

# 论文概述

这篇论文标题为《20-Dimensional surrogate-assisted Bayesian optimization of laser-driven proton beams》，发表于2025年5月23日，作者来自加拿大Institut national de la recherche scientifique (INRS)和Infinite Potential Laboratories。论文聚焦于使用机器学习（Machine Learning, ML）优化激光驱动质子加速过程，特别是通过自适应控制可变形镜（Deformable Mirror, DM）来提升质子束的最大能量。核心方法是多步随机森林（Random Forest, RF）辅助的贝叶斯优化（Bayesian Optimization, BO），简称MSBO（Multi-Step Bayesian Optimization）。该方法在实验中将质子最大能量从3.85 MeV提升到6.64 MeV，增幅70%，并优于传统波前校正方法（增幅24%）。

下面，我将详细介绍论文中的贝叶斯优化算法和实验步骤。解释基于论文内容，避免外部假设。

## 贝叶斯优化算法

论文中使用的贝叶斯优化（BO）是一种代理辅助（surrogate-assisted）的优化框架，旨在高效优化高维、噪声大、黑箱函数（如激光-等离子体交互导致的质子能量）。BO的核心是构建一个概率模型来近似目标函数（这里是质子最大能量作为DM执行器电压的函数），然后通过采集函数（acquisition function）指导下一次采样点。论文强调BO适合低维空间（≤20维），并结合随机森林（RF）作为代理模型，以处理噪声和非线性关系。

## 算法关键组件

### 1. 代理模型（Surrogate Model）：随机森林（Random Forest, RF）

- RF是一种集成学习方法，由多个决策树组成（论文中使用300棵树）。每棵树独立训练，预测通过平均或投票得出，以减少噪声和过拟合。
- RF的优势：捕捉复杂非线性关系、处理噪声数据（如TNSA机制的5%射击间波动）、提供物理可解释性（例如，通过相关矩阵分析执行器影响）。
- 训练细节：树生长直到叶子“纯净”即一组执行器电压对应相同质子能量输出）。RF用于预测质子最大能量作为20维输入（执行器0-19电压）的函数。
- 为什么用RF而非高斯过程（Gaussian Process, GP）？RF更适合高维、噪声数据，且计算高效。论及RF在等离子体稳定性预测中的应用时，文中指出RF具有更高的泛化能力。

## 2. 贝叶斯优化框架

- 目标函数：最大化质子能量 ( $E_p \max$ )，这是一个黑箱函数，受DM执行器电压影响。BO不直接实验评估目标函数，而是用RF代理来模拟。
- 优化过程：使用Python的scikit-optimize库中的 `gp_minimize` 函数。该函数基于GP（尽管代理是RF，但优化器用GP迭代细化预测）。
- 初始化：从初始数据集（360个配置）训练RF。
- 迭代：BO平衡探索（采样不确定区域）和利用（聚焦高能量配置）。
- 采集函数（Acquisition Function）：上置信界（Upper Confidence Bound, UCB）。UCB优先选择潜在高能量或不确定性高的配置，公式隐含为： $UCB(x) = \mu(x) + \kappa \cdot \sigma(x)$ ，其中 $\mu(x)$ 是均值预测， $\sigma(x)$ 是不确定性， $\kappa$ 是探索-利用权衡参数。
- 维度和约束：优化20维空间（执行器0-19，电压范围[-80V, 80V]），其余28个执行器固定为0V。以减少计算复杂性，避免高维“维度诅咒”。
- 优势：
  - 高效：只需<150个实验样本即可收敛，而非穷举搜索。
  - 鲁棒性：处理噪声（实验波动~5%），忽略失败射击，离线优化减少风险（如极端电压损坏光学元件）。
  - 与文献比较：类似于Sequential Model-Based Algorithm Configuration (SMAC) 和Efficient Global Optimization (EGO)，但论文强调RF代理在高维噪声环境中的适用性。

## 3. 多步结构（Multi-Step Bayesian Optimization, MSBO）

- MSBO是论文的核心创新：将BO分解为多步，结合数据生成、代理训练和优化。
- 为什么多步？直接BO在低重复率实验（如离子加速，0.625 Hz）中资源消耗大。MSBO先收集数据训练代理，再用BO优化代理，减少实时实验。
- 评估指标：

- 均方误差 (RMSE)。评估RF预测准确性，公式为  $RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum (y_i - \hat{y}_i)^2}$ ，其中  $y_i$  是实验能量， $\hat{y}_i$  是预测。RMSE从~1.3 MeV降到~0.3 MeV (~100射击后稳定)。
- 收敛：89次试验显示，~100-150射击后  $E_p \text{ max}$  稳定在  $6.44 \pm 0.33$  MeV，接近实验  $6.64 \pm 0.30$  MeV。

#### 4. 局限与扩展

- 局限：BO在>20维空间效率低；依赖源稳定性（噪声限预测准确~5%）。
- 扩展：可并行BO、混合优化，或应用于其他指标（如质子通量）。论文建议用于无全功率波前测量的设施。

## 实验步骤

实验在INRS的ALLS 150 TW Ti:Sapphire激光器上进行，激光参数：3.2 J能量，22 fs脉宽，800 nm波长，峰值强度  $1.3 \times 10^{20} \text{ W/cm}^2$ 。目标：通过DM控制波前，提升TNSA (Target Normal Sheath Acceleration) 质子能量。DM有48个执行器（压电双模，[-200V, +200V]），但只优化20个。诊断：Thomson抛物线谱仪+MCP检测器测量质子谱，定义  $E_p \text{ max}$  为谱截止斜率中点能量。波前传感器 (SID4 WFS) 和CCD相机辅助分析（全功率下衰减测量）。

## 详细步骤（对应论文图1.C的MSBO流程）

### 1. 数据收集（第一步：生成初始数据集）

- 使用拉丁超立方采样 (Latin Hypercube Sampling, LHS) 生成360个DM配置。
- 输入：执行器0-19电压独立变化 [-80V, 80V]，其余执行器为0V。LHS确保参数空间均匀覆盖。
- 输出：每个配置下测量质子最大能量（重复率0.625 Hz，目标为4.5 μm铝箔，p偏振，20°入射角）。
- 分析：相关矩阵显示执行器0（控制散焦）与  $E_p \text{ max}$  相关最强 (0.86)，平均相关 0.08，执行器间相关弱 ( $< |0.1|$ )。
- 时间：整个过程~1小时（包括计算5分钟）。

## 2. 代理模型训练（第二步：训练RF模型）

- 用360个数据训练RF（300棵树），预测E\_p max作为电压函数。
- 分割：85%训练，15%测试。树生长至叶子纯净。
- 目的：RF作为快速评估的代理，模拟真实实验。

## 3. 贝叶斯优化（第三步：使用BO优化代理）

- 输入：训练好的RF作为目标函数。
- 工具：scikit-optimize的gp\_minimize，UCB采集函数。
- 过程：BO迭代探索20维空间，平衡探索/利用，找到最优电压配置。
- 输出：预测的最优DM配置和E\_p max。

## 4. 实验验证（第四步：测试最优配置）

- 将BO最优配置应用于DM，实验测量质子谱（平均10射击）。
- 结果：E\_p max =  $6.64 \pm 0.30$  MeV (MSBO)，对比零电压 $3.85 \pm 0.14$  MeV (增70%)，WFS校正 $5.37 \pm 0.24$  MeV (增24%)。
- 焦斑分析：MSBO产生变形波前（非高斯），强度低但能量耦合更好（图2）。
- 重复试验：在新目标架上测试，E\_p max降13% ( $5.82 \pm 0.38$  MeV)，归因于对齐/表面质量/激光漂移。

## 5. 效率评估（附加分析）

- 89次优化试验：随机子集（2-358射击）训练RF，重复10次BO。结果： $\sim 30$ 射击达90%最优， $\sim 100$ 射击稳定（图3.A）。
- RMSE演化：从 $\sim 1.3$  MeV降到 $\sim 0.3$  MeV（图3.B），残余噪声来自实验波动。
- 比较：仅优化执行器得 $5.25 \pm 0.22$  MeV；手动/WFS方法时间类似但次优。

## 实验注意事项

- 稳定性：射击间 $E_p$  max波动~5%，影响优化噪声。
- 资源：每个目标架~400射击，MSBO用~150，剩余用于研究。
- 创新：MSBO挑战传统“平波前”假设，证明非高斯梁（如Laguerre-Gaussian模式）可提升能量耦合。
- 适用性：适合短焦距加速器或无全功率诊断设施。

此方法展示了数据驱动优化在激光-等离子体物理中的潜力，未来可扩展到全48维或多目标优化。如果需要更多细节（如代码或模拟），可参考论文数据可用性声明。