

令和 5 年 6 月 20 日現在

機関番号：12612
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2020～2022
課題番号：20K03804
研究課題名（和文）深層ニューラルネットワークを駆使した冷却原子系における量子多体計算手法の開拓

研究課題名（英文）Quantum many-body calculations of ultracold atoms using deep neural networks

研究代表者
齋藤 弘樹（Saito, Hiroki）

電気通信大学・大学院情報理工学研究科・教授

研究者番号：60334497
交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：人工知能や機械学習といった技術は近年盛んに研究され応用されている。本研究では機械学習の手法を冷却原子気体の制御に応用した。特に外部から系をかき混ぜ、系の内部に望みの流れを作ることにより主眼を置いた。ニューラルネットワークを用いた強化学習を用いて数値シミュレーションを行った結果、渦や渦輪を望みの位置に生成する制御法を見出した。また、Skyrmionと呼ばれる状態を流体力学的に生成する方法も見出した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

冷却原子系は量子力学的現象を研究する上で非常に理想的な物理系である。その理由は超低温でクリーンであるというばかりでなく、制御性が高いということが大きな理由として挙げられる。これまで、粒子間相互作用や外部ポテンシャルなどを制御することによって多くの量子力学的な物理現象がこの系で調べられてきた。本研究は、強化学習の手法を用いて、これらのパラメータを時間の関数としてどのように制御すれば望みの状態が得られるかという問いに答えたものであり、冷却原子系の制御性をより高めたという意義を持つ。

研究成果の概要（英文）：Recently, technologies of artificial intelligence and machine learning have been developing rapidly. In this research project, I applied methods of machine learning to the system of ultracold atoms. I used the reinforcement learning to create desired states of the system by controlling an external potential. As a result, I found that the desired vortex states can be generated in a Bose-Einstein condensate by controlling the external potential. I also found a method to create skyrmions in a Bose-Einstein condensate hydrodynamically.

研究分野：量子凝縮系物理学

キーワード：ボース・アインシュタイン凝縮 量子渦 機械学習 強化学習

1. 研究開始当初の背景

近年の人工知能技術の発展は目覚ましい。例えば「AlphaGo」と呼ばれる深層ニューラルネットワークを用いたシステムが、囲碁の世界チャンピオンを打ち負かしたというニュースは当時の人々に衝撃を与えた。囲碁の盤面の総数はおよそ 10^{170} 乗通りもあり、その全てに対して次の最善手を計算機のメモリに格納することは不可能である。にもかかわらず、AlphaGo は訓練を通じて、あらゆる囲碁の盤面に対する最善手を学習し、人間に劣らない判断を下すことができる。これは機械学習の過程で、膨大な情報からある種の特徴が抽出され、それが効率良く深層ニューラルネットワークの中に格納されているためだと考えられている。

これを量子多体問題に応用するという提案が、2017年スイス連邦工科大のグループによってなされた。量子多体問題が困難である最大の理由は、系のサイズに対して基底 $|n\rangle$ の数が指数関数的に増大してしまうという点にある。つまり、数値計算において、量子多体状態のすべての波動関数 $\psi(n)$ をメモリに格納することは、系のサイズが増大するにつれて急速に困難になる。これを克服するために、ニューラルネットワークと機械学習を利用しようというのが肝となるアイデアである。AlphaGo の中に膨大な囲碁の情報が効率良く収められているのと同様に、膨大な数の多体波動関数 $\psi(n)$ をニューラルネットワークの中に効率良く収め、量子多体問題を解こうというわけである。AlphaGo の場合は、囲碁の対局に勝利することを目指して学習が行われるのに対し、量子多体問題の場合(例えば基底状態を求めたいとすると)系のエネルギーが最小になることを目指して、最善の波動関数を与えるように学習が行われる。

研究開始当初はこの方法が提案された直後であり、この方法をいくつかの量子多体問題に適用する研究が出始めたという状況であった。

2. 研究の目的

申請時の目的として以下のようなものを掲げた。

- (1) ボース・ハバード模型の基底状態探索において、大規模深層ニューラルネットワークを用いた方法の有効性を検証し、そのメカニズムを探求する。
- (2) ボース・ハバード模型における、高精度な時間発展の手法を開発し、クエンチ等の問題に適用する。
- (3) 純粋状態だけでなく混合状態にも拡張し、有限温度状態を求める方法を開発する。
- (4) 格子模型だけでなく連続空間の系にも拡張し、ボース・アインシュタイン凝縮体等に機械学習の手法を応用する。

以下に述べるように、これ以外にも機械学習の様々な手法を冷却原子系に広く応用することが、本研究の目的である。

3. 研究の方法

大規模深層ニューラルネットワークを扱う上でGPUの利用は不可欠である。GPUとは本来グラフィック表示を高速に行うために高度な並列処理を行う装置として開発されたが、その並列計算の能力が数値計算や機械学習において利用されている。まずGPU計算機の環境を整えることから研究計画が始まった。

次に、これまで行われている計算を大規模な系に拡張し、計算時間・計算精度の点において実用性を追求するとともに、時間発展および有限温度状態を求める方法を探求する計画であった。時間発展は既に基本的な方法が提案されており、本申請者もボース・ハバード系で実装済みだが、精度や安定性に問題があり改良が必要である。また、有限温度状態 $\rho = \exp(-\beta H)$ を得るには $d \frac{d}{d\beta} \rho = -H \rho$ を解くこと、つまり「時間」発展を求める問題に置き換えられる。波動関数 $\psi(n)$ と違って密度行列 $\rho(n, n')$ は状態数も多く、より大規模な計算が必要となる。

さらに、連続空間中のボース粒子系の問題に機械学習の手法を応用することを考えたが、これには強化学習と呼ばれる手法を用いた。強化学習とは現在の系の状態に対して、最終的に望みの状態になるように、最適な行動を選ぶ機械学習の手法である。これに深層ニューラルネットワークを組み合わせたものが、上述のAlphaGoにも使われており、同様の手法をボース粒子系の制御に応用した。

4. 研究成果

申請時に掲げた目的を達成するために研究を開始したが、上記(1),(2)の研究目的については現在も研究を継続中である。(1)の大規模化については本資金の申請後多くの研究が急速に出始め、新規性のある研究を行うことが困難になりつつある。また(2)については、研究の結果、時間発展の精度を上げることが非常に困難であることがわかりつつある。(3)については、本資金の申請直後に研究を進め、本研究期間が始まる前に研究成果を論文として出版することができた。従って、以下では研究目的(4)に関して、本研究期間内に得られた研究成果について述べ

る。

「強化学習によるボース・アインシュタイン凝縮体のダイナミクスの制御」

ボース・アインシュタイン凝縮体のダイナミクスは、平均場近似を行うと、非線形シュレーディンガー方程式で記述することができる。方程式が非線形であるため、これを解析的に解くことはできず、どのような現象が起こるかを予想することも難しい。従って、ボース・アインシュタイン凝縮体のダイナミクスを詳細に制御することはこれまで困難であった。これに対して本研究では、強化学習の手法を応用して、外部ポテンシャルを制御することにより、一定時間のダイナミクスの後に、ある望みの状態に到達させることが可能であることを示した。

具体的には、まず二次元トラップ系を考え、ガウス関数型の外部ポテンシャルの位置と強度を時間の関数として制御することにより、単一量子渦状態を生成することを目的とした。実験的には、外部ポテンシャルはレーザー光によって与えることができるため、位置や強度を制御することは容易にできる。強化学習エージェントとして畳み込みニューラルネットワークを用い、ボース・アインシュタイン凝縮体の密度分布を画像として入力し、ポテンシャルの位置や強度を変化させる「行動」を出力とした。多数回の試行でエージェントを学習させた結果、目的の単一量子渦状態がうまく生成できることがわかった。図1はそのダイナミクスを示している。ポテンシャルを移動させると、通常は互いに逆向きに回転する二つの量子渦がペアで生成されるが、この場合は、凝縮体のふちをうまく利用して、そのうちの一つの量子渦を外に逃がしている。その結果、単一の量子渦が中央に残った状態が生成できている(図1(e))。このような巧妙な制御を、物理系に対する予備知識を何も与えずに発見することができるのが強化学習の威力である。

さらに三次元系において、同様にポテンシャルを強化学習によって制御し、量子渦輪を生成することも試みた。図2はそのダイナミクスを示している。この結果で面白い点は、棒状のポテンシャルであるにもかかわらずリング状の渦が生成できていることである。一見するとこのようなことは困難に思えるが、強化学習によって見事にその制御法が見つけ出されている。これらの研究成果は以下の論文として発表した。

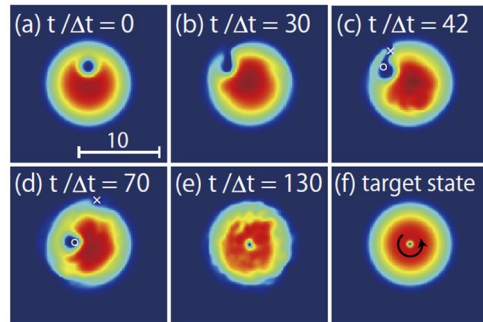


図1：強化学習による量子渦生成

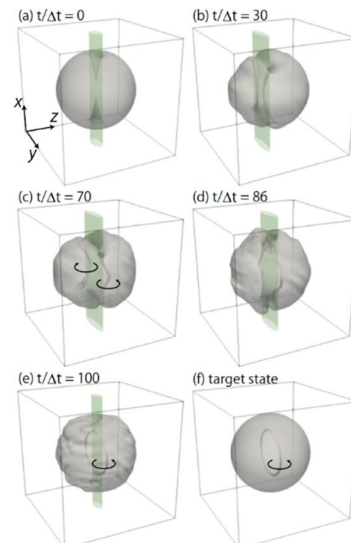


図2：強化学習による量子渦輪生成

H. Saito, "Creation and manipulation of quantized vortices in Bose-Einstein condensates using reinforcement learning", J. Phys. Soc. Jpn. 89, 074006 (2020)

「二成分ボース・アインシュタイン凝縮体中の障害物ポテンシャルによる Skyrmion 生成」

以上の研究に端を発し、外部ポテンシャルによって、量子渦や量子渦輪だけでなく、より複雑な量子状態を作れるのではないかと考えたのがこの研究である。Skyrmion とは三次元中の孤立したトポジカル励起であり、本来原子核物理の分野で提唱された状態である。この状態をボース・アインシュタイン凝縮体中に生成する方法は従来から提案されているものの、いずれも凝縮体に位相を「書き込む」方法であった。それに対して、本研究では、外部ポテンシャルを動かすだけで Skyrmion が流体力学的に生成できることを示した。これは流れる流体中で障害物後方に渦ができる原理と同じである。

図3は主な結果を示している。(a)に描かれているような特殊な形状のポテンシャルを二成分ボース・アインシュタイン凝縮体中で動かすことにより、その後方に Skyrmion 状態が生成されていることが示されている。(a)のポテンシャルは複雑であるが、複数のレーザー光により作れることも示した。これらの研究成果は以下の論

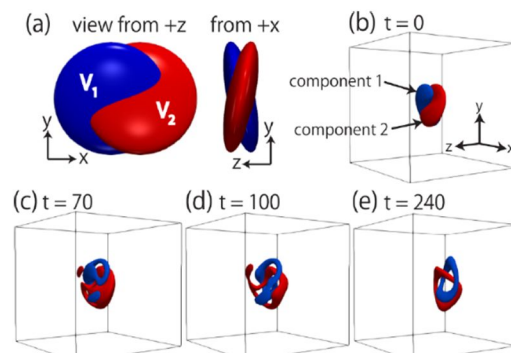


図3：ポテンシャルによる Skyrmion 生成

文として発表した。本研究では機械学習の手法は用いられていないが、前ページの強化学習を使った制御法をこの系に応用する研究を現在進めているところである。

K. Sakaguchi, K. Jimbo, and H. Saito, “Hydrodynamic generation of skyrmions in a two-component Bose-Einstein condensate”, *Phys. Rev. A* 105, 013312 (2022).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 8件/うち国際共著 4件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Keisuke Jimbo and Hiroki Saito	4. 巻 103
2. 論文標題 Surfactant behavior in three-component Bose-Einstein condensates	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 063323/1-10
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevA.103.063323	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kyoshiro Sakaguchi, Keisuke Jimbo, and Hiroki Saito	4. 巻 105
2. 論文標題 Hydrodynamic generation of skyrmions in a two-component Bose-Einstein condensate	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 013312/1-7
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevA.105.013312	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Xiao-Fei Zhang, Lin Wen, Lin-Xue Wang, G.-P. Chen, R.-B. Tan, and Hiroki Saito	4. 巻 105
2. 論文標題 Spin-orbit-coupled Bose gases with nonlocal Rydberg interactions held under a toroidal trap	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 033306/1-9
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevA.105.033306	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Hiroki Saito	4. 巻 89
2. 論文標題 Creation and Manipulation of Quantized Vortices in Bose-Einstein Condensates Using Reinforcement Learning	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 074006/1-8
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7566/JPSJ.89.074006	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Ali Abid, Saif Farhan, Saito Hiroki	4. 巻 105
2. 論文標題 Phase separation and multistability of a two-component Bose-Einstein condensate in an optical cavity	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 063318/1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.105.063318	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Li Shaoxiong, Le Uyen Ngoc, Saito Hiroki	4. 巻 105
2. 論文標題 Long-lifetime supersolid in a two-component dipolar Bose-Einstein condensate	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 061302/1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.105.L061302	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Qiu Xu, Hu Ai-Yuan, Cai Yongyong, Saito Hiroki, Zhang Xiao-Fei, Wen Lin	4. 巻 107
2. 論文標題 Dynamics of spin-nematic bright solitary waves in spin-tensor-momentum coupled Bose-Einstein condensates	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 033308/1-13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.107.033308	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Saito Hiroki, Hayashi Masazumi	4. 巻 92
2. 論文標題 Rossby-Haurwitz Wave in a Rotating Bubble-Shaped Bose-Einstein Condensate	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 044003/1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.92.044003	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計6件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 坂口京志郎, 神保圭佑, 齋藤弘樹
2. 発表標題 2成分 BEC 中における障害物ポテンシャル後方での Skyrmion 生成
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Abid Ali, 齋藤弘樹
2. 発表標題 Phase separation and optical multistability of two-component Bose-Einstein condensate in an optical cavity
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 神保圭介, 齋藤弘樹
2. 発表標題 3成分BECにおける界面活性剤的振る舞い
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋期大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 門倉強, 齋藤弘樹
2. 発表標題 超流動体の乱流状態におけるKolmogorov-Hinze スケール
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Shaoxiong Li, Hiroki Saito
2. 発表標題 Long Lifetime Supersolid of Two Component Dipolar BEC
3. 学会等名 29th International Conference on Low Temperature Physics (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Shaoxiong Li, Uyen Le, Hiroki Saito
2. 発表標題 Supersolid of Two-Component Dipolar Bose-Einstein Condensate
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋期大会
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
中国	陝西科学技術大学	重慶師範大学		
パキスタン	Quaid-i-Azam大学			