

機械学習法の導入によるX線自由電子 レーザー性能の高度化

Advanced x-ray free electron laser performance by
introducing machine learning

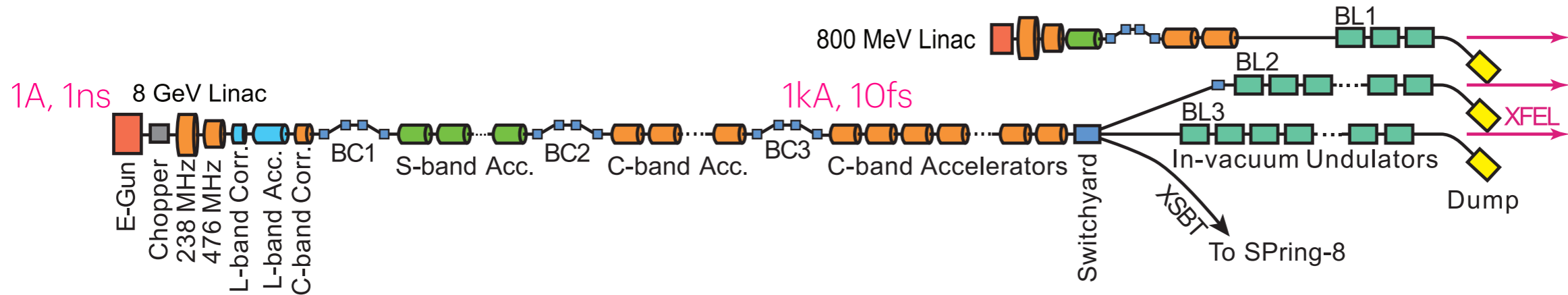
08/01/2024, 第21回日本加速器学会年会 受賞講演
岩井瑛人, 前坂比呂和 on behalf of SACLA colleague



JASRI



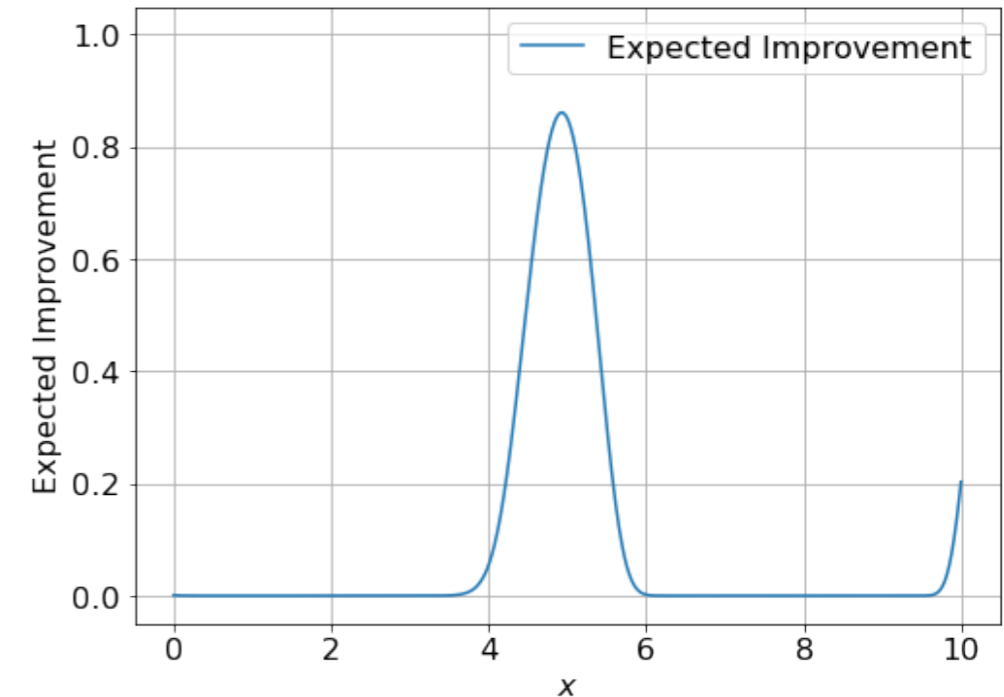
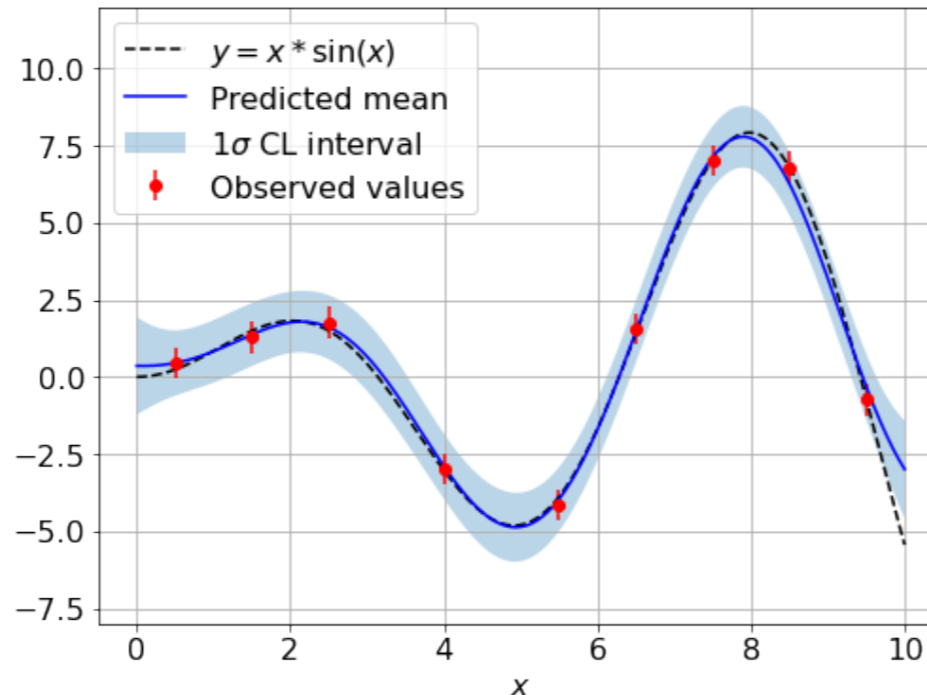
XFEL/SACLA (→ motivation)



- ▶ 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



▶ 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

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

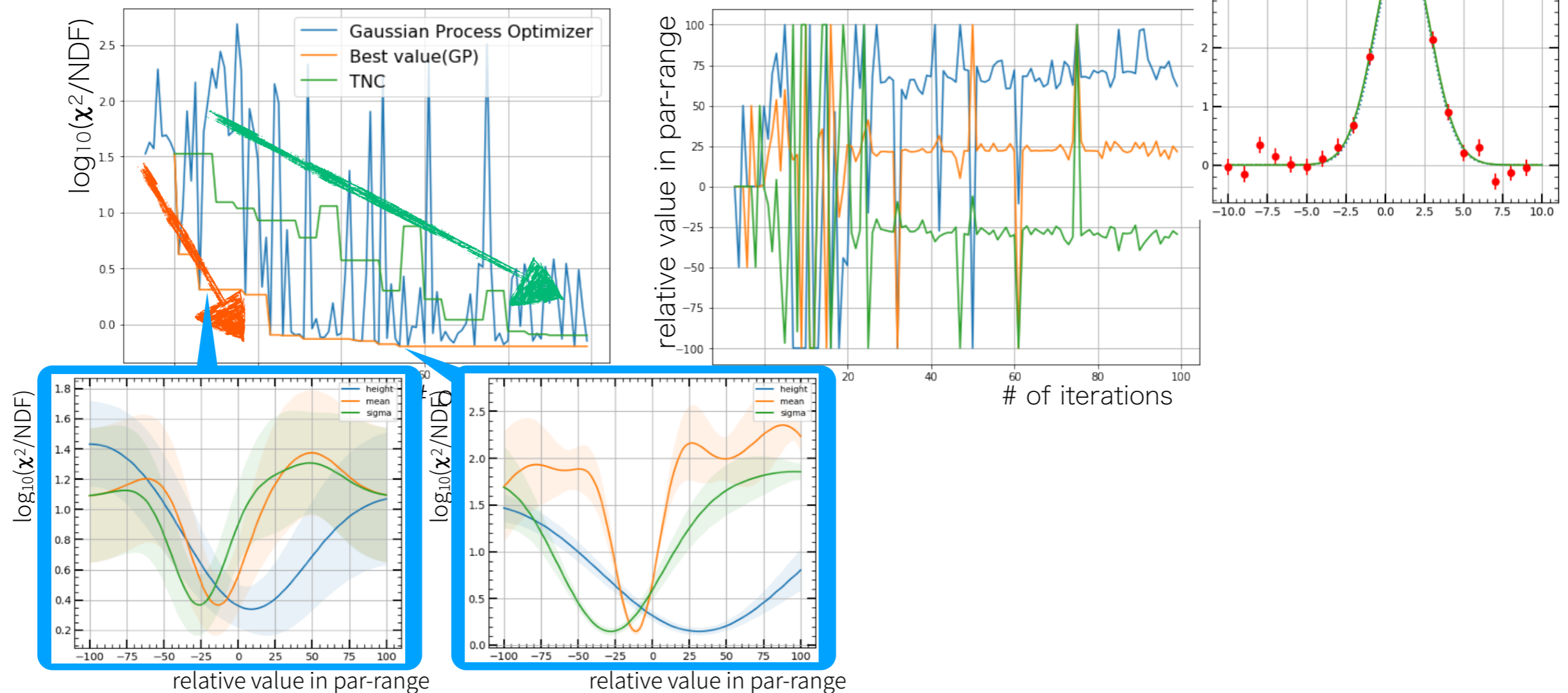
3.3. 当該条件でのサンプルデータを追加して, GPモデルをアップデート



GPR Optimizer

▶ 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

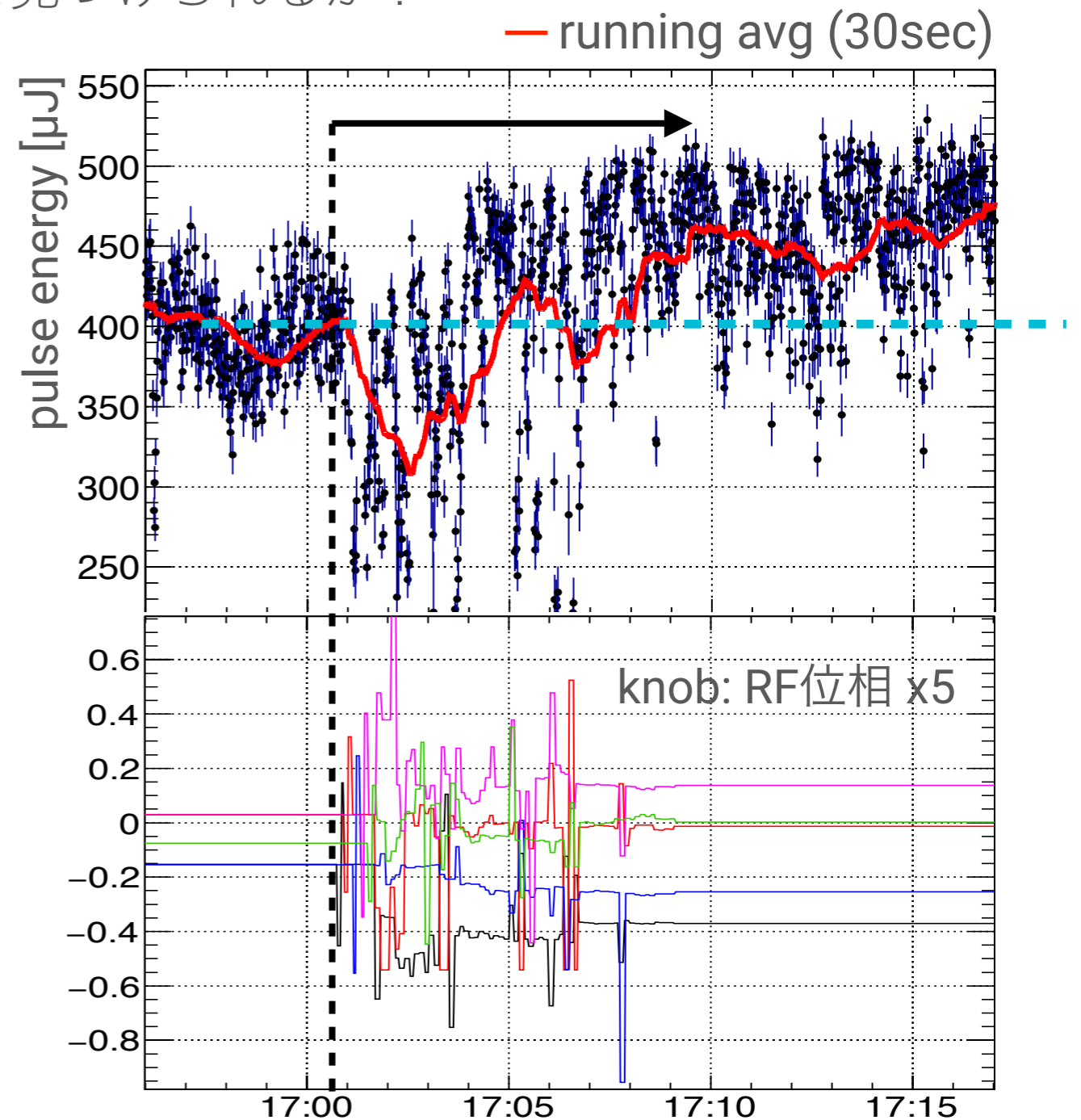
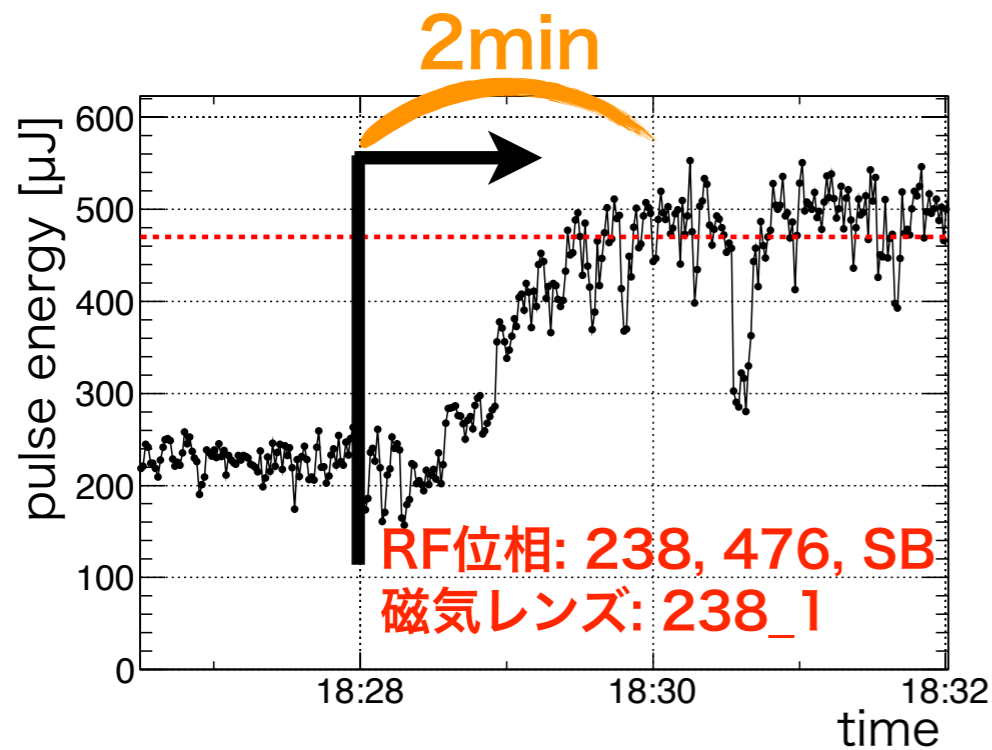


▶ 既存/古典的な方法 (TNC; Truncated Neuton) と同等のフィット結果

- 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)

ビームの調整

- ▶ 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

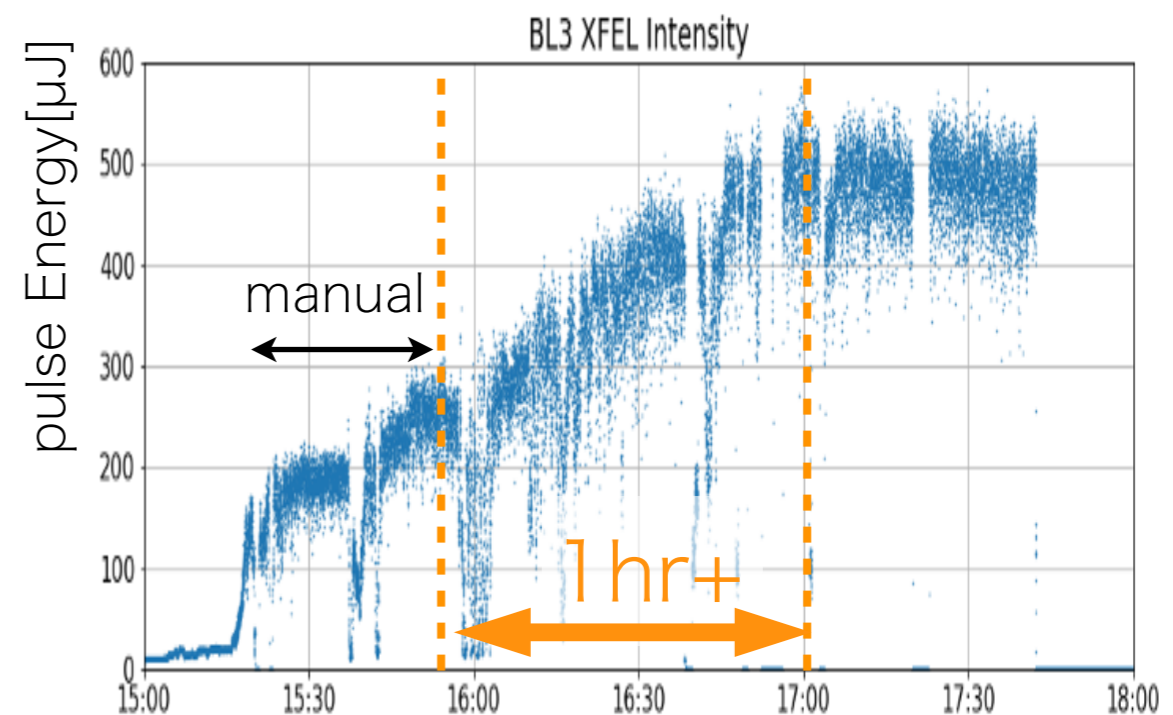
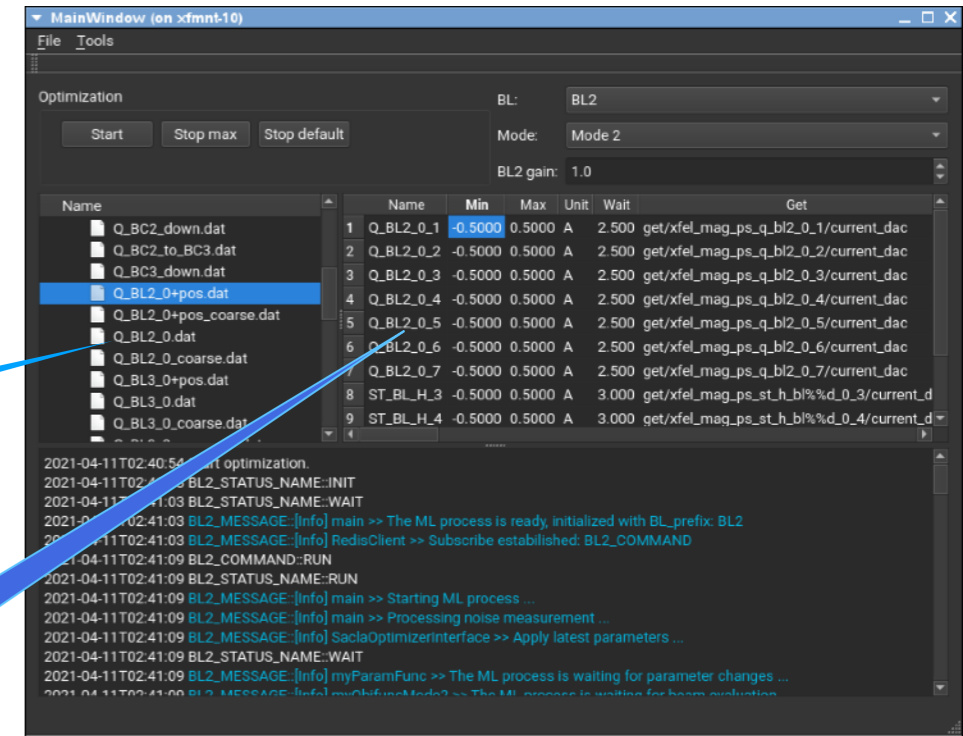
- ▶ 運転員による GUI での利用
 - GPR Optimizer は既に実戦投入されている
 - 経験の浅い運転員から、熟練の運転員まで広く日常的に調整に利用されている
 - 運用上は調整時間, 安定性/再現性の観点などから 10~15パラメータ程度までで利用

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

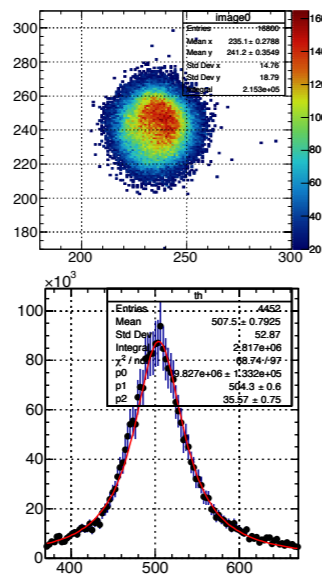
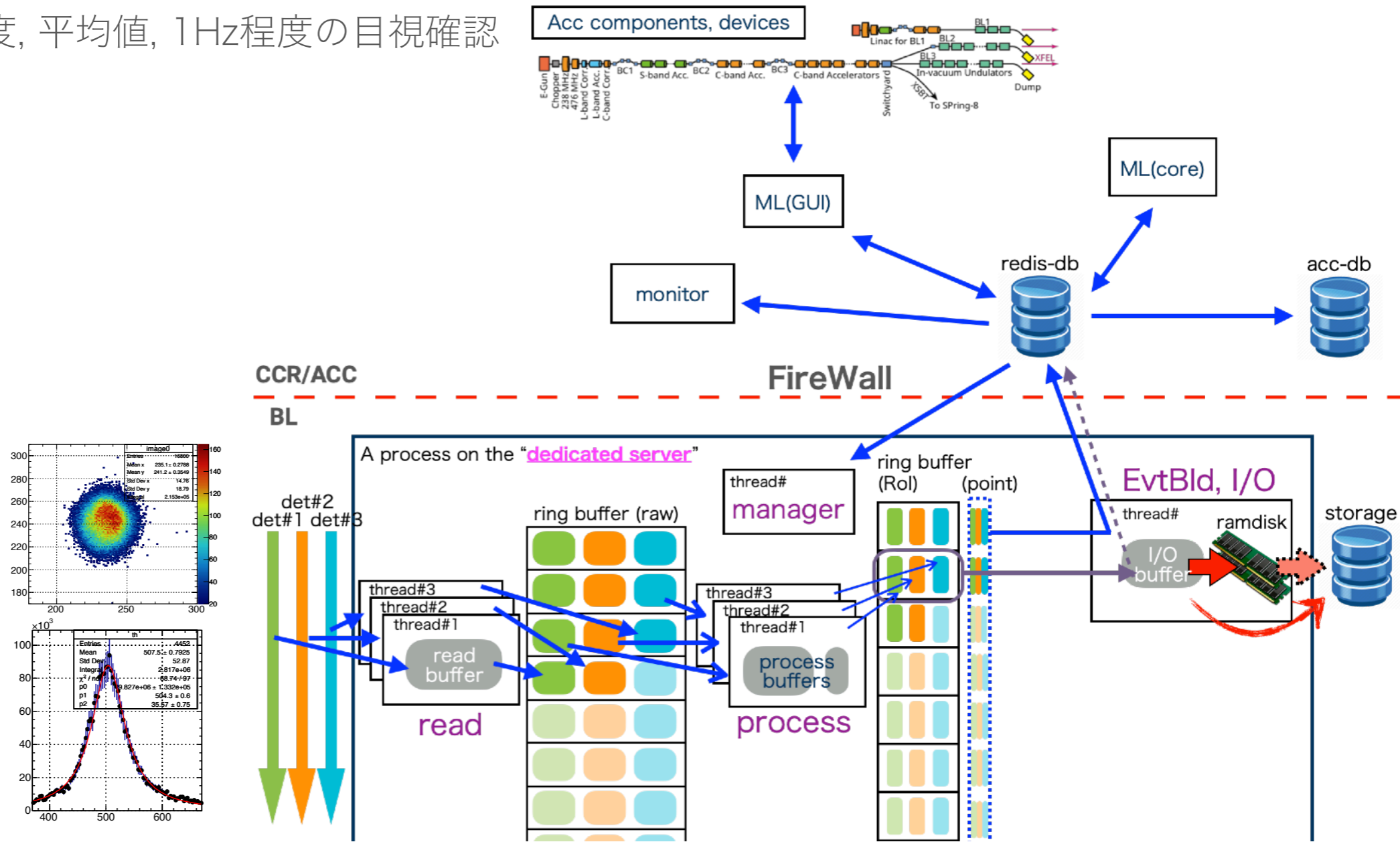
- ✓ On-demand FB
- ✓ 調整の合理化によりSRへの入射開始後も、以前と同等以上のXFEL供給を実現
- ✓ 未踏の 1mJ@10keV 達成にも貢献

➔ 更なる高度化へ



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程度の日視確認



様々な性能指標の最適化

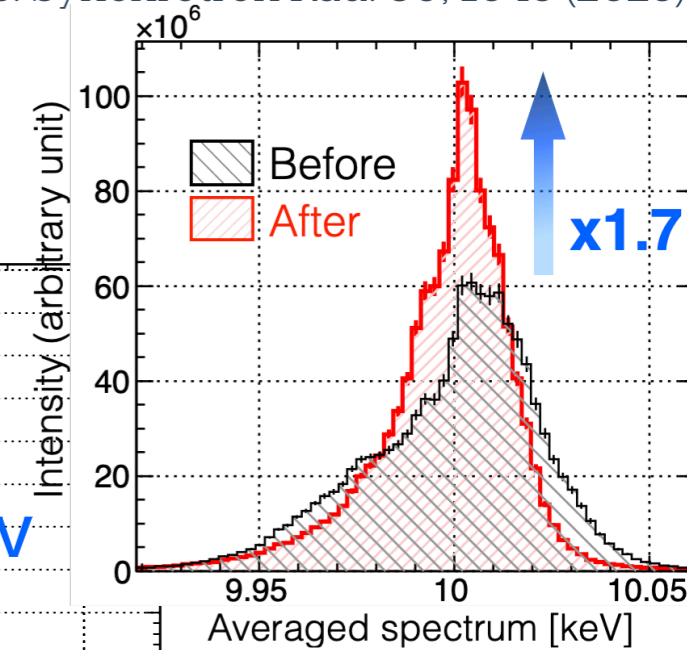
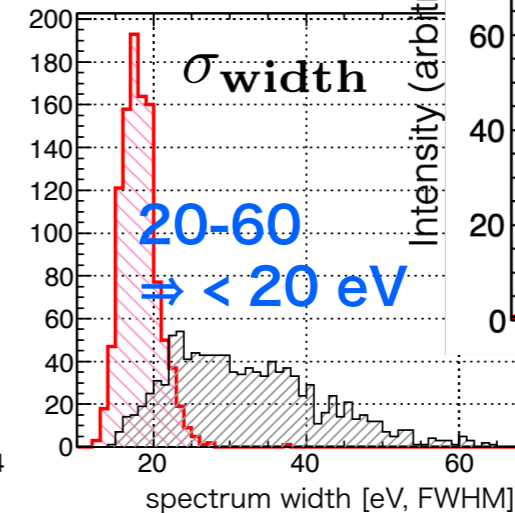
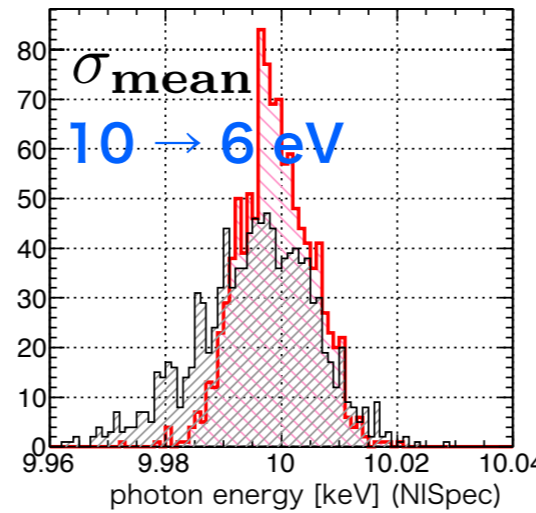
E. Iwai et al.: J. Synchrotron Rad. 30, 1048 (2023).

▶ スペクトル輝度最適化

- 性能指標: $\frac{\text{PulseEnergy}[\mu\text{J}]}{\sigma[\text{eV}]}$

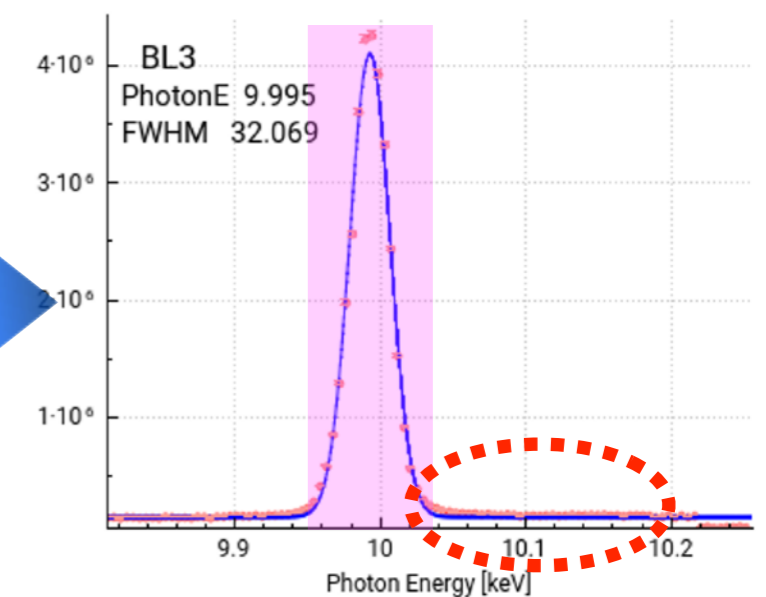
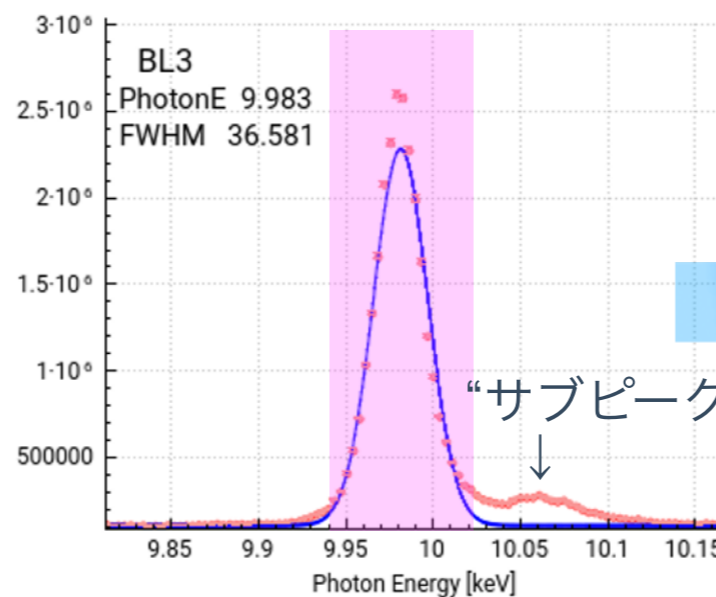
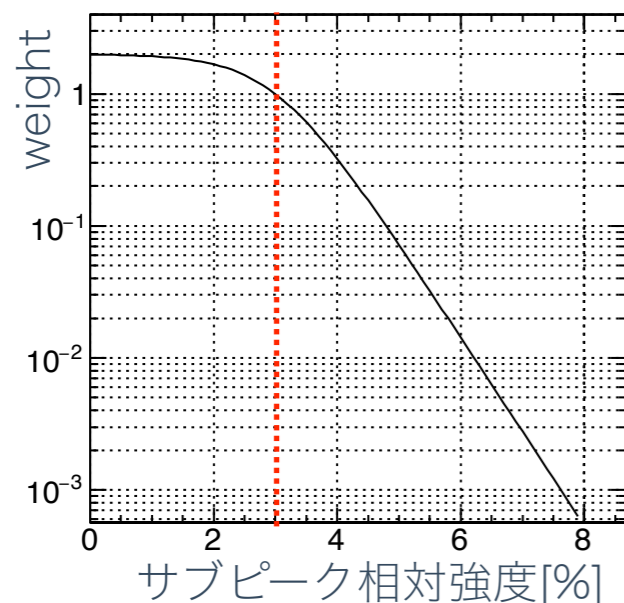
$$\sigma^2 = \sigma_{\text{mean}}^2 + \sigma_{\text{width}}^2$$

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



▶ スペクトル形状最適化: サブピーク/“肩”の抑制

- 利用実験側からのリクエスト: “サブピークを 3% 以下に”
- “サブピーク”相対強度に応じた weight を掛ける

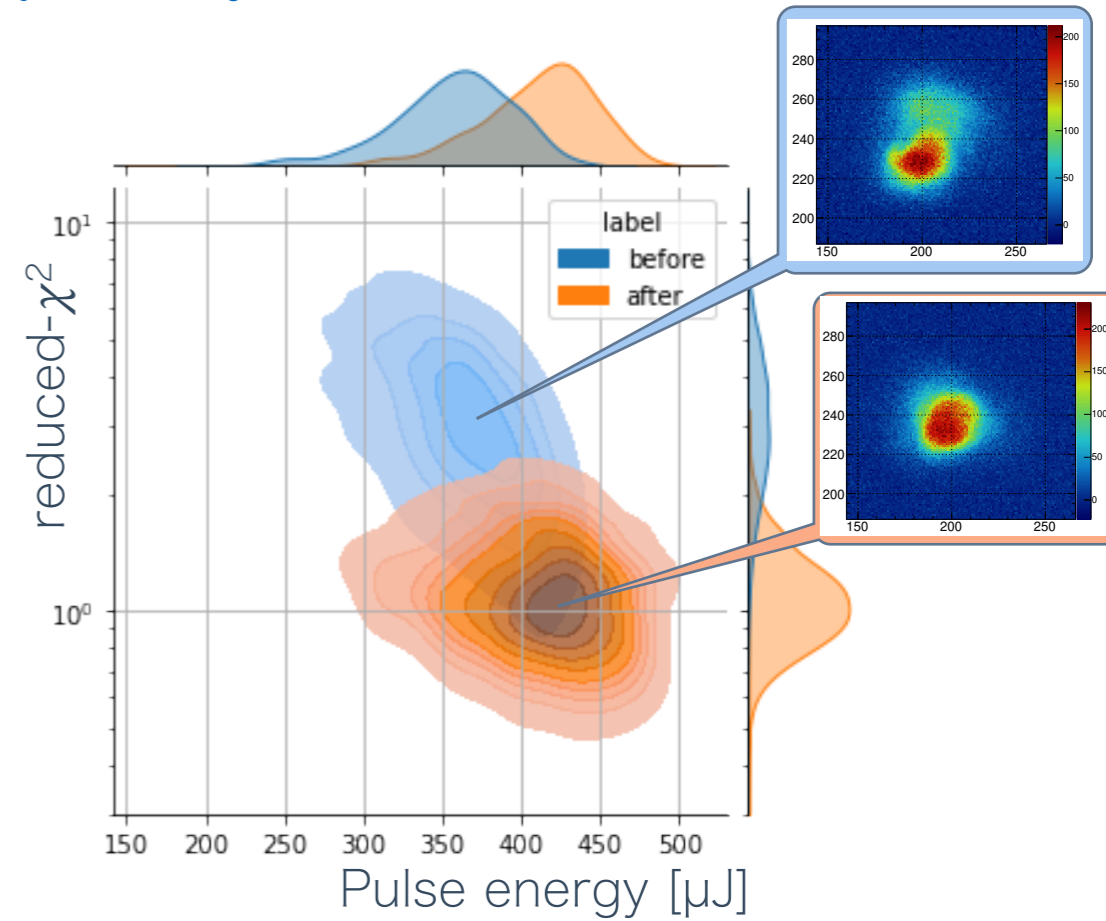
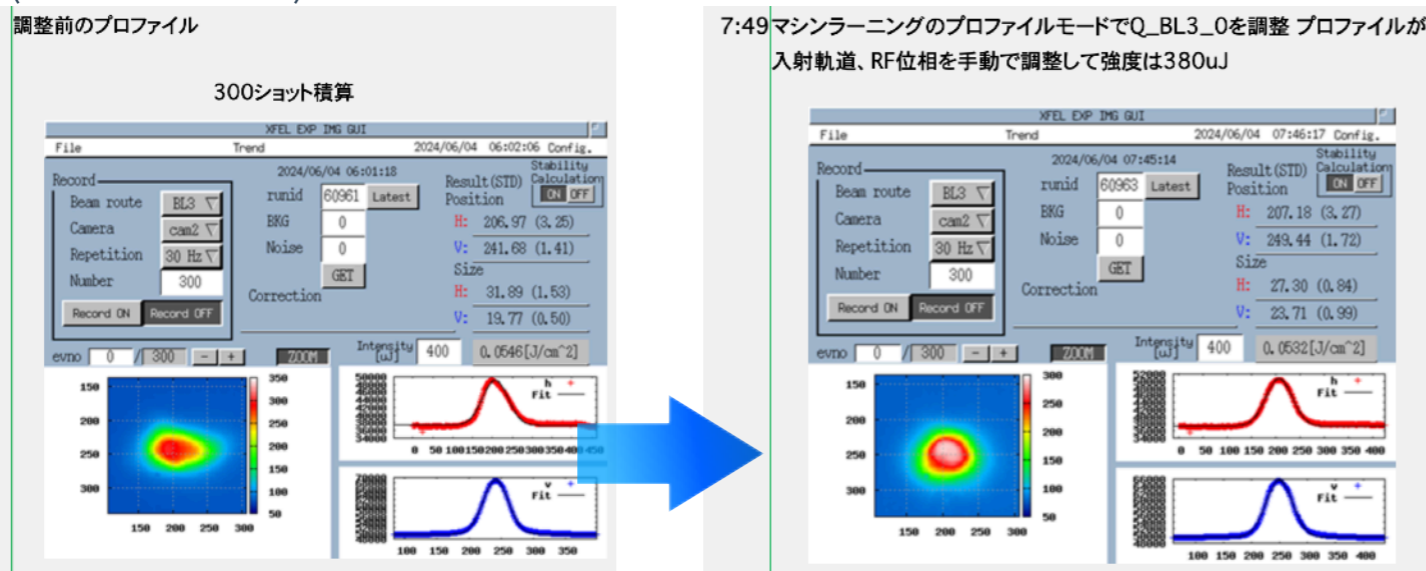


様々な性能指標の最適化 cont'd

▶ XFEL 空間プロファイル最適化

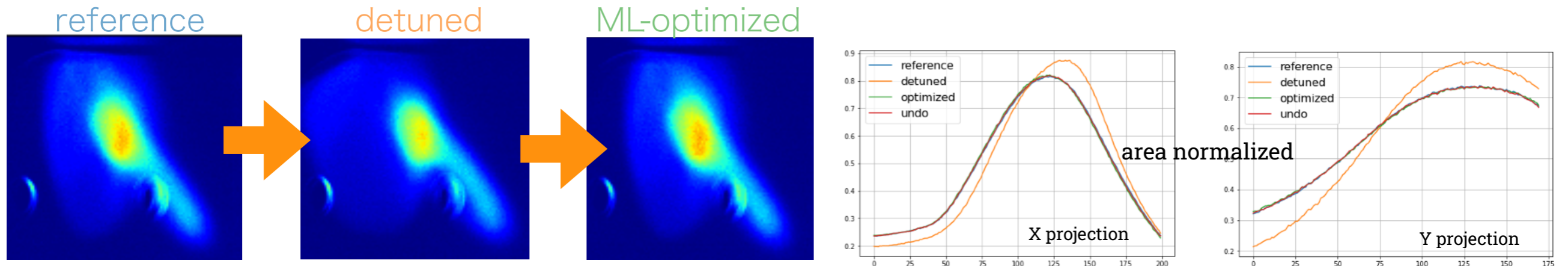
- ・ 圧縮の過程で“ふた珠”になりやすいが、丸い”ひと珠”が求められる
- ・ XFELスクリーンイメージを二次元ガウシアン(単一 σ)でフィットした reduced- χ^2 で既存の性能指標を規格化

(運転ログより)



▶ 電子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

- ・ ゴール: 複数のスクリーンと壁電流モニター出力を再現



GP Optimizer の実装

- ▶ オブジェクト指向, 階層型実装 → 共同開発や将来的な改良を視野
 - 他の用途にも応用できるように, 施設/用途ごとの差分は基幹/コア部から分離
 - “ML core”層は Transformer, DQN などの更に先進的なコアに置き換えられるように

gpopimizer
(w/ plots or GUI)

“Application”

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

SaclaOptimizerInterface

OptimizerInterfaceBase

“I/O”

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

e.g.) 冒頭の “ガウスフィット” の例
はこの基底クラスで実装

SaclaGPRegressor

(MLcore)

“ML core”

Gaussian Process
Transformer
Deep Q-Network
...

- GP: Torch版, sklearn版
- Scipy: Nelder-Mead など

GP Optimizer の実装

- ▶ オブジェクト指向, 階層型実装 → 共同開発や将来的な改良を視野
 - 他の用途にも応用できるように, 施設/用途ごとの差分は基幹/コア部から分離
 - “ML core”層は Transformer, DQN などの更に先進的なコアに置き換えられるように



gpopimizer
(w/ plots or GUI)

“Application”

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

SaclaOptimizerInterface

“I/O”

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

OptimizerInterfaceBase

e.g.) 冒頭の “ガウスフィット” の例
はこの基底クラスで実装

SaclaGPRegressor

“ML core”

Gaussian Process
Transformer
Deep Q-Network
...

(MLcore)

- GP: Torch版, sklearn版
- Scipy: Nelder-Mead など

Prospects

- ▶ 課題, テーマ
 - 性能指標の高度化 (X-band deflector による E-T 分布など)
 - 調整, 運転: 都度学習(GPR) から 事前+強化学習(Transformer, DQN, ...) へ
 - 異常検知, 故障予兆
- ▶ コードレベルの協力, 協働
 - オブジェクト指向, 階層型実装 (前述)
- ▶ 裾野の広がり
 - 加速器分野に “機会学習” というフィールドは無かった
 - 私も含め “本業” の傍での個人的な取り組み
 - ➔ 加速器機械学習フォーラムの発足(国内)
<https://www.rcnp.osaka-u.ac.jp/Divisions/acc/accml/>
過去2回のワークショップ、次回は12月頃に SPring-8 で開催
- ✓ 個人ベース → 広く加速器分野へ

Summary

- * SACLA/SPring-8 ではさらなる高性能化&運転合理化を目指し、機械学習手法を用いた取り組み
 - Gaussian Process Regressor を用いた自動調整
 - 日々の調整に活用
 - XFEL スペクトル輝度, 形状の最適化
 - XFEL 空間プロファイルの最適化
 - 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
- * これから
 - 性能指標の高度化: X-band deflector による E-T 分布など
 - 都度学習 から 事前+強化学習、異常検知, 故障予兆
 - 様々なレベルでの協力, 共有を推進

Acknowledgement

順不同

- ▶ 制御:
 - ・N/W 経由で様々な機器を同じ形式で制御, 読み取りできる仕組み
 - ・加速器, ビームラインの N/W を跨って横断的に必要な生データを収集
- ▶ ビームライン:
 - ・高分解能インラインスペクトルメータの開発, 導入などXFELの性能指標化に必要なデータ
- ▶ 加速器機器:
 - ・同じパラメータを適用した時の再現性, 安定性
 - ・自動調整ツールがどんな値を設定しても安全性を担保
- ▶ 運転:
 - ・どういうものが必要かのインプット
 - ・調整のツボを抑えた活用
- ▶ ...

➔ いずれも機械学習活用の上で重要な要素であり、欠かせないものです。関係者の方々のご尽力に感謝いたします。