



November 28, 2023

加速器・ビーム物理の機械学習ワークショップ2023

未来を加速する 加速器と機械学習が 拓く新時代への展望 2023

広島大学先進理工系科学研究科

黒口俊平

本講演の目的

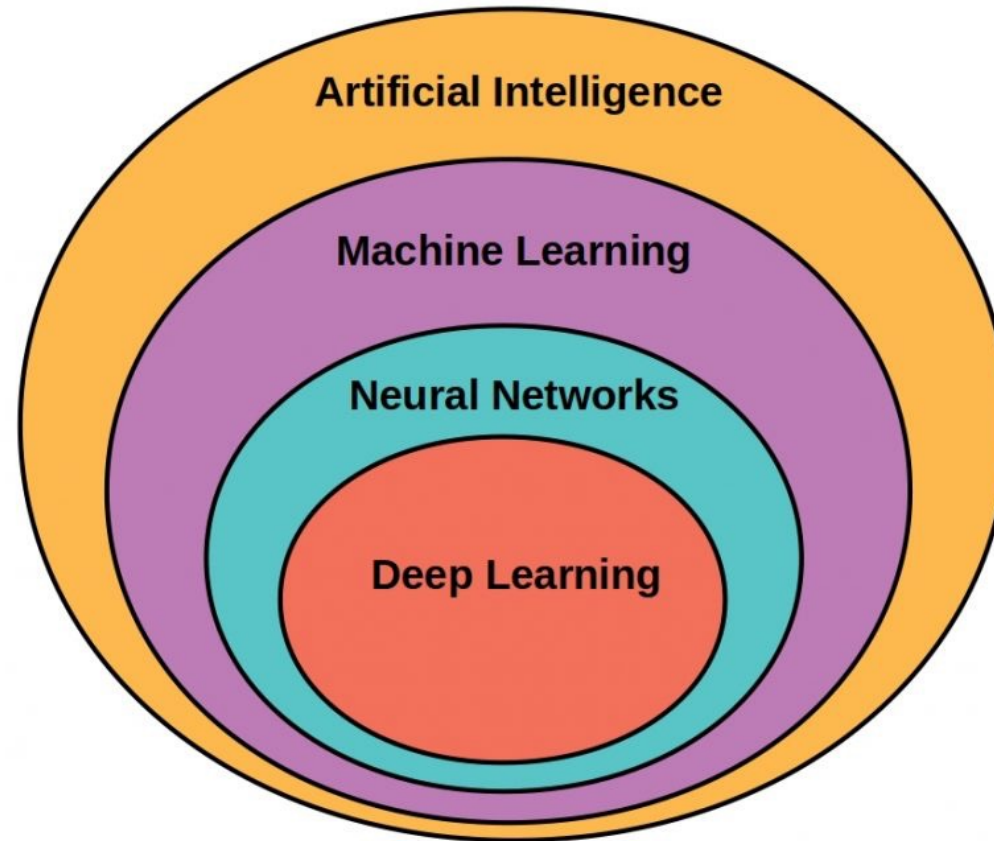
加速器・ビーム物理の機械学習ワークショップ2023 Overviewより
<https://indico2.riken.jp/event/4626/overview>

開催趣旨

加速器施設における供給ビームの高機能化を機械学習により実現することが、近年、各施設で成果をあげている。この機械学習による加速器調整の様々な手法について、情報交換する場を設けることで、加速器関連の機械学習が大いに発展することが期待される。第二回となる本ワークショップでは、前回に引き続きこれまで加速器・ビーム物理コミュニティにおいて行われてきた、加速器運転・調整や供給ビームの診断に関する機械学習の開発の現状を俯瞰するとともに、各施設における開発の現状、そして今後の計画などについて活発な議論を行いたい。

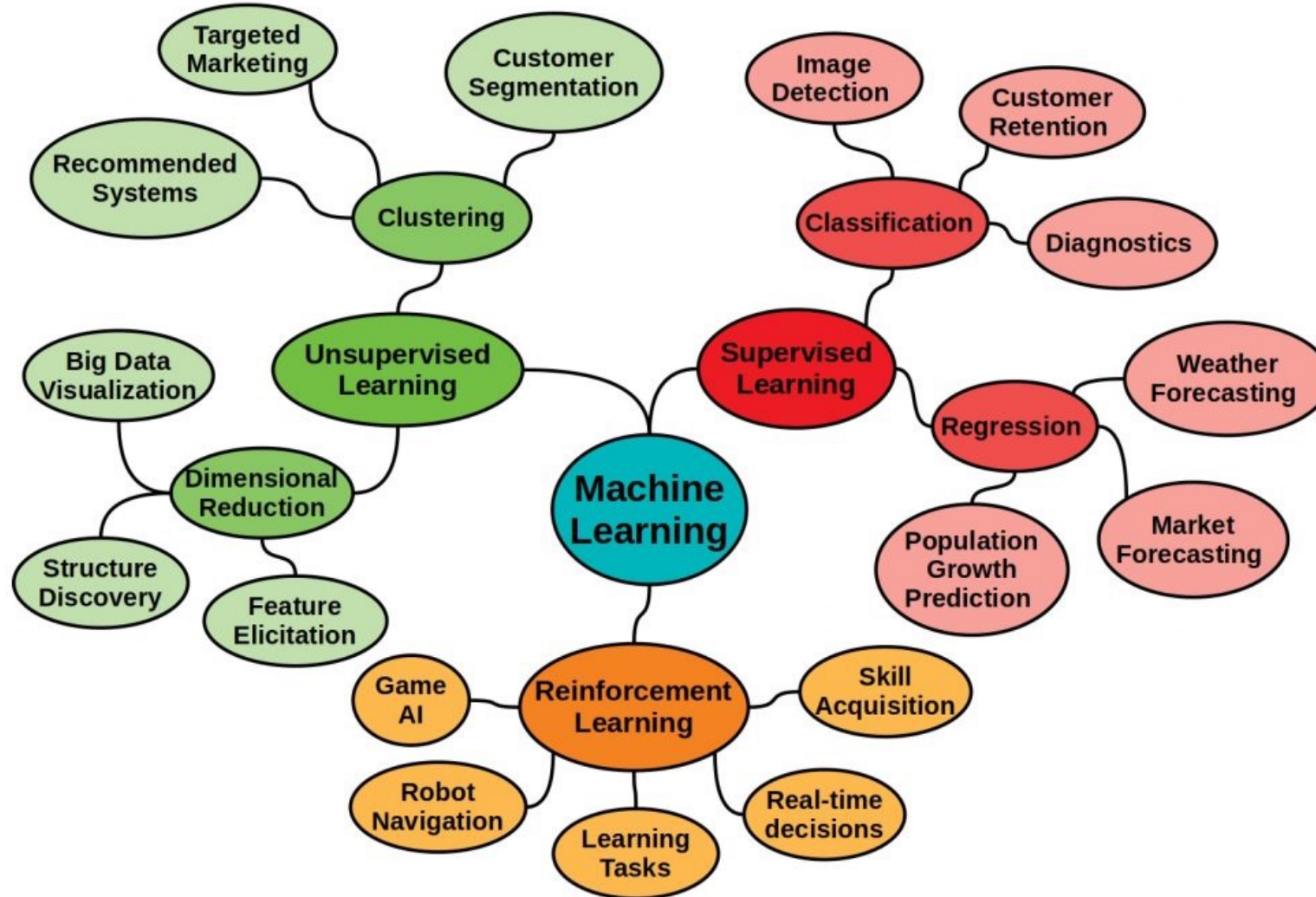
- 加速器・ビーム物理における機械学習活用の現状の整理
 - 今後についての議論のきっかけとして
- 機械学習歴半年なので間違いあるかも

AI、機械学習、ニューラルネットワーク、ディープラーニング



Source: https://starship-knowledge.com/wp-content/uploads/2020/10/ML_AI_DL.jpeg

機械学習の分類

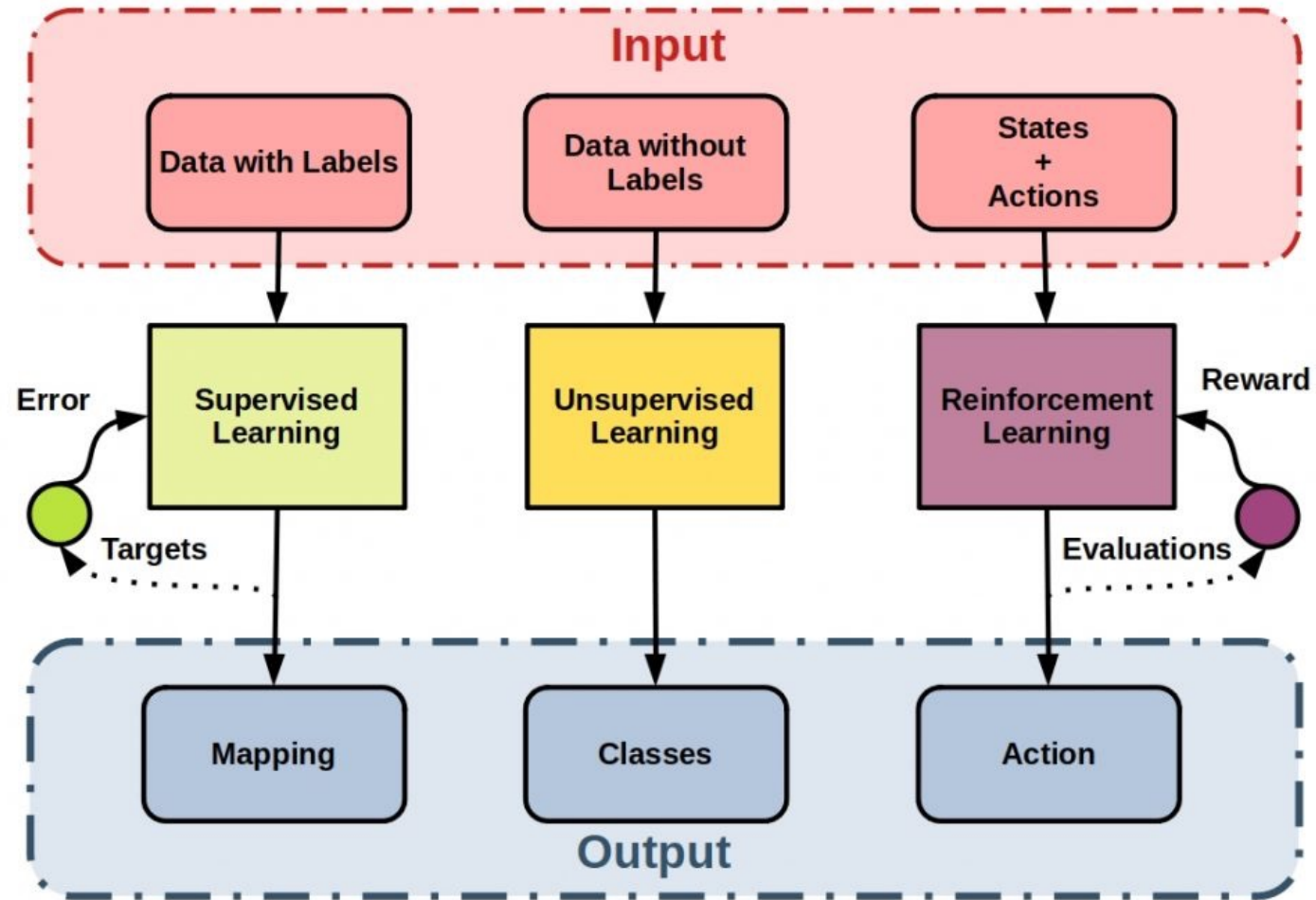


Source: https://starship-knowledge.com/wp-content/uploads/2021/01/scikitLearn_ml.jpeg

機械学習の大分類

- 教師あり学習
 - ラベル付けされた訓練データを利用して、入力データから目標変数を推論する関数を学習
 - 線形回帰、ロジスティック回帰、サポートベクターマシン (SVM)、決定木、GBM、Bayesian Networks、Ensemble Methods、単純ベイズ分類器、k-NN、Neural Network、LSTM、Transformer
- 教師なし学習
 - ラベル未付きデータから構造やパターンを発見することを目的
 - クラスタリング、次元削減、連想ルール学習、Spectral Clustering、Isolation Forest、One-Class SVM、LOF、GMM、LDA、GAN、PCA、SOM、Autoencoder、VAE、Diffusion Models
- 強化学習
 - 環境と対話し、行動を選択することで報酬を最大化するような方策を学習
 - Q-Learning、SARSA、REINFORCE、PPO、Actor-Critic、Dyna-Q、Deep Q-Networks (DQN)、TD3、HER、IQN、Rainbow、A3C、Tonic
- Others
 - 半教師あり学習、自己教師あり学習、メタラーニング、連合学習、集団学習、進化的アルゴリズム、etc.、それらの組み合わせ

機械学習の大分類



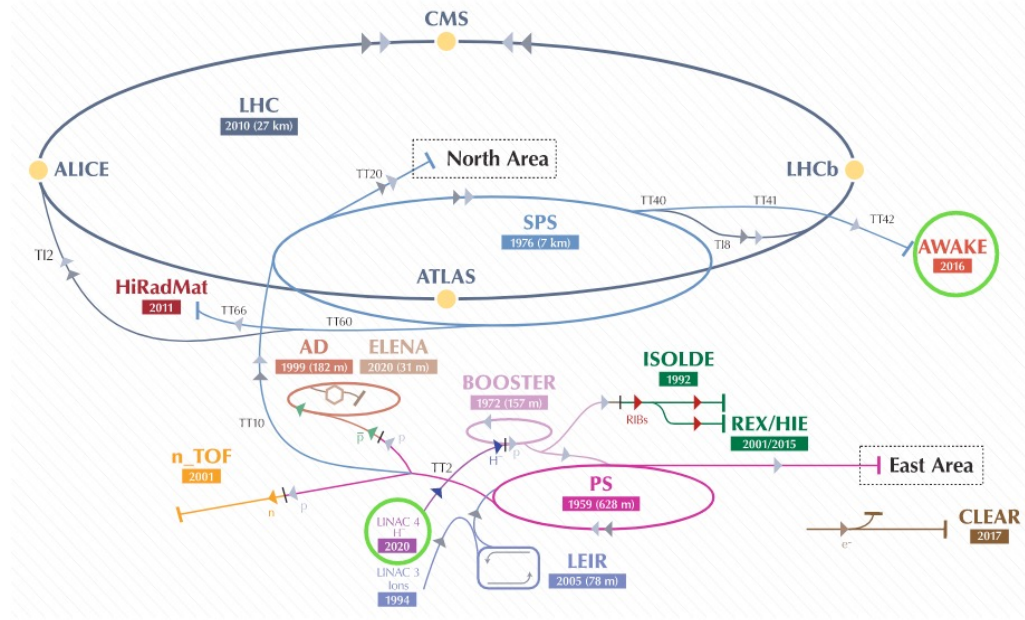
https://starship-knowledge.com/wp-content/uploads/2021/01/unsupervised_supervised_reinforcement.jpeg

機械学習は何ができるか

- 回帰
 - 連続する値を予測
- 分類
 - 定義されたカテゴリに振り分ける
- 最適化
- クラスタリング
 - データポイントをグループ化する
- 次元削減
 - 本質的な情報を維持したままシンプルにする
- 異常検出
 - 異常や外れ値を検出
- 強化学習
 - 行動を学習する
- 推薦システム
 - ユーザーの情報に基づき推薦
- 自然言語処理
 - テキストデータの理解や生成
- 画像認識
- 音声認識

いくつか論文紹介

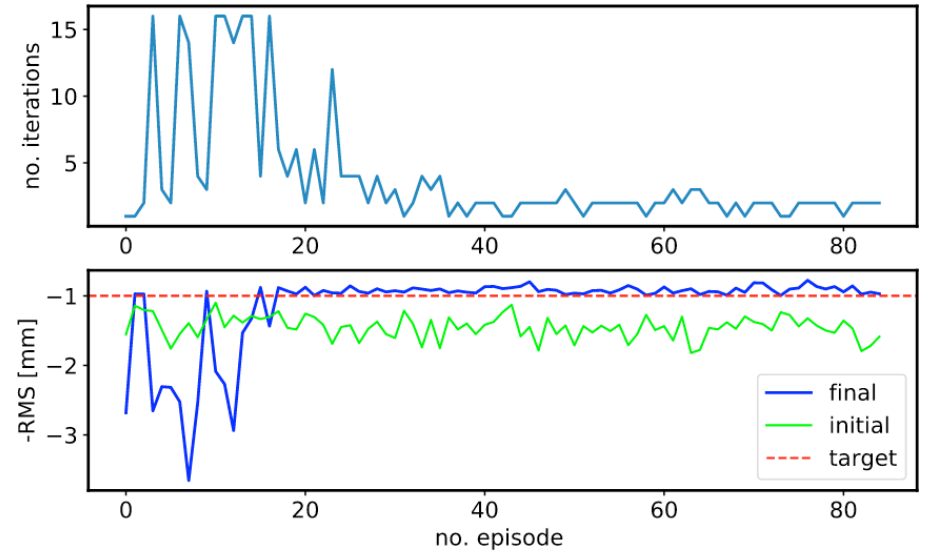
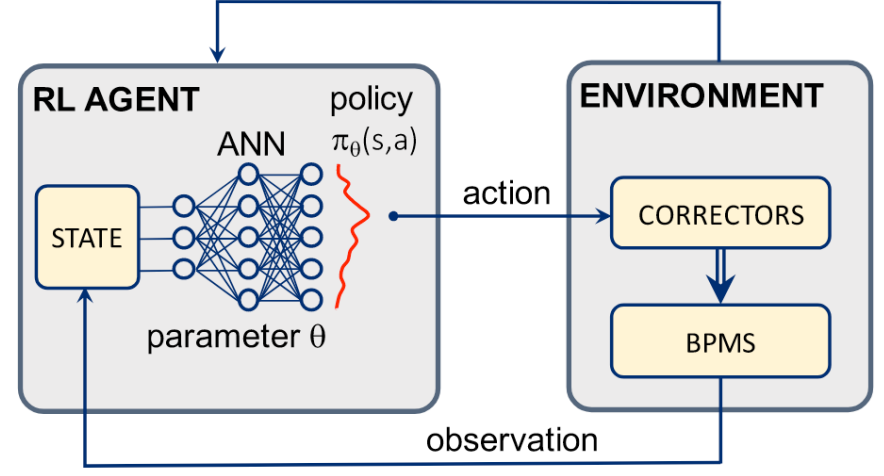
Kain, Verena, et al., “Sample-Efficient Reinforcement Learning for CERN Accelerator Control.”,
<https://doi.org/10.1103/PhysRevAccelBeams.23.124801>



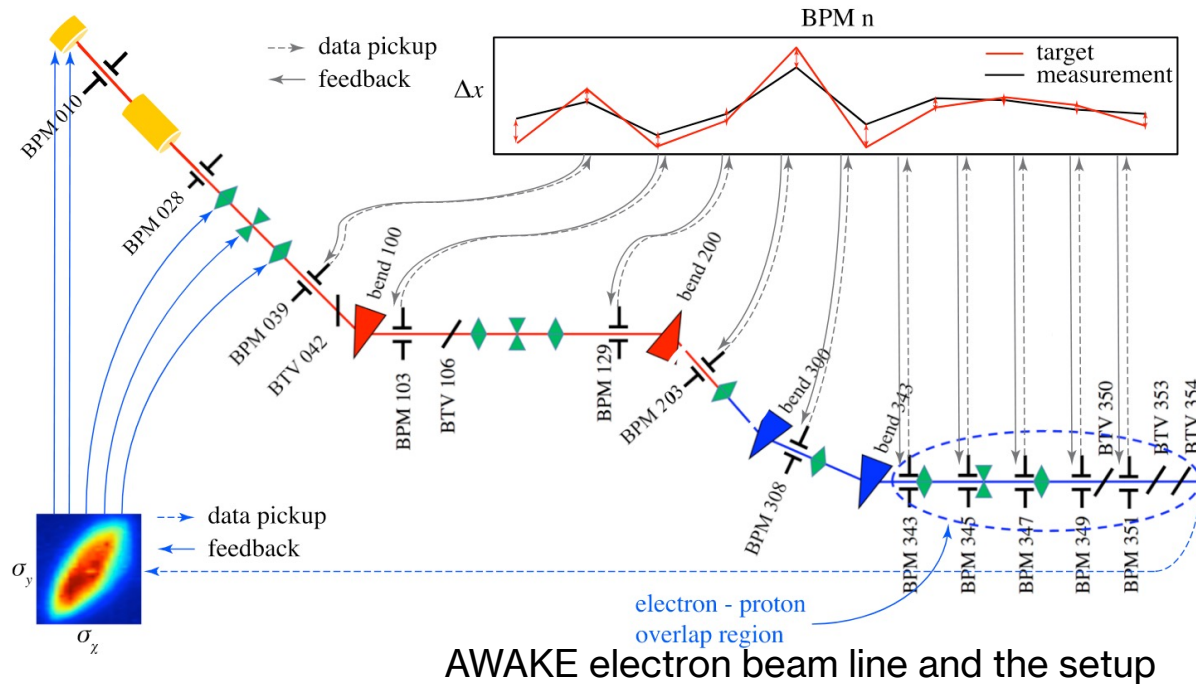
To investigate this approach, continuous model-free reinforcement learning with up to 16 degrees of freedom was developed and successfully tested at various facilities at CERN.

OpenAI Gym, NAF, TD3, ILQR

the example of trajectory correction
 reward



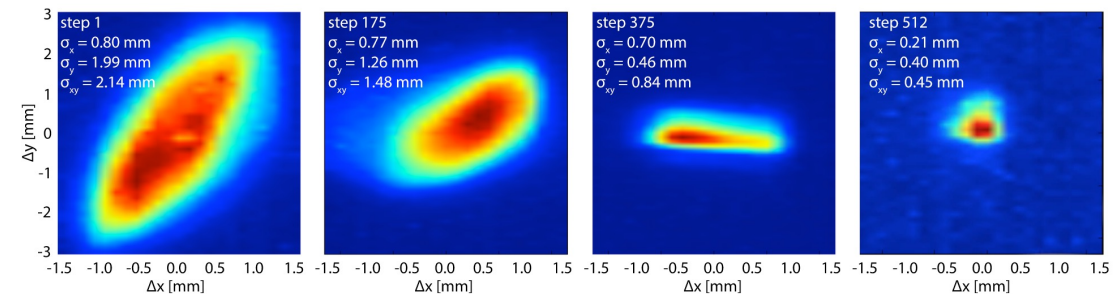
Scheinker, Alexander, et al., “Online Multi-Objective Particle Accelerator Optimization of the AWAKE Electron Beam Line for Simultaneous Emittance and Orbit Control”, <https://doi.org/10.1063/5.0003423>.



Online multi-time scale multi-objective optimization algorithm that performs real time feedback on particle accelerators.

- Developed and demonstrated an online multi-time-scale multi-objective optimization algorithm.
- Demonstrated the ability to maintain the nominal trajectory of the beam while minimizing the emittance within the electron beamline in CERN's advanced proton-driven plasma wakefield acceleration experiment.

AWAKE electron beam size at the end of the beamline at different stages of the optimization



Plehn, Tilman et al., “Modern Machine Learning for LHC Physicists”, 2022,
<https://doi.org/10.48550/arXiv.2211.01421>

128 page

- The goal is to quickly guide students who possess a basic understanding of particle physics and a great enthusiasm for machine learning to applications that are related.
- They start with an unconventional introduction to neural networks motivated by the LHC, and covers classification, unsupervised classification, generative networks, and inverse problems.

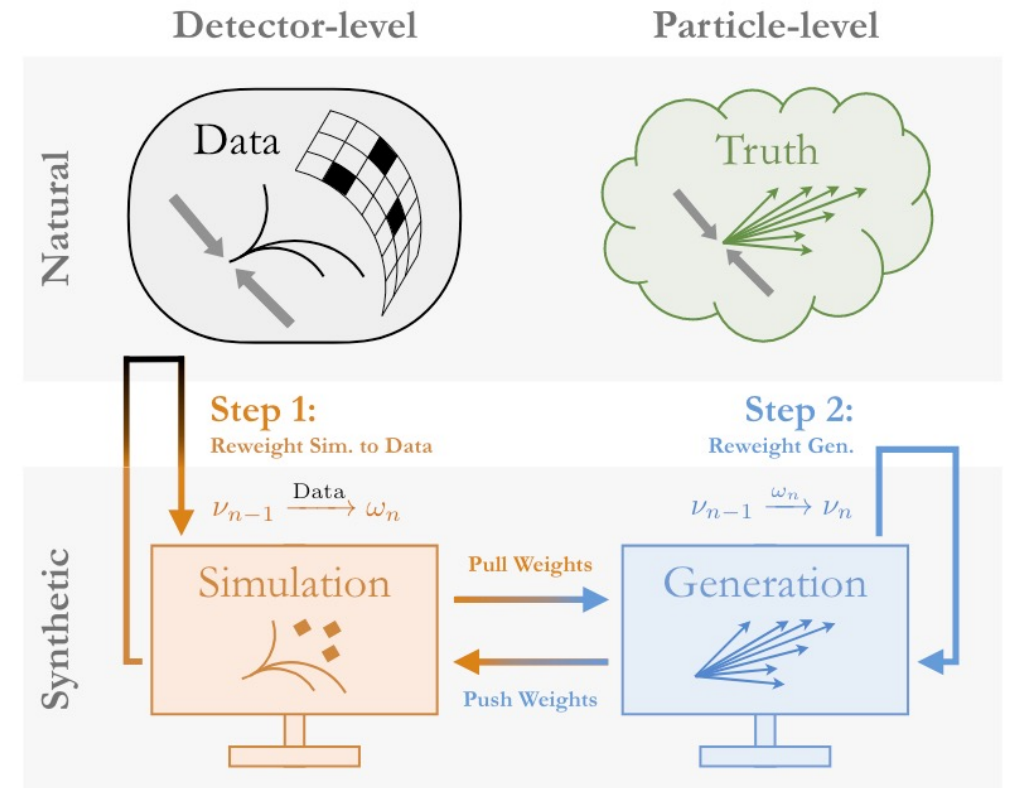
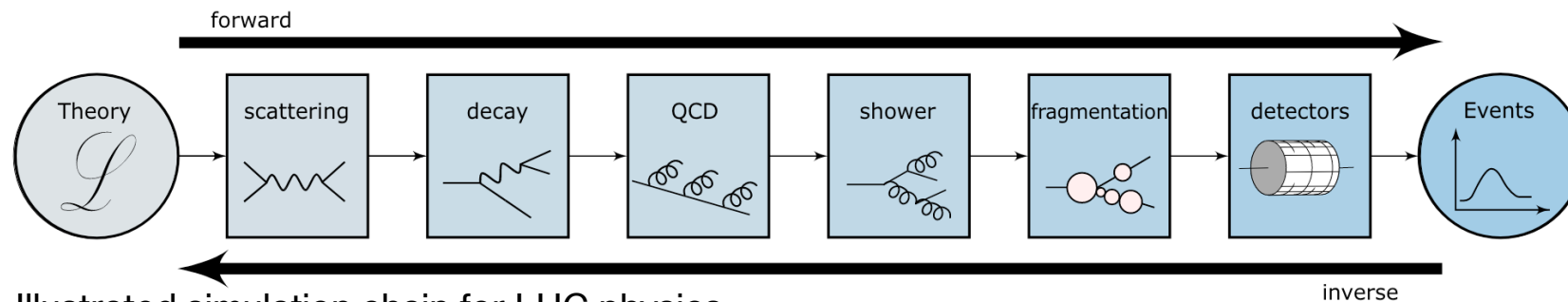
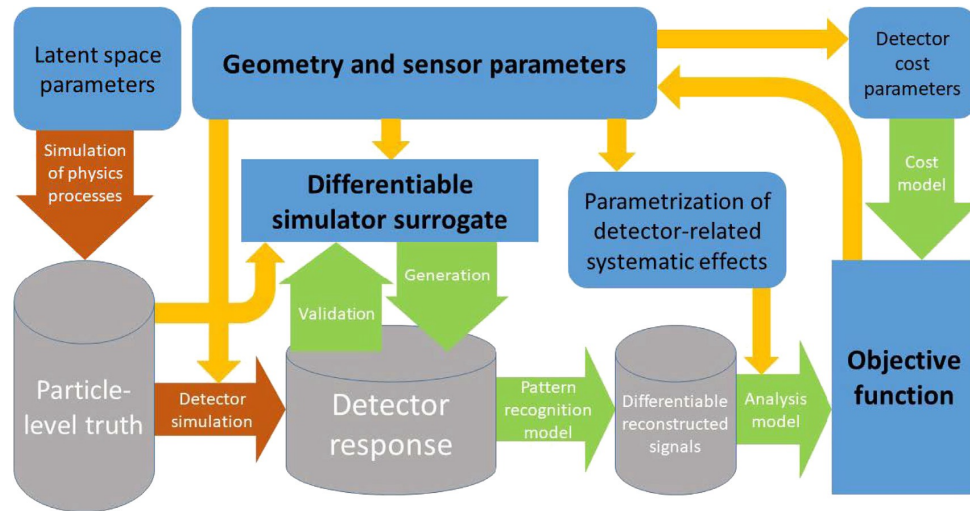


Illustration of the Omnifold method for detector unfolding.



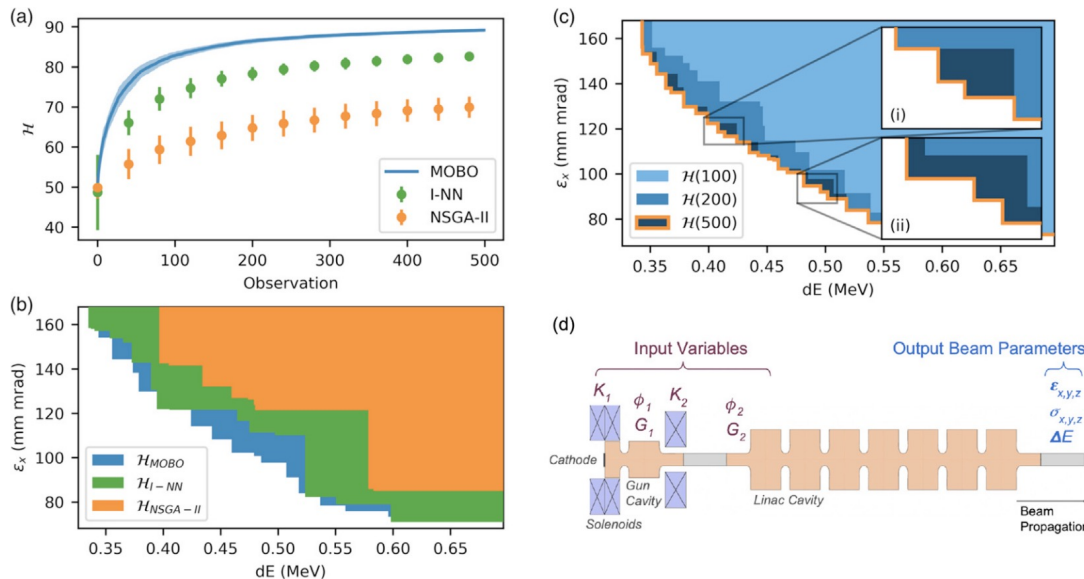
Illustrated simulation chain for LHC physics.

Dorigo, Tommaso et al. "Toward the End-to-End Optimization of Particle Physics Instruments with Differentiable Programming", *Reviews in Physics* 2023, <https://doi.org/10.1016/j.revip.2023.100085>.



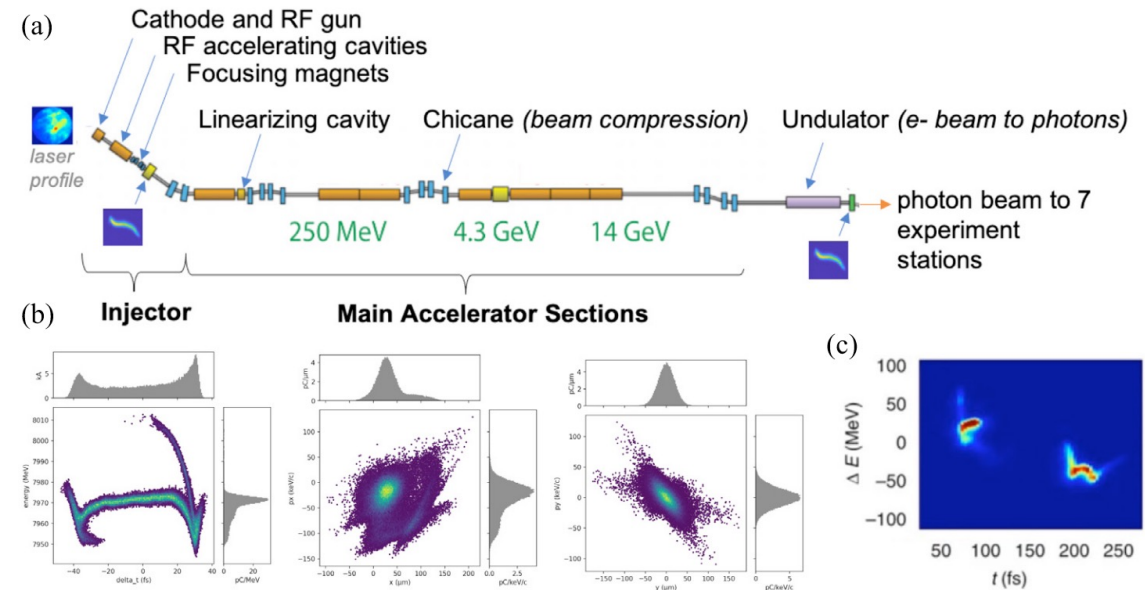
Block diagram for the optimization of a generic particle physics detector.

- The construction of a fully differentiable pipeline and the use of deep learning techniques may allow the simultaneous optimization of all design parameters.
- In this white paper, we lay down our plans for the design of a modular and versatile modeling tool for the end-to-end optimization of complex instruments for particle physics experiments as well as industrial and medical applications that share the detection of radiation as their basic ingredient.



Multi-objective Bayesian optimization of the Argonne Wakefield Accelerator

November 28, 2023 未来を加速する加速器と機械学習が拓く新時代への展望2023



Example of a linear accelerator and major components (in this case the Linac Coherent Light Source)

加速器・ビーム物理において 機械学習の適用で何ができるか

- **ビームの品質・安定性向上**
 - 加速器物理の理解、オンライン自動調整、多目的最適化
- **データ解析**
 - 物理学モデルの適用、シグナル検出、精度の評価
- **異常検知・診断**
 - 分類、外れ値検知
- **運用コスト削減**
 - 最適化、監視・自動調整
- **開発速度向上**
 - 新しい加速器の設計、制作の効率化

加速器の性能・信頼性の向上
コスト削減・効率化
が期待できる

機械学習を適用するために 我々は何を考えればいいか

- どこに適用するか、どのように適用するか
- 何をやりたいか、何が難しいのか、どんな手法がマッチしているか
- E.g:
 - 加速器運転での最適化調整を自動化したい
 - → 使える情報は何かあり何を最適化したいのか、高速にパラメータ選択が必要
- 機械学習を適用させやすくするために
 - データや操作をできる限りデジタル化する
 - データの蓄積

そして、ChatGPTの登場

OpenAI Playground Assistants APIの画面より

User

加速器物理学における重要な概念を挙げてください。

gpt-4-turbo

加速器物理学では、多くの概念が中心的な役割を担っています。以下にそのいくつかを挙げます。

- 1 ビームダイナミクス (Beam Dynamics): 加速器内で荷電粒子ビームの動きを支配する物理法則。ビームの軌道、集束、拡散、安定性などの理解が含まれる。
- 2 電磁場 (Electromagnetic Fields): 加速及びビーム制御に使用される静電場や磁場。これらは粒子を加速し、彼らの軌道を曲げたり、ビームを集束させるために使用される。
- 3 シンクロトロン放射 (Synchrotron Radiation): 荷電粒子が加速される際、特に円軌道を描くときに発生する放射。特に電子加速器で重要な現象。
- 4 加速機構 (Acceleration Mechanisms): 粒子を加速するために使用される様々な技術。直線加速器ではRFキャビティ、円形加速器ではシンクロトロン、サイクロトロンやリニアックなどがある。
- 5 共振 (Resonance): 加速器設計において考慮すべき現象で、粒子の運動と外部からの力が同期し、その結果粒子の振動が増大する。
- 6 荷電粒子ビームの品質: 明瞭なビームを得るための粒子ビームの特性。エミッタンス、ビームブリリアンス、ビームサイズ、エネルギー Spreid などが含まれる。

ChatGPT

- 2022年11月30日、OpenAIが誰でもアクセスしやすい形でChatGPTを利用できるよう公開した。
 - Web上の情報のほとんどを圧縮して知識として持つ（ように見える）
 - 人間と区別がつかないほどの会話能力
- LLM (Large Language Model; e.g. ChatGPT) は生産性を大きく向上させる
 - Noy, Shakked et al., “Experimental Evidence on the Productivity Effects of Generative Artificial Intelligence”, March 1, 2023, <https://doi.org/10.2139/ssrn.4375283>
 - Ziegler, Albert et al., “Productivity Assessment of Neural Code Completion.”, MAPS 2022, <https://doi.org/10.1145/3520312.3534864>.
- このスライド制作もChatGPT (GPT-4 Turbo)の力を借りた
- 検索エンジン無しで学習・研究することを想像してみしてほしい

LLMsはどう加速器に使えるか？

- ChatGPTなどに加速器技術やコーディングのことについて聞けば多くの場面で妥当そうな回答は得られる
 - Hallucination、バイアスはある。著作権、機密情報の取り扱いに注意。
 - 人に聞くより 速い & 何度でも聞ける & 結構賢いのがポイント
- 役割
 - コパイロット、エージェントとして
 - 人間の何を代替する？
- ツールの活用（インフラ化していく）
 - ChatGPT, GitHub Copilot, Microsoft Copilot, Google Bard, Claude
- 例えば、加速器知識に特化したエージェント（e.g. GPTs）
 - どのように作るか？(Custom instructions? Retrieval? Fine-tuning? Distillation?)
 - 加速器のことを何でも聞ける
 - 研究者、エンジニア、技術者、専門家... の仕事の何を任せられるか？どのように使えるか？
- Multi-modal LLMはどう使える？
- Roboticsとの組み合わせ？
- 自律型・マルチタスク型エージェント？(e.g. SuperAGI, MetaGPT) ... Initial AGI
- 今後数年の発展すら予測が難しいが、活用・導入は進む（進めるべき）だろう

未来を加速する加速器と機械学習

- 加速器は、素粒子物理学、材料科学、放射線化学、医療、産業など様々な用途で使われるツールである
 - 加速器の性能向上がこれらの分野の発展に大きく寄与する
 - 機械学習はテクノロジー、ビジネス、ヘルスケアなど様々な分野で応用されてる技術である
 - 加速器技術開発に機械学習を適用することで、性能向上・効率化が期待できる
- 機械学習・加速器の発展により多様な分野の成長が加速できる

まとめ

加速器・ビーム物理において

- 機械学習の能力
- 機械学習適用例
- 何を考えればいいか

を概括した。

最近の例として

- 近年の適用例
- LLMs

を紹介した。参考になれば幸いである。