

# 機械学習手法を用いた XFELの自動調整

11/26/2020, オンラインセミナー@京都大学

岩井 瑛人

高輝度光科学研究センター/理化学研究所



イントロ

# 研究来歴 と 本セミナーの要旨

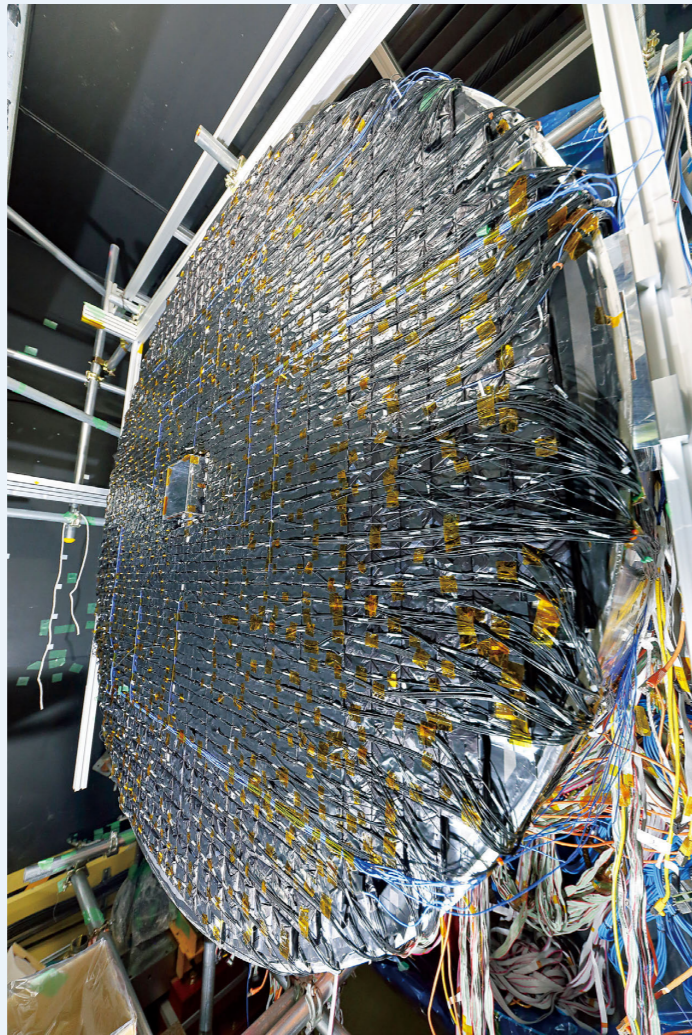
- ▶ 素粒子実験: 新しい物理の探索
  - K中間子の稀崩壊, J-PARC E14 KOTO実験
  - ステライルニュートリノ探索, J-PARC E56 JSNS2実験
- ▶ 加速器科学: 放射光加速器 (2018/10 ~)

## \* 本セミナーのトピック

- 素粒子実験屋が放射光加速器分野に移ってどうなった? 実体験に基づく“異分野転生”のススメ
- SACLA/SPring-8 での加速器研究から: 機械学習手法を用いた XFEL の自動調整

# 研究来歴 と 本セミナーの要旨

## 高エネルギーニュース HIGH ENERGY NEWS



Volume 39 Number 2

July/August/September 2020

54

### ■ 研究紹介

## 機械学習手法を用いた XFEL の自動調整・序

高エネルギー実験室が異分野転生したら…?

高輝度光科学研究センター 光源基盤部門

(兼) 理化学研究所 XFEL 開発研究部門

岩井 瑛人

iwai@spring8.or.jp

2020年8月5日

### 1 はじめに

本稿では、思いがけず高エネルギー実験から放射光加速器へと“異分野転生”した実験室が、その後どうなったかを、いくつかの研究トピックの中から、皆様に興味を持っていただけたような機械学習を用いた研究について触れながら紹介したいと思います。

特に若い研究者、ポスドクや学生の方々に向けて。本稿は他分野の研究紹介であり、直接関わりがないように見えるため、いまいち興味が湧かないかもしれないけれど、主題は別にあり、研究内容自体は二次なので、途中を飛ばしてでも、締めの下りに目を通して、今後の研究生活のヒントにいただければ幸いです。

係にある。本内容は主に後者の SACLA の研究について述べる。

### 2.1 SACLA 加速器

図1は入射部、3つのシケインとCバンド加速管などからなる SACLA の線形加速器の概要である。SACLA は数 keV から 20 keV 程度の XFEL を提供する。電子ビームを振り分け運転を行うことで、ビーム条件を個別に変えられる XFEL ビームライン: BL2, BL3 を同時稼働し、さらに 2020 年 2 月からは SPring-8 蓄積リングへの入射も同時に行う。SACLA のプロトタイプ加速器を移設、改修、アップグレードを行った Soft-XFEL 用のビームライン、SCSS+ (BL1) が併設されている。

### 2 SACLA/SPring-8

SACLA[1, 2]/SPring-8[3, 4] は、兵庫県の播磨科学公園都市にある大型放射光施設である。

SPring-8 は、8 GeV の電子ビームを用いて主に X 線領域の放射光を発生させる実験施設であり、1997 年 10 月に供用運転を開始した。SPring-8 の加速器は、1 GeV まで電子を加速する線形加速器、8 GeV まで加速するシンクロトロン、電子を蓄積して放射光を発生させる蓄積リングからなる。

SACLA は SPring-8 の隣に建設された X 線自由電子レーザー (XFEL; X-ray Free Electron Laser) 施設であり、2012 年 3 月に供用運転を開始した。SACLA は超低エミッタンスな 8 GeV 電子ビームを生成する 400 m の線形加速器と、電子ビームから X 線レーザーを発生させる挿入光源と実験施設部 (300 m) からなる。連続的に強い X 線を発生する SPring-8 と、10 fs (フェムト秒) の超短パルス X 線レーザーを発生する SACLA は相補関

### 2.2 XFEL

X 線領域では、可視光領域のような単純で高い効率のミラーが存在しないため、Self-Amplified Spontaneous Emission (自己増幅自発放射; SASE) を用いてレーザー発振を行う。XFEL, SASE の発生原理の詳細は OHO'13 のテキスト [5] を参照ください。定性的に説明をすると、電子ビームから欲しい波長相当のマイクロバンチの列が形成され、このマイクロバンチからのコヒーレントな放射と電子ビームが相互作用することで、正帰還的に発振・増幅が進む過程である。その増幅ゲインは電流の 1/3 乗、エミッタンスの  $-1/3$  乗に比例する。出力が飽和する、ゲイン長の 20-25 倍を現実的な大きさ (~50 m) に収めようとするすると、(運動量) 規格化エミッタンスを  $1\pi$  mm mrad、ピーク電流を 10 kA 程度にする必要がある。

SACLA では、約 1 ns 幅、1 A で切り出した電子ビームについて、速度の違い入射部近傍では速度差を用いた



# 研究来歴 と 本セミナーの要旨

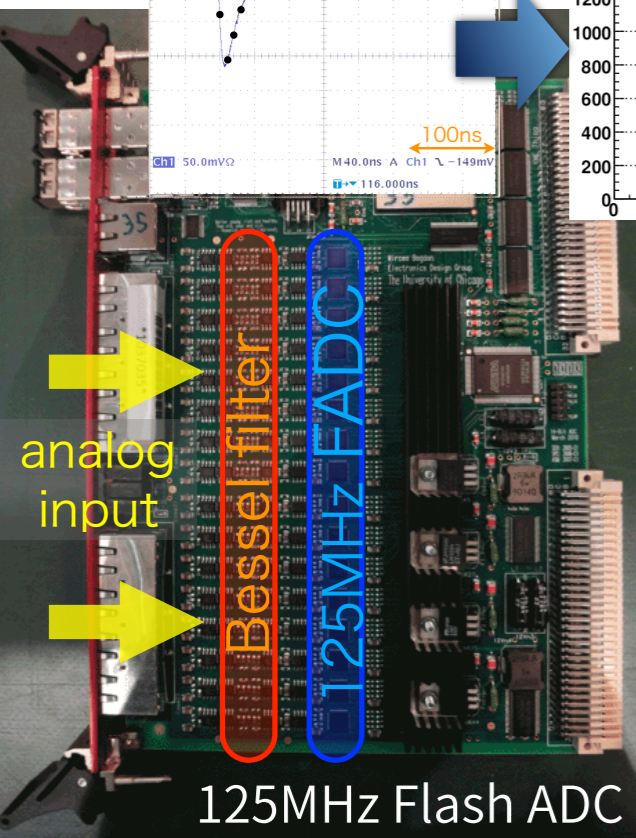
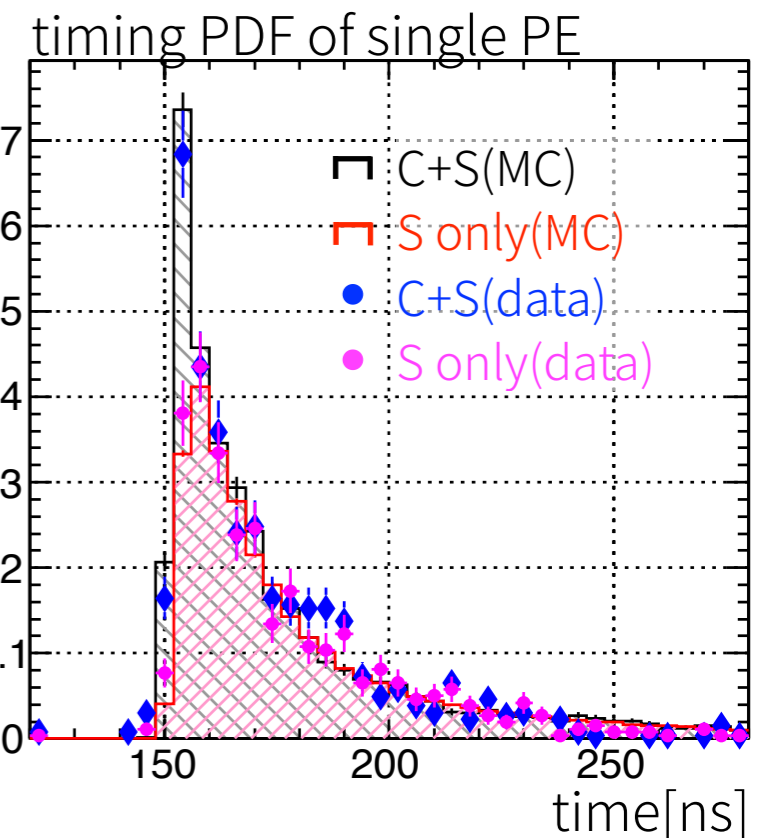
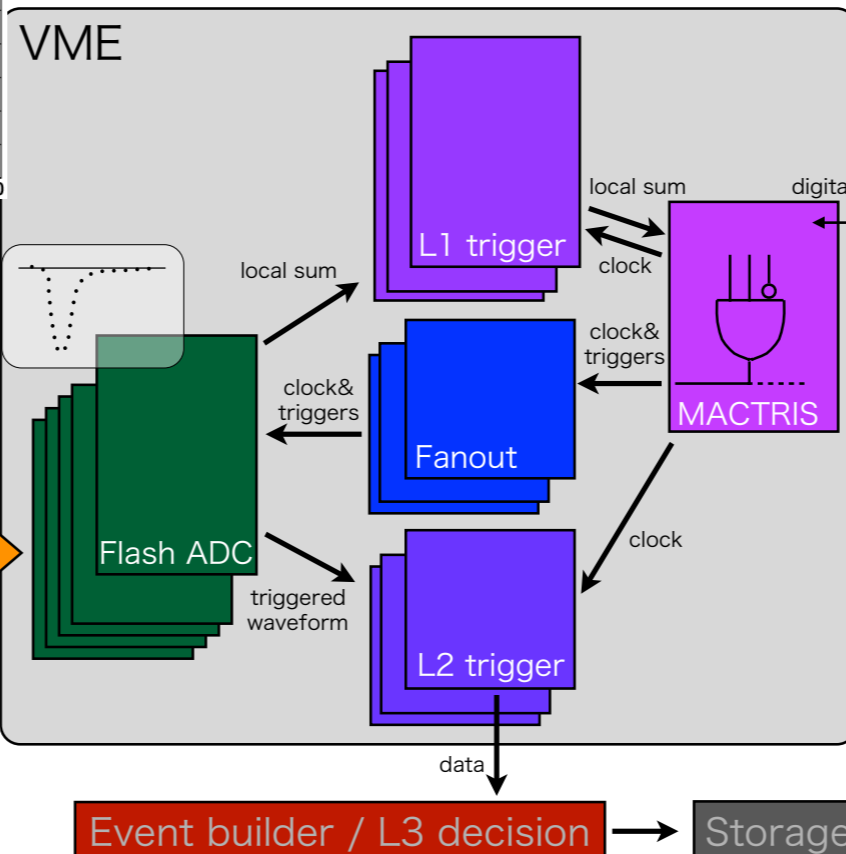
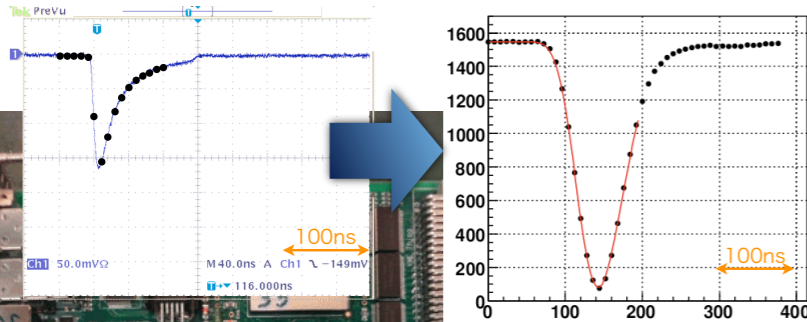
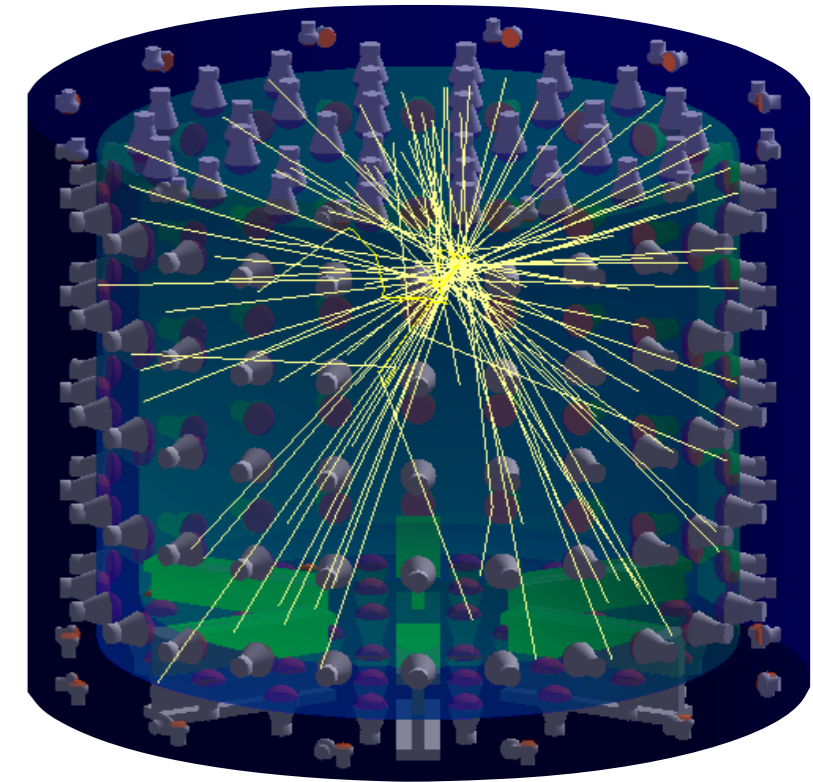
- ▶ 素粒子実験: 新しい物理の探索
  - K中間子の稀崩壊, J-PARC E14 KOTO実験
  - ステライルニュートリノ探索, J-PARC E56 JSNS2実験
- ▶ 加速器科学: 放射光加速器 (2018/10 ~)

## \* 本セミナーのトピック

- 素粒子実験屋が放射光加速器分野に移ってどうなった? 実体験に基づく“異分野転生”のススメ
- SACLA/SPring-8 での加速器研究から: 機械学習手法を用いた XFEL の自動調整

# 素粒子実験時代の研究内容

- 実験デザイン, 設計
- カロリメータ
- トリガー, データ取得システム

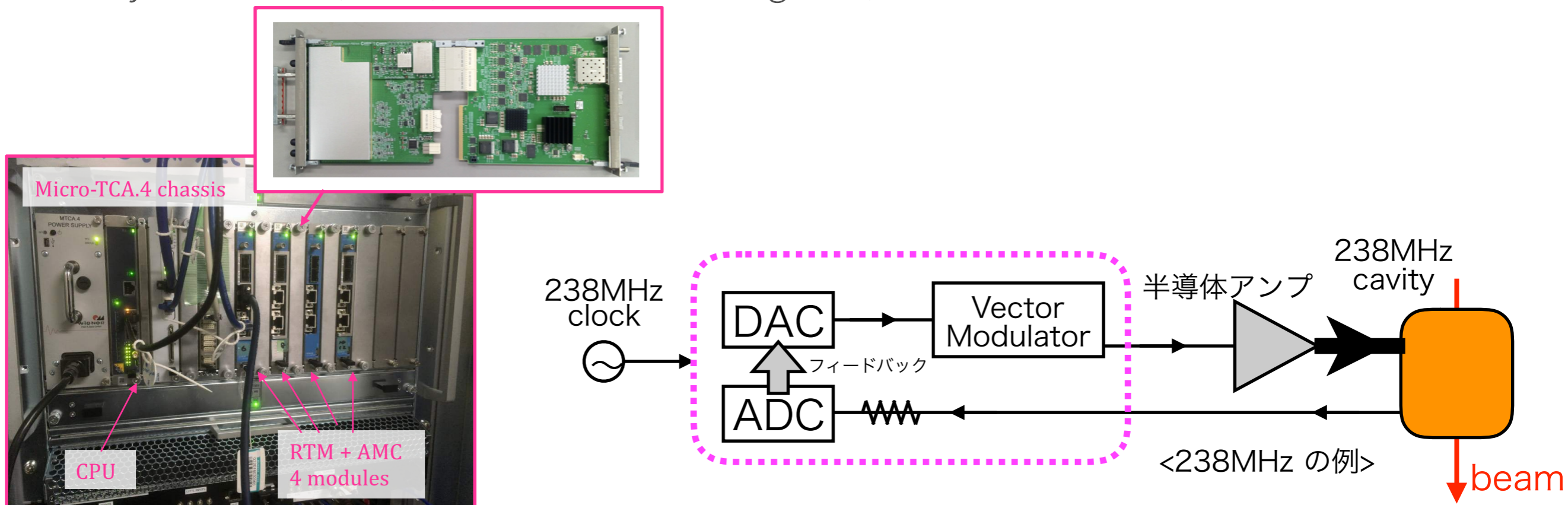


125MHz Flash ADC

# 放射光加速器転向後

- 超高精度タイミング, RF制御 (Low-Level RF)
    - SACLA: 全長700m
    - 高周波加速はタイミングが重要  
→ 加速, ビームの圧縮具合が変わる
    - 最終出力は ~10kA, ~10fs
    - 信号金属線, 光ファイバ, 送受信器, 制御機器の温湿度, 光路長変化等によるズレ
- ➡ 個々に 超高精度でモニター, 制御

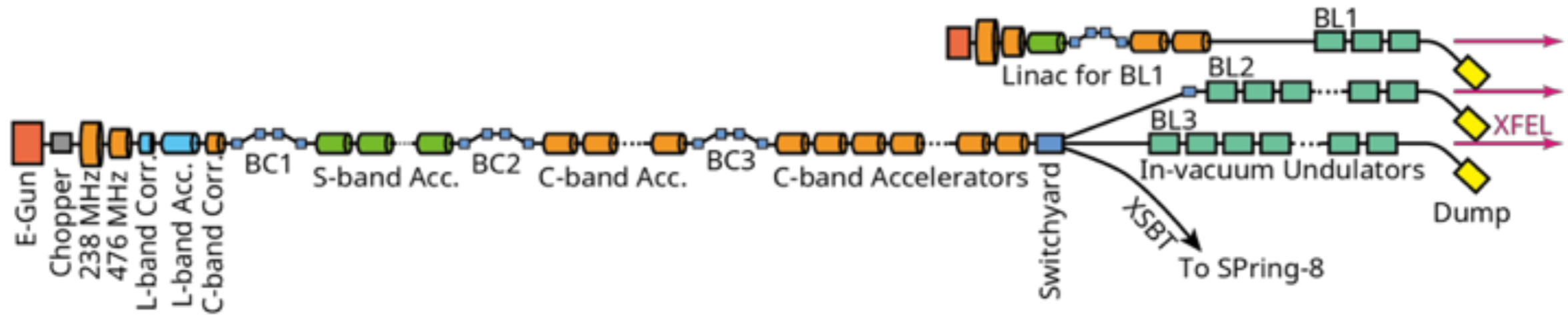
▶ Keyword: clock, 同期, FPGA, Waveform-digitizer, フィードバック …



**XFEL調整の研究へ…**



# XFEL/SACLA



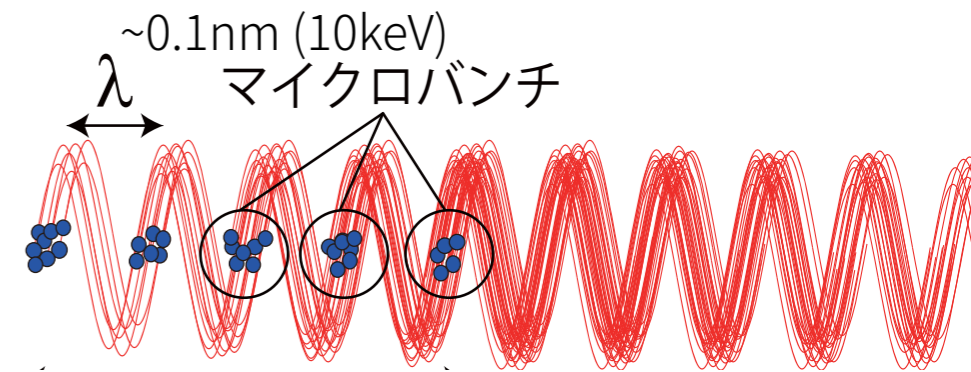
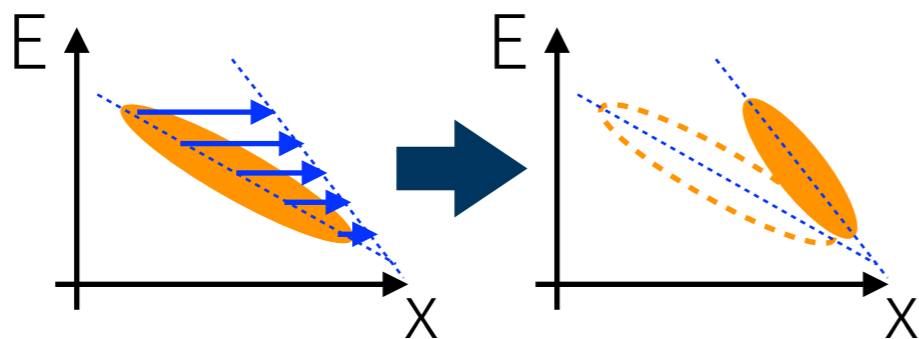
◎ XFEL: X-ray Free Electron Laser

- X線には反射率の高い実用的なミラーが無い

➔ SASE(Self-Amplified Spontaneous Emission; 自己増幅自発放射) 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

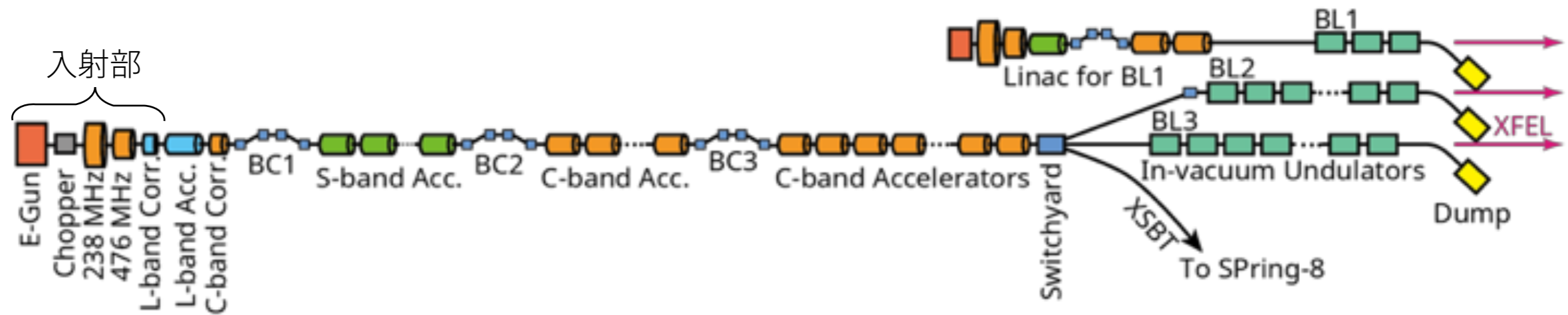
- 自発放射 → エネルギー変調 → 密度変調 の正帰還  
 ↙ コヒーレント放射 ↘



▶ (ローカルな) 電子数密度 ~  $\frac{6 \text{次元位相空間上の輝度}}{\text{}} \text{で決まる}$   
 $\rightarrow (x_i, x_i') \sim (x_i, p_i) [i : x, y, z]$

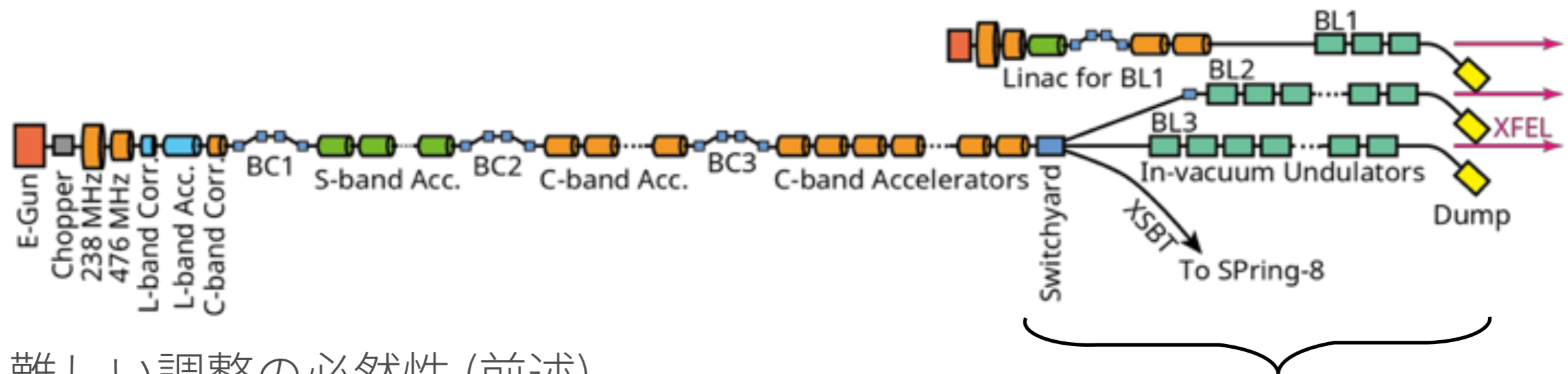


# XFEL/SACLA



- ▶ 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
    - x-y プロファイル: 4次元方向がシュリンクしたものの一部
    - 時間方向の分布: 5次元方向にシュリンクしたものの一部
  - 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
    - 速度圧縮: エネルギーと速度 $\beta$ が非線形
- ◎ “シュリンク”した平均値を用いても, どうし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

# XFEL/SACLA (→ motivation)



- ▶ 難しい調整の必然性 (前述)
- ▶ 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 (BL) 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
    - 今年から 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 …)
  - 東北に建設中の新しい 3GeV 放射光施設

# “独自”の研究へ…

## ▶ “独自性”: ビーム評価, 解析の “統計的アプローチ”

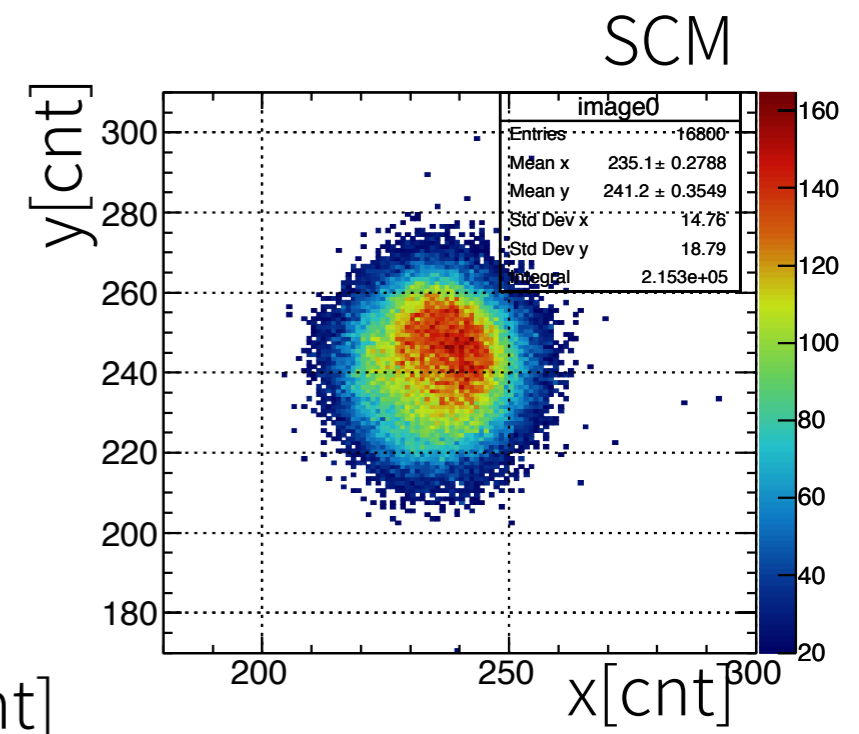
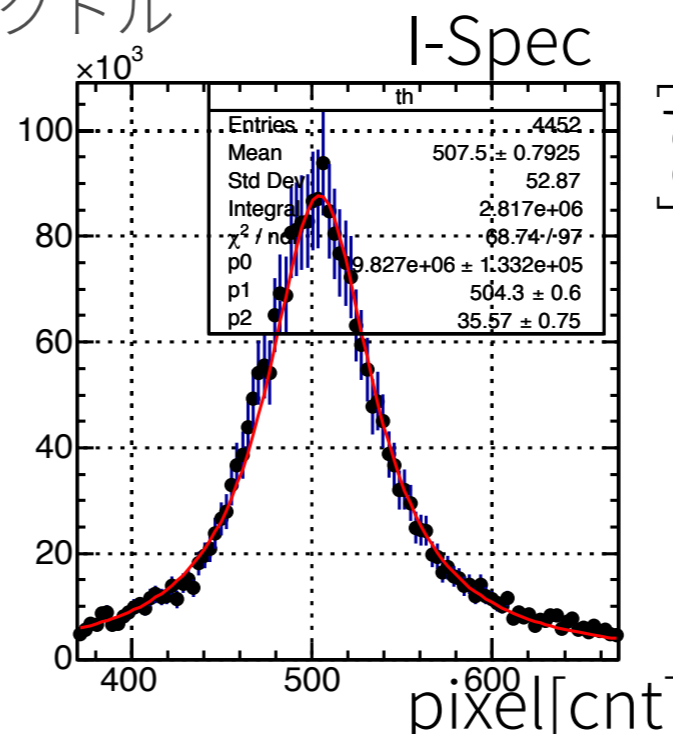
- 高エネルギー, 素粒子実験では日常的に多用される手法
- 加速器: 主にパラメータ, 機器応答の平均値や時間変動をモニター, 解析
  - × 多パラメータ間の相関の系統的解析
  - × ショット毎のパラメータの統計的解析
  - × 平均のみ参照、ふらつき, 再現性, 幅 に対する評価が希薄
- これまでのXFELの調整: 基本的に指標は積分強度のみ
  - エネルギースペクトル, 空間プロファイルは参考程度の補助的情報
  - 30Hz のビームに対して 1Hz, 1shot の絵のみ

## ▶ BL/実験系の常設測定器のデータ

- **I**nline **S**pectrometer: エネルギースペクトル

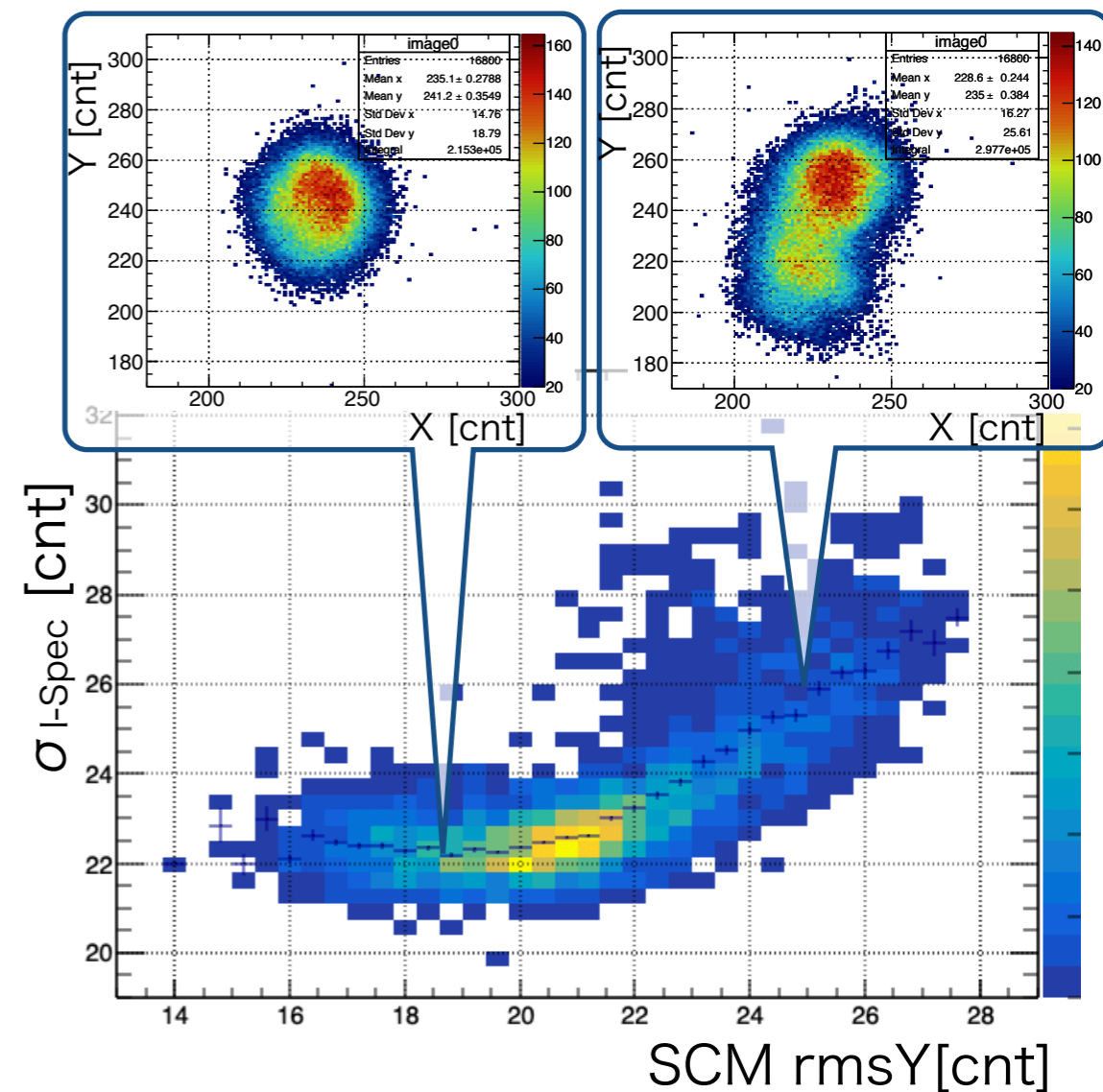
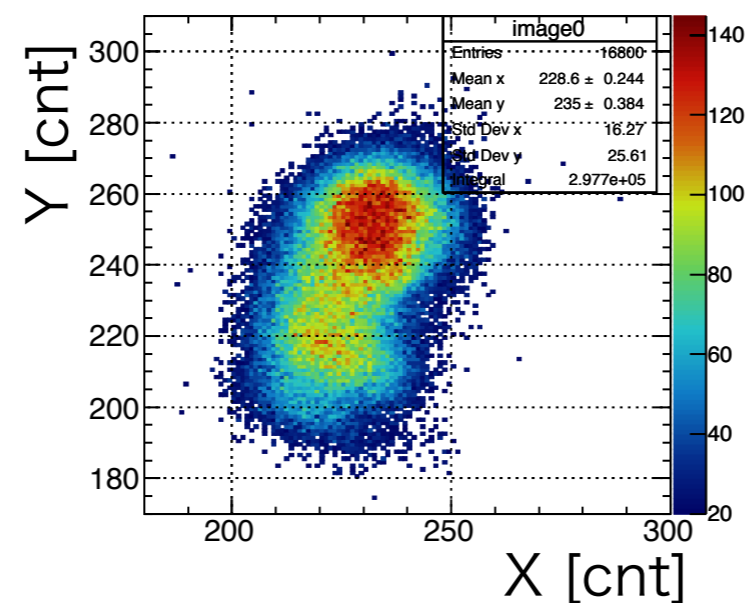
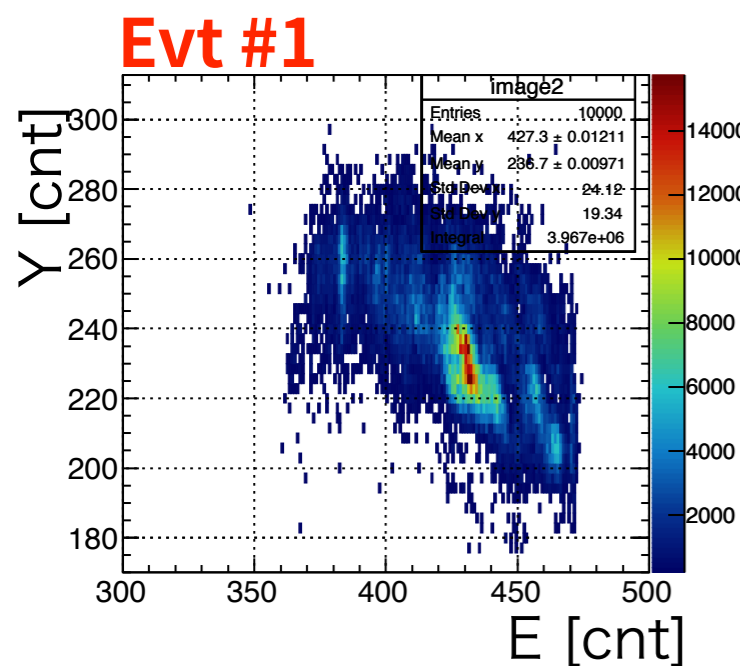
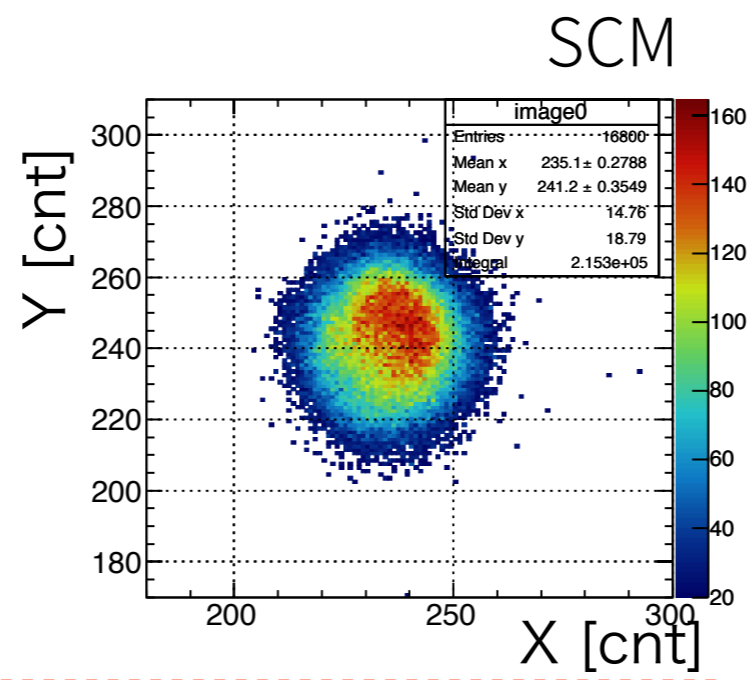
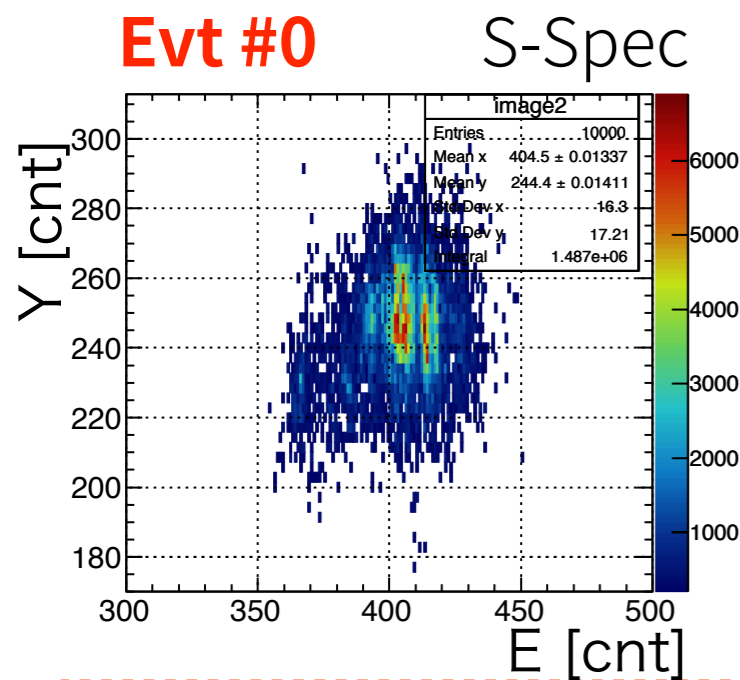
- **S**Creen **M**onitor: 空間プロファイル

- ...



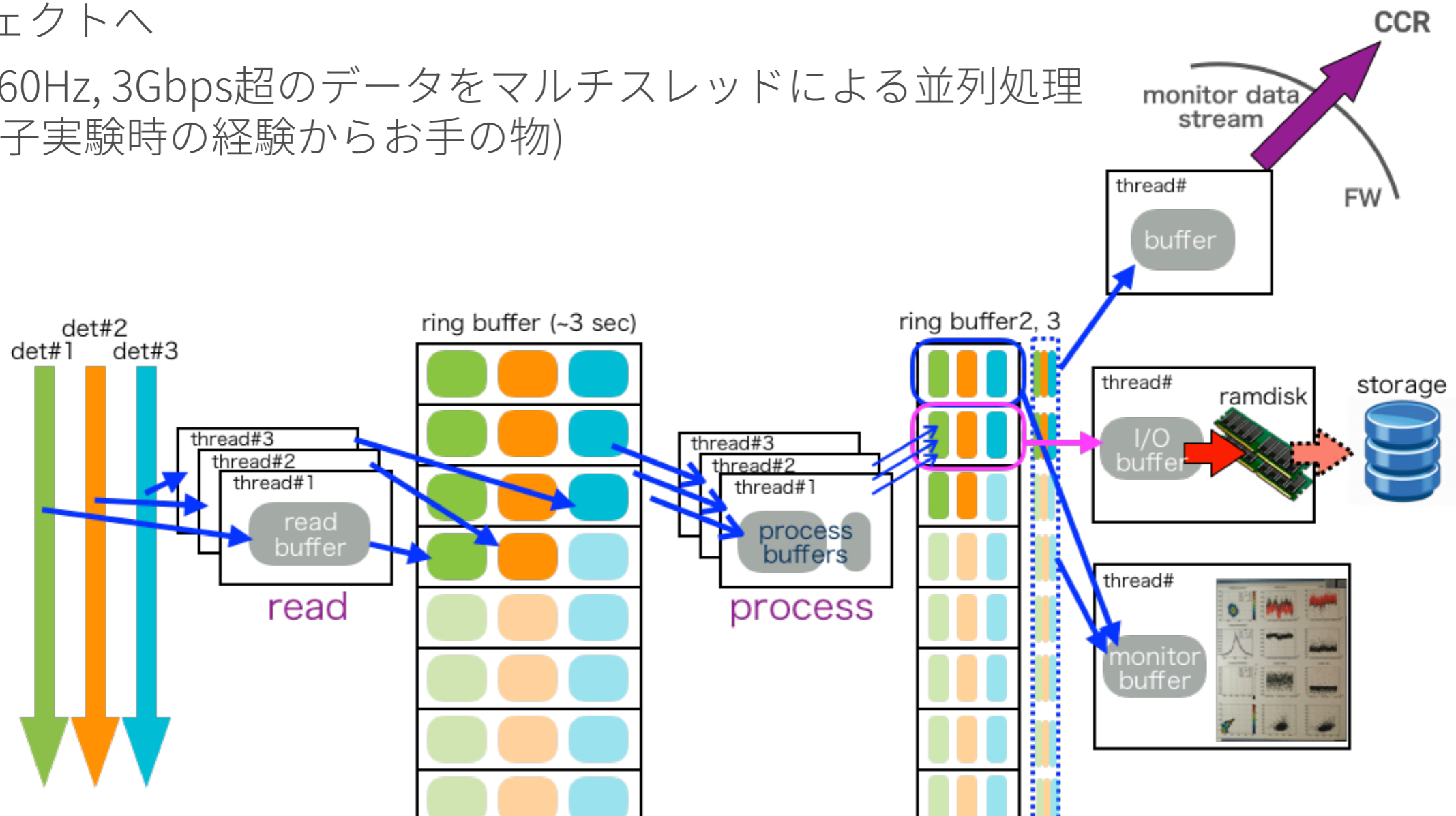
# XFEL性能の指標化

- 常設されていない **Single Spectrometer** と比較 (オフライン)  
➔ 常設されている I-Spec, SCM から同様の症状を診断可能



# XFEL性能の指標化

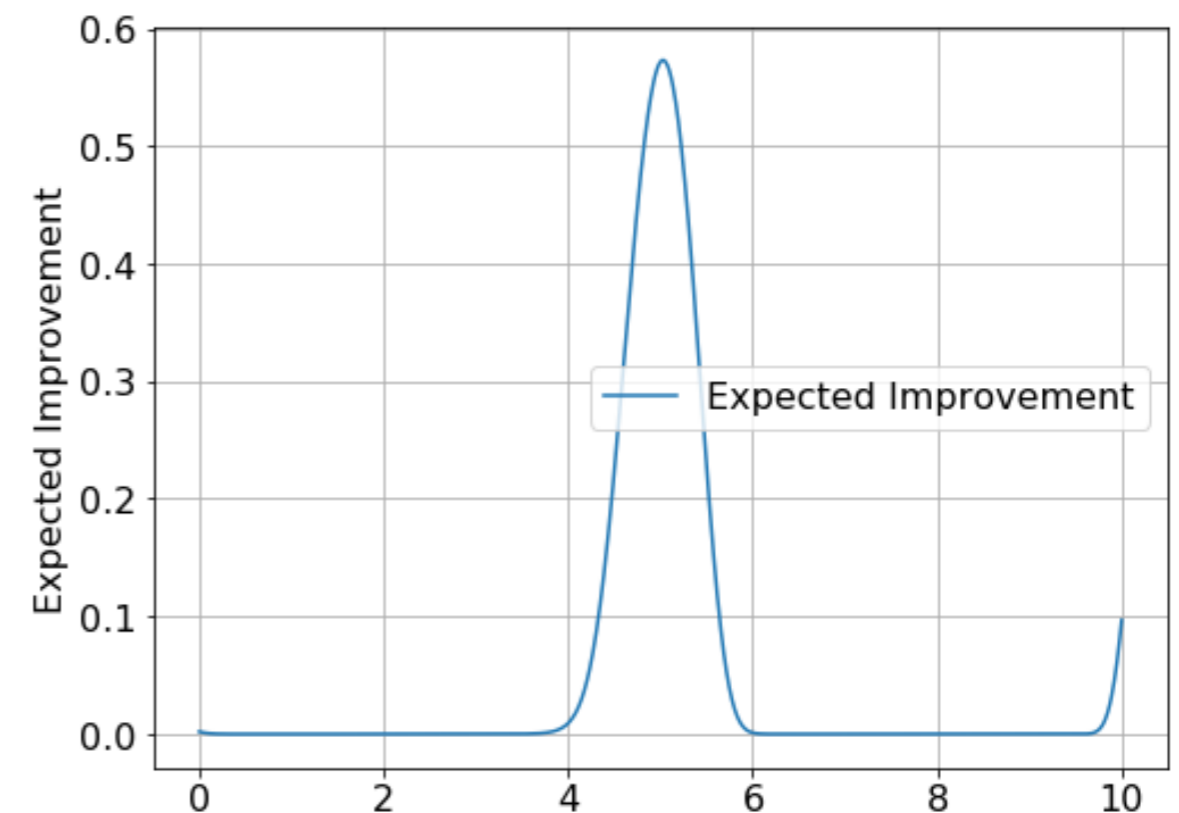
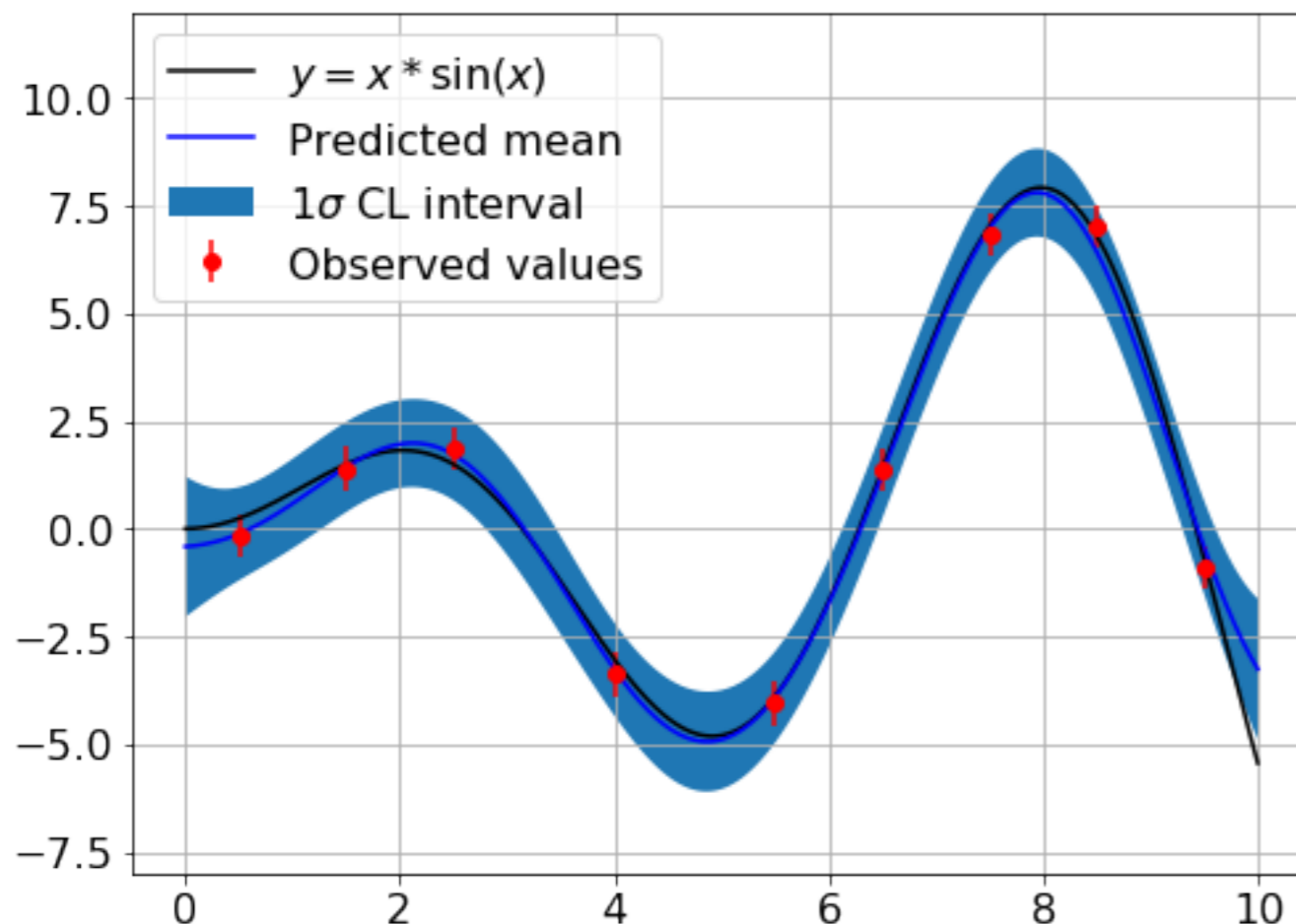
- ▶ BL/実験系の常設測定器の生データへのアクセス
  - 加速器施設は多数の構成要素からなる巨大な複合体
  - 加速器制御系と, ユーザーがアクセスしうるBL/実験系ネットワークを切り離すべきというセキュリティ理由
  - 加速器系, BL/実験系という部門間の障壁
- ➡ 加速器の素人 = “専門”(色) が無い立場として、各部の研究者, 専門家を横断的に跨ぐプロジェクトへ
- ▶ 最大60Hz, 3Gbps超のデータをマルチスレッドによる並列処理 (素粒子実験時の経験からお手の物)





# 機械学習を用いた自動調整の研究へ

- 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 のテスト(1)

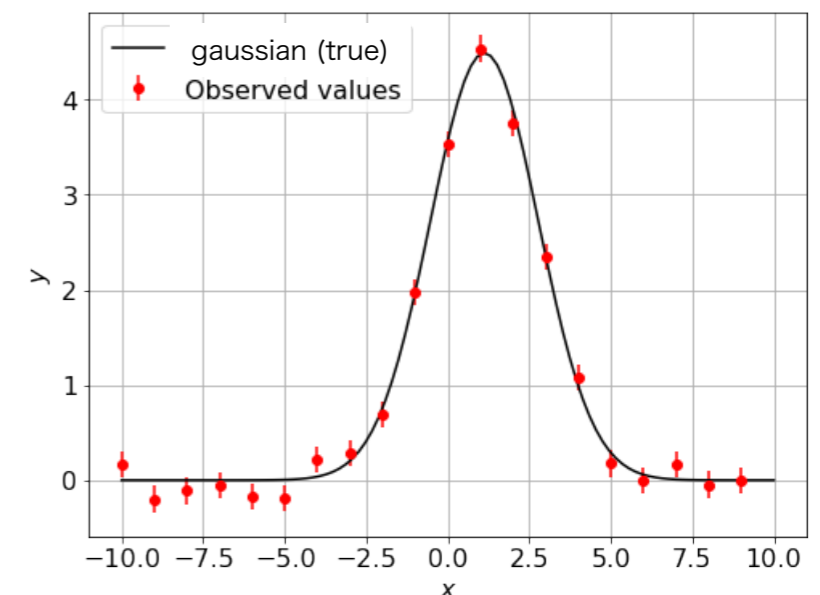
- 最適化シーケンス

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

- loop
- 3.1. 与えられたパラメータ空間内で最大の EI を与えるパラメータの決定
  - 3.2. 最大 EI のパラメータを適用
  - 3.3. 当該条件でのサンプルデータを追加して, GPモデルをアップデート

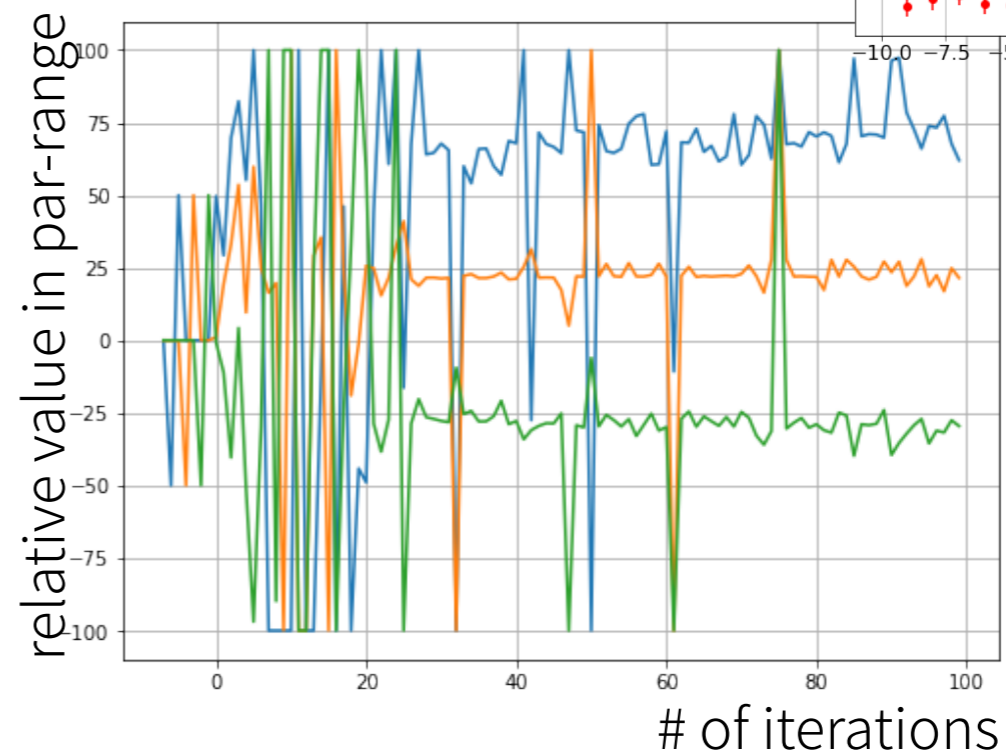
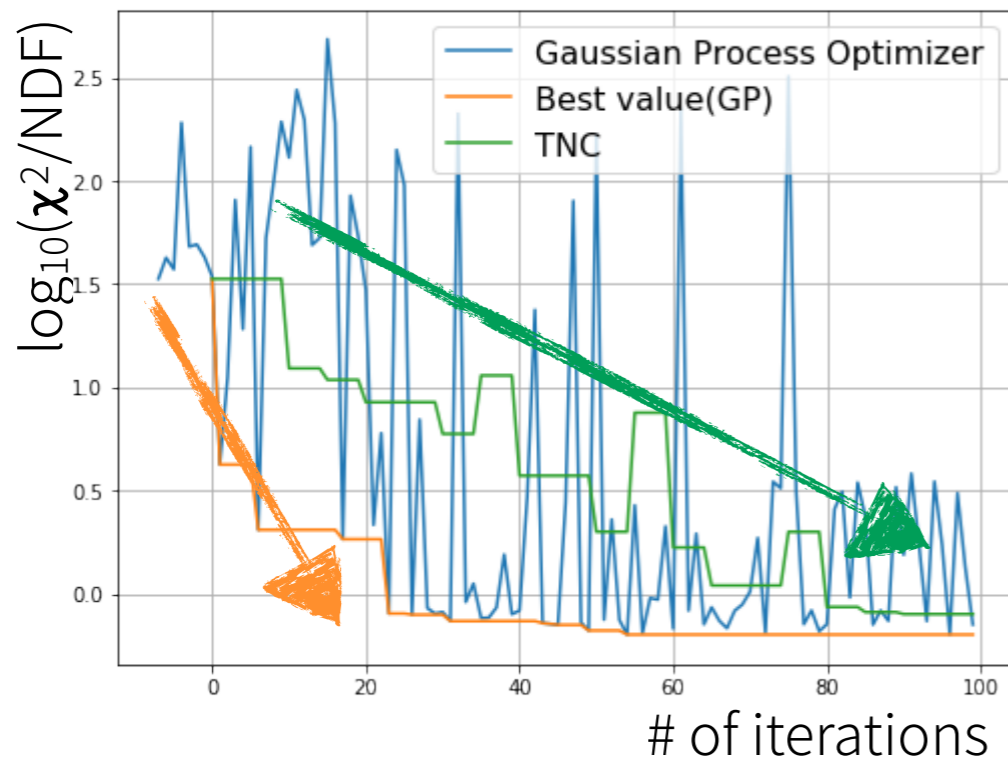
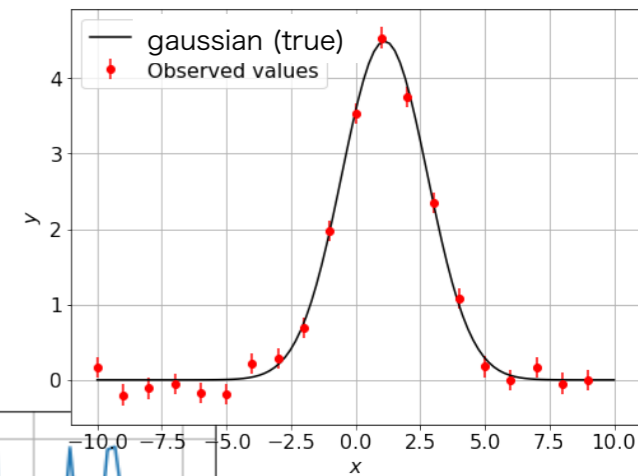
- この GPR-Optimizer を用いて誤差付きデータについてガウスフィットを行う

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



# GPR Optimizer のテスト(1)

- データのガウスフィットを GPR Optimizer を用いて行う



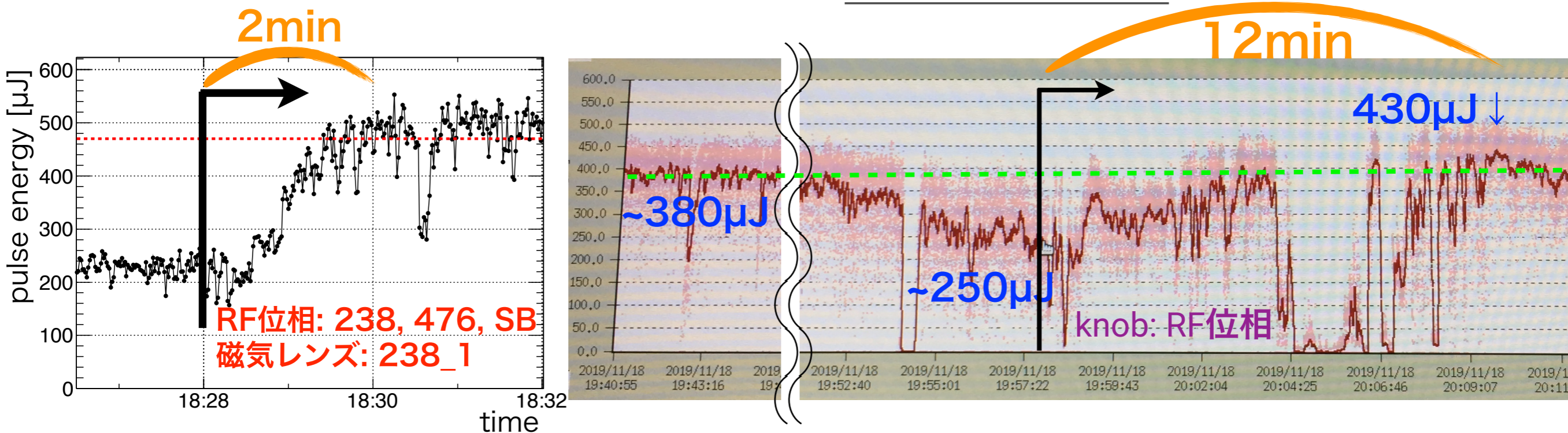
- 既存/古典的な方法 (TNC; Truncated Neuton) と同等のフィット結果
  - 少ない”試行回数”で収束 (※加速器調整なら調整時間に相当)
  - ‘best’ な値に収束後にも大きなパラメータの”飛び”: GPRの特徴の一つ (local min/max にハマりにくいメリットの反面)

# GPR Optimizer のテスト(2)

- 実際にビームを用いたテスト

- まずは XFEL出力強度を最大化(通常行われている調整と同様)

- 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



- ▶ パラメータ数 ~ 調整”ノブ” の数を徐々に増やす(RF位相, Q/ML/ST磁石電流…)

- ▶ 課題: 計算資源リミットによるパラメータ数の上限 → **solved**

- ✓ effective coding, smart algorithm

- ✓ dedicated powerful machine (cores, memory)

- ✓ another library: scikit-learn → BoTorch/GPyTorch



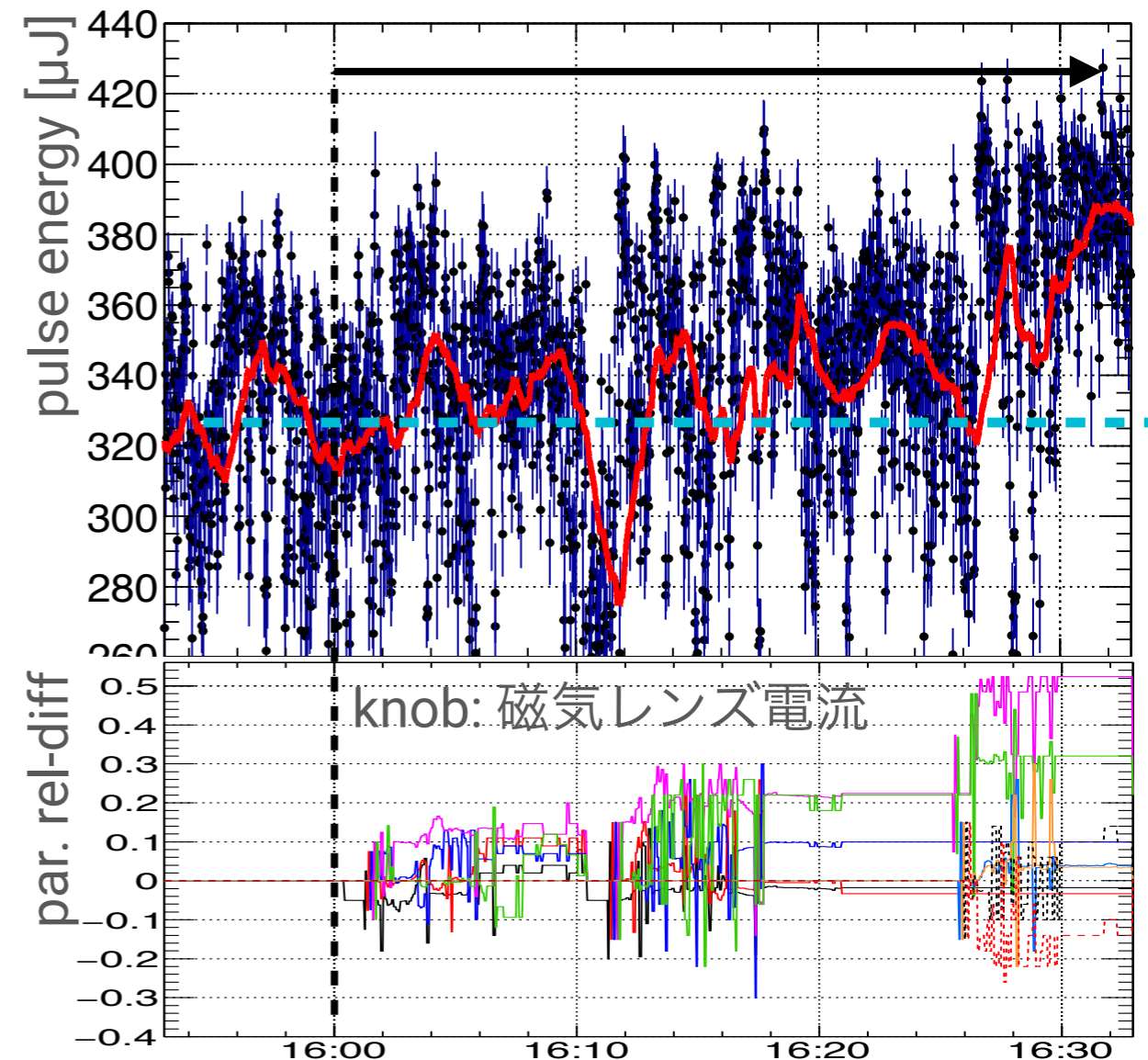
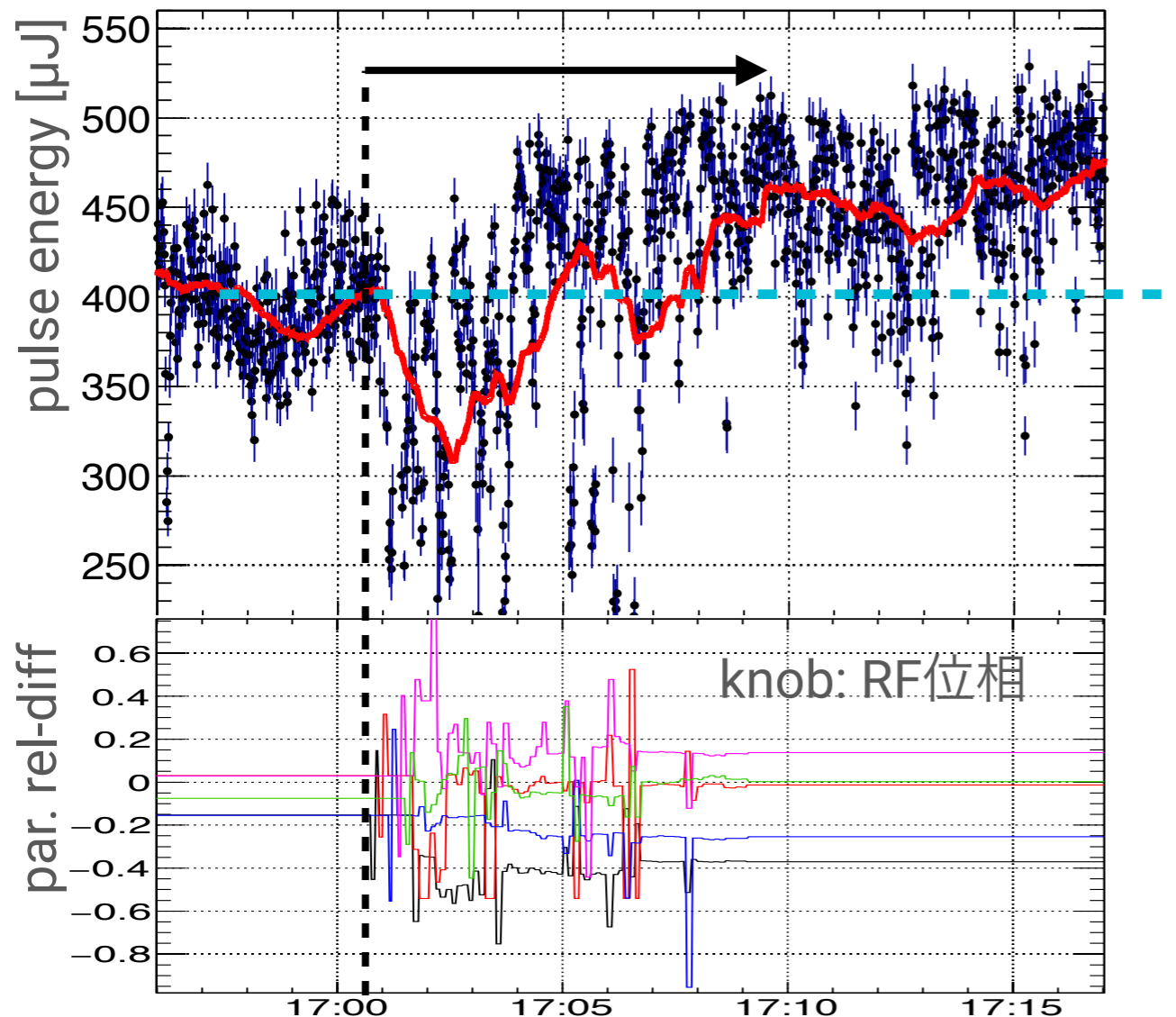
# 通常調整後の自動調整による最適化

▶ 答えを知らない, 未知の“山頂”を見つけられるか？

✓ **左**: RF位相の調整

✓ **右**: 入射部の磁気レンズの調整(2 BL共通部)

— running avg (30sec)





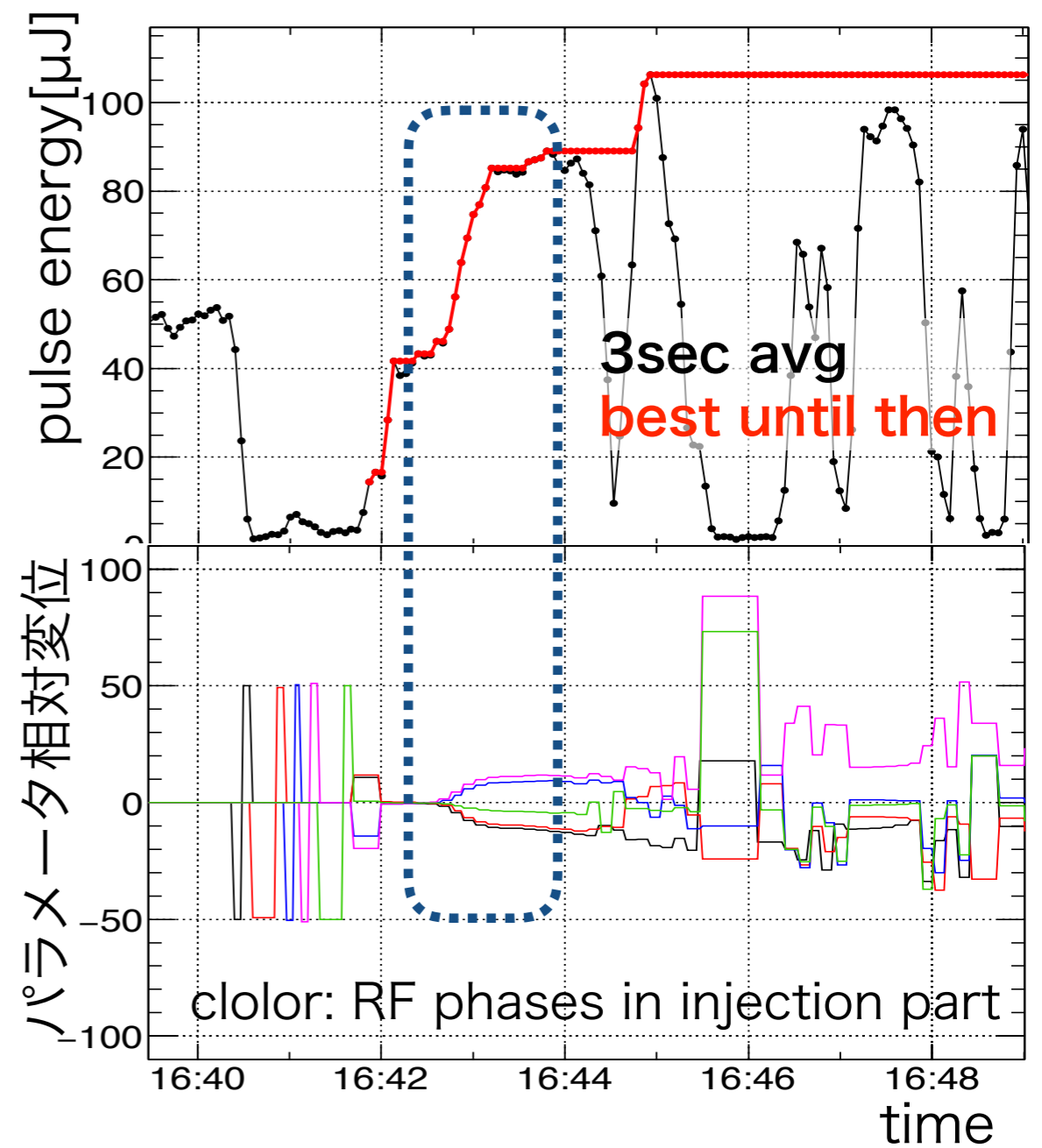
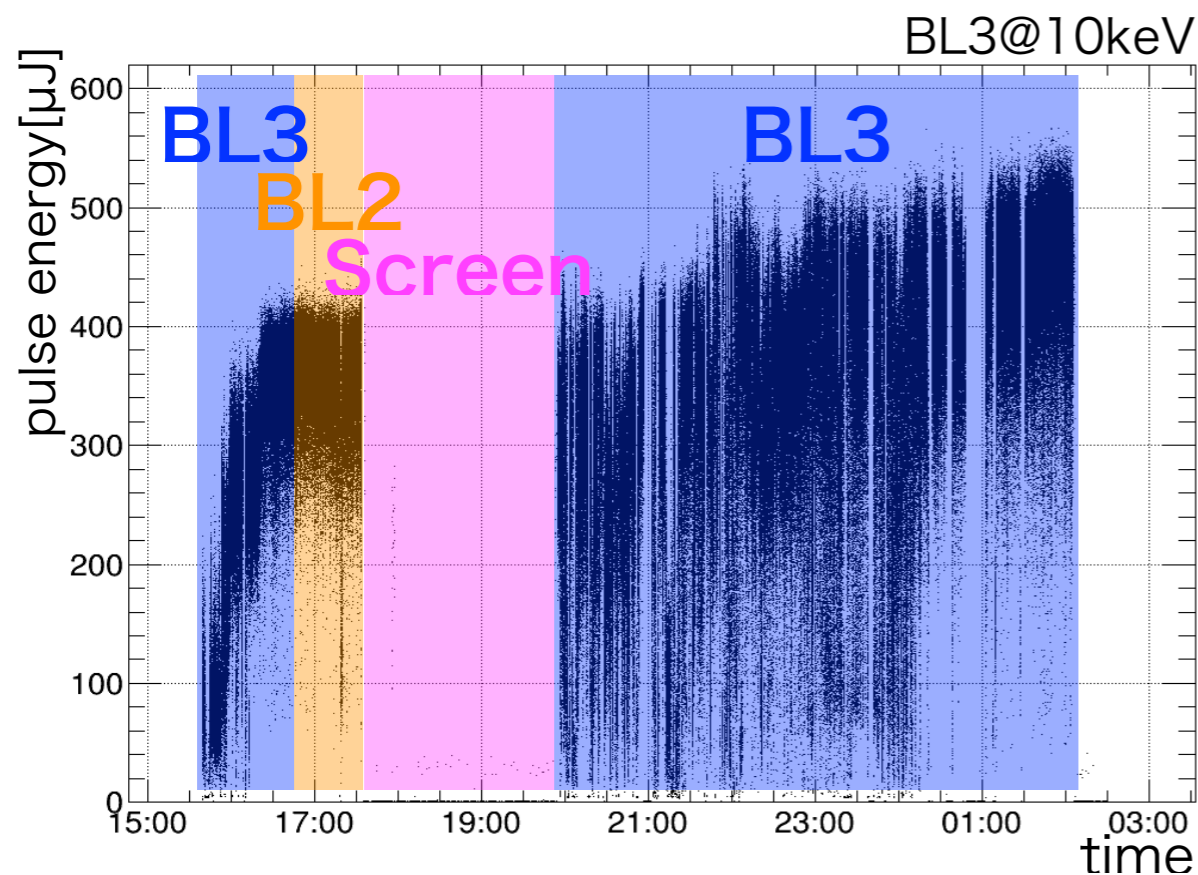
# SACLA立ち上げ時の調整

▶ **Left:** BL3 10keV: 50 → 550 $\mu$ J

- 調整ノブ: RF位相, ML/Q 電流(2-BL共通部, 独立部)

▶ **Right:** 電子銃(最上流)のカソード交換後の quick recovery

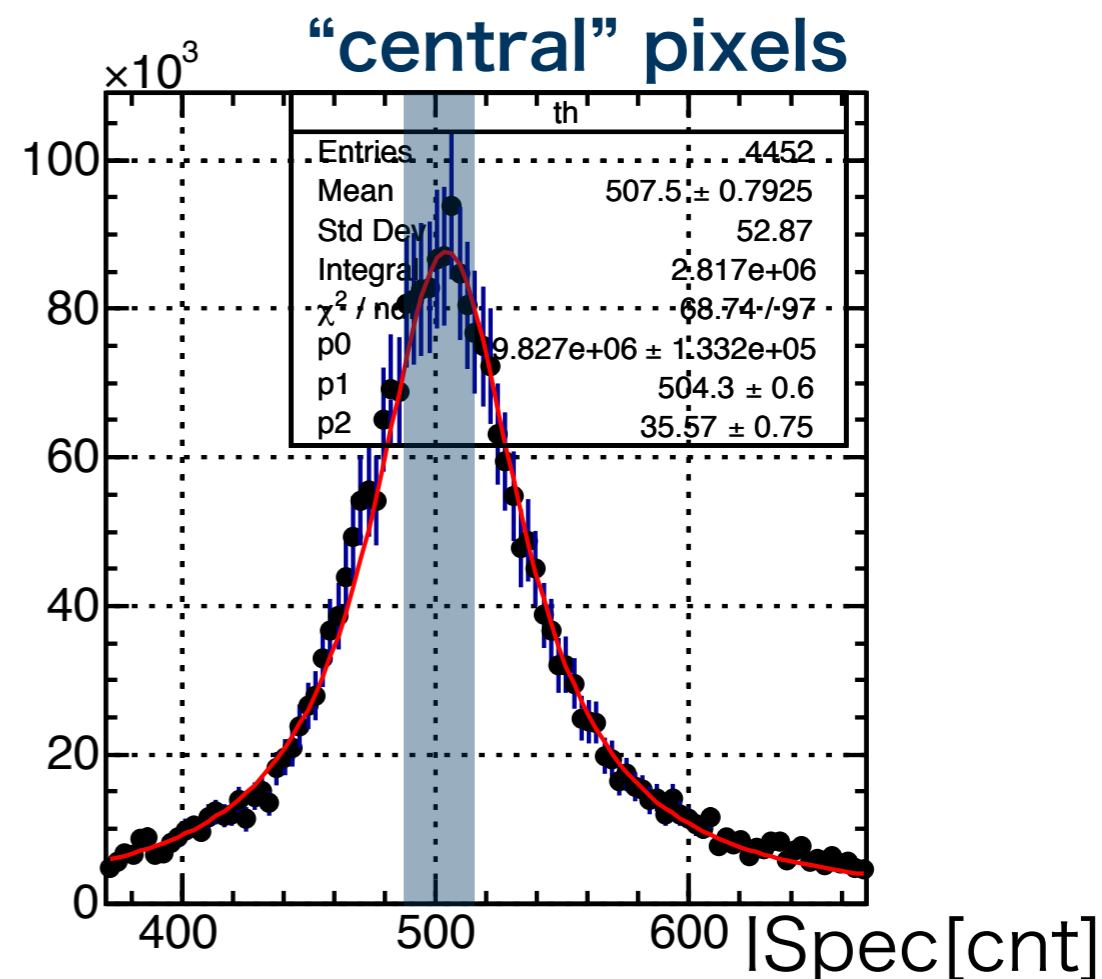
- ML-like な振る舞いを観測



# スペクトル幅を考慮した調整

- Inline-Spectrometer(I-Spec) のデータを指標として用いる
- ➡ Cauchy(Breit-Wigner) でフィットした結果と比較して, “中心ピクセル数” 定義の最適化
  - ▶ ピクセル数増加: スペクトル幅に対する感度が低下
  - ▶ ピクセル数減少: 統計, binning, pixel幅 などによる不定性が増加

※ I-Spec は常設測定器だが、無視できない分解能と intrinsic な幅 (~30eV@10keV) がある

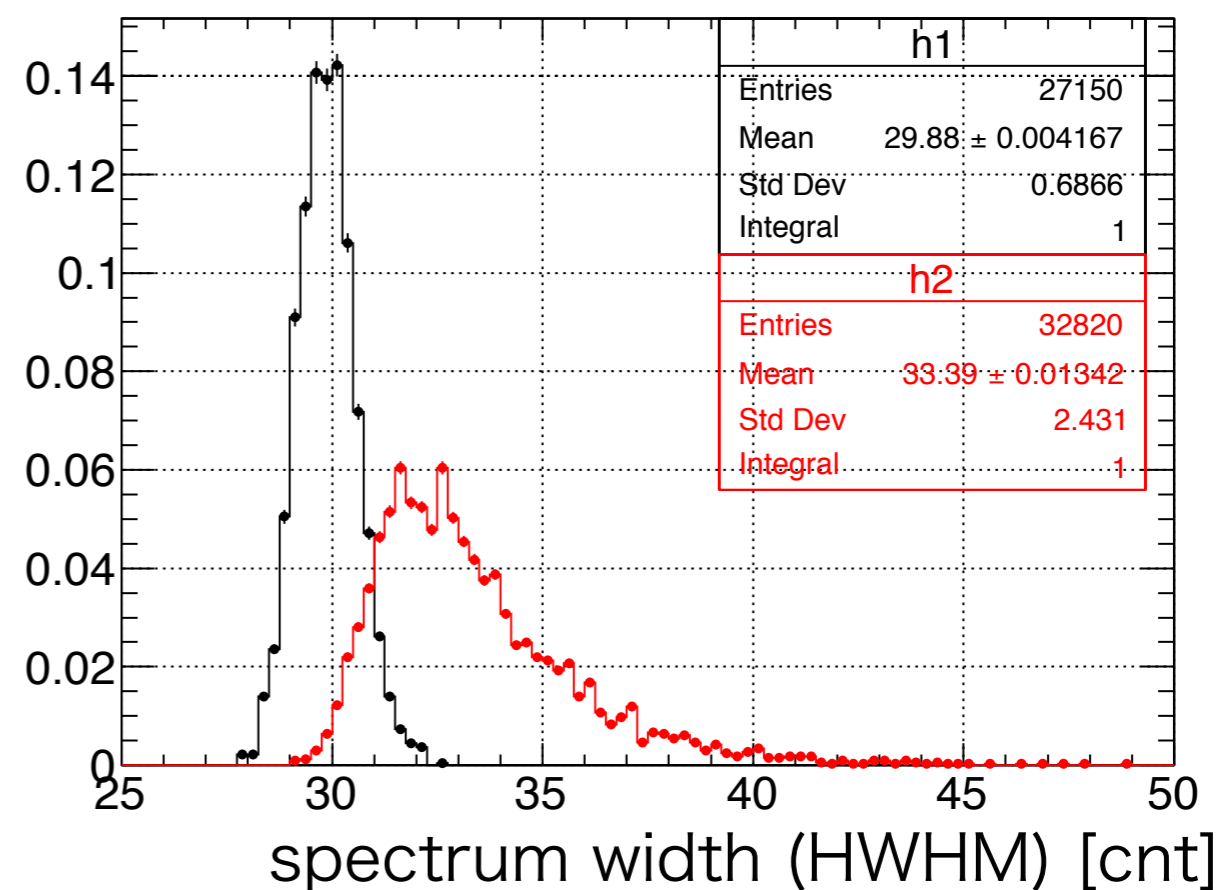
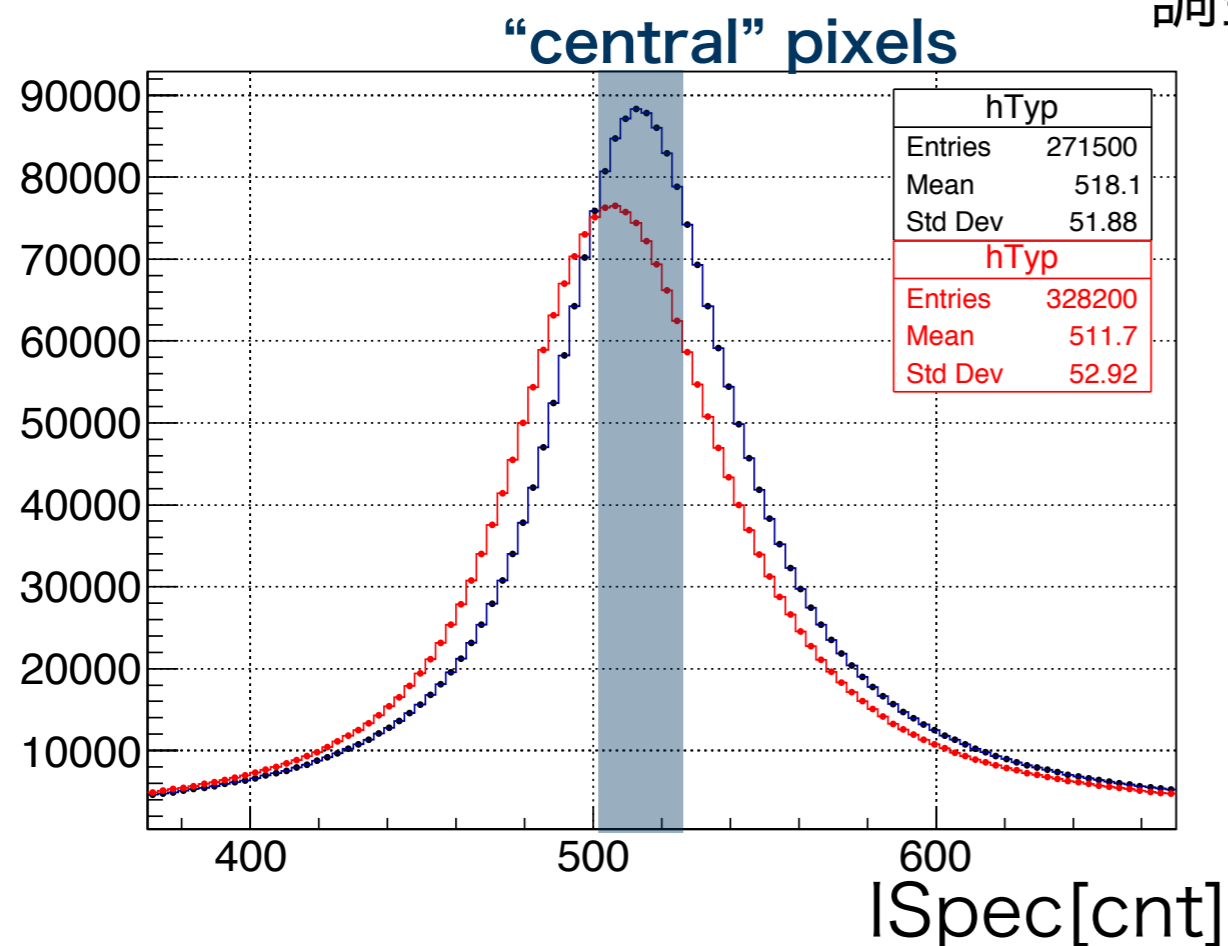


# 自動調整後のスペクトル幅

- **Left:** I-Spec のデータの単純平均  
(ピーク波長のパルス毎のフラつきは考慮していない)
- **Right:** Cauchy でフィットした時のスペクトル幅

調整前

調整後



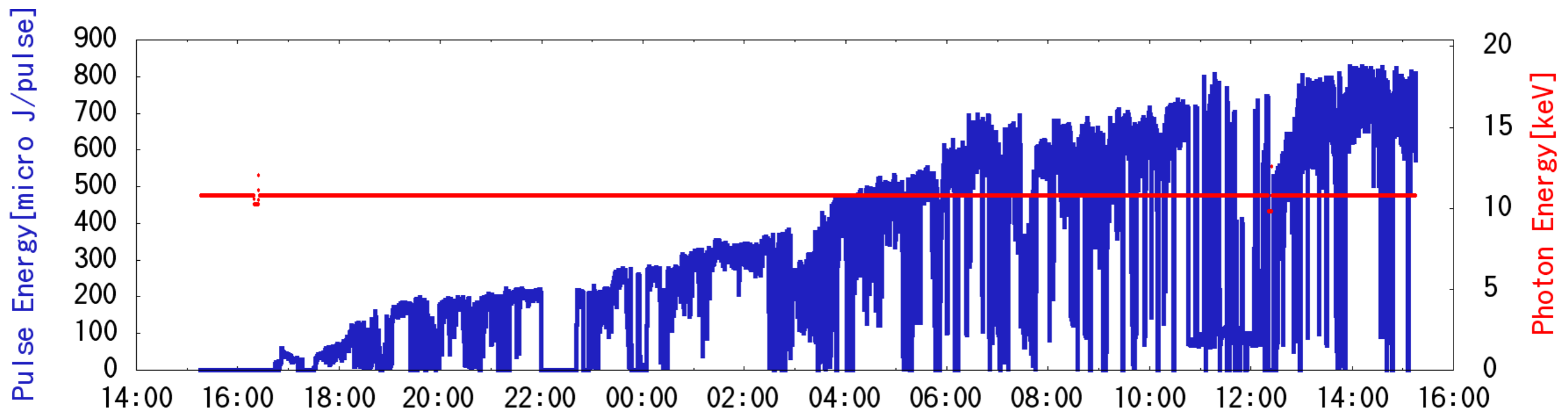
# ML-GUI

18:17 FELを確認(BL2:300uJ BL3:350uJ)

18:17以降、Machine Learningソフトでの調整を朝まで実施する。  
BL2/3 10keV

## ▶ CUIベース → GUI

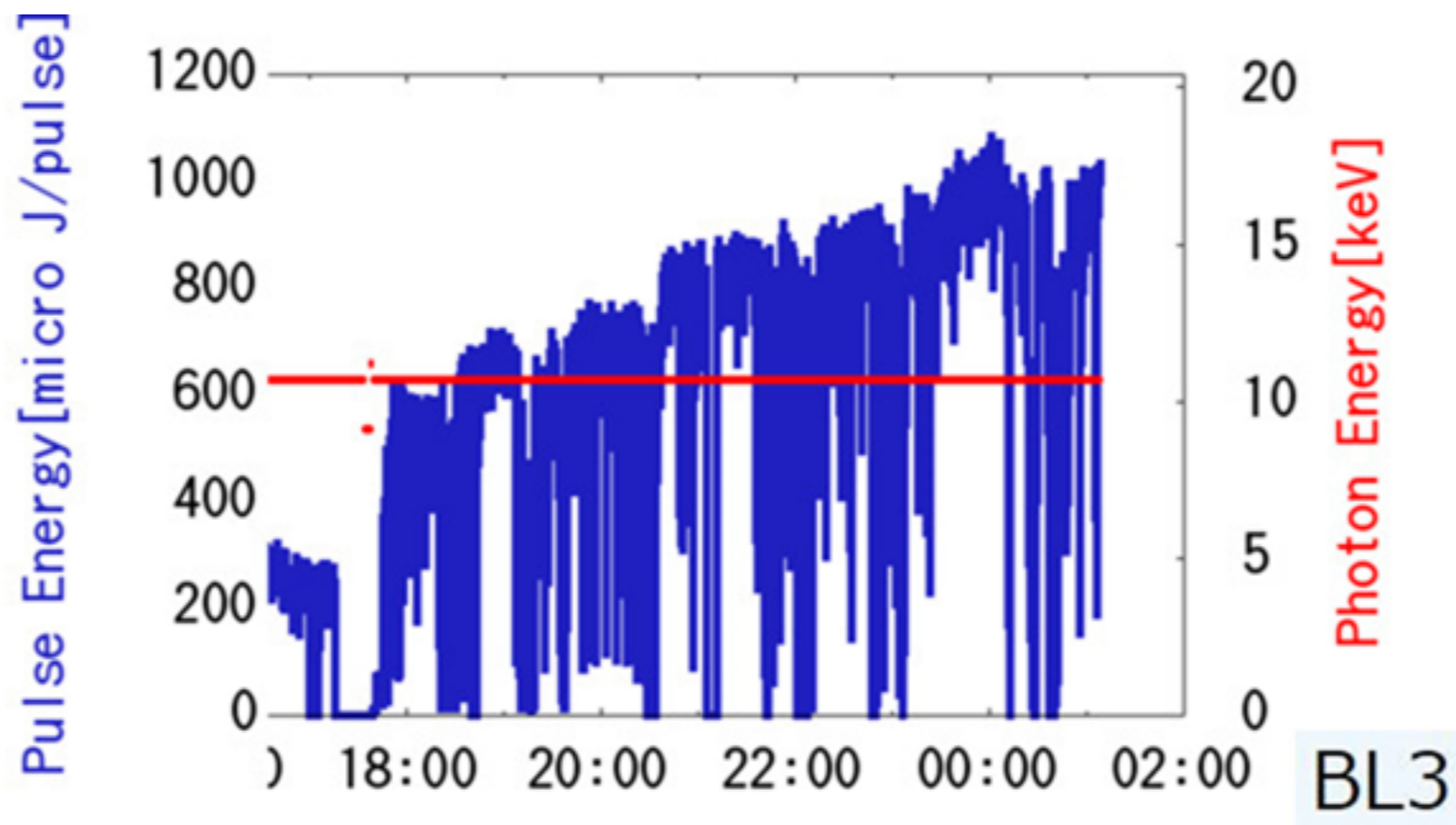
- ML-GUI は 既実戦投入されている
- 私が立ち会わなくても、問題なく利用可能
- 経験の浅い運転員から、熟練の運転員まで広く日常的に調整に利用されている



- さらに多様な用途, 高度な機器操作, 高度な目的関数を必要とする調整を運転員ベースで開発できるような枠組みを開発中

# そして…

- 未踏の 1mJ@10keV を達成！ (11/15)





**今後: 水平展開と垂直展開**

# Optimizer の実装

- Object志向, 階層型の実装 → 共同開発や将来的な改良を視野
  - “ML core” 層は DQN などのさらに先進的なコアに置き換えられるように
  - 他の用途にも応用できるように、施設/用途毎の差分は基幹/コア部から分離

gpoptimizer  
(w/ plots or GUI)

## “Application”

SACLA, SPring-8,  
XFEL, profile, efficiency,  
loss ... etc.

e.g.) Tune Injector, ID gaps etc.  
for different BLs

SaclaOptimizerInterface

OptimizerInterfaceBase

## “I/O”

another acc. lab,  
another experiment,  
another analysis ...

e.g.) The “Fitting test” was  
performed with the base-class

SaclaGPRegressor

(MLcore)

## “ML core”

Gaussian Process  
Deep Q-Network  
...

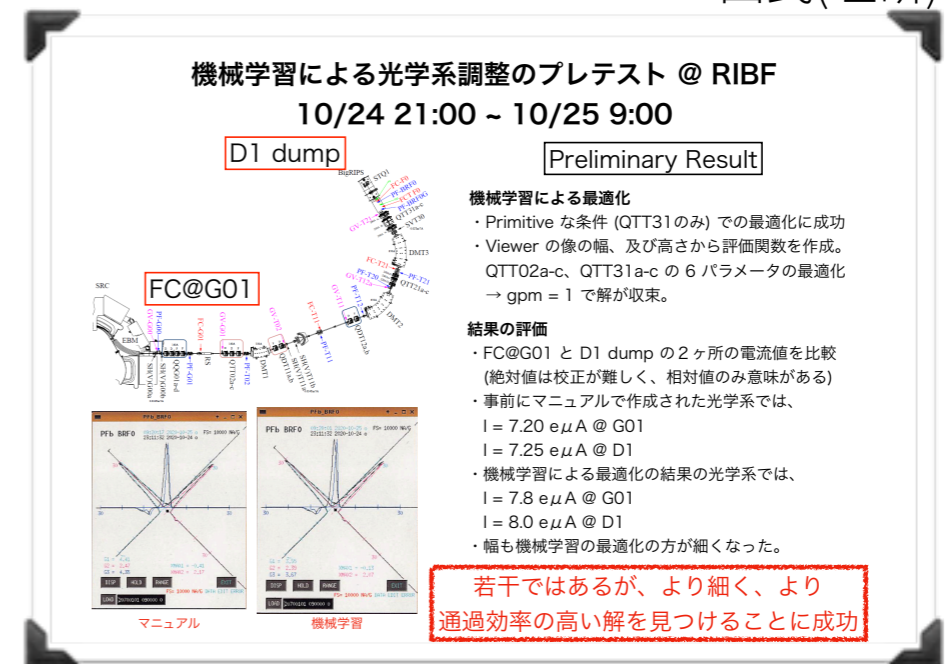
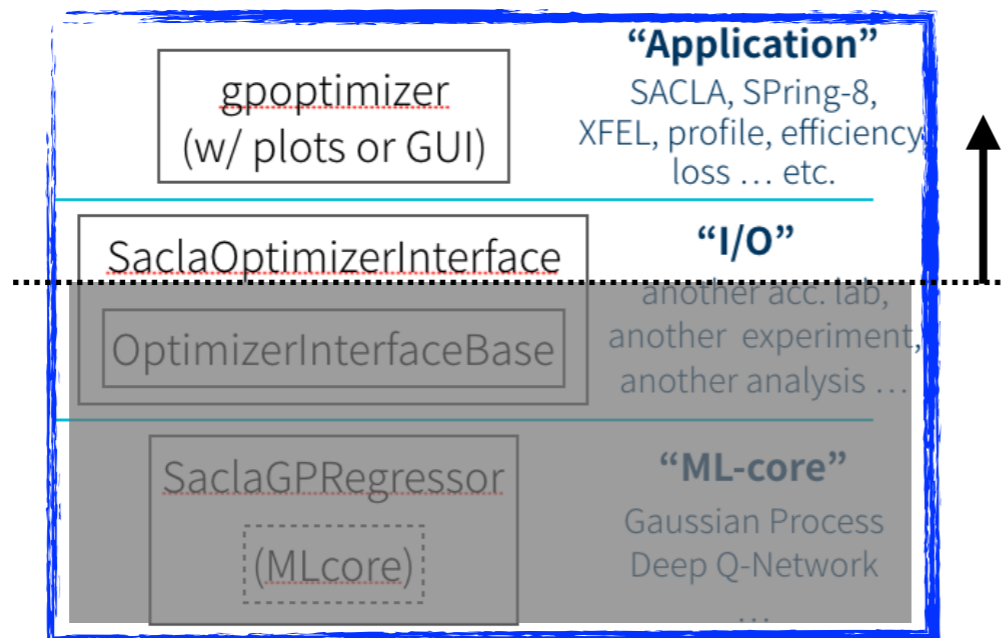
e.g.) “BoTorch/GPyTorch” version of  
GP-core was coded inherited from  
“scikit-learn” version

# 他施設, 他用途での応用

## ● RIBF@理研(和光) での応用試験

- 異なる加速器, 異なる用途: 安定核やウランを加速, 標的に当てて破碎片や分裂片核種を生成
- 部分的, 限定的ながら実ビームを用いた初回試験

西氏(理研)

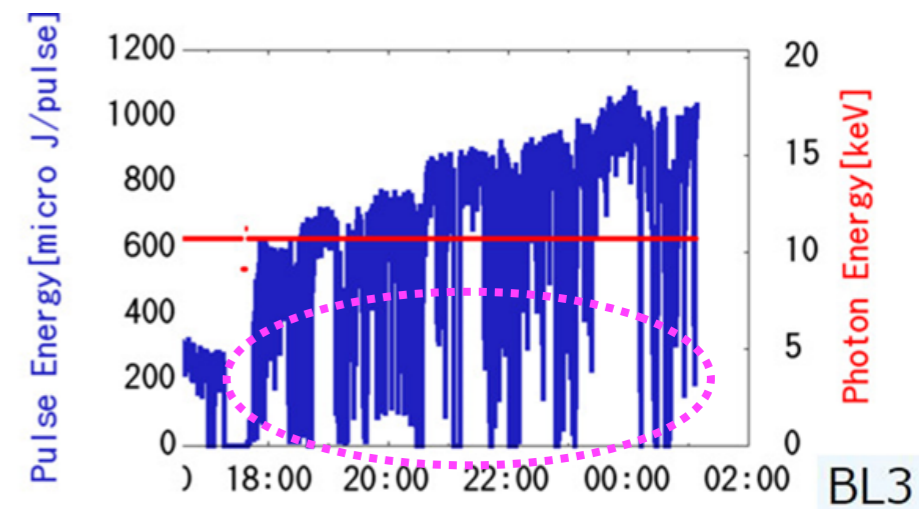


- 上位レイヤーの差分実装のみで, 手調整より良いビームの自動調整, 生成に成功 (互いに Optimizer 実装詳細, 加速器/用途の詳細をブラックボックス化したまま, かなり理想的に接続できた)

✓ 今後, 基幹/コア部 を含めて共同で開発を進める

➡ 他施設, 他用途での応用可能性を実証

# 今後の展開



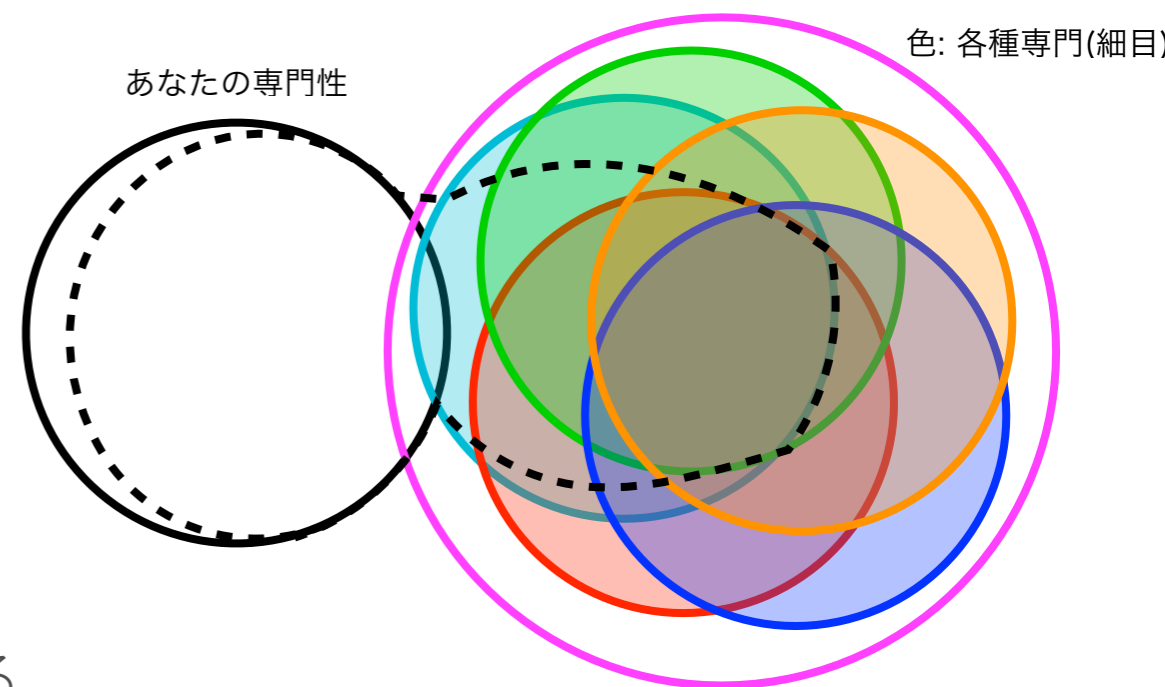
- ユーザー運転中にも使える, GPR-Optimizer の開発  
(目的: RF位相ドリフト等による性能低下抑止, 性能維持)
  - GPだけでなく、深層学習, 強化学習, 敵対的生成ネットワークなど, 過去に蓄積した経験を基にした, さらに洗練された機械学習手法を用いたコア/基幹部の開発
  - 国内で裾野を広げ, 基幹部の共同開発を押し進める
    - ✓ “加速器” に特化した技術では無いので, ”多パラメータ空間内での最適化” 用途なら応用可能
- ➡ 新領域の開拓を目論む



**この2年の経験を踏まえて…  
(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
  - 「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 **他分野の専門性**
  - 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

# まとめ

- 素粒子実験から放射光加速器という全く異なる(ように見える)分野へ移ってみた
- 素粒子実験で培った経験のうち, 近接するLLRF から研究を開始 (加速器分野も素粒子実験に負けず劣らず研究対象フィールドが広い)
- 素粒子実験での土壌を活かして, “独自” のアプローチで加速器研究に取り組む
  - XFEL性能の指標化
  - 機械学習手法を用いた自動調整手法を開発 (性能指標の最大化)
- ➡ 国内で裾野を広げ, 基幹部の共同開発を進め, 新領域の開拓を目論む
- どのレベルでも, 興味がありましたらご連絡ください, 歓迎致します
  - 素粒子/高エネルギー実験出身の他分野研究者として
  - 機械学習の素粒子, 原子核分野等での応用
  - SACLA/SPring-8 など放射光加速器での研究