

# 二色混合非線形吸収における 混合比のベイズ最適化

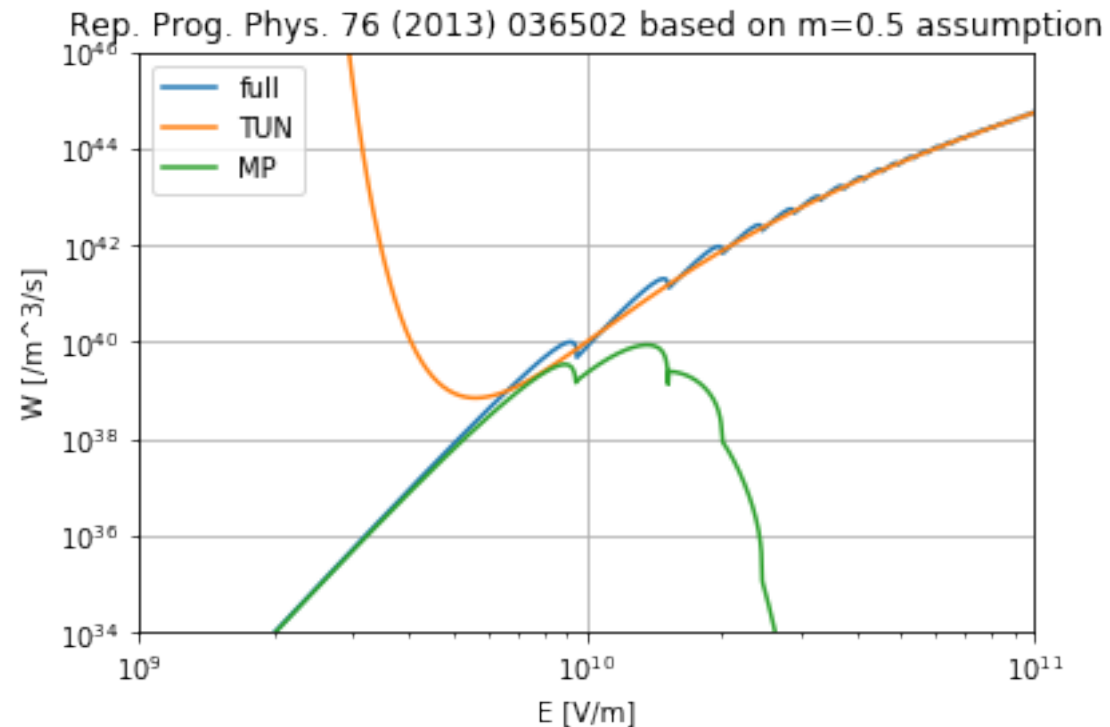
-Bayesian optimization for optical nonlinear absorption  
with two-color excitation-

2019/10/10

Yasushi SHINOHAR(篠原 康)

# Nonlinear absorption of insulators

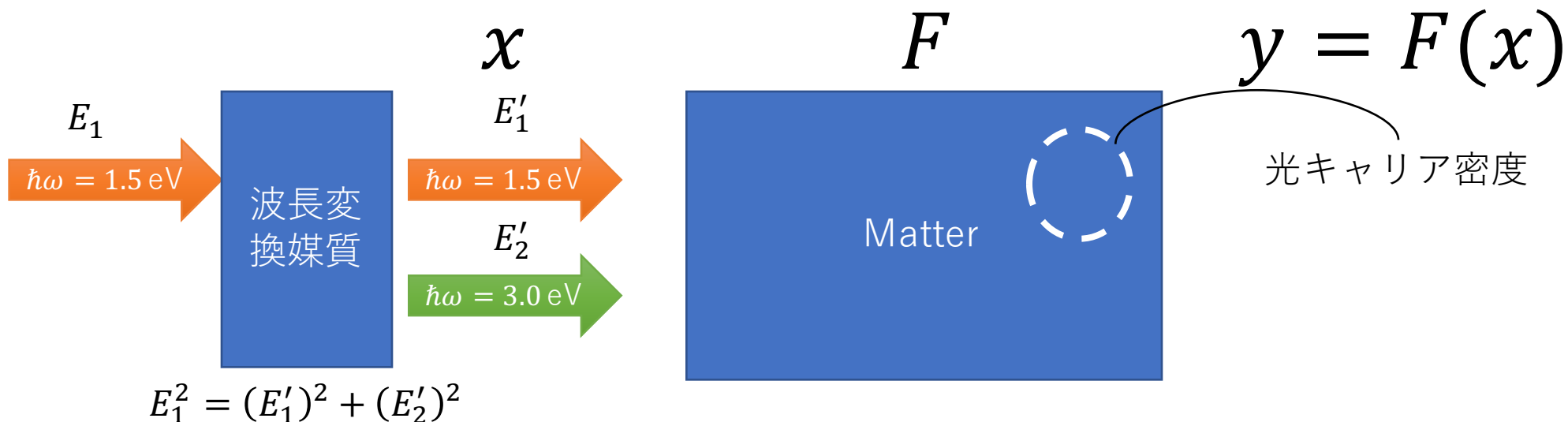
- Photo carrier creation due to strong electric field via higher-order perturbation or tunnel process



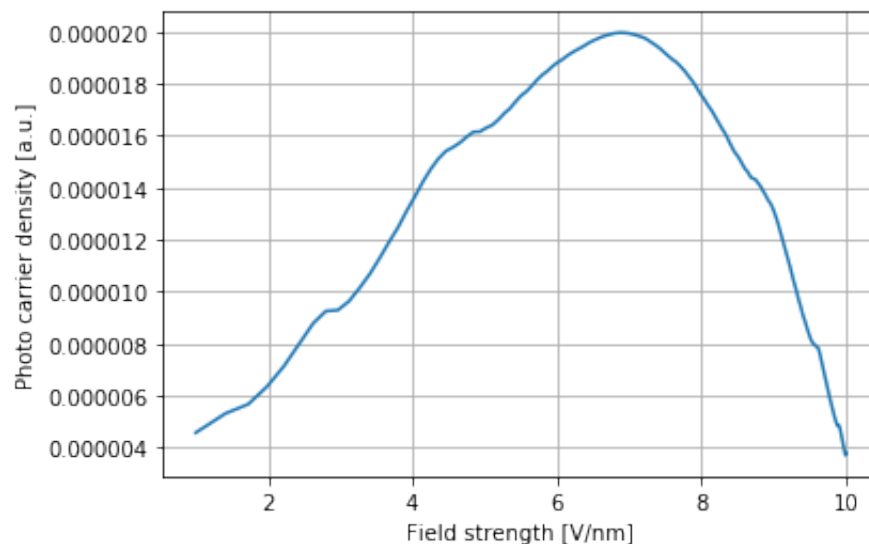
# Theoretical treatment of nonlinear absorption

- Analytic formula based on parabolic band with a monochromatic electric field
  - L.V. Keldysh, Sov. Phys. JETP **20**, 1307 (1965)
  - Easy, computationally cheap
  - Need to derive new formula for more generalized condition like arbitrary shape of electric field
- Numerical simulation based on a first-principles theory
  - An example : TDDFT within SALMON(<https://salmon-tddft.jp/>)
  - Applicable to arbitrary field shape, reflecting electronic structure
  - Computationally expensive, typically 1k cores required

# Optimization of two-color field

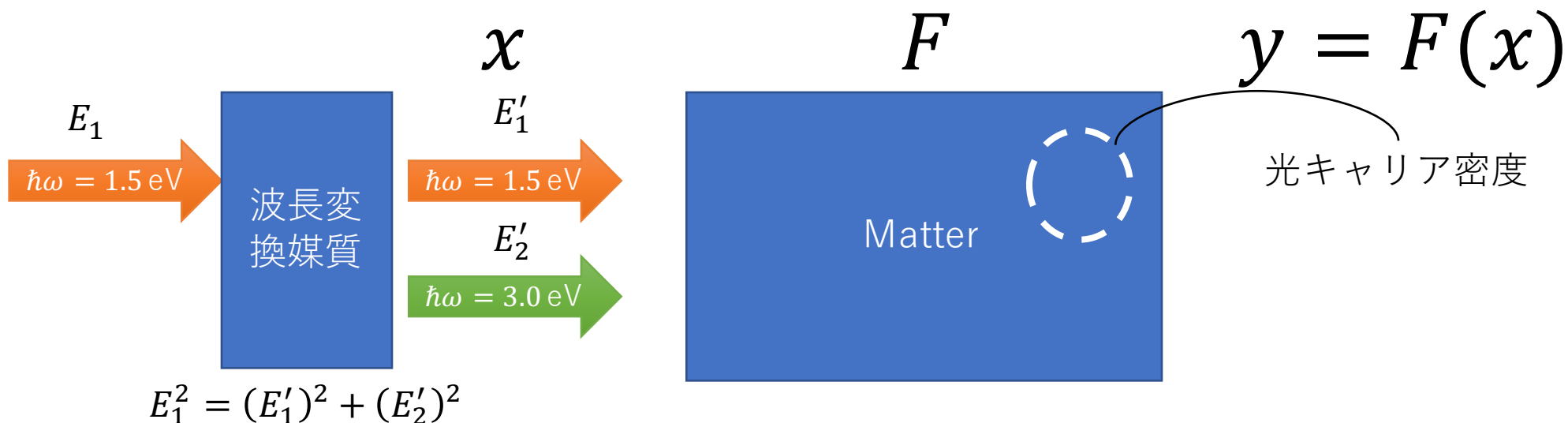


## • 模式図

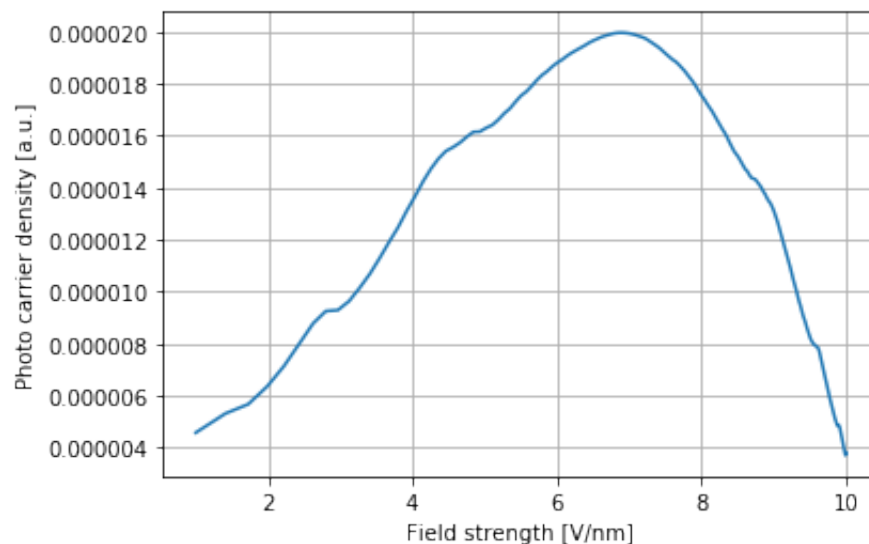


この混合比( $E'_1:E'_2$ )をNumerical simulationでの評価を基準に最適化したい

# 二色混合電場を用いた光吸収の最適化



## • 模式図

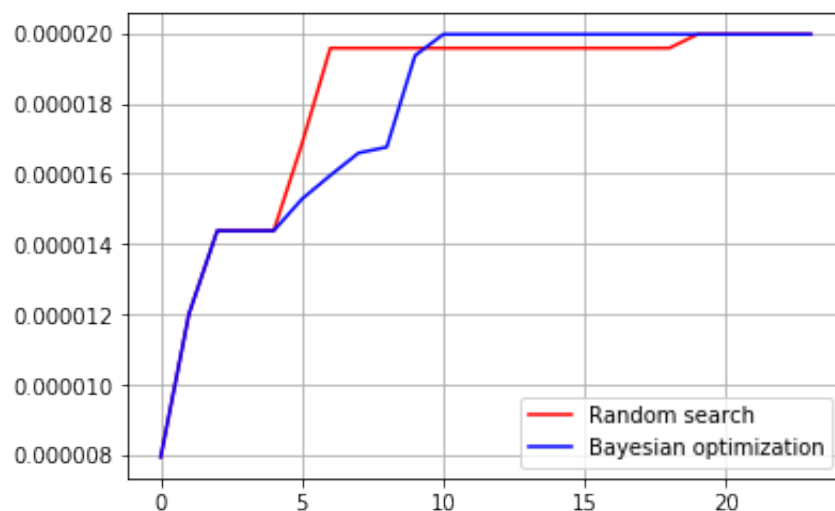


## 実証実験：

1. Analytica formulaで全パラメータ探索をして大雑把な傾向をつかむ(一先ず正解を求める)
2. ベイズ最適化との相性を確認する

# ベイズ最適化 within combo

- 田村さんの講義・チュートリアルで紹介された最初の例を使う
  - Analytica formulaを使って最初に $(E'_1: E'_2) \rightarrow n_{PC}$ を計算して`data.csv`に格納
  - 最小値を求める部分を最大値に
  - 一次元自由度のパラメーター探索なので4回random sampling+20回ベイズ探索



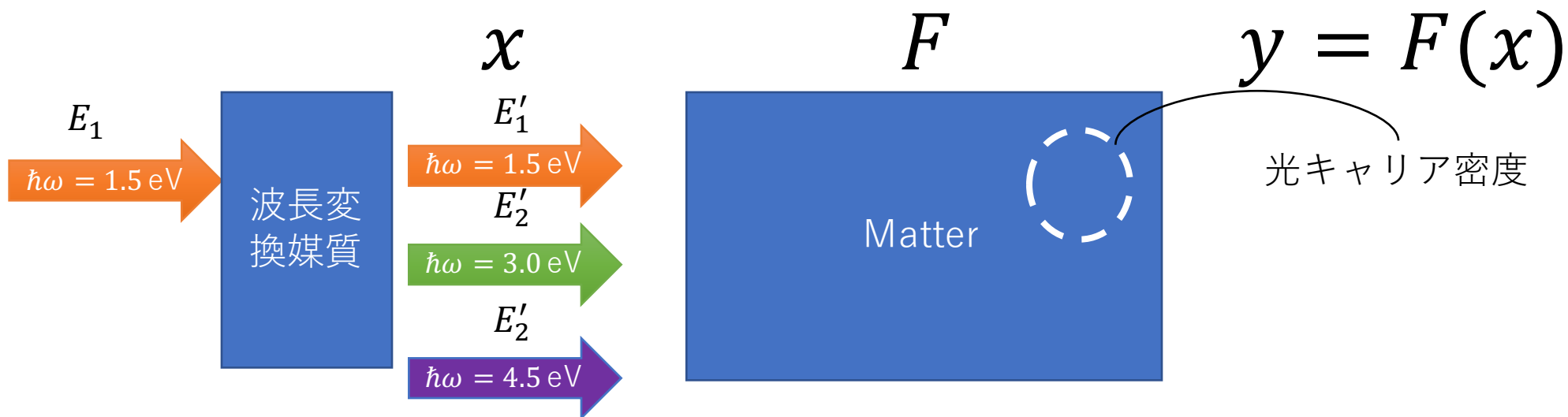
結果：  
ベイズ最適化の方が若干早い

考察：  
そもそも局所最適解がないので、勾配法の方が早いかも

# 困ったこと

- Comboのインストール
  - setup.pyのディレクトリで`import combo`をするとエラーがたくさん出る
    - これを取り除こうとしていて時間が解けた
    - 違うディレクトリに移ってから`import combo`をすれば、別に問題はなかった
  - GithubのREADME.mdではnumpy, scipy, Cythonが依存ライブラリと書かれているが、実はsixも必要
    - `pip install six`で解決
- 以下にまとめた
  - <https://qiita.com/Yasushi-Shinohara/items/673406d67714c92d4f04>

# 三色に拡張



$$E_1^2 = (E'_1)^2 + (E'_2)^2 + (E'_3)^2$$

- 結果

