

機械学習手法を用いた XFEL の自動調整

APPLICATION OF MACHINE-LEARNING TO ACCELERATOR OPERATIONS AT SACLA

岩井瑛人^{*A, B)}, 杉本崇^{A)}, 城地保昌^{A)}, 久保田洗二^{C)}, 田尻泰之^{C)}, 前坂比呂和^{B)}, 稲垣隆宏^{B)}, 原徹^{B)}, 田中均^{B)}
Eito Iwai^{*A, B)}, Takashi Sugimoto^{A)}, Yasumasa Joti^{A)}, Koji Kubota^{C)}, Yasuyuki Tajiri^{C)},
Hirokazu Maesaka^{B)}, Takahiro Inagaki^{B)}, Toru Hara^{B)}, Hitoshi Tanaka^{B)}
^{A)}Japan Synchrotron Radiation Research Institute (JASRI)
^{B)}RIKEN SPring-8 Center (RSC)
^{C)}SPring-8 Service (SES)

Abstract

We have developed a new system based on Gaussian process regression [1], a machine learning method, to optimize the electron beam. This new system was evaluated with beam. Starting from a degraded state by intentionally adding known offsets for some accelerator parameters, the system recovered to more than its original performance within a few minutes. We have also evaluated the optimizer with the following cases; recovery of degraded performance by unknown external disturbances such as phase drifts, starting from a state where the operator has fully-tuned by hand, tuning for restarting the accelerator after a long shutdown period, etc. We also introduced a new performance indicator, central intensity of Inline Spectrometer. By using the new indicator, we can maximize spectral density by maximizing pulse energy while narrowing (keeping) spectral width. The system has been developed so that even inexperienced operators can use it from the GUI, and today it is used for actual accelerator tuning. The system enables efficient beam tuning and contributes to keep providing variety of beams close to their peak performance. The mechanism of this system, its application at SACLA and other facilities, and future plans for its development are described.

1. はじめに

X線自由電子レーザー (XFEL) 施設 SACLA [2, 3] では、Fig. 1 に示すように2本の XFEL ビームラインと SPring-8 蓄積リングへ、異なるエネルギーやピーク電流を振り分けて同時運転している。XFEL では BL ごと、ユーザー実験ごとにビーム条件が変わるため、共通となる加速器部分の調整は非常に難しい。一方、XFEL 利用の普及に連れ、ユーザーからの要求は強度や安定性だけでなく時間幅、空間分布など、より高度な性能指標へシフトしつつある。このような背景からビーム調整の合理化の必要性が高まる一方、これまでは熟練運転員による1パラメータずつの手動調整が主で、複数パラメータの同時調整などは困難であった。そこで機械学習を導入し、加速器の制御値をパラメータとして、性能指標を最大化することで、電子ビームを最適化するシステムを開発した。

2. GPR による電子ビームの最適化

2.1 Gaussian Process Regression

電子ビーム最適化システムを開発するにあたり、機械学習手法の一つである Gaussian Process Regression (GPR; ガウス過程回帰) [1] を用いることにした。Figure 2 上は、この GPR を適当な1次元データに適用した例である。誤差付きのデータを入力として回帰分析を行い、元の分布のモデル化を行う。この際、GPR は特定の関数形を仮定しない。また、各入力に対する期待値と共にその不定性を評価することができる。Figure 2 下は、

分布の最小値を与える入力値を求めるという課題に対して、回帰分析で得た期待値とその不定性を考慮して、既存データからの(最小値)更新幅の期待値, Expected Improvement (EI) を計算したものである。

この GPR を用いて、次のようなシーケンスでビーム性能の最適化を行う。

1. 与えられたパラメータ数, 範囲から適当なデータを取る
2. そのデータから GP モデルを作成
3. Optimization ループ
 - (1) 現行モデルから EI の最大値を探索
 - (2) 最大 EI を与えるパラメータセットを試す
 - (3) 新たに取得したデータを加えて GP モデルを更新

このシーケンスを用いることでビームの調整・最適化ができる。例では1次元であった入力を多次元に拡張し、加速器の各制御パラメータを割り当てる。出力はビーム性能指標とする。いくつかの入力パラメータセットに対して、ビーム性能指標を測定し、このデータセットを用いて、性能指標を最大化する入力パラメータセットを導出する。この入力パラメータセットを実際に機器に設定・測定を行い、新たなデータセットを得る。これを繰り返すことで、多次元の制御パラメータ空間上でビーム性能指標のモデル化を行い、その精度をあげていくことができる。端的にいうと、関数のフィッティングなど χ^2 (Likelihood) の最小 (大) 化を行っている降下法の一つである。

指標の最大化方法としては Nelder-Mead 等の古典的手法もある。後続でビームを用いて検証するが、定性的にいうと古典的な降下法は空間上の刻みを次第に小さ

* iwai@spring8.or.jp

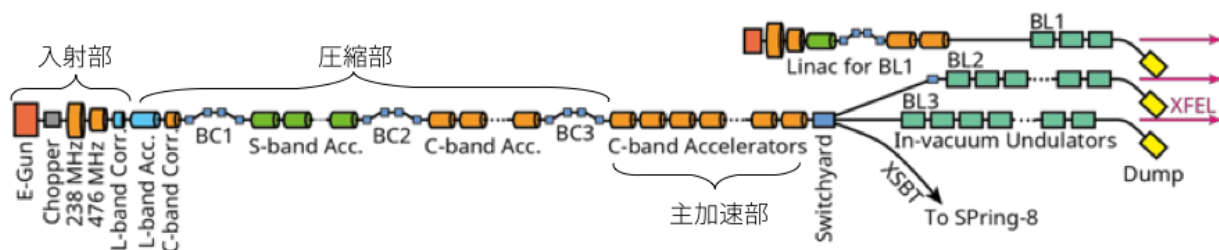


Figure 1: Schematic view of SACLA accelerator. SACLA distributes electron beams of different energies and peak-currents to two XFEL beamlines and the SPring-8 storage ring for simultaneous operation. It consists of injection, bunching, main linac and undulator sections.

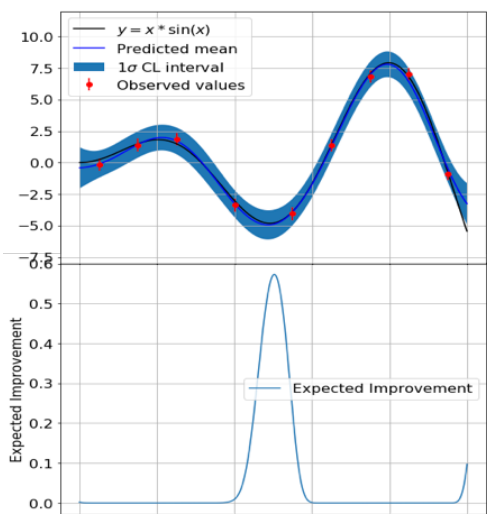


Figure 2: Example of applying GPR for 1D data. Top: Data with error (red dots) for certain function (black dashed line), and median (blue line) and uncertainty (blue band) obtained with GPR. Bottom: Expected Improvement (EI) calculated with the obtained GPR model.

くしながら連続的に探索を行う。一方、評価対象は測定データなので、 χ^2 や likelihood のように滑らかとは限らず、容易に極小(大)に陥りうる。そのため XFEL 強度のような統計的不定性などを伴う実データを指標とする場合、特に多パラメータ空間においては、局所値に落ち込み調整が進まなくなる問題がある。これに対して GPR も途中までは似たような経緯を辿り得るが、一つのピーク近傍を続けて探索を行うと、その周りの不定性が次第に小さくなり、相対的に他の空間の不定性が EI に大きく効くようになり、別のピーク候補へ跳ぶような挙動になる。このように GPR を用いた最適化手法は、多次元パラメータ空間においても誤差や不定性のある測定データを上手く扱うことができ、中央値と共にその周りの不定性の評価することで、指標の極大・極小に落ち込みにくいという特徴を備える。

2.2 GPR を用いた Optimizer の実装

GPR を用いたビーム性能最適化プログラム (Optimizer) は、Python の scikit-learn [4] を用いて実装を始め

た。多次元パラメータに拡張する際に問題になるのは、多次元空間内の EI の最大値をどのようにして求めるかである。前述したように、GPR は特定の関数形を持たないため、EI の最大値を解析的に解くことはできない。先の 1次元の例 (Fig. 2) では、パラメータ方向に 200 分割してそれぞれの値を計算して、滑らかな曲線を描いている。つまり多次元の場合は、その空間上のそれぞれのグリッド点に対する EI を逐次計算する必要がある。必要グリッド数は、1軸方向の分割数 N とパラメータ数 n に対して N^n となり、指数関数的に増える。そこで、global で広範なパラメータ空間は GPR でグリッド探索を行い、最大値を与えそうな空間上のセルを選択する。選んだ多次元空間上の local なセル内は、比較的 robust で legacy な探索方法である Truncated Newton Constrained (TNC) 法で探索を行うことにした。こうすることで 1軸方向の分割数 N を reasonable な数に抑えることができる。

こうして実装した GPR-Optimizer を用いて簡単なテストを行ったのが Fig. 3 である。このテストはガウス分布の誤差付きデータについて同関数のフィットを行わせ、その際の χ^2 の最小化をこの GPR-Optimizer を用いて行い、古典的な手法と比較したものである。お手製の GPR-Optimizer はフィットパラメータを正しく最適化できていることが確認できる。また、古典的な手法 (TNC) と比べて、少ない試行回数でフィットパラメータを漸近させられていることが分かる。この“少ない試行回数”というのも重要である。これは必ずしも少ない計算負荷/時間であるとは限らない。関数フィッティングなどでは、試行回数が多くても結果的に計算時間が短ければ問題ないわけだが、ビームの調整・最適化に用いるとなると、ここで言う“試行回数”はビームパラメータの変更回数に対応し、加速器機器の中にはパラメータ変更に、秒やそれ以上掛かるものも多数あるため、少ない試行回数で崖下りができるというのは重要な要素の一つである。また χ^2 がある程度落ちきった後にも、時折大きく跳ね上がるのは、不定性の大きな別の点を探しに行くことにより極小値に落ち込みにくいという GPR の特徴の一側面を表している。

さらに、後述するビームによる試験などを繰り返ししながら、高機能・高効率化を進めた。制御パラメータは、それぞれパラメータ範囲の上限・下限を指定するが、これはパラメータ空間が n 次元の直方体になっていることを意味する。個々のパラメータとしては、適当なパラメータ範囲を設定したとしても、特に制御パラメータが多く

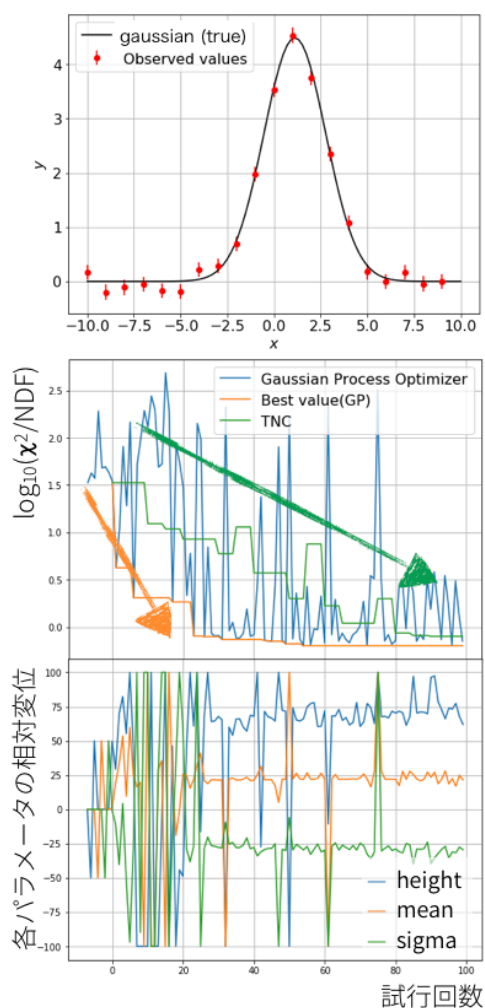


Figure 3: Test of our developed GPR-Optimizer. Gaussian function fitting is performed using GPR-Optimizer (top) and compared with TNC, one of the classical descent methods. Middle: The horizontal axis shows the number of trials (in this case, the number of Gaussian function calls), and the vertical axis shows $\log_{10}(\chi^2/\text{NDF})$; blue: GPR-Optimizer, orange: its minimum history and green: TNC. Bottom: Relative variation of each parameter as a function of the number of trials; blue: height, orange: mean, green: sigma.

なってくると、全てのパラメータを上限 or 下限に設定すると¹、ビームとしてはあまり望ましくない状態になってしまう。この状態を抑止するため、パラメータ空間は n 次元の直方体ではなく、 n 次元の球になるようにした。

また、グリッド状で網羅的に EI の計算を行うと、前述したように指数関数的に計算量が増えるため、計算機や各種コーディングの工夫を行っても、4 コア/16 GB メモリの計算機で 6~7 パラメータ程度、20 コア/192 GB

メモリにしての 9~10 パラメータ付近で計算時間 (10 秒以上²) and/or メモリ量の限界を迎える。scikit-learn に代わり、BoTorch [5]/GPyTorch [6] を用いることで、この計算資源による制約は無くなり、numpy の次元数の上限である 32 パラメータまではプログラムとしては動作するようになり、15 パラメータ程度まではビーム調整で実際に動作を確認した。

3. ビーム試験

前述した GPR-Optimizer について、実際のビーム応答を用いて試験を行った。GPR-Optimizer で扱う主な制御パラメータを Table 1 に示す。はじめは調整済の XFEL について、RF 位相などのパラメータをあえて少しずつ出力を下げたビームに対し、変更を加えたパラメータを含む、複数の調整ノブを入力パラメータとして定義して、元の出力以上まで回復できるかを試験した。ここではビーム性能指標は SASE 強度、パルスエネルギーである。

今回のように意図的に出力を下げたものを回復させる試験においては、パラメータ数が 1, 2 と少ない場合は、元のパラメータを再現するが、パラメータ数が 3 個以上になると必ずしも元のパラメータそのものを再現はしない。これは、一つずつ順に制御パラメータを振って調整を行う既存の手作業の調整方法においては、多次元パラメータ空間上で必ずしも最適な運転点を見つけられていない可能性を示唆していると考えられる。それゆえ今回の試験では、元のパラメータを再現するか否かではなく、元の出力と同等 (以上) に回復できるか否かを評価を行った。

Figure 4 は GPR-Optimizer を用いて、4 つの制御パラメータを用いて意図的に落とした XFEL 出力を回復させる試験を行った時の結果である。開始後 2, 3 分で、元の出力強度と同等以上のレベルまで回復させることができた。Figure 1 に示す圧縮部までの RF 位相、入射部の磁気レンズ、圧縮部以降の四極磁石や各種ステアリング磁石、アンジュレーター・ギャップなど、扱えるパラメータの種類や数を増やしながら同様の試験を行った。

また、比較のため古典的な手法の一つ Nelder-Mead 法を用いて同様の試験を行った。制御パラメータ (RF 位相) が 2 つまでは動いたが、3 つ以上に増やすと元のレベルまで出力が回復しなくなった。

GPR-Optimizer を用いた自動調整の基本的な動作が確認できたので、次は位相ドリフトなど何らかの外部要因により下がった出力の回復や、運転員の手作業による調整済みの定常状態の出力を更に上げるなど、“答え”を知らない環境下での動作を試験した。いずれも良好な結果であったため、最後の確認として長期停止期間後の加速器の立ち上げ時の調整における試験を行った。Figure 5 はその際の出力履歴である。SASE による弱い増幅が始まったばかりの数 μJ の状態から調整を開始した。複数の位相を同時に連動させ、パラメータ空間上の尾根に沿って登り、出力をのぼしているところに、人間による手動の調整とは異なる、機械学習らしさと可能性を垣間

¹ Figure 2 にも垣間見えるように、パラメータの上下境界では外側に点が得られないため不定性が大きくなりやすく、Optimizer はどうしても時々端・角の点を選ぶ傾向がある。

² ビームの評価や機器操作に必要な時間を超えて、調整の効率が大きく低下するため。

Table 1: Main Parameters of SACLA Accelerator (Fig. 1) to Be Tuned by GPR-Optimizer

制御パラメータ	内訳, 数
圧縮部までの RF 位相	7 位相: 238MHz, 476MHz, L 補正, L バンド, C 補正, S バンド, C バンド
入射部の磁気レンズ電流	9 台
圧縮部以降の四極磁石電流	62 台 (部分毎, 或いは各部感度の高いものを選んで全体で 10-15 台前後選ぶ)
ステアリング磁石電流	主に入射部, アンジュレータ直前の計 8 台
アンジュレーター・ギャップ	2 段テーパー (3 変数), 3 台ずつ任意テーパーリング (7 変数)

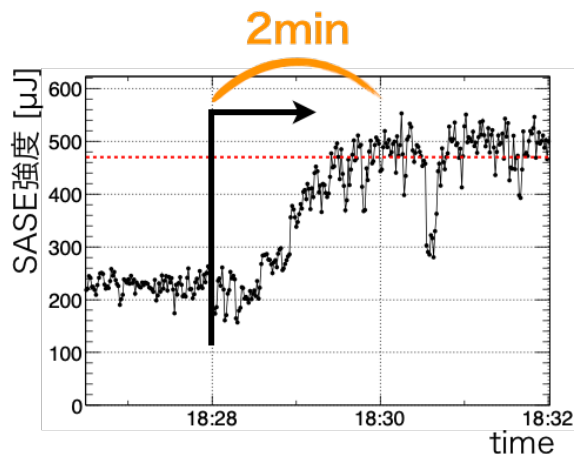


Figure 4: Test of the automatic accelerator tuning using the GPR-Optimizer. The XFEL output power was degraded by intentionally adding known offsets for three RF-phases and a current of magnetic lens placed in injector, and then recovered. The dashed line shows the initial level before the degradation.

見ることができる。停止期間中の更新作業などの機器調整、異なる BL の調整などを挟みつつ、複数の異なる機器パラメータセットの調整を行うことで、数時間で 550 μJ まで出力を伸ばした。

4. ビーム性能の新たな指標化

これまで GPR-Optimizer による自動調整そのもののスタディを目的として、旧来の運転員の調整方法を模倣して、SASE 強度のみを性能指標としていた。次に、ビーム性能指標の置き換えを行うことで、さらに高度なビーム調整を試みた。SASE 強度の増加と共に、得られるスペクトル幅をシャープにすることで、spectral-density を最大化することを目的として、Inline Spectrometer (I-Spec) [7] の中心近傍強度を指標にした。積分する中心ピクセル幅は、増やすとスペクトル幅に対する感度を失い、減らすとショットごとの不定性が大きくなる。これらを比較することで、指標として用いる中央ピクセル数の幅の最適化を行った。Figure 6 は、I-Spec の中心近傍強度を新たな指標として、GPR-Optimizer による自動調整を行う前後の典型的なスペクトル³と、ショットごとの幅の

³ スペクトル幅の広がりに加えて、ショットごとの中心波長のフラツキの効果が含まれる。

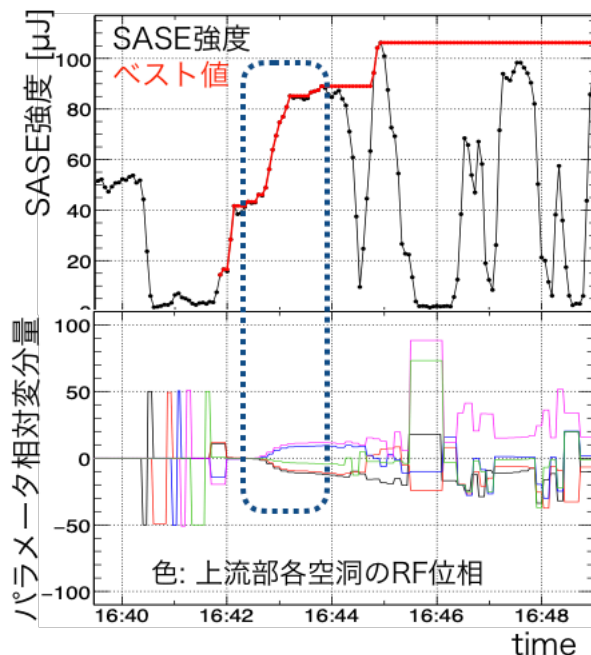


Figure 5: Test of automatic tuning by GPR-Optimizer after the long shutdown period. Horizontal axis shows time and the vertical axis shows the pulse energy (top) and relative variation of each upstream RF phase (bottom). The pulse energy was increased by linking multiple parameters in dashed lines.

分布である。積分値である SASE 強度に代わり、I-Spec の中心近傍強度を指標とすることで、スペクトル幅を細くしつつ (保ちながら)、SASE 強度を伸ばすことができることを確認できた。

これまでのところ、10 keV において 20-30 eV のスペクトル幅で 700 μJ を供給するなど、BL2, BL3 において高品質でピーク性能に近い XFEL を安定的に供給できている。

5. 実装

ここまで説明してきた GPR-Optimizer のソフトウェア的な実装について少し紹介する。Figure 7 は、GPR-Optimizer 実装の概要である。GPR-Optimizer は、ML-core, I/O, Application レイヤーで構成され、オブジェクト指向と階層型実装になっている。最下層の "ML core" は、次の制御パラメータ判断を実装するレイヤーであり、GPR に変えてより先進的な機械学習手法を用いた

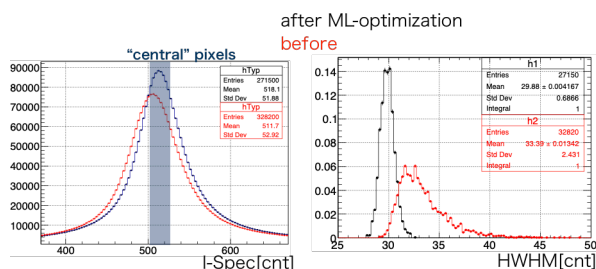


Figure 6: Integrated spectrum (left) and half-width of each pulse (right) before (red) and after (black) the tuning, obtained by maximizing the central intensity of the I-Spec. Both are normalized by the number of pulses. Here, 1 cnt is approximately 0.5 eV.

コアを開発した際にシームレスに置き換えられる狙いがある。例えば、前述した “BoTorch/GPyTorch” 版の GPR コアは、“scikit-learn” 版を継承して作られている。中央の “I/O” 層は、“ML core” レイヤーへのデータ入出力を司るレイヤーで、加速器施設、各種実験毎に異なる入出力制御基盤を実装する。例えば、前述した GPR-Optimizer を用いた関数フィットは、このレイヤーの基底クラスを用いて実装した。最後の “Application” 層は、何をどのように最適化するかなど、各種指標と制御対象を実装するレイヤーであり、SACLA では性能指標としてパルスエネルギー、spectral-density など、制御対象として RF 位相、磁気レンズや四極磁石、アンジュレーターギャップなど各種最適化を実装している。

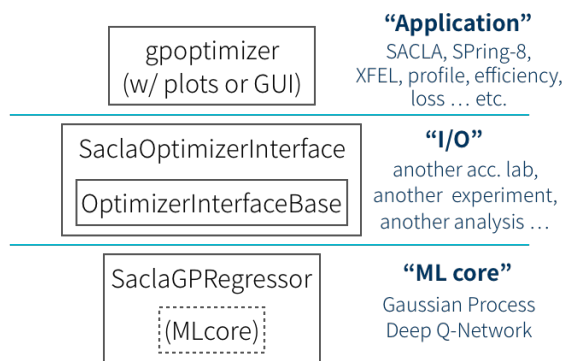


Figure 7: Schematic of the GPR-Optimizer implementation. It is implemented with object oriented and layered structure, and consists of three layers, ML-core, I/O and Application.

このように GPR-Optimizer の実装は、今後の更に高度な機械学習の導入や、他用途/他施設での応用可能性を念頭に置いた設計となっている。このフレームワークを用いて、理化学研究所 RI ビームファクトリー (RIBF) でビーム調整への応用に向けた開発、試験が始まっている [8]。この RIBF での応用においては、上位レイヤーの差分実装 (施設固有の機器制御等) だけで初回の試験から問題なく動作し、一定の成果が得られている。今後は基幹、コア部を含めて共同で開発を進める予定である。

6. 現状と今後

現在は、この GPR-Optimizer を経験の少ない運転員でも GUI から使えるよう整備し、実際の加速器調整に活用、効率的なビーム調整を可能としている。また、10 keV の波長で SACLA において歴代最高となる 1 mJ 達成にも貢献した。

今後の開発について、機械学習活用のさらなる高度化として次の 3つの方向を考えている。1つ目は、さらに多様な用途を目的とした調整への応用で、その一環として (特に XFEL への影響が大きい熱電子銃直下の) 空間プロファイルの最適化などを行う。2つ目は、より良い適切な性能指標の作成である。これまでの結果から、何らかの性能指標を用意すれば、GPR-Optimizer を用いてその性能指標の最適化が実現できているので、望ましいビーム状態をより適切に表す性能指標を用意すれば、さらなる最適化が期待できる。より高分解能なリアルタイム診断系や、ユーザー実験毎に最適化した性能指標などの開発をビームライングループと協力して進めている。3つ目は、Deep Q-Network (DQN) などのより洗練された機械学習手法の応用である。GPR が「パラメータ空間上の性能指標について逐次学習」させたのに対して、DQN では、これまでの“経験”と直近のデータから次にどのように制御すればよいかなど「調整方法そのものについて学習」を行わせる。前者がビーム性能そのもので評価付けを行うのに対して、後者はその時点での操作・判断について評価付けを行う。これはちょうど新人の運転員が出力強度のみを見ながら、網羅的に全パラメータを順番に振って調整を行うのに対して、経験が豊富な運転員が各種パラメータ変動履歴などを見て、効きそうな制御パラメータを直接調整するのに似ている。これにより調整開始直後の出力低下や、非物理領域へのパラメータ設定が抑止され、より効率的に調整が行えることが期待できる。

これと並行して機械学習応用研究の裾野を広げ、基幹部の共同開発を狙う。前述したように GPR-Optimizer はレイヤー構造になっているため、他の施設や放射光加速器以外の他の用途にも基盤部分は応用できると考えている。興味のある人、グループ、施設を積極的に巻き込んで、今後の開発を進めていきたい。

参考文献

- [1] C. E. Rasmussen & C. K. I. Williams, “Gaussian processes for machine learning”, MIT Press ISBN 026218253X (2006).
- [2] T. Ishikawa *et al.*, “A compact X-ray free-electron laser emitting in the sub-ångström region”, Nature Photonics, vol. 6, pp. 540-544, (2012).
- [3] <http://xfel.riken.jp/>
- [4] <https://scikit-learn.org/stable/>
- [5] <https://botorch.org/>
- [6] <https://gpytorch.ai/>
- [7] K. Tamasaku *et al.*, “Inline spectrometer for shot-by-shot determination of pulse energies of a two-color X-ray free-electron laser”, J. Synchrotron Rad. 23, 331-333 (2016).
- [8] 西隆博 他, 第 18 回日本加速器学会年会 TUOA03.