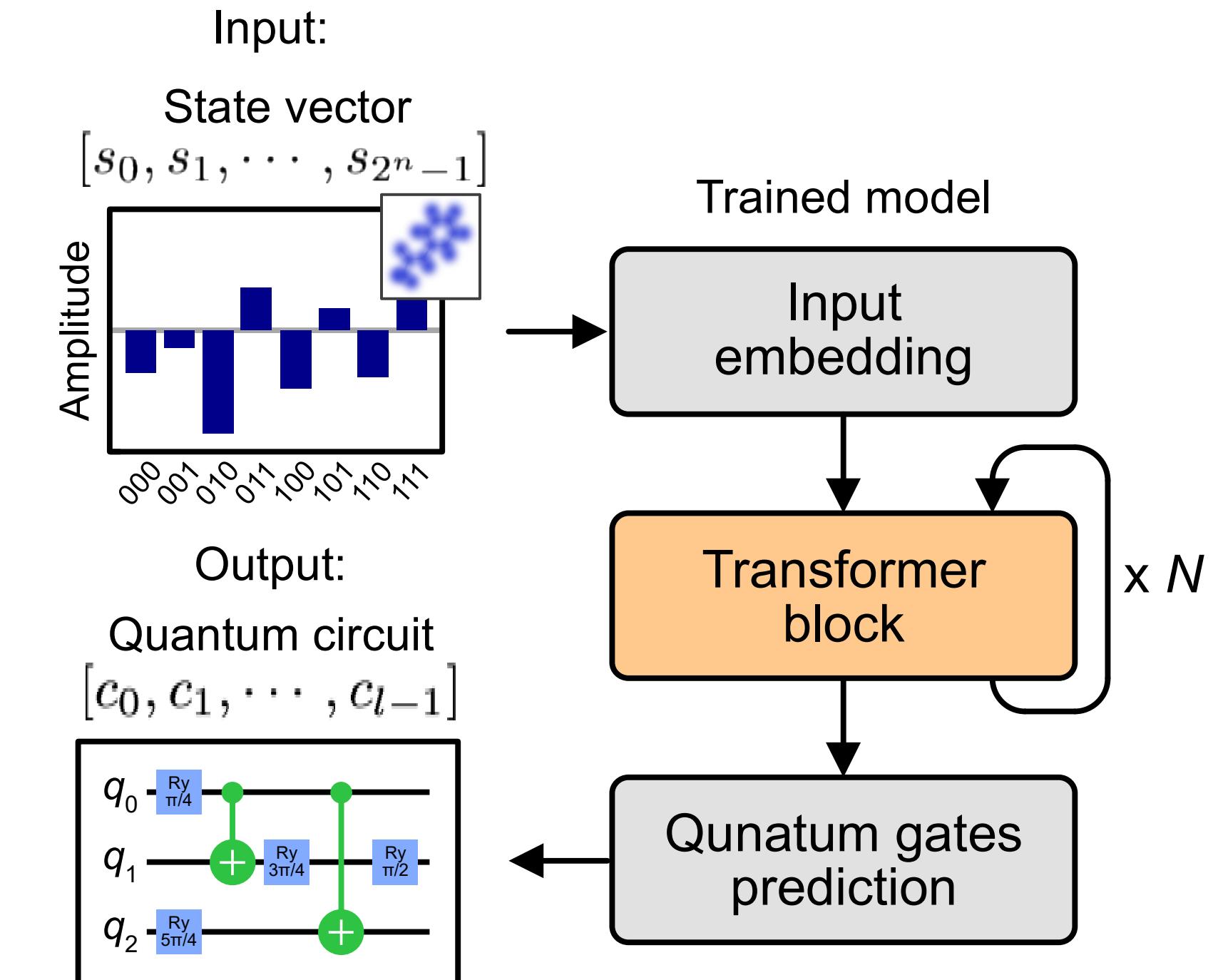
文章生成AIの技術を応用して、量子計算プロセスを自動生成するAIを開発

本研究のアイデア

自然言語処理

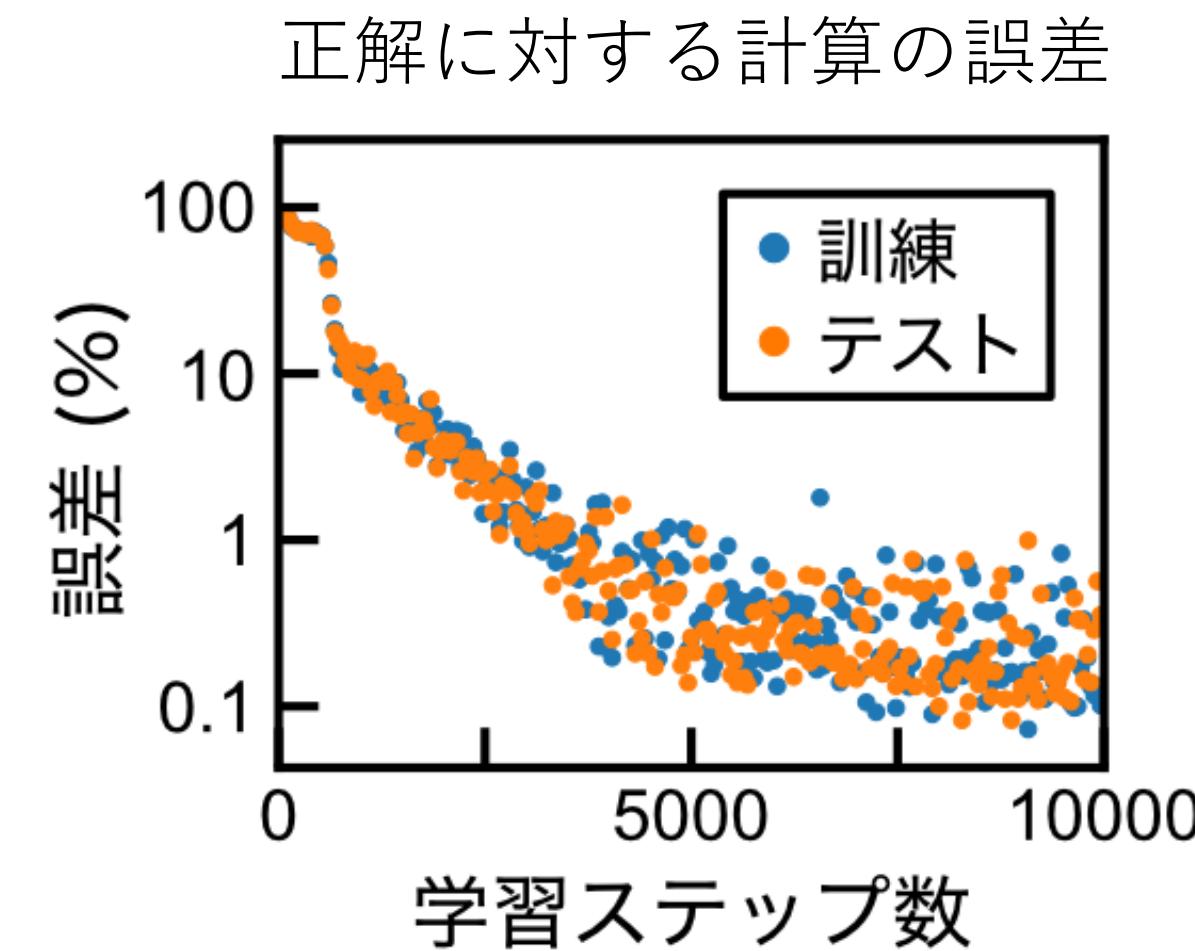
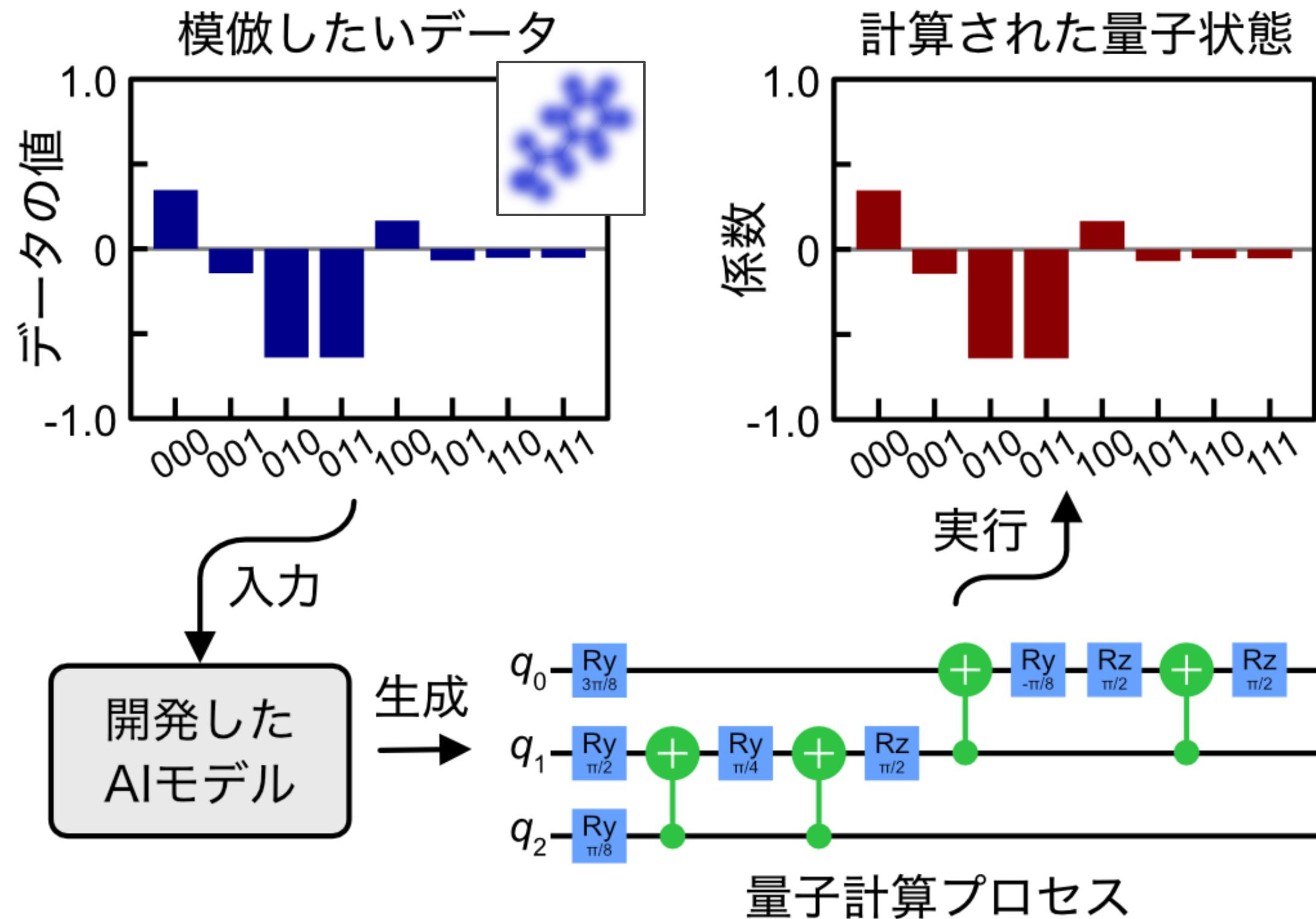


本研究：振幅エンコーディング



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

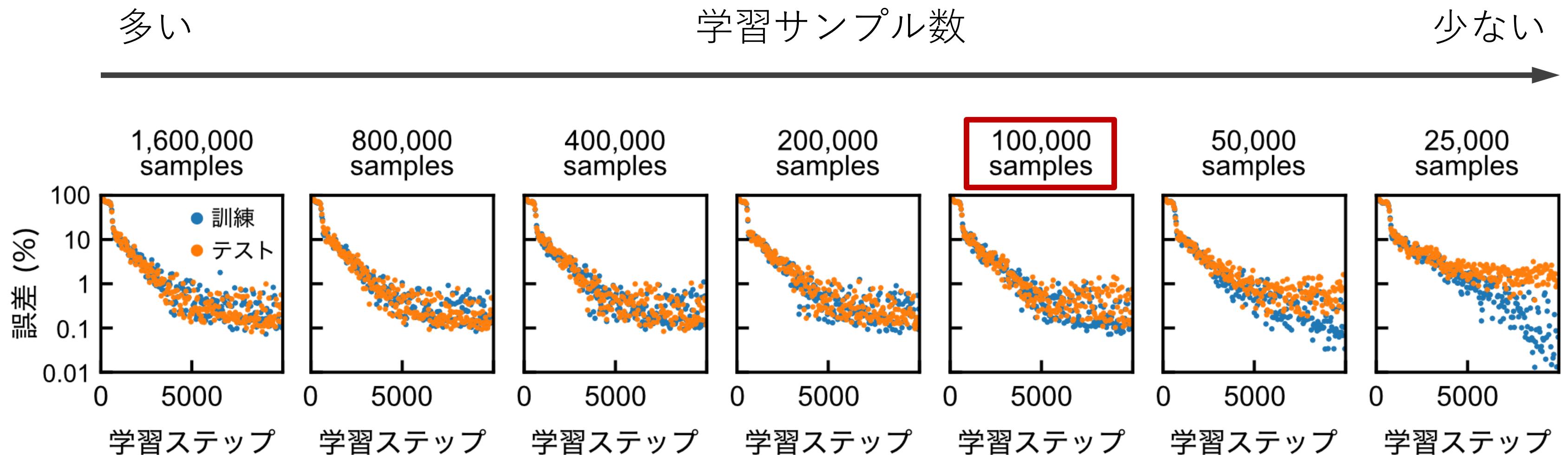
開発したAIによる量子計算プロセスの生成



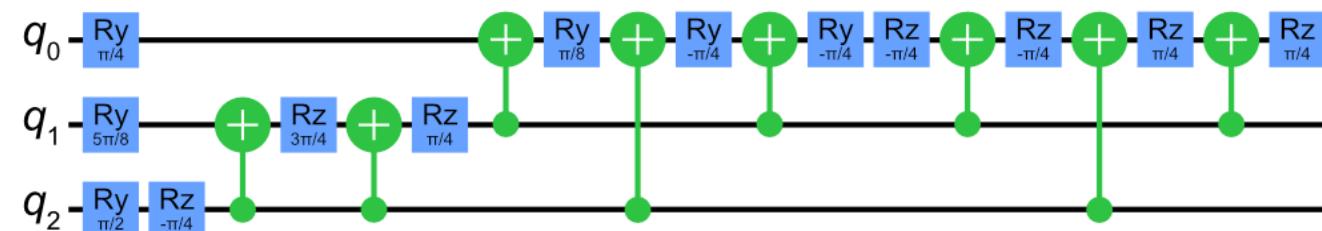
- 正解データに対して0.1%程度の誤差で正確に量子状態を生成
- 学習に用いた訓練データだけでなく、未知のテストデータに対しても正しく状態を生成

開発したAIの高い汎化性能

学習サンプル数に対する誤差の変化



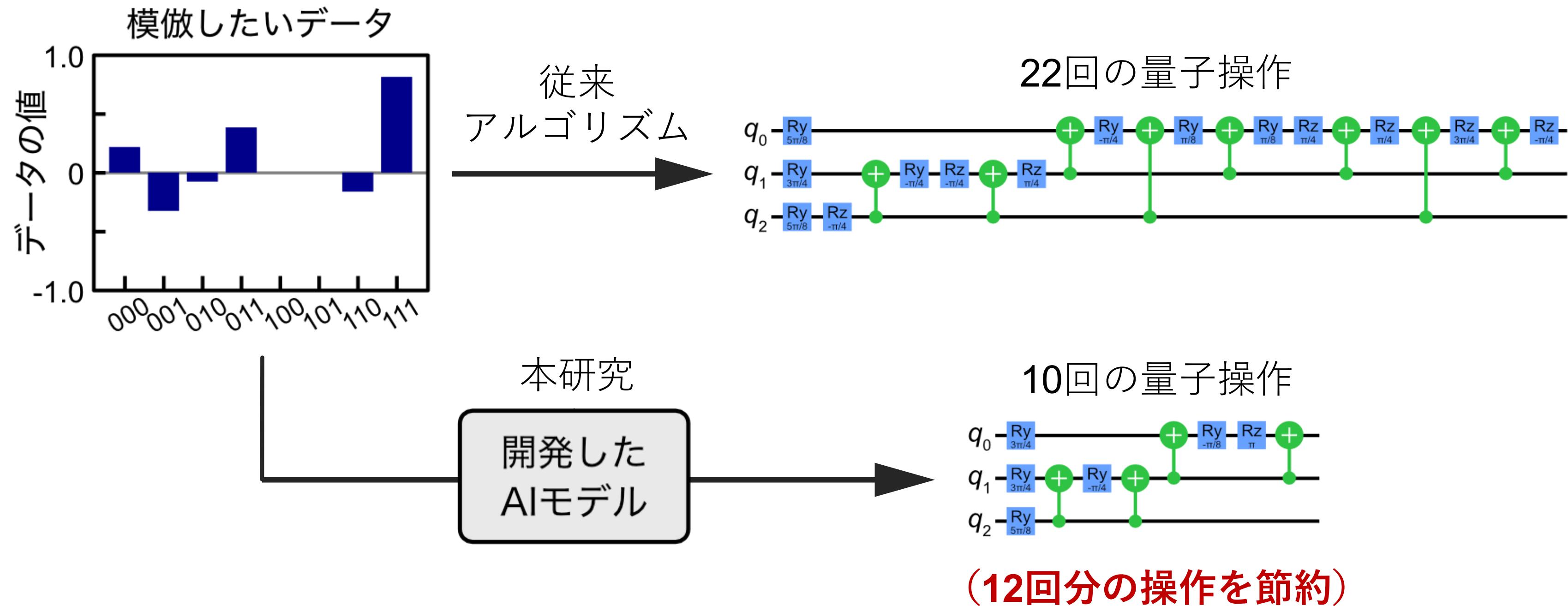
量子操作の系列 = 組み合わせ膨大



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

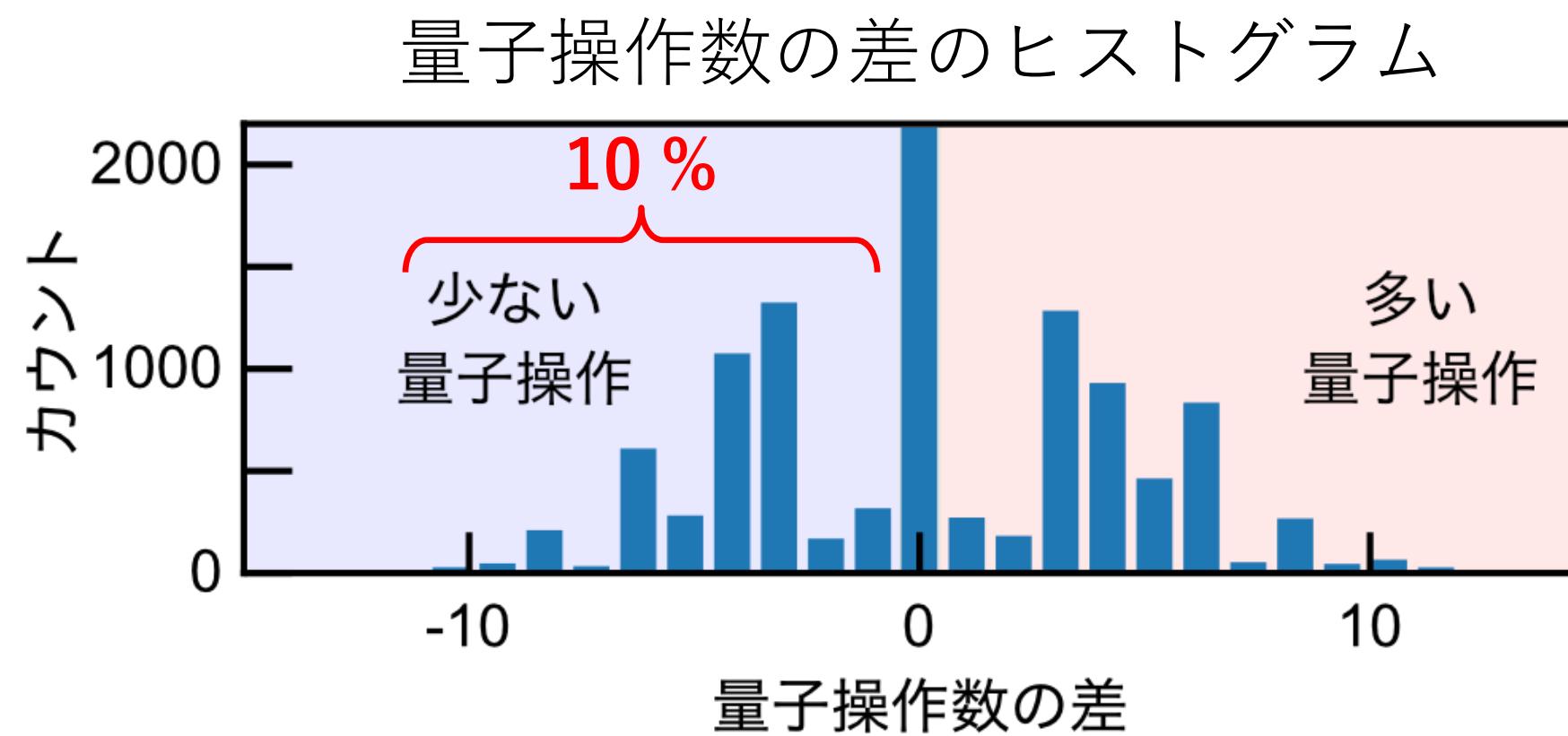
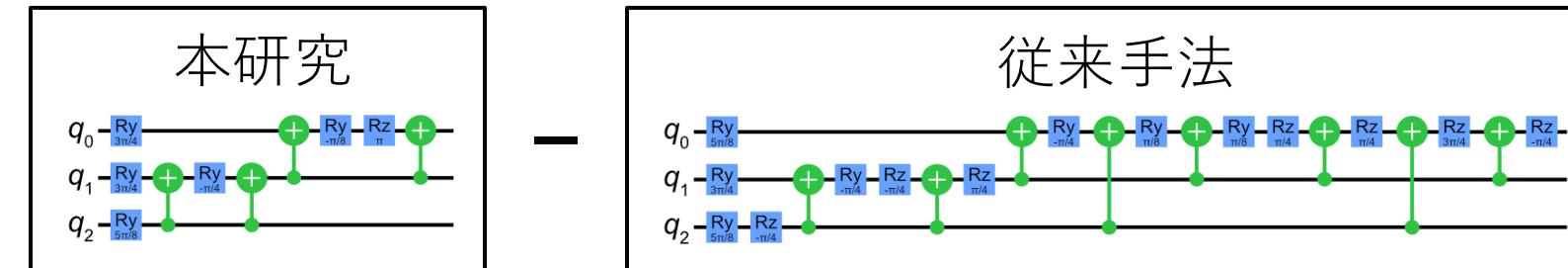
開発したAIが量子アルゴリズムを理解、再構築

学習済みAIにより生成された量子回路

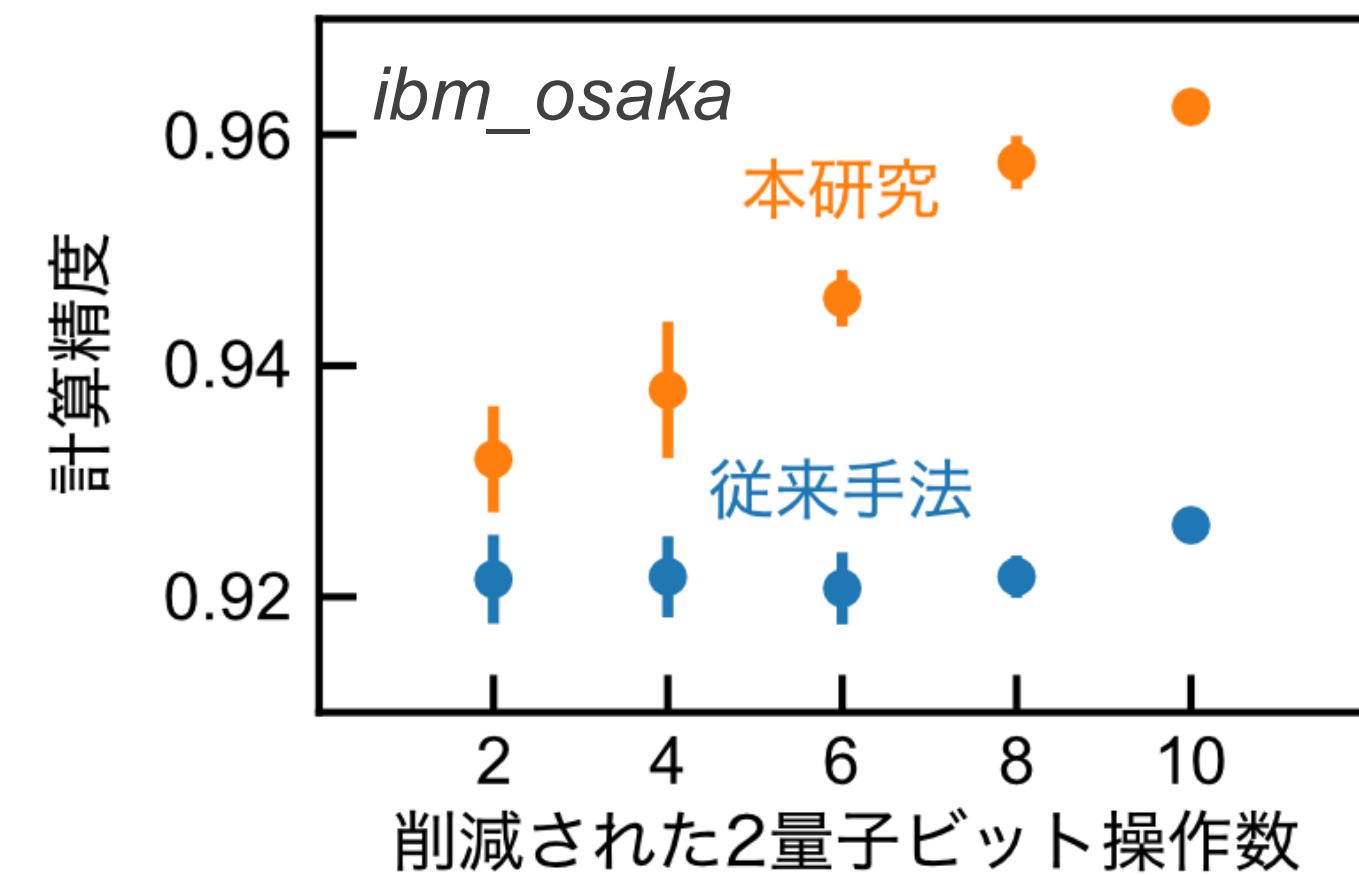


少ない量子操作の数で所望の量子状態を生成 → 高速かつエラーを抑えて量子計算可能

学習済みAIにより生成された量子回路



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



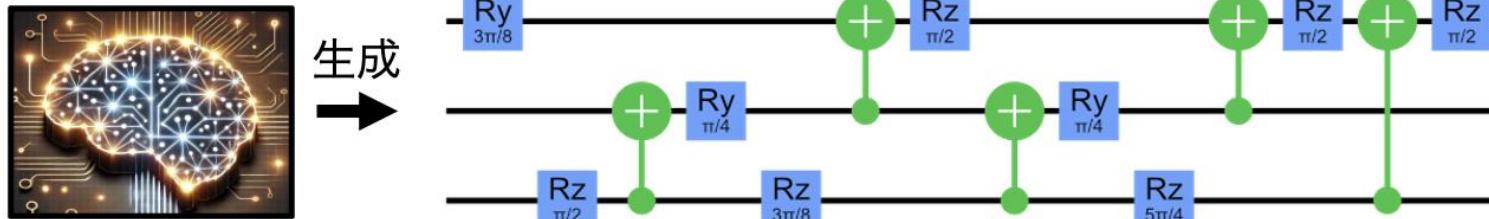
操作数の減少により、現実の量子コンピュータで計算エラーを低減できることを実証

2つ目の話題：文章生成AIを応用した量子コンピュータの制御

文章生成の技術を用いた量子計算プロセスの自動生成

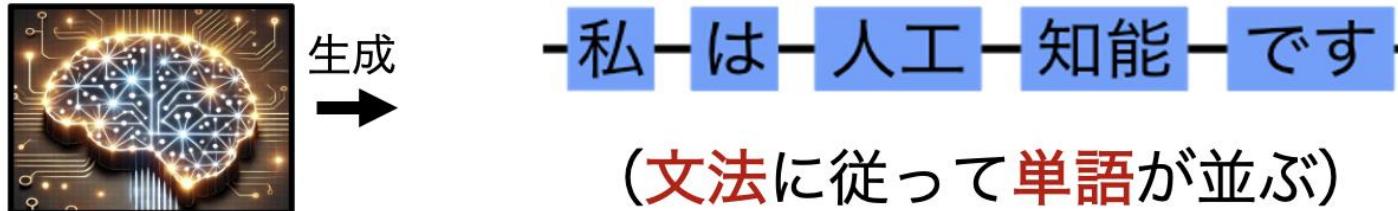
- ✓ 自然言語の文章と量子計算の構造の類似性に着目
- ✓ 量子操作を自動生成する深層学習AIを開発

▶ 量子コンピュータにおける量子計算



(量子アルゴリズムに従って量子操作が並ぶ)

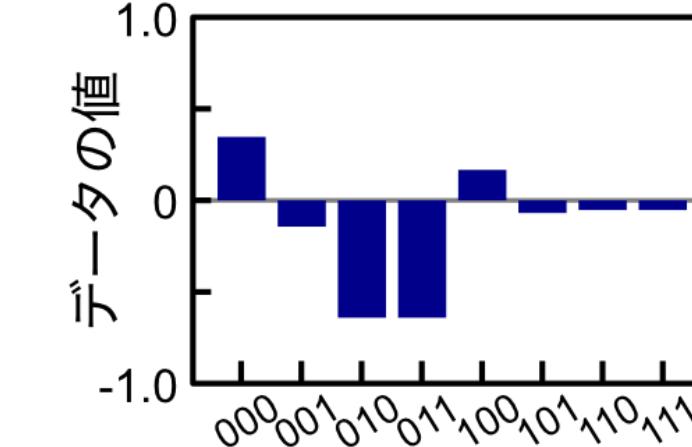
▶ 自然言語における文章



(文法に従って単語が並ぶ)

- ✓ 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

入力したいデータ

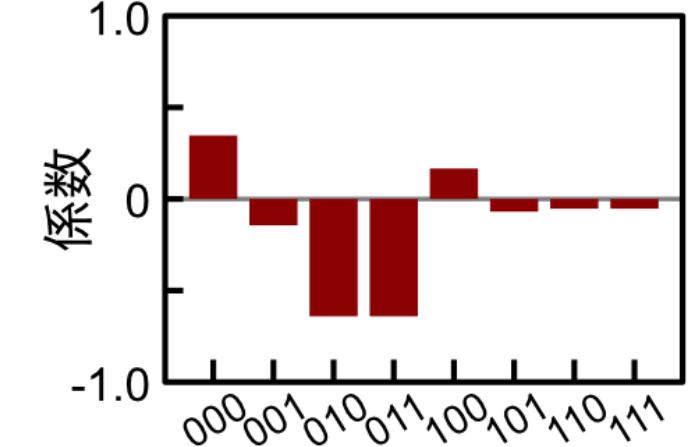


入力

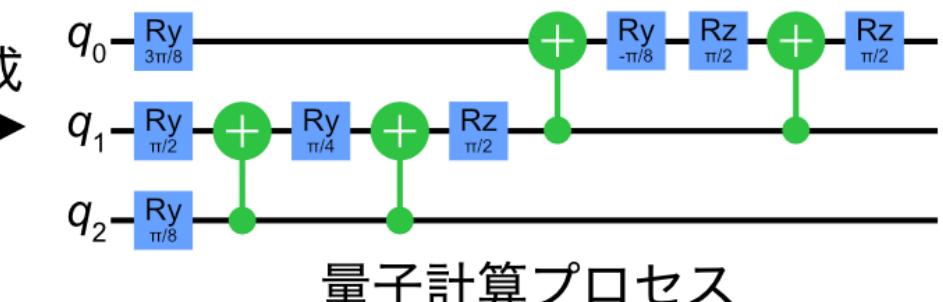
開発した
AIモデル

生成

計算された量子状態



実行



量子計算プロセス

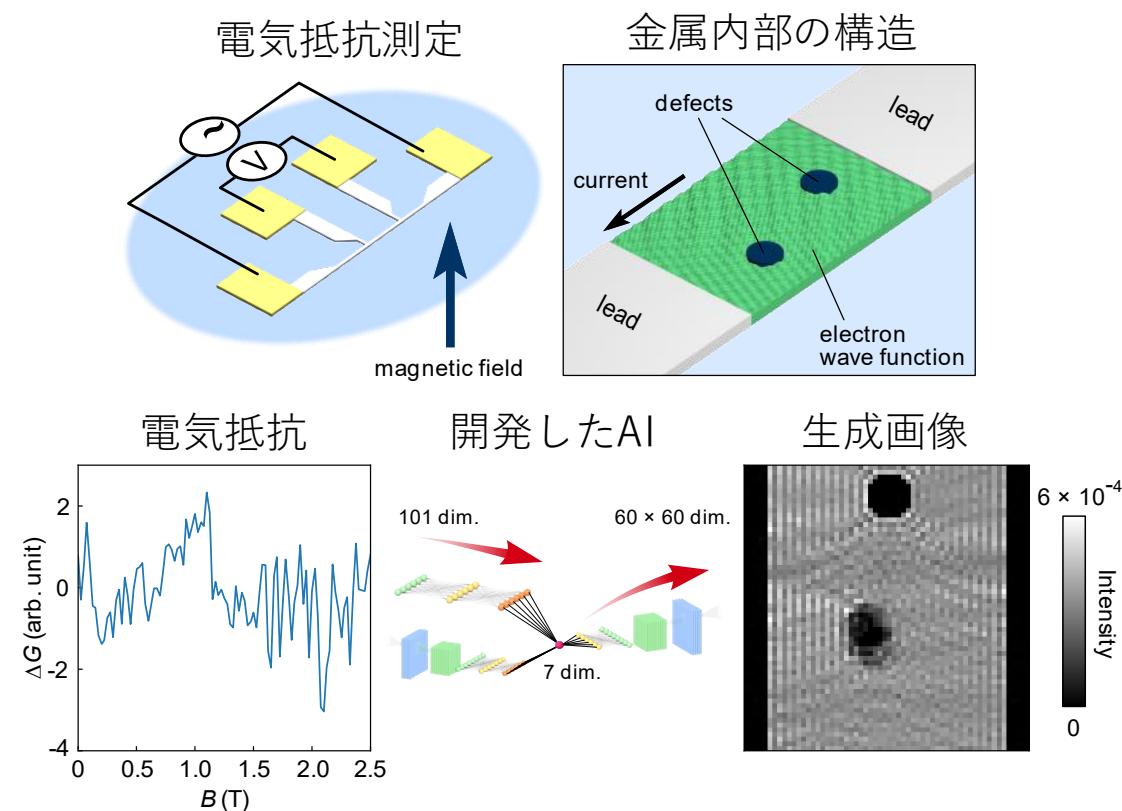
所望の量子状態を実現する深層学習AIの開発に成功、量子計算のエラー低減を実現

本日のまとめ

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

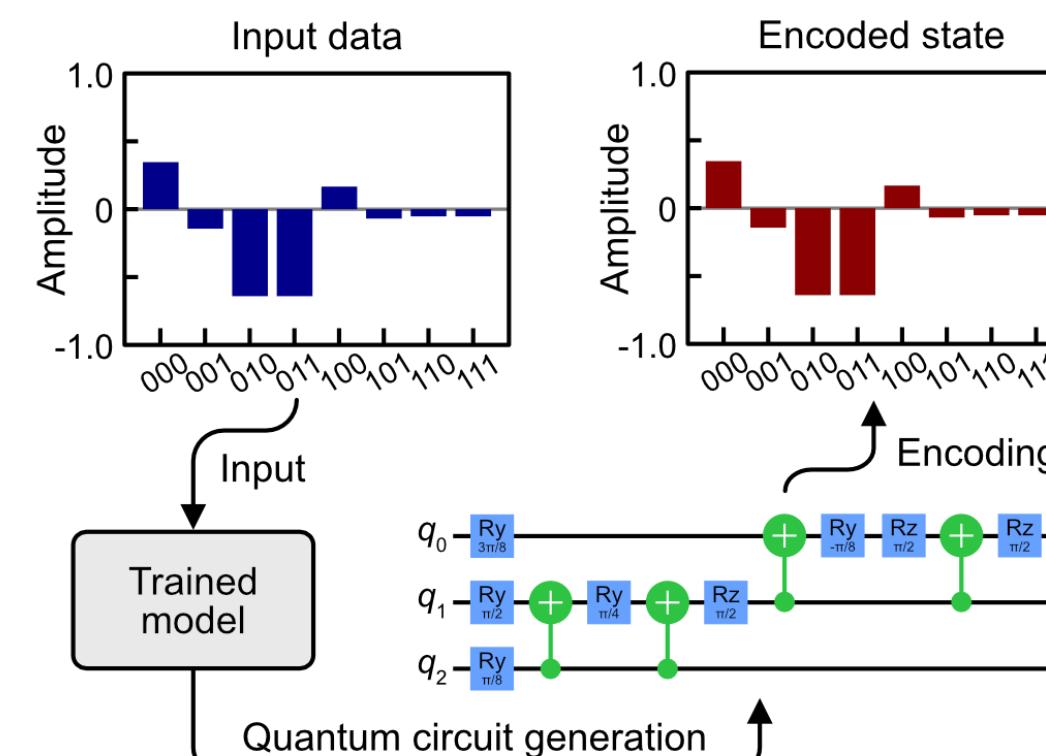


S. Daimon, K. Tsunekawa, S. Kawakami, T. Kikkawa et al., *Nature Communications* **63**, 032003 (2022).

文章生成AI

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

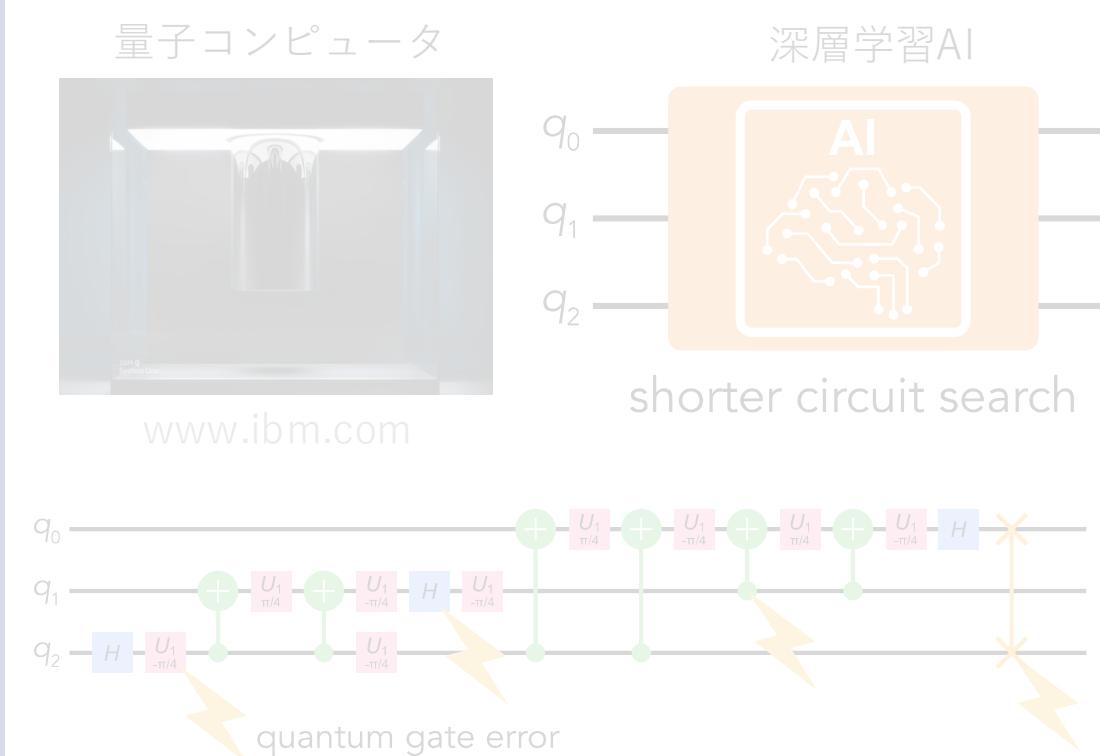


S. Daimon and Y. Matsushita, *Physical Review Applied* **22**, L041001 (2024).

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).

最先端の深層学習AIを量子現象に応用し、複雑な問題を解決できることを実証