

中性原子気体のレーザー冷却実験におけるベイズ最適化を用いたパラメータ探索 Parameter search based on Bayesian optimization in laser cooling experiments of neutral atomic gasses

中村一平¹, 兼村厚範^{2,3}, 中曾 拓³, 山本隆太¹, 小沢秀樹¹, 福原 武¹

Ippei NAKAMURA¹, Atsunori KANEMURA^{2,3}, Takumi NAKASO³, Ryuta YAMAMOTO¹,
Hideki OZAWA¹, and Takeshi FUKUHARA¹

理研 CEMS¹, LeapMind 株式会社², 産総研³

RIKEN CEMS¹, LeapMind Inc.², AIST³

量子縮退を起こすまで冷却された極低温の中性原子気体は、例えば量子シミュレーションのような量子情報技術を実装するための有用なプラットフォームである。原子気体の冷却には磁気光学トラップや光双極子トラップによる蒸発冷却の技術が用いられるが、効率的な冷却にはレーザー光の周波数や強度、冷却時間、外部磁場の強さなど種々のパラメータを精密に制御することが不可欠である。広大なパラメータ空間から最適値を探り当てるため、十分な知識を持った実験者の人手を介したパラメータ探索が行われてきた。近年では自動車の自動運転などの分野で機械学習の技術の発展が著しいが、冷却原子実験においてもこの技術を取り入れてパラメータ探索を自動化する試みが始まっている [1-3]。

今回我々は、統計的予測に基づきパラメータを探索するベイズ最適化法 [4] を用いて ^{87}Rb 原子のボース・アインシュタイン凝縮体 (BEC) 生成の自動最適化を行った。ベイズ最適化法の実装は、COMBO ライブラリ [5] を自作のレーザー冷却装置の制御プログラムと接続することで実現した。COMBO は Python で、制御プログラムは Labview でそれぞれ動作するが、両ソフトウェアは TCP/IP ソケット通信を通じてリアルタイムで実験パラメータと実験結果をやりとりできる。これにより、学習器が最新の実験結果を逐次取り込んで予測を更新し、実験装置に新しい実験パラメータを指示するオンライン最適化の自動実験を行えるようにした。

室温の ^{87}Rb 気体から BEC を得るには磁気光学トラップから蒸発冷却まで複数のステップを経ることになるが、本研究では偏光勾配冷却と蒸発冷却に着目してそれぞれ最適化を行った。偏光勾配冷却に関しては、冷却に用いるレーザー光の周波数と強度、リポンプ光と呼ばれる補助的なレーザー光の強度、冷却時間の 4 パラメータの最適化問題として扱った。最適化の対象 (スコア) は偏光勾配冷却の後段に控える交差型光双極子トラップ (FORT) に移行できた原子数である。およそ 45 分の最適化で人手で見つけたパラメータと遜色なく、ランダム探索と比べると 3 倍大きいスコアが得られた。COMBO によるパラメータの探索範囲は装置が許容する全範囲であり、人間の事前知識を与えずとも基本的な探索が行えることが分かった。

偏光勾配冷却の後に交差型 FORT へ移行された低温の原子気体は、蒸発冷却によってさらに温度を下げられると BEC に転移する。図 1 にあるように、原子は FORT ビームが及ぼす双極子力によって 2 本の FORT ビームの交差点で保持される。この FORT ビームの強度を徐々に落とすことで原子のトラップポテンシャルを浅くし、運動エネルギーの大きい原子を選択的に捨て去ることで原子集団の平均速度を落とす過程を蒸発冷却という。ビーム強度の落とし方 (蒸発曲線) については素朴なモデルでは指数減衰型で構わないことが知られているが [6]、原子間の多体相互作用などがあるために個々の実験状況に応じて最適な曲線を人手で探索しているのが実際である。図 1b は我々の装置で用いている蒸発曲線のプロットである。この曲線に従って蒸発冷却を行うことで、温度 40 μK 、原子数 3.8×10^6 の気体から原子数 1.8×10^4 の BEC を生成することができる。より多くの原子を BEC へ移行させられる可能性を検討するため、図 1c に示すような最適化を COMBO に行わせた。蒸発曲線の長さや始点終点のレーザー強度は人手で見つけた曲線と同じ値に固定し、曲線の間部分に設けた 4 つの節にあたるレーザー光強度を調節することで一つの蒸発曲線が記述される。FORT ビームは 2 本あるので、全体で $4 \times 2 = 8$ パラメータの最適化問題を COMBO に解かせることになる。

最適化のパフォーマンスを図 2a に示す。およそ 3 時間/300 パラメータの試行で人手と同程度のスコアが得られた。探索は 400 パラメータまで行ったが、この試行回数では人手を凌駕するパラメータは発見されな

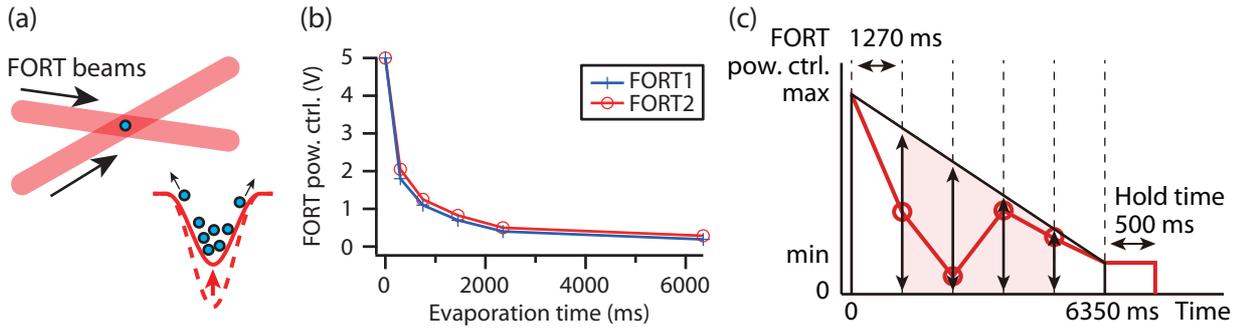


図 1: ^{87}Rb 蒸発冷却の自動最適化。(a) 交差型 FORT と蒸発冷却。(b) 人手で探索した蒸発曲線。縦軸は FORT ビーム強度をコントロールしているアナログ信号の電圧、横軸は時間で蒸発冷却の所要時間は 6.35 sec。(c) 蒸発曲線の自由パラメータ。始点から終点まで 1270 ms ごとに設けた 4 つの節を結んで蒸発曲線とする。COMBO は節の強度パラメータの値を薄紅色の台形領域内で自由に指定する。

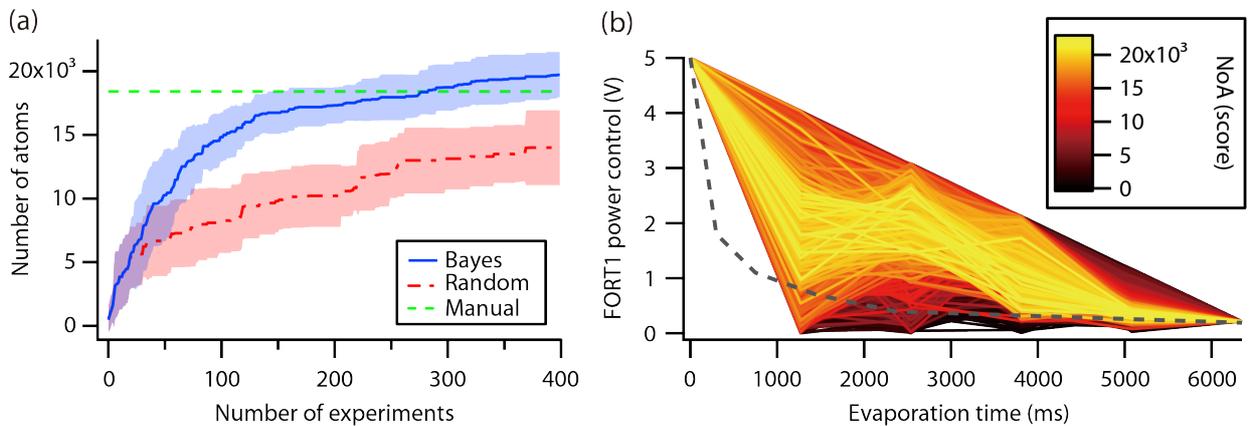


図 2: ^{87}Rb 蒸発冷却の最適化パフォーマンスと蒸発曲線。(a) 試行回数に対するスコアの推移。実験パラメータの試行回数に対してそれまでに得られたスコアの最大値をプロットした。実線は最適化実験を 16 セット繰り返した平均の軌跡で、半透明の帯は標準偏差を示している。(b) 最適化実験で得られた蒸発曲線。2 本の FORT ビームのうち 1 本について、16 セット合計 12480 試行の蒸発曲線から上位 5000 本をプロットした。点線は図 1b にも掲載した人手の蒸発曲線。

かった。特筆すべきはスコアの大きさよりも探索によって見つかった蒸発曲線である。図 2b に一連の最適化実験で得られた 12480 試行分の蒸発曲線から上位 5000 本のプロットを掲載した。線形が単調減少ではない、人手で探索を行う際には想定しないような蒸発曲線にも良好なスコアを与えるものが多くみられた。全体的な傾向としては、蒸発曲線の初期段階では良いスコアを与えるパラメータが広く分布しているのが見て取れる。蒸発が進んで 4 段階目の節になると良好なスコアを得られる強度パラメータの幅が狭くなったが、これは光トラップの保持力が小さい蒸発冷却の終盤では最適値からのわずかなズレも許されなくなるためと解釈できる。講演では、これらの結果についてパラメータ間の相関の分析も含めて議論する。

[1] P. B. Wigley *et al.*, *Sci. Rep.* **6**, 25890 (2016).
 [2] T. Lausch *et al.*, *Appl. Phys. B* **122**, 112 (2016).
 [3] A. D. Tranter *et al.*, *Nat. Commun.* **9**, 4360 (2018).
 [4] D. R. Jones *et al.*, *J. Glob. Optim.* **13**, 455 (1998).
 [5] T. Ueno *et al.*, *Mat. Disco.* **4**, 18 (2016).
 [6] C. A. Sackett *et al.*, *Phys. Rev. A* **55**, 3797 (1997).