

機械学習手法を用いた XFEL の自動調整・序

高エネルギー実験屋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”した実験屋が、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そ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う。

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、研究内容自体は二の次なので、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していただければ幸いです。

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

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。

2.2 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 1π 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、速度の遅い入射部近傍では速度差を用いた

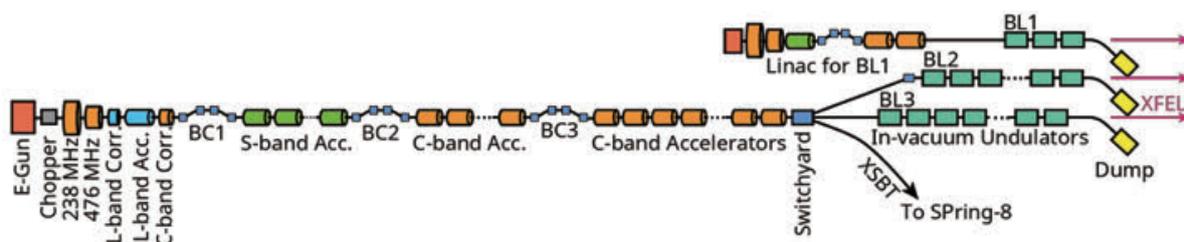


図 1: SACLA の概要。入射部, 3つのシケイン (Bunch Compressor; BC) と Cバンド加速管などからなる線形加速器と挿入光源列からなる。

速度圧縮, 光速になってからは3箇所のシケインでのエネルギーによる軌道長差を用いた圧縮を経て, 約 10 fs 幅, 10 kA の電子ビームを生成している¹。

つまり, XFEL の安定供給とさらなる性能向上を目指すには, 1π mm mrad 以下の超低エミッタンスと, 約 10 fs 以下のパンチ長を高い精度で制御, 維持する必要がある。SACLA の供用運転以降, XFEL の安定的な発振を目指して各種改良が行われてきたが, fs レベルともなると, 各種機器やメタル/光ケーブルなどの小さな温度, 湿度依存性でも出力性能のドリフト要因となる。そのため, 加速器機器のパラメータは理論値を設定するだけでなく, どうしても運転員の手作業での細かな調整が必要となっていた。

3 これまでの XFEL 運転と問題点

XFEL のビーム性能として, X 線光子のエネルギー (周波数) と総数の積に相当する, X 線の総エネルギー: SASE 強度 [J] を用いる。これまでは主に XFEL の SASE 強度 (の平均値, トレンド) を性能指標として調整を行い, 運転を行ってきた。そうすることで, 例えば 10 keV の SASE で平均強度 $700 \mu\text{J}$ (@BL3) を比較的定常的に供給できるようになっていた。しかし, 私にも身に覚えがあるが, 実験ユーザーは XFEL 強度がある一定水準以上に達して, その伸びが穏やかになってくると, 次はその強度を前提として, 更に “高品質” なビームを安定的に求められるようになる。それは例えば XFEL の狭いスペクトル幅, 小さなパルスごとの強度のフラつきであったり, XFEL ビームポインティングの安定性, 空間プロファイルの狭い幅, ガウシアンライクな “綺麗さ” であったりする。これらのビーム品質の良し悪しが常に同じように連動すれば良いが, 残念ながらそうとは限らない。時には空間プロファイル上の複数の異なる励振の種が, やや異なる波長で増幅した結果, SASE の全体強度としては伸びるが, スペクトル幅は広がり, 空間プロファイルも芯が複数ある崩れたものになる場合もある。SASE

¹総電荷が約 1/10 になっているのは, 圧縮, シケインの過程での効率と, 電流分布の形状による。

の出力強度は伸びるが, 更に高度なビーム品質においては良かったり, 悪かったりというのが私が転属してきた時の状況だったと理解している。

4 XFEL 性能の指標化

各種加速器パラメータの時間変動こそデータベースに残して, トラブル発生時にはその原因究明に利用することはあるが, 概して高エネルギー実験領域で多用する, 多くのパラメータの相関を系統的に調べたり, ショットごとのデータを統計的に解析するというようなアプローチは, 日常的には用いられていないようである。そもそもの研究領域の背景として, 加速器や測定器のデータに対する意識が, 高エネルギー実験領域と異なる部分があるのかもしれない。

上で述べたように, これまで XFEL の調整は主に SASE の全体強度のみを指標として調整が行われ, エネルギースペクトルや, 空間プロファイルは, 少なくとも XFEL の調整・運転に関してはいえば, あくまでも参考程度の補助情報に過ぎなかった。もちろん実験ユーザーのために, エネルギースペクトルや空間プロファイルをパルスごとに測定する測定器は存在するが, 加速器運転のセキュリティ上の観点から, 加速器制御系のネットワークは, 外部ユーザーがアクセスしうるビームライン/実験系ネットワークとは切り離すべきという原理論や, 加速器系とビームライン/実験系という部門間の障壁などにより, これまでは積極的にこれらの測定器のデータを加速器運転で活用しようという議論にはならなかったようである。

一方私は加速器の素人であったが, これはある種, 何系の人という “専門” (色) がないという意味でもあり, これを最大限活かして, 巨大な加速器・実験施設の各部の研究者・専門家を横断的に跨ぐプロジェクトとして進めることにした。

4.1 実験系測定器のデータ

XFEL 実験施設にはユーザーが各々の試料や、必要に応じて測定器を持ち込んで実験を行っているが、(光)ビームライン/実験系に施設として常設している測定器の代表的なものに Inline Spectrometer (I-Spec) と S-Creen Monitor (SCM)[6, 7] があり、前者はエネルギースペクトル、後者は2次元空間プロファイルを測定する。はじめにこれらの測定器からどのようなデータが得られるかを確認する。

I-Spec は XFEL ビーム上にダイヤモンド多結晶薄膜を配置し、ごく一部のレーザー光がその波長に応じて異なる角度・場所へ回折する。この光を multi-port CCD で測定することで、XFEL ビームの中心波長を決定することができる。図 2 は I-Spec の測定データの例である。回折像を切り出すことで、エネルギースペクトルの情報にアクセスすることができる。

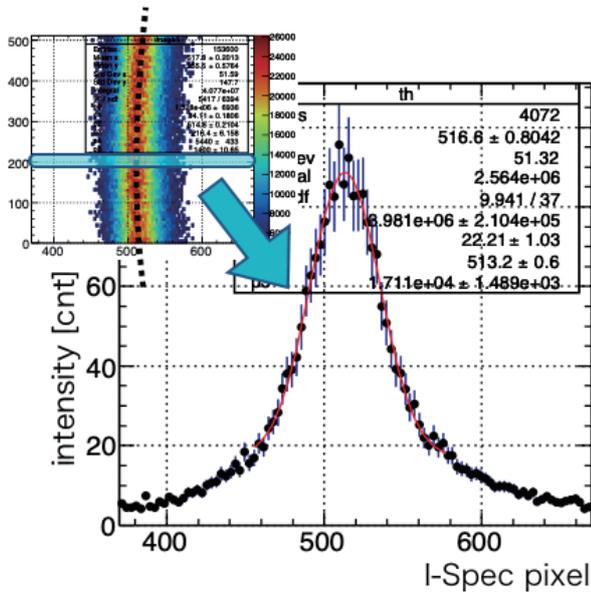


図 2: I-Spec で得られる回折像の例 (左上)。切り出すことでエネルギースペクトルにアクセスできる (右下)。

SCM は不純物としてホウ素を含むダイヤモンド薄膜を利用した蛍光スクリーンであり、XFEL の空間プロファイルを測定できる。図 3 は SCM の測定データの例である。

図 4 は I-Spec で得られたスペクトル幅と、SCM で得られた空間プロファイルの Y 方向の広がり (RMS) の相関 (5000 ショット、約 3 分) である。図中右側の相関が見られる部分は、6 次元位相空間上の別の領域にいる電子群のレーザー増幅が進み、それが別波長となってメイン波長の分布に重なる結果、エネルギースペクトルが太って見えるということを示唆している。このことは、別の測定器 Single Spectrometer (S-Spec)[8] の測定によって

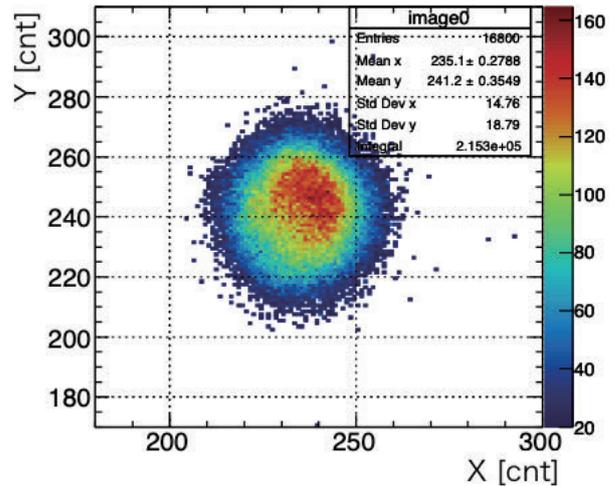


図 3: SCM で得られる空間プロファイルの例。

も²、直接確認された (図 5)。まさしく上記で例にした、SASE 強度を伸ばそうとした結果、異なる種の励振をも促進し、スペクトル幅と空間プロファイルが崩れている状態である。常設されている I-Spec と SCM のショットごとのデータの相関を調べることで、スペクトル幅の増大や空間プロファイルの乱れが、何を原因として起こっているかの判断材料になることを示した。

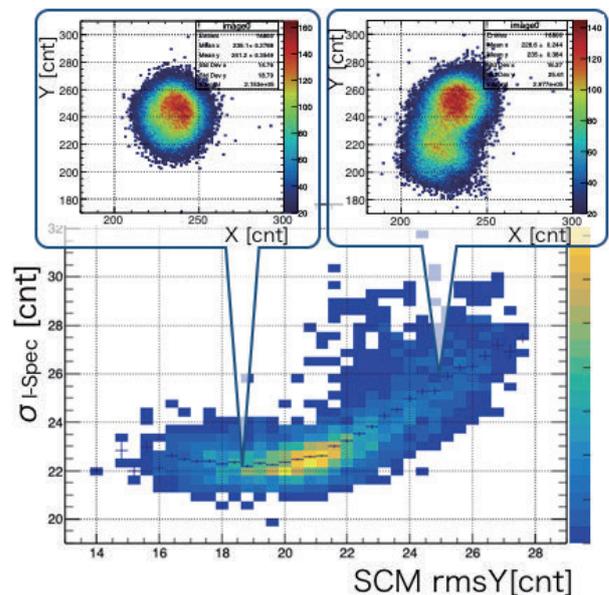


図 4: I-Spec で測ったスペクトル幅と SCM で得た空間プロファイルの広がり (RMS) の相関。広がり異なる 2 点での典型的なプロファイルを合わせて掲載する。

²ただしこの測定器は、XFEL を光学的に一部分岐する、測定には機器の繊細な微調整が必要などの理由により、残念ながら常設はできない

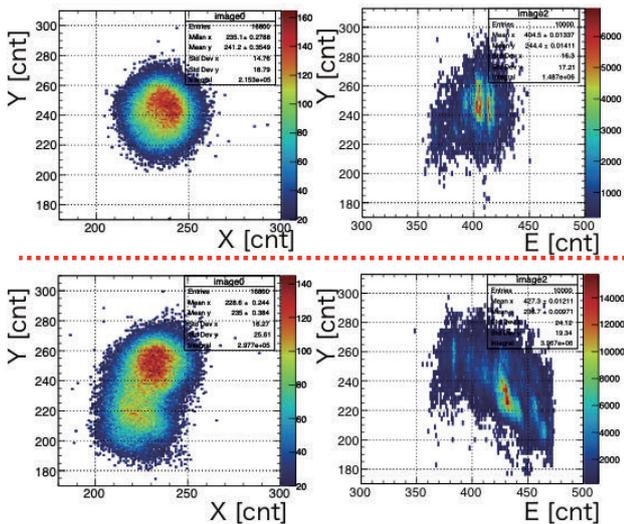


図 5: 空間プロファイルが異なる 2 つのショット (左) に対応する, S-Spec のデータ (右)。横軸がエネルギー, 縦軸が Y 方向の位置。上の例はエネルギーが Y 方向の位置に依らないのに対して, 下の例は Y の位置に応じて異なる波長で励振していることが分かる。

4.2 XFEL 測定器 生データのリアルタイム処理

ビームラインが設置している測定器のデータが加速器の調整に有益であることが分かったわけだが, これらのデータはビームライン側からのリクエスト時に, 必要な測定器のデータのみをオフラインにストアするという形式でしか手に入らない。「これから 1000 ショット分のランを走らせる」というような具合である。しかも先に述べたとおり, 加速器制御とビームライン/実験系のネットワークはセキュリティの観点から切り離されており, 基本的にアクセスできない。そこで, 関係各所と交渉を進め, ビームライン/実験系のネットワーク上に私が専有できる計算機を配置し, その場で下処理を行い必要なデータを抽出し, その情報を限定的な手段を用いて加速器側に流すことにした。

ビームライン各種測定器の生データは, Data-Handling Server に一時的にキャッシュされ, 通常は必要時のみ取得, 基本的には垂れ流しになっている。この生データからモニターデータを抽出し, 加速器側からリアルタイムにアクセスするには, SACLA が 60 Hz 運転時には機器あたり最大 1 Gbps 超, ビームラインあたり最大 (S-Spec も含めて) 3 Gbps 超を安定して捌く必要がある。非同期に流れる各測定器のデータを順に処理しては, とても繰返周期に間に合わないため, イベントビルド, RoI 抽出, モニターデータの作成, オンラインモニター, データストアなどを全て別スレッドで行うマルチスレッド処理で実装を行った。図 6 は, XFEL 測定器 生データのリアル

タイム処理システムの概要である。似たような経験は高エネルギー実験領域時代の KOTO 実験 [9], JSNS² 実験 [10, 11] でもあったので, 比較的容易にこのような全体図を構想して実現することができた。これにより, 4.1 節で見たようなデータ, 相関を全ショットについて, リアルタイム取得し, 加速器の運転・調整に活用できるようになった。

5 機械学習手法を用いた自動調整の研究へ

XFEL 加速器の調整や運転のために, エネルギースペクトルや空間プロファイルに関するデータが, ショットごとにリアルタイムで加速器側から処理・モニターできるようになり, 目的に応じたビームの性能を点数化・指標化できるようになった。ここで, 私本来なら次は加速器の調整パラメータとの 1 次元や 2 次元の簡単な相関を運転員の制御コンソールに出力し, それらを指標として調整を行うことで, (機械学習手法も先の視野にいれつつ) もう少しロバストな統計的アプローチというステップを踏んで研究を進めるつもりであった。しかし, 時代の流れなのか, (放射光) 加速器領域においても機械学習手法を用いた研究が各所で始まっている。そういった背景もあり, 私としては一足飛びな感はあるが, リアルタイムに取得できるようになった測定器データと, 機械学習手法を用いた加速器の調整・最適化の研究を始めることになった。「始める」と書いたのは読んで字のごとく, 私は機械学習のエキスパートではなく, 始めたばかりの素人だからである。

5.1 Gaussian Process Regression を用いたビーム性能の最適化の概要

こんにちは, 機械学習というと多くの人は深層学習 (Deep Learning) に類する手法を想像されたかもしれないが, 私が用いるのは Gaussian Process Regression (GPR; ガウス過程回帰) という手法である。図 7 は, この GPR における 1 次元の例である。適当な関数から得た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 では特定の関数形を仮定しない³。また, 各入力に対する中央値と共にその不定性を評価することができる。ここでは, 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, 回帰分析で得た中央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) を計算している。

³length-scale など kernel の hyper-parameter は存在するが, その決め方など詳細はここでは割愛する。

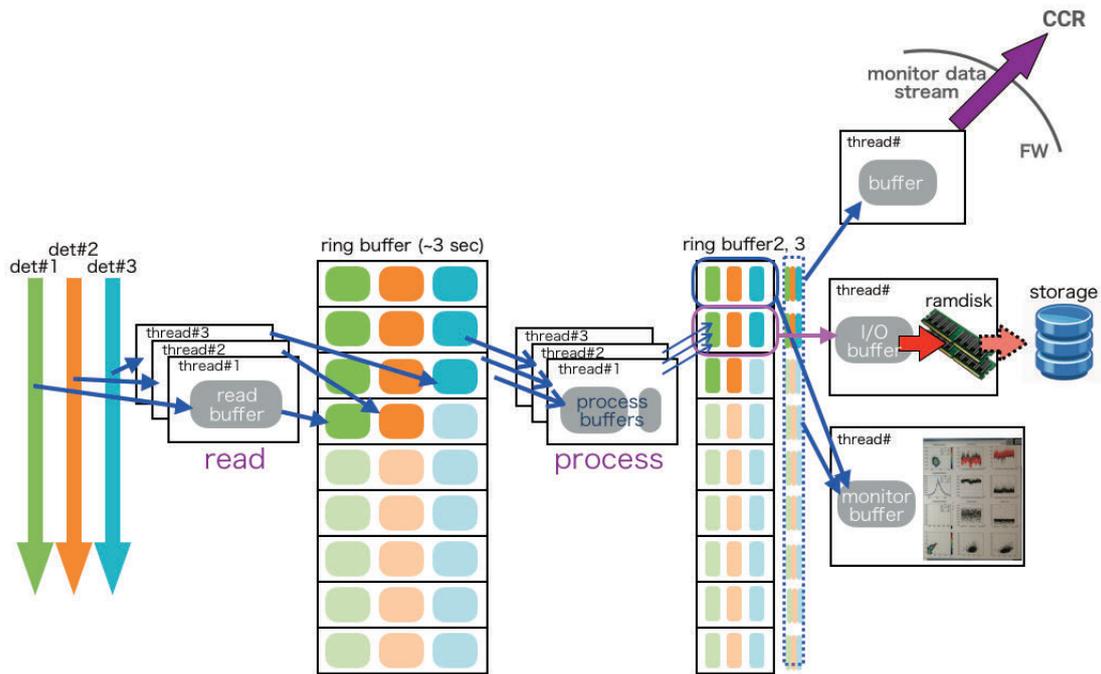


図 6: XFEL 測定器 生データのリアルタイム処理システムの概要。

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、範囲から適当な先見データを取る
2. 先見データから 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

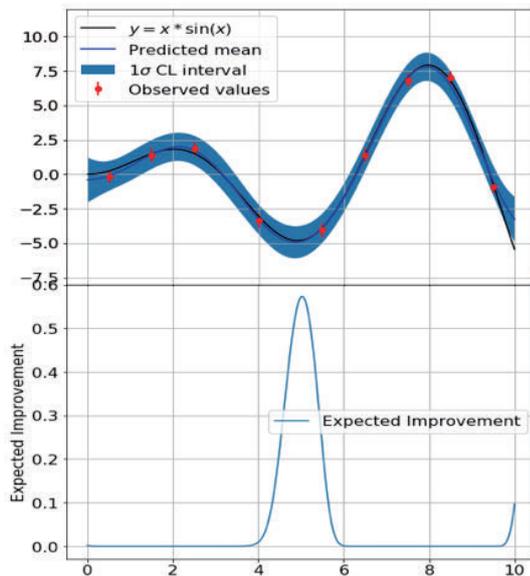


図 7: GPR の 1 次元での活用例。上: 適当な関数 (黒破線) の誤差付きデータ (赤点) と、GPR により求めた中央値 (青線) と不定性 (青帯)。下: 求めたモデルによる Expected Improvement (EI) の計算値。

例では 1 次元であった入力を、多次元に拡張して加速器の各制御パラメータを割り当て、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。身も蓋もない言い方をすると、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賢い版である。そんな言い方をすると、「機械学習じゃないじゃないか!」と言い出す人がいるかもしれないが、Wikipedia にも「ガウス過程は機械学習における教師あり学習の回帰分析に応用される」とある [12]。この 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がある。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)にハマリ得る。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。

5.2 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[13] を用いて、独自に実装を始めた⁴。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 (図 7) 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、滑らかな曲線っぽいものを描いている。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、指数関数的に増えてしまう。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 reasonable⁵ な数に抑えることができる。

こうして実装した GPR を用いた Optimizer を用いて簡単なテストを行ったのが図 8 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、秒やそれ以上掛かるもの⁶もあるため、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も、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特徴の側面を表している。

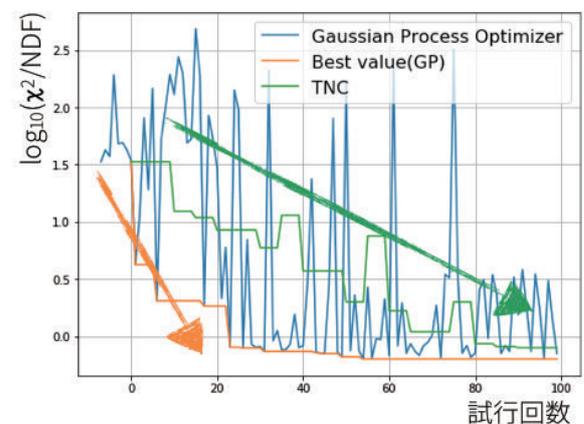


図 8: 自作した GPR-Optimizer 実装のテスト。誤差付きデータのガウス関数フィットを自作 Optimizer を用いて行い、古典的な降下法の一つ TNC と比較した。横軸は試行回数 (ここではガウス関数呼び出し回数)、縦軸は $\log_{10}(\chi^2/\text{NDF})$ 。青線が GPR-Optimizer、橙線がその最小値の履歴、緑線が古典的降下法の一つ TNC での結果。

このあと、後述するビームによる試験などを繰り返しながら、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⁷、ビームとしてはトンデモな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

⁴ 前述したように加速器分野でも似たような取り組みは各所で始まっている。某施設の Optimizer は丁寧に公開されていたので試してみたが、特定の条件下のみの分岐処理など、環境・施設依存の処理が各所にハードコードされており、公開されていても、とてもではないが違う環境・施設下で本人たち以外が使えるような代物ではなかった。

⁵ 単位グリッドの大きさを length scale 程度より極端に小さくする必要は無い。

⁶ 磁石の励磁量や挿入光源の開口をかえる精密モーターなど。

⁷ 図 7 にも垣間見えるように、パラメータの上下下限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・角の点を選んでしまう。

各種コーディングの工夫を行っても、9~10パラメータ付近で計算時間 and/or メモリ量の限界を迎える。scikit-learn に代わり、BoTorch[14]/GPyTorch[15] を用いることで⁸、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動作を確認した。

5.3 Optimizer のビーム試験

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。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して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、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 強度である。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うと、制御パラメータが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。

図 9 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。RF 位相、磁気レンズや四極磁石など、扱えるパラメータの種類や数を増やしながらか同様の試験を行った。

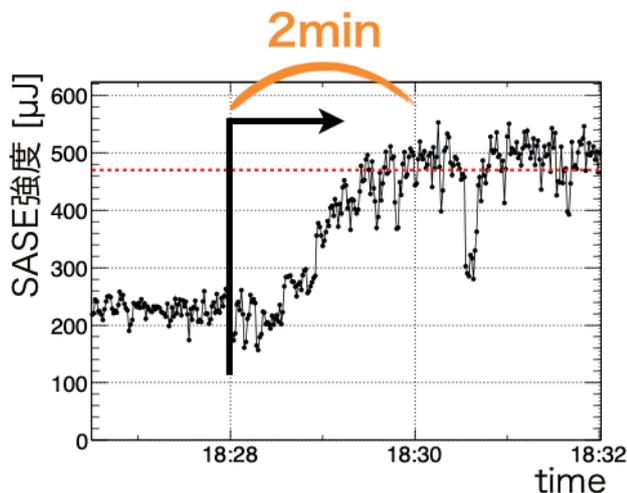


図 9: GPR-Optimizer による加速器の自動調整のテスト。入射部近傍の位相 3 パラメータと磁気レンズの計 4 パラメータを振って人為的に出力を低下させ、その回復を行った。破線は元の低下前の出力レベル。

⁸この指数関数的に増える計算量は、当該分野でも共通の課題であり、様々な工夫や近似が提唱されている。私はこのライブラリが実装する、最大 EI を与える入力パラメータの導出をブラックボックス的に使っている。

こ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を再現しない。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持って評価を行った。

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、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。図 10 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、数十 μJ の状態から調整を行った。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見ることができている。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。

5.4 ビーム性能の新たな指標化

これまでは 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を目的として、I-Spec 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傾向にある。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。図 11 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⁹と、ショットごとの幅の分布である。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。

⁹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ことに注意。

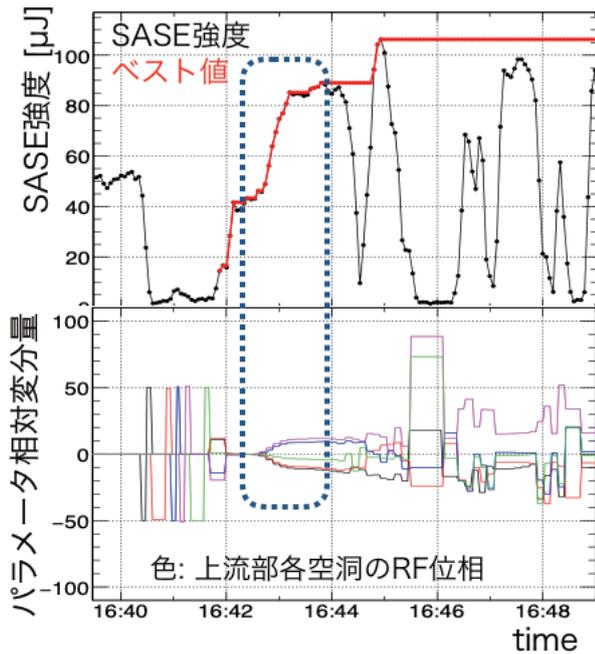


図 10: 加速器停止明け、立ち上げ時の GPR-Optimizer による自動調整のテストより。横軸は時刻、縦軸は SASE 強度 (上) と上流部各 RF 位相の相対変分量 (下)。破線部: 複数パラメータを連動させて、出力をのぼしている。

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。

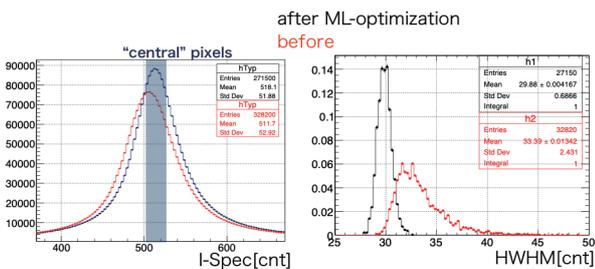


図 11: I-Spec の中心近傍強度を指標とした調整前後の I-Spec の積算出力 (左) と、パルスごとの半値半幅 (右)。共にショット数で規格化。赤: 調整前, 黒: 調整後。ここでは 1 cnt はおおよそ 0.5 eV。

5.5 現状と今後の展開

この GPR-Optimizer を用いた自動調整は、(私が不在でも) 運転員が GUI アプリケーションを操作して、各種調整が平常利用できるようになっており、さらに高度な調整、汎用な用途、複数の BL で利用できるように準備

を進めている。ちょうどこのような進展があったにも関わらず、新型コロナ禍で様々な国際会議や研究会などの発表の機会が失われていたところに、お声がけをいただき、今回このように寄稿させていただくこととなった。

上記で述べたように、GPR-Optimizer を用いた自動調整は、その枠組みが一段落して、様々な用途に拡張・応用されていく段階にある。私は GPR-Optimizer の開発から一歩引いて、新たな機械学習コア: Deep Q-Network (DQN) に類する手法を用いた、自動調整の研究を始めるつもりである。ようやく (みなさんがはじめに期待したであろう) Deep 系に着手するわけである。さきの Gaussian Process による手法が、「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 による自動調整は、これまでの「経験」と直近のデータから次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とに対応する。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。

今回紹介した GPR-Optimizer は、既存データから次の制御パラメータを決めるコア部、入出力 (制御と測定) を繰り返して最適化を行う Optimizer 部、実際の用途に応じて評価付けと機器操作を行うアプリケーション部の各種レイヤーからなる。DQN によるあらたなコア部の開発を進めることで、既存の Optimizer 部、アプリケーション部は転用できると期待している。またこのような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。興味がある方はお声がけいただければ、今後 DQN などの新しいコア部の開発を進めるにあたり、協力していける箇所があるのではないかとと思われる。

6 放射光加速器の今後

3 GeV 次世代放射光施設計画 [16] が 2023 年度中の稼働を目指して進められており、2018 年度には仙台市東北大学青葉山新キャンパス内にて整備用地の造成が開始された。この次世代放射光施設には、SACLA で導入された各種技術の積み上げた実績と、その経験を活かした新技術が導入される。そのプロトタイプ加速器として、同じく SPring-8 サイトにあるニュースバルのための新入

射器を現在建設中である¹⁰。2022年からはこの3GeV次世代放射光施設の建設が本格化する。また、3 GeV次世代放射光施設にはその後控える SPring-8 アップグレード [17, 18] に向けて進められてきた新開発技術の一部も先行導入される。つまり3 GeV次世代放射光施設は、さらに次の世代の放射光加速器のプロトタイプを一部兼ねていることになる。また、SACLA アップグレードに向けた開発も始まっている。このように大型の放射光施設計画においては、長い停滞期間が生じることが無いよう、各々の開発・建設・運転のフェーズが少しずつ並行に進められている。

7 高エネルギー実験屋が異分野転生したら...?

これまでの機械学習関連のトピックを通して見てきたように、高エネルギー実験領域から、全く異なる放射光加速器という異分野転生した私は、素人であるという弱みさえも活かして、概ね楽しく研究を進められているし、当該分野に貢献できているのではないかと思う。

今回、私の場合は突然の外部要因によって、他分野へ目を向けざるを得なくなったわけだが、一般にいざ他分野への進出を本気で考えると、自分はその分野の全くの素人なのにやっていけるだろうかなど不安になることもあると思う。でも、そうやって他分野へ飛び出した今こそ、私は自信を持って言えることがある。「今の分野、実験領域で自分で考え、目一杯頑張ってきたのなら、どこの分野に行っても何の心配も不要である」と。

一つには、“研究”とは、何かの領域で先端を走っていることだと私は思う。色々な人が日々様々なことを考え、その最先端を形成しているが、簡単に成せることは最先端にはなりえないので、必然的に色々な分野で最先端には似通った問題が現れる。そういった問題には、近いアプローチやノウハウが有益なこともしばしばある。私の場合は、高エネルギー実験在籍時に測定器データの読み出しボード、Firmware、DAQ 周りに携わっていたため、放射光加速器分野に転向後は、重要な基幹技術の一つである Low Level RF (LLRF) にすぐに携わることができた。局所的な最終目的が少し異なるだけで、大局的にみるとやっていることは同じである。さすがにお給料をもらいながら、何ヶ月も勉強だけしてアウトプットがないというのは許されないかもしれないが、何か一つでも現場の仕事として貢献できる基盤があると、それをベースとして仕事に携わりながら知見を広げていくことができる。

もう一点、当該分野の素人であることについて。前述したように、あなたがもしこれまで実験で、自分で考え、目一杯頑張ってきたなら、何の問題もない。これまで自分の分野で専門性のパイを大きくしてきたのなら、自分が素人であるその分だけ、他分野の研究においてあなたは独自性を備えていることになる。新しい分野の素人であることは、弱みであると共に、強みでもあるのだ。また、最先端研究の一步内側、当該分野の“基礎知識”にあたる箇所は比較的簡単に獲得することができる。そうするとあなたのパイはますます大きくなる。

私が比較的小・中規模実験に属していたということもあるが、高エネルギー実験屋は基本的には実験に関する何から何まで全て自分たちでやりたがる集団だと思う。最近でこそ、実験の大型化、長期化で役割が固定化して専門家化する傾向にあるが、それでもまだ小・中規模実験では、あるときはセンサー開発、あるときはシミュレーション、またあるときはエレクトロニクスとDAQをやり、別の日は材料開発などなど。そういう意味でこの分野の人は、他分野へ移ることに向いていると思う。私達は特定の知識に基づく専門家なのではなく、あらゆることを対象とした研究のプロなのではないかと感じている。

最後は、自分の本当の興味の中心がどこにあるかだと思う。私は結局のところ、わ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だったのだと思う。

8 終わりに

思いがけない事態をきっかけに放射光科学、加速器科学という全く異なる分野に“転生”することになったわけだが、当該分野の素人であるという当初の心配・懸念は全くの杞憂に終わり、今となってはむしろ他分野での経験という独自性が強みですらあると感じられる。このような研究者としての土壌を育てていただいた、高エネルギー実験分野でお世話になった方々には感謝の言葉しかない。

おわりに、突然の事態に困り果てている私の相談に親身になってご尽力いただき、自分では想像もつかなかった、このような未知の可能性を示していただいた中家剛氏、山中卓氏、どこの馬の骨とも分からない、他分野のポストドクだった私を受け入れ、全くの素人に多くの知識と機会を与えていただいた、田中均氏、稲垣隆宏氏をはじめとするSACLA/SPring-8、放射光科学研究センターと高輝度光科学研究センターの皆様には感謝いたします。最後に、近隣の民間企業も含めて検討する私に対して、私の研究活動を続けさせるべく、遠方での単身赴任生活へ送り出してくれた(ている)、妻と子どもたちに感謝します。

¹⁰SACLA-SR 入射に伴う、1 GeV 線形加速器とシンクロトロン の廃止に伴う、ニュースパル専用の新入射器。

参考文献

- [1] 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).
- [2] <http://xfel.riken.jp/>
- [3] H. Tanaka *et al.*, “Top-up Operation of SPring-8 Storage Ring with Low-Emittance Optics”, in *Proc. European Accelerator Conf. (EPAC’06)*, Edinburgh, Scotland, June 2006, pp. 3349-3361, THPLS034.
- [4] <http://www.spring8.or.jp/ja/>
- [5] <http://accwww2.kek.jp/oho/oho13/text.html>
- [6] K. Tono *et al.*, “Beamline, experimental stations and photon beam diagnostics for the hard x-ray free electron laser of SACLA”, *New J. Phys.* 15 083035 (2013).
- [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] Y. Inubushi *et al.*, “Determination of the Pulse Duration of an X-Ray Free Electron Laser Using Highly Resolved Single-Shot Spectra”, *Phys. Rev. Lett.* 109, 144801 (2012).
- [9] J. Comfort *et al.* (J-PARC E14 Collaboration), “Proposal for $K_L \rightarrow \pi^0 \nu \bar{\nu}$ Experiment at J-PARC” (http://j-parc.jp/researcher/Hadron/en/pac_0606/pdf/p14-Yamanaka.pdf) (2006).
- [10] M. Harada *et al.*, “Proposal: A Search for Sterile Neutrinos at J-PARC Material and Life Science Experimental Facility”, *physics.ins-det/1310.1437* (2013).
- [11] S. Ajimura *et al.*, “Technical Design Report (TDR): Searching for a Sterile Neutrino at J-PARC MLF (E56, JSNS2)”, *arXiv:1705.08629[physics.ins-det]* (2017).
- [12] <https://ja.wikipedia.org/wiki/ガウス過程#応用>
- [13] <https://scikit-learn.org/stable/>
- [14] <https://botorch.org/>
- [15] <https://gpytorch.ai/>
- [16] N. Nishimori, T. Watanabe and H. Tanaka, “A Highly Brilliant Compact 3 GeV Light Source Project in Japan”, in *Proc. 10th Int. Particle Accelerator Conf. (IPAC’19)*, Melbourne, Australia, May 2019, pp. 1478-1481.
- [17] SPring-8-II Conceptual Design Report, <http://rsc.riken.jp/pdf/SPring-8-II.pdf>
- [18] H. Tanaka *et al.*, “SPring-8 Upgrade Project”, in *Proc. 7th Int. Particle Accelerator Conf. (IPAC’16)*, Busan, Korea, May 2016, pp. 2867-2870.