

1 一般物理理論

1.1 上田研究室

近年のナノサイエンスの発展により、原子や分子、光子を量子 1 個のレベルで精密に測定し、制御することが可能になってきた。当研究室では、このような高い制御性を有する系での量子多体問題の解明と、その基礎となるナノスケールの熱力学・統計力学の構築を目指して理論研究を行っている。特に近年の中心的テーマとなっているのは、冷却原子気体・非平衡開放系の研究、および、量子論・統計力学と情報論・人工知能の融合である。レーザー冷却により絶対零度近くまで冷却された原子系においては、高い制御性のもとで、ボース・アインシュタイン凝縮 (BEC) などの巨視的量子現象や、固体物理、宇宙物理とも類似した現象を創り出し、その普遍的性質と新しい量子多体物理の可能性を探究することができる。私たちは、環境への散逸や量子測定の反作用の影響下にある冷却原子系の非ユニタリダイナミクス、非平衡開放系における相の分類、人工ゲージ場中での量子ホール効果や渦格子、孤立量子系の熱平衡化などについて研究を行っている。同時に私たちは、情報をキーワードとして量子論や統計力学の基礎概念を捉え直し、物理と情報を融合させた新分野の構築を目指す研究にも取り組んでいる。特に測定やフィードバック制御を行うもとの情報の流れに着目し、熱力学の第二法則や揺らぎの定理の一般化、波束収縮のダイナミクス、測定結果からのハミルトニアン推定などの研究を行っている。さらに、私たちは機械学習や深層学習における情報処理のプロセスに注目し、物理学の視点から AI や機械学習の理解に取り組んでいる。

1.1.1 冷却原子気体・非平衡開放系

非エルミート系のトポロジカル場の理論

近年、非平衡開放系や強相関電子系において、非エルミートな有効ハミルトニアンによって記述されるトポロジカル現象に大きな関心が集まっている。とくに、非エルミート系に固有のトポロジカル相と、それにもなって多数の局在状態が系の表面に現れる表皮効果が、理論・実験の両面からさかんに研究されている。われわれは、非エルミート系のトポロジカル相を普遍的なかたちで記述する有効場の理論を構築した [3]。従来の場の理論の枠組みは、平衡系を仮定しているので、散逸の存在が本質的となるような非平衡開放系においては、どのようにして場の理

論を定式化すればいいかが未解明であり、われわれの場の理論のあたらしい定式化はそれに答えを与えるものである。また、得られた場の理論にもとづいて、散逸に誘起されたカイラル磁気効果など、あたらしい非平衡トポロジカル現象を具体的に予言した。さらに、場の理論の観点では、表皮効果は非平衡開放系に特有の量子異常（アノマリー）の帰結であることも示した。

表皮効果の起こる開放量子系における緩和時間とスペクトルギャップの間の新たな関係式

Markov な開放量子系の時間発展はリウビリアンと呼ばれる超演算子で生成され、そのスペクトルギャップは固有モードの最も遅い指数減衰を特徴づけることから定常状態に至る緩和時間の逆数に対応することが多くの場合仮定される。しかし、我々はリウビリアンが非エルミート演算子であることに注目し、定常状態が系の一方の端に局在する「リウビリアン表皮効果」が起こる系において、系の緩和時間をスペクトルギャップ・局在長・システムサイズと結びつける新たな関係式を見出した [7]。この結果の導出においては、リウビリアンの局在した右固有モードと左固有モードの重なりが指数関数的に小さくなることから、初期状態を固有モードで展開したときの係数が系のサイズに関して指数関数的に大きくなることを利用する。特に、この新たな関係式は開放量子系の緩和時間の発散が必ずしもスペクトルギャップの消失を伴わないことを示し、開放量子系の緩和には固有値スペクトルのみならず固有モードによる初期状態の展開係数も重要であることを示している。

BCS 理論の開放量子多体系への拡張

冷却原子気体においては、非弾性衝突による原子のロスがしばしば存在する。我々は、非弾性衝突による散逸を取り入れることにより BCS 理論を開放量子多体系へと拡張し、散逸下のフェルミ超流動体のダイナミクスを記述する平均場理論を構築した [6]。通常、相互作用をクエンチした場合には超流動秩序変数の振幅の集団モードが誘起されるが、今回構築した平均場理論は、散逸のクエンチが相互作用クエンチとは「直交」した方向に作用し、秩序変数の位相の集団モードを誘起することを予言する。このような散逸誘起の集団位相モードは 2 つの超流動体を Josephson 結合させることにより Josephson 流から観測可能である。さらに、印可する散逸の強さを大きくしていくと、Josephson 流のダイナミクスは 2 つの超流動体の位相が同期した領域から非同期した領域へと転移する。これは、開放量子多体系における非平衡相転移の新たな例を与える。

1.1.2 量子論・統計力学と情報理論・人工知能の融合

収束性のある効率的な深層 Q ネットワークアルゴリズム

AI の深層強化学習は近年経験的には成功しているが、AI 技術の不安定性とランダムネスの問題はこの技術を現実の問題に適用するのを困難にするとともに、得られた結果の信頼性や整合性をしばしば揺るがす。この問題を解決するために、我々は収束性のある深層 Q 学習アルゴリズムを開発し、物理における制御問題の解法に安定的にかつ信頼のおける形で適用できるようにした [10]。これはスケラブルでかつ深層ニューラルネットワークで効率的に使用することができる初めての収束性のある強化学習アルゴリズムである。我々の方法は、従来の深層 Q ネットワークアルゴリズムでは不安定性の問題のため困難であった Atari 2600 ベンチマークの課題を解決することができた。また、我々はこの方法が量子 4 次振動子の測定とフィードバック制御による冷却問題に対してより安定的な結果を生成することも確かめた。図 1.1.1 に示したように、従来の方法では数値実験を繰り返すと不安定でゆらぐ結果が得られるのに対し、我々の方法を用いると数値実験を何度繰り返しても安定的に同様の結果が得られる。

深層ネットワークを学習させる基礎理論

深層学習の基礎研究は二つに大別される。第一の部分は RNN, CNN, GNN, GAN, BERT のような深層ネットワークを開発して、その模型の性質を究明することである。第二の部分は深層ネットワークを学習させる、即ち、訓練することである。この訓練部分の核心となるアルゴリズムは確率的勾配降下法である。我々の研究によって示されたように、深層学習に於ける確率的勾配降下法は簡単な数学モデルに簡約することで厳密に理解することができる [4, 11, 5, 12]。この厳密な結果と、数値計算を併用することで、深層ニューラルネットワークがどのように鞍点と局所的な最小値から脱出できるかを明らかにした。また、我々はこの研究に基づき、確率的勾配降下法のダイナミクスの中の揺らぎとノイズの厳密解を導出し、深層学習における訓練の安定性についての理解を進めた。確率的勾配降下法の揺らぎとニューラルネットワークの過剰パラメータとの関係も理解できるようになった。この過剰パラメータの部分は神経科学にも類似な関係があり、現在活発に議論されている。

<受賞>

- [1] 川畑幸平: 第 12 回育志賞、日本学術振興会、2022.1.20.

<報文>

(原著論文)

- [2] Yuto Ashida, Zongping Gong, and Masahito Ueda: Non-Hermitian physics, *Adv. Phys.* **69**, 249 (2020).

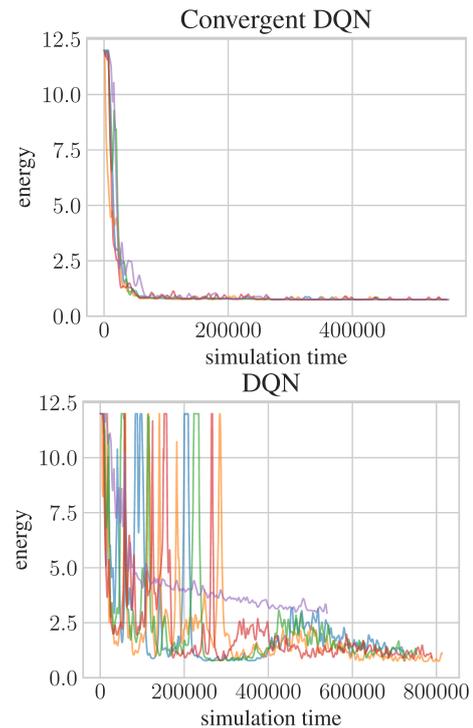


図 1.1.1: 我々の収束性深層 Q ネットワーク (上図) と従来の方法 (下図) による学習曲線。縦軸は 4 次振動子のエネルギー、横軸は学習時間を表す。従来の方法では学習曲線は非常にランダムな挙動を示すのに対し、我々の方法では異なる試行について学習曲線が互いにコンシステントな結果を与える。

- [3] Kohei Kawabata, Ken Shiozaki, and Shinsei Ryu: Topological Field Theory of Non-Hermitian Systems, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 216405 (2021) [selected for Editors' Suggestion].
- [4] Kangqiao Liu*, Liu Ziyin*, and Masahito Ueda (*equal contribution): Noise and Fluctuation of Finite Learning Rate Stochastic Gradient Descent, *Proceedings of the 38th International Conference on Machine Learning (ICML 2021)*, PMLR **139**, 7045 (2021).
- [5] Zhang Zhiyi and Liu Ziyin: On the Distributional Properties of Adaptive Gradients, *37th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI 2021)*.
- [6] Kazuki Yamamoto, Masaya Nakagawa, Naoto Tsuji, Masahito Ueda, and Norio Kawakami: Collective Excitations and Nonequilibrium Phase Transition in Dissipative Fermionic Superfluids, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 055301 (2021).
- [7] Taiki Haga, Masaya Nakagawa, Ryusuke

- Hamazaki, and Masahito Ueda: Liouvillian Skin Effect: Slowing Down of Relaxation Processes without Gap Closing, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 070402 (2021).
- [8] Yūto Murashita, Naoto Kura, and Masahito Ueda: Entropy production of a closed Hamiltonian system via the detailed fluctuation relation, *Phys. Rev. Research* **3**, 033224 (2021).
- [9] Hongchao Li and Peng Ye: Renormalization group analysis on emergence of higher rank symmetry and higher moment conservation, *Phys. Rev. Research* **3**, 043176 (2021).
- [10] Zhikang T. Wang and Masahito Ueda: A Convergent and Efficient Deep Q Network Algorithm, *The International Conference on Learning Representations 2022 (ICLR 2022)*.
- [11] Liu Ziyin*, Kangqiao Liu*, Takashi Mori, and Masahito Ueda (*equal contribution): Strength of Minibatch Noise in SGD, *The International Conference on Learning Representations 2022 (ICLR 2022)* [Spotlight].
- [12] Liu Ziyin, Botao Li, James B. Simon, and Masahito Ueda: SGD May Never Escape Saddle Points, *The International Conference on Learning Representations 2022 (ICLR 2022)* [Spotlight].
- (国内雑誌)
- [13] 中川大也、辻直人、川上則雄、上田正仁: 冷却原子気体における開放量子多体系の物理、*日本物理学会誌* 第 77 巻 第 2 号 p.88-92 (2022).
- (学位論文)
- [14] Kohei Kawabata: Universality of open systems: non-Hermiticity, topology, and localization (doctoral dissertation).
- [15] Yuki Sakamoto: Theoretical Study of an Evolutionary Game Model on a Network (master thesis).
- <学術講演>
- (国際会議)
- 招待講演
- [16] Masaya Nakagawa: Dissipative Hubbard model: magnetism, superfluid pairing, and exact solution, *New Trends in Quantum Condensed Matter Theory*, online conference organized by Institute for Solid State Physics, 2021.7.29.
- [17] Masahito Ueda: Nonequilibrium control of quantum many-body systems beyond the hermitian framework of quantum physics, *KITP workshop on Transport and Efficient Energy Conversion in Quantum Systems*, KAVLI Institute for Theoretical Physics, University of California, Santa Barbara, 2021.8.30.
- [18] Masahito Ueda: Out-of-time-order fluctuation-dissipation theorem and universal bound on chaos, *International workshop on Probing Complex Quantum Dynamics through Out-of-time-ordered Correlators*, Max Planck Gesellschaft, 2021.10.13.
- [19] Masahito Ueda: Beyond-Hermitian Quantum Physics, *Physics department colloquium at St. Andrews*, University of St. Andrews, 2021.10.15.
- [20] Masahito Ueda: Beyond-Hermitian Quantum Physics, *1st International Symposium on Trans Scale Quantum Science*, online conference organized by The University of Tokyo, 2021.10.27.
- [21] Kohei Kawabata: Symmetry and Topology in Non-Hermitian Physics, *Virtual seminar series on Pseudo-Hermitian Hamiltonians in Quantum Physics (PHHQP)*, 2021.12.9.
- [22] Masahito Ueda: Beyond Hermitian Quantum Physics, *Quantum simulation of novel phenomena with ultracold atoms and molecules*, online conference organized by HKUST IAS, 2021.12.13.
- 一般講演
- [23] Kangqiao Liu: Thermodynamic Uncertainty Relations for Arbitrary Initial States, *The Second Annual Workshop on Stochastic Thermodynamics (WOST II)*, Santa Fe Institute, online, 2021.5.17-21.
- (国内会議)
- 一般講演
- [24] 中川大也: Fermi-Hubbard 模型の厳密な超流動秩序状態について、第 3 回冷却原子研究会「アトムの会」、オンライン、2021.8.10.
- [25] 中川大也、桂法称、上田正仁: 多成分 Hubbard 模型における η ペアリング状態とエルゴード性の弱い破れ、*日本物理学会第 77 回年次大会*、オンライン、2022.3.15.
- [26] 杉本昇大、濱崎立資、上田正仁: 長距離相互作用系における固有状態熱化仮説の妥当性、*日本物理学会第 77 回年次大会*、オンライン、2022.3.17.
- (セミナー)
- [27] 中川大也: 散逸 Hubbard 模型における磁性と超流動ペアリング、*online CMT seminar*、オンライン、2021.4.6.
- [28] Shoki Sugimoto: Thermalization of Isolated Quantum Systems and Its Typicality, *Yagami Statistical Physics Seminar*、オンライン、2022.1.11.

1 Ueda Group

Research Subjects: Bose-Einstein condensation, fermionic superfluidity, topological phenomena, open quantum systems, information thermodynamics, quantum information, measurement theory, machine learning

Member: Masahito Ueda and Masaya Nakagawa

With recent advances in nanoscience, it has become possible to precisely measure and control atoms, molecules, and photons at the level of a single quantum. We are interested in theoretically studying emergent quantum many-body problems in such highly controllable systems and developing nanoscale thermodynamics and statistical physics that lay the foundations of such problems. Our particular focuses in recent years include many-body physics of ultracold atomic gases and unification of quantum and statistical physics and information theory. Atomic gases which are cooled down to nearly zero temperature by laser cooling techniques offer unique opportunities for studying macroscopic quantum phenomena such as a Bose-Einstein condensation (BEC) in controlled manners. Unprecedented controllability of such gases also enables us to simulate phenomena analogous to condensed matter and astronomical physics, to investigate their universal properties, and to explore unknown quantum many-body physics. In our recent works, we have studied nonunitary dynamics of atomic gases subject to dissipation and/or measurement backaction, classification of phases of matter in nonequilibrium open systems, quantum Hall effect and vortex lattices in synthetic gauge fields, and thermalization of isolated quantum systems. We are also interested in relating fundamental concepts of quantum and statistical physics with information theory and exploring interdisciplinary fields that unify physics and information. In particular, we have recently worked on generalizations of the second law of thermodynamics and fluctuation theorems and the formulations of state reduction dynamics and Hamiltonian estimation in light of information flow under measurements and feedback controls. Furthermore, we have recently tackled an understanding of AI and machine learning from a viewpoint of physics. We list our main research subjects in FY2021 below.

- Quantum many-body phenomena in ultracold atoms, nonequilibrium open systems
 - Topological field theory of non-Hermitian systems [1]
 - Novel relation between the Liouvillian gap and relaxation time in open quantum systems with skin effects [2]
 - Extension of the BCS theory to open quantum many-body systems [3]
- Unification of quantum physics, statistical mechanics, information theory, and machine learning
 - Convergent and efficient deep Q network algorithm [4]
 - Fundamental theory for training deep neural networks [5, 6, 7, 8]

- [1] K. Kawabata, K. Shiozaki, and S. Ryu, Phys. Rev. Lett. **126**, 216405 (2021) [selected for Editors' Suggestion].
- [2] T. Haga, M. Nakagawa, R. Hamazaki, and M. Ueda, Phys. Rev. Lett. **127**, 070402 (2021).
- [3] K. Yamamoto, M. Nakagawa, N. Tsuji, M. Ueda, and N. Kawakami, Phys. Rev. Lett. **127**, 055301 (2021).
- [4] Z. T. Wang and M. Ueda, The International Conference on Learning Representations 2022 (ICLR 2022).
- [5] K. Liu*, Liu Ziyin*, and M. Ueda (*equal contribution), Proceedings of the 38th International Conference on Machine Learning (ICML 2021), PMLR **139**, 7045 (2021).
- [6] Liu Ziyin*, K. Liu*, T. Mori, and M. Ueda (*equal contribution), The International Conference on Learning Representations 2022 (ICLR 2022) [Spotlight].
- [7] Zhang Zhiyi and Liu Ziyin, 37th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI 2021).
- [8] Liu Ziyin, B. Li, J. B. Simon, and M. Ueda, The International Conference on Learning Representations 2022 (ICLR 2022) [Spotlight].