

中国科学院高能物理研究所

Institute of High Energy Physics
Chinese Academy of Sciences



机器学习在HEPS束线调光上的应用 进展

赵海峰

多学科中心同步辐射技术与应用组/

PAPS-X射线应用系统

2023.06.15



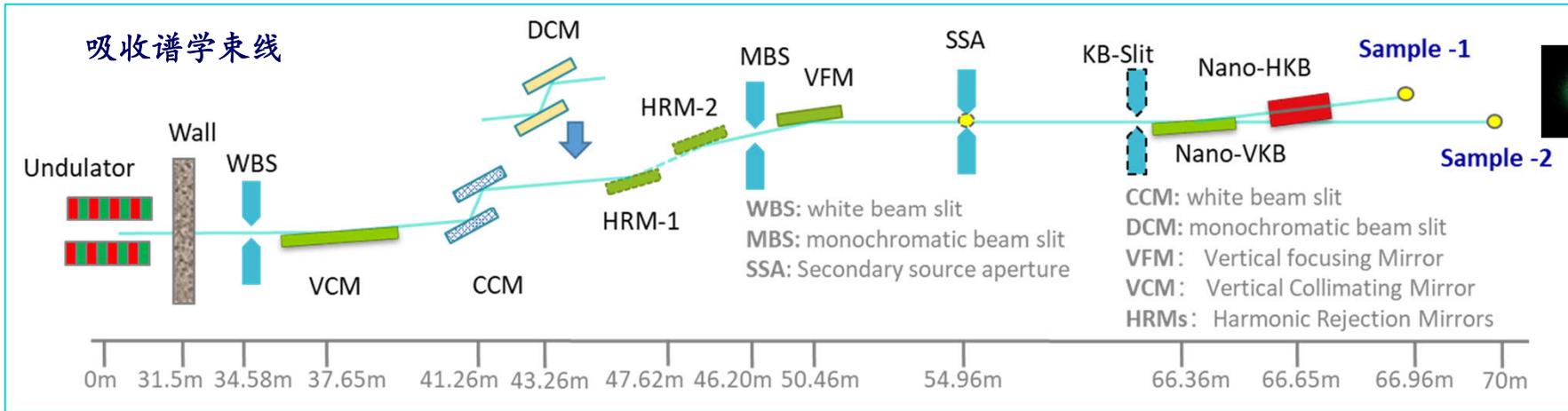
Outline



- 光束线调光
- 机器学习在光束线调光中的应用
- HEPS束线调光ML模型介绍
- Case.1 反射镜姿态调节
- Case.2 反射镜面形误差评估
- 小结和展望



光束线调光



调光面临的困难和挑战:

- 时间长,
 - 传统的光束线调光算法基于规则或手动调节的方式进行, 需要耗费大量的时间。
- 快速调节
 - 某些实验可能需要在短时间内对光束进行快速调节。调光系统需要具备高速响应能力, 以实现快速的光束调节, 同时保持调节的精确性和稳定性。

- 调光复杂、繁琐
 - 多种器件: VCM、HRM1、HRM2、VFM、DCM...
 - 多个调节维度: pitch、roll、yaw、bending、surface error...





机器学习在光束线调光中的应用



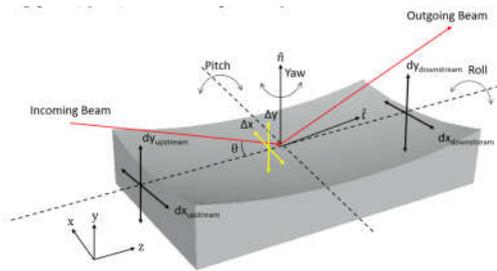
→ ML加速追迹/光学模拟@TES@NSLS-II

→ 2-25 μm @2-5.5keV

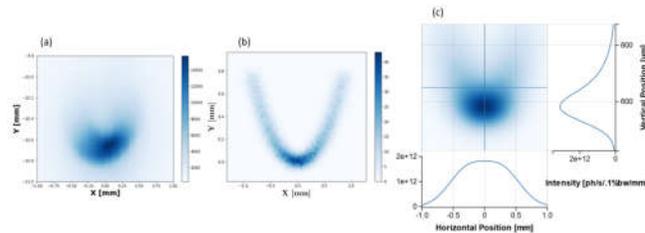


TEW简化设备布局图

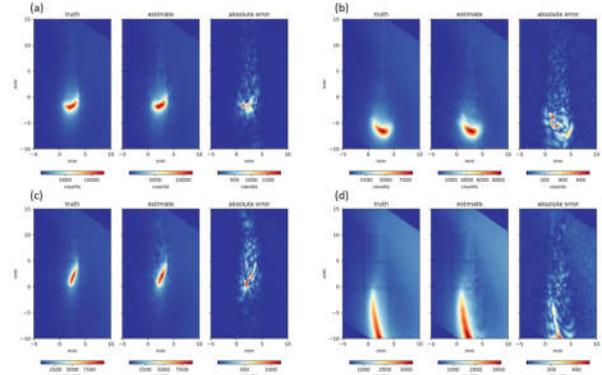
90000张@16H



超环面聚焦镜姿态调节图
4维度



Measure VS SHADOW, SRW



四参数快速模拟

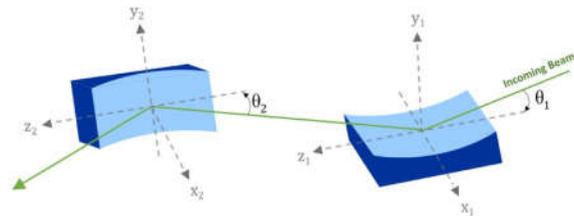
通过ML可以大幅提升束线追迹计算的效率



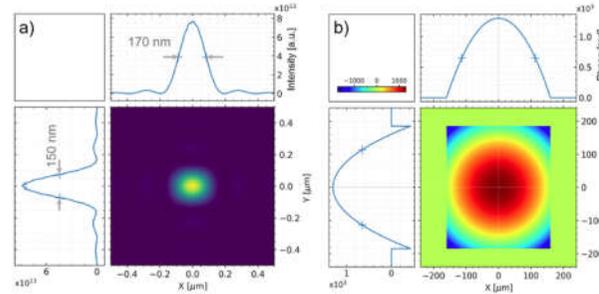
机器学习在光束线调光中的应用



→ DNN助力KB镜像差分析@ CARNAÚBA@Sirius



KB镜示意图



使用SRW模拟的光束强度分布和相位分布

$$\phi_{\text{error}} = \phi_{\text{wfr}} - \phi_{\text{sph}}$$

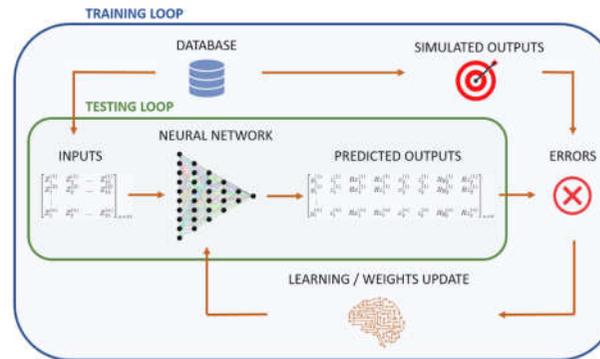
$$\phi_{\text{sph}}(x, y) = \frac{2\pi}{\lambda} (\sqrt{R^2 - x^2 - y^2} - R)$$

像差用Zernike 多项式分解系数表示

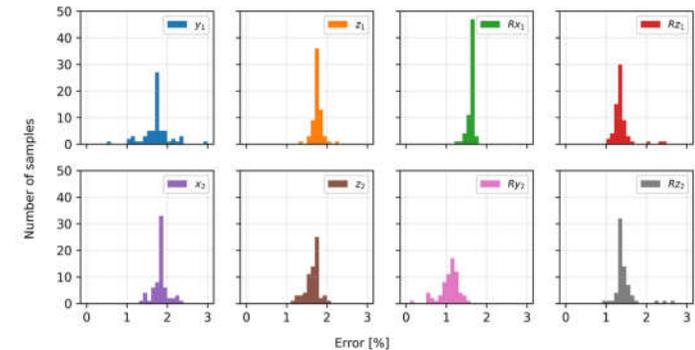
	Installation accuracy	Alignment tolerances			
		KB1	KB2	KB1	KB2
x	μm	50	100	>1000	10
y	μm	150	50	10	>1000
z	μm	200	160	100*	100*
Rx	μrad	40	20	4	>1000
Ry	μrad	175	25	>1000	13
Rz	μrad	340	105	50*	50*

* relative between the two mirrors

KB镜自由度受限



神经网络的训练和测试循环图



每个自由度的神经网络预测误差的直方图

DNN快速识别KB镜像差的来源和程度

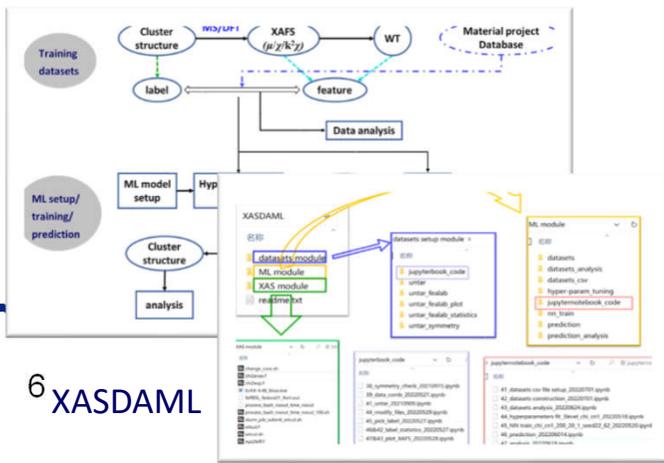
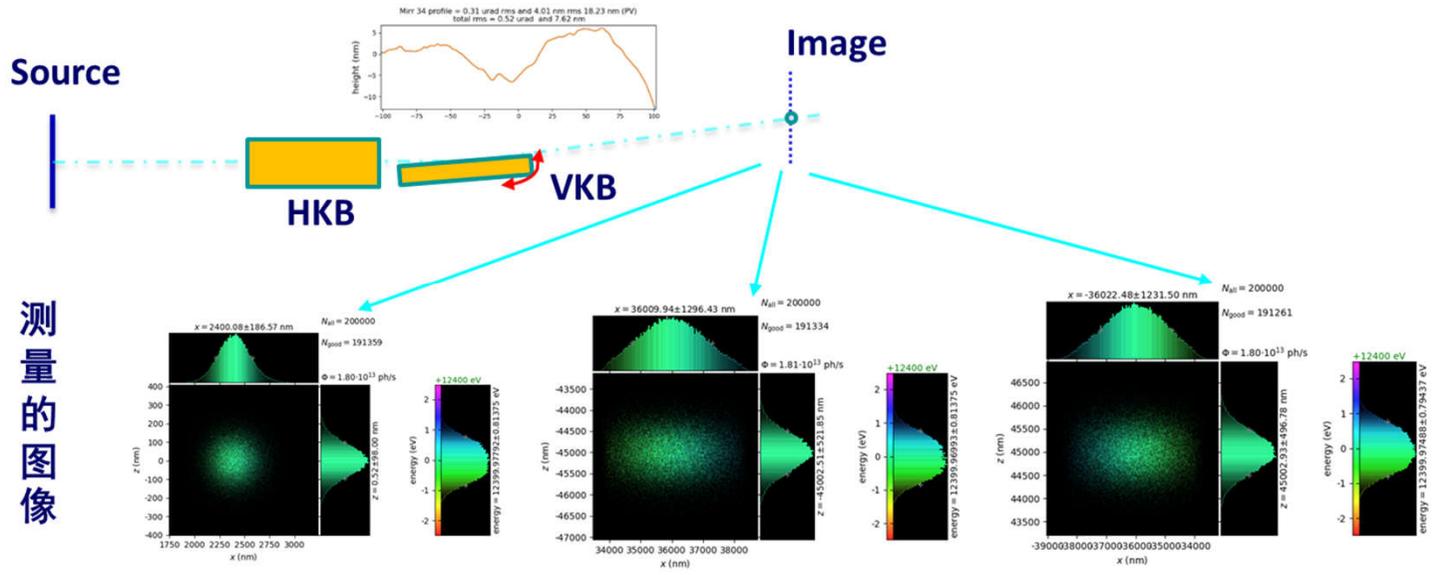
平均误差1.6%，最大误差3.0%



HEPS束线调光ML模型介绍



→ HEPS束线调光ML模型设计



束线调光流程图

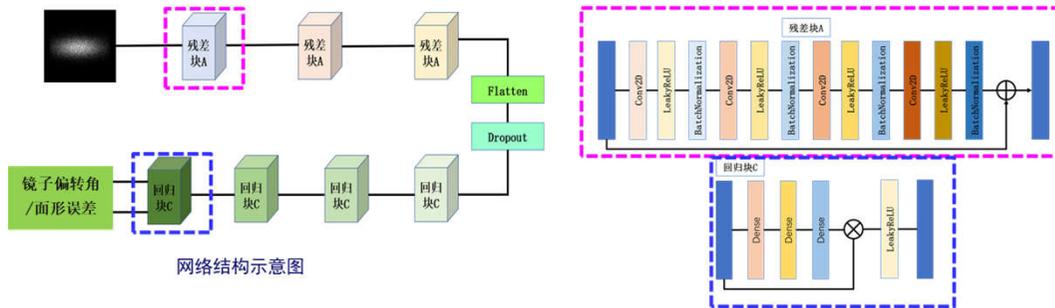


HEPS束线调光ML模型介绍



采用的ML模型

- MLP、GBM、DRF、XGBoost、GLM、StackedEnsemble
- ResNet



调光涉及的因素（影响光斑的因素）

- 光学元件操作
 - 镜子的姿态——滚角、偏转、平移等
 - 夹持、压弯等
 - 狭缝卡位
- 镜子本身——加工导致的面型误差
- 光源——色散分布

代码细节

- 代码语言: Python
- 自己编写
 - 模拟数据生成、图像预处理、标签提取、ML训练、预测、分析
- 代用第三方库
 - XRT:用于光线追踪模拟的python包
 - tensorflow、Keras、sklearn
 - pandas、numpy
 - matplotlib
 - os、sys、time、pickle、mpi4py、cv2、PIL



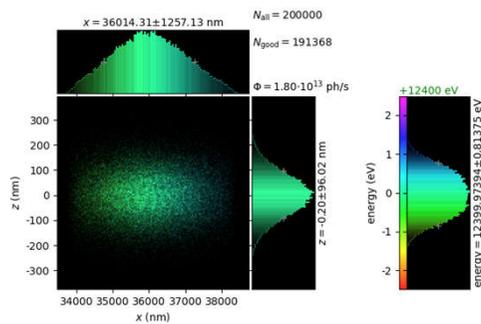
Case. 1 反射镜姿态调节



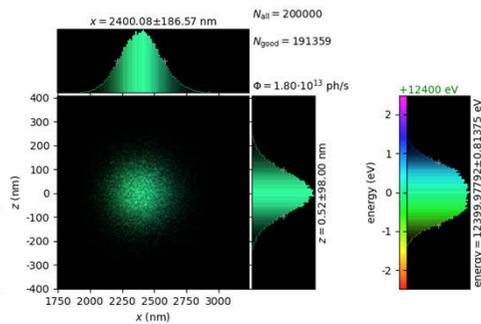
- 情况1
- 不考虑镜面误差、温控/夹持等情况
 - 只考虑反射镜姿态与图像的关系
 - 一块镜子：水平和垂直偏转角度 ↔ 图像

- 数据
- 来源：XRT(<https://xrt.readthedocs.io>)
 - 961套 (134M)
 - Feature
 - 光斑大小、光斑中心点
 - 图像
 - Label: 水平、垂直偏转角

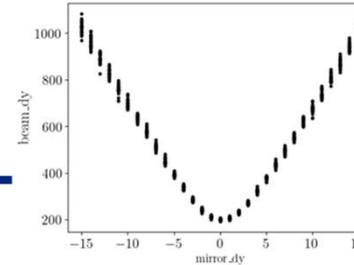
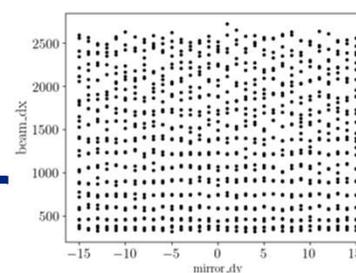
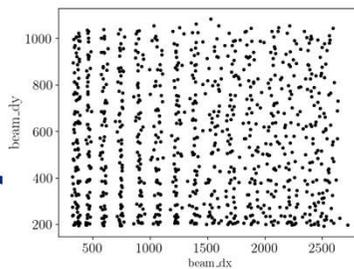
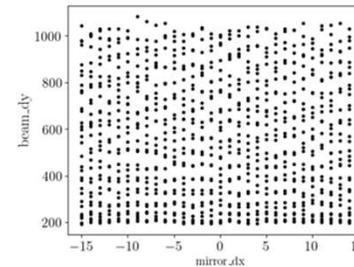
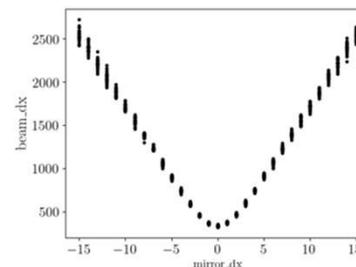
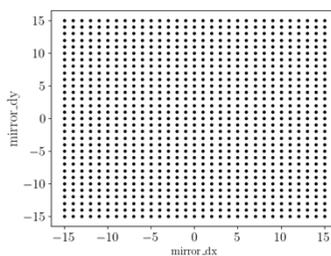
数据集分析



(-15, 0) 图像



(0, 0) 图像



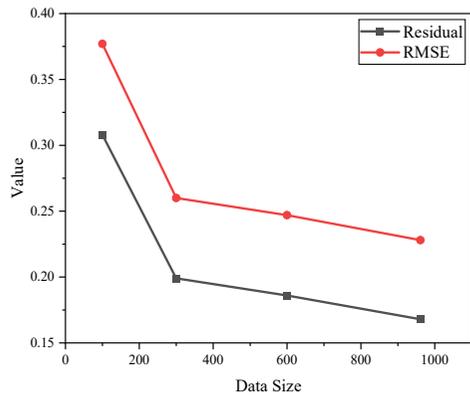
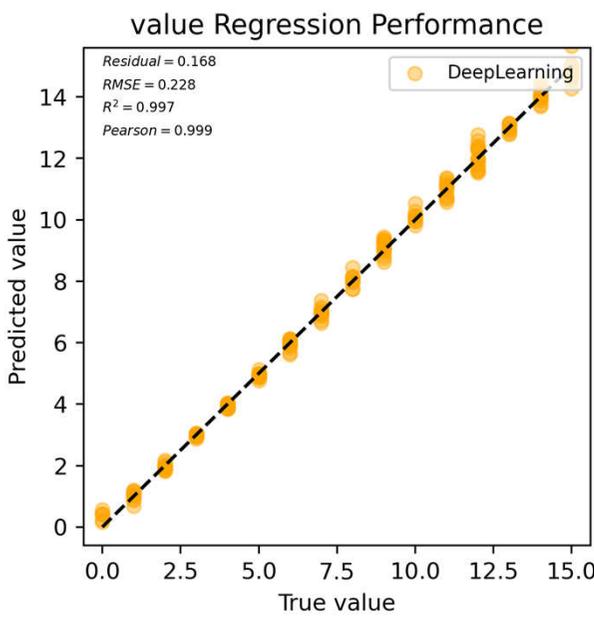
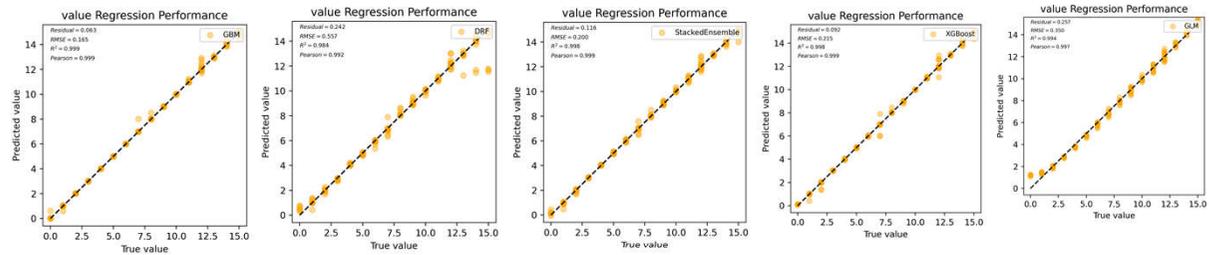
光斑大小与偏转角紧密相关；横纵向分离



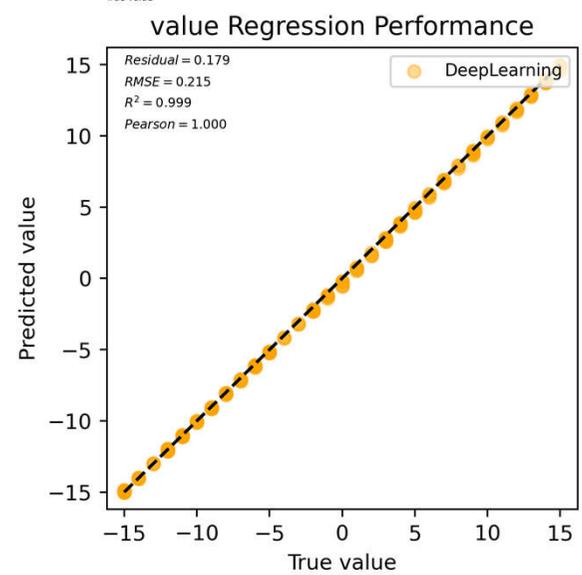
Case. 1 反射镜姿态调节



→ 光斑大小 → 镜子姿态

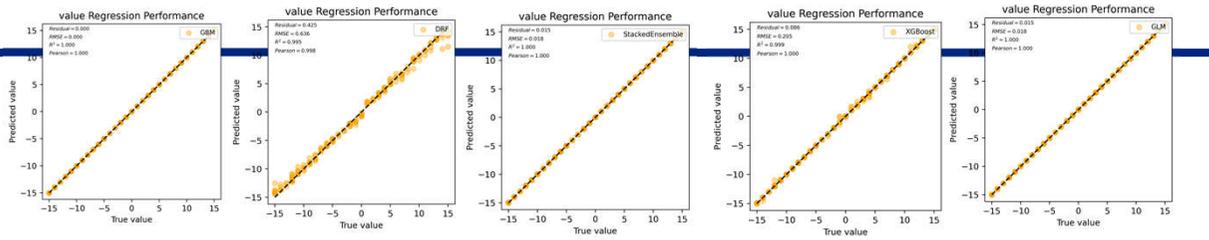


数据集量VS预测情况



→ 光斑位置 → 镜子姿态

从图像中提取出光斑大小/位置就能准确预测出镜子的姿态





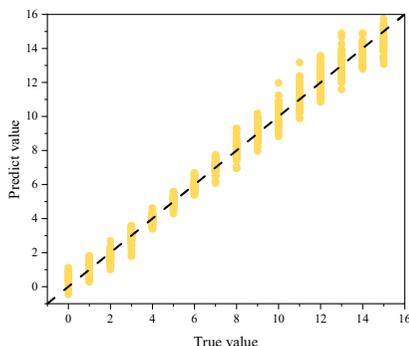
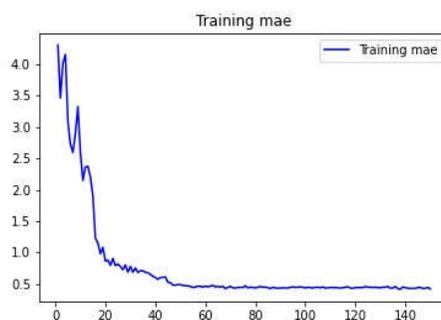
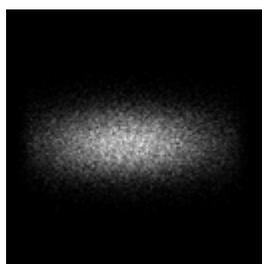
Case. 1 反射镜姿态调节



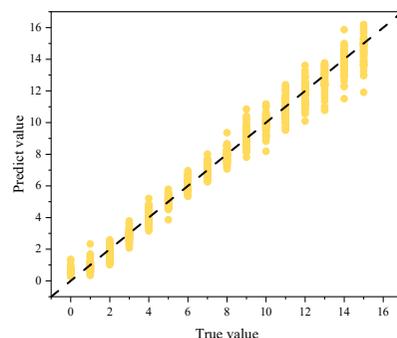
→ 图像→镜子姿态

→ 灰度图 (128*128)

→ 对镜子参数预测效果



10 镜子参数1



镜子参数2

实验平台	显卡: NVIDIA RTX3090 显存: 24GB
数据集	961
图像尺寸	128*128*1
光斑分布 (横轴)	368.61~2773.6
光斑分布 (纵轴)	242.05~1132.62
横纵轴网络权重占比	1:1
训练集、测试集、验证集比例	8: 1: 1
BatchSize	8
Epoch	50轮
训练时间	194s
镜子偏转参数绝对值范围	0-15
MAE, R2	0.396,0.987

通过图像也能给出较为准确的镜子姿态信息



Case. 1 反射镜姿态调节



→ 小结

数据来源		数据提取											图像	
		中心点					光斑尺寸							
机器学习方法		梯度提升机 GBM	深度学习 DeepLearning	分布式随机森林 DRF	堆叠集成算法 Stacked Ensemble	提升树模型 XGBoost	广义线性模型 GLM	梯度提升机 GBM	深度学习 DeepLearning	分布式随机森林 DRF	堆叠集成算法 Stacked Ensemble	提升树模型 XGBoost	广义线性模型 GLM	Resnet
评价指标	R ²	1.000	0.999	0.995	1.000	0.999	1.000	0.999	0.999	0.992	0.999	0.999	0.997	0.987
	MAE	0.000	0.179	0.425	0.015	0.086	0.015	0.063	0.168	0.242	0.116	0.092	0.257	0.396
时间 (s)		9	1241	74	254	453	8	7	1168	73	253	451	7	194

- 对于较为规则的图像，经过数据提取，要比直接输入图像预测效果更好
- 常规的ML模型都能胜任，较为复杂的ML模型存在欠拟合/训练时间长等情况，效果较差。

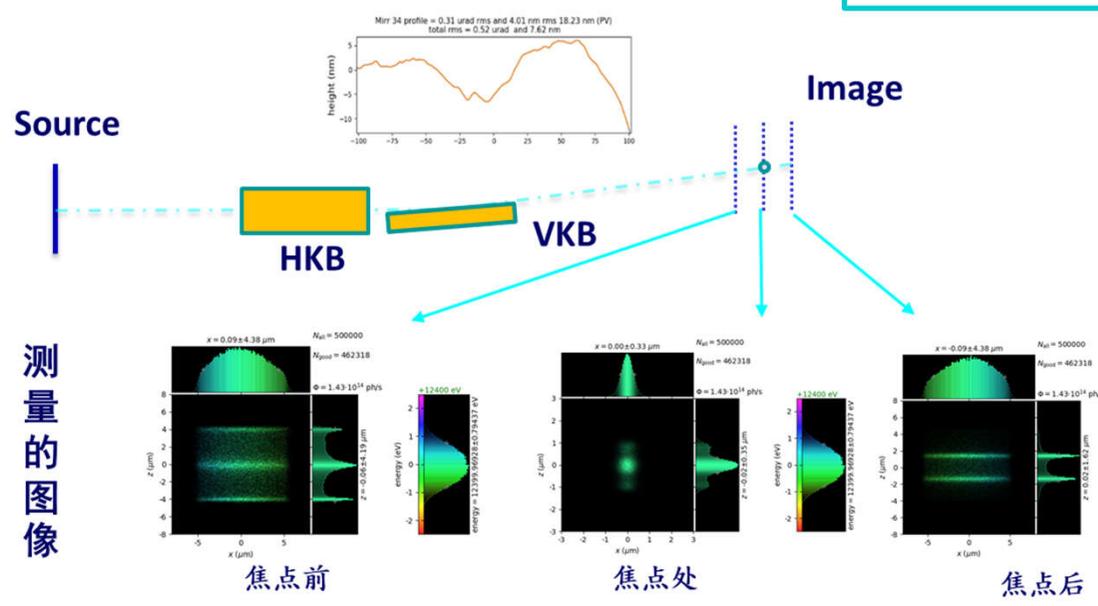


Case. 2 反射镜面形误差评估

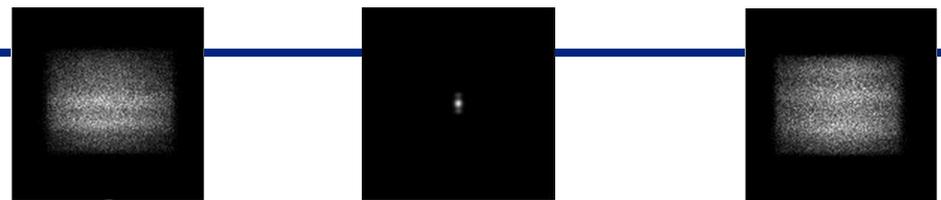


- 情况2
 - 不考虑镜子姿态、压弯/夹持等情况
 - 只考虑面型误差与图像的关系
 - 一维面型 ↔ 图像 (焦点、前、后)

- 数据1
 - 来源: XRT(<https://xrt.readthedocs.io>)
 - 1万套 (6.4GB)
 - Feature: 图像
 - Label: 镜面误差曲线



- 运行环境
 - CPU: 6226R (2.9GHz/16核)*2
 - 内存: 192G (DDR4 2933MHz 32G*6)
 - GPU: RTX3090 (显存24GB)



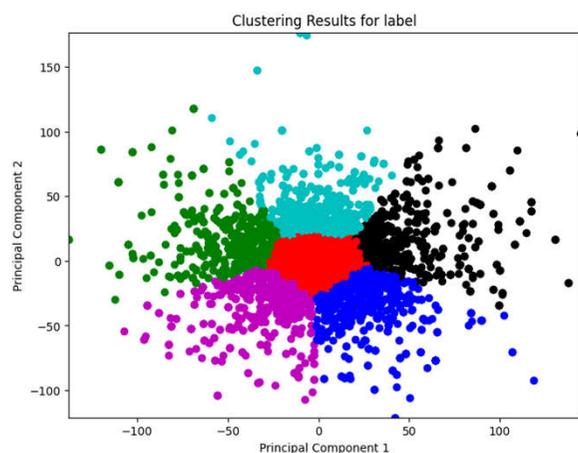


Case. 2 反射镜面形误差评估



→ 数据分析

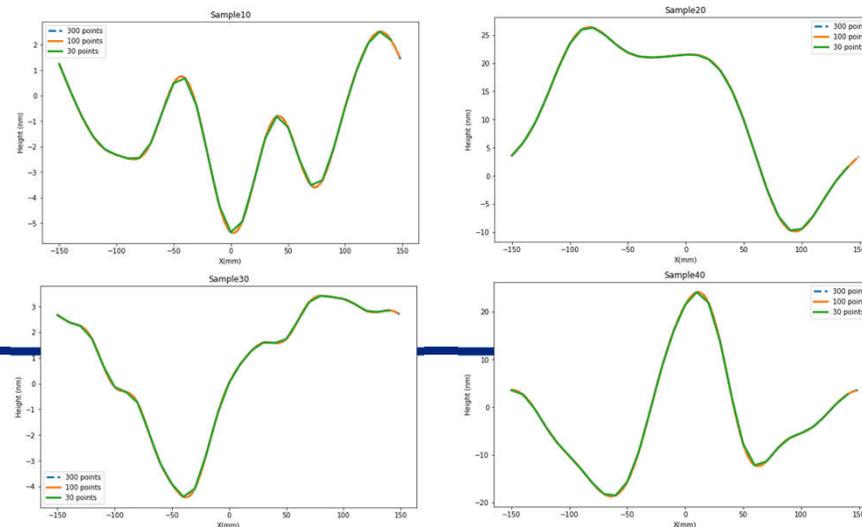
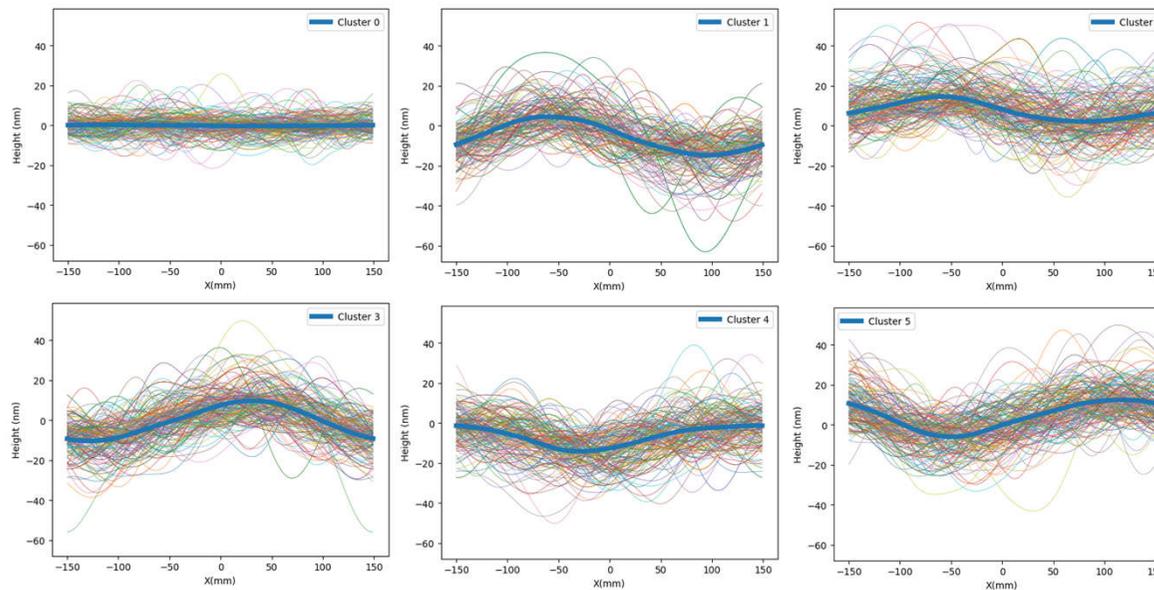
■ 聚类



数据空间较大

■ 数据简化处理

→ 面型误差曲线分别取
300, 100, 30个点



降低数据量和训练难度



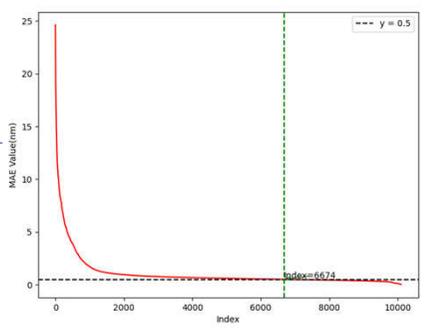
Case. 2 反射镜面形误差评估



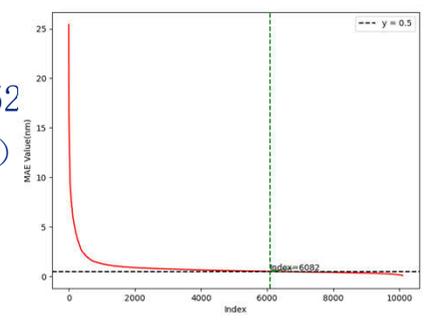
→ 最佳模型 (单图)

评估MAE

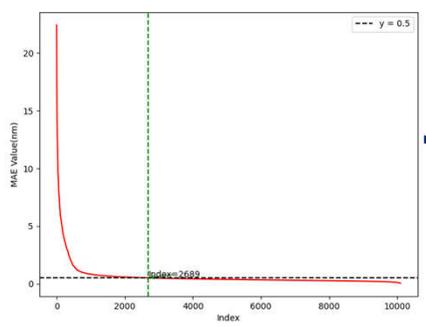
- 焦点处
 - 300个点, $R^2=0.661$
 - 用时 (250epoch, 32-46s/epoch) : 2h45m39s



- 焦点前
 - 30个点, $R^2=0.852$
 - 用时 (322epoch) , 3h1m49s

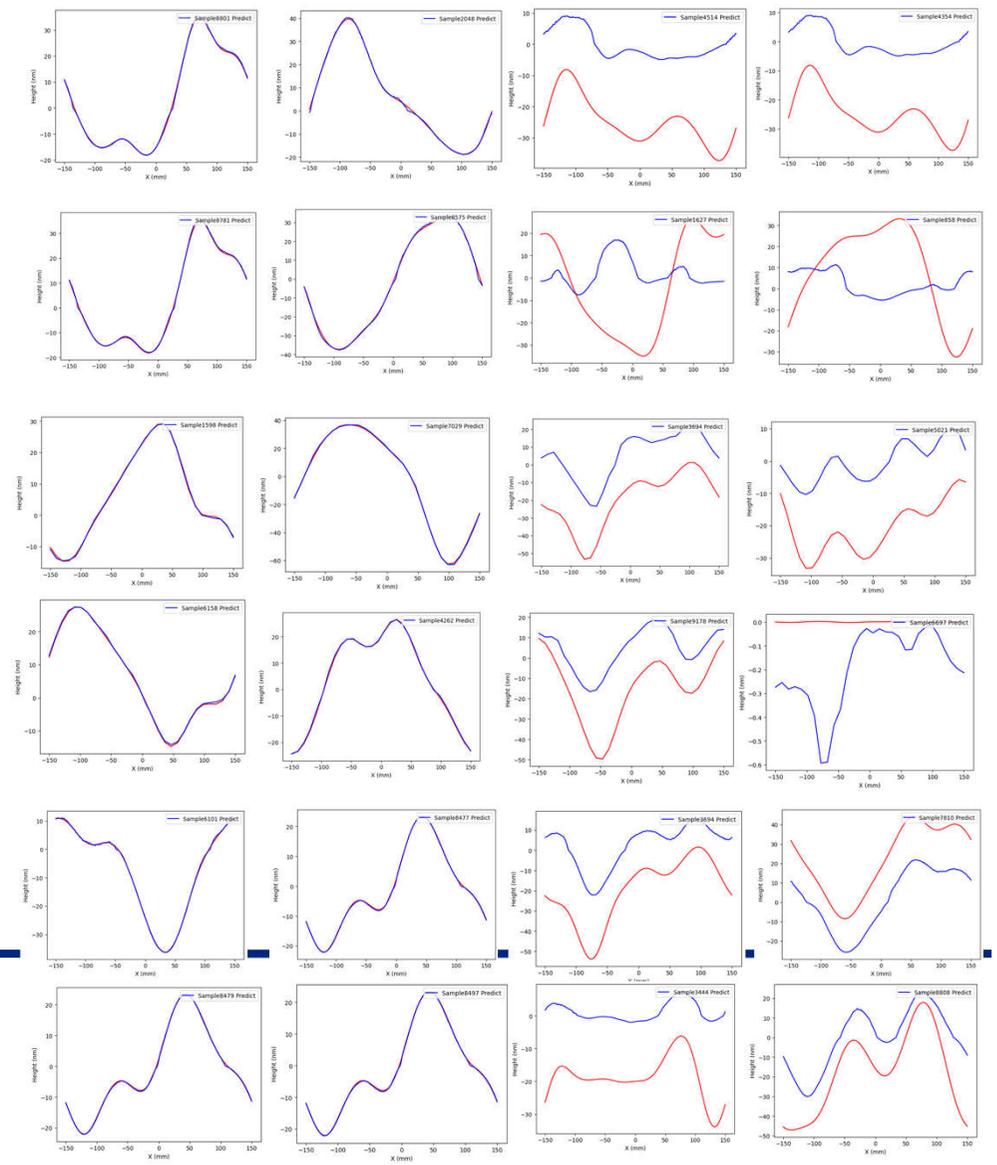


- 焦点后
 - 300个, $R^2=0.864$
 - 用时 (250epoch, 32-46s/epoch) , 2h45m39s



Best

Worst





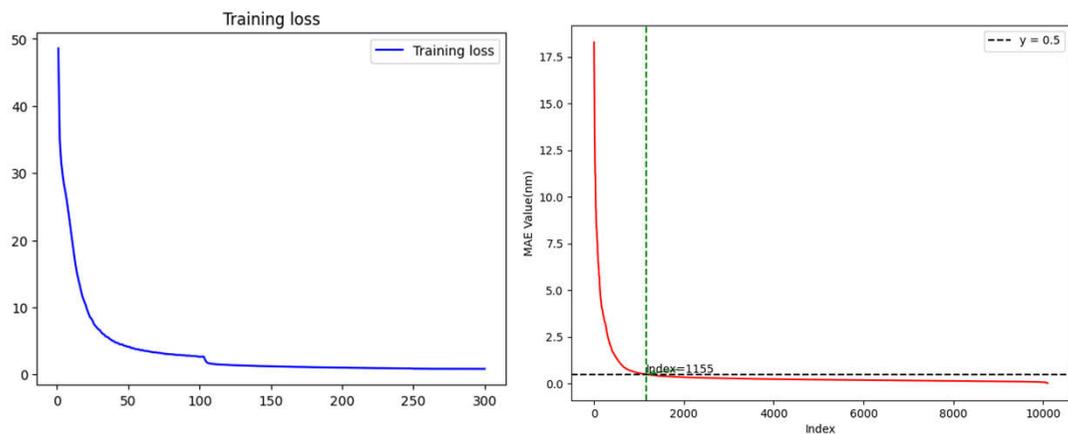
Case. 2 反射镜面形误差评估



→ 最佳模型 (3图)

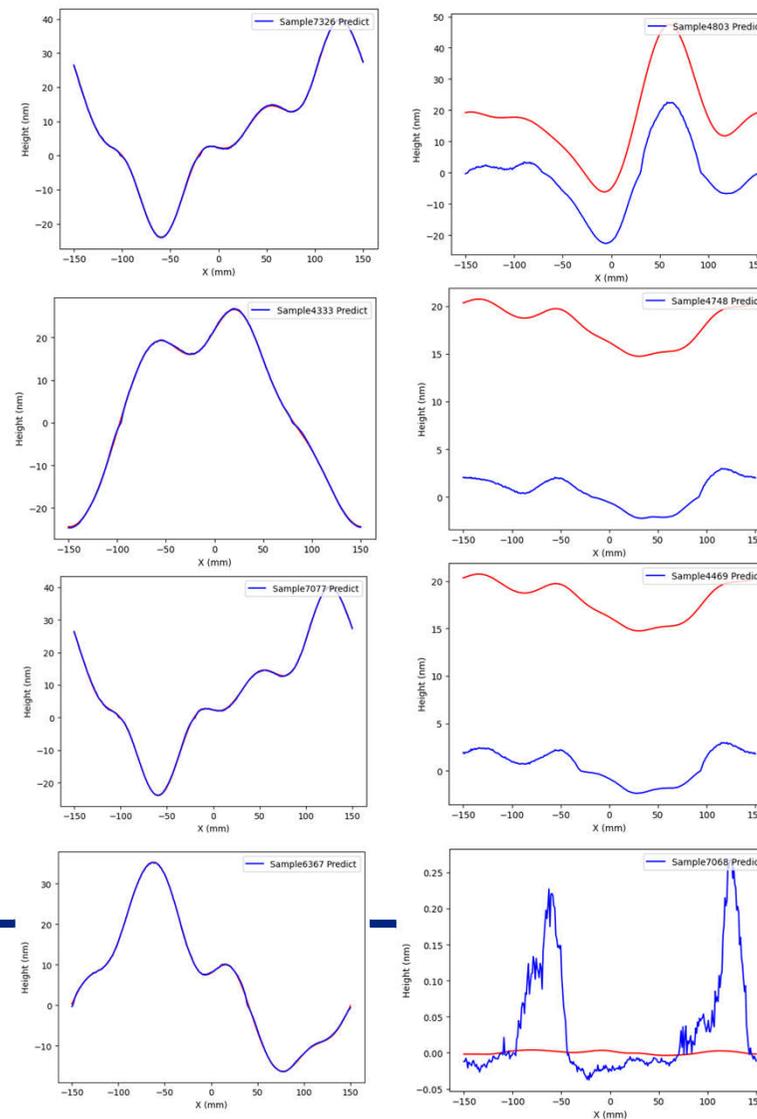
→ 300个点, $R^2=0.884$

→ 用时 (250epoch), 3h12m12s



Best

Worst

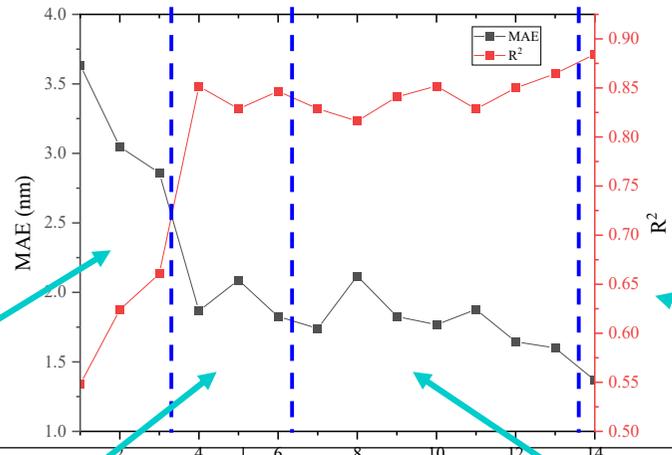




Case. 2 反射镜面形误差评估



→ 模型比较



训练数据		焦点处		焦点前		模型序号						焦点后		焦点处+	焦点前+	焦点后
取点个数	30	30	300	30	30	30	30	30	100	100	300	300	300	300	300	300
回归层结构	层数	3	5	5	3	4	6	5	3	4	4	5	5	5	5	5
	节点数	300-150-30	600-400-200-100-30	1000-800-600-500-300	300-150-30	300-150-60-30	600-400-200-100-60-30	600-500-450-400-30	512-256-100	1024-512-256-100	1024-512-400-300	600-500-450-400-300	1600-1000-800-600-300	1000-800-600-400-300	1000-800-600-400-300	1000-800-600-400-300
评价指标	MAE	3.6350	3.0476	2.8588	1.8667	2.0878	1.8259	1.7401	2.1176	1.8259	1.7680	1.8774	1.6458	1.6000	1.3671	
	MSE	34.4962	27.0844	25.6617	11.1458	13.0474	11.5208	12.2632	13.4616	11.6708	11.0437	11.8627	10.2043	10.1216	7.9287	
	RMSE	5.8733	5.2043	5.0657	3.3385	3.6121	3.3942	3.5019	3.6690	3.4163	3.3232	3.4442	3.1944	3.1814	2.8158	
	R2	0.5478	0.6240	0.6605	0.8517	0.8286	0.8467	0.8287	0.8163	0.8409	0.8519	0.8285	0.8499	0.8644	0.8844	

- 3图>焦点后>焦点前>焦点处
- 数据点数对训练时长、预测效果无影响

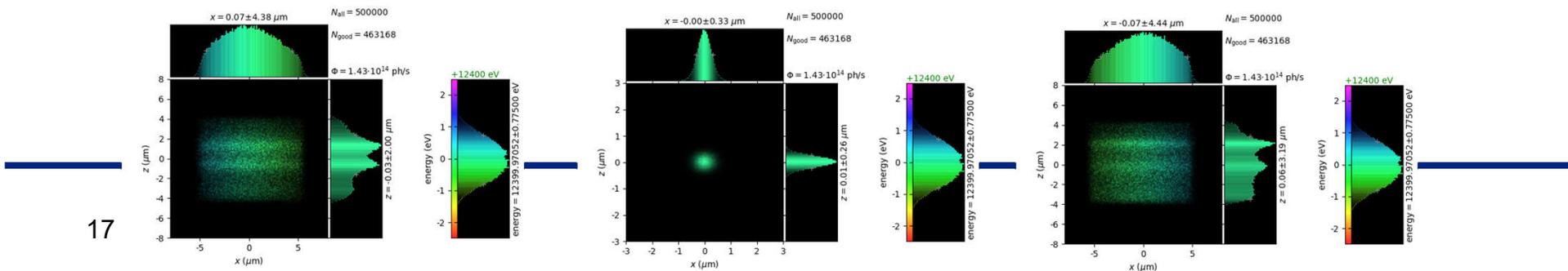
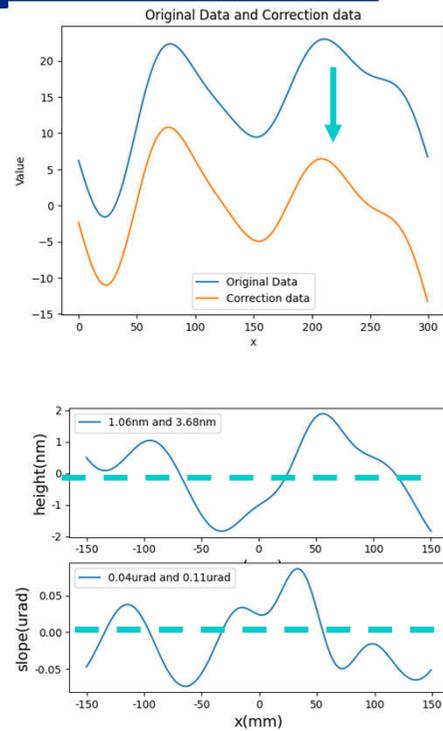
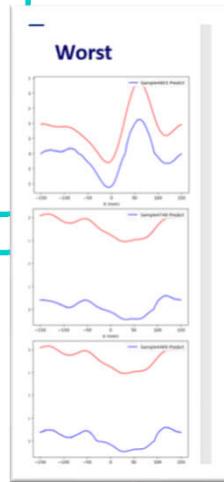


Case. 2 反射镜面形误差评估



- 情况2
 - 不考虑镜子姿态、压弯/夹持等情况
 - 只考虑面型误差与图像的关系
 - 一维面型 ↔ 图像 (焦点、前、后)

- 数据2
 - 来源: XRT(<https://xrt.readthedocs.io>)
 - 1万套 (6.4GB)
 - Feature: 图像
 - Label: 镜面误差曲线 (做重心、倾斜校正)
 - 考虑实际加工工艺情况
 - 限制数据范围



焦点前

焦点处

焦点后

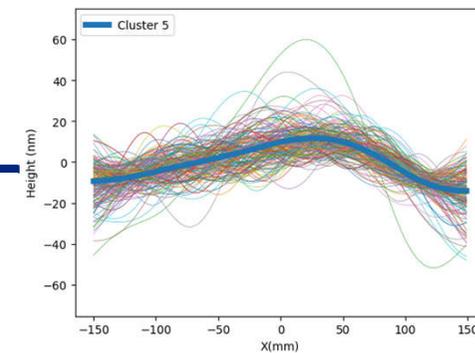
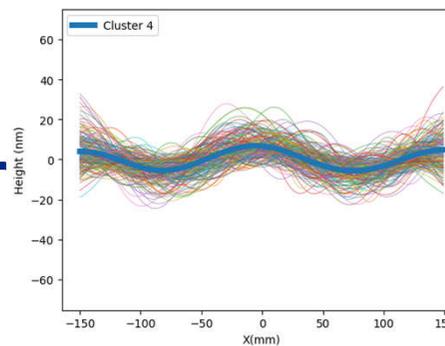
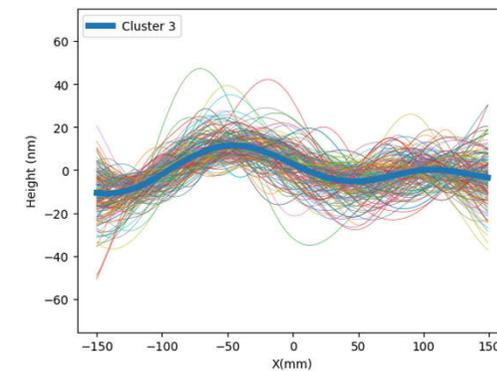
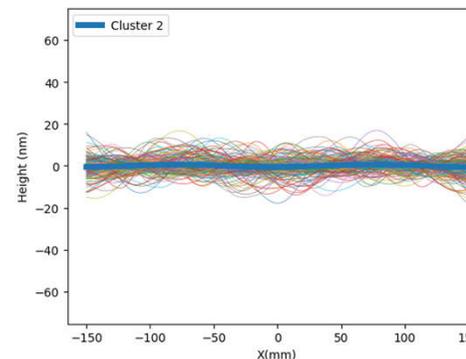
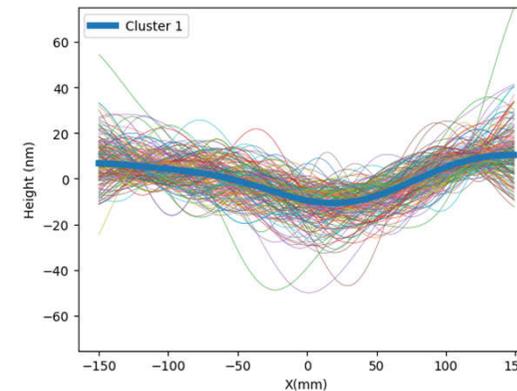
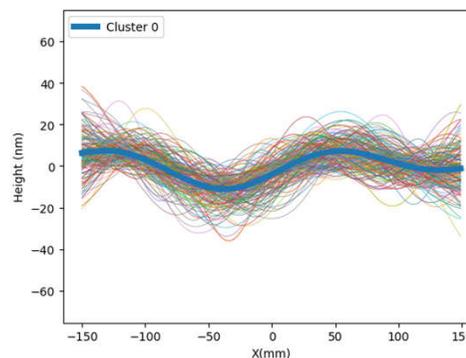
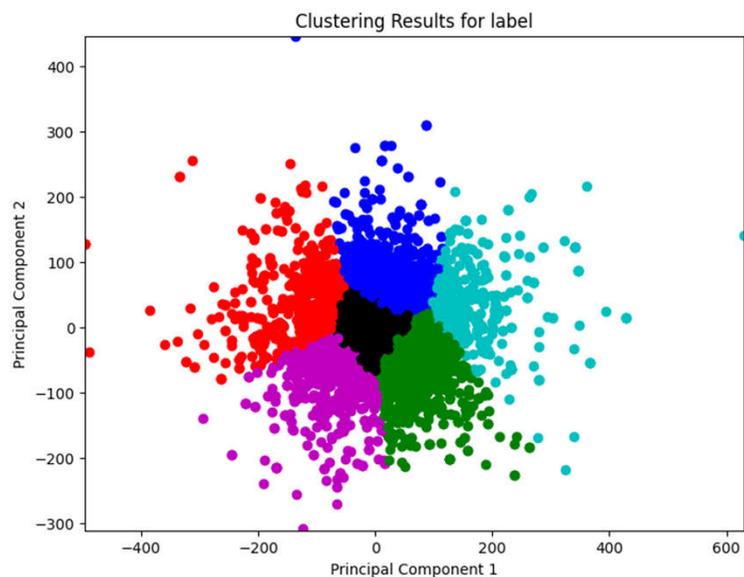


Case. 2 反射镜面形误差评估



→ 数据分析

■ 聚类



相较于非约束数据，聚类更清晰



Case. 2 反射镜面形误差评估



→ 最佳模型（单图通道） 评估MAE

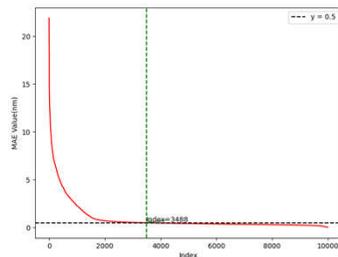
Best

Worst

■ 焦点处

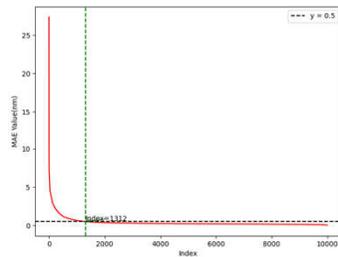
- Loss=MAE
- $R^2=0.404$

- 300个点
- 5层（1000-800-600-400-300）
- 用时（300epoch）



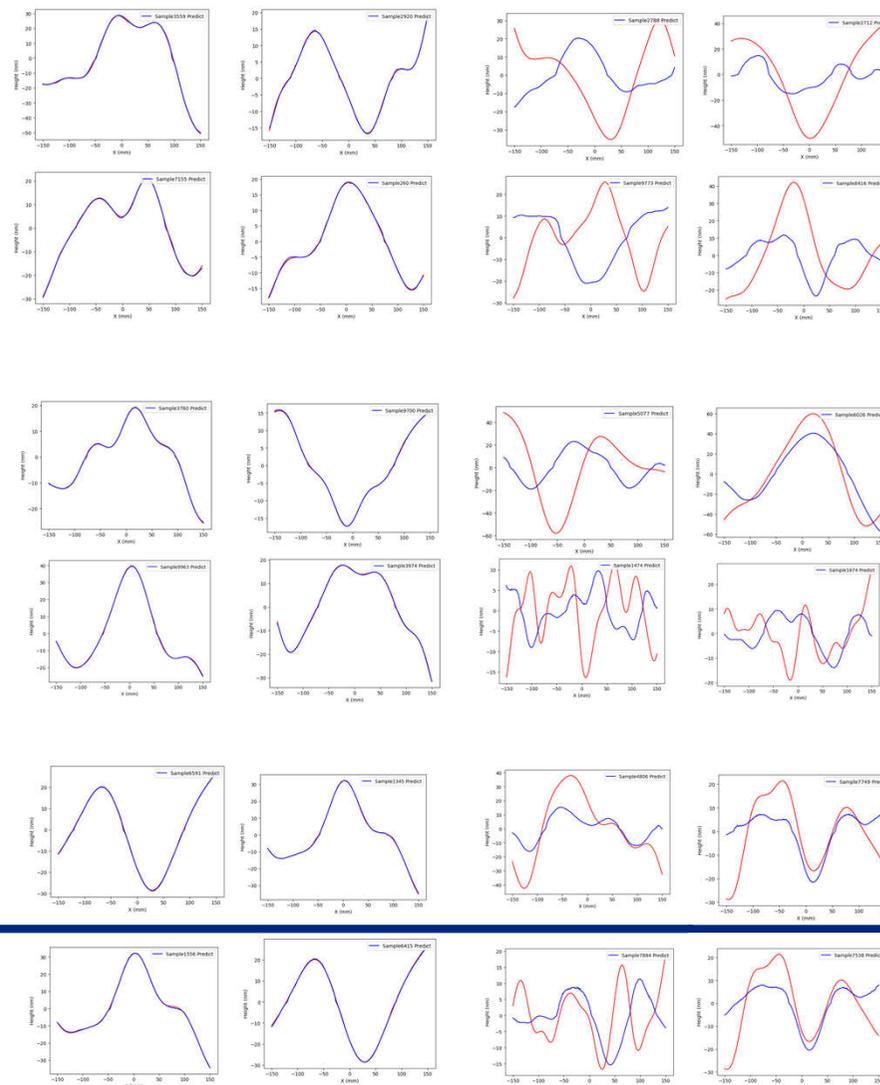
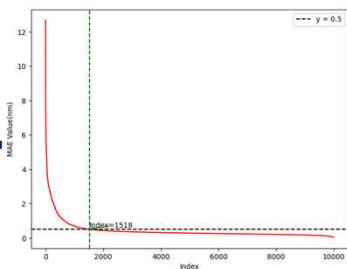
■ 焦点前

- Loss=MAE
- $R^2=0.884$



■ 焦点后

- Loss=MAE
- $R^2=0.919$



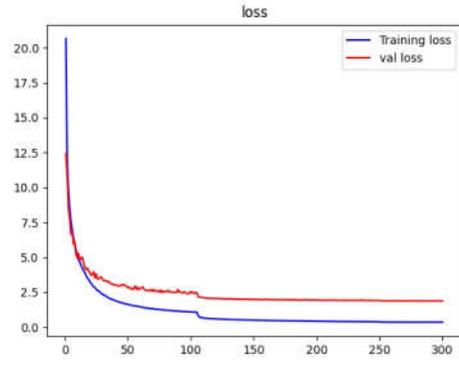


Case. 2 反射镜面形误差评估

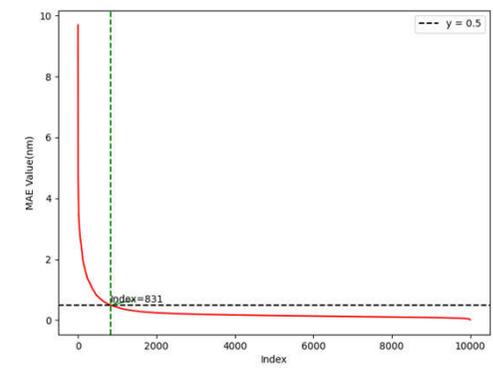


最佳模型 (3图通道)

- 常规
 - ➔ Loss=MAE
 - ➔ $R^2=0.961$

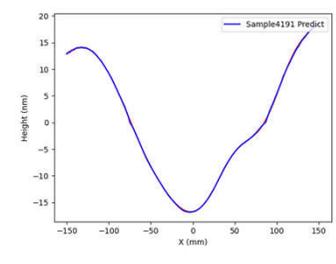
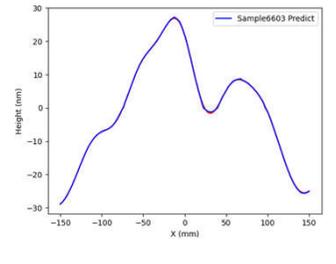
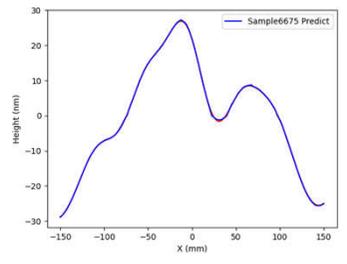
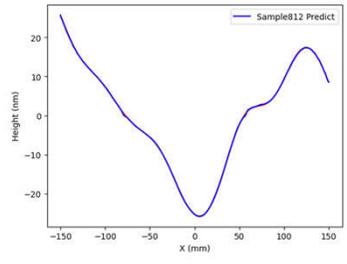


训练曲线

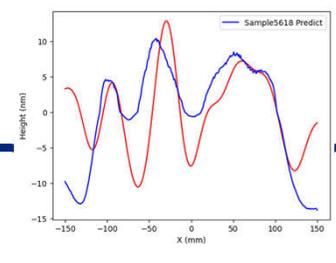
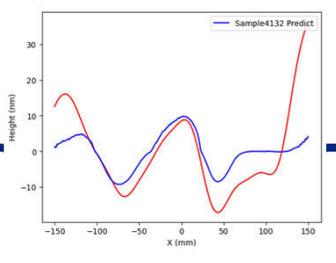
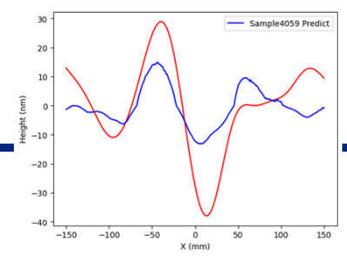
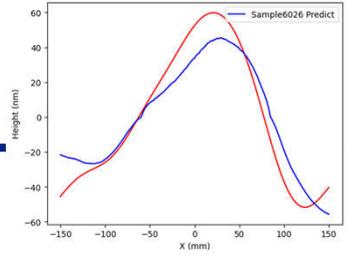


评估MAE

Best



Worst





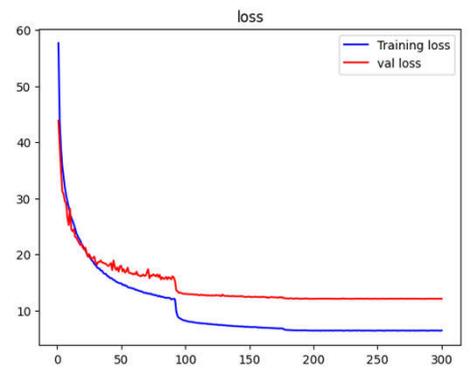
Case. 2 反射镜面形误差评估



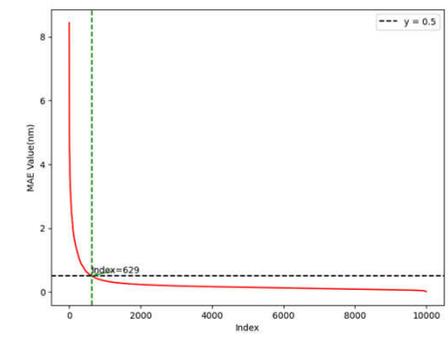
➔ 最佳模型 (3图通道)

■ 物理嵌入

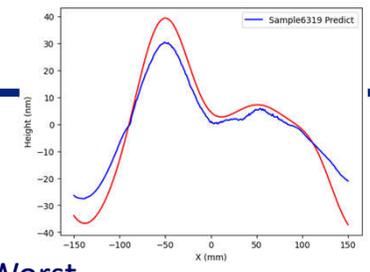
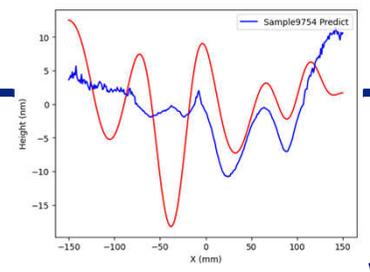
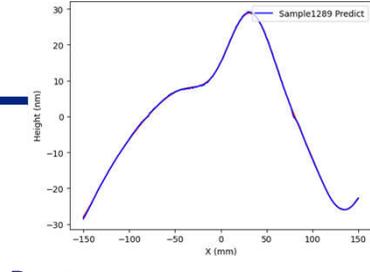
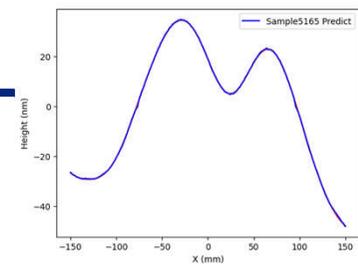
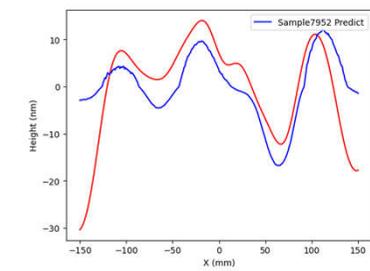
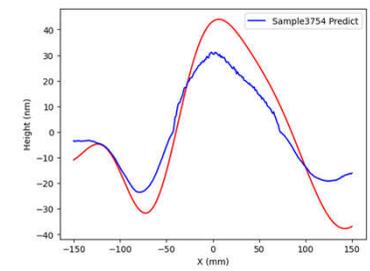
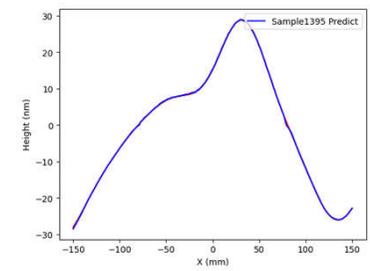
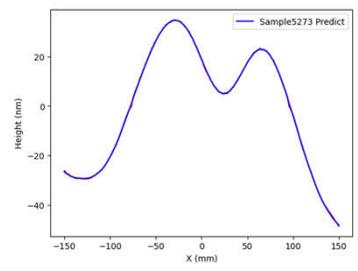
- ➔ $loss = MAE + \text{强制重心为0}$
- ➔ $loss = MAE + \text{平移误差} + \text{斜率误差}$
- ➔ $loss = MAE + 10 * \text{平移误差} + 10 * \text{斜率误差}$
- ➔ $loss = 5 * MAE + \text{平移误差} + \text{斜率误差}$
- ➔ $loss = 10 * MAE + \text{平移误差} + \text{斜率误差}$
- ➔ **$loss = 20 * MAE + \text{平移误差} + \text{斜率误差}$**
- ➔ $loss = 30 * MAE + \text{平移误差} + \text{斜率误差}$



训练曲线



评估MAE



21

Best

Worst

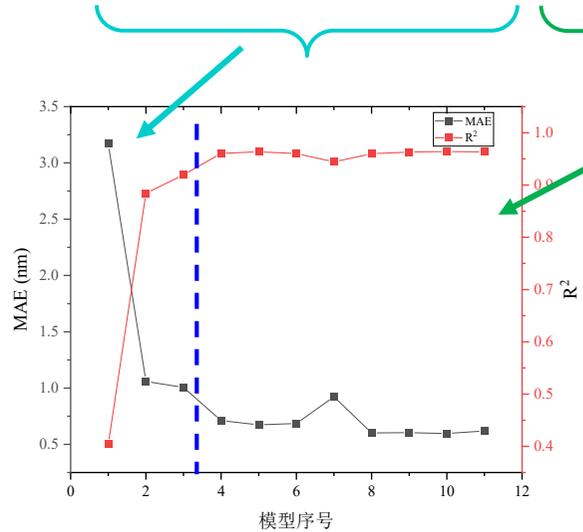


Case. 2 反射镜面形误差评估



→ 模型比较

图像		焦点处	焦点前	焦点后	焦点处+焦点前+焦点后							
损失函数		MAE	MAE	MAE	MAE	MAE + 强制平均值为0	MAE + 平移误差+斜率误差	MAE + 10*平移误差+10*斜率误差	5* MAE + 平移误差+斜率误差	10* MAE + 平移误差+斜率误差	20* MAE + 平移误差+斜率误差	30* MAE + 平移误差+斜率误差
评价指标	MAE	3.1701	1.0587	1.0060	0.711	0.6735	0.6853	0.9224	0.6022	0.6034	0.5965	0.6193
	MSE	27.2497	5.4236	3.7595	2.1415	1.9178	2.1174	2.776	1.8484	1.8272	1.7545	1.9172
	RMSE	5.2201	2.3289	1.9389	1.4634	1.3849	1.4551	1.6661	1.3596	1.3517	1.3246	1.3846
	R2	0.4039	0.8844	0.9193	0.9605	0.9636	0.9601	0.9444	0.9597	0.9631	0.9642	0.9634



- 单通道：焦点后 > 焦点前 > 焦点处
- 多通道 > 单通道
- 物理嵌入能提升预测能力



总结和未来展望



→ 小结

- 构建ML模型，通过XRT建模，利用样品处的图像来预测光学元件的姿态，或镜子的面型误差，是可行的
- 更为丰富的图像有助于姿态和面型误差的预测
- 物理嵌入能有效提升预测能力

→ 下一步工作

- 优化数据集
 - 利用模式传播的方式、并行计算方法提升波动传播的计算效率
 - 生成更有针对性的数据集，降低训练难度
- 增大适用场景范围。考虑更多符合实验场景（考虑多镜、色散光、夹持等），来预测镜子姿态；
- 优化ML模型
- 采集实验数据进行分析，用于HEPS首批线站束线调光
- 利用面型误差工作，将其推广到波前检测工作
- 结合控制系统，实现调光自动化



致谢



→ 团队

- PAPS-X射线光学系统/HEPS-光学系统：杨福桂、李明
- PAPS-X射线应用系统：尧浩东

→ 致谢

- HEPS/PAPS/BSRF
- 国家重点研发计划“大科学装置前沿研究”重点专项





谢谢!
欢迎批评指正!