

Министерство образования и науки Российской Федерации
Московский физико-технический институт (государственный
университет)

Физтех-школа физики и исследований им. Ландау (ЛФИ)
Кафедра Российского квантового центра
Лаборатория (Квантовые симуляторы и интегрированная фотоника)

Выпускная квалификационная работа бакалавра

Оптимизация бозе-эйнштейновского конденсата
атомов тулия на длине волны 1064 нм

Автор:

Студент группы Б02-910
Федотова Екатерина Александровна

Научный руководитель:

Акимов Алексей Владимирович

Научный консультант:

Кумпилов Давлет Асланбиевич



Москва 2023

Аннотация

В работе представлены результаты применения байесовской оптимизации к испарительному охлаждению атомов тулия и получению конденсата Бозе-Эйнштейна (БЭК). С помощью программного интерфейса управления экспериментальной установкой реализован алгоритм байесовской оптимизации на языке Python, обрабатывающий изображение атомов и строящий стохастическую модель зависимости т.н. функции стоимости от значений оптимизируемых параметров эксперимента. Проведены эксперименты с разными функциями стоимости и их влияние на итоговое количество атомов в БЭК. В результате получено макроскопическое ($2 \cdot 10^4$) число атомов в БЭК, исследованы особенности применения алгоритма к экспериментам с холодными атомами и влияние магнитного поля на эффективность и скорость испарения в оптической дипольной ловушке.

Обозначения и сокращения

БЭК – конденсат Бозе-Эйнштейна

МОЛ – магнито-оптическая ловушка

ОДЛ – оптическая дипольная ловушка

cost – функция стоимости ("cost function")

N_{BEC} - количество атомов в состоянии бозе-эйнштейновского конденсата

γ - скорость испарительного оглаждения

PSD - фазовая плотность (phase-space density)

Содержание

1	Введение	5
2	Экспериментальная установка	6
2.1	Этапы охлаждения. Кратко.	6
2.2	Оптическая дипольная ловушка	6
2.3	Система детектирования	9
2.4	Распределение Томаса-Ферми	10
3	Испарительное охлаждение	12
3.1	Идеальный гармонический газ в гармонической ловушке	12
3.2	Экспериментальное измерение частот ловушек	14
3.3	Испарительное охлаждение	15
4	Байесовская оптимизация.	18
4.1	Гауссовский процесс.	18
4.2	Оптимизация.	19
4.3	Реализация.	19
4.3.1	Параметры.	19
4.3.2	Стабильность установки	21
4.3.3	Предобучение	22
4.3.4	Функция стоимости (cost function)	23
4.4	Оптимизация эффективности испарительного охлаждения γ	24
4.5	Оптимизация количества атомов в БЭК разными cost	29
4.6	Направления дальнейшего исследования алгоритма	31
5	Заключение	32
	Список литературы	33

1 Введение

Лазерное охлаждение [1] – широкоиспользуемая техника в физике многих частиц, используемая для получения ультрахолодных атомов. Полученные ансамбли атомов и ионов используются в квантовой сенсорике [2], квантовой информатике [3, 4], гравиметрии [5, 6] и квантовых симуляторах [7, 8].

На основе одиночных ионов [9, 10] и ансамблей нейтральных атомов [11] получены современные оптические стандарты частоты с неточностью более 10^{-17} - 10^{-18} с и нестабильностью 10^{-18} например на Sr [12] и Yb [13]. В лабораториях идут работы по созданию компактных оптических часов [14, 15]. Одно из их применений – это построение карты гравитационного поля Земли [16], что полезно для поиска полезных ископаемых и навигации.

Проводились фундаментальные исследования проверки дрейфа фундаментальных констант [17] и поиска тёмной материи [18] с помощью ионов в радио-частотной ловушке.

Среди многочисленных платформ [19] реализаций идеи Феймана о квантовом компьютере [20, 21] особое место отводится квантовой симуляции на нейтральных атомах. Такую платформу можно настроить под определенный класс задач, которые будут симулировать определенную квантовую систему, решение которой затруднительно или невозможно для современных компьютеров или суперкомпьютера. Симулятор состоит из 1D/ 2D/ 3D оптической решётки, которая играет роль периодического потенциала в кристаллической решётки, и из находящихся в её узлах атомов, которые симулируют электроны в твёрдом теле [22]. В такой системе контролируются и параметры решётки, и сечение взаимодействия атомов, что даёт большую свободу для исследования эффектов в твёрдом теле и проверки фундаментальных теорий. Ведутся исследования по реализации моделей ферми- и бозе- хаббарда [23], исследуется переход от сверхтекучести БКШ к конденсату Бозе-Эйнштейна [22].

Для реализации большого числа упомянутых выше экспериментов в физике многих тел нужен источник конденсата Бозе-Эйнштейна (БЭК). Причём при транспортировке атомов [24] и их перегрузке из ловушки, где происходило охлаждение, в оптическую решетку атомное облако претерпевает большие потери в количестве. Поэтому критически важно иметь макроскопическое число атомов в начале пути. Для этого необходимо оптимизировать параметры охлаждения. В виду того, что таких параметров много, то ручным перебором найти наилучшую их комбинацию невозможно. Поэтому используется алгоритм машинного обучения - Байесовская оптимизация. Данный подход позволил оптимизировать параметры уставки в экспериментах по получению БЭК Rb и Tm, так что увеличилось количество атомов в конденсате, а также дало возможность оптимизировать время всей испарительной последовательности [25–27]. Байесовская оптимизация в приложении к получению конденсата показала превосходство над нейронными сетями и методом дифференциальной эволюции [28].

Целью данной работы было: 1) освоить алгоритм машинного обучения для работы с экспериментами по получению БЭК; 2) получить БЭК с помощью алгоритма и оптимизировать количество атомов в нём.

Во втором разделе будут описаны особенности экспериментальной установки и детектирования полученных атомных облаков. Разделе 3 посвящён теории испарительного охлаждения и экспериментальному измерению частот скрещенной оптической дипольной ловушки. В разделе 4 содержится общая теория гауссовских процессов и байесовской оптимизации, а исследование характеристик алгоритма и его результаты.

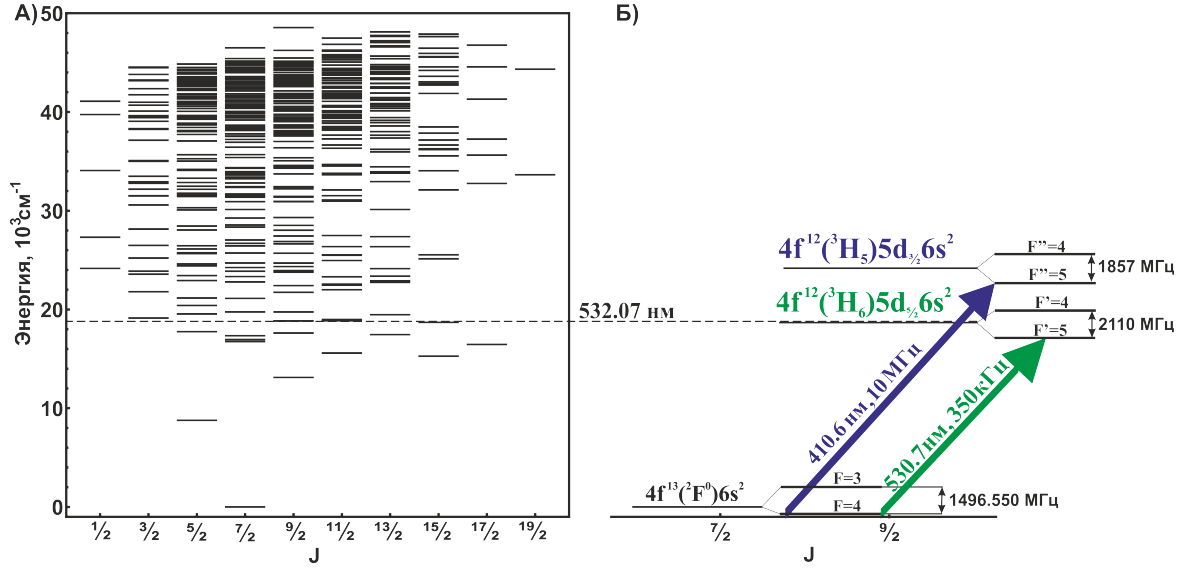


Рис. 2: А) Энергетическая схема уровней тулия. Уровни имеют полный электронный момент J , варьируемый от 0,5 до 9,5. Данные взяты из NIST. Б) Используемые в эксперименте атомные переходы, а также приведены величины их сверхтонкого расщепления [30]. Переходы с длинами волн 410.6 нм и 530.7 нм используются для МОЛ. Пунктиром отображена длина волны 532,07 нм оптической дипольной ловушки.

тельной частей атома смещаются в противоположных направлениях. Дипольный момент в свою очередь взаимодействует с осциллирующим электрическим полем.

Пусть $\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2}\vec{e}E(\vec{r})e^{-i\omega t} + c.c.$ – внешнее монохроматическое поле с частотой ω , где $\vec{E}(\vec{r})$ – амплитуда электрического поля, \vec{e} – единичный вектор поляризации излучения, $c.c.$ – комплексно сопряжённое слагаемое. Рассмотрим нейтральный двухуровневый атом с частотой перехода ω_0 . Тогда наведенный дипольный момент пропорционален внешнему полю и осциллирует на оптической частоте ω : $\vec{p}(\vec{r}) = \alpha_J \vec{E}(\vec{r}, t)$, где α_J – комплексная поляризуемость атома.

В таком случае потенциальная энергия взаимодействия атома и внешнего поля и скорость рассеяния:

$$U_{dip}(\vec{r}) = -\frac{1}{2}\langle \vec{p}(\vec{r}) \cdot \vec{E}(\vec{r}) \rangle_{time} = -\frac{2\pi a_B^3}{c} Real(\alpha) I(\vec{r})$$

$$\Gamma_{scattering} = \frac{P_{absorbition}}{\hbar\omega} = \left\langle \frac{\dot{\vec{p}} \cdot \vec{E}}{\hbar\omega} \right\rangle_{time} = \frac{4\pi a_B^3}{\hbar c} Im(\alpha_J) I(\vec{r}),$$

где $I(\vec{r}) = \frac{\epsilon_0 c}{2} |\vec{E}(\vec{r})|^2$ – интенсивность поля, c – скорость света, ϵ_0 – диэлектрическая постоянная, $P_{absorbition}$ – поглощенная осциллятором энергия, которая впоследствии переизлучается.

Из лоренцевской модели классического осциллятора:

$$\alpha_J = \frac{3c^3}{2a_B^3\omega_0} \cdot \frac{\Gamma/\omega_0^3}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma(\omega^3/\omega_0^2)},$$

где Γ – скорость спонтанного распада возбужденного уровня.

Когда электрическое поле сильно отстроено по частоте от атомного резонанса, возможно применение приближения вращающейся волны. В этом случае процессами нагрева можно пренебречь, так как скорость рассеяния фотонов очень низкая.

$$\Delta\omega = \omega - \omega_0 \gg \Gamma$$

$$U_{dip}(\vec{r}) = -\frac{3\pi c^2}{2\omega^3} \left(\frac{\Gamma}{\omega_0 - \omega} + \frac{\Gamma}{\omega_0 + \omega} \right) I(\vec{r})$$

$$\Gamma_{scattering}(\vec{r}) = \frac{3\pi c^2}{2\hbar\omega^3} \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^3 \left(\frac{\Gamma}{\omega_0 - \omega} + \frac{\Gamma}{\omega_0 + \omega} \right)^2 I(\vec{r})$$

Для многоуровневой системы суммируются вклады от всех переходов на рассматриваемый уровень.

Из приведенных выше формул видно, что при красной отстройке лазерного излучения от атомного резонанса ($\Delta\omega = \omega - \omega_0 < 0$) атомы будут захватываться в максимуме интенсивности луча. Таким образом атомы захватятся из МОЛ в оптическую дипольную ловушку. Также из формулы видно, почему выгодно использовать сильно отстроенное излучение, так как удерживающий потенциал, то есть глубина ловушки, пропорционален $I/\Delta\omega$, а рассеяние $I/(\Delta\omega)^2$. Таким образом увеличение отстройки подавляет потери из-за рассеяния, а потенциал при этом просаживается не так сильно.

Экспериментально ОДЛ создается сфокусированным лазерным лучом. Распределение интенсивности эллиптического гауссова пучка и потенциал ОДЛ:

$$I(x, y, z) = \frac{2P}{\pi w_y(x)w_z(x)} \exp \left[-\frac{2y^2}{w_y^2(x)} - \frac{2z^2}{w_z^2(x)} \right]$$

$$U_{dip} = -\frac{2\pi a_B^3 \text{Real}(\alpha)}{c} \frac{2P}{\pi w_y(x)w_z(x)} \exp \left[-\frac{2y^2}{w_y^2(x)} - \frac{2z^2}{w_z^2(x)} \right],$$

где P – мощность лазерного излучения; $w_y(x) = w_{0y}\sqrt{1 + (x/x_{Ry})^2}$ и $w_z(x) = w_{0z}\sqrt{1 + (x/x_{Rz})^2}$ – зависимость ширин пучка по уровню e^{-2} в зависимости от координаты распространения луча, w_{0y} и w_{0z} – минимальные размеры луча по уровню e^{-2} в перетяжке, $x_{Ry} = \frac{\pi w_{0y}^2}{\lambda}$ и $x_{Rz} = \frac{\pi w_{0z}^2}{\lambda}$ – длины Релея для соответствующих Оу и Оз осей.

Можно воспользоваться гармоническим приближением при учёте, что атомное облако собирается вблизи центра ОДЛ и его размер много меньше размера луча. Тогда можно записать частоты поперечных колебаний для такой ловушки:

$$U_{dip} \approx U_{dip(0,0,0)} + \sum_{i=x,y,z} \frac{\partial U_{dip}}{\partial i}(0,0,0)i + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U_{dip}}{\partial i^2}(0,0,0)i^2 =$$

$$= -\frac{2\pi a_B^3 \text{Real}(\alpha)}{c} \frac{2P}{\pi w_{0y}w_{0z}} \left[1 - \frac{2y^2}{w_{0y}^2} - \frac{2z^2}{w_{0z}^2} - \frac{1}{2}x^2 \left(\frac{1}{x_{Ry}^2} + \frac{1}{x_{Rz}^2} \right) \right]$$

$$\nu_{y,z} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{-4U_0}{m_{Tm}w_i^2}}, \quad \nu_x = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{-2U_0}{m_{Tm}x_{Rell}^2}} \quad U_0 = -2\pi a_B^3 \text{Real}(\alpha)I_0/c, \quad (2.1)$$

где $x_{Rell} = \frac{x_{Ry}x_{Rz}}{\sqrt{0.5(x_{Ry}^2 + x_{Rz}^2)}}$ – обобщенная длина Релея.

Динамическая поляризуемость в основном состоянии может быть найдена через экспериментально измеренные частоты (см. п.3.2) продольных колебаний атомов в ОДЛ:

$$\alpha = \pi^3 \varepsilon_0 c \frac{\nu_y^2 w_{0y}^3 w_{0z} m_{Tm}}{P} = \pi^3 \varepsilon_0 c \frac{\nu_z^2 w_{0z}^3 w_{0y} m_{Tm}}{P}$$

Из приведенных формул видно, что ось Ох является менее жесткой, что уменьшает эффективность испарительного охлаждения (см. п.3). Поэтому в эксперименте добавляется второй перпендикулярный луч, образуется скрещенная дипольная ловушка. Суммарный

потенциал и частоты:

$$U_{dip} = -\frac{2\pi a_B^3 \text{Real}(\alpha_1)}{c} \frac{2P_1}{\pi w_{01y} w_{01z}} \left[1 - \frac{2y^2}{w_{01y}^2} - \frac{2z^2}{w_{01z}^2} - \frac{x^2}{x_{1Rel}^2} \right] - \quad (2.2)$$

$$-\frac{2\pi a_B^3 \text{Real}(\alpha_2)}{c} \frac{2P_2}{\pi w_{02y} w_{02z}} \left[1 - \frac{2y^2}{w_{02y}^2} - \frac{2z^2}{w_{02z}^2} - \frac{x^2}{x_{2Rel}^2} \right] \quad (2.3)$$

$$\nu_{y,Crossed} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{-\frac{4}{m_{Tm}} \left(\frac{U_{01}}{w_{01y}^2} + \frac{U_{02}}{w_{02y}^2} \right)} \quad (2.4)$$

$$\nu_{z,Crossed} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{-\frac{1}{m_{Tm}} \left(\frac{4U_{01}}{w_{01y}^2} + \frac{2U_{02}}{z_{2Rel}^2} \right)} \quad (2.5)$$

$$\nu_{x,Crossed} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{-\frac{1}{m_{Tm}} \left(\frac{2U_{01}}{x_{1Rel}^2} + \frac{4U_{02}}{w_{02x}^2} \right)} \quad (2.6)$$

2.3 Система детектирования

Для снятия данных об атомном облаке используется камера CMOS. Снимаются 2 фотографии. Первое фото – это распределение интенсивности $I_{atoms}(x, y)$, полученное после прохождения широкого луча (на участке камеры можно считать как плоский фронт) резонансного синего света $\lambda = 410.6$ нм круговой поляризации через атомы ((более подробно описано [29])). Второе снимок – это распределение интенсивности луча I_{dark} , который прошёл ту же оптическую систему, но без атомов. Согласно закону Бугера-Ламберта-Бера, распределение интенсивности $I(x, y, z)$ проходящего пучка будет описываться уравнением:

$$\frac{dI}{dz} = -\sigma I(x, y, z) n(x, y, z),$$

где $\sigma = \frac{\sigma_0}{1+I(x,y,z)/I_s+(2\delta/\Gamma)^2}$ и $\sigma_0 = \frac{3\lambda^2}{2\pi}$ – резонансное сечение поглощения атомом одиночного фотона, I_s – интенсивность насыщения, $n(x, y, z)$ – распределение атомов в ловушке. Проинтегрировав это выражение по оси z , получаем:

$$f(x, y) = \ln \left[\frac{I_{dark}(x, y)}{I_{atoms}(x, y)} \right] + \frac{I_{dark}(x, y) - I_{atoms}(x, y)}{I_s} = \sigma_0 \int n(x, y, z) dz$$

То есть, это из двух фотографий получаем распределение атомов в ловушке, проинтегрирование вдоль оси распространение луча.

Примечание. В эксперименте не учитывается шум матрицы камеры, так как в отсутствии пучка показание пикселя камеры пренебрежимо мало и не превышает 1 из 255 внутренних единиц.

Пример использования.

Зная теоритическое распределение атомов в ловушке, полученную фотографию можно аппроксимировать теоритической функцией и тем самым получить желаемую информацию, такую как количество атомов и температуру. В случае термального распределения атомов в 3х-мерной гармонической ловушке использованное распределение – гауссовая функция (см. 3.1) или в случае наличия в облаке бозе конденсата – параболой (см. 2.4)

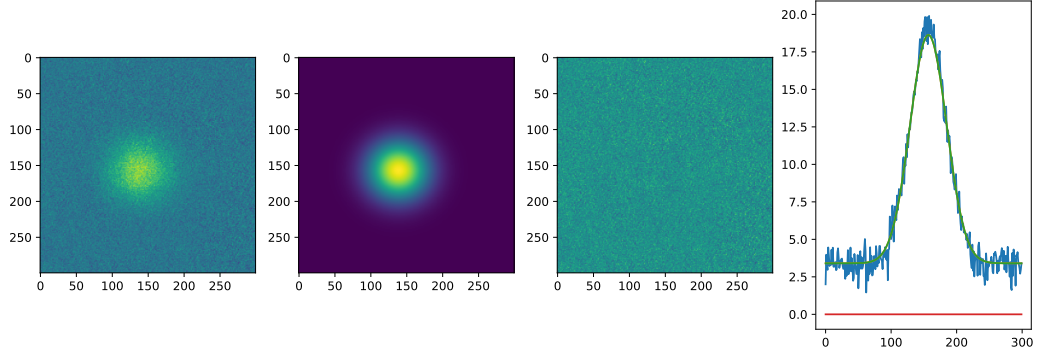


Рис. 3: Фотография атомного облака. Атомы в состоянии БЭК отсутствуют. Температура облака 0.215 мК, фазовая плотность 1.32

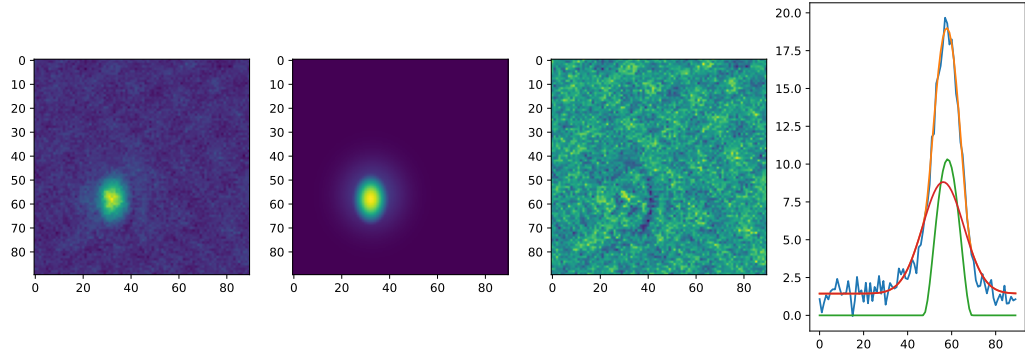


Рис. 4: Фотография атомного облака. Количество атомов в состоянии БЭК по фиту равно 20991

2.4 Распределение Томаса-Ферми

Уравнение Гросса-Питаевского описывает основное состояние квантовой системы тождественных бозонов:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} + V(\vec{r}) + \frac{1}{2} W_0 |\psi_{BE}(\vec{r})|^2 - \mu \right) \psi_{BE}(\vec{r}) = 0,$$

где $\psi_{BE}(\vec{r}) = \sqrt{N} \psi$ – волновая функция, которая описывает БЭК как единый объект, ψ – волновая функция одной частицы в БЭК, N – количество частиц; $V(\vec{r})$ – внешний потенциал; W_0 – коэффициент взаимодействия между частицами ($W_{ij} = W_0 \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$); μ – химический потенциал.

В приближении Томаса-Ферми мы пренебрегаем кинетической энергией БЭК, предполагая её малой по сравнению с внешним потенциалом и внутренним взаимодействием частиц:

$$n(\vec{r}) = |\psi_{BE}(\vec{r})|^2$$

$$\left(-\cancel{\frac{\hbar^2}{2m}} \Delta_{\vec{r}} + V(\vec{r}) + \frac{1}{2} W_0 |\psi_{BE}(\vec{r})|^2 - \mu \right) \psi_{BE}(\vec{r}) = 0$$

В таком случае алгебраически выражается плотность частиц. Рассмотрим случае одномерного осциллятора $V(x) = \frac{1}{2}m\omega x^2$:

$$n(\vec{r}) = \frac{\mu - V(\vec{r})}{W_0} = \frac{\mu - \frac{1}{2}m\omega x^2}{W_0}$$

С учетом нормировочного условия получаем выражения для химического потенциала:

$$\int_{-x_0}^{x_0} dx n(x) = \frac{2\mu x_0}{W_0} - \frac{m\omega x_0^3}{3W_0} = N$$

$$\mu(x_0) = \frac{W_0 N}{2x_0} + \frac{1}{6}m\omega x_0^2$$

Так как БЭК состоит из частиц, находящихся в своем основном состоянии, то чтобы найти границы ИЭК, нужно минимизировать $\mu(x_0)$:

$$\frac{\partial \mu(x_0)}{\partial x_0} = 0 \Rightarrow x_0 = \left(\frac{3W_0 N}{2m\omega} \right)^{1/3}, \quad \mu = \frac{1}{2}m\omega \left(\frac{3W_0 N}{2m\omega} \right)^{2/3}$$

Таким образом, получаем распределение плотности БЭК в приближении Томаса-Ферми:

$$n(x) = \frac{1}{2} \frac{m\omega}{W_0} \left[\left(\left(\frac{3W_0 N}{2m\omega} \right)^{2/3} - x^2 \right) \right]$$

Данная формула легко обобщается на 3х-мерный осциллятор. Отсюда видно, что БЭК на фотографиях с эксперимента аппроксимируется 3х-мерной параболой, в отличие от термального облака, где для фита используется нормальное гауссово распределение.

3 Испарительное охлаждение

3.1 Идеальный гармонический газ в гармонической ловушке

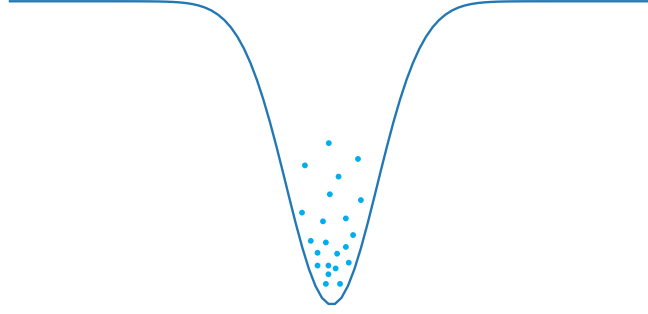


Рис. 5: Идеальный гармонический газ в гармонической ловушке

Объект нашей работы - бозе газ атомов тулия. Охарактеризуем его распределения в гармонической ловушке. Для решения этой задачи вспомним, что из статистической физики следует, что вместимость (c_i) энергетического уровня (E_i) выражается как:

$$c_i = c_0 e^{-\frac{E_i}{k_B T}},$$

где k_B – константа Больцмана, c_0 вместимость состояния с энергией $E = 0$. Замечание: если $c_0 \ll 1$, то газ классический, не вырожденный.

Общее число частиц: $N = \sum_i c_i = c_0 \sum_i e^{-\frac{E_i}{k_B T}}$

Распределение атомов в 6 D - мерном фазовом пространстве (или Phase Space Density - PSD):

$$\rho(\vec{r}, \vec{p}) = \rho_0 e^{-\frac{E(\vec{r}, \vec{p})}{k_B T}}$$

, где ρ_0 пиковая PSD, h^3 - объем в 6-мерном пространстве, занимаемый одним состоянием.

$$N = \frac{1}{h^3} \int \rho(\vec{r}, \vec{p}) d^3r d^3p$$

Энергия

$$E(\vec{r}, \vec{p}) = E_{\text{kin}}(\vec{p}) + E_{\text{pot}}(\vec{r}) = \left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} \right) + \left(\frac{m\omega_x^2 x^2}{2} + \frac{m\omega_y^2 y^2}{2} + \frac{m\omega_z^2 z^2}{2} \right),$$

где $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ - частоты ловушки, экспериментальное измерение которых будет описано ниже.

Для удобства введём обозначение средней частоты ловушки, которая является средним геометрическим от координатных частот: $\bar{\omega} = \sqrt[3]{\omega_x \omega_y \omega_z}$

Также из формулы инергии выпишем стандартное отклонение для импульса и координат: $\sigma_p^2 = mk_B T$; $\sigma_x^2 = \frac{k_B T}{m\omega_x^2}$; $\sigma_y^2 = \frac{k_B T}{m\omega_y^2}$; $\sigma_z^2 = \frac{k_B T}{m\omega_z^2}$

Таким образом, заметим, что Больцмановская экспонента факторизуется, что значительно облегчает вычисление количества частиц и распределений:

$$\begin{aligned} e^{-\frac{E}{k_B T}} &= \exp \left(-\frac{p_x^2}{2mk_B T} - \frac{p_y^2}{2mk_B T} - \frac{p_z^2}{2mk_B T} - \frac{m\omega_x^2 x^2}{2k_B T} - \frac{m\omega_y^2 y^2}{2k_B T} - \frac{m\omega_z^2 z^2}{2k_B T} \right) = \\ &= e^{-\frac{p_x^2}{2\sigma_p^2}} e^{-\frac{p_y^2}{2\sigma_p^2}} e^{-\frac{p_z^2}{2\sigma_p^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} e^{-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
N &= \frac{\rho_0}{h^3} \int d^3r d^3p e^{-\frac{E(\vec{r}, \vec{p})}{k_B T}} = \frac{\rho_0}{h^3} \int d^3r d^3p e^{-\frac{p_x^2}{2\sigma_p^2}} e^{-\frac{p_y^2}{2\sigma_p^2}} e^{-\frac{p_z^2}{2\sigma_p^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} e^{-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}} = \\
&= \frac{\rho_0}{h^3} \int dp_x e^{-\frac{p_x^2}{2\sigma_p^2}} \int dp_y e^{-\frac{p_y^2}{2\sigma_p^2}} \int dp_z e^{-\frac{p_z^2}{2\sigma_p^2}} \int dx e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} \int dy e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} \int dz e^{-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}} = \\
&= \frac{\rho_0}{h^3} (\sqrt{2\pi})^6 \sigma_p^3 \sigma_x \sigma_y \sigma_z = \frac{\rho_0}{h^3} \frac{(2\pi k_B T)^3}{\omega_x \omega_y \omega_z} = \frac{\rho_0}{h^3} \left(\frac{k_B T}{\bar{\omega}} \right)^3
\end{aligned}$$

Отсюда получаем выражение для пиковой фазовой плотности и распределение фазовой плотности:

$$\begin{aligned}
\rho_0 &= N \left(\frac{\hbar \bar{\omega}}{k_B T} \right)^3 \\
\frac{\rho(\vec{r}, \vec{p})}{h^3} &= N \left(\frac{\bar{\omega}}{2\pi k_B T} \right)^3 e^{-\frac{p_x^2}{2\sigma_p^2}} e^{-\frac{p_y^2}{2\sigma_p^2}} e^{-\frac{p_z^2}{2\sigma_p^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} e^{-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}}
\end{aligned}$$

Распределение плотности частиц в координатном пространстве получается интегрированием выражения выше по импульсам с учетом размера "ячейки" в фазовом пространстве:

$$\begin{aligned}
n(\vec{r}) &= h^{-3} \int d^3p \rho(\vec{r}, \vec{p}) = N \left(\frac{\bar{\omega}}{2\pi k_B T} \right)^3 \int d^3p e^{-\frac{p_x^2}{2\sigma_p^2}} e^{-\frac{p_y^2}{2\sigma_p^2}} e^{-\frac{p_z^2}{2\sigma_p^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} e^{-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}} = \\
&= N \left(\frac{\bar{\omega}}{2\pi k_B T} \right)^3 \cdot e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} e^{-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}} \cdot (2\pi)^{3/2} \sigma_p^3 = N \left(\frac{m \bar{\omega}^2}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} e^{-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}} = n_0 e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} e^{-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}}
\end{aligned}$$

где введено обозначение пиковой плотности $n_0 = N \left(\frac{m \bar{\omega}^2}{2\pi k_B T} \right)^{3/2}$. Заметим, что распределение плотности частиц имеет гауссовый профиль.

Причем средняя плотность будет меньше пиковой в $\sqrt{8}$ раз:

$$\bar{n} = \int d^3r n(\vec{r}) \frac{n(\vec{r})}{N} = n_0 \frac{n_0}{N} \sigma_x \sigma_y \sigma_z \pi^{3/2} = n_0 \left(\frac{m \bar{\omega}^2}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \left(\frac{k_B T}{m \bar{\omega}^2} \right)^{3/2} \pi^{3/2} = \frac{1}{\sqrt{8}} n_0$$

Выведем распределение энергии.

$$E(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + \frac{m\omega_x^2 x^2}{2} + \frac{m\omega_y^2 y^2}{2} + \frac{m\omega_z^2 z^2}{2} = s_1^2 + s_2^2 + s_3^2 + s_4^2 + s_5^2 + s_6^2 = s^2,$$

где s – радиус в 6-мерном пространстве, $s_i = \frac{p_j}{\sqrt{2m}}$ ($i = 1, 2, 3; j = x, y, z$) и $s_i = \sqrt{\frac{m}{2}} \omega_j j$ ($i = 4, 5, 6; j = x, y, z$).

Количество состояний с энергией ниже E – объём гиперболы с радиусом s :

$$G(E) = \frac{1}{h^3} \int_{E' < E} d^3r' d^3p' \frac{dp_x = \sqrt{2m} ds_1}{dx = \frac{2}{m\omega_x^2} ds_4} \frac{8}{h^3 \bar{\omega}^3} \int_{s' < s} d^6 s' = \frac{8\pi^3}{6h^3 \bar{\omega}^3} s^6 = \frac{E^3}{6h^3 \bar{\omega}^3}$$

Плотность состояний:

$$D(E) = \frac{E^2}{2h^3 \bar{\omega}^3}$$

Распределение частиц по энергии:

$$f(E) = D(E) \times \rho(E) = N \frac{E^2}{2k_B T^3} e^{-\frac{E}{k_B T}}$$

Как и следовало ожидать, если проинтегрировать данное выражение по энергии, то

получим общее количество частиц:

$$\int_0^{\infty} dE f(E) = \int dE N \frac{E^2}{2k_B^3 T^3} e^{-\frac{E}{k_B T}} \xrightarrow{x=\frac{E}{k_B T}} \frac{N}{2} \int_0^{\infty} dx x^2 e^{-x} = N$$

Средняя энергия на одну частицу:

$$\bar{E} = \frac{1}{N} \int_0^{\infty} dE E f(E) \xrightarrow{x=\frac{E}{k_B T}} \frac{1}{2} k_B T \int_0^{\infty} dx x^3 e^{-x} = 3k_B T$$

Локальная фазовая плотность $\rho(\vec{r}) \equiv \rho(\vec{r}, 0)$:

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}, \vec{p}) &= \rho_0 e^{-\frac{E(\vec{r}, \vec{p})}{k_B T}} = \rho_0 e^{-\frac{E_{\text{pot}}(\vec{r})}{k_B T}} e^{-\frac{p^2}{2mk_B T}} = \rho(\vec{r}) e^{-\frac{p^2}{2mk_B T}} \\ n(\vec{r}) &= h^{-3} \int d^3 p / \rho(\vec{r}, \vec{p}) = h^{-3} \rho(\vec{r}) \int d^3 p e^{-\frac{p^2}{2mk_B T}} = h^{-3} \rho(\vec{r}) (2\pi mk_B T)^{3/2} \\ \rho(\vec{r}) &= n(\vec{r}) \left(\frac{h^2}{2\pi mk_B T} \right)^{3/2} = n(\vec{r}) \cdot \Lambda^3, \end{aligned}$$

где Λ – длина тепловой волны Бройля, Λ^3 – квантовый объём. Полученная формула показывает, что локальная фазовая плотность получается из произведения распределения плотности частиц умноженное на квантовый объём, зависящий от температуры системы и массы частицы. Λ характеризует, когда систему нужно рассматривать как квантовую: если среднее расстояние между частицами меньше, чем Λ , значит что мы находимся в классическом режиме.

Более ощутимый критерий: $\rho(\vec{r}) \ll 1$ – классический режим. Когда $\rho \sim 1$ волновые функции отдельных частиц перекрываются и переходим в квантовый режим, где важную роль играет природа частицы и соответствующая статистика (ферми или бозе).

3.2 Экспериментальное измерение частот ловушек

Чтобы охарактеризовать ОДЛ, необходимо знать частоты дипольной ловушки. Измерения проводятся по атомному облаку в ловушке, а точнее по колебанию центра масс облака или по колебанию его размера. Пошагово алгоритм можно описать следующим образом:

1. Холодные атомы перегружаются в дипольную ловушку, которая создана лучом $\lambda = 1064$ нм на максимальной доступной мощности P_0
2. Для возбуждения осцилляций вдоль оси ОХ (ОZ) в скрещенной ловушке уменьшается мощность луча ОХ (ОZ) ловушки. Ждём небольшое время τ , когда система придет в равновесное состояние. Как следствие облако атомов расширяется под новую ловушку.
3. Возвращаем изначальную мощность луча.
4. Теперь через время t фотографируем облако. Фотография это разрушающее измерение путем поглощения атомов резонансной волны (описано в разделе 2.3). Поэтому необходимо снова повторить шаг 1-3 и снять облако уже при времени $t + \Delta t$ и так далее.

В результате получаем график осцилляций по соответствующей оси (ОУ или ОZ) размера облака от времени. Полученную частоту из этого графика нужно поделить на 2, чтобы получить частоту осцилляций центра масс, то есть частоту ловушки. Из эксперимента рис. 6 получаем $\nu_x = 32$ Гц и $\nu_z = 550$ Гц.

Из формулы 2.4 раздела 2.2 видно, что ν_y пересчитывается из перетяжек горизонтального и вертикального пучков ОДЛ w_{01y} и w_{02y} , которые измеряются с помощью ССД камеры. Ввиду малости перетяжек $w_{01x}, w_{02x}, w_{01z}, w_{02z}$ погрешность прямого измерения

размера перетяжек будет значительной, поэтому они пересчитываются с помощью 2.1:

$$\frac{-4U_0}{m_{Tm}(2\pi)^2} = \nu_z^2 w_z^2 = \nu_y^2 w_y^2 = \nu_x^2 w_x^2,$$

где $\nu_i, i = x, z$ - промеряются описанным выше способом, но для ловушки, которая образована одним соответствующим лучом.

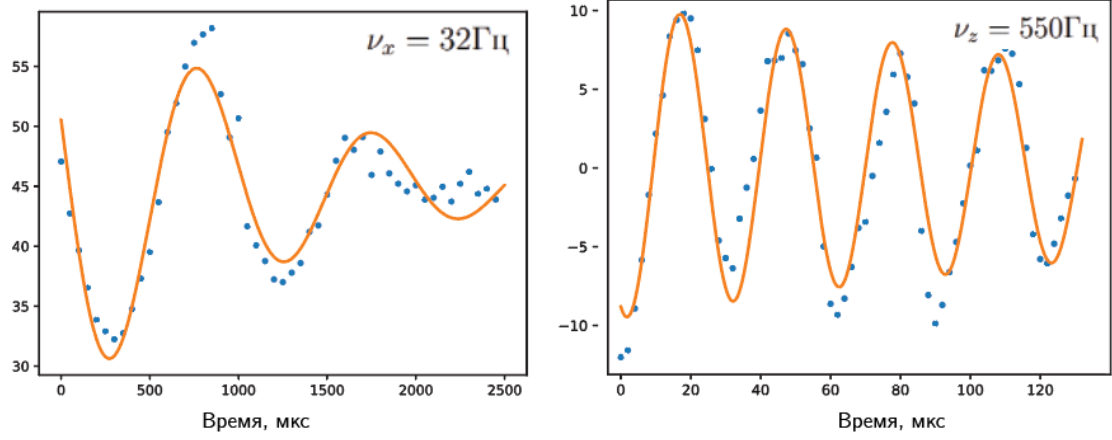


Рис. 6: Экспериментальное измерение частот ловушек

3.3 Испарительное охлаждение

На этапе магнитооптической ловушки можно достигнуть температуры \sim мК, обусловленная выражением $E_{\text{kin}} \sim k_B T$. Эта температура всё ещё на порядок выше температуры вырождения атомов тулия. Поэтому для дальнейшего охлаждения необходимо использовать другой метод, напиме, испарительное охлаждение. Название говорит само за себя - можно проследить аналогию с остывающей чашкой чая, где резервуар путем оспарения покидают самые горячие частицы и поэтому общая температуры напиток понижается.

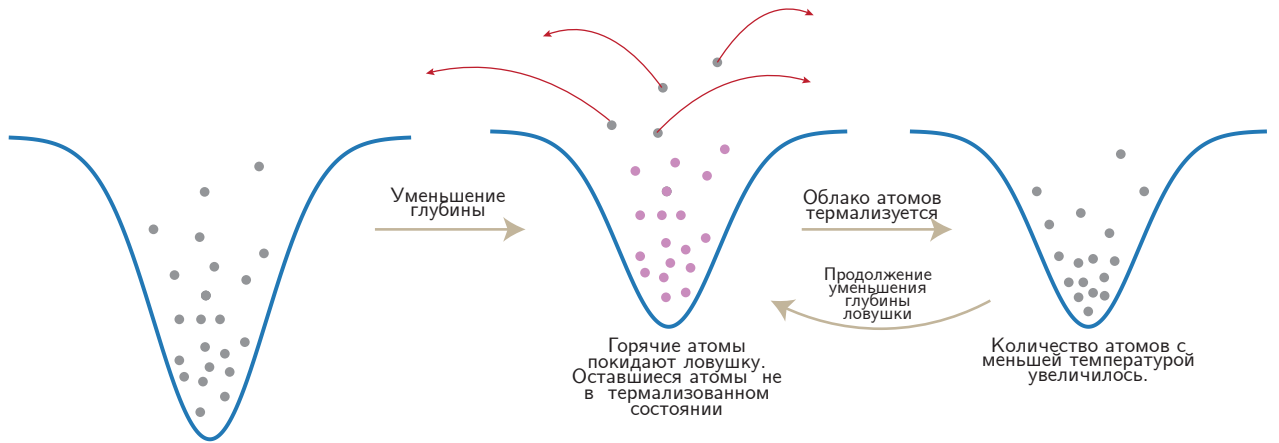


Рис. 7: Испарительное охлаждение

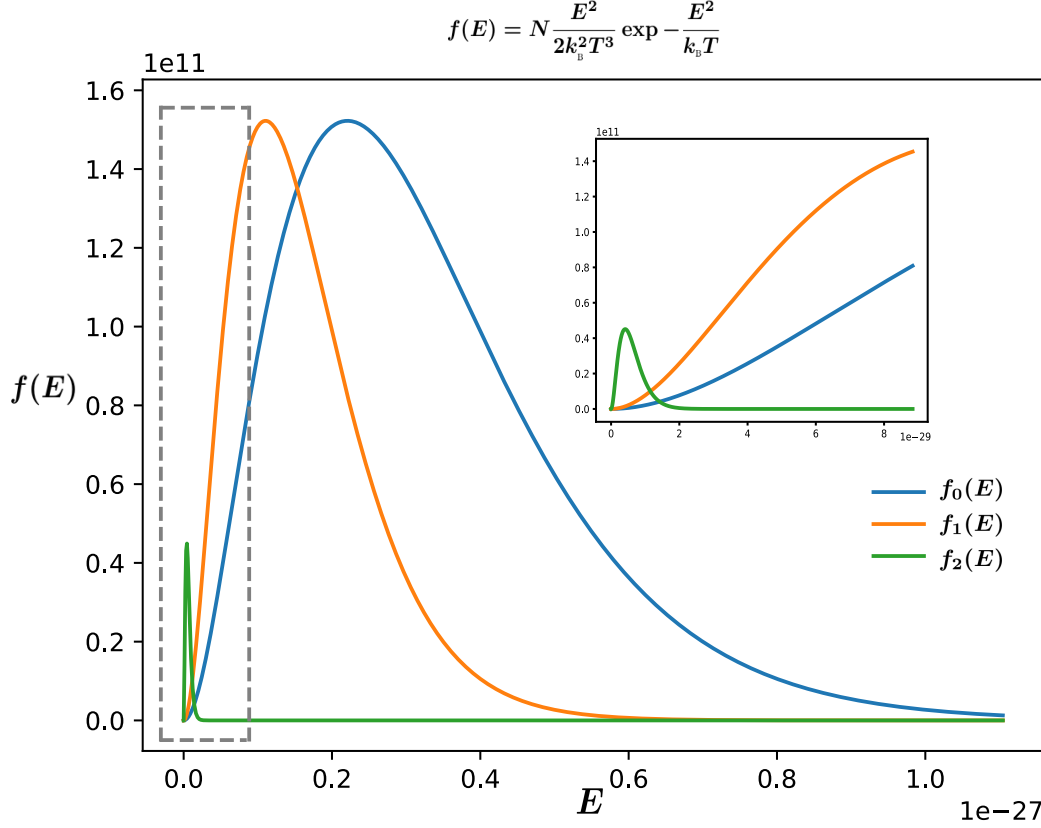


Рис. 8: Энергетическое распределение атомов при разной температуре при испарительном охлаждении

Начальное распределение атомов по энергии (рис.8):

$$f_0(E) = N_0 \frac{E^2}{2k_B^2 T_0^3} \exp - \frac{E^2}{k_B T_0}$$

Полная энергия: $E_0 = 3N_0 k_B T_0$

Введём параметр η - параметр усечения хвоста распределения, то есть считаем, что все атомы, имеющие имергию больше $\eta k_B T_0$, покидают ловушку и оставшиеся атомы N_1 термализуются к новой температуре T_1 .

$$N_1 = \int_0^{\eta k_B T_0} dE f_0(E) \longrightarrow \frac{N_1}{N_0} = 1 - \frac{1}{2}(\eta^2 + 2\eta + 1) e^{-\eta}$$

$$E_1 = \int_0^{\eta k_B T_0} dE E f_0(E) \longrightarrow \frac{E_1}{E_0} = 1 - \frac{1}{6}(\eta^3 + 2\eta^2 + 6\eta + 6)e^{-\eta}$$

$$T_1 = \frac{E_1}{3N_1 k_B} \longrightarrow \frac{T_1}{T_0} = \frac{E_1}{E_0} \frac{N_0}{N_1}$$

$$\rho = N \left(\frac{\hbar \bar{\omega}}{k_B T} \right)^3 \longrightarrow \frac{\rho_1}{\rho_0} = \frac{N_1}{N_0} \left(\frac{T_1}{T_0} \right)^{-3}$$

Пример $\eta = 5$: $\frac{N_1}{N_0} = 0.88$, $\frac{T_1}{T_0} = 0.84$, $\frac{\rho_1}{\rho_0} = 1.48$

Наша цель в испарительном охлаждении это повысить фазовую плотность атомного облака, чтобы перейти к плотностям конденсата. И как видно из примера при такой тактике охлаждения всего за одну итерацию возможно увеличение фазовой плотности почти в 1.5 раза. Но цена – это потеря атомов, которых нам хотелось бы оставить как можно больше. Поэтому вводится естественный параметр для оптимизации γ – скорость испарительного охлаждения, отражающий зависимость как быстро мы увеличиваем фазовую плотность по отношению к потере атомов. В дальнейшем этот параметр будет заложен в основу алгоритма машинного обучения как функция стоимости (cost function).

$$\frac{\rho_1}{\rho_0} = \left(\frac{N_1}{N_0} \right)^{-\gamma} \longrightarrow \gamma = -\frac{\log(\rho_1/\rho_0)}{\log(N_1/N_0)}$$

4 Байесовская оптимизация.

Байесовская оптимизация - это широко используемый метод нахождения экстремума шумной предварительно неизвестной функции, вычисление значения которой в точке дорого по времени или другим ресурсам. Примером задачи может служить оптимизация гиперпараметров нейронной сети (количество слоёв и нейронов, активационная функция слоя, коэффициент скорости обучения и так далее). То есть параметров много, а тестирование отдельной комбинации может достигать часов или дней, поэтому полным перебором параметров узнать оптимальную комбинацию невозможно. Другой пример использования, где затраты не только по времени, - оптимизация параметров крыла самолёта. Изготовление и экспериментальная проверка долгая и дорогая.

В нашем случае нужно оптимизировать параметры испарительного охлаждения в оптической дипольной ловушке. В данной работе оптимизировались мощность горизонтального и вертикального пучков, а также ширина горизонтального пучка. Изменение мощности и ширины пучков во времени задается линейной аппроксимацией. После прохождения цикла охлаждения с заданными параметрами делается фотография, из которой можно достать всю необходимую информацию (количество атомов, температуру и тд, см раздел 2.3). По этим данным высчитывается функция стоимости, минимум которой необходимо найти. В последующих разделах будет более подробно описано, как выбирается функция стоимости, но сейчас немного более подробно остановимся на теоретической составляющей алгоритма Байесовской оптимизации, которая позволяет находить минимум этой функции. Этой теме посвящено много книг и разборов, поэтому в данной работе будет краткий обзор для прояснения идеи.

4.1 Гауссовский процесс.

В основе байесовской оптимизации лежит Гауссовский процесс (GP). По сути GP решает задачу нелинейной регрессии, когда требуется найти значение функции в точке x , зная ее значение $f_{i=1..N}$ в конечном наборе других точек $x_{i=1..N}$. Основным преимуществом GP является то, что он также даёт неопределенность предсказанного значения. Задача формулируется в предположении, что неопределённость значения функции от многих параметров задаётся многомерным гауссовым распределением. Известное свойство такого распределение - интегрирование по любой оси даст снова гауссово распределение. (больше слов и объяснений сюда)

$$p(y_1, y_2) = \mathcal{N} \left[\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} A & B \\ B^T & C \end{pmatrix} \right]$$
$$p(y_1|y_2) = \frac{p(y_1, y_2)}{p(y_2)} = \mathcal{N}[a + BC^{-1}(y_2 - b), A - BC^{-1}B^T]$$

Обозначим \mathbb{E} - мат. ожидание, $m[\mathbf{x}]$ - функция среднего, $k[\mathbf{x}, \mathbf{x}']$ - функция ковариации.

Тогда прогнозируемая функция (без учёта шума): $f[\mathbf{x}] \sim GP[m[\mathbf{x}], k[\mathbf{x}, \mathbf{x}']]$, причём $\mathbb{E}[f[\mathbf{x}]] = m[\mathbf{x}]$, $\mathbb{E}[(f[\mathbf{x}] - m[\mathbf{x}])(f[\mathbf{x}'] - m[\mathbf{x}'])] = k[\mathbf{x}, \mathbf{x}']$

Самый распространенный выбор функции корреляции (ядра GP) - экспоненциальное ядро: $k[\mathbf{x}, \mathbf{x}'] = \alpha^2 \cdot \exp \left[-\frac{d^2}{2\lambda} \right]$, где d - евклидово расстояние между точками ($d = \sqrt{(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}^2$), α, λ - гиперпараметры ядра. При малой α^2 функция слабо изменяется в вертикальном направлении. А при малом λ (часто называется как важность параметра) функция становится менее гладкой и резко изменчивой при движении в направлении

неисследованных областей.

4.2 Оптимизация.

После гауссовского процесса у нас есть прогноз на функцию от многих переменных cost и неопределенность этого прогноза в каждой её точке. Напомним, что в саму функцию заложены величины, которые нужно оптимизировать, а переменные функции - это параметры установки, которые варьируются в процессе обучения. Таким образом, теперь можно проверять потенциальные точки минимума cost функции не в слепую. Выбор новой точки из прогноза преследует две цели: проверить точки, где ожидается минимум cost функции, либо проверить точку с наибольшей неопределенностью прогноза. Такой подход направлен на избежание застревания в локальных минимумах функции.

Чуть более строго говоря, на основе модели, сгенерированной гауссовским процессом, составляется "функция приобретения" (acquisition function, AC), как

$$f_{\text{ac}}(\theta) = \alpha\mu(\theta) + \beta\sigma(\theta)$$

, где $\mu(\theta)$ - предсказанное среднее значение в точке θ со стандартным отклонением $\sigma(\theta)$; α и β - фиксированные во время обучения коэффициенты.

Так как значение функции $f_{\text{ac}}(\theta)$ мы знаем во всех точках, то точку её минимума θ_0 можно найти например с помощью метода градиентного спуска. Точка θ_0 и будет новой точкой, где проверяется значение функции cost на минимальность. Следующий шаг, это снова запустить гауссовский процесс с учётом новой измеренной точки и пересчитать функцию приобретения.

4.3 Реализация.

Код программы написан на языке Python с использованием пакета M-LOOP (Machine-Learner Online Optimization Package) и запускается на компьютере №1. Параметры физической установки охлаждения атомов управляются с помощью платформы Labview, установленной на компьютере №2. Они синхронизируются управляющей платой Arduino, которая дополнительно перед каждым новым запуском проверяет привязку лазеров к резонансным длинам волн (411 нм и 531 нм). Эта проверка позволяет вовремя устранить неисправность и при этом не даёт оптимизатору получить заведомо ложные данные.

4.3.1 Параметры.

Параметры

Цель - оптимизировать на этапе испарительного охлаждения мощности горизонтального (hor) и вертикального (vert) лучей скрещенной дипольной ловушки, а также ширину (shake) горизонтального луча. Три эти функции (hor, vert, shake) являются функциями от времени и задаются кусочно-линейно. Границы отрезков кусочно-линейной функций оптимизируются описанным выше методом, чаще всего кроме начальной точки, которая соответствует максимальной допустимой мощности на установке для каждой из функций. Кроме того, разбиение функций по времени фиксировано во время обучения.

Например (рис.9), горизонтальный пучок задаётся с помощью начального значения во время t_{h_0} и 8 изменяемых значений во времена t_{h_1}, \dots, t_{h_8} , аналогично в вертикальном пучке фиксируются значения $t_{v_{01}}, t_{v_{02}}$ с соответствующим максимальным значением функции vert и варьируется значение 1 точки t_{v_1} . И последняя функция shake, отвечающая за ширину

пучка, задаётся 4 значениями $t_{s_0}, t_{s_1}, t_{s_2}, t_{s_3}$, где в данном примере установлено равенство функции во времена t_{s_0} и t_{s_1} и фиксировано значение t_{s_3} на минимальном допустимом значении. На рис.9 с одного из запусков алгоритма оптимизации отображены допустимые границы изменения каждого параметра, о чём будет более подробно рассказано ниже, а также 3 набора функций. Таким образом, получаем пространство из 11 параметров, на которых задаётся функция стоимости cost , минимум которой мы стремимся найти. Чем больше размерность исследуемого пространства, тем сложнее найти в нём минимум функции и алгоритму машинного обучения понадобится больше итераций, чтобы сойтись. Это является ограничением на количество параметров, которые стоит рассматривать. В горизонтальном пучке скрещенной дипольной в начале испарительной последовательности мощность сильно выше, чем в вертикальном, поэтому испарение в начале идёт только изменением интенсивности горизонтального пучка.

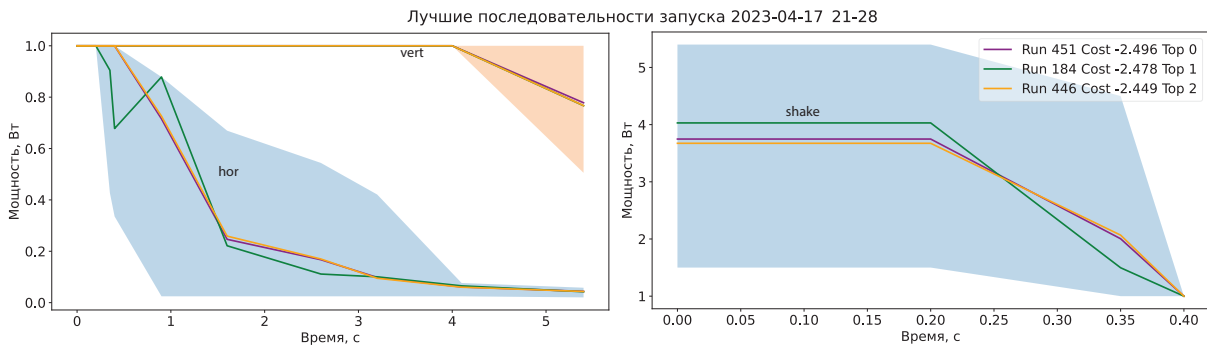


Рис. 9: Пример полученных оптимизатором кусочно-линейных функций, которые подаются на установку

Границы (*boundary*)

Дополнительно накладывается ограничение на возможные значения параметров. Это даёт подсказку алгоритму, в какой области искать оптимум. Очевидными ограничениями для каждого параметра является его положительность и максимальная мощность. Тем не менее это слишком большая область для поиска, и более того, не учитывает общую тенденцию функций hor , vert и shake к уменьшению. Поэтому границы для каждого параметра выставляются вручную перед запуском алгоритма оптимизации. Однако важно не слишком сильно зажать их, так как в таком случае возможно, что алгоритму будет недоступно проверить не очевидные для человека, но более оптимальные значения параметров. Следовательно, может потеряться одно из главных преимуществ использования байесовской оптимизации - поиск неординарного, но более удачного решения.

Таким образом, выставление вручную границы возможных значений параметров может сильно повлиять на конечный результат оптимизации. Если границы слишком широкие, то алгоритм может просто не сойтись к ответу. А если они слишком узкие, то в процессе работы алгоритма, можно заметить, что он выбирает в качестве наиболее удачных параметров те, что находятся на границах. Это позволяет сделать вывод, что алгоритму не хватает свободы и нужно расширить границы, так как, возможно, более удачная комбинация параметров лежит за ними.

Ещё одно ограничение на выбор границ - особенность фита фотографии. Фотография аппроксимируется двумерным гауссовым распределением, из которого берутся значения количества атомов в ловушке и температуры. Если границы параметров hor будут слишком

широкими, то это приводит к тому, что анализируемая фотография имеет "хвосты" (рис. 10). Это связано с тем, что в такой ловушке атомы еще относительно горячие и как бы поднимаются из скрещенной и попадают в область горизонтального пучка. Выходит, что физически, такую фотографию нельзя фитить как только двумерное гауссово распределение, и это приводит к ложной оценке cost функции. Такое может произойти, когда оптимизируется начало испарительной последовательности.

Подводя итог обсуждения границ, можно подчеркнуть важность правильной установки границ параметров, за корректностью которых нужно следить в процессе оптимизации, чтобы понять, нужно ли их сузить или расширить.

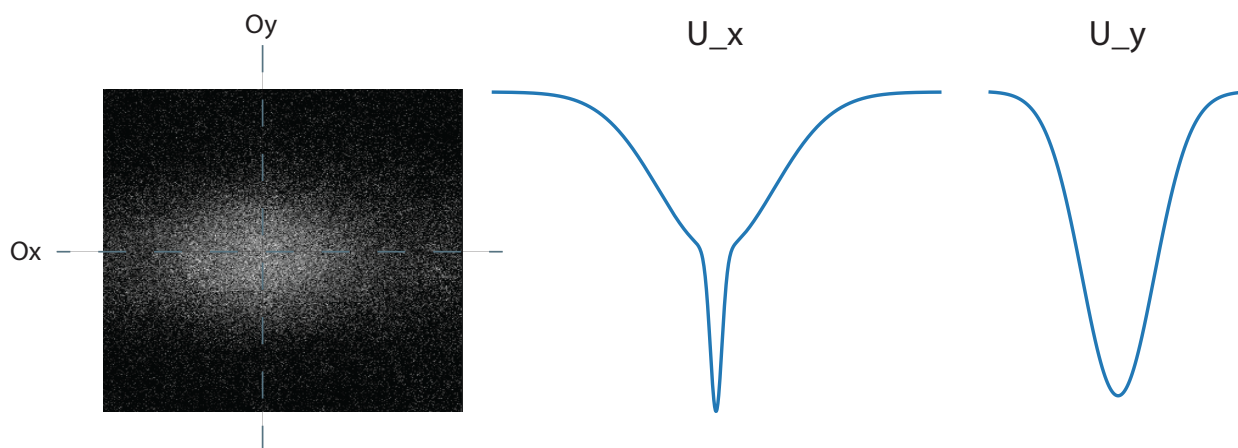


Рис. 10: Фотография относительно горячих атомов. Схематичный рисунок потенциала скрещенной ОДЛ

Важность параметров

Гиперпараметры ядра гауссового процесса можно интерпретировать как важность соответствующего параметра оптимизации 4.1. Эту величину можно использовать для отбора параметров с целью сокращения их количества и улучшения сходимости [26]. По графику зависимости гиперпараметров от количества точек в модели (11) можно увидеть намёк на сходжение алгоритма. Когда порядок важности параметров почти не меняется при следующих итерациях алгоритма, это свидетельствует о том, что новые точки не добавляют новой информации в статистическую модель эксперимента.

Данные о важности параметры дают возможность проверить корректность работы установки. Например, если параметр, который по физическим соображениям должен сильно влиять на cost функцию, а на деле по графику оказывается совершенно неважным, то это потенциальный признак, что стоит проверить правильность работы, например, электрической схемы, меняющий данный параметр. Ведь может оказаться, что до прибора не доходит измененное значение параметра. Тогда по факту величины напряжений на установке не изменятся и cost функция останется та же, но алгоритм припишет её значение другой комбинации параметров.

4.3.2 Стабильность установки

Стабильность на разных этапах охлаждения.

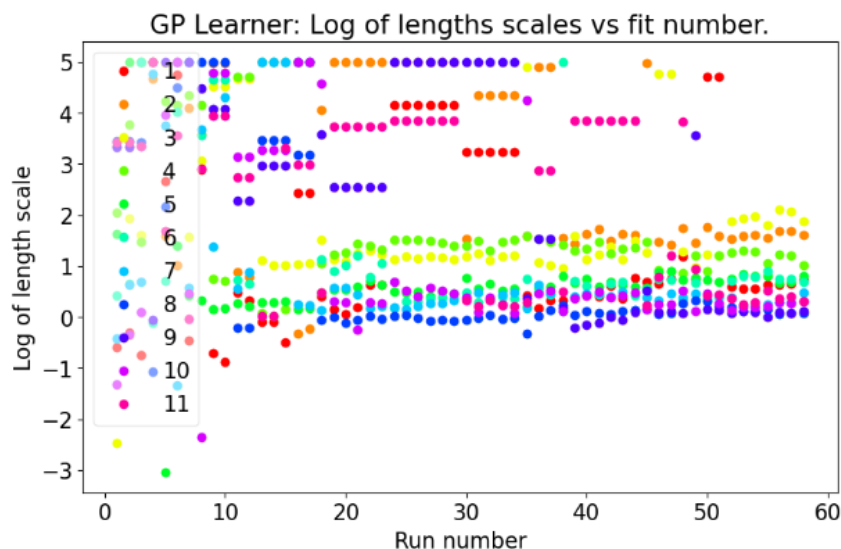


Рис. 11: График важности параметров из оптимизатора

Так как вычисление функции стоимости происходит по реальной фотографии атомов, которая получена после отрабатывания испарительного цикла с заданными параметрами, то на cost функция отражается так называемое уплывание установки. То есть за счёт различных шумов и нестабильности значение cost при одних и тех же параметрах разное. В связи с этим было необходимо проследить за динамикой установки и оценить ошибку, которая подается как дополнительная информация оптимизатору. Для этого в течение 5 часов снимались фотографии атомов на 7 этапах охлаждения. Нестабильность уставки обусловлена различными причинами (флуктуации мощности в пучках дипольной ловушки, флуктуации в электрических схемах, термальными эффектами на оптической системе). Из обработанных данных считываемая ошибка примерно 10%

Контрольная последовательность

Флуктуации осложняют интерпретацию полученных данных оптимизатора. В связи с этой проблемой была добавлена контрольная последовательность: каждые 5-10 итераций снимается фиксированный набор параметров и таким образом на общем графике зависимости значения cost от итерации отображается уплывание установки.

На этом примере хорошо видно ещё одно преимущество оптимизатора - подстраивание под изменяющиеся условия. Несмотря на сильный разброс значений контрольной последовательно, алгоритм стабильно выдает хорошие наборы параметров. Собственно, добавление всё новых точек для одного и того же набора параметров позволяет быстрее оценить гиперпараметр шума в ядре модели.

4.3.3 Предобучение

Для построения первого прогноза cost функции с помощью GP нужны первоначальные измерения. В нашем случае - это значения cost при случайных комбинациях допустимых значений параметров. Естественно предположить, что чем больше начальных измерений, тем точнее может быть получен первый прогноз и тем быстрее алгоритм может начать сходиться. На примере рис.13 продемонстрировано описанное ожидаемое поведение оптимизатора. На основании статьи [26], количество случайных итераций было выбрано в 2 раза

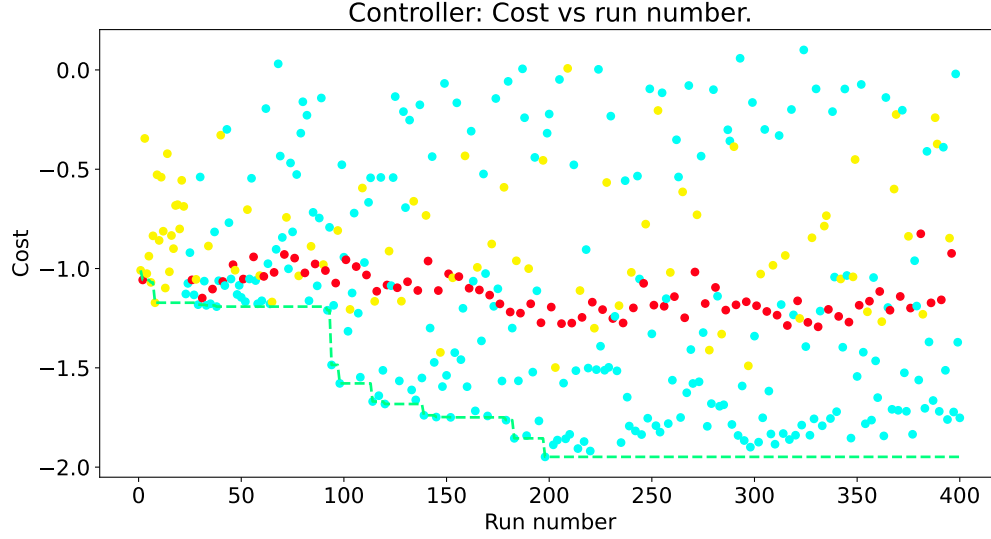


Рис. 12: Пример запуска алгоритма. Зависимость значения cost функции от номера итерации. Красные точки соответствуют запуску установки с контрольными параметрами больше количества оптимизируемых параметров.

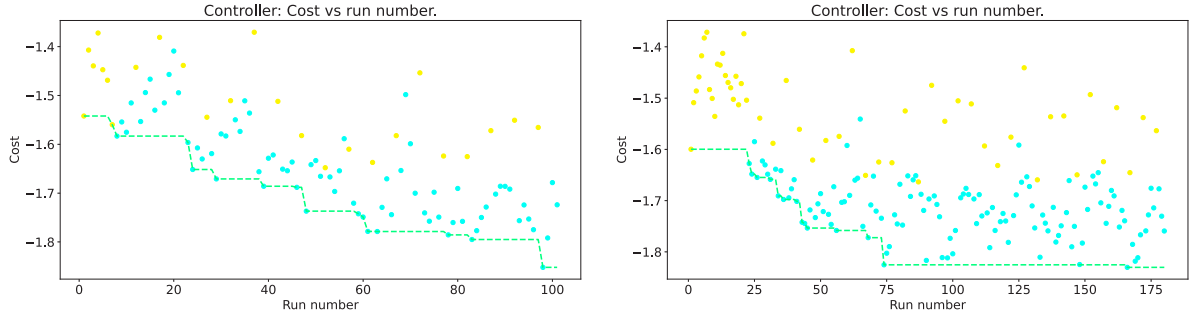


Рис. 13: Пример запусков при разном количестве случайных итераций в начале для создания прогноза гауссовой регрессии

4.3.4 Функция стоимости (cost function)

Сердцем Байесовской оптимизации можно назвать функцию стоимости cost. В нашем случае мы оптимизируем параметры испарительного охлаждения и в итоге хотим увеличить количество атомов в бозе-эйнштейновском конденсате, поэтому в качестве cost функции использовались:

- Скорость испарительного охлаждения γ (см. раздел 3.3)
- Количество атомов в конденсате и пиковая засветка картинки $N_{\text{BEC}} \cdot PD$
- Линейная комбинация пунктов двух пунктов, указанных выше: $a\gamma + bN_{\text{BEC}}$

Тем не менее это не единственный выбор cost функции. Так как конечной целью является оптимизировать количество атомов в конденсированном состоянии, то логично использовать эту характеристику в функции стоимости. Однако в таком cost одиноково расцениваются последовательности из параметров, который дают, например, облака атомов без БЭК, но с разной температурой. Зато это учитывается в третьем варианте cost функции. С ним до нахождения параметров, дающие БЭК на установке, оптимизатор стремится улучшить скорость испарительного охлаждения. И уже придя к комбинации параметров с БЭК на фотографии, стремится увеличить количество атомов в нём. В разделе 4.5 приведем результаты работы с каждой из упомянутых функций.

4.4 Оптимизация эффективности испарительного охлаждения γ .

Перед оптимизацией количества атомов непосредственно в БЭК производилась оптимизация испарительной последовательности до температуры конденсата. Для этого была выбрана функция стоимости $cost = -\gamma = -\frac{\log(\rho/\rho_0)}{\log(N_0/N)}$ (см. 3.3), которая задаёт задачу алгоритму увеличить PSD - фазовую плотность (ρ) - потеряв при этом как можно меньше атомов.

Получение БЭК ($cost = -\gamma$)

Выбор оси для подсчёта температуры облака.

Особенность выбора $-\gamma$ в качестве функции стоимости заключается в том, что для подсчёта PSD нужно знать температуру облака (T_x или T_y), которая в свою очередь пересчитывается из σ_x или σ_y - среднеквадратичного отклонения по оси X или Y нормального распределение, которым аппроксимируется фотография облака атомов. Из этого следует два вопроса:

1. Как подсчитывается температура для облаков, где есть конденсат?

Первый путь - вырезается центральная область фотографии, где отображён БЭК. Оставшиеся края облака, соответствующие термальному распределению, нормальным распределением. Второй - всё облако аппроксимируется нормальным распределением. В таком случае в абсолютную величину температуры вносится ошибка, но сохраняется связь с истинной температурой. Значит, оптимизатору передаётся информация об изменении температуры и соответствующего значения cost функции при изменении параметров испарительного охлаждения.

2. Какую ось выбрать для оценки температуры?

Если глубина скрещенной ловушки в момент выключения будет достаточно велика, то достаточно горячие атомы будут локализованы в области пространства, где идёт только горизонтальный луч, что приводит к образованию "хвостов" на фотографии (рис.10). В таком случае аппроксимация двумерной функцией Гаусса некорректна, однако ошибка определения температуры по оси Oy существенно меньше чем по Ox . Поэтому выбор температуры по Oy является предпочтительным, но не обязательным. С другой стороны, если облако атомов заведомо холоднее 1 мК, то для обычного термального облака обе температуры почти совпадают, однако если на фотографии присутствует БЭК, то "температура" по оси Ox (точнее, ширина облака) будет уменьшаться и, в нулевом приближении, будет тем меньше, чем больше атомов в БЭК. Эту особенность, хоть она и не физична, можно использовать с алгоритмической точки зрения для получения БЭК, если высчитывать эффективность испарительного охлаждения по температуре Ox .

Получение двух веток устойчивых решений.

При работе оптимизатора может появиться 2 ветки устойчивых решений (рис. 14). Первая соответствует получению БЭК с $6 - 7 \cdot 10^3$ атомов, вторая - термальному облаку с температурой 0.3 мК. Как при следующих запусках алгоритма, так и после изменения границ параметров такой особенности замечено не было: найденное устойчивое решение было одно и соответствовало облаку с БЭК. Тем не менее этот эксперимент подчеркивает, что для оптимизации количества атомов непосредственно в конденсате нужно выбрать другую функцию стоимости. Данный эффект вызван описанной выше особенностью подсчёта температуры облака.

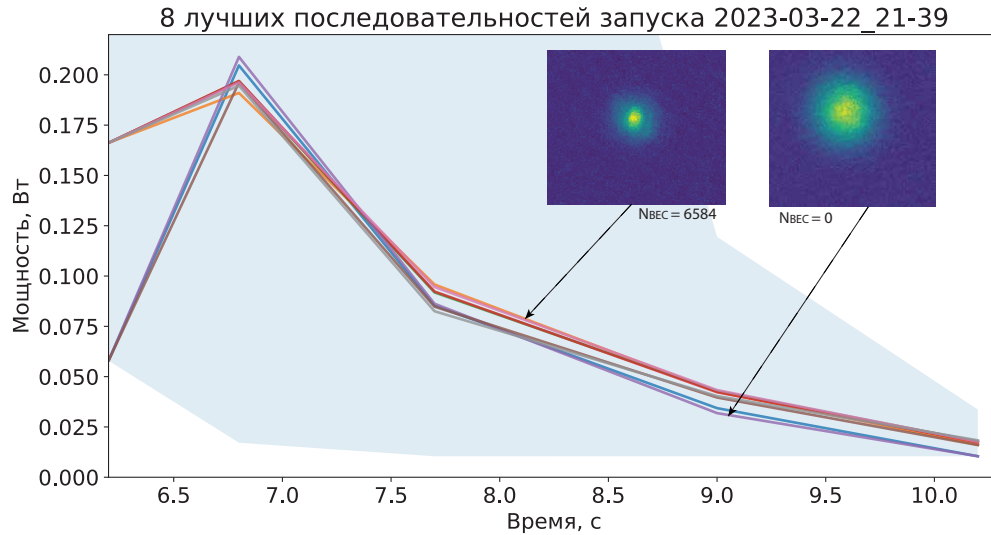


Рис. 14: Два устойчивых набора параметров, которые приводят к разным атомным облакам

Изменение магнитного поля

В качестве одного из подходов к оптимальному получению высокой эффективности испарения было решено изменить внешнее постоянное магнитное поле (постоянное в течение всей испарительной последовательности) с 3.90 Гс на 3.75 Гс, и тем самым уменьшить длину рассеяния (измерения длины рассеяния в этом диапазоне магнитных полей были проведены ранее), чтобы удлинить последовательность. Однако на тех же параметрах оптимизатора перестали находиться испарительные последовательности, дающие БЭК. Также, последовательности стали упираться в верхние границы параметров, что было интерпретировано как нехватка общего времени охлаждения в изменившихся внешних условиях. Дополнительным подтверждением этого стали сравнительные запуски на общем времени охлаждения 9 с и 10.2 с, где длинная последовательность стремится совпасть с короткой и продолжить её.

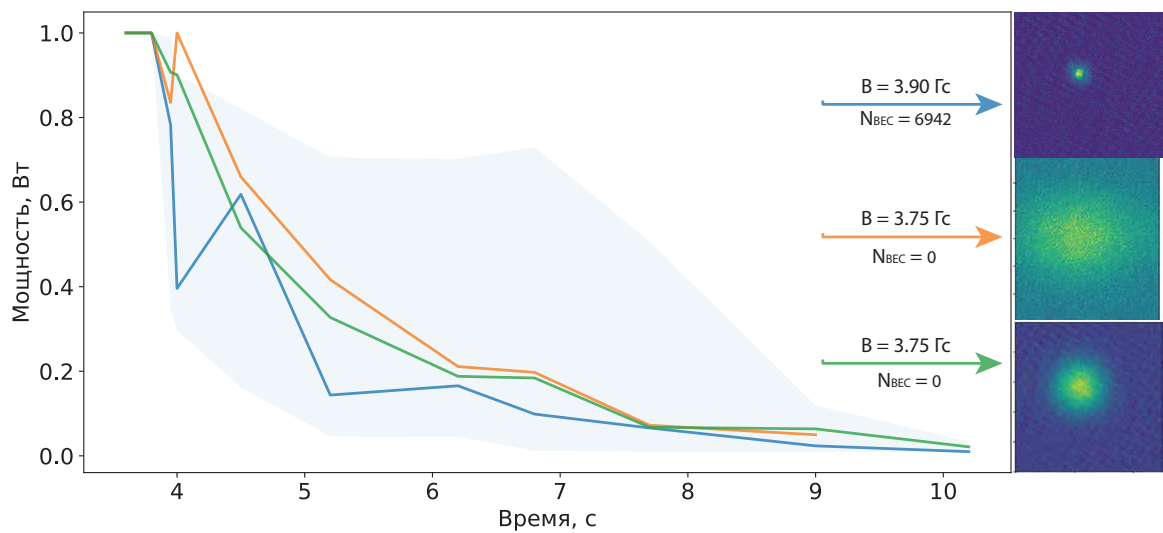


Рис. 15: Результат оптимизации в разных магнитных полях. Видно сильное влияние итогового результата от магнитного поля.

Влияние времени фотографирования (термализация)

Была проверена гипотеза, что нужно дать атомам термализоваться перед фотографированием, т.е. фотографировать после выдерживания в постоянном потенциале (назовём это временем задержки). Было проведено 3 запуска с временами задержки 0, 0.3 и 1.2 с. Однако с точки зрения получения БЭКа это не помогло. Более того, получившиеся облака сравнимы по всем характеристикам (количество атомов, температура, PSD), так что эффект от наличия или отсутствия задержки отсутствует и оптимизатор подстраивается под него.

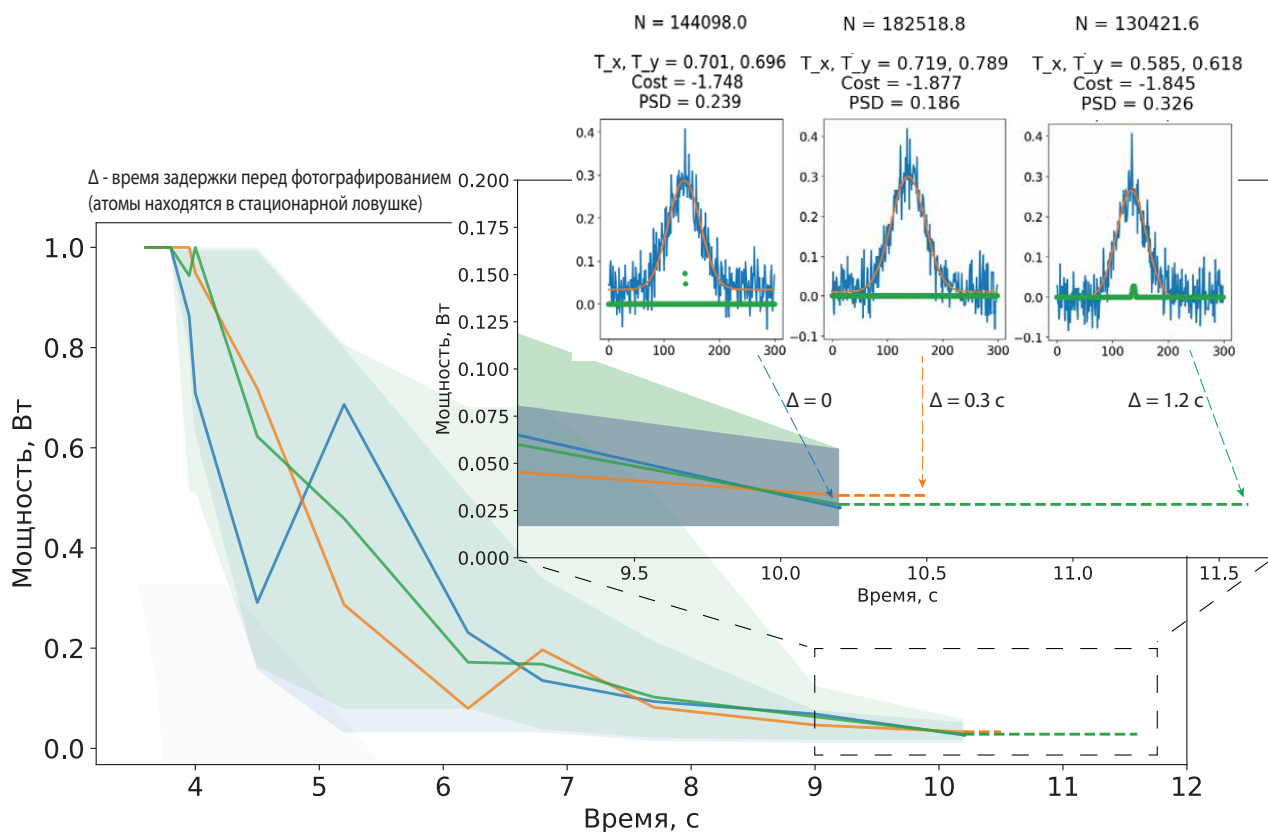


Рис. 16: **заголовок.**

Длительность последовательности

Была проверена гипотеза, что в новом магнитном 3.75 Гс поле БЭК можно получить, если сделать испарительную последовательность длиннее. Для это просняли зависимость работы алгоритма от общего времени последовательности (рис.17). Было проверено 5 охлаждающих последовательностей: 6, 7, 8, 9 и 11.3 с. Ни на одной из них оптимизатор не сошёлся к БЭК. Также видно, что на последовательностях 8, 9 и 11.3 с перестаёт меняться лучшее значение функции стоимости, то есть γ .

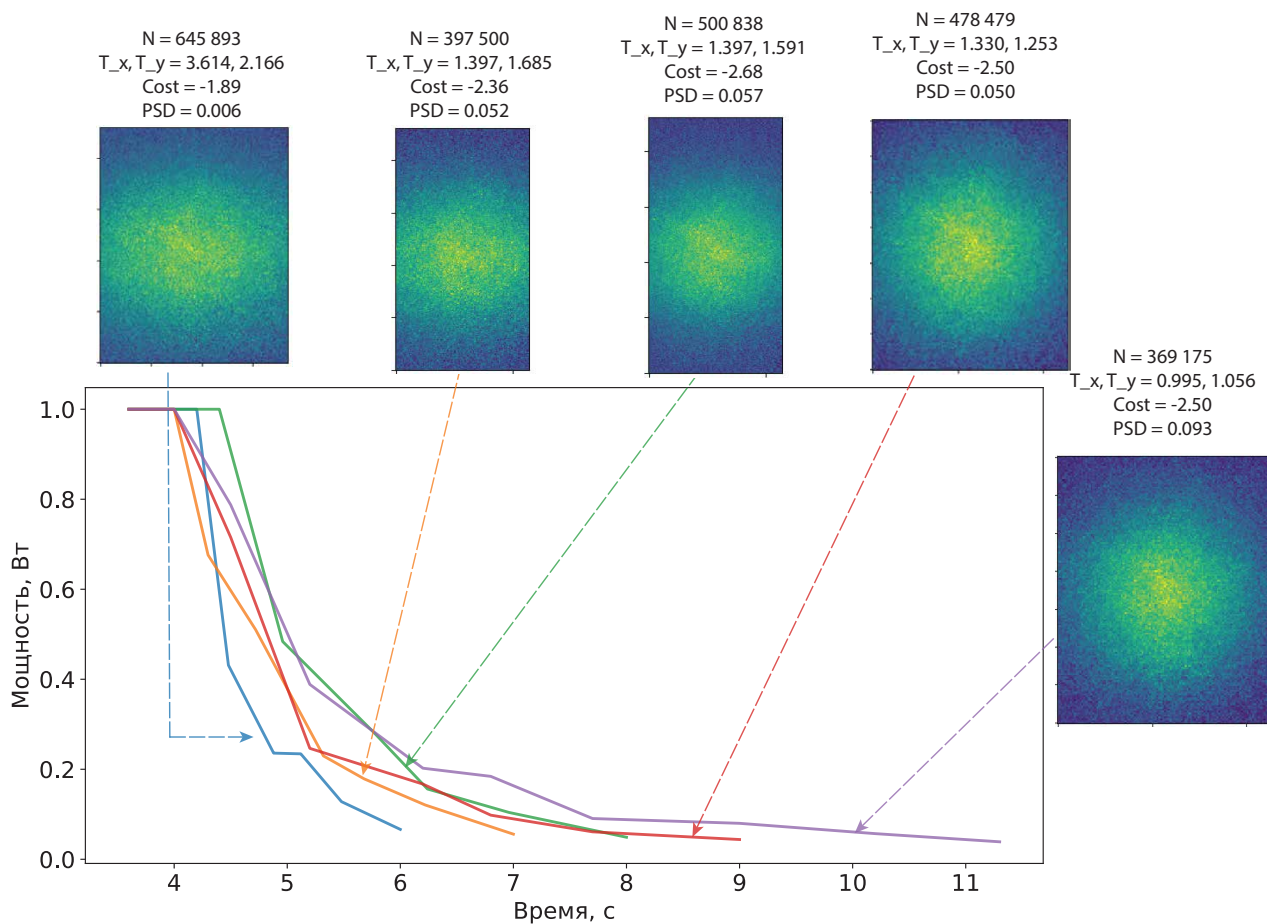


Рис. 17: Результат оптимизации при разных длительностях испарительной последовательности

4.5 Оптимизация количества атомов в БЭК разными cost

На основании результатов раздела 4.4 был выбран подход по оптимизации в 2 этапа. Первый этап – оптимизация холодного облака с помощью $cost = -\gamma$. Затем фиксируются подобранные алгоритмом параметры, первой части ('голова') испарительной последовательности. Второй – оптимизация 'хвоста' последовательности с помощью другой функции стоимости, которая содержит в себе количество атомов в БЭК в явном виде.

1. $Cost = N_{BEC} \cdot PD$

Была проверена функция $Cost = N_{BEC} \cdot PD$, где PD(peak density) – максимальное значение пика фотографии. В результате было получено $2 \cdot 10^4$ атомов в конденсате. У данного выбора функции есть несколько недостатков. Во-первых, она обращается в ноль, если нет конденсата на фотографии. Т.е. нужно выставлять относительно узкий границы для варьируемых параметров, а также с помощью такой функции алгоритм не будет различать термальные облака с разной фазовой плотностью.

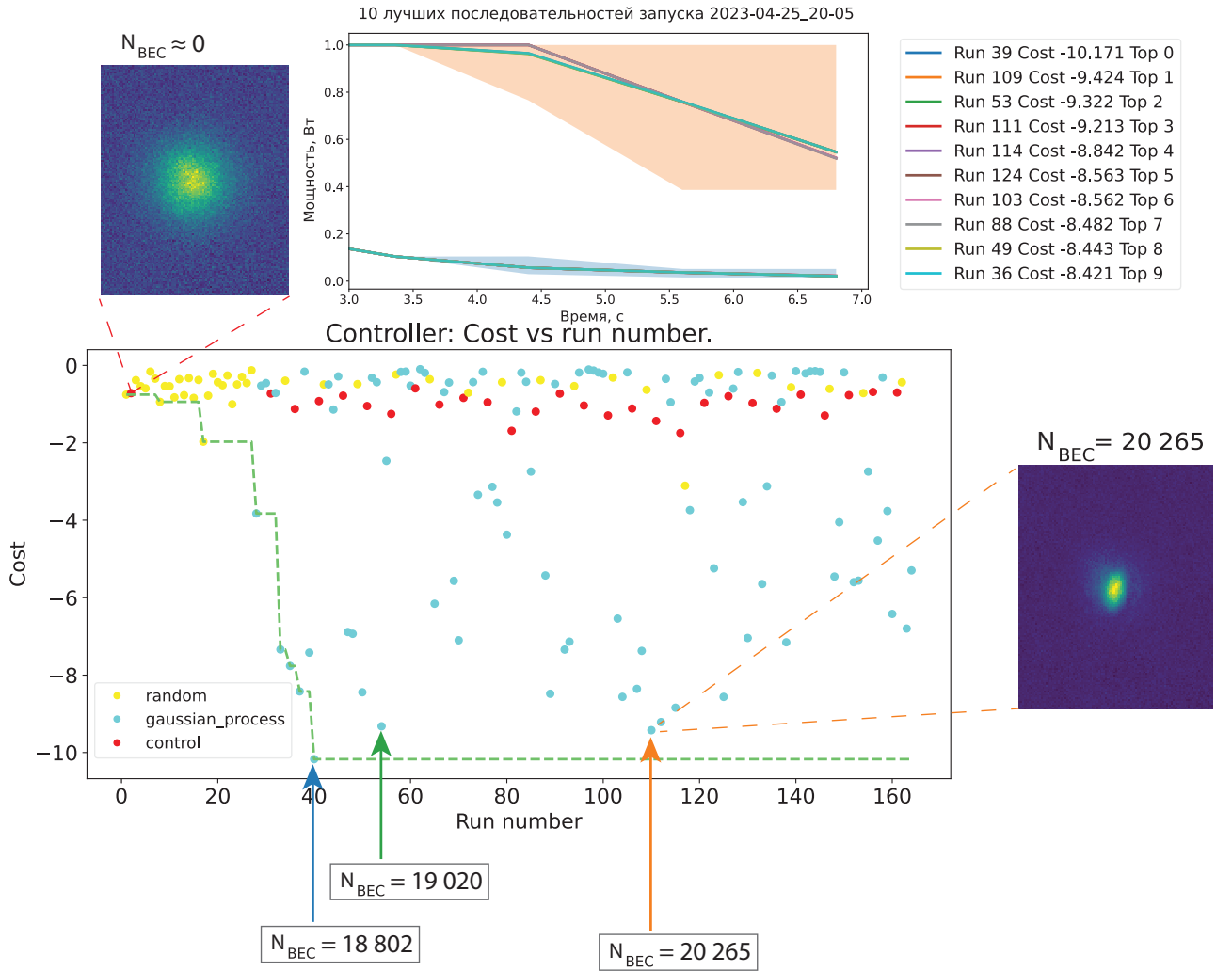


Рис. 18: Результат оптимизации при выборе cost функции $-\gamma$

$$2. \text{cost} = a\gamma + bN_{\text{BEC}}$$

Выбор данной функции был мотивирован желанием дать алгоритму информацию о разных термальных облаках. Здесь $a = -1$ и $b = 4 \cdot 10^{-3}$ – безразмерные коэффициенты, коэффициент b стремится сделать слагаемые одного порядка. Таким образом, алгоритм сначала увеличивает PSD, а затем увеличивает количество атомов в БЭК, не теряя при этом информацию о термальной части. Но как уже обсуждалось в начале раздела 4.4, γ по фотографии облака с конденсатом можно высчитывать двумя путями: γ_{thermal} – получена через фит температуры по краям облака, где нет конденсата; γ_{total} – посчитана через фит всего облака двумерным распределением.

$$\text{cost} = a\gamma_{\text{thermal}} + bN_{\text{BEC}}$$

С помощью такой cost функции было получено $1.8 \cdot 10^3$ атомов в конденсате.

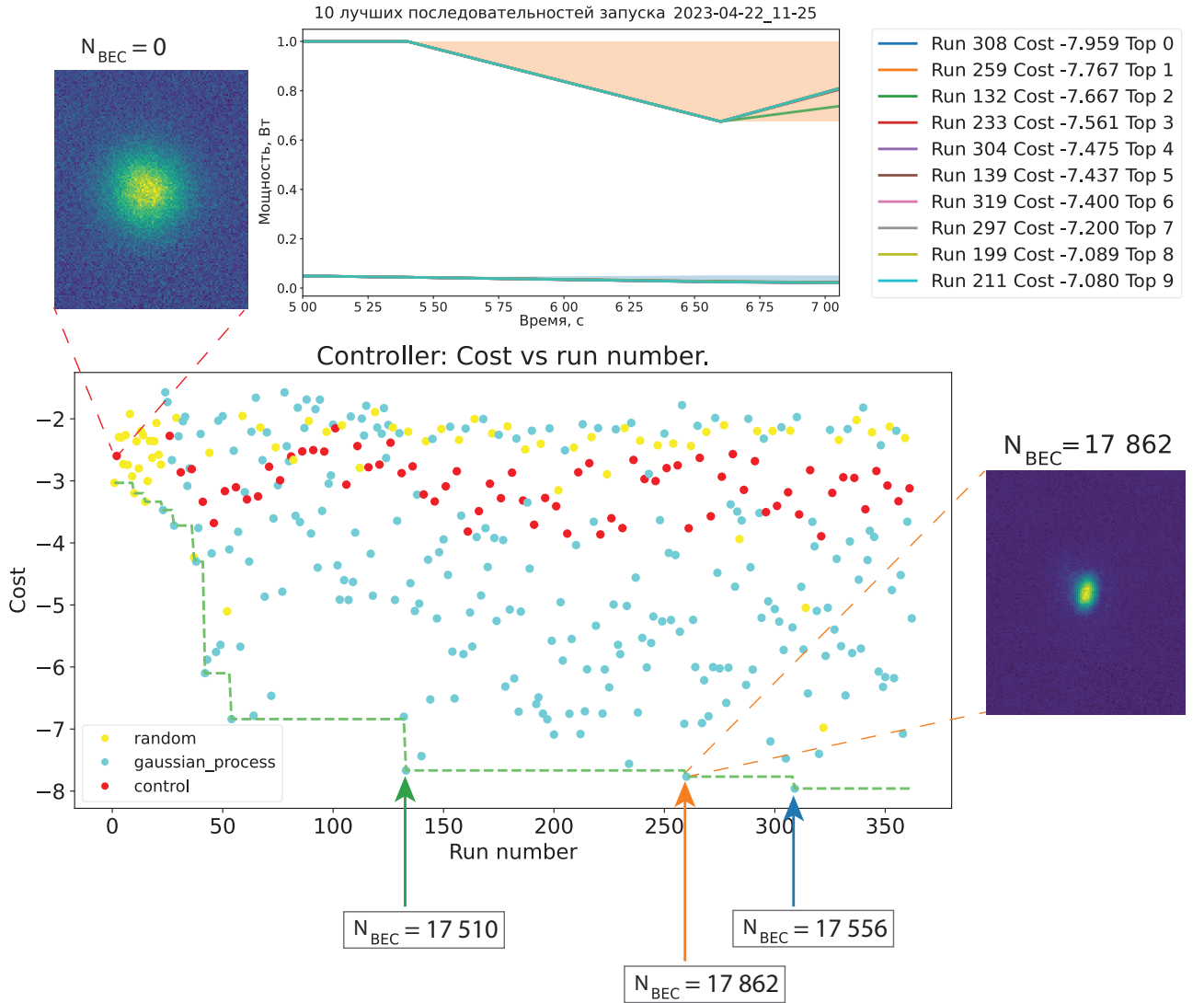


Рис. 19: Результат оптимизации при выборе cost функции $a\gamma_{\text{thermal}} + bN_{\text{BEC}}$

$$cost = a\gamma_{total} + bN_{BEC}$$

С помощью такой cost функции было получено $1.9 \cdot 10^3$ атомов в конденсате.

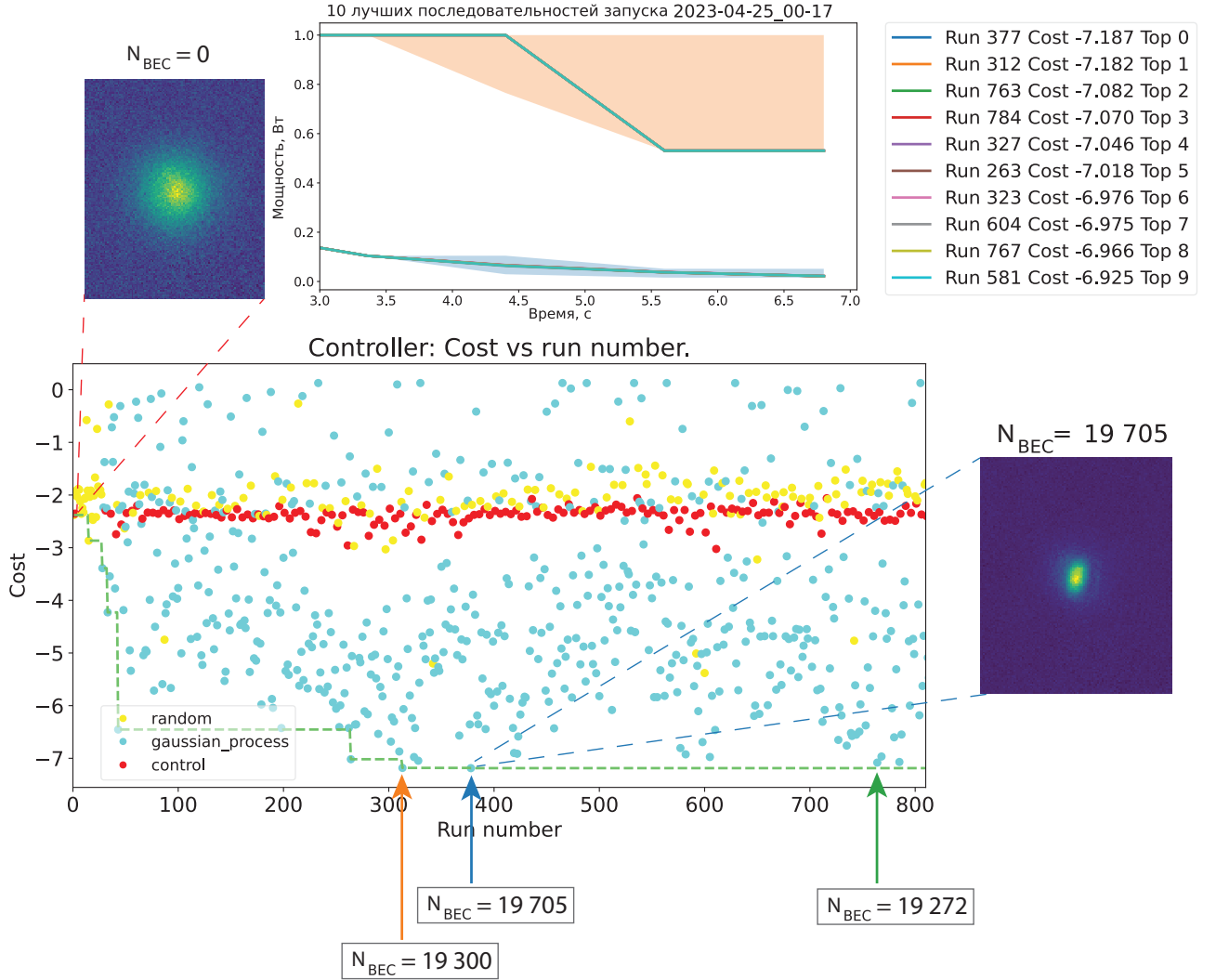


Рис. 20: Результат оптимизации при выборе cost функции $a\gamma_{total} + bN_{BEC}$

4.6 Направления дальнейшего исследования алгоритма

- Предоставить оптимизатору свободу варьировать времена разбиения кусочно-гладких функций hor, vert, shake как параметры.
- Предоставить оптимизатору варьировать другие параметры установки, например, магнитное поле.
- Протестировать другой класс функций для поиска.

5 Заключение

Был освоен алгоритм машинного обучения Байесовской оптимизации для работы с экспериментами по получению конденсата Бозе-Эйнштейна (БЭК) атомов тулия. Была проделана работа по связыванию процессов на экспериментальной установке и кодом машинного обучения. Также был написан код по обработке фотографий атомов, где анализируются отдельно атомы находящиеся в состоянии конденсата и нет. Было изучено влияние на алгоритм параметров, фиксируемых перед запуском кода, на работу оптимизатора.

На основе результатов работы алгоритма были произведены модификации как кода, так и физической установки, что позволило выявить и устранить скрытые дефекты установки по охлаждению атомов. Алгоритм был проверен при разных внешних магнитных полях, разных длительностях оптимизируемых испарительных последовательностях.

Были придуманы и проверены 3 разных функций стоимости. С помощью каждой из них был получен БЭК и оптимизировано количество атомов в нём. В результате получены стабильные наборы параметров установки, с помощью которых получается макроскопическое количество атомов в БЭК даже при сильных шумах на установке.

В дальнейшем планируется продолжать использовать данный метод машинного обучения и адаптировать его под другие задачи эксперимента, например, оптимизировать параметры транспорта атомов между областью с магнито-оптической ловушкой и областью с оптической решеткой, где будет находиться квантовый симмулятор.

Благодарности

Хочу поблагодарить своего научного руководителя к.ф.-м. н. Акимова Алексея Владимировича, а также Цыганка Владислава Викторовича и Кумпилова Давлета Асланбиевича за помощь и наставления. Першина Даниила Александровича, Хоружия Кирилла Александровича, Хлебникова Владимира Александровича, Кожокару Ивана Сергеевича, Зыкову Анну Константиновна и всех сотрудников лаборатории РКЦ за ценные советы и помощь, неоценимый вклад в развитие проекта, поддержку и дружественную рабочую атмосферу.

Список литературы

- [1] V S Letokhov, M A Ol'shanii, and Yu B Ovchinnikov. Laser cooling of atoms: a review. Quantum and Semiclassical Optics: Journal of the European Optical Society Part B, 7(1):5, feb 1995.
- [2] Kai Bongs, Michael Holynski, Jamie Vovrosh, Philippe Bouyer, Gabriel Condon, Ernst Rasel, Christian Schubert, Wolfgang P Schleich, and Albert Roura. Taking atom interferometric quantum sensors from the laboratory to real-world applications. Nature Reviews Physics, 1(12):731–739, 2019.
- [3] Xiaoling Wu, Xinhui Liang, Yaoqi Tian, Fan Yang, Cheng Chen, Yong-Chun Liu, Meng Khoon Tey, and Li You. A concise review of rydberg atom based quantum computation and quantum simulation. Chinese Physics B, 30(2):020305, 2021.
- [4] TM Graham, Y Song, J Scott, C Poole, L Phuttitarn, K Jooya, P Eichler, X Jiang, A Marra, B Grinkemeyer, et al. Multi-qubit entanglement and algorithms on a neutral-atom quantum computer. Nature, 604(7906):457–462, 2022.
- [5] Camille Janvier, Vincent Ménoret, Bruno Desruelle, Sébastien Merlet, Arnaud Landragin, and Franck Pereira dos Santos. Compact differential gravimeter at the quantum projection-noise limit. Physical Review A, 105(2):022801, 2022.
- [6] Vincent Ménoret, Pierre Vermeulen, Nicolas Le Moigne, Sylvain Bonvalot, Philippe Bouyer, Arnaud Landragin, and Bruno Desruelle. Gravity measurements below 10^{-9} g with a transportable absolute quantum gravimeter. Scientific reports, 8(1):1–11, 2018.
- [7] Immanuel Bloch, Jean Dalibard, and Sylvain Nascimbene. Quantum simulations with ultracold quantum gases. Nature Physics, 8(4):267–276, 2012.
- [8] Florian Schäfer, Takeshi Fukuhara, Seiji Sugawa, Yosuke Takasu, and Yoshiro Takahashi. Tools for quantum simulation with ultracold atoms in optical lattices. Nature Reviews Physics, 2(8):411–425, 2020.
- [9] Samuel M Brewer, J-S Chen, Aaron M Hankin, Ethan R Clements, Chin-wen Chou, David J Wineland, David B Hume, and David R Leibrandt. Al^{+} 27 quantum-logic clock with a systematic uncertainty below 10^{-18} . Physical review letters, 123(3):033201, 2019.
- [10] Sören Dörscher, Nils Huntemann, Roman Schwarz, Richard Lange, Erik Benkler, Burghard Lipphardt, Uwe Sterr, Ekkehard Peik, and Christian Lisdat. Optical frequency ratio of a 171yb^{+} single-ion clock and a 87sr lattice clock. Metrologia, 58(1):015005, 2021.
- [11] Tobias Bothwell, Dhruv Kedar, Eric Oelker, John M Robinson, Sarah L Bromley, Weston L Tew, Jun Ye, and Colin J Kennedy. Jila sri optical lattice clock with uncertainty of. Metrologia, 56(6):065004, 2019.
- [12] B. J. Bloom, T. L. Nicholson, J. R. Williams, S. L. Campbell, M. Bishof, X. Zhang, W. Zhang, S. L. Bromley, and J. Ye. An optical lattice clock with accuracy and stability at the 10^{-18} level. Nature, 506(7486):71–75, jan 2014.

- [13] N. Hinkley, J. A. Sherman, N. B. Phillips, M. Schioppo, N. D. Lemke, K. Beloy, M. Pizzocaro, C. W. Oates, and A. D. Ludlow. An atomic clock with 10^{-18} instability. Science, 341(6151):1215–1218, sep 2013.
- [14] Jacopo Grotti, Silvio Koller, Stefan Vogt, Sebastian Häfner, Uwe Sterr, Christian Lisdat, Heiner Denker, Christian Voigt, Ludger Timmen, Antoine Rolland, et al. Geodesy and metrology with a transportable optical clock. Nature Physics, 14(5):437–441, 2018.
- [15] Jian Cao, Jinbo Yuan, Shaomao Wang, Ping Zhang, Yi Yuan, Daoxin Liu, Kaifeng Cui, Sijia Chao, Hualin Shu, Yige Lin, et al. A compact, transportable optical clock with 1×10^{-17} uncertainty and its absolute frequency measurement. Applied Physics Letters, 120(5):054003, 2022.
- [16] Ben Stray, Andrew Lamb, Aisha Kaushik, Jamie Vovrosh, Anthony Rodgers, Jonathan Winch, Farzad Hayati, Daniel Boddice, Artur Stabrawa, Alexander Niggebaum, Mehdi Langlois, Yu-Hung Lien, Samuel Lellouch, Sanaz Roshanmanesh, Kevin Ridley, Geoffrey De Villiers, Gareth Brown, Trevor Cross, George Tuckwell, Asaad Faramarzi, Nicole Metje, Kai Bongs, and Michael Holynski. Quantum sensing for gravity cartography. Nature, 602(7898):590–594, February 2022.
- [17] T. Rosenband, D. B. Hume, P. O. Schmidt, C. W. Chou, A. Brusch, L. Lorini, W. H. Oskay, R. E. Drullinger, T. M. Fortier, J. E. Stalnaker, S. A. Diddams, W. C. Swann, N. R. Newbury, W. M. Itano, D. J. Wineland, and J. C. Bergquist. Frequency ratio of $^{171}\text{Yb}^{+}$ and $^{199}\text{Hg}^{+}$ single-ion optical clocks; metrology at the 17th decimal place. Science, 319(5871):1808–1812, 2008.
- [18] A. Derevianko and M. Pospelov. Hunting for topological dark matter with atomic clocks. Nature Physics, 10(12):933–936, Dec 2014.
- [19] A. K. Fedorov, N. Gisin, S. M. Beloussov, and A. I. Lvovsky. Quantum computing at the quantum advantage threshold: a down-to-business review, 2022.
- [20] Richard P. Feynman. Simulating physics with computers. International Journal of Theoretical Physics, 21(6):467–488, June 1982.
- [21] Richard P. Feynman. Quantum mechanical computers. Foundations of Physics, 16(6):507–531, June 1986.
- [22] Immanuel Bloch, Jean Dalibard, and Wilhelm Zwerger. Many-body physics with ultracold gases. Reviews of Modern Physics, 80(3):885–964, jul 2008.
- [23] T. Graß, K. Saha, K. Sengupta, and M. Lewenstein. Quantum phase transition of ultracold bosons in the presence of a non-abelian synthetic gauge field. Physical Review A, 84(5), nov 2011.
- [24] Till Klostermann, Cesar R. Cabrera, Hendrik von Raven, Julian F. Wienand, Christian Schweizer, Immanuel Bloch, and Monika Aidelsburger. Fast long-distance transport of cold cesium atoms. Physical Review A, 105(4), apr 2022.
- [25] Zachary Vendeiro, Joshua Ramette, Alyssa Rudelis, Michelle Chong, Josiah Sinclair, Luke Stewart, Alban Urvoy, and Vladan Vuletić. Machine-learning-accelerated bose-einstein condensation. Physical Review Research, 4(4), dec 2022.

- [26] P. B. Wigley, P. J. Everitt, A. van den Hengel, J. W. Bastian, M. A. Sooriyabandara, G. D. McDonald, K. S. Hardman, C. D. Quinlivan, P. Manju, C. C. N. Kuhn, I. R. Petersen, A. N. Luiten, J. J. Hope, N. P. Robins, and M. R. Hush. Fast machine-learning online optimization of ultra-cold-atom experiments. Scientific Reports, 6(1), may 2016.
- [27] E. T. Davletov, V. V. Tsyganok, V. A. Khlebnikov, D. A. Pershin, D. V. Shaykin, and A. V. Akimov. Machine learning for achieving bose-einstein condensation of thulium atoms. Physical Review A, 102(1), jul 2020.
- [28] A J Barker, H Style, K Luksch, S Sunami, D Garrick, F Hill, C J Foot, and E Bentine. Applying machine learning optimization methods to the production of a quantum gas. Machine Learning: Science and Technology, 1(1):015007, feb 2020.
- [29] Tsyganok V. Vladislav. Deep laser cooling of thulium atoms in optical dipole trap. PhD thesis, MIPT, 2020.
- [30] N. Kolachevsky, A. Akimov, I. Tolstikhina, K. Chebakov, A. Sokolov, P. Rodionov, S. Kanorski, and V. Sorokin. Blue laser cooling transitions in tm i. Applied Physics B, 89(4):589–594, nov 2007.
- [31] Rudolf Grimm, Matthias Weidemüller, and Yurii B. Ovchinnikov. Optical dipole traps for neutral atoms, 1999.