

ILC 電子ドライブ陽電子源設計における機械学習を用いた全体最適化 OVERALL OPTIMIZATION USING MACHINE LEARNING IN THE DESIGN OF ILC ELECTRON-DRIVEN POSITRON SOURCE

黒口俊平^{A)}, 栗木雅夫^{A)}, 高橋徹^{A)}, 田地野浩希^{A)}, リプタックザカリー^{A)},
浦川順治^{B)}, 榎本嘉範^{B)}, 大森恒彦^{B)}, 福田将史^{B)}, 森川祐^{B)}, 横谷馨^{B)}

Shunpei Kuroguchi^{A)}, Masao Kuriki^{A)}, Tohru Takahashi^{A)}, Hiroki Tajino^{A)}, Zachary Liptak^{A)},
Junji Urakawa^{B)}, Yoshinori Enomoto^{B)}, Tunekiko Oomori^{B)}, Masafumi Fukuda^{B)}, Yu Morikawa^{B)}, Kaoru Yokoya^{B)}

^{A)} Hiroshima University Graduate School of Advanced Science and Engineering (Hiroshima Univ. ADSE)

^{B)} High Energy Accelerator Research Organization (KEK)

Abstract

In the ILC electron-driven positron source, obtaining a large number of positrons per incident beam is crucial to prevent target damage. While positron source design traditionally relies on physical simulations to track accelerator particles, this study focuses on using machine learning for more efficient optimization and trend identification. In this study, instead of physical simulations, we constructed a surrogate model to provide guidance for the ILC electron-driven positron source design using a small dataset. We used this model to predict positron capture rates and determine the optimal parameters for maximizing them.

1. はじめに

現在、国際リニアコライダー (ILC; International Linear Collider) は、ヒッグス粒子やトップクォークの大量生成、超対称性粒子の発見を目指す高エネルギー物理学の次世代主要計画であり、北上山地に建設を予定されている。リニアコライダーは、シンクロトン放射によるロスがないためリング型コライダーの限界を超えて高エネルギーを実現できるが、ビームの再利用ができないため、時間あたりに必要な粒子数が桁違いに大きい。

ILC での陽電子生成方法には、高エネルギーの電子ビームを、高密度の金属標的に照射することで標的の内にて対生成反応を起こし、陽電子を生成する電子ドライブ方式が検討されている。高エネルギーの電子ビームを Driver Linac から標的に入射し、標的で生成された陽電子は Capture Linac、シケイン、Booster Linac、ECS (Energy Compressor Section) を通過したのち Damping Ring (DR) を周回し衝突点へと輸送される (Fig. 1) [1,2]。ILC 電子ドライブ陽電子源では、対生成反応により陽電子を生成するが、金属標的の破壊を防ぐため、入射した電子ビームあたり多くの陽電子を得ることが重要である。ECS 出口の DR アクセプタンスを満たす陽電子数から入射電子数を割った数、陽電子捕獲率を大きくすることで、標的破壊を防ぎつつ大量の陽電子の生成を可能にする。

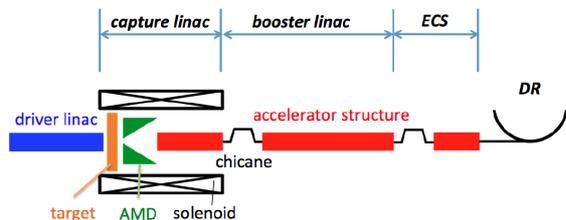


Figure 1: Schematic layout of the ILC electron-driven positron source [1].

陽電子捕獲率の計算の際には、ターゲットでの電子ビームの制動放射から対生成による陽電子生成は Geant4 [3]、ターゲット直後から Capture Linac 出口までは GPT (General Particle Tracer) [4]、シケインから ECS までは SAD (Strategic Accelerator Design) [5]、という各セクションで適した三つのシミュレーションソフトを使用して、一連の物理過程のシミュレーションを行っている。これまでの研究ではシミュレーションを通して各部分ごとに逐次的に最適化を手動で行っており、人の手が入ることで時間を要していた。また、物理シミュレーションではより現実に近づけるほど、より多くの計算量が必要であり、傾向を見るのにも時間がかかる。加速器の膨大なパラメータにおいては、部分的に最適化したとしても全体最適であるとは限らない。

したがって、設計においてはより現実に近い条件で、効率的に全体最適化し、すぐに傾向が見れることが重要になる。そこで、物理シミュレーションの代わりに物理シミュレーションの結果をサンプリングし機械学習を用いてサロゲートモデル (代理モデル) を構築し、設計に利用することを目指した。サロゲートモデルを利用することで高速かつ高精度に最適化することが可能となる。一方で、高精度なサロゲートモデルを構築するには通常多くのデータセットが必要である。ANL の AWA の例ではランダムなデータセットを用いてサロゲートモデルからパレート最適解を求めるには、少なくとも 5000 個程度以上が必要であることがわかっている [6]。そのため、少ないデータセットで高精度なサロゲートモデルを構築することが重要であるが、陽電子捕獲率が高くなるパラメータ空間近傍でのみ精度が高ければいいことに着目した。本研究では、少ない物理シミュレーションからサロゲートモデルを構築し、それを元に陽電子捕獲率が最大となるパラメータを探索し、その付近でまた物理シミュレーションを回しサロゲートモデルを構築する、というのを繰り返す手法を用いた。

2. CAPTURE LINAC におけるビームローディング補償

粒子が加速されると空洞に減速場を誘起するビームローディングという現象が起こるため、それを補償することが課題となっている。Capture Linac では先行研究で Superfish を用いて設計された APS 空洞のパラメータを用いて加速管を通過する粒子のトラッキングを GPT により行い、求められた粒子分布からビームローディング電流の計算を行った。GPT にて模擬された Capture Linac は加速セル 11 セル、結合セル 10 セルの計 21 セルで一本の加速管とし、この加速管 36 本で構成された。生成直後の陽電子はばらつきが大きいため、Capture Linac にて捕獲を行い、約 250 MeV まで加速を行う。先行研究より大口径の APS (Alternate Periodic Structure) 空洞とした。APS 空洞は $\pi/2$ モードの定在波加速空洞で、大きなアパーチャーと高い加速勾配、群速度最大の特徴を持つ。電場の生じるセル (加速セル) を長く、電場の生じないセル (結合セル) を短くすることで、より効率的に粒子を加速することが可能になっている。

Capture Linac では粒子はオフレストの状態に捕獲されるため、RF に振幅変調および位相変調をかけることによりビームローディングの補償を行う。ビームローディング電流は Capture Linac 内での集群の様子や捕獲される粒子数によって変化し、加速勾配に関してもビームローディング電流の大きさによって値が変化する。そのため、より正確なビーム電流及び加速勾配を求めるためにイタレーション (繰り返し計算) によるシミュレーションを以下の方法で行った。手法は去年の学会での報告 [7] から計算手法をいくつか改善した。

1. 空洞電場を加速管ごとに決定し、GPT で計算。
2. 求められた粒子分布からビームローディング電流 I 、ビーム位相 θ 、位相変調量 φ を求める。
3. 2 で得られた結果から空洞電場を決定し、再び GPT にて計算。
4. 2 から 3 の計算を 10 回繰り返す。

このようにして得られた結果の例が Fig. 2 である。

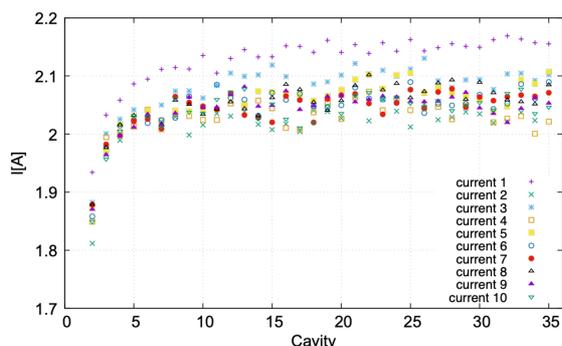


Figure 2: Beam loading current per cavity. Colors are separated per iteration.

Figure 2 は横軸に加速管の本数、縦軸にビームローディング電流を示している。ビームローディング電流は Capture Linac 中流から下流にかけてほとんど一定の

値を取っていることがわかる。また本研究では GPT のイタレーションによる計算に時間がかかることから、RF の初期位相に 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8 の五つを取りそれぞれ 10 回ずつのイタレーションを行った。今回示した結果は初期位相が 0.5 の場合のプロットである。イタレーション回数を増やすと収束すると予想したがある範囲内で振動する結果となったため、データのばらつきを考慮し、Capture Linac 出口以降の SAD シミュレーションに用いる粒子分布の選定には、イタレーション 3-10 回目の各加速管の分散の和が一番小さくなるイタレーションのデータを使用した。

3. 手法

サロゲートモデルの構築及び最適化の手法は、先行研究の手法 [6] を参考にして、以下の手順で行った。

1. 範囲内のランダムなパラメータを設定し、物理シミュレーションによりデータセットを取得。
2. データセットからニューラルネットワークでサロゲートモデルを構築。
3. サロゲートモデルから遺伝的アルゴリズムにより陽電子数が最大となるパラメータに最適化。
4. 最適なパラメータ近傍で物理シミュレーションを実行しデータセットを取得し以前のデータセットに追加。
5. 2 から 4 を繰り返す。

Figure 3 に手法の概要図を示す。

3.1 初期のデータセットの取得

イタレーションの 0 回目、初期データセットとしては、物理シミュレーションを回して、訓練用データセットを 20 個、検証用データセットを 5 個の計 25 個のランダムデータを用いた。入力パラメータは、今回は本手法が有効かどうか確かめるために 4 つという少ないパラメータ数にした。入力パラメータは Capture Linac の RF の初期位相、Capture Linac 後のシケインの偏向角、Booster の電圧、ECS のシケインの偏向角である。入力パラメータの範囲は、手動で最適化していたパラメータ付近とした。遇つかパラメータは ECS 出口の DR アクセプタンスを満たす陽電子数とした。今回は 1000 で割れば陽電子捕獲率となる。前述したように上流 GPT の計算はビームローディング電流を考慮すると時間がかかるため先に計算しておき、Capture Linac の位相を変えた値を先に計算しておいた位相に最も近いの GPT の結果を用いて SAD のシミュレーションを行った。今回のデータセットからは、SAD のエラーが起きたときも陽電子数が 0 になるプログラムになっていると思われること、陽電子数が高いパラメータ空間で最適化すればいいことから、陽電子数が 0 になるものを除いた。

3.2 ニューラルネットワークによるサロゲートモデルの構築

ニューラルネットワークによりデータセットからサロゲートモデルを構築した。各入力パラメータはパラメータを制限した範囲でそれぞれ -0.5-0.5 に正規化し、正規化した状態でニューラルネットの学習と遺伝的アルゴリズムに用いた。ニューラルネットの構成は中間

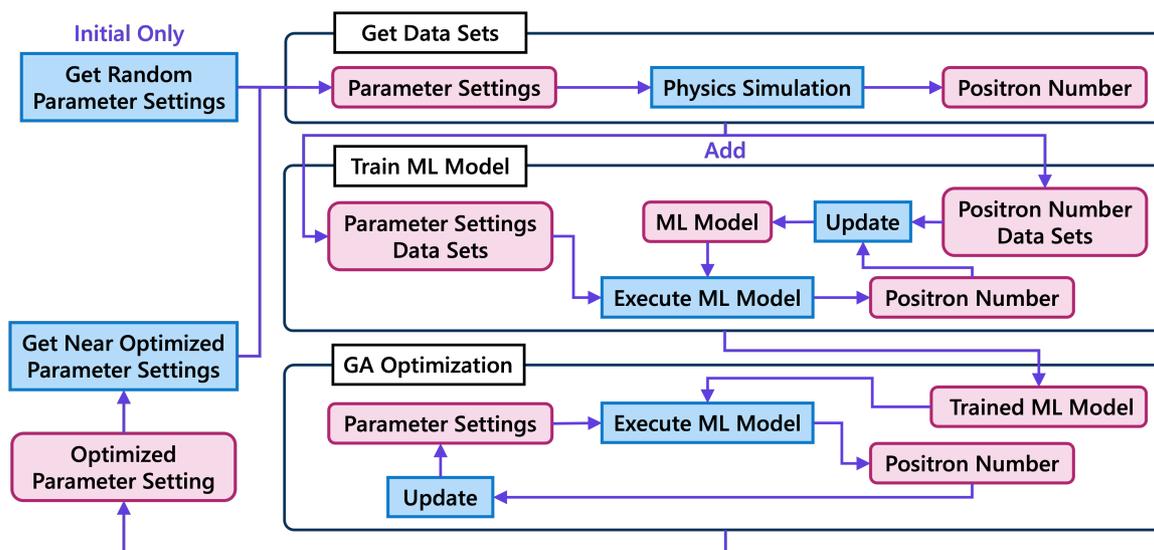


Figure 3: Conceptual diagram of NN-based surrogate model training and GA-based optimization iterations.

層が3層の各ノード数は4-12-8-4-1の多層パーセプトロン (MLP) とし、損失関数はMSE (平均二乗誤差) を使用した。各イタレーションごとに損失が小さくなるように epoch (学習回数) や lr (学習率) などのハイパーパラメータを手動で調整した。機械学習のライブラリ PyTorch [8] を利用している。

3.3 サロゲートモデルを用いた遺伝的アルゴリズムによる最適化

遺伝的アルゴリズム (GA; Genetic Algorithm) とは解候補の集団 (個体) を交叉、変異、評価、選択を繰り返し最適解を見つける手法である。最適化のために遺伝的アルゴリズムを用いたのは、局所解に陥りにくいこと、将来的に多目的最適化も想定していることから選択した。シミュレーションサンプリングから訓練したサロゲートモデルで遺伝的アルゴリズムを回し、陽電子数が最大となるようにパラメータを最適化した。シミュレーションサンプリングから訓練したサロゲートモデルで遺伝的アルゴリズムを回し、陽電子数が大きくなるようにパラメータを最適化した。事前に作成したサロゲートモデルからハイパーパラメータは先に調整し固定しておき、各世代での個体数は500個で100世代まで回すこととした。遺伝的アルゴリズムのライブラリ DEAP [9] を利用している。

3.4 次回のデータセットの取得

次回のイタレーションでのデータセットに用いる入力パラメータは、遺伝的アルゴリズムで予測最適値となるパラメータを基準にガウス分布の乱数を作成してデータセットとして取得した。ガウス分布の広がりには可能なパラメータの範囲を基準に決定したが、これはパラメータ制限範囲が広すぎると想定範囲外のデータセットを取得すると考えられるため改善の余地がある。一回のイタレーションで取得するデータセットは、初期データセットと同じく、訓練用データセットを20個、検証用データセットを5個の計25個とした。次回

のサロゲートモデル構築に使う訓練データはこれまでのイタレーションで作成したデータセットを合計したものをを用いた。今回は12回までイタレーションを回したため、使用したデータセットは初期データセットと合わせて合計で325個である。

4. 結果

Figure 4 にサロゲートモデルの遺伝的アルゴリズムによる世代ごとの予測陽電子数を示す。2回目から8回目までの遺伝的アルゴリズムによる予測最大値はシミュレーションのデータセットデータよりある程度大きくなった。これは、陽電子数が0を含まないデータであること、陽電子数が高いと思われるデータセットのみを集めていることが要因として考えられる。

各イタレーションごとに予測した最大の陽電子数とシミュレーション結果を Fig. 5 に示す。オレンジ色が遺伝的アルゴリズムで予測した最大陽電子数、青色がその予測した最適パラメータ近傍でのシミュレーション結果の陽電子数、緑色が予測した最適パラメータでのシミュレーション結果の陽電子数である。遺伝的アルゴリズムはイタレーション0回目からであるが、比較しやすいように一つ後ろにずらしている。

遺伝的アルゴリズムで予測した最大陽電子数は、イタレーション9回目以前は大きく変動しているがそれ以降はある程度収束していることがわかる。予測最適パラメータ近傍でのシミュレーション結果の最大値もイタレーション9回目以降は高いところである程度収束している。予測最適パラメータでのシミュレーション結果が合わないのは、SADのエラーかパラメータの感度が高い事が考えられる。

シミュレーションデータでの陽電子数の最大値は671であり、これは13回目のイタレーションの予測最適パラメータ近傍でのシミュレーション結果から得られた。12回目の最後の遺伝的アルゴリズムでの予測最大値は740.9であった。シミュレーション結果と予測最大値との差は、サンプリング数が少ないこと、イタ

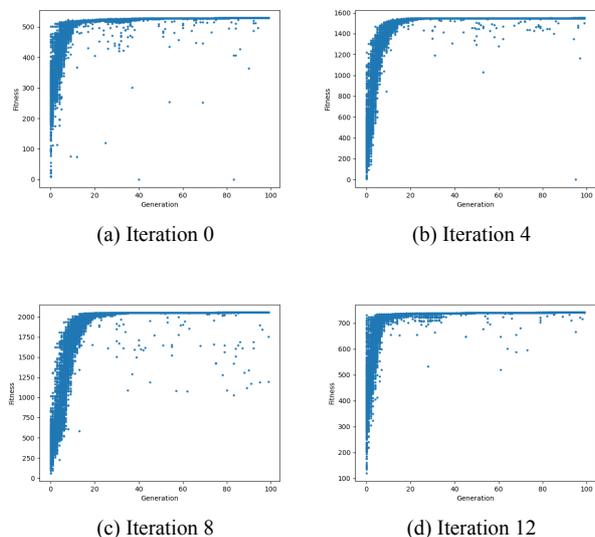


Figure 4: Prediction of positron counts per generation using Genetic Algorithms for surrogate models.

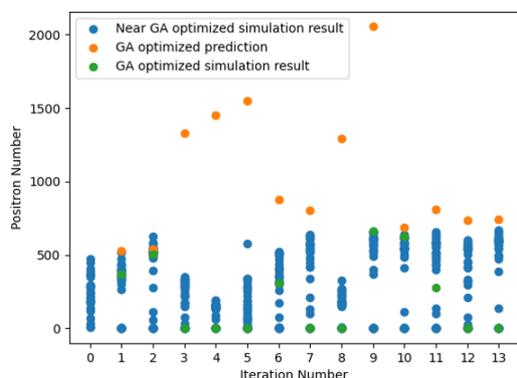


Figure 5: Maximum predicted positron count and simulation value.

レーション数が足りないことが要因と考えられる。以前シミュレーションで得られた陽電子捕獲率より小さい値を取っているのは、今回はパラメータ数や範囲を絞ったこと、ビームローディング電流の計算の方法が

変わったことが要因と考えられる。また、今回の手法は初期のランダムサンプリングに大きく依存していると考えられ、局所解に陥っている可能性があるため、予測最適値が、より多くのデータセットから取得したシミュレーションでの最適値と一致するかは判断できない。

5. まとめ

本研究では、物理シミュレーションの代替として、少ないデータセットで ILC 電子ドライブ陽電子源設計の指針となるサロゲートモデルの構築をした。また、サロゲートモデルを用いて陽電子捕獲率とそれを最大化する最適なパラメータを予測した。本手法はまだ改善の余地はあるが設計の効率化に寄与すると考えられる。

今後の方針として、入力パラメータの数を増やし、より高い陽電子捕獲率を目指す。今回はサロゲートモデルの出力パラメータとして陽電子数としたが、出力パラメータを見直し、より設計に役立つサロゲートモデルを構築する。また、物理シミュレーションの代替として高速なサロゲートモデルを利用して設計の指針とすることも考えられる。

参考文献

- [1] Seimiya, Yuji *et al.*, “Positron capture simulation for the ILC electron-driven positron source”, *Prog. Theor. Exp. Phys.*, vol. 2015, pp. 103G01, Oct. 2015, doi:10.1093/ptep/ptv136
- [2] M. Kuriki *et al.*, “A design of ILC E-driven positron source” *J. Phys.: Conf. Ser.*, vol. 2420, pp. 012006, Jan. 2023, doi: 10.1088/1742-6596/2420/1/012006
- [3] Geant4, <https://geant4.web.cern.ch>
- [4] General Particle Tracer, <https://www.pulsar.nl/gpt/>
- [5] Strategic Accelerator Design, <https://acc-physics.kek.jp/SAD/>
- [6] Edelen, Auralee *et al.*, “Machine learning for orders of magnitude speedup in multiobjective optimization of particle accelerator systems”, *Phys. Rev. Accel. Beams*, vol. 23, pp. 044601, Apr. 2020, doi:10.1103/PhysRevAccelBeams.23.044601
- [7] Hiroki Tajino *et al.*, “A study of beam loading compensation in the capture linac of ILC electron driven positron source”, Proc. PASJ2022, Online (Kyushu University), TUP030, pp. 365–369, Oct. 2022.
- [8] PyTorch, <https://pytorch.org>
- [9] DEAP, <https://deap.readthedocs.io/>