

制限付きベイズ最適化の加速器チューニングへの応用 APPLICATION OF CONSTRAINED BAYESIAN OPTIMIZATION TO TUNING PARTICLE ACCELERATORS

三塚岳 ^{*,A,B)}

Gaku Mitsuka ^{*,A,B)}

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

^{B)} The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI)

Abstract

We are promoting the application of Bayesian optimization to accelerator tuning. Bayesian optimization-based beam orbit tuning has proven effective in reducing beam loss in the KEK injector and improving injection efficiency in the SuperKEKB beam injection section. However, it has become apparent that during optimization, there are issues such as the objective parameter values being temporarily degraded or significant beam losses occurring that could cause the accelerator to stop operating. Therefore, we are introducing objective-function-constrained Bayesian optimization to perform accelerator tuning while maintaining the arbitrary measurement values above a certain threshold. In this presentation, we will report on the overview of constrained Bayesian optimization and the results of beam tests conducted at the KEK electron-positron injector.

1. 研究の背景

瞬間ルミノシティ $6 \times 10^{35} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ を目指す SuperKEKB 電子陽電子衝突型加速器 (以下、SuperKEKB) にとって、最重要課題の一つが「如何に 2-3 A クラスの大電流ビームを蓄積するか、ひいては如何に高いビーム入射効率を維持するか」である。ビーム入射に寄与する加速器パラメータは入射器に始まり主リングに至るまで多岐に渡るが、SuperKEKB ではまずビーム輸送路下流のステアリング電磁石やセプトラム電磁石、および主リング入射部に位置するキッカー電磁石を用いてビーム軌道を調整することが多い。

先行研究 [1,2] では、入射ビーム軌道調整にベイズ最適化を応用し、ビーム衝突運転中において高い入射効率の獲得に成功した。一方、最適化の過程で入射効率が一時的に非常に低下してしまうという問題も明らかになった。これは最適化中に一時的にビーム入射が滞ることを意味し、大電流ビームを維持する上で解決せねばならない問題である。

2. 制限付きベイズ最適化

本研究では、目的関数が閾値以下に低下するのを防ぎつつ関数最適化を行う、制限付きベイズ最適化 “SafeOpt” [3,4] をビーム軌道調整に応用した。今回の入射ビーム軌道調整では、入射効率が目的関数である。つまり、最適化の過程で入射効率が閾値以下に低下することを防ぐため、制限付きベイズ最適化を用いる。

SafeOpt のアルゴリズムは Fig. 1 の通りである。探索集合 D の中から、安全領域 S_t をガウス過程を用いて求める。ここで、非空集合 S_t を定義する閾値を h とし、任意の初期入力を S_0 とする。安全領域を拡張するための集合 G_t と S_t を各ステップ t 毎に更新し、徐々に安全な領域を広げながら最適化を行う。 L は Lipschitz 定数である。 $l_t(x)$ および $u_t(x)$ は、 $y_t(x_t)$ の推定値の下限値および上限値であり、ガウス過程から求められる。

```

for  $t = 1, 2, \dots$  do
  if  $t > 1$  then
     $S_t = S_{t-1} \cup \{x \in D \mid \exists x_s \in S_{t-1} : l_t(x_s) - Ld(x_s, x) \geq h\}$ 
  else
     $S_1 = S_0$ 
  end if
   $G_t \leftarrow \{x \in S_t \mid \exists x' \in D \setminus S_t : u_t(x) - Ld(x, x') \geq h\}$ 
   $x_t \leftarrow \operatorname{argmax}_{x \in G_t} \{u_t(x) - l_t(x)\}$ 

```

Figure 1: Pseudo code of the SafeOpt algorithm.

ガウス過程に含まれるカーネル関数として、本研究では Sequared Exponential (SE) カーネルを用いた。SE カーネルは、入力空間の距離に応じて出力空間の相関を定義するものであり、以下の式で表される。

$$k_{SE}(x, x') = \exp\left(-\frac{(x - x')^2}{\gamma^2}\right). \quad (1)$$

ここで γ は長さスケールと呼ばれ、入力空間の変化に対する出力空間の感度を調整するハイパーパラメータである。長さスケールが小さいほど、入力空間の変化に対して出力空間が敏感に反応し、最適化の収束速度へも影響を与える。[5]

3. KEK 電子陽電子入射器における軌道調整試験

本研究の最終的な目的は SuperKEKB へのビーム入射の高効率化であるが、SuperKEKB は 2024 年 12 月末から 2025 年 11 月まで休止中である。一方、電磁石の印加電流を変化させ、ビーム軌道の最適化により目的関数を最大化するという流れは、KEK 電子陽電子入射器 (以下、Linac) におけるビーム軌道調整 (目的関数は電子ビーム電荷) と、SuperKEKB におけるビーム入射調整の間で類似している。そのため、SafeOpt をビーム軌道調整へ応用する試験環境として、Linac 電子ビーム (陽電子生成用) を用いた。

* gaku.mitsuka@kek.jp

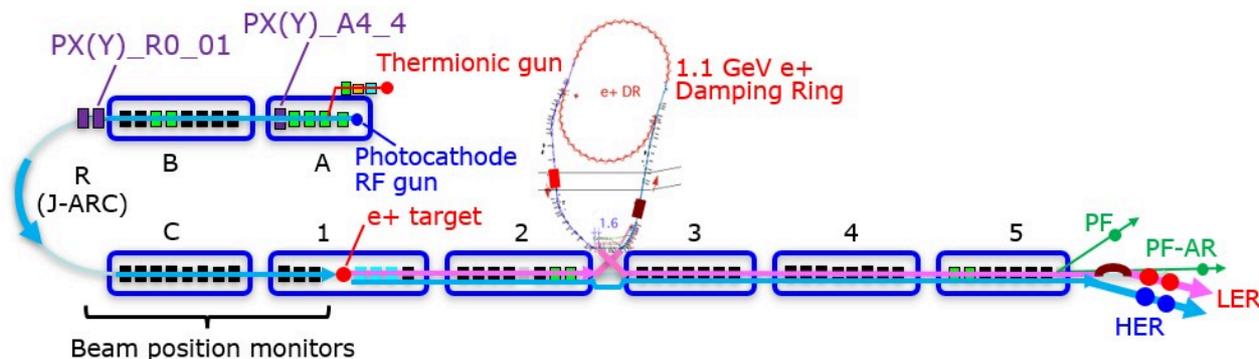


Figure 2: Layout of KEK Linac. The four steering magnets used in this study are indicated by the purple boxes at the A-B sectors.

Linac の鳥瞰図を Fig. 2 に示す。ビーム軌道調整試験の大まかな流れは、1) A-B セクターでステアリング電磁石の印加電流を変更し電子ビームの軌道変化を行った直後に、C-1 セクターでビーム電荷を測定する。2) 次に、その応答結果をもとにステアリング電磁石の印加電流を調整し、再度 C-1 セクターでビーム電荷を測定するというものである。これを繰り返すことで、ビーム軌道調整を行いながら目的関数 (ビーム電荷) の最大化を目指す。本試験で使用したパルスステアリング電磁石は、A-B セクターの PX(Y)_A4_4 と PX(Y)_R0_01 の合計 4 台であり、Fig. 2 にて紫色の四角で示されている。ビーム毎のモード切り替えが容易なパルス電磁石を使っているため、他のビーム運転に影響なく調整・試験が可能である。

パルスステアリング電磁石数は比較的少数の合計 4 台に留めた。これは、パラメータ数が増えると最適化の収束まで時間がかかり、各パラメータの最適ビーム軌道への寄与も理解も難しいためである。なお、日常のビーム調整においても、陽電子の収量向上 (1 セクターの陽電子標的にビームを照射する) に対して A-B セクターなど上流でのビーム軌道調整が効果的であることが知られている。[6]

電荷測定には Linac に備わるビーム位置モニター (BPM) を用いた。電荷測定精度は絶対精度と統計的な揺らぎを含めて 5% である。本試験では、電荷測定数を 5 回とし、それらの平均値を最終的な測定値とした。

4. ビーム軌道調整試験結果

2025 年 6 月に Linac にてビーム軌道調整試験を行った。Sec. 2 で述べた通り、SafeOpt では初期集合 S_0 が必要である。そこで、ステアリング電磁石の印加電流をランダムに変化させ、対応するビーム電荷の応答とのデータセットを初期集合 S_0 とした。 S_0 の獲得に費やすステップ数は 15 である。続いて、 S_0 に基づく 50 ステップの制限付きベイズ最適化を実施した。これら合計 65 ステップの最適化プロセスを 1 ランとし、ランダムシードを変化させ合計 5 ラン実施した。Linac 試験での閾値 h は BPM で測定した電荷 Q とし、5 nC および 7 nC の 2 通りとした。また、長さスケール γ は 0.5、1.0、および 1.5 の 3 通りとした。

Figure 3 および 4 に、長さスケール $\gamma = 0.5$ および

1.5、閾値 $h = 7$ nC のときの最適化結果を示す。横軸はステップ数であり、縦軸は BPM で測定したビーム電荷である。左図は 5 ラン毎の推移を示し、右図は各ステップにおけるビーム電荷のボックスプロット (平均値と分散) を示す。縦点線は初期過程 15 ステップと最適化 50 ステップの境界を示す。横点線は閾値 $h = 7.0$ を示す。初期過程ではビーム電荷 Q は閾値 7.0 を下回ることが多いが、最適化開始後は閾値を上回り、最適化によりビーム電荷が徐々に増加している。長さスケール $\gamma = 1.5$ では、1-3 ランで閾値を複数回下回ることが確認できる。

5. 閾値と長さスケールによる最適化結果の違い

Section 4 で示した試験結果をもとに、閾値 h と長さスケール γ 毎の最適化結果を比較した。Figure 5 は、閾値 $h = 5.0$ および $h = 7.0$ 、長さスケール $\gamma = 0.5$ 、1.0、および 1.5 における最大電荷を示す。最大電荷はランダムシードを変化させ実施した 5 ランのうち最大の電荷とする。最大電荷については、閾値によらず 0.5-1.5 の範囲内では長さスケールが大きい方が有利な傾向がある。

Figure 6 の上図は、最大電荷に到達するまでの平均ステップ数を示す (初期過程でのステップ数は除く)。閾値と長さスケール毎に有意な違いはなく、平均して 20 ステップで最大電荷に到達している。下図は閾値を下回る割合 (下回るステップ数/50 ステップ) を示す。長さスケール 0.5 では 5 ラン全てでゼロ、長さスケール 1.5 では 1-3 回/50 ステップ程で閾値を下回ることが確認できる。

長さスケールが小さいほど、入力空間の変化に対して出力空間が敏感に反応するため、活用的な最適化を行う傾向になる。従って、初期過程で探索した範囲を超えるようなパラメータ設定を試行することが少なくなり、最適化の結果として最大電荷は小さくなる傾向がある。また、初期過程で獲得した安全領域 S_0 からの拡張にも慎重になるため、最適化の過程で閾値を下回る確率が低くなる傾向にある。今後の課題として、Ref. [4] にて紹介された試みである Matern カーネルと SE カーネルの組み合わせにより、最適化性能と安全性の両立を図ることも検討している。

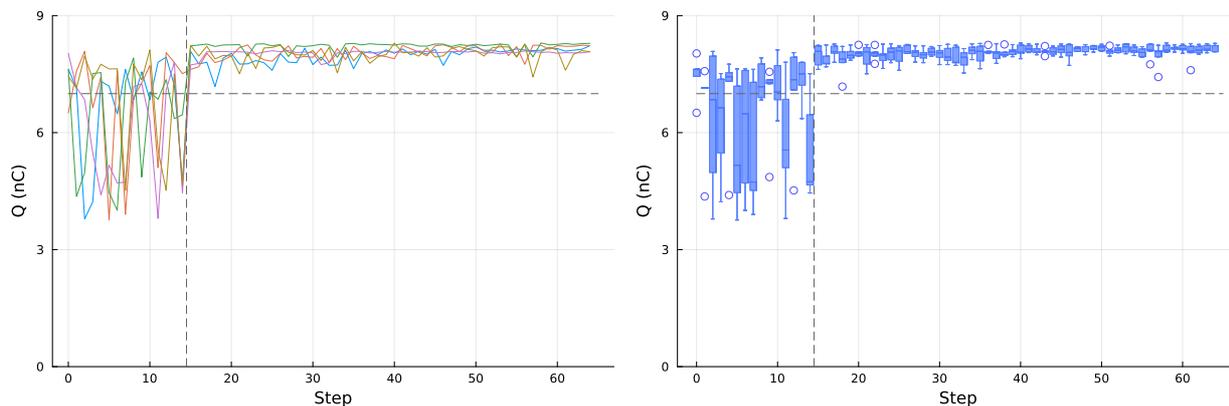


Figure 3: The optimization results for a length scale $\gamma = 0.5$ and a threshold value $h = 7$ nC. The horizontal and vertical axes are the number of steps and the beam charge measured with BPMs, respectively. (Left) 5-run-by-run evolution of the optimization. (Right) Boxplot of the beam charge at each step.

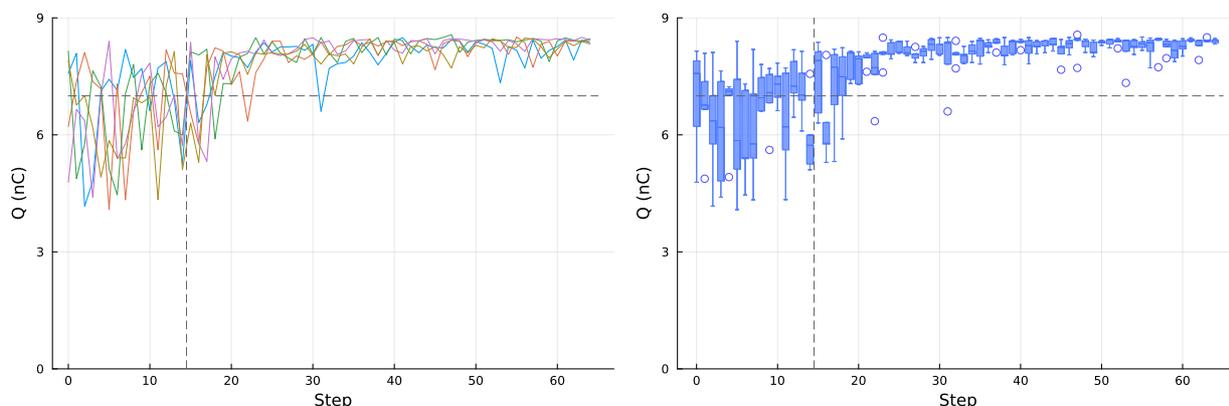


Figure 4: The optimization results for a length scale $\gamma = 1.5$ and a threshold value $h = 7$ nC. (Left) 5-run-by-run evolution of the optimization. (Right) Boxplot of the beam charge at each step.

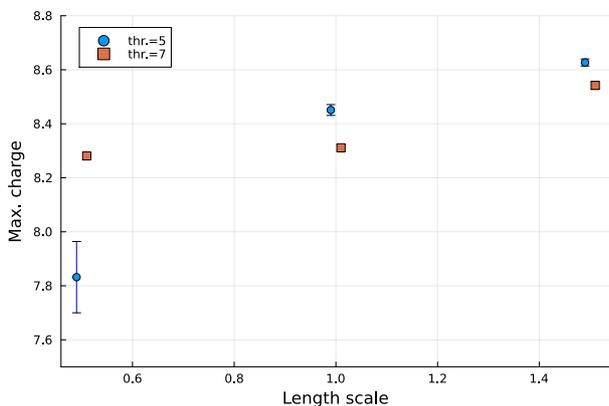


Figure 5: Maximum charge among five runs. Thresholds h are 5.0 (blue circles) and 7.0 (orange squares). Horizontal axis is the length scales $\gamma = 0.5, 1.0, \text{ and } 1.5$.

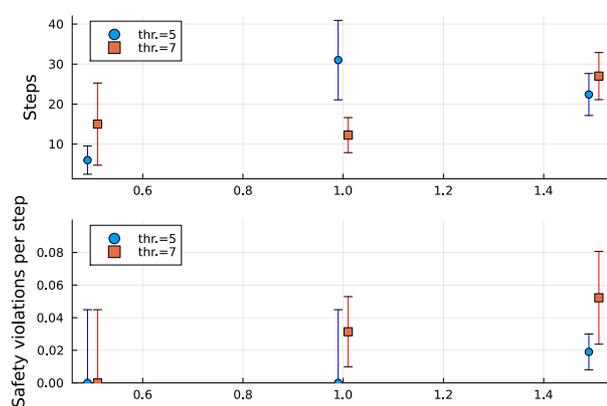


Figure 6: (Top) Average number of steps to reach the maximum charge for each run. (Bottom) Ratio of safety violating steps relative to a total of 50 steps. Thresholds h are 5.0 (blue circles) and 7.0 (orange squares). Horizontal axis is the length scales $\gamma = 0.5, 1.0, \text{ and } 1.5$.

6. 重要パラメータの変化

最適化に対する各パラメータの重要度を Functional ANOVA モデル [7] を用いて定量化した。このモデルで

は、Functional ANOVA 内でランダムフォレスト予測値を利用し、あるハイパーパラメータあるいは他のハイ

パラメータとの組み合わせの両方の重要性を定量化している。

Figure 7-9 は、閾値 $h = 7.0$ のときのパラメータ重要度を示し、それぞれ長さスケール $\gamma = 0.5, 1.0, 1.5$ に対応する。行と列はパラメータ名を、対角成分より上側にある各要素の数値は重要度を示す。重要度が高いほど、目的関数 (ビーム電荷) の最大化に対する寄与が大きいことを意味する。上流のステアリング電磁石 (PX(Y)_A4_4) が下流 (PX(Y)_R0_01) に比べて重要な点は、2023 年に実施した制限なしベイズ最適化試験 [6] と同様である。

興味深い点として、長さスケールを 0.5 から 1.0 を経て 1.5 へ増加させると、X 方向ステアリング電磁石 PX_A4_4 の重要度が 0.34 から 0.13 へと低下している。一方、Y 方向の PY_A4_4 には逆の傾向が見え、重要度が 0.15 から 0.41 へと増加している。この傾向は閾値を 5 nC としても同様に見られるため、閾値とは独立した原因に起因すると考えられる。

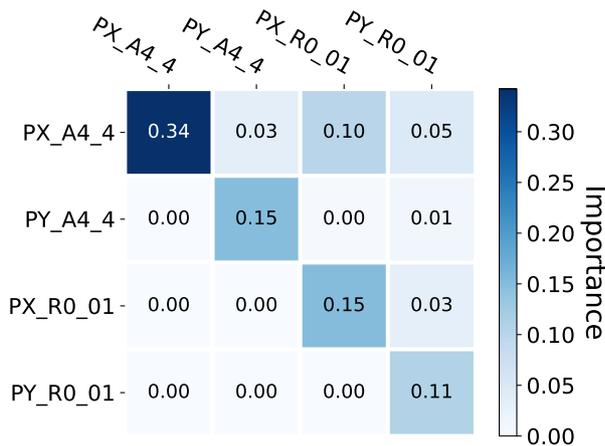


Figure 7: Parameter importance on a length scale $\gamma = 0.5$. The rows and columns indicate the parameter name, and the numerical value of each element above the diagonal component indicates the importance.

7. 今後の課題と展望

今後の課題として 2025 年 11 月の SuperKEKB 運転再開後、ビーム輸送路から SuperKEKB 主リングへのビーム入射調整へ SafeOpt を応用する。初めにビームスタディを実施し、結果に応じて入射効率の閾値や長さスケールを決定する。今後の展望として、SafeOpt よりも高性能と謳われる制限付き最適化の試験と導入を目指す。Ref. [4] には、閾値を下回る確率を縮小させた LoSBO や LoS-GP-UCB といったアルゴリズムが提案されている。加えて、“指標関数 (リング各所でのビームロスなど)” を導入し、目的関数 (入射効率) ではなく指標関数に制限を加えた運転環境の安全にも考慮したベイズ最適化の開発を検討している。

参考文献

[1] S. Kato and G. Mitsuka, “Upgrade of beam injection tuning

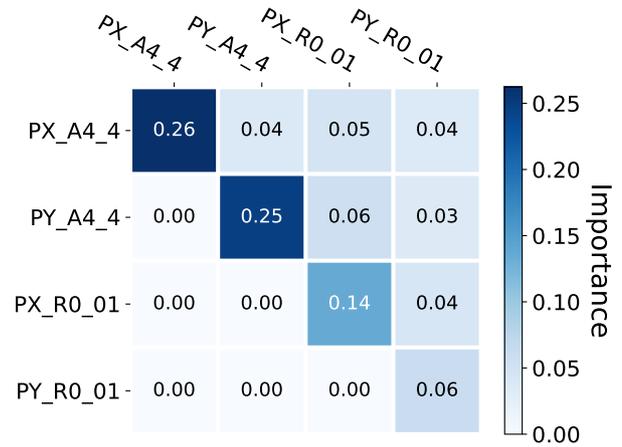


Figure 8: Parameter importance on a length scale $\gamma = 1.0$. The rows and columns indicate the parameter name, and the numerical value of each element above the diagonal component indicates the importance.

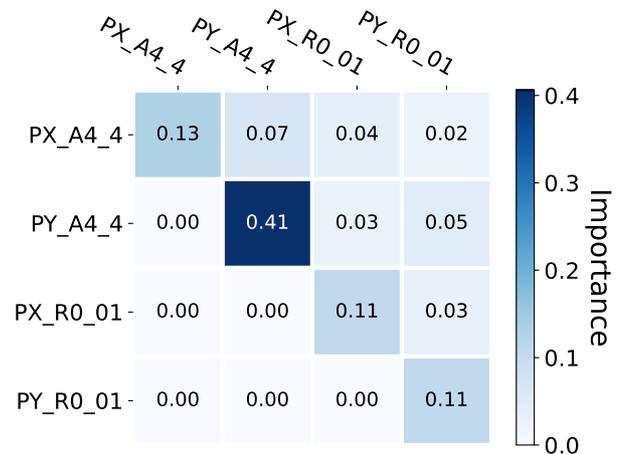


Figure 9: Parameter importance on a length scale $\gamma = 1.5$. The rows and columns indicate the parameter name, and the numerical value of each element above the diagonal component indicates the importance.

using machine learning at the SuperKEKB accelerator”, Proceedings of the 22th Annual Meeting of Particle Accelerator Society of Japan, Tokyo, Japan, Aug. 6–Aug. 8, 2025.

- [2] G. Mitsuka, “Machine learning experience at SuperKEKB”, eeFACT 2025, Tsukuba, Japan, Mar. 3–Mar. 7, 2025.
- [3] Y. Sui, A. Gotovos, J. Burdick, and A. Krause, “Safe Exploration for Optimization with Gaussian Processes”, Proceedings of the 32nd International Conference on Machine Learning, 37, 997–1005 (2015).
- [4] C. Fiedler, J. Menn, L. Kreisköther, and S. Trimpe, “On Safety in Safe Bayesian Optimization”, Transactions on machine learning research, 9, 1–28 (2024).
- [5] R. Garnett, “Bayesian Optimization”, Cambridge University Press, 2023.
- [6] G. Mitsuka, S. Kato, N. Iida, T. Natsui, and M. Satoh, “Machine-learning approach for operating electron beam at

KEK electron/positron injector linac”, *Phys. Rev. Accel. Beams*, 27, 084601 (2024).
[7] F. Hutter, H. Hoos, and K. Leyton-Brown, “An Efficient Ap-

proach for Assessing Hyperparameter Importance”, *Proceedings of the 31st International Conference on Machine Learning*, 32(1), 754–762 (2014).