

ベイズ最適化を用いた KEK Linac ビーム調整と SuperKEKB への展望

BAYESIAN OPTIMIZATION ASSISTED BEAM TUNING AT THE KEK LINAC AND PROSPECTS FOR SuperKEKB

三塚岳^{*A)}, 飯田直子^{A)}, 加藤臣之輔^{B)}, 夏井拓也^{A)}, 佐藤政則^{A)}

Gaku Mitsuka^{*A)}, Naoko Iida^{A)}, Shinnosuke Kato^{B)}, Takuya Natsui^{A)}, Masanori Satoh^{A)}

^{A)} KEK

^{B)} University of Tokyo

Abstract

Hundreds of thousands of tuning parameters must be optimized to match the operating conditions to obtain the best performance from an accelerator. In the past, experts made decisions based on their experience on which tuning parameters contributed the most to the performance and adjusted them sequentially. On the other hand, accelerator tuning approaches based on machine learning, which has become much easier to handle, have been studied intensively in recent years. We have been developing a beam-tuning tool based on Bayesian optimization to improve the efficiency of beam operation at the SuperKEKB accelerator. In this conference, we will report the latest results of beam tests on the KEK injector, including positron beam yield maximization and dispersion tuning as the first step of the development, and also explain the Bayesian optimization algorithm.

1. 導入

近年の加速器では、性能を維持または改善するため、十から百に渡るパラメータを刻々と変化する状況に合わせて調整しなければならない。調整の成否を示すモニター値も総数が数百にのぼり、種類もビーム軌道、ビーム電荷、ディスパージョン、エミッタンス、エネルギー損失など多彩である。これまではビーム運転の専門家が知識と経験に基づいて、多くのパラメータを調整してきた。しかし最近の複雑かつ繊細な加速器では、専門家に頼った調整のみでは、加速器性能の向上に長い時間と労力を要してしまう。一方、機械学習を用いた加速器調整は、専門家に依存した調整に代わるものとして最近注目を集めている。機械学習は 2010 年代以降、速度、精度、応用範囲において目覚ましい進歩を遂げている。各ベンダーから様々なライブラリが提供されており、比較的容易に利用でき使いやすくなっている。

本研究の目的は、教師なしパラメータ最適化アルゴリズムを用いた加速器調整である。本稿で用いるベイズ最適化 [1] は、ガウス過程 [2] とベイズ決定論 [3] に基づくパラメータ最適化アルゴリズムである。ベイズ最適化は、複数のパラメータを変更し、応答の試行を得ることによって教師なし学習を行う。ベイズ最適化は教師ありデータを使用しないため、加速器への応用においては温度ドリフトなどの環境変化の影響を受けにくいという利点がある。とはいえ、予測精度を向上させるには複数回の試行を繰り返す必要がある。1 回の試行にかかるコストを無視できない加速器調整では、多くの試行は避けるべきである。このような相反する要求の下で、我々は実際のビーム調整にベイズ最適化を応用しテストした。当初の目標性能に達したか、与えられたパラメータ次元に対して何回の試行が必要であったか、また、複数の目標 (例えば、ビーム電荷対分散関数) が達成されたか、などを調べるためである。さらに、ベイズ最適化に加えて進化アルゴリズムのひとつ

である Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy (CMA-ES) [4] もビーム調整に応用し、2 つのアルゴリズムの特徴と調整結果を比較した。ビーム調整試験は、上記アルゴリズムを既実装しているパラメータ最適化ライブラリ optuna [5] を用いて、2023 年 6 月に KEK 線形加速器 Linac にて行った。複数の異なる最適化アルゴリズムを用いたビーム調整の結果は、今後機械学習を加速器へ応用していく際に不可欠なガイドラインとなると考えている。

なお本稿では紙面の関係より、ベイズ最適化と CMA-ES の解説は一切省くことにする。別途参考文献を参照して欲しい。

2. LINAC におけるビーム試験セットアップ

Figure 1 は Linac の模式図である。まず電子銃を用いて電子ビームを生成する。電子銃は熱電子銃と RF 銃の二通りがあり、陽電子生成用の電子ビームには大電荷ビーム生成に適した熱電子銃を使用する。電子ビームはバンチャーを通った後、直線 A-B セクターを経由してアークセクター (R セクター) に入る。アークセクターで進行方向を折り返したあと、1 セクターの最後までに 3.3 GeV に加速された電子ビームはタングステン製の陽電子生成標的に衝突する。陽電子生成標的内の多重散乱とそれに続く γ 線対生成により生成された陽電子は、フラックスコンセントレーターで前方へ収束される。陽電子ビームは 1.1 GeV まで加速されたあとダンピングリングの中で 40 ms 周回し、その間にエミッタンスが低減される。最終的には、スイッチヤードにおいて陽電子ビームは SuperKEKB 陽電子リングにつながるビーム輸送路に入射される。

ビーム調整試験の目的は、ステアリングマグネットのコイルに印加する電流を最適化し、陽電子生成標的直前での電子ビームの電荷を最大化することである。通常、このような電荷最大化調整は運転エキスパートが人力で行っている。人力で行っている調整を最適化プログラムが代替できるか試すのが、今回の試験の目的である。ビーム試験では、合計 6 台のパルスステアリン

* gaku.mitsuka@kek.jp

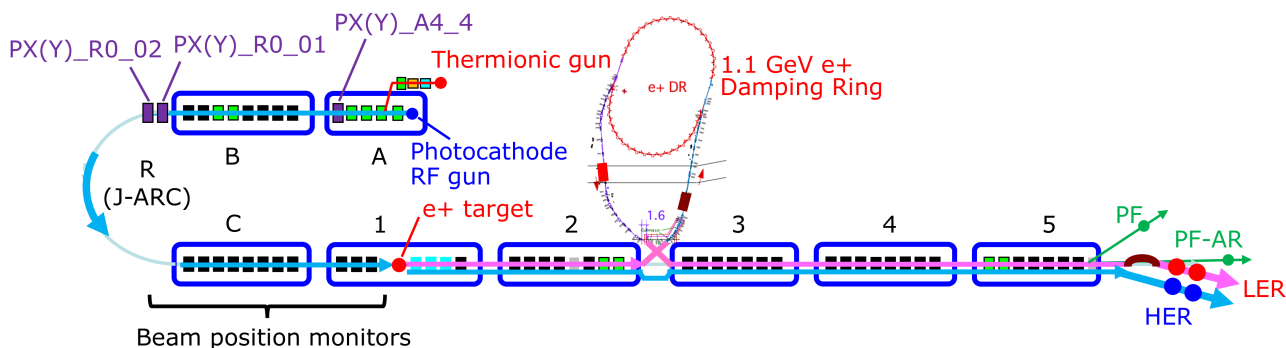


Figure 1: Layout of the pulse steering magnets and beam position monitors at the KEK Linac.

グマグネットを使用した。A セクターの PX(Y)_A4_4 (X は水平方向、Y は垂直方向) のステアリングマグネットを 2 台、R セクターでアーク部直前の PX(Y)_R0_01 と PX(Y)_R0_02 の 4 台、合計 6 台である。電荷測定用のビーム位置モニター (BPM) は R セクター下流から陽電子生成標的直前までの合計 14 台である。

印加電流値の設定と、BPM で測定した電荷の取得は EPICS プロトコルを経由して行っている。ビーム試験時の電子ビーム線り返しは 1 Hz だったため、印加電流を変更したあとに 1 s 待機時間を設けた。その後電荷を 3 点取得し (つまり 3 s かかる)、測定誤差を減らすために 3 点の平均値を最適化プログラムの測定値とした。

3. LINAC におけるビーム試験結果

3.1 最大電荷ピークホールド値

ここでは KEK Linac において 2023 年 6 月に行ったビーム試験の結果を紹介する。Figure 2 に、0 から 99 までの各トライアル毎に推移する電子ビーム電荷量のピークホールド値を示す。Figure 2 (a) は BoTorch アルゴリズム [6] に基づくベイズ最適化を用いた結果である。5 本ある実線 (それぞれをランと呼ぶ) は、最適化プログラム開始直後の初期化において、最適化パラメータ (各ステアリング磁石の電流値) を探索範囲内でランダムに設定する場合を示す。本稿ではこのような初期化手法を *enqueue* なし (図中では *without enqueue*) と呼ぶ。初期化は 0-9 トライアルの合計 10 回行われる。初期化は探索範囲全体にわたる大まかな確率密度分布を得るために必要である。1 ランにかかる時間はおよそ 20 分であり、そのほとんどは BPM からの電荷情報の平均化にかかる待ち時間である。5 ラン中 2 ランでは初期化直後の 0 トライアル目で偶然 4 nC 程度の電荷量を得ている。5 ランすべてにおいて、およそ 35 トライアルで 9.3 nC 以上の最大値に達している。一方で、5 本ある破線 (ほぼ重なって判別は難しいが) では、各磁石の電流初期値として、高いビーム電荷量を与えると事前に分かっている電流値の組み合わせを設定する場合である。本稿ではこのような初期化手法を *enqueue* あり (図中では *use enqueue*) と呼ぶ。高い電荷量を与える電流値の組み合わせは、実線に相当するランの内 1 つのランにおいて、最も高い電荷量を与える上位 10 組の電流値組み合わせを採用している。結果的に、破線は初期化直後から高いピーク電荷量を示している。事前に

高い電荷量を与える電流値の組を幾通りか把握しておき、それらを最適化の初期値として与える手法は、ある程度の再現性を担保できる状況であれば、実際の加速器調整においても役に立つはずである。

Figure 2 (b) は CMA-ES を用いた実験結果である。測定は 6 月 12 日に行われ、これは (a) の測定から 10 日後である。その 10 日間の間に電子ビーム生成下流の状況が変化し、最適化に使用するセクター直前での電荷量が低下していた。そのため、CMA-ES で最適化された電荷量も、やや低い 9.0 nC 以下である。初期値をランダムに与えた場合の実線を見ると、BoTorch に比べて最大電荷量への到達が最も遅いのが分かる。破線は、電荷量が上位 10 個に相当する磁石電流値の組み合わせを初期値として与えた場合である。初期値として与えた組み合わせは、CMA-ES を用いた測定 (つまり実線の 1 本) から得られたものである。

Figure 2 で示した 2 通りの結果は、全てトライアルを 100 回で打ち切っている。しかし BoTorch に関しては、別途 1 ランのみ最適化を 300 トライアルまで延長した試験を行った。これによると BoTorch は最大電荷量付近で活用に重点をおいた最適化を続けた。よりラン数を増やした系統的な測定は今後の課題である。

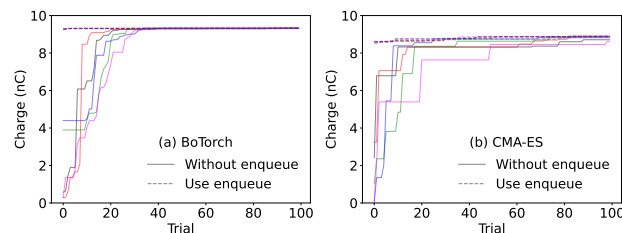


Figure 2: Peak hold values of the electron beam charge at each trial. Panels (a) and (b) show the BoTorch and CMA-ES results, respectively.

3.2 電荷の travel distance

Figure 3 では、トライアル毎に積算していく電荷量 (travel distance) を示す。積算電荷量は

$$D = \sum_{t=1}^{99} |q(t) - q(t-1)| \quad (1)$$

で定義する。積算電荷量を用いることで、どのトライアル付近で電荷量の変化が拡大するか、もしくは穏やかになるかを判断できる。Figure 3 (a) は BoTorch の結果である。実線 5 本は enqueue 無しに相当し、その内 3 本では、30-40 トライアル付近から積算電荷量が急上昇しているのが分かる。これら 3 本の実線を Fig. 2 (a) の結果と比較すると、電荷量がほぼ最大に達したトライアル付近で最適化が活用から探索へ移行している事が分かる。Figure 2 (a) の 5 実線の内、最大電荷量への到達がもっとも緩やかな緩やかなマゼンタ実線も、Fig. 3 (a) では 55 トライアル付近で探索へ大きく移行している。一方で、enqueue 機能を用いて初期値を設定した 5 本の破線では、20 トライアル以降では積算電荷量の上昇は緩やかなままである。これは最適電流値付近の活用を続けている事を意味している。

Figure 3 (b) は CMA-ES の結果である。Enqueue ありの方が enqueue 無しに比べて積算電荷量が常に小さいことが分かり、(a) の BoTorch と同等である。CMA-ES では試していないが、300 トライアルまで延長した試験を行った場合、BoTorch と同様に最大電荷量付近で活用に重点をおいた最適化を続ける可能性が考えられる。

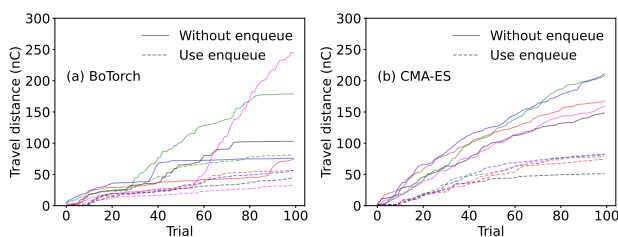


Figure 3: Integrated charge over trials. Panels (a) and (b) show the BoTorch and CMA-ES results, respectively.

3.3 パラメータ重要度

Figure 4 は各磁石の電流の fANOVA [7] で定量化した重要度を示している。白抜き丸が enqueue 無し、白抜き四角が enqueue ありの場合であり、それぞれ 5 回測定の平均値である。Figure 4 (a) は BoTorch の測定結果である。Enqueue 無しの場合は、最大の重要度は PX_A4_4 で 0.5 である。重要度は総和が 1 になるよう規格化されているため、PX_A4_4 だけで約 50% の重要度を担うことが分かる。Figure 1 で見られる様に、PX_A4_4 は今回最適化に使用した 3 台の水平方向ステアリング磁石のなかで最も上流に位置する。そのため、軌道変化に対する PX_A4_4 の影響が最も大きく、結果的に目的関数 (電荷) に対する PX_A4_4 の重要度が高くなったと理解できる。水平方向の軌道エラーが大きくなるとビームが R セクターのコリメータやビームパイプと接触しビームロスが発生する。これが X 方向の重要度が約 0.5 と大きい理由として考えられる。Enqueue ありでは PY_A4_4 の重要度が 0.4 へ増大している事がわかる。ビームライン下流の PX_R0_01, PY_R0_01, PX_R0_02, PY_R0_02 の電流値は初期化時点ではほぼ最適化されており、電荷への影響は小さいと予想される。一方で、PY_A4_4 は最上流に位置するため、僅かな電流値変化でも電荷への影響は大きく、相対的に重要度が増した

と考えられる。

Figure 4 (b) は CMA-ES の結果である。Enqueue ありの結果は BoTorch と同等の結果が得られ、これは Fig. 3 (a) と (b) の積算電荷量の類似から理解可能である。一方で、enqueue 無しの PX_A4_4 の重要度は BoTorch が 0.5 に対して、CMA-ES は 0.7 以上である。定量的な理解には至っていないが、活用と探索のトレードオフが PX_A4_4 の重要度に影響している可能性がある。

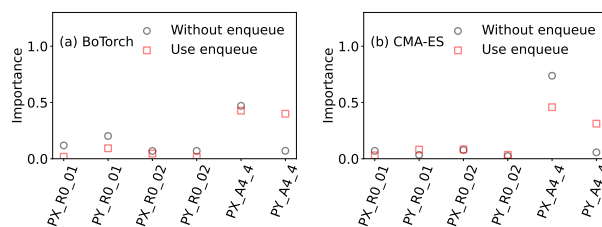


Figure 4: Importance of each input parameter averaged over five runs. Panels (a) and (b) show the BoTorch and CMA-ES results, respectively.

3.4 電荷最大化とディスページョン低減の同時最適化

これまで 1 つの目的関数のみを最大化する、単目的最適化を扱ってきた。一方で、ビーム調整では 2 つ以上の目的関数を扱う場合にしばしば遭遇する。例えば、ビーム電荷の最大化とディスページョン関数の低減、ビーム入射の効率化とバックグラウンド事象の低減などである。複数の目的関数を同時に最適化するのが多目的最適化であり、多目的ベイズ最適化などのアルゴリズムが開発されている。今回は多目的ベイズ最適化を用いて、ビーム電荷とディスページョン関数のパレート最適解を求めた。パレート最適解とは、ビーム電荷とディスページョン関数いずれかが他の測定点よりも勝っている測定点であり、一般的には複数の測定点の組み合わせとなる。パレート最適解が作る境界面をパレートフロントという。

Figure 5 は、ビーム電荷とディスページョン関数の 2 次元プロットであり、赤点がパレート最適解である。多目的最適化により次元が増えたため、総トライアル数は 200 回とした。多目的ベイズ最適化から作られたパレートフロントは、確かにビーム電荷の最大化とディスページョン関数の最小化を達成している。一方で、全トライアル数 200 回のうちパレート最適解数は 5 個であり、効率性の悪さが判明した。多目的最適化をビーム調整へ応用する際は、制限付き最適化を行うなど、効率性改善の試みが必要と感じた。

4. SUPERKEKB への展望

今回 Linac で行った機械学習によるビーム調整試験の結果を、今後は SuperKEKB へ反映させて行く予定である。SuperKEKB にて機械学習で置き換え可能と思われるビーム調整項目は、1) ビーム輸送路から SuperKEKB 主リングへのビーム入射、2) 電子・陽電子ビーム衝突点における両ビームの衝突調整、などである。

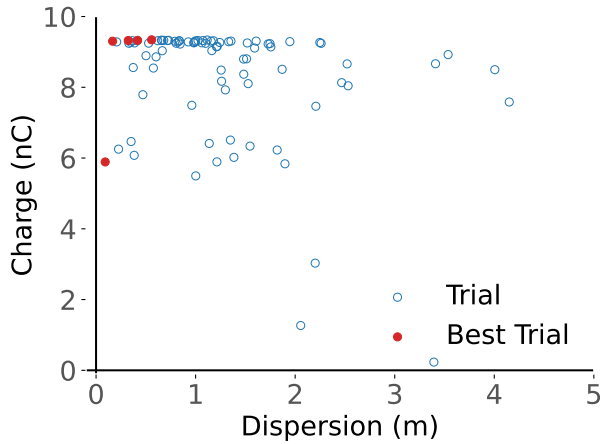


Figure 5: The BoTorch result for the multiobjective optimization on the maximum beam charge (vertical axis) and dispersion function (horizontal axis).

以下の Eq. (2)

$$\sigma_y^{*2} = \beta_y^* \varepsilon_y + \beta_x^* \varepsilon_x \left(\frac{R_2^2}{\beta_x^{*2}} + R_1^2 \right) + (\eta_y \sigma_\delta)^2 \quad (2)$$

は衝突点における垂直方向ビームサイズ σ_y^* に対する寄与を示しており、垂直方向エミッタンス ε_y だけでなく、水平方向エミッタンス ε_x もベータatron振動の水平・垂直カップリング (R_1 や R_2) を通じて寄与している。Figure 6 に示したのは、電子ビームの水平・垂直カップリング R_2 を調整することで、電子ビームサイズ σ_y^* が縮小し、ルミノシティが向上した際の状況である。ルミノシティ向上は 30% にも及び、カップリング調整がルミノシティ向上に大きく貢献していることが分かる。

一方で、現在のカップリング調整は R_1 – R_4 を逐次 1 次元ずつ行っているため、電子ビームと陽電子ビームを合わせると一通りのカップリング調整を行うのに数時間を要する。ベイズ最適化などの最適化アルゴリズムを用いて、複数のカップリングパラメータを一度に調整できれば、大幅な時間短縮につながる。今後は Linac で得た知見を SuperKEKB のビーム入射調整やカップリング調整などに応用していく計画である。

参考文献

- [1] R. Garnett, “Bayesian Optimization”, Cambridge University Press, 2023. <https://bayesoptbook.com/>
- [2] C. E. Rasmussen and C. K. I. Williams, “Gaussian Processes for Machine Learning”, The MIT Press, 2015. <https://gaussianprocess.org/gpml/>
- [3] J. O. Berger, “Statistical decision theory and Bayesian analysis; 2nd ed.”, Springer, 1985.
- [4] N. Hansen, “The CMA Evolution Strategy: A Tutorial”. <https://arxiv.org/abs/1604.00772>
- [5] T. Akiba *et al.*, “Optuna: A Next-generation Hyperparameter Optimization Framework”. <http://arxiv.org/abs/1907.10902>

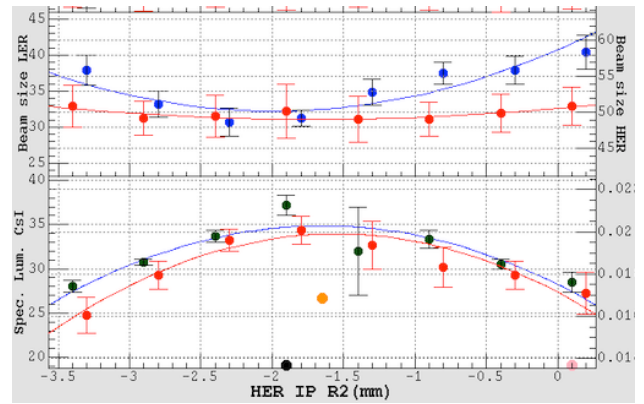


Figure 6: Betatron oscillation coupling on the horizontal and vertical coordinate influencing the vertical beam size (upper panel) followed by an increase in the specific luminosity (lower panel).

- [6] M. Balandat *et al.*, “BoTorch: A Framework for Efficient Monte-Carlo Bayesian Optimization”, Advances in Neural Information Processing Systems 33, 2020. <https://proceedings.neurips.cc/paper/2020/hash/f5b1b89d98b7286673128a5fb112cb9a-Abstract.html>
- [7] F. Hutter, H. Holger and K. Leyton-Brown, “An Efficient Approach for Assessing Hyperparameter Importance”, Proceedings of the 31st International Conference on Machine Learning, Jun. 2014, pp. 754–762. <https://proceedings.mlr.press/v32/hutter14.html>