

阪大OB、素粒子実験から放射光加速器へ - 加速器運転へのMachine Learning 手法の導入 -

10/16/2023, セミナー@大阪大学

“世界をリードする光源加速器研究への誘い”

岩井 瑛人

高輝度光科学研究センター/理化学研究所



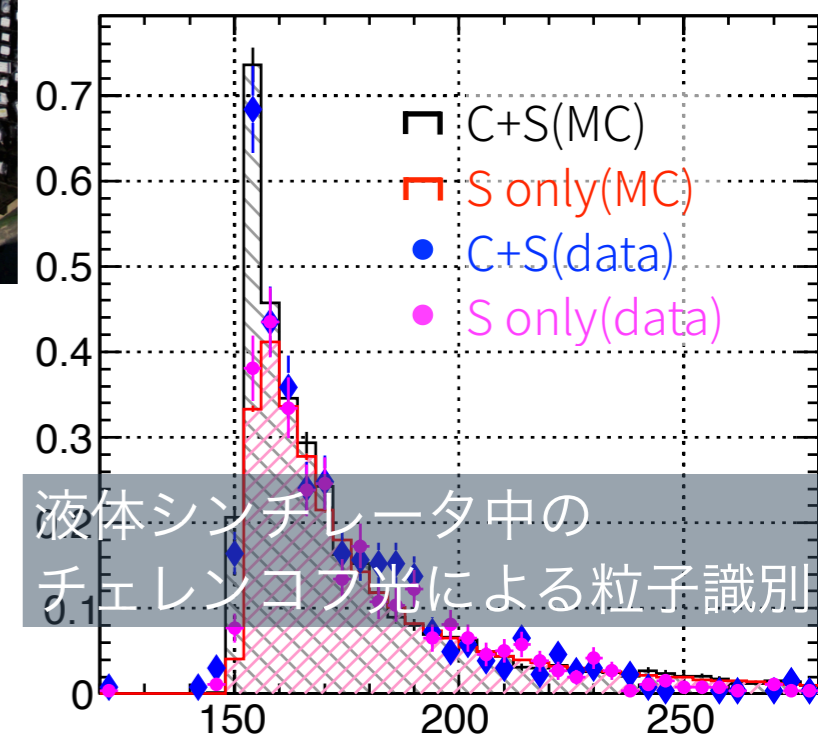
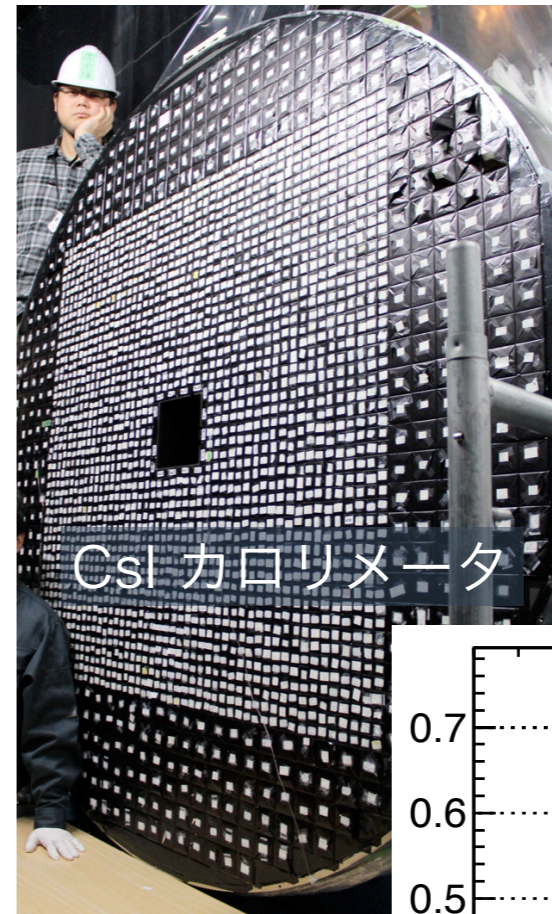
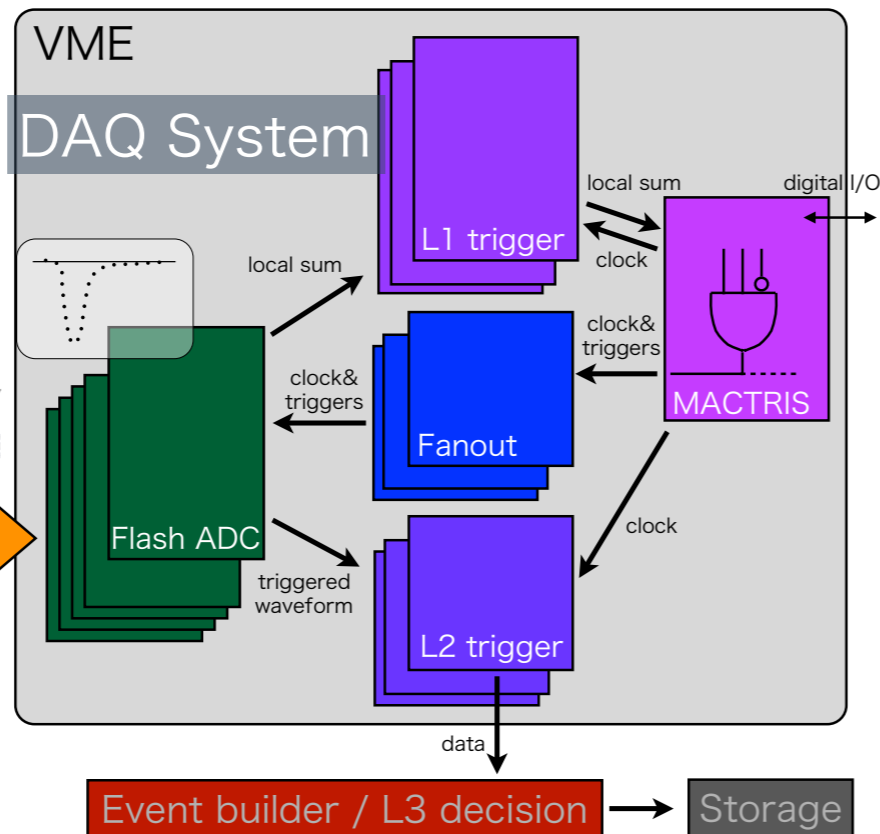
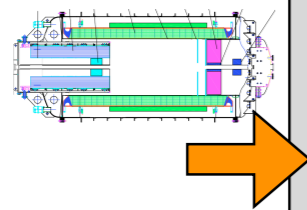
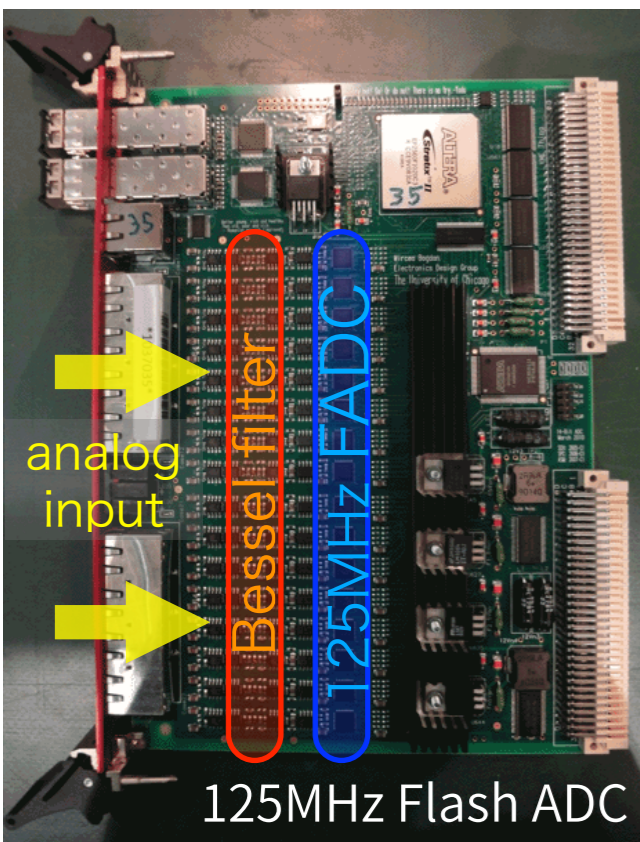
JASRI



Introduction

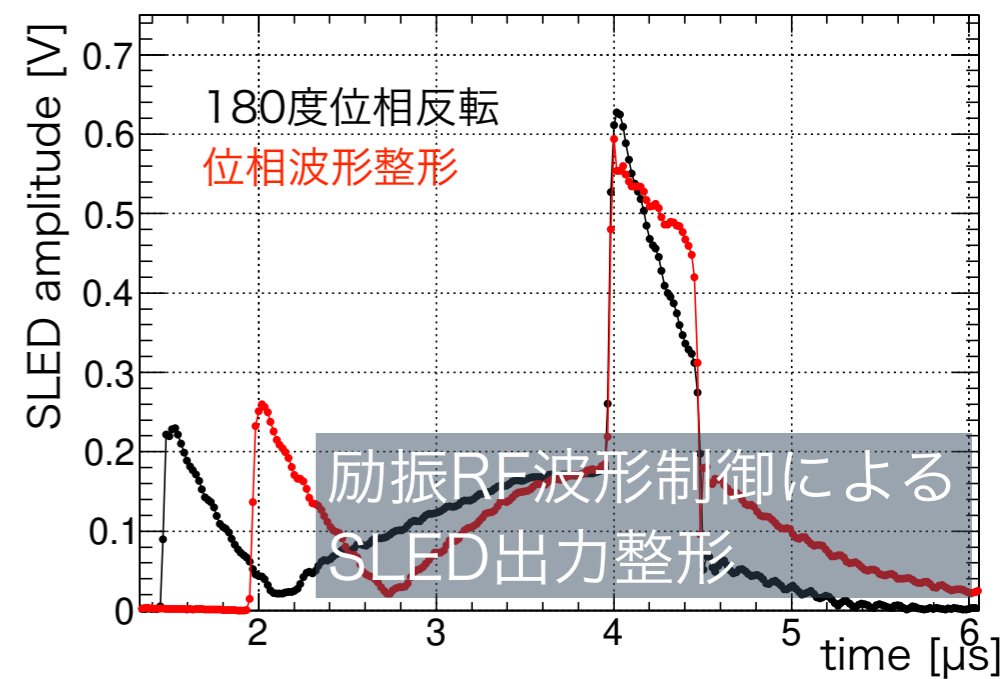
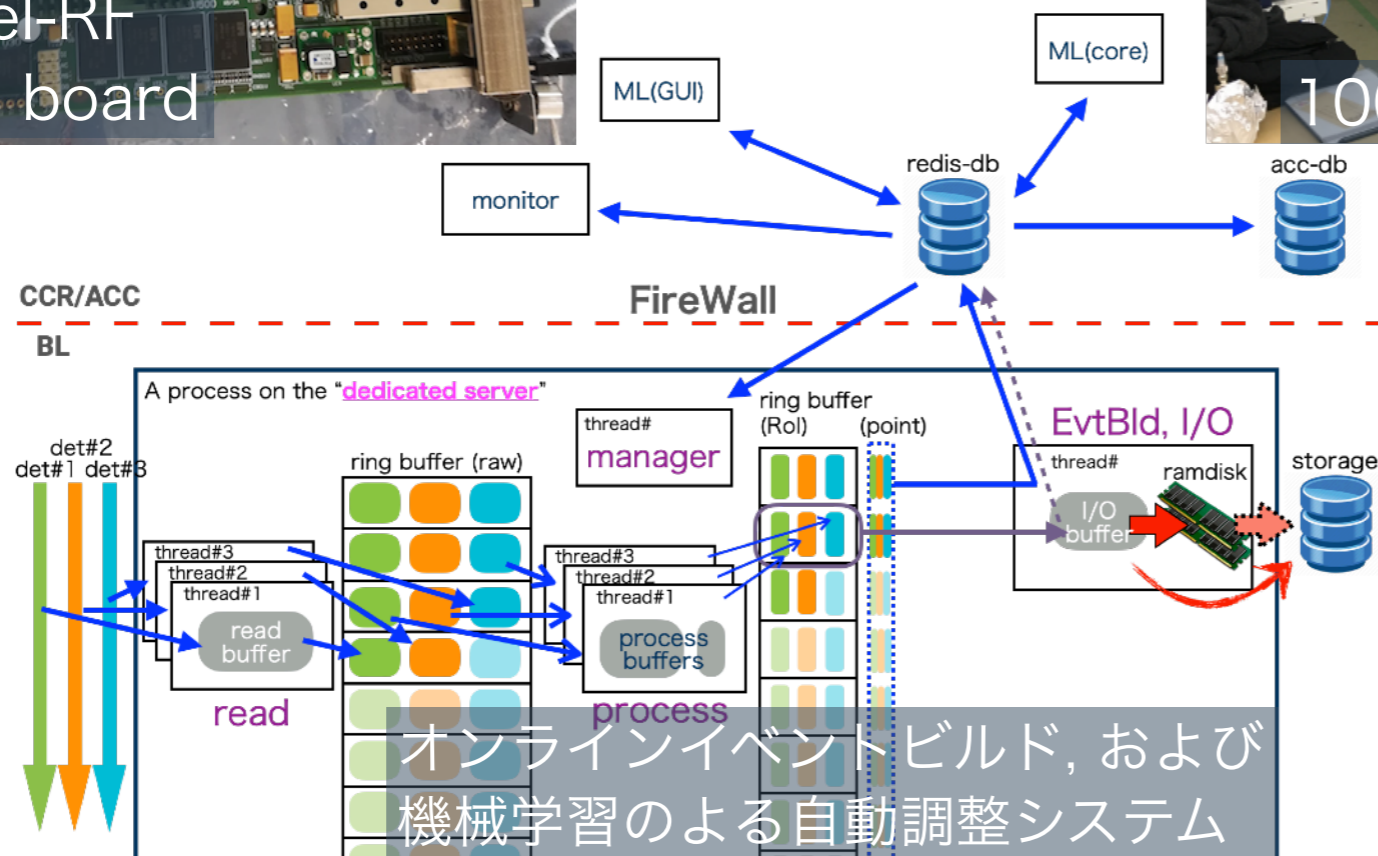
自己紹介

- ▶ ~2012: KOTO実験 @大阪大学 旧山中研(現南條研)
- ▶ ~2018: JSNS2実験 @KEK→ミシガン大学
- ▶ ~現在: SACLA/SPring-8 @理化学研究所→高輝度光科学研究センター

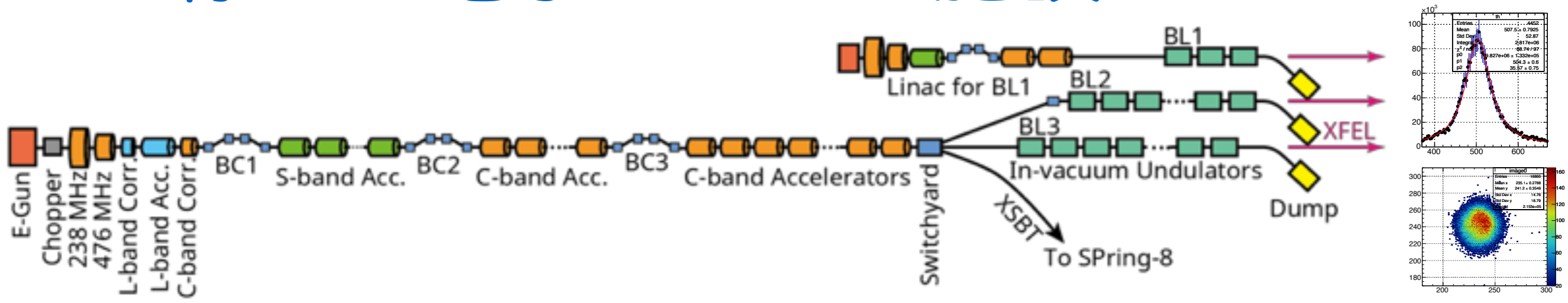


自己紹介

- ▶ ~2012: KOTO実験 @大阪大学 旧山中研(現南條研)
- ▶ ~2018: JSNS2実験 @KEK→ミシガン大学
- ▶ ~現在: SACLA/SPring-8 @理化学研究所→高輝度光科学研究センター



X線自由電子レーザー施設: SACLA

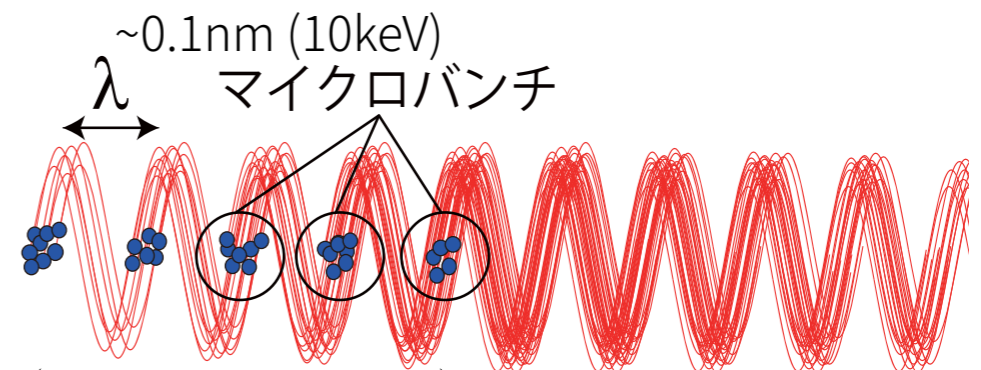
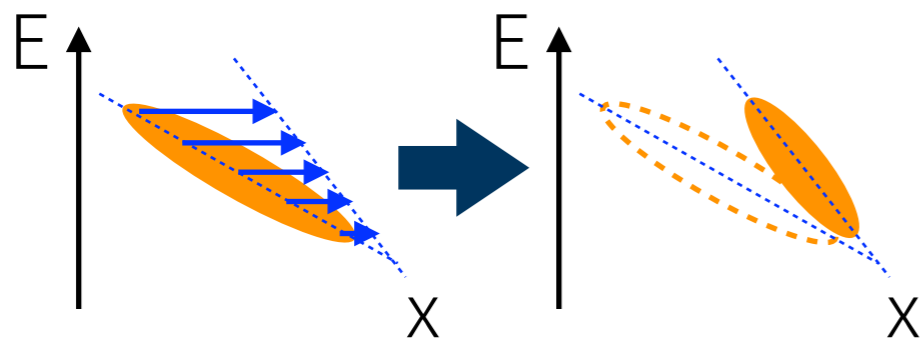
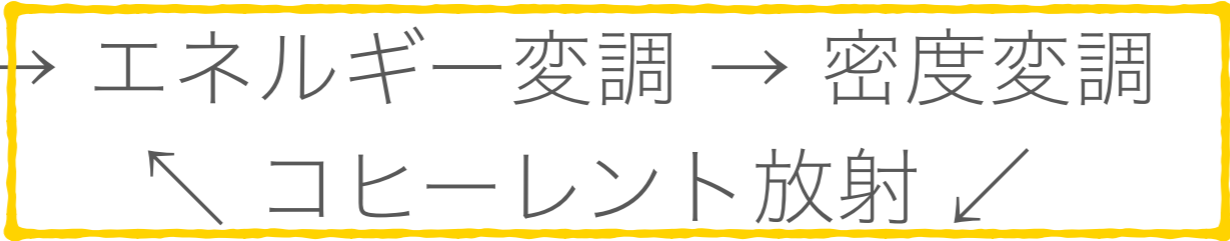


▶ X線自由電子レーザー (X-ray Free Electron Laser; XFEL)

➔ SASE (Self-Amplified Spontaneous Emission) による増幅

- ・ 電子ビームと(コヒーレントな)自発放射の相互作用

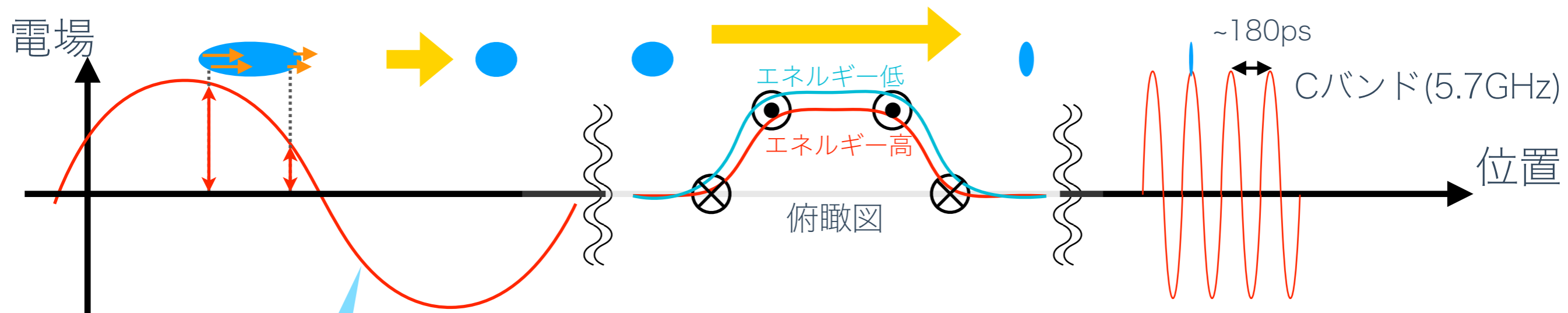
- ・ 自発放射 → エネルギー変調 → 密度変調 の正帰還



✓ (ローカルな) 電子数密度 ~ 6次元位相空間上の輝度で決まる!

高周波(RF) 制御

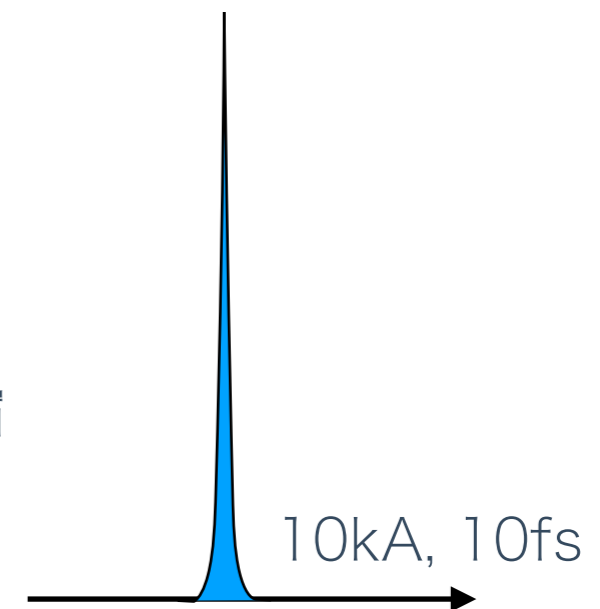
- ▶ 加速器は "電子の塊" の電気波乗り
 - ・ 8GeV まで加速 → 大電力高周波
 - ・ ~10fs (f/フェムト: 10の -15乗) の精度 → 高精度高周波制御
- ➔ 電子ビームをどこに乗せるか? ~ RF位相



※実際には減速位相で行う

$m > \mu > n > p > f$
 $10^{-3} \quad 10^{-6} \quad 10^{-9} \quad 10^{-12} \quad 10^{-15}$

時間方向に10万分の1に圧縮



XFEL/SACLA

- ▶XFEL出力強度は6次元位相空間上の輝度で決まる
 - ・これらを十分な精度でインラインで測る手法は未だ無し
 - ・SACLAの入射部は熱電子銃+速度圧縮のため均一性が良くはない
(熱電子銃: 500 keV, エネルギーと速度 β が非線形)
- ➔“シュリンク”した平均値を用いても計算通りにはいかない (領域共通の課題)
どうしてもビームを見ながらの難しい調整が必要になる

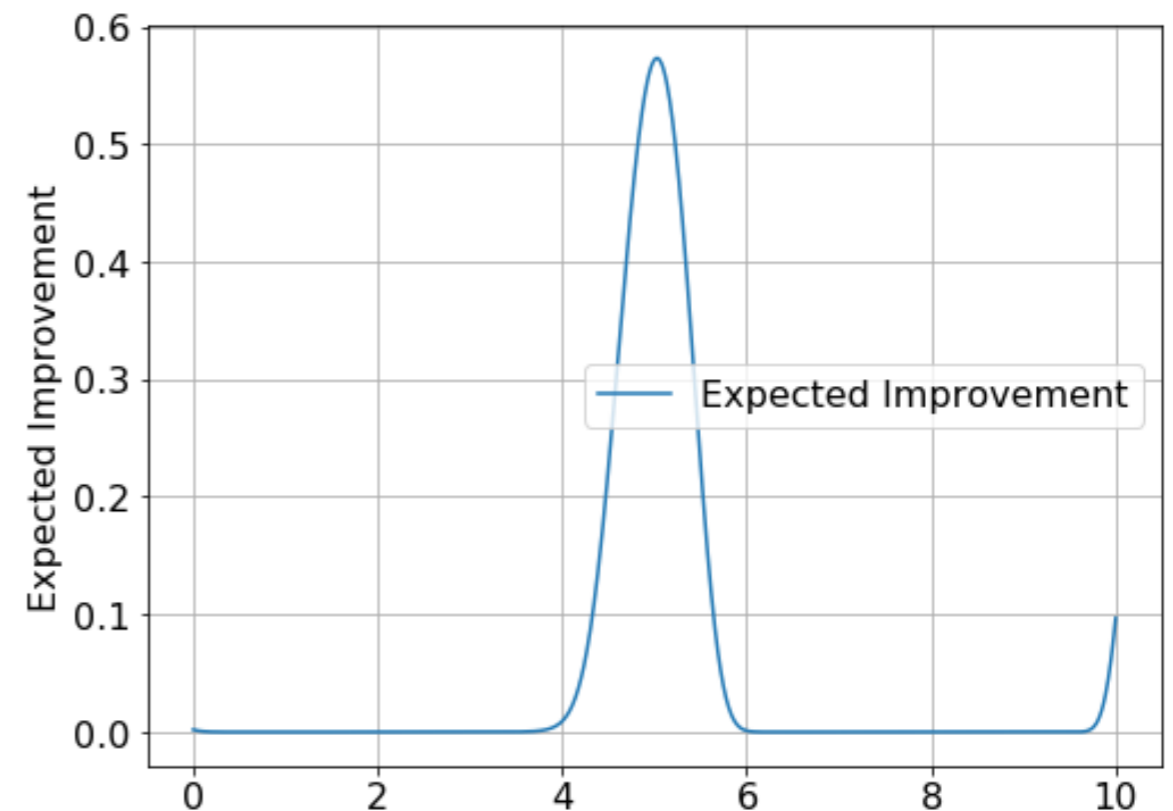
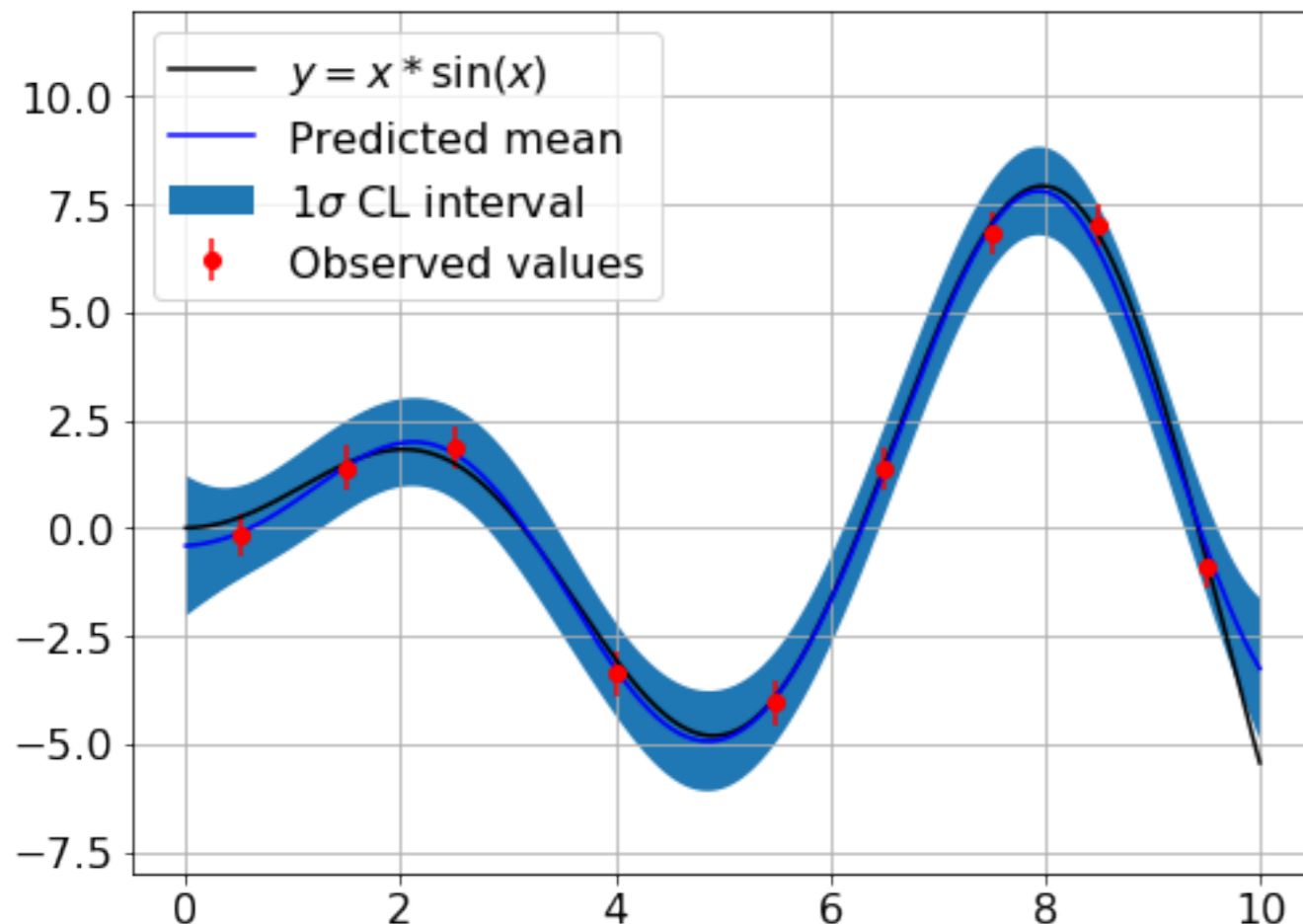


- ▶調整, 運転の合理化の必要性
 - ・波長, ビーム条件が異なる3本のXFELビームラインの同時運転
 - 数日毎に必要な波長, ビーム条件などが個々に変わる
 - うち2本は主加速部までを共有, パルス毎に切替&振分
 - 2020年2月から SPring-8 蓄積リングへの入射器の役割も兼ねる (→ SPring-8-II)
 - ・ビーム強度, 供給安定性が飽和傾向 → より良いXFELビーム性能への要求
(パルス幅, 空間プロファイル, 各種レーザー指標の安定性 …)
- ➔ 調整, 運転への機械学習手法の適用

機械学習手法を用いた 加速器運転パラメータの最適化

機械学習を用いた自動調整

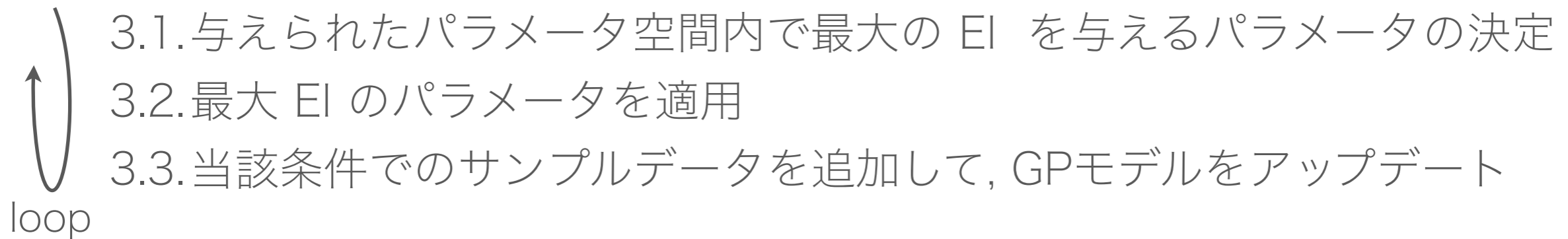
- ▶ 機械学習手法の一つ, Gaussian Process Regressor (GPR; ガウス過程回帰) を用いて Optimizer を作成
 - 誤差, 不定性を持つ多次元空間のデータをうまく扱える
 - local min/max にハマりにくい
- ▶ Expected Improvement (EI)
 - GPR の中央値と不定性を用いて更新期待値を計算



GPR Optimizer

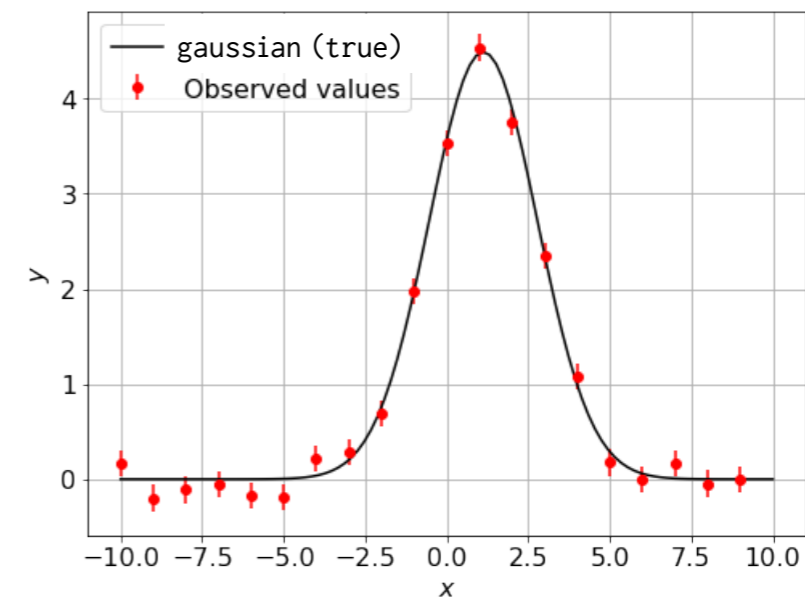
▶最適化シーケンス

1. パラメータ数, range に応じていくつかデータを収集
(例えば 3 パラメータなら 7 点)
2. それらのデータを元に最初の GPモデルを生成
3. 最適化ループ



▶この GPR-Optimizer を用いて誤差付きデータについてガウスフィットを行う

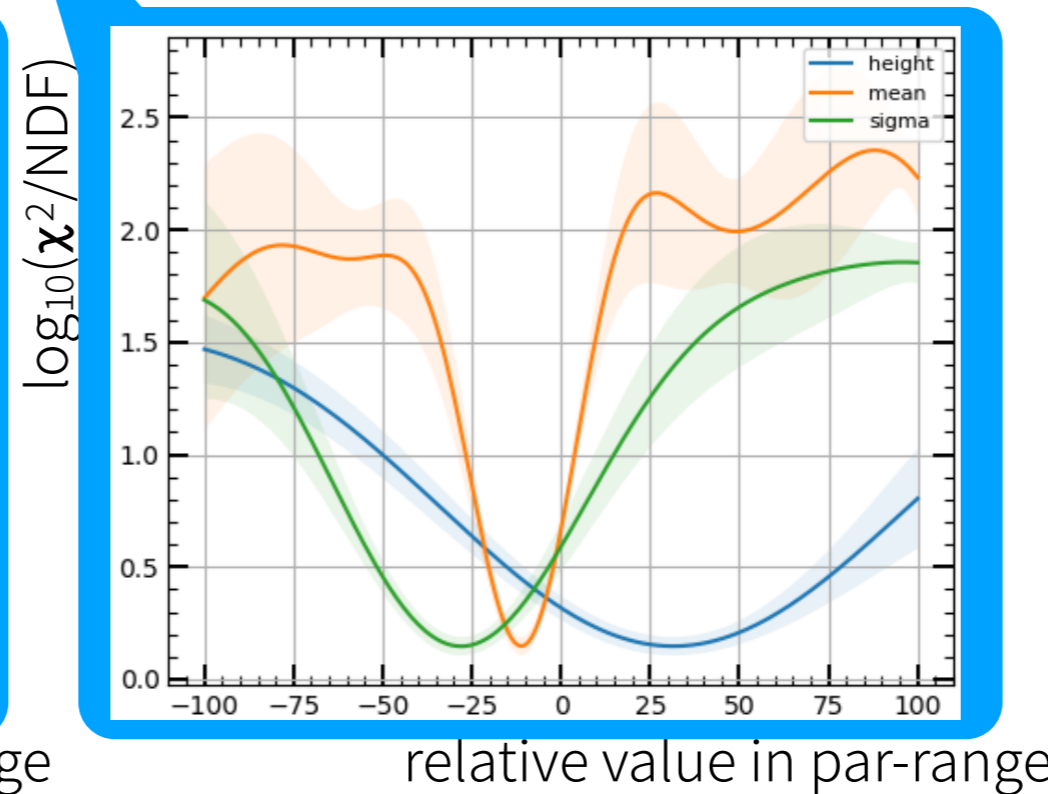
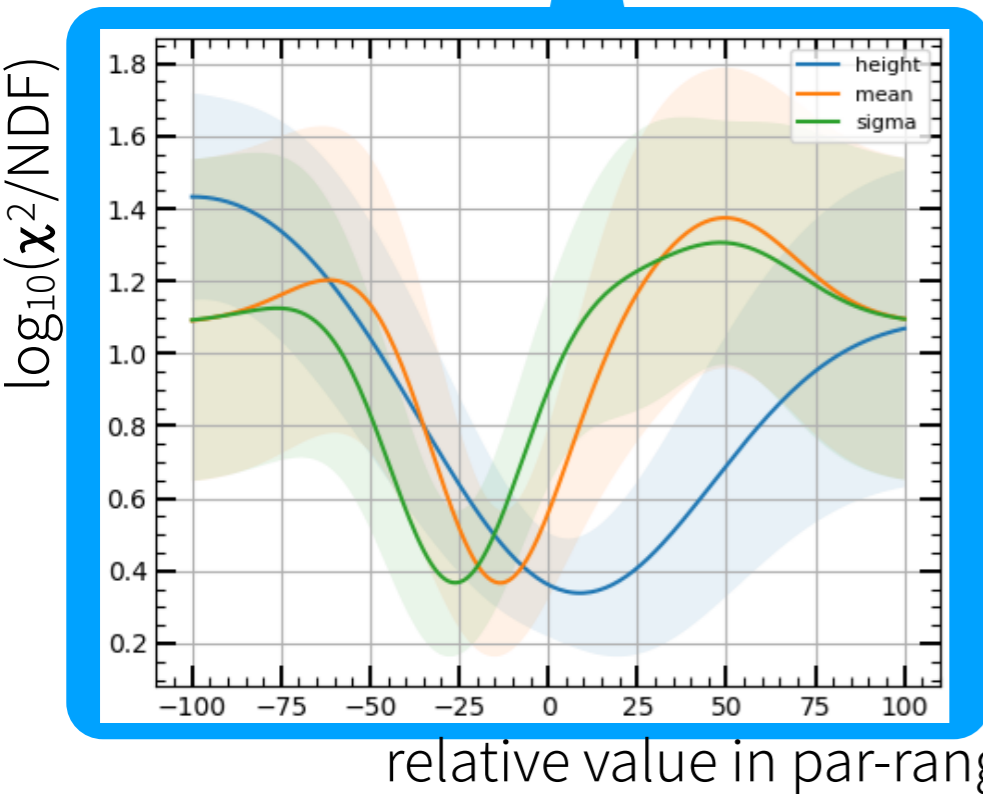
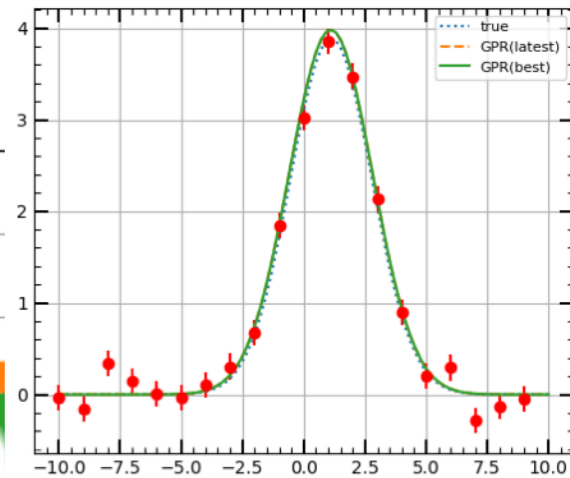
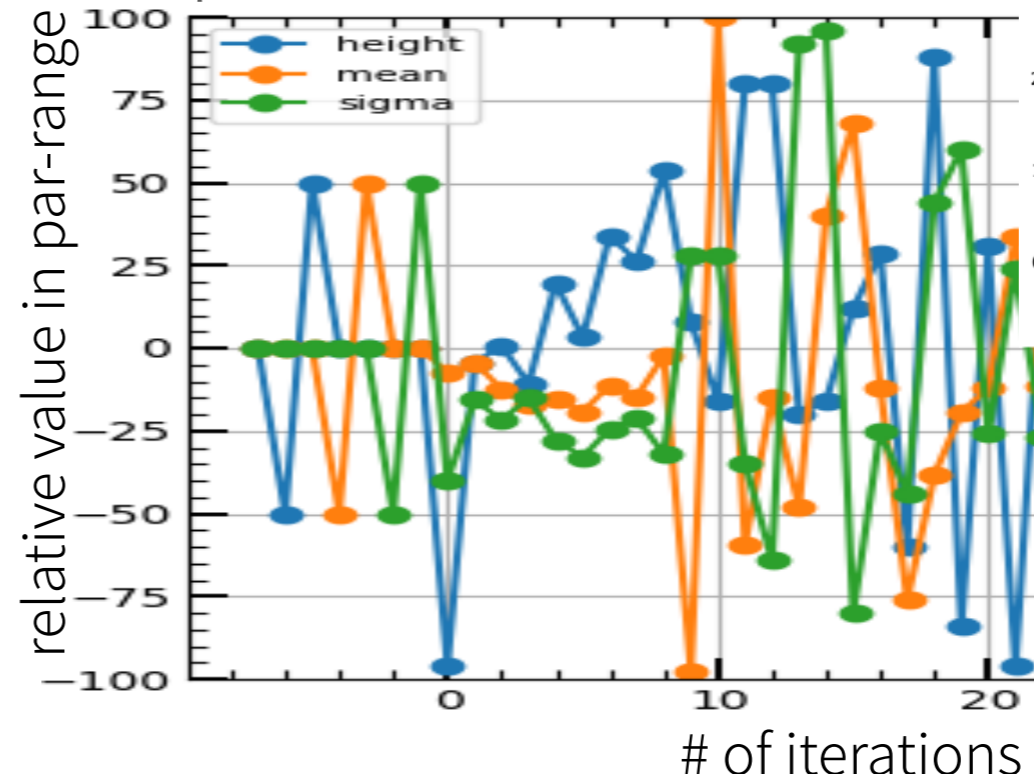
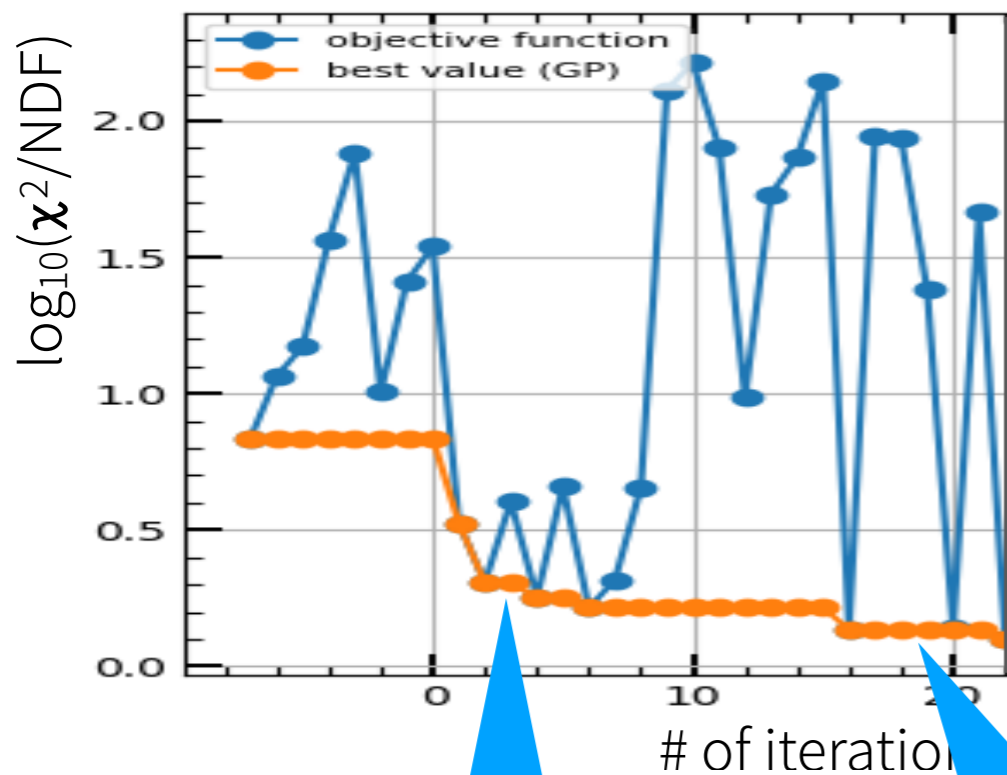
- ・パラメータ数: 3
- ・目的関数: (reduced) chi-square



GPR Optimizer のテスト (1)

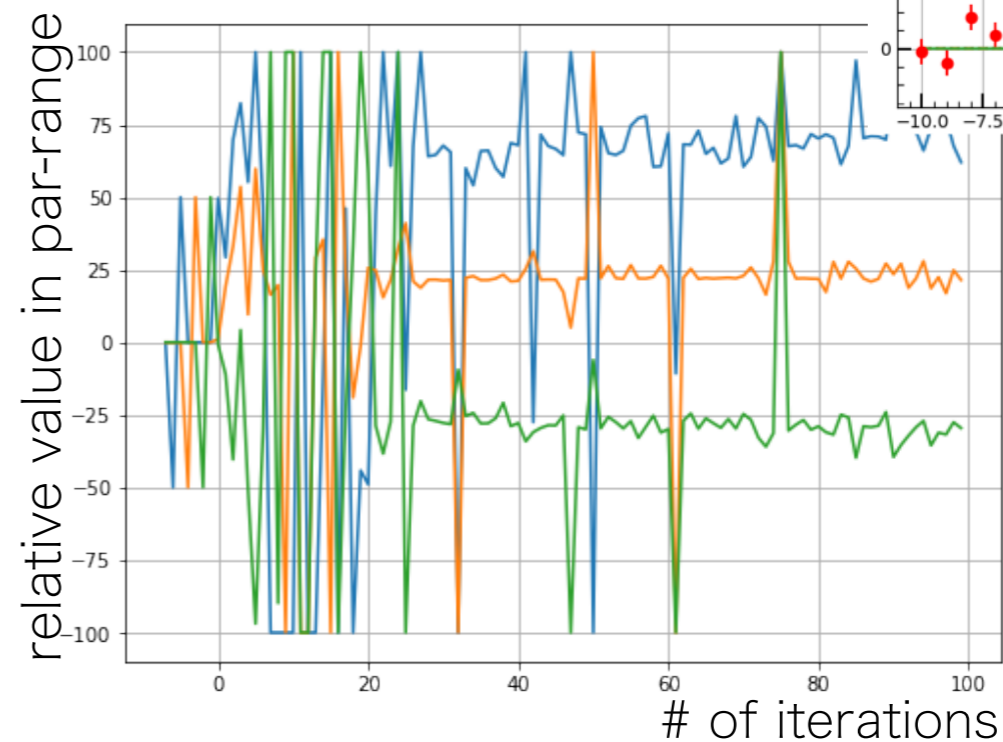
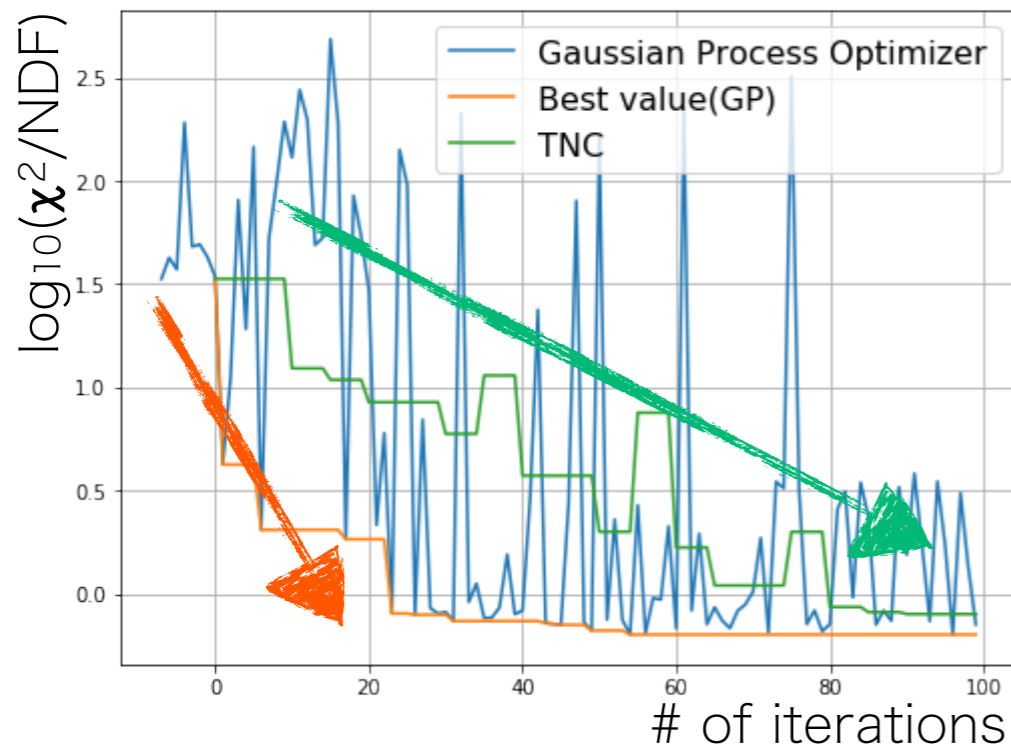
— GPR Optimizer

▶ データのガウスフィットを GPR Optimizer を用いて行う

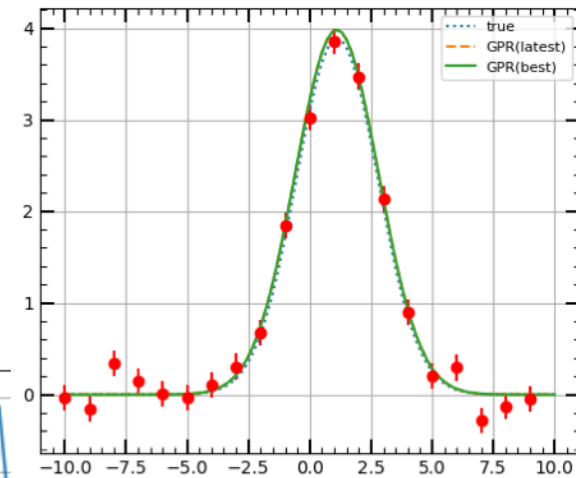


GPR Optimizer のテスト (1)

▶ データのガウスフィットを GPR Optimizer を用いて行う



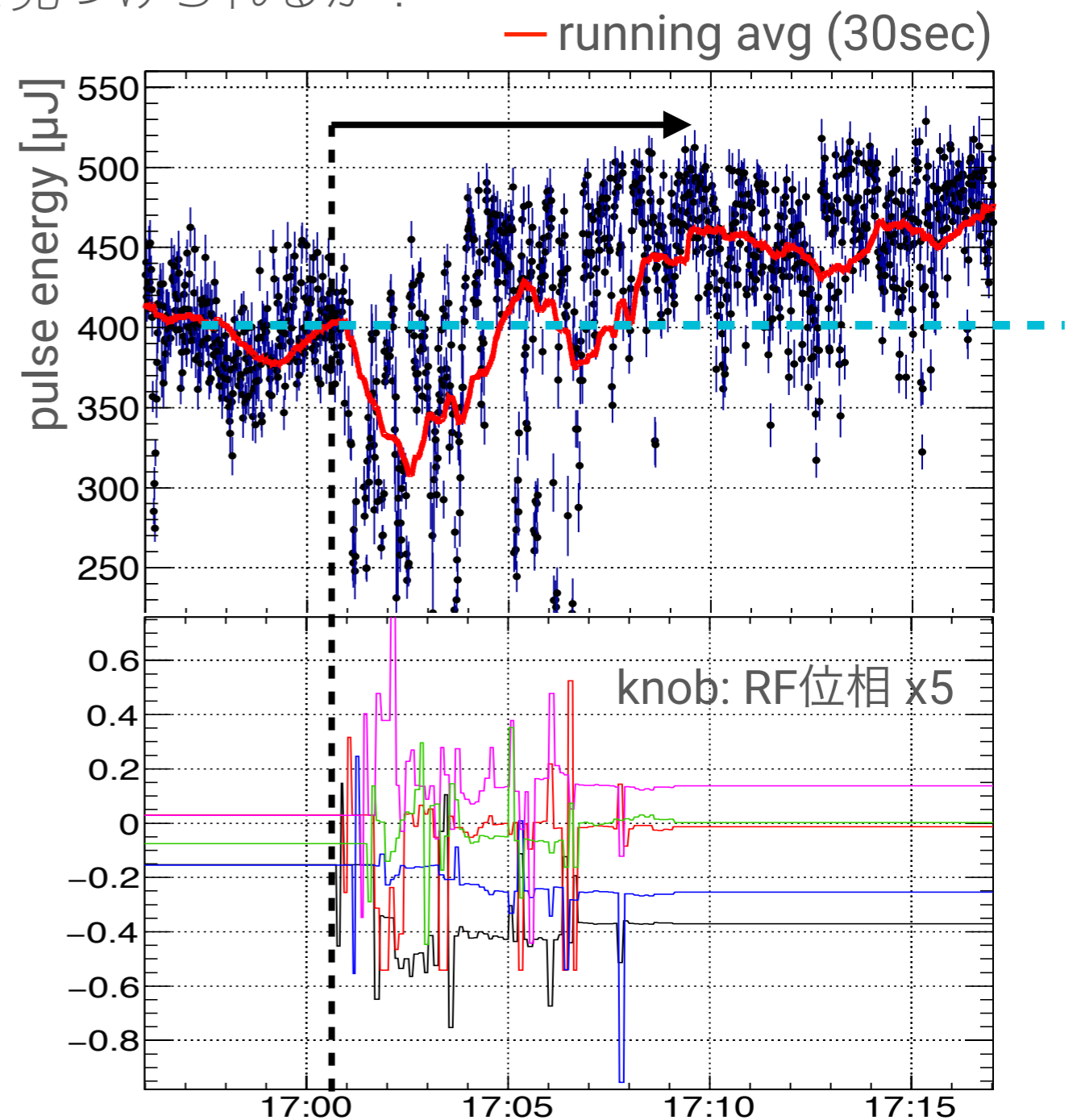
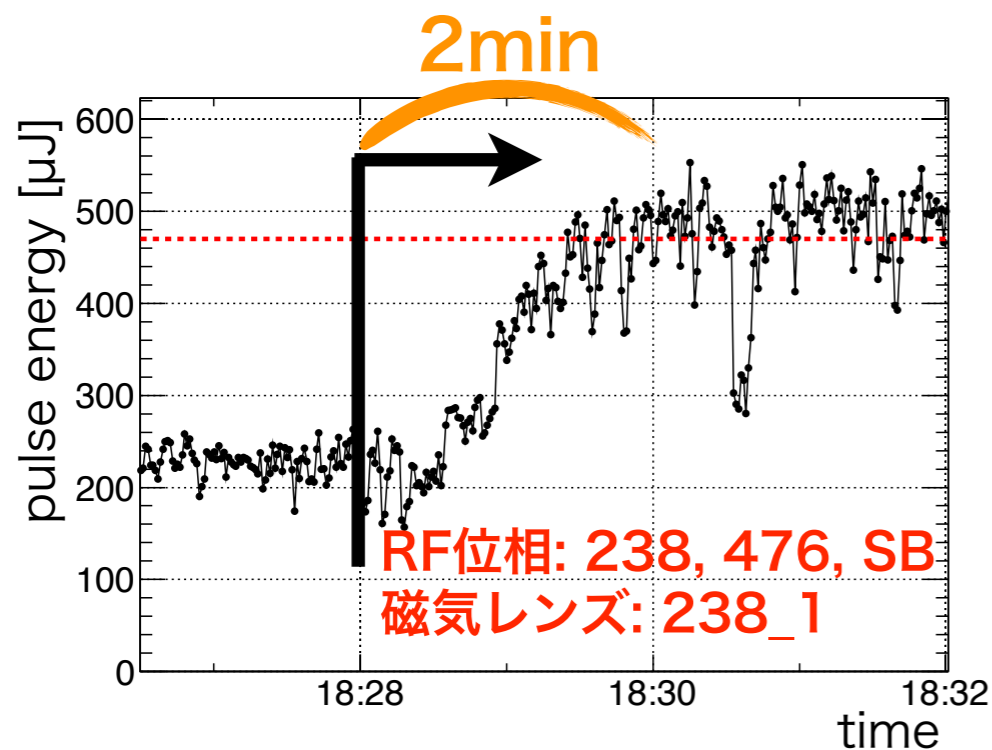
— GPR Optimizer



- ▶ 既存/古典的な方法 (TNC; Truncated Neuton) と同等のフィット結果
 - 少ない”試行回数”で収束 (※加速器調整なら調整時間に相当)
 - ‘best’ な値に収束後にも大きなパラメータの”飛び”: GPRの特徴の一つ (local min/max にハマりにくいメリットの反面)

GPR Optimizer のテスト (2)

- ▶ 実際にビームを用いたテスト (通常行われている調整と同様, XFEL出力強度を最大化)
 - ・ 左: まずは少数のパラメータ, 意図的に出力を下げた既知のオフセット
 - ・ 右: 通常の手動調整後, 未知の“山頂”を見つけられるか?



日常的な加速器調整での活用

▶ 運転員による GUI での利用

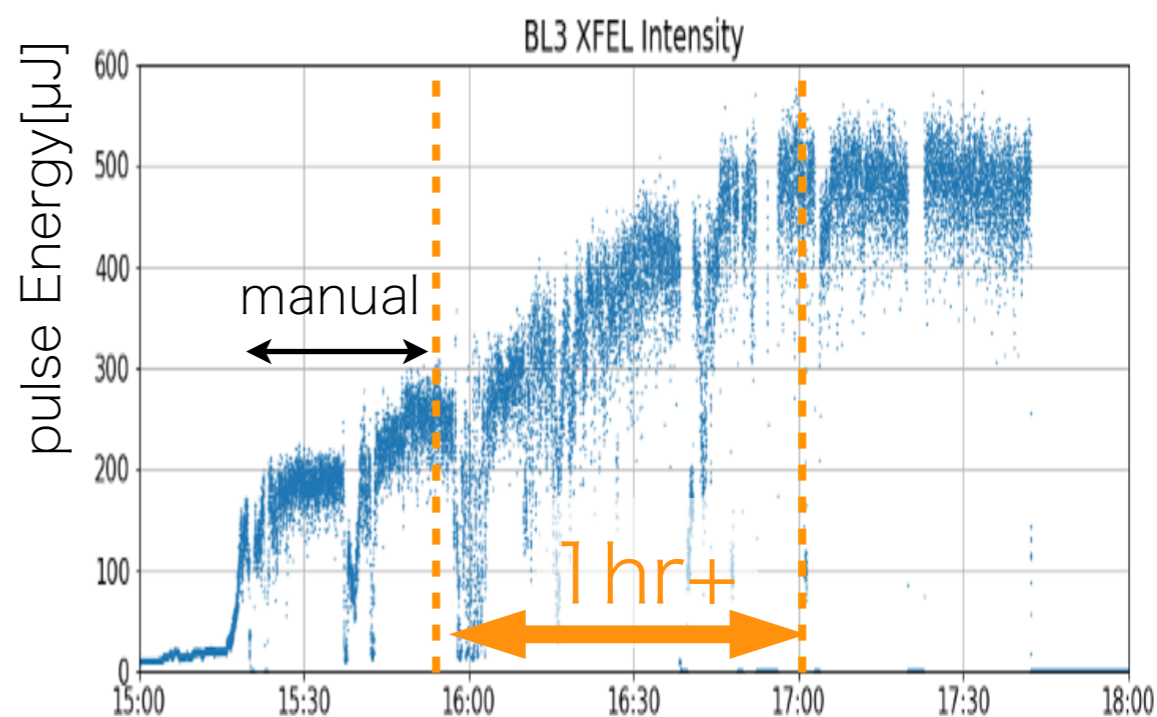
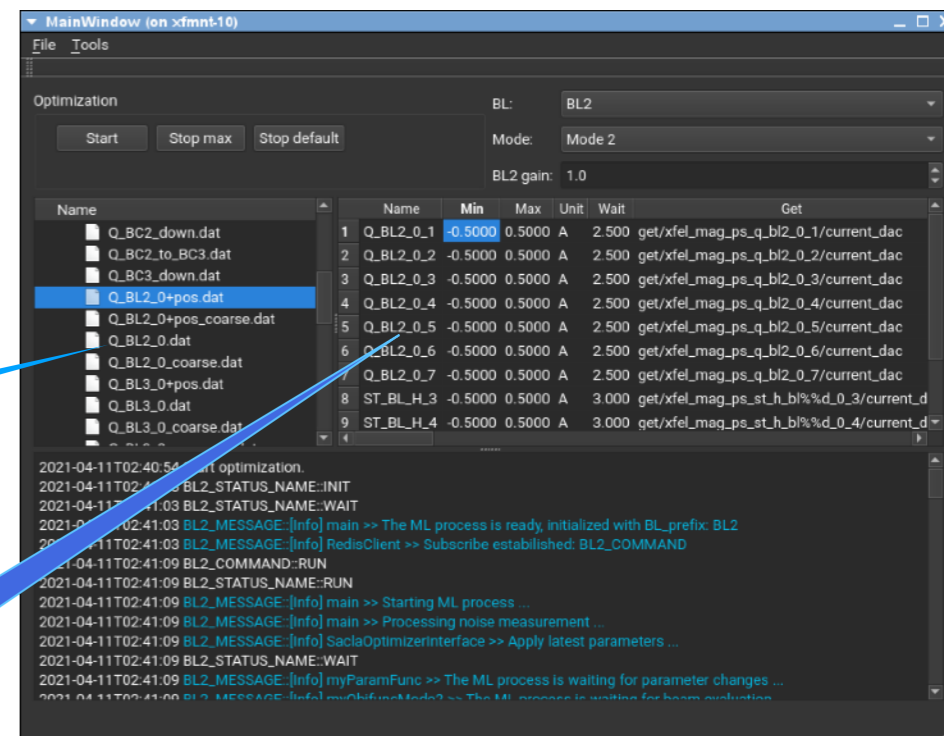
- GPR Optimizer は既に実戦投入されている
- 経験の浅い運転員から、熟練の運転員まで広く日常的に調整に利用されている
- 運用上は調整時間、安定性/再現性の観点などから10-15パラメータ程度までで利用

目的, セクション毎の
制御パラメータ・テンプレート

各機器の制御範囲, 待ち時間,
制御情報などのリスト

- ✓ 調整の合理化によりSRへの入射開始後も、以前と同等以上のXFEL供給を実現
- ✓ 未踏の 1mJ@10keV 達成にも貢献

➔ 更なる高度化へ向けての研究



更なる高度化

- ▶ 更に洗練された性能指標 (BL系の方と協力)
 - “スペクトル” 最適化
 - …
- ▶ 更に多様な用途
 - 入射部の空間プロファイル調整
 - …
- ▶ 更に高度な機械学習手法の導入
 - 深層学習系: Deep Q-Network など
 - …
- ▶ その他の取り組み

更なる高度化

- ▶ 更に洗練された性能指標 (BL系の方と協力)

- “スペクトル” 最適化

- …

- ▶ 更に多様な用途

- 入射部の空間プロファイル調整

- …

- ▶ 更に高度な機械学習手法の導入

- 深層学習系: Deep Q-Network など

- …

- ▶ その他の取り組み

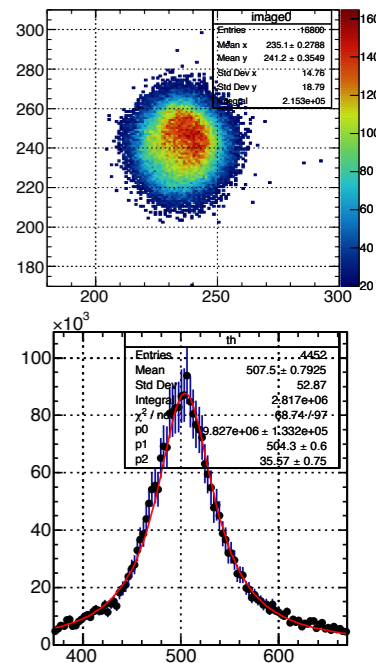
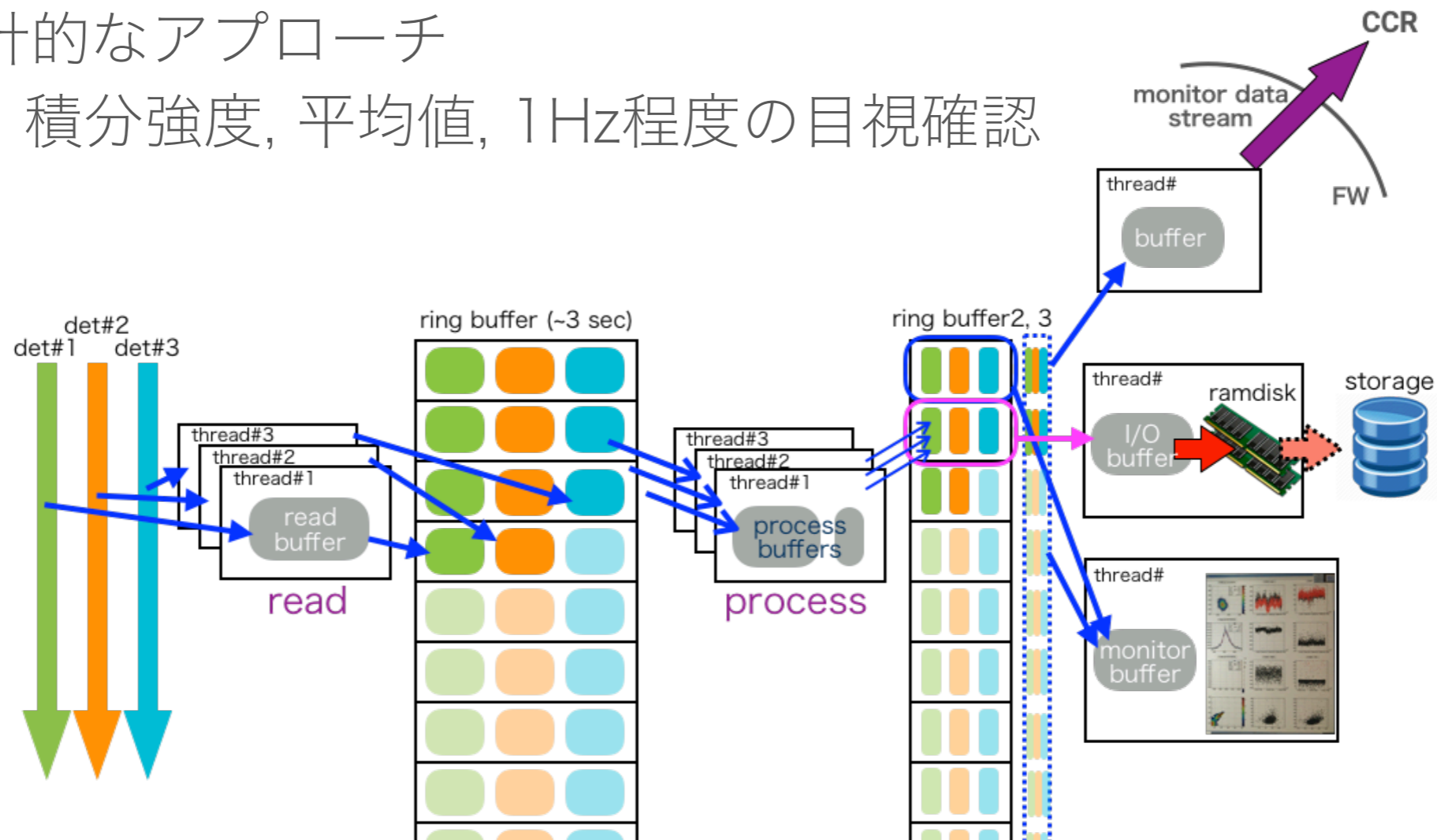
XFEL性能の指標化

- ▶性能指標を最大化する枠組みの一つは実証できた
- ▶ユーザーの求める“性能”を指標化できれば、ニーズに即した調整が可能になる

→ BL/実験系の常設測定器の生データへのアクセス
(最大60Hz, 3Gbps超のデータをマルチスレッドによる並列処理)

✓多パラメータ間の相関, ショット毎のふらつきなどに対する
系統的, 統計的なアプローチ

⇔ これまで: 積分強度, 平均値, 1Hz程度の目視確認



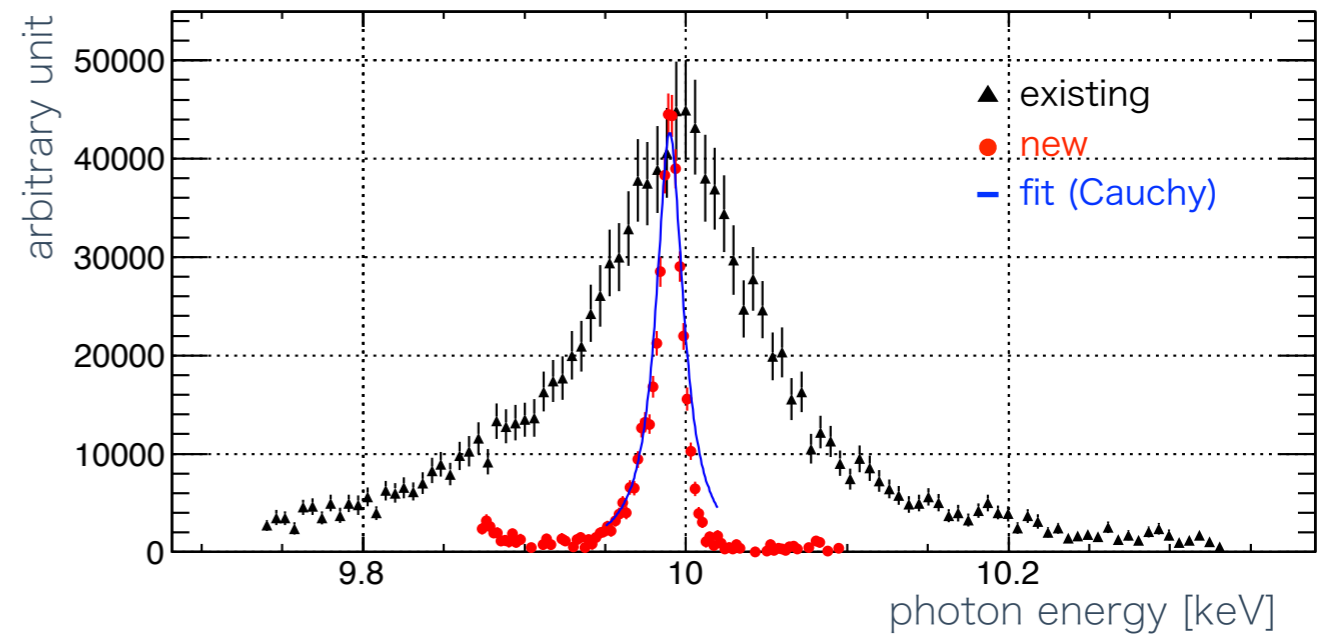
スペクトル輝度最適化

- ▶ ショット毎のパルス幅を十分な精度でオンラインで測定できる新型スペクトロメータ
- ▶ この新型スペクトロメータを活用した、中心波長のスペクトル輝度最適化を行う

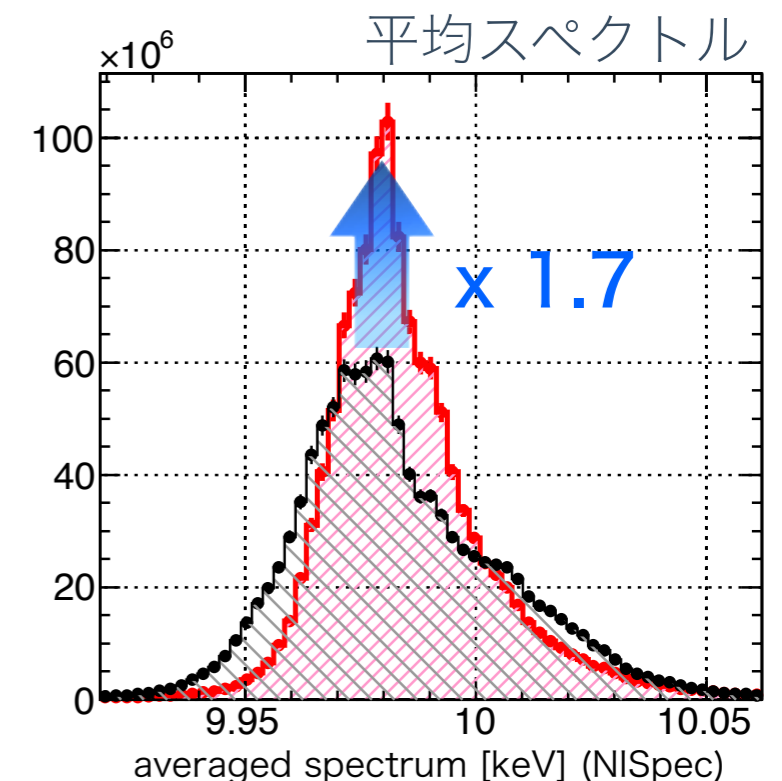
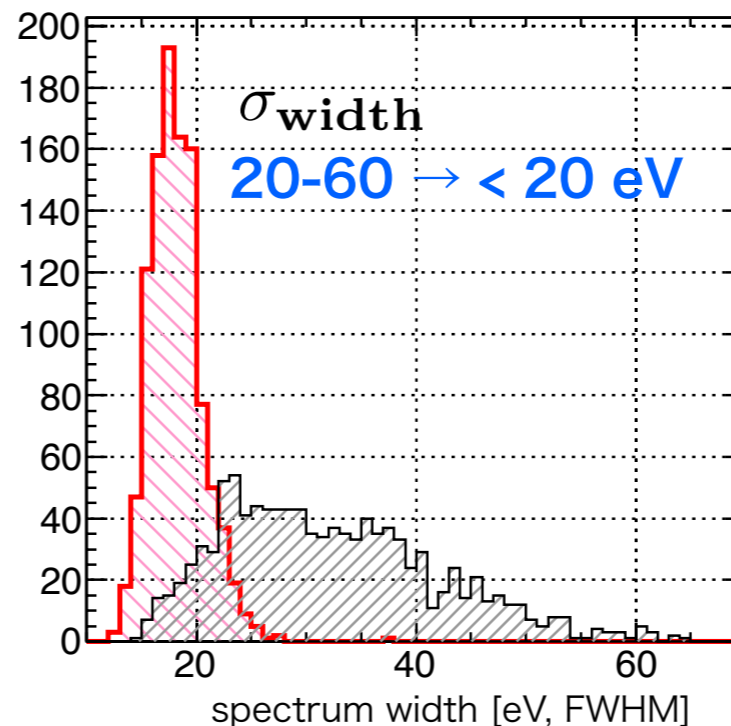
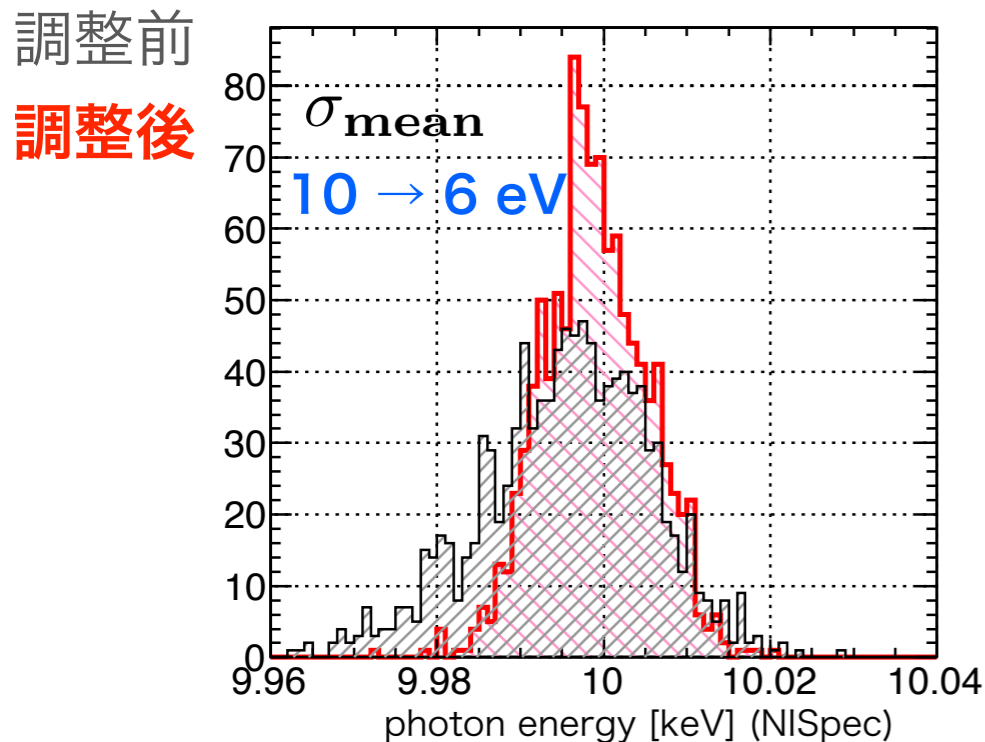
- 性能指標:

$$\frac{\text{PulseEnergy} [\mu\text{J}]}{\sigma [\text{eV}]}$$
$$\sigma^2 = \sigma_{\text{mean}}^2 + \sigma_{\text{width}}^2$$

- σ_{mean} : 中心波長のふらつき
- σ_{width} : ショット毎のパルス幅

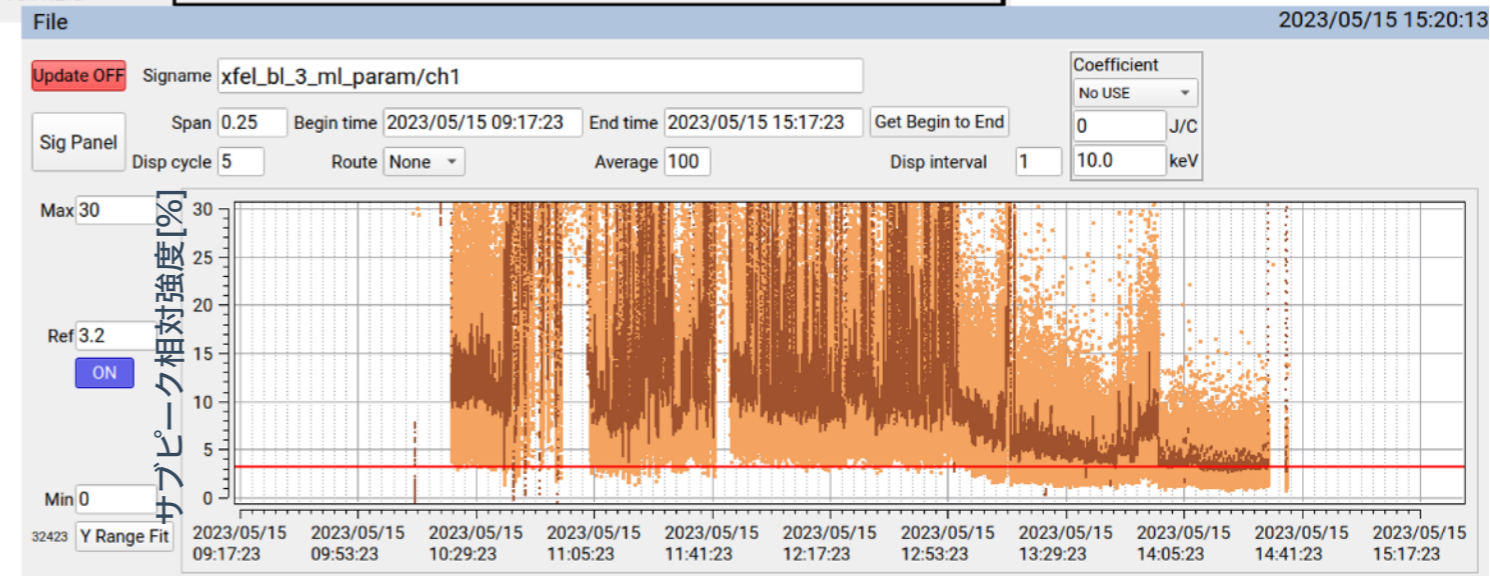
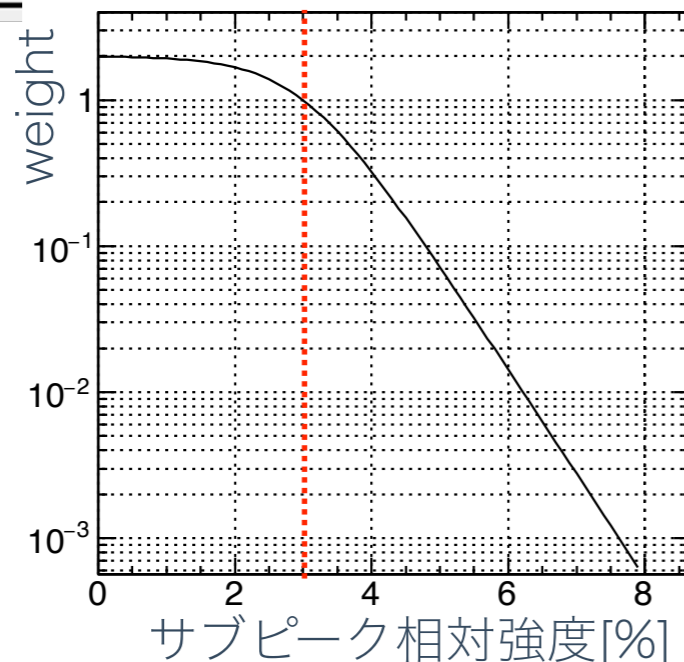
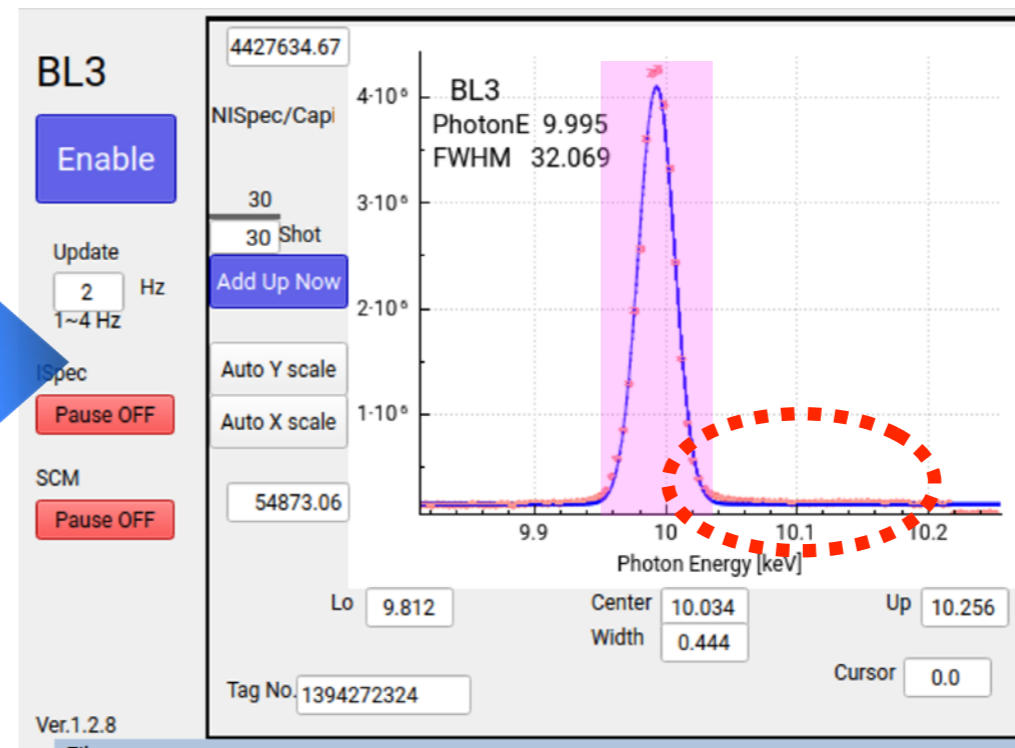
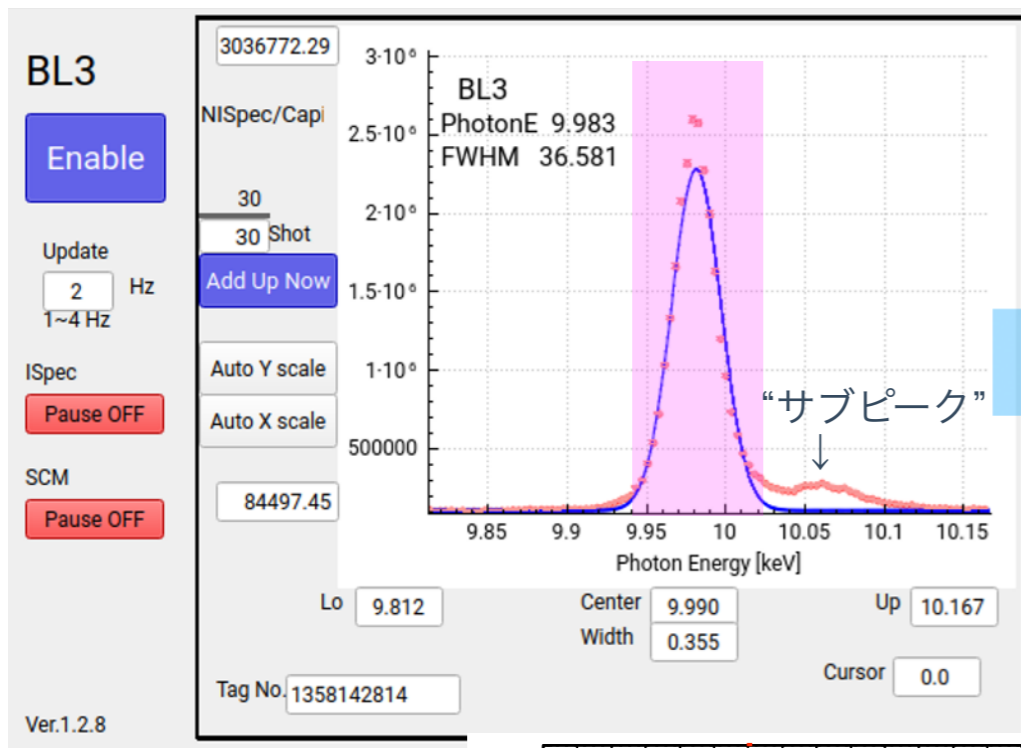


✓ 中心波長のスペクトル輝度を x1.7倍改善 (実はこの時はパルスエネルギー自体は殆ど変わっていない)



平均スペクトル形状最適化

- ▶ “中心波長のサイドバンドのピーク強度(サブピーク強度)を中心波長の3%以下に”
 - ・ 利用実験側からのリクエスト
 - ・ 先のスペクトル輝度の最適化を行ってもしばしば“肩”が残りがち
 - ・ ショット毎に“サブピーク強度”で weight を掛けた平均値を最大化



更なる高度化

▶ 更に洗練された性能指標 (BL系の方と協力)

- スペクトル輝度最適化

- ...

▶ 更に多様な用途

- 入射部の空間プロファイル調整

- ...

▶ 更に高度な機械学習手法の導入

- 深層学習系: Deep Q-Network など

- ...

▶ その他の取り組み

入射部ビームプロファイルの調整

▶入射部調整の重要性(再掲)

- ・XFEL出力強度は電子ビームの6次元位相空間上の輝度で決まる
- ・SACLAの入射部は熱電子銃+速度圧縮のため均一性が良くはない
(熱電子銃: 500 keV, エネルギーと速度 β が非線形)

➔特に電子銃カソードの交換後などは、厳密で効率的な電子ビームの状態の再現が重要！

- 壁電流モニター(縦情報)の追加
- スクリーンの高解像化

▶これまでの調整と課題:

- ・二次元プロファイル, あるいはその射影を人間が目で見ても再現, 上流から何度か繰り返して調整
 - 二次元ヒストグラムは range や gain などの色表示の印象に人間がしばしば騙される
 - あちらを合わせると、こちらが合わず

➔開発の狙い: これらの調整を機械学習で行う

1. スクリーン画像データは統計的な処理で指標化 → “印象” に騙されない
2. 複数地点のスクリーン画像等を同時に評価 → “6次元位相空間” 情報の抽出？

◎ 入射部に大きな機器変更があっても、同じ性能のビームを安定的に供給できるように！

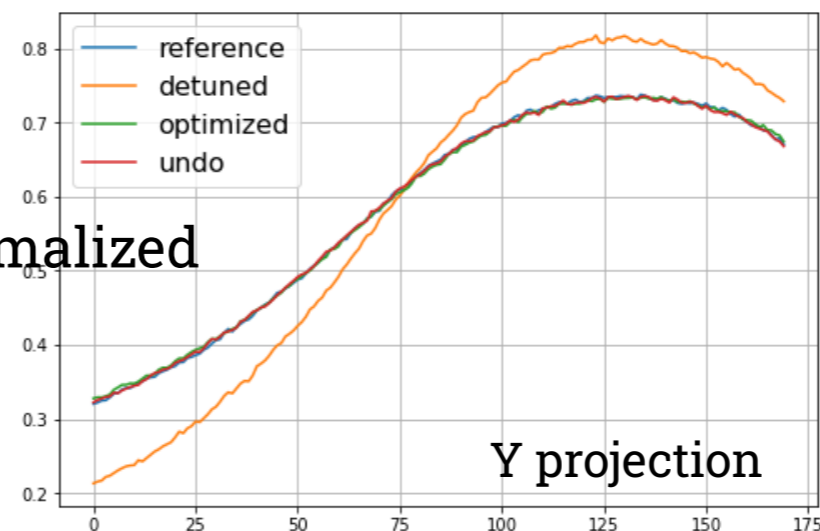
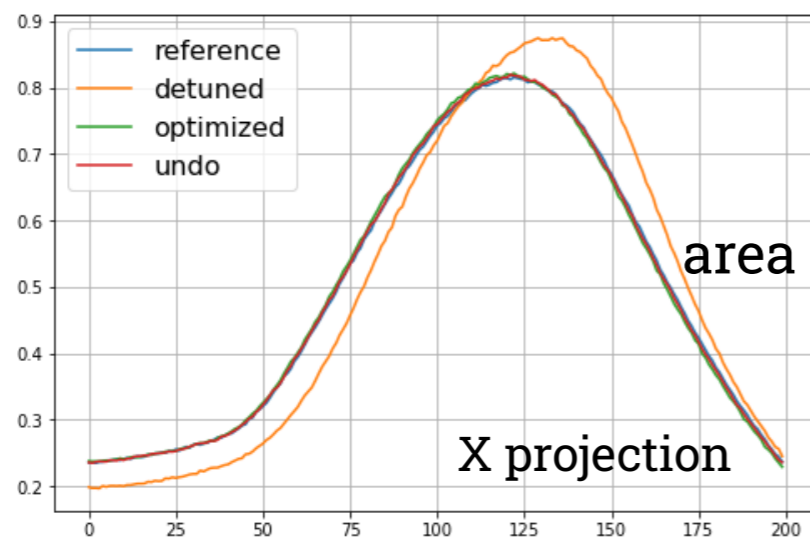
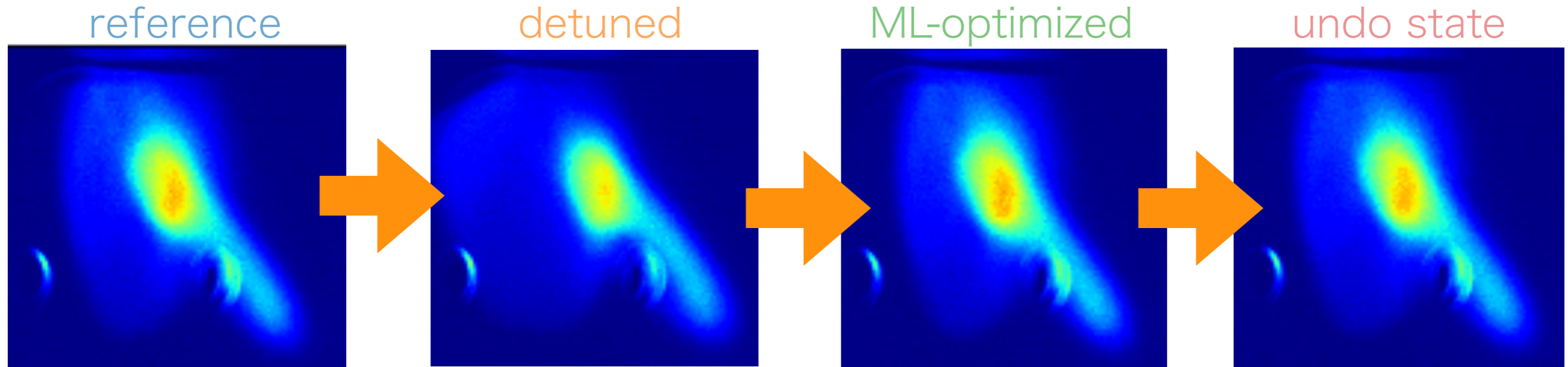
▶指標：二次元ピクセル毎の出力のリファレンスとの差分の reduced chi-square

- ・ピクセル毎の出力を全体の charge で規格化 → “形” の評価
- ・光統計, ノイズ項などの誤差/weight も評価

➔ビーム電流, アイリス, 露光時間, ゲイン等が変わっても不変(鈍感)

$$\chi^2 = \sum_i \left\{ \frac{x_i - kx_i^{\text{ref}}}{\sigma(x_i)} \right\}^2$$

入射部プロファイル調整試験

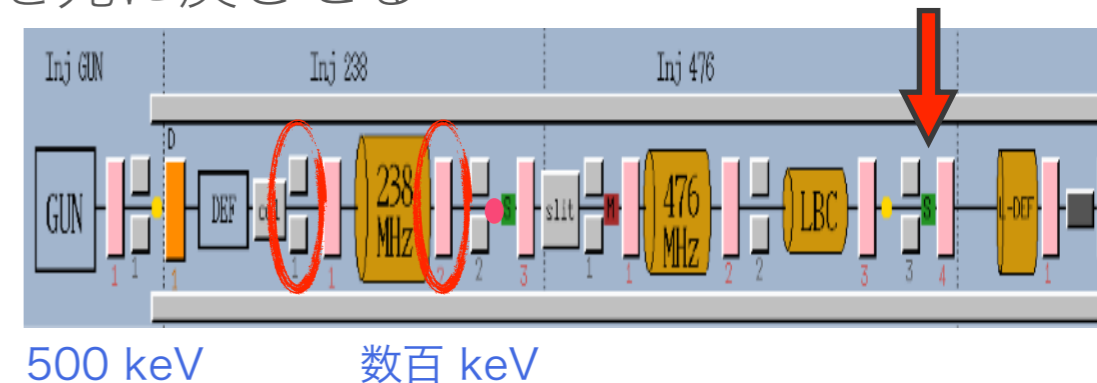


▶調整試験: 意図的に入射部のパラメータをズラしたものを元に戻させる

✓再現調整ができた

-ヒステリシスはこの振り幅においては negligible

*(定量性が難しいが) 人の目より感度が高そう



➡ 複数スクリーン, 及び壁電流モニター(縦情報)等の同時評価による位相空間再現を目指す

更なる高度化

- ▶ 更に洗練された性能指標 (BL系の方と協力)

- スペクトル輝度最適化

- ...

- ▶ 更に多様な用途

- 入射部の空間プロファイル調整

- ...

- ▶ 更に高度な機械学習手法の導入

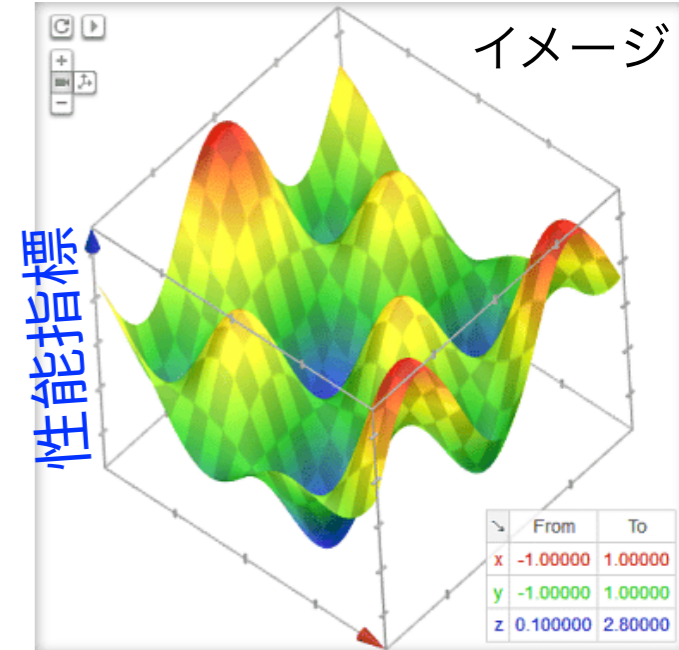
- 深層学習系: Deep Q-Network など

- ...

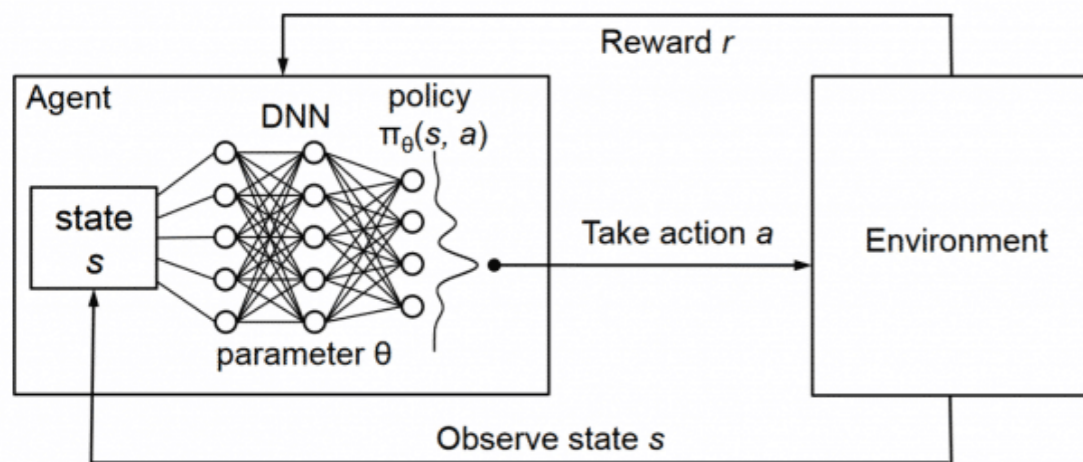
- ▶ その他の取り組み

更に高度な機械学習手法の導入

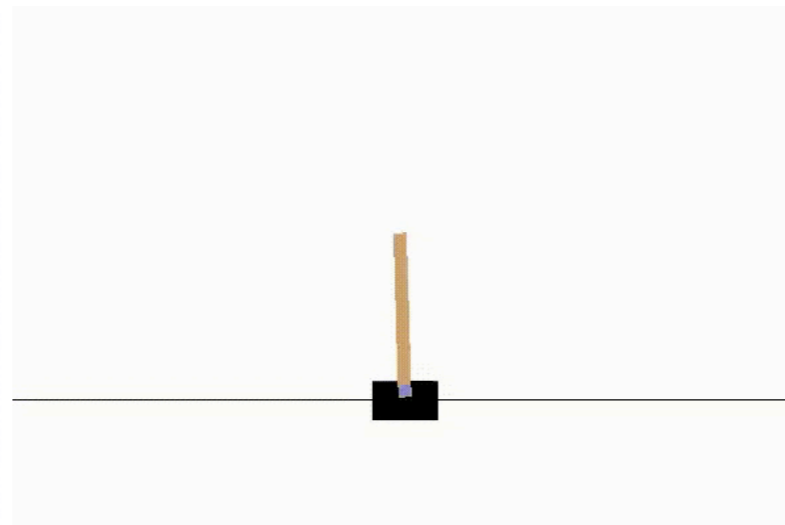
- ▶ 現行: Gaussian Process ベースの自動調整
 - ・ その時点での多次元パラメータ空間を都度学習



- ▶ Ex: Deep Q-Network 等を用いた自動調整
 - ・ 指標そのものを学ぶのではなく、指標最大化のやり方を学ぶ。その時にどうすれば最も良くなるかを、過去の学習を元に判断する
~ “熟練エキスパート運転員” を生成



DeepRM-HotNets



まだこれから。。。

更なる高度化

- ▶ 更に洗練された性能指標 (BL系の方と協力)

- スペクトル輝度最適化

- ...

- ▶ 更に多様な用途

- 入射部の空間プロファイル調整

- ...

- ▶ 更に高度な機械学習手法の導入

- 深層学習系: Deep Q-Network など

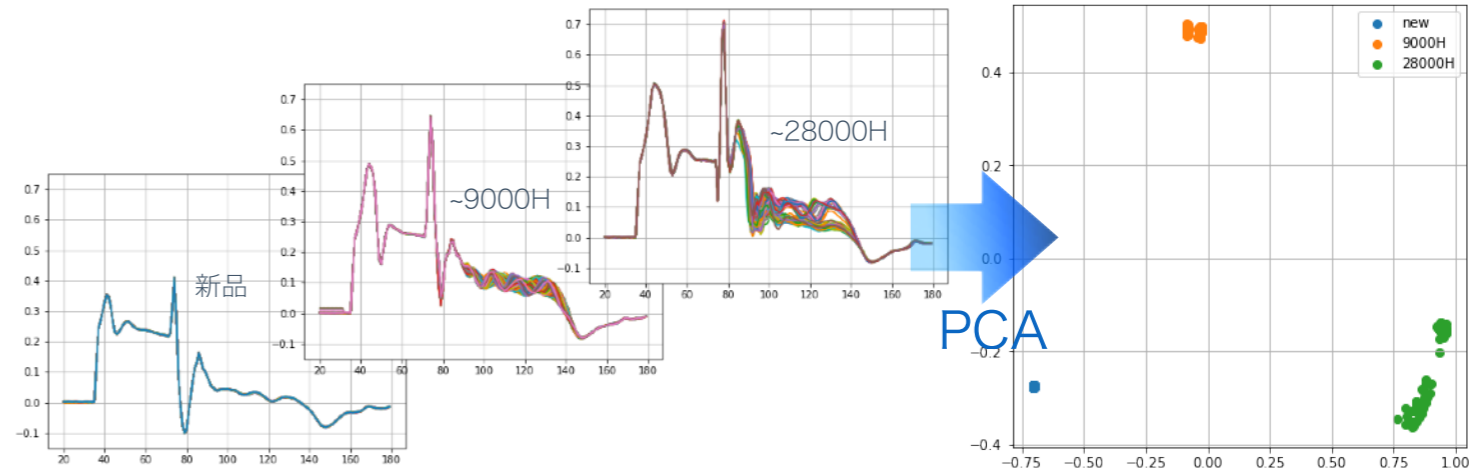
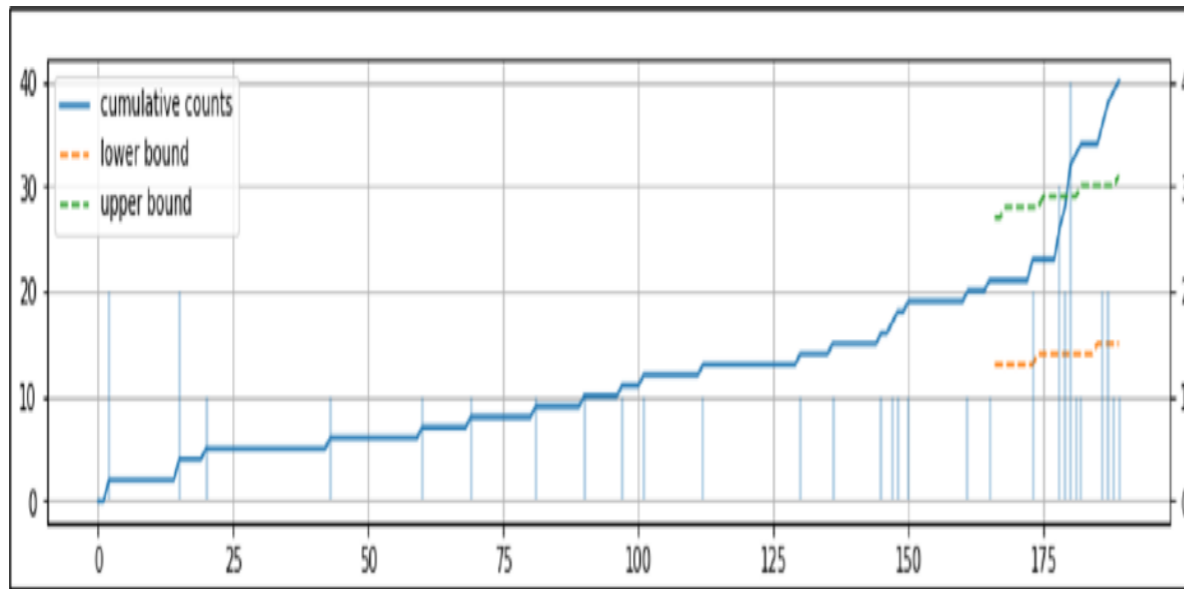
- ...

- ▶ その他の取り組み

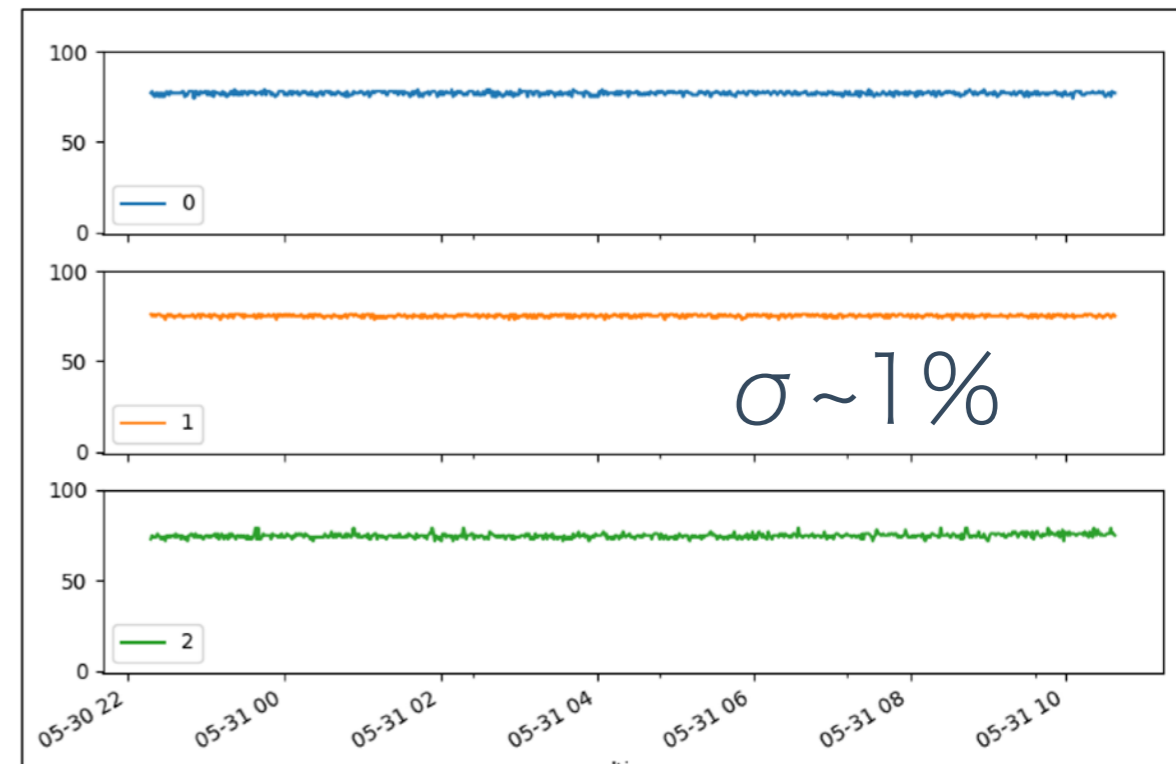
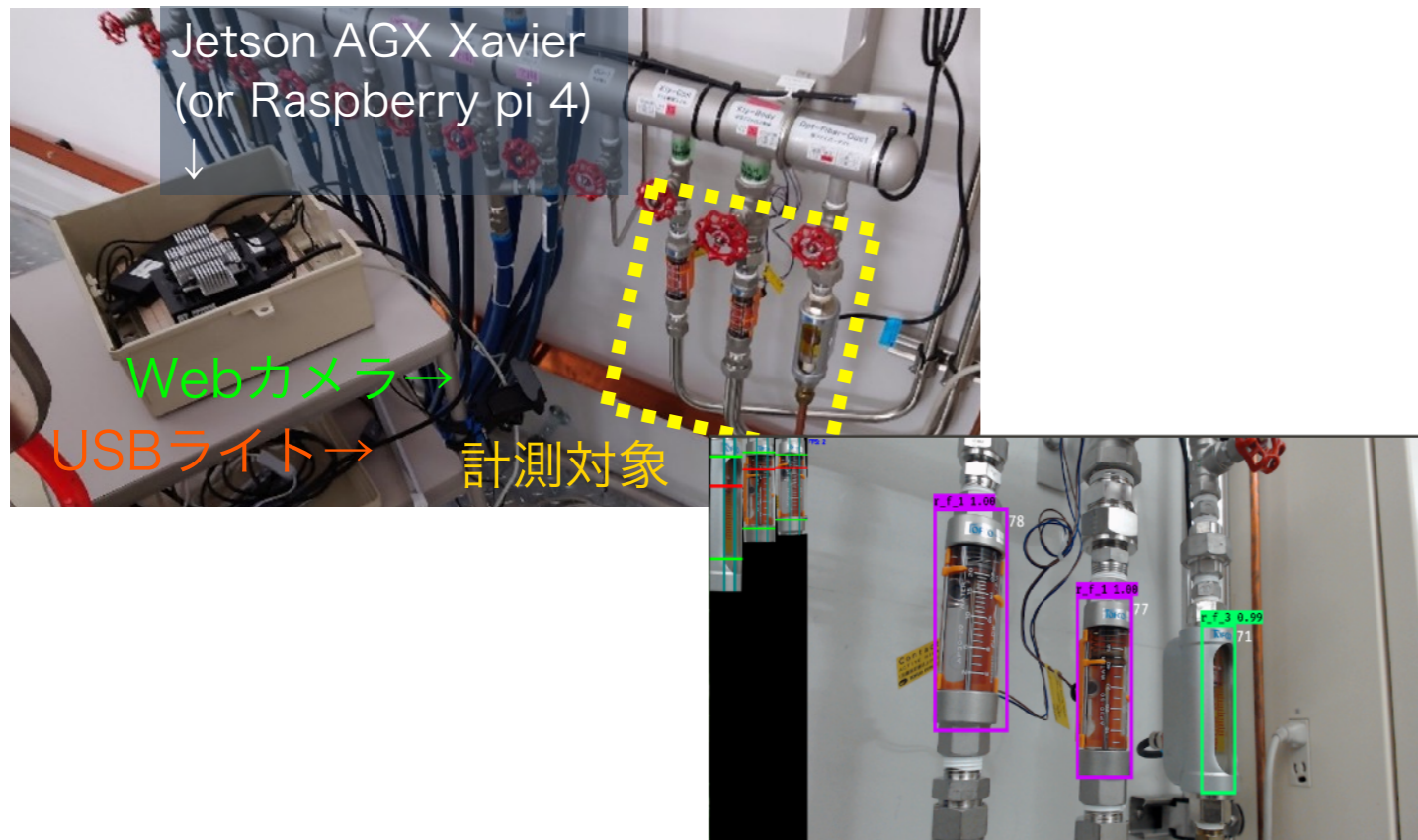
その他: 高可用性化への取り組み

▶ 民間企業との共同研究の例

・故障予知: サイラトロン(高電圧スイッチ) など



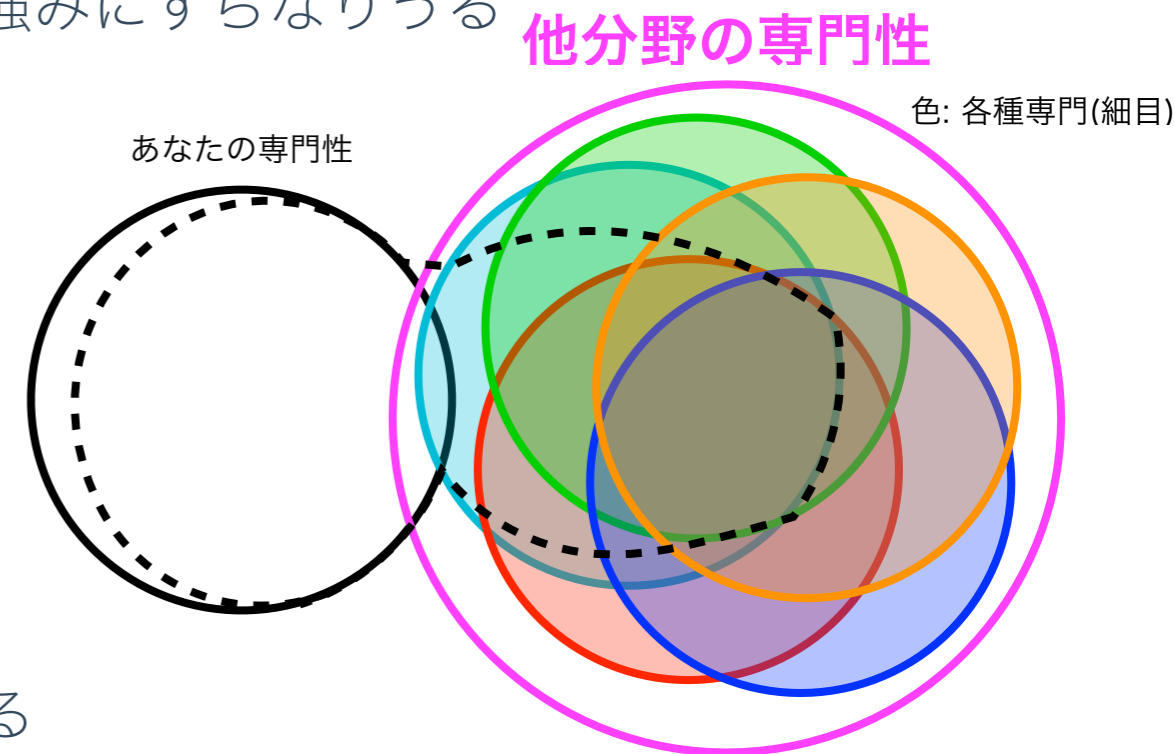
・計器読取: 運転中の加速器トンネル内のアナログ計器 など



素粒子実験 → 光源加速器 の経験を踏まえて…
(ポスドク, 学生の方々に向けて)

“異分野転生”のススメ

- 他の実験, 他の物理トピック, 他分野への進出に際しての不安: 『他分野は素人なので…』
- ➔ 私の見解: “現分野で, 自分で考え, 目一杯やってきたのなら, どの分野でも一切の不安は不要”
 - “研究” が最先端を形成 → 近いアプローチ, ノウハウが活かせることがしばしば
 - ex) 実験: 波形読出/firmware/DAQ → 加速器: LLRF, 機械学習
 - 「他分野の素人」は欠点では無い, 場合によっては強みにすらなりうる
 - ex) 部門間を跨いだ横断的なプロジェクト



- 素粒子, 原子核実験研究者は異分野転生に向いている
- なんでも全て自分達でやろうとする。特定知識の専門家ではなく、様々な事象を対象とした”研究”のプロ?

プログラミング, 英語, オンラインでのトークなども “技能” の一つ…?

- 本質的な興味の対象はどこか?

- ▶ 私は実は “分からないことをどうにかして調べる, できないことをできるようにする, という研究の過程そのもの” が本質的な興味の対象

Summary

* SACLA/SPring-8 では、さらなる 高性能化&運転合理化 と 高可用化を目指し、機械学習手法を用いた取り組みを開始

▶ 加速器運転パラメータの最適化

- Gaussian Process Regressor を用いた自動調整
- 運転員により日々の調整に活用
- スペクトル輝度, 形状の最適化
- ビーム位相空間再現の試み: 空間プロファイルの再現調整
- より洗練された機械学習手法の導入へ

▶ 加速器の高可用化

- 機械学習を用いて故障の予防, 予知などを旨す

* どのレベルでも興味がありましたらご連絡ください, 歓迎いたします。

- 阪大OB, 素粒子/高エネルギー実験出身の他分野研究者として
- 機械学習の他分野での応用
- SACLA/SPring-8 など光源加速器での研究