

SuperKEKB 加速器真空システムにおける機械学習を応用した 圧力異常検知システムの検討 -その 2-

STUDY ON A PRESSURE ANOMALY DETECTION SYSTEM APPLYING MACHINE LEARNING FOR THE SuperKEKB VACUUM SYSTEM -2-

末次祐介[#]

Yusuke Suetsugu[#]

KEK

Abstract

This study developed a pressure-anomaly detection system utilizing machine learning for the vacuum system of the SuperKEKB accelerator. The system identified abnormal pressure behaviors among approximately 600 vacuum gauges before triggering the conventional alarm system, facilitating the early implementation of countermeasures and minimizing potential vacuum issues. By comparing the recent pressure behaviors of each vacuum gauge with the previous behaviors, the program detected anomalies using the decision boundary of a feed-forward neural network previously trained on actual abnormal behaviors. Realistic regression models for pressure behaviors enabled a reasonable prediction of the causes of anomalies. The program, implemented in Python, has been operational since April 2024 for test. The developed anomaly detection system is beneficial for ensuring the stable operation of large-scale machines.

1. はじめに

SuperKEKB は高エネルギー加速器研究機構(KEK)の電子・陽電子衝突器である。その主リング(MR)は、それぞれ周長約 3 km の 7 GeV 電子リング(HER)と 4 GeV 陽電子リング(LER)から構成されている[1, 2]。2016 年の運転開始以来、SuperKEKB は堅調にその性能を上げ[3]、また、ビームパイプ等を超高真空に維持する真空システムも概ね順調に稼働している[4]。MR の LER/HER のビームパイプの圧力は、約 10 m 毎に設置された、約 300 個/リング、計約 600 個の冷陰極真空計(CCG)で常時監視されている。

MR 真空システムの各種機器はほぼ期待通りの性能を発揮しているが、ビームが発する放射光(SR)による熱サイクル、ビームが生成する高次高周波、老朽化等により、機器やフランジからのリーク、異常な圧力上昇が時折観測されており、場合によっては大きな故障に至っている[4]。もしこれら圧力の異常な振る舞いの兆候を早めに検知できれば、予め対応措置を検討、準備することが可能となり、安定な運転につながる。

そこで、機械学習を応用して圧力異常の兆候を検出し、運転員や担当職員に注意喚起する異常検出システムを開発している[5, 6]。ここでいう圧力の「異常」とは、調べたい直近の期間の圧力(調査データ)のビーム電流や時間に対する振る舞いが、数日前の圧力(参照データ)の振る舞いから予想されるものと違った場合、と定義する。本システムは機械学習の基本的、初歩的な手法を用いているが、これまでの知見に基づいたモデルを使って圧力の挙動を記述、予想する点の特徴である。以下、開発している異常検知手法を手順に沿って説明する。なお機械学習や Python でのプログラミングについては主に文献[7]を参考にした。

[#] yusuke.suetsugu@kek.jp

2. 解析用の運転期間とデータの定義

加速器運転中の圧力の振る舞いは蓄積ビームの有無で大きく違うので、まず解析を容易にするために三つの運転期間を定義する。ビーム蓄積中は、不安定なビームから真空機器を守るために、ビームロスや加速空洞のトリップ等の信号を使ってビームはリング外に度々(数回/日)、不定期に捨てられる(ビームアポートと言う)。Figure 1 (a) は、一連のビーム入射、ビーム蓄積、ビームアポートを含む典型的な「1 フィル」を示している。ビームアポート後、ビームは通常 5~10 分程度で再入射される。真空システムに関係する故障等は、高いビーム電流を蓄積していて熱負荷が高い時、およびビームがアポートされ機器に急激な熱応力が加わる時に多い。そこで、ビーム運転中では、この 1 フィルを Storage 期間(ビーム入射と蓄積)と Tail 期間(ビームアポート直後)に分けてデータを解析する。

一方、真空システムは加速器停止中でもビームパイプ等を超高真空に維持するために常時稼働しているが、機器の老朽化、腐食、高電圧印加部の異常放電等でリークが発生する場合がある。そこで、ビームが長期間無い場合に、ある一定期間(例えば 6 時間)を No-beam 期間とし、定期的に圧力の振る舞いを調査する。

Figure 1 (b)は参照データと調査データの関係を示している(2022年の加速器運転中の10日間の例)。調査データは各真空計の最新(直近)の Storage、Tail、あるいは No-beam 期間のデータである。一方、参照データは、調査データの数日前(例えば 8 日前からの 3 日間)のそれらのデータとする。

3. 回帰曲線の導出

各期間の圧力の振る舞いを記述する回帰曲線はビーム電流あるいは時間の関数である。参照データの回帰曲線は調査データでの各真空計の「正常」な振る舞いを予想するために使用する。一方、調査データの回帰曲

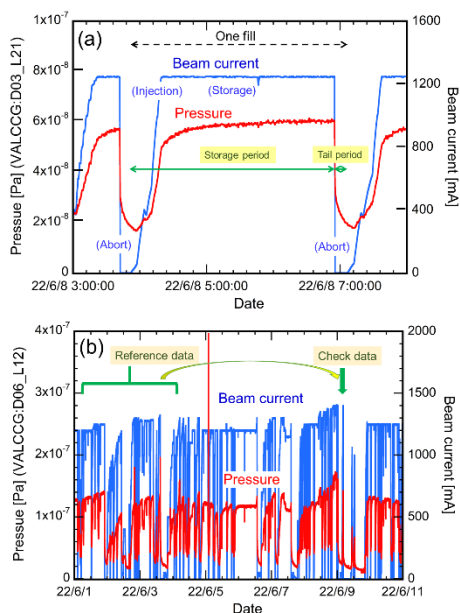


Figure 1: (a) Typical ‘fill’ consisting of beam injection, beam storage, and beam abort. (b) Typical operation status in June, 2022, highlighting the relation between the check and reference data. The vertical lines of the beam current correspond to times of beam abort.

線は、データの異常の判断や、データが「異常」と判断された場合の原因推定に使用される(後述)。

一般に、回帰曲線の導出で重要なことは、用途に適切なモデルを採用することである。モデルを作成する目的は主に二つである。第一に、将来の振る舞いの予想である。例えば、調査データでのビーム電流が参照データよりも高い場合でもその振る舞いは回帰曲線によって予想可能となる。第二に、各種パラメータの影響の評価である。適切なモデルを用いることにより、パラメータの出力への影響度をうまく評価できる。それは異常な振る舞いの要因を推定するのに有用となる。

ここでは、これまでの運転時の経験・知見に基づいた合理的なモデルを採用することにした。その結果、モデルが単純となり、また過学習の回避につながる。さらに、異常な振る舞いの要因の推定が比較的少ないデータで可能となろう。以下、各期間での回帰曲線を導出する。

3.1 Storage 期間での回帰曲線

Storage 期間の圧力 P のビーム電流 I に対する振る舞いは次の式で表すことができる[4, 5]

$$P(I) = P_b + \Delta P_s + \Delta P_t \\ = w_0 + w_1 I + w_2 (I^2/N_b)^2 \quad (1)$$

ここで、圧力 P_b はベース圧力、すなわち、ビーム入射前の圧力である(定数)。 ΔP_s および ΔP_t は SR による圧力上昇、および機器の発熱による圧力上昇である。 ΔP_s はいわゆる光刺激脱離と呼ばれるもので、ビーム電流に比例する。一方、 ΔP_t は熱脱離である。今回の場合、温度 (T) はせいぜい 50°C と低い。そのような条件では、これまでの解析や実験から、 $\Delta P_t \propto (\Delta T)^2$ と簡単に表せることが分かっている[4]。さらに、 ΔT はビームに起因する高次高周波のパワー ($\propto I^2/N_b$) に比例すると考えると実際の圧力

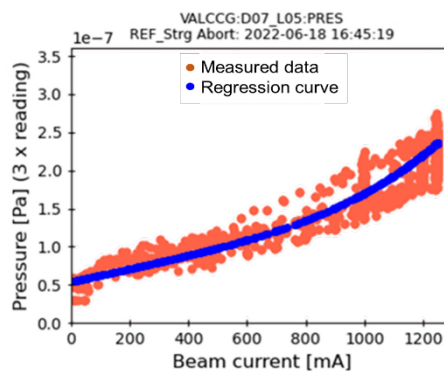


Figure 2: Example of the measured pressure behaviors (orange) and regression curves (blue) for the storage period as a function of beam current.

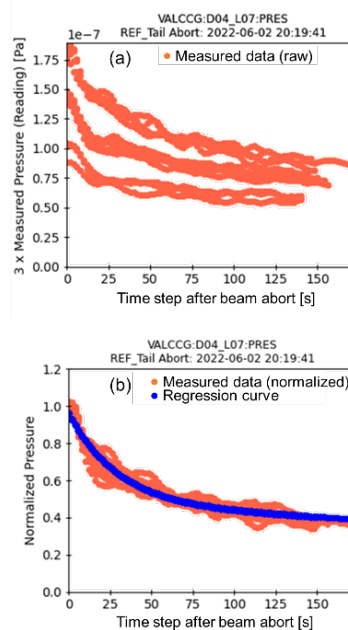


Figure 3: (a) Behaviors of measured pressures (orange) and the regression curve (blue) (a) before and (b) after normalizing the raw data of the reference data in the tail period as a function of time step after beam abort.

のビーム電流に対する振る舞いをよく再現する(N_b はバンチ数) [4]。 $w_0 \sim w_2$ は定数(重み定数)、また、 $w_0 \sim w_2 > 0$ とする(合理的仮定)。 $w_0 \sim w_2$ は平均二乗誤差を最小にするべく勾配法で求めた。 Figure 2 に Storage 期間での参照データとその回帰曲線の例を示す。

3.2 Tail 期間での回帰曲線

この期間の圧力 P は、ビームアポート後の時間 (t) の関数で表す。参照データの $P(t)$ の振る舞いの例を Fig. 3 (a) に示す(ビームアポート後約 2 分間)。注意すべきは、ビームアポート時 ($t = 0$) の圧力がその時のビーム電流値に異存する点である。参照データにはいくつかのフィルが含まれるため、その結果、この図のように生の圧力 P の振る舞いは数本の線状になることがある。

ビームアポート後の圧力 P の時間変化は、通常の真

空容器の排気時の振る舞いと同様に扱うことができる。つまり、 $P(t)$ は、空間の気体分子の排気による圧力減少 ($\propto \exp(-at)$ 、 a は排気系で決まる定数)と、壁に吸着した気体分子の排気による圧力減少 ($\propto -1/t$)、および初期の圧力($P_{t=0}$)の和で表すことができる[8]。しかし、上述したように、 $P(t)$ はビームアポート時の圧力に依存するため、ここでは、規格化した圧力 $\Delta P_n = (P - P_b)/(P_{t=0} - P_b)$ を用いる(P_b はベース圧力) [5, 6]。これにより、異なる $P_{t=0}$ の曲線を縮退できる。また、 $t=0$ での発散を防ぐために、サンプリング時間(Δt)以降の時間のみを考える。つまり、

$$\Delta P_n \equiv \frac{P - P_b}{P_{t=0} - P_b} = w_0 \exp(-w_1 t) + \frac{w_2}{t} + w_3, \quad (2) \quad t \geq \Delta t$$

ここで、 $w_0 \sim w_3$ は定数(重み定数)、また、 $w_0 \sim w_3 > 0$ とする(合理的仮定)。 P_b は、簡単のために 3×10^{-8} Pa (CCG の測定限界)とした。 Δt は 2 秒である。3.1 と同様、 $w_0 \sim w_3$ は平均二乗誤差が最小になるように勾配法で求めた。Figure 3 (b)に Fig. 3 (a)の P を ΔP_n で表したデータとその回帰曲線を示す。

3.3 No-beam 期間の回帰曲線

この期間はビームが無く、圧力 P を時間の関数として定期的に調べる。正常であれば、 $P(t)$ は調査する期間でほぼ一定となるが、リークが発生したりポンプが故障したりすると時間的に変化する。ここでは、簡単のために 1 次元モデルを使う。すなわち、

$$P(t) = w_0 + w_1 t \quad (3)$$

ここで、 w_0 と w_1 は定数である(重み定数)。また、 w_0 、 w_1 は平均二乗誤差が最小になるよう勾配法で求めた。

4. FNN (Feedforward Neural Network)の構築

4.1 異常を判断する FNN

調査データの正常、異常を判断(2 クラス分け)するための 2 層 FNN(順伝播型ニューラルネットワーク)の構成を Fig. 4 に示す。ここで、 $x_0 \sim x_N$ は $N + 1$ 個の入力パラメータである。 $z_0 \sim z_M$ は $M + 1$ 個の中間層の出力パラメータ、活性化関数は \tanh 関数である。 $y_0 \sim y_K$ は $K + 1$ 個の最終出力パラメータで、出力関数はソフトマックス関数である。例えば 2 クラス分けでは $K = 1$ である。最終出力パラメータはそのクラス(ここでは「正常」と「異常」)の出現確率を表す。Table 1 に、一例として、Storage 期間の入力パラメータ、 M 、 N 、 K をまとめている。ここで、 R_{cal} 、 R_{ref} 、 R_{chk} は、参照データの回帰曲線で計算した、調査データ、参照データの二乗平均平方根誤差(RMSE、Root Mean Square Error)、および調査データの回帰曲線で計算した調査データの RMSE である。 P_{ave_chk} 、 P_{max_chk} 、 P_{ave_ref} は調査データの平均圧力、最大圧力、および参照データの平均圧力である。添え字 'log' は、変数の対数を取ることを意味し、圧力が桁で大きく変化するために導入した。例えば、 R_{cal} では(x を代表的な変数として)、

$$R_{cal_log} = f_{log}(R_{cal}), \quad (4) \quad f_{log}(x) = \text{sgn}(x) \log_{10}(|x| \times 10^{12}), \quad |x| = 1 \times 10^{-12} \text{ for } |x| < 1 \times 10^{-12}.$$

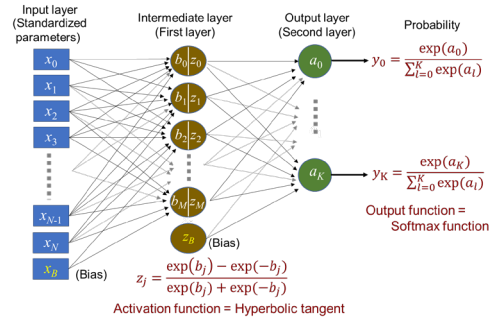


Figure 4: Two-layer FNN for detecting anomalies and estimating their potential causes in the check data.

である。関数 $\text{sgn}(x)$ は符号関数で、 $x < 0$ も扱えるように組み込んだ。また、 1×10^{-12} は、ここで扱うパラメータの典型的な最小値である。また、添え字 'std' は各パラメータの寄与を均等化するための標準化を意味する。これは機械学習では通常の手法である。例えば、 R_{cal_log} では、

$$R_{cal_log_std} = f_{std}(R_{cal_log}), \quad f_{std}(x) = \frac{x - m_{tr}}{\sigma_{tr}}. \quad (5)$$

である。ここで、 m_{tr} および σ_{tr} は訓練データでのその変数の平均と標準偏差を示す。

4.2 異常の原因を推定する FNN

異常と判断された真空計の調査データについて、異常の原因を 2 または 3 個の可能性のある候補から選択する 2 層 FNN を構築した。FNN の構成は Fig. 4 と同様で、例として Storage 期間の入力パラメータ、 N 、 M 、 K を Table 2 に挙げている。ここで、 $w_0 \sim w_3$ は回帰曲線の重みパラメータである。添え字の意味は前節 4.1 と同じである。これからわかるように、主な入力パラメータは各回帰曲線の重みパラメータとしている。

各期間での可能性のある原因候補は、これまでの経験から選定した。例えば、ビームのある Storage 期間では 'Leak or pump failure'、'Over heating or discharge'、'Abnormal beam orbit or leak' を候補とした。Figure 5 は Storage 期間での 'Leak or pump failure' 時の圧力の振る舞い、回帰曲線の例を示す。この場合、参照データに比べてゲタを履いているので、調査データの w_0 (w_{0_chk}) が参照データの w_0 (w_{0_ref}) よりも大きくなると考えられる。他の期間についても、回帰曲線の重みパラメータを入力変数に用いることで効率よく推定できる。

5. FNN 重みパラメータの学習

構築した FNN の決定境界を与える重みパラメータは、2016 年から 2024 年の実際に異常があった期間の測定データを使って学習した。学習はいわゆる '教師あり学習' で、我々が異常/正常を判断し、また原因を選択した。全データは訓練用データと試験用データに 6:4 の割合で分けた。重みパラメータは、一般的に使用されている TensorFlow のライブラリー Keras を用い、平均公差エントロピー誤差 (MCEE、Mean Cross Entropy Error) を勾配法で最小にするように最適化した[9]。各 FNN の訓練、試験データの数、学習率 (L_r)、エポック数、バッチ数も Table 1、2 に挙げている。

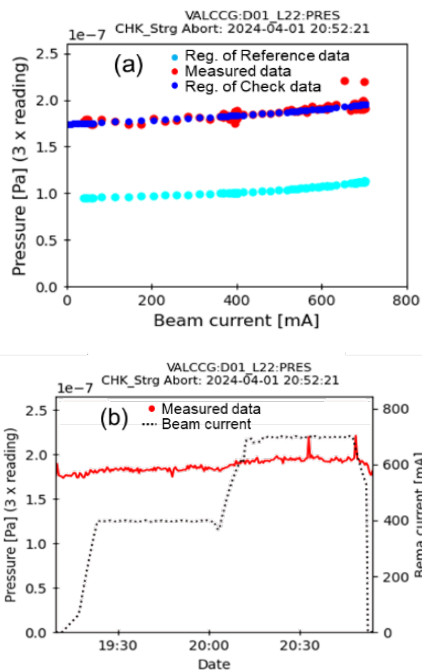


Figure 5: (a) Example of abnormal pressure behavior caused by ‘leak or pump failure’ of the check data in the storage period. (a) Behaviors of the measured (red) and calculated pressures from the regression curves of the reference (cyan) and check (blue) data. (b) Time trend of pressure (red), and the beam current (black dots) for the corresponding time.

Figures 6 (a)と(b)に、一例として、Storage 期間の異常検知の学習におけるエポック毎の MCEE の減少、クラス分けの正答率を、訓練、試験データについてそれぞれ示している。MCEE は堅調に減少しており過学習が生じていないことが分かる。また 90%以上の正答率が得られている。異常の原因推定についても同様の学習結果、95%以上の正答率が得られている。この高い正答率は単純で知見に基づいたモデルを使っているのが一因と考えられる。ただ、現状では、例えば、‘Discharge’ と ‘Overheating’ を区別できない。もし温度についての情報を含めることができれば区別できるのではないかと考えている。これらは今後の課題である。

Table 1 Input parameters, M , N , K , N_{tr} , N_{tst} , L_r , epoch number and batch number for the storage period for FNN to detect abnormal behavior.

Periods	Input parameters	N	M	K	N_{tr}, N_{tst}	L_r	Epoch	Batch
Storage	$R_{cal_log_std}, R_{ref_log_std}, R_{chk_log_std}, P_{ave_chk_log_std}, P_{max_chk_log_std}, P_{ave_ref_log_std}$	5	3	1	249, 186	0.0002	1000	20

Table 2 Input parameters, M , N , K , N_{tr} , N_{tst} , L_r , epoch number and batch number for the storage for FNN to estimate the possible causes of anomalies.

Periods	Input parameters	N	M	K	N_{tr}, N_{tst}	L_r	Epoch	Batch
Storage	$W_0_ref_log_std, W_1_ref_log_std, W_2_ref_log_std, W_0_chk_log_std, W_1_chk_log_std, W_2_chk_log_std, P_{max_chk_log_std}, P_{max_ref_log_std}$	7	4	2	112, 73	0.0004	1500	20

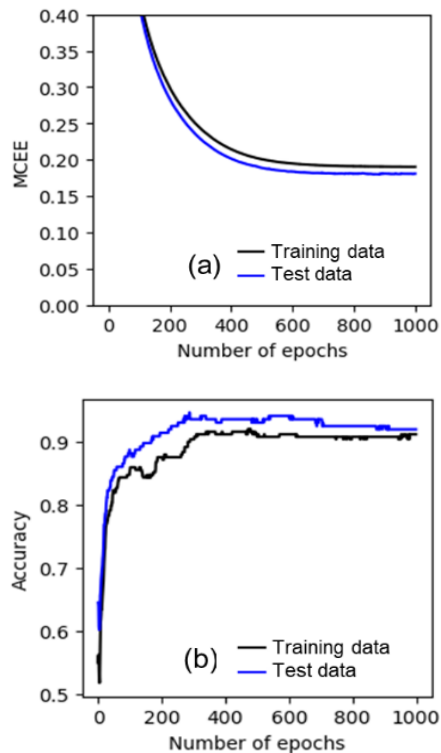


Figure 6: Learning curves of the FNN weight parameters for anomaly detection in the storage period, where the variation in (a) the MCEE and (b) accuracies are plotted against the epoch numbers for training and test data.

6. 検知プログラム

Python で記述した検知プログラムは、KEKB 加速器の制御ネットワークの Linux 端末に組み込まれた。プログラムは常に起動しており、その中の解析プロセスはビームアボートや一定期間のタイマーでトリガーされ、調査データの解析を行う。なお、Storage 期間でも、一定期間(例えば 6 時間)ビームアボートが無ければその期間の解析を行うようにした。

2022 年から 2024 年までの過去のデータを使って模擬試験を行った[5, 6]。検知プログラムでは、直近の 8 回の調査で異常と検知された回数を真空計毎に集計し、頻

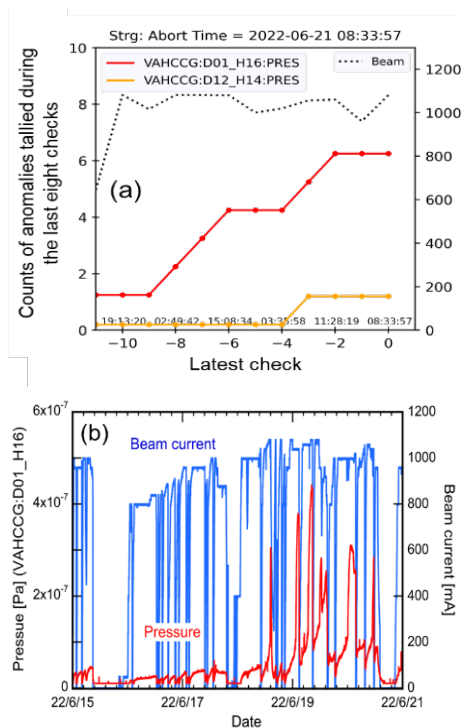


Figure 7: (a) Historical plot of the number of anomalies tallied during the last eight checks for the frequently detected two vacuum gauges, and the maximum beam current in each fill (black dot) in the storage period. (b) Time trends of the pressure of a suspicious vacuum gauge (red) and beam current (blue) for six days at that time.

繁に検知された真空計についてその回数をグラフに表示する。それらの真空計の近くで異常が生じている可能性が高い。同時に予想される原因も表示する。

Figure 7 (a) は Storage 期間での一例である。この場合、HER の真空計 ‘VAHCCG_D001_H16:PRES’ で異常が頻繁に検知され始めている。Figure 7 (b) は当時の圧力とビーム電流の履歴である。同じビーム電流値で蓄積中、圧力が急激に上昇しているのがわかる。圧力は通常のアラームが発報する値(1×10^{-4} Pa)までは至っていない。推定される原因は ‘Overheating or discharge’ である。運転終了後にビームパイプ内部を確認すると、実際フランジ接続部で放電が起き、発熱したことがわかった。Tail 期間、No-beam 期間でも同様に異常を検知可能であることが示された。プログラムはまだ試用中、改良中であるが、圧力の異常検知として有望な結果が得られている。

7. まとめと今後の課題

SuperKEKB 加速器の大型真空システムにおいて、機械学習を応用した圧力異常検知システムを検討、開発している。このシステムは約 600 個の真空計の圧力の異常な振る舞いを通常のアラームシステムが発報する前にいち早く検知し、それに対する準備や対策を可能とする。検知には 2 層の FNN を用いており、機械学習としては

基本的、初歩的な手法ではあるが、データの回帰曲線のモデルにこれまでの運転中の経験・知見を基にした合理的なモデルを採用したことが一つの特徴である。これによりモデルが単純になり効率的に異常を検知でき、また、異常の原因についても高い正答率を得ていると考えられる。検知プログラムは Python 記述され、過去のデータを使った模擬試験では有望な結果が得られた。2024 年 4 月から実際の運転で試用している。現在、イオンポンプ放電電流の異常検知システムへの応用を検討中である。今後の改良点としては以下の点が挙げられる。

- 異常検知能力の向上: プログラムに新しいデータを保存する機能を持たせ、今後の学習用にデータを蓄積し、適時 FNN モデルを更新していけば検知確度は向上すると考えられる。
- 原因特定能力の向上: 圧力と共にイオンポンプの放電電流や温度のデータを含める。例えば放電電流を含めることで ‘Leak’ と ‘Vacuum gauge failure’ を区別できるだろう。また、温度のデータを含めることで、 ‘Overheating’ と ‘Discharge’ をより明確に推定できるであろう。

謝辞

本研究にあたり多くの助言を頂いた KEK 加速器研究施設 三塚岳准教授、佐々木信也技師に深く感謝いたします。また貴重なご意見を頂いた KEKB 加速器グループ、特に真空グループの方々に深謝いたします。

参考文献

- [1] <https://www.superkekb.kek.jp/>
- [2] Y. Ohnishi *et al.*, “Accelerator design at SuperKEKB”, *Prog. Theor. Exp. Phys.*, 2013, 03A011. doi:10.1093/ptep/pts083
- [3] Y. Ohnishi, “Recent progress of SuperKEKB project and future prospect”, *Proc. 14th International Particle Accelerator Conference (IPAC2023)*, Venice, Italy, May 2023, pp. 1339. doi: 10.18429/JACoW-IPAC2023-TUOGB1
- [4] Y. Suetsugu *et al.*, “SuperKEKB vacuum system operation in the last six years operation”, *Phys. Rev. Accel. Beams*, 2023, **26**, 013201. doi: 10.1103/PhysRevAccelBeams.26.013201
- [5] Y. Suetsugu, “Investigation of a pressure anomaly detection method applying machine learning in the SuperKEKB vacuum system”, *Proc. 20th Annual Meeting of Particle Accelerator Society of Japan (PASJ2023)*, Funabashi, Japan, Aug. - Sep. 2023, Funabashi, pp. 78-82. https://www.pasj.jp/web_publish/pasj2023/proceedings/PDF/WEOB/WEOB9.pdf
- [6] Y. Suetsugu, “Machine learning-based pressure-anomaly detection system for SuperKEKB accelerator”, *Phys. Rev. Accel. Beams*, 2024, **27**, 063201. doi: 10.1103/PhysRevAccelBeams.27.063201
- [7] 伊藤真、”Python で動かして学ぶ！ あたらしい機械学習の教科書”，第 2 版，翔泳社，2019。
- [8] J. M. Lafferty, “Foundations of vacuum science and technology”, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1997.
- [9] <https://www.tensorflow.org/guide/keras>