arXiv:2303.08984v1 [physics.acc-ph] 15 Mar 2023

使用逻辑 LASSO 回归预测粒子加速器中断

Sichen Li, [1,*] Jochem Snuverink, [1] Fernando Perez-Cruz, [2] 和 Andreas Adelmann[1,†]

[1]保罗·谢勒研究所，*5232* 菲利根，瑞士[2]瑞士数据科学中心，苏黎世联邦理工学院，瑞士（日期：2023年3月17日）

意外的粒子加速器中断（也称为联锁）会导致运行状态骤变，尽管联锁是必要的安全措施。这可能造成大量束流时间损失，甚至损坏设备。我们提出了一种简单而强大的二元分类模型，旨在预测此类中断，并将其应用于保罗·谢勒研究所的高强度质子加速器综合设施。该模型采用逻辑回归，并以最小绝对收缩与选择算子进行惩罚；它基于双样本统计检验，用于区分加速器的不稳定状态与稳定状态。

在联锁发生前收到警报，首要目的是采取应对措施并减少束流时间损失。因此，我们开发了一种连续评估指标，用于衡量任意时段内节省的束流时间，并假设可以通过降低束流电流来避免联锁。表现最佳的联锁至稳定状态分类器有望使每日束流时间增加约 5 分钟。文中还列举并讨论了可用于快速调节束流电流的仪器设备。

关键词：机器学习、粒子加速器、束流中断、LASSO 回归

I. 引言

近年来，随着数据收集、存储和分析能力的不断提升，数据驱动算法，尤其是机器学习（ML）方法，在学术界、工业界和社会生活中日益受到关注并变得愈发重要。粒子加速器对诸多科学领域产生了重大影响，包括搜寻新型物理现象 [1], 、核废料嬗变 [2, 3], 和癌症治疗 [4, 5]。鉴于粒子加速器在运行过程中持续生成海量结构化数据流，它们天然适合应用机器学习技术；众所周知，这类技术擅长处理目标明确且高度复杂的输入空间 [6]。

近年来，数据驱动方法在粒子加速器相关理论和技术研究中的应用显著增加 [7, 8], ，例如旨在助力未来加速器设计的快速、准确的束流动力学建模 [9], ；与原始仿真相比，可大幅节省计算成本的高精度代理模型 [10], ；符合安全限制的束流能量优化 [11, 12],；以及更具体的应用场景，包括光学校正 [13]和准直器自动对准 [14]。在所有潜在应用领域中，不论是否为上述所列，确保安全、稳定运行始终是加速器控制的一项关键关注。对加速器运行期间的异常事件进行预先检测或预测，将有助于实现更准确、及时的控制，延长束流时间，并为用户提供质量更好的束流。预测性维护领域已对类似方法进行了深入研究 [15], ，其目标是提前识别潜在故障，并及时采取必要的维护措施。由于数据复杂，且不同加速器之间差异很大，与预测一台逐渐老化的发动机相比，预测加速器设施的未来行为更难以建模。尽管如此，多个机构已针对不同类型的异常事件进行了多项研究；这些研究共同聚焦于从预先进行异常检测的角度预测故障，并为后续的缓解措施提供了可能性 [6, 16, 17]。

Reščič 等人 [18, 19] 在奥克里奇的散裂中子源（SNS）利用束流电流脉冲，通过二元分类检测束流损失跳闸。将异常脉冲之前的脉冲作为正类，并将无跳闸运行时的脉冲作为负类，即可在 16 ms 的时间预算内预测下一个脉冲的行为；这段时间正好是相邻两个脉冲之间的间隔。表现最佳的随机森林（RF）分类器结合主成分分析（PCA）技术来优化输入特征，准确率达到 96%，召回率达到 61%；所有分类器都能在 4 ms 内完成预测，远快于可用时间预算。Blokland 等人的后续研究 [20] 使用相同的束流电流脉冲数据，通过构建孪生 [21]网络，实现了具备不确定性感知能力的预测。

Tennant 等人 [22] 在杰斐逊实验室的连续电子束加速器设施（CEBAF）专注于超导射频（SRF）腔低温模块中的故障。他们应用了各种机器学习模型，以便快速检测这些超导射频故障。借助序贯多分类模型，作者进一步发现，腔体

* 另任职于苏黎世联邦理工学院物理系；sichen.li@psi.ch
† andreas.adelmann@psi.ch

快速发生的故障比逐渐发展的故障更难预测 [23]。Eichler等人 [24] 近期在欧洲X射线自由电子激光器（Eu-XFEL）开展的另一项超导射频异常研究，沿袭了Nawaz 等人 [25]的工作，提出了一种基于奇偶空间的新方法，用于检测失超并将其与其他异常区分开来。由射频波形偏差得出的残差信号，通过广义似然比进行统计判定，可作为区分各种异常类别的独特度量。该方法已通过实验实施，研究还详细分析了现有方法目前错误分类的异常。

遵循类似的方法，本文基于一项先前研究 [26], 提出一种有效的基于分类的方法，旨在预测保罗·谢勒研究所（PSI）的质子回旋加速器设施——高强度质子加速器（HIPA）发生的束流中断，即联锁。

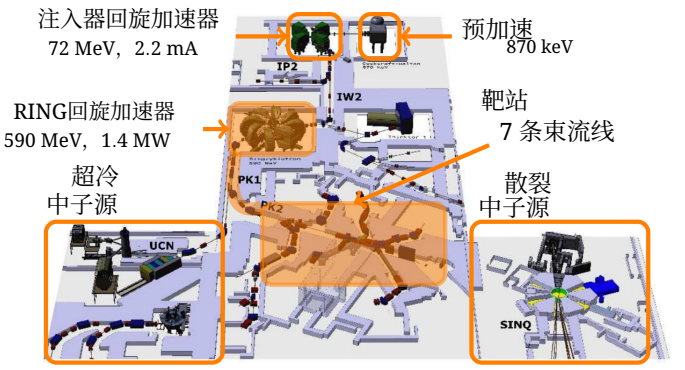


图1. HIPA设施示意图 [28]。质子先由Cockroft-Walton加速器预加速至870 keV，然后送入注入器回旋加速器，达到72 MeV。随后，束流由大型八扇区RING回旋加速器加速至最高能量590 MeV，再输送至靶站和实验区域。

A. 设施与数据集

HIPA 可产生功率近 1.4 MW 的质子束，使其成为全球功率最高的质子回旋加速器设施之一 [27]。为跟踪加速器的运行情况并确保不超出安全限值，设施内各处安装了各种传感器和监测器，包括束流损失监测器、温度监测器等。联锁系统是一项必要的安全措施：一旦发生问题且某个信号超出其安全限值（例如图 2 中以红色显示的损失监测器），系统便会立即关闭束流。然而，这类停机会导致运行状况骤变，并造成大量束流时间损失。我们提议为联锁构建一个预测模型，如图 2 右下方所示。模型输出一旦表明即将发生联锁，我们就希望对设施采取某种恢复操作，以避免联锁发生，从而为用户节省束流时间。

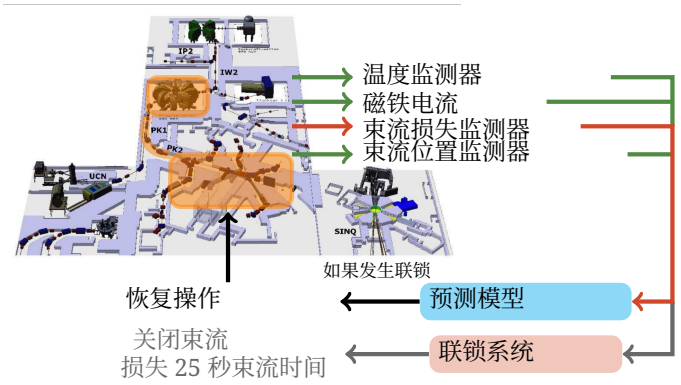


图2. 配备所提出的预测模型的 HIPA 联锁系统。在此示例中，当束流损失监测器检测到束流损失高于安全阈值时（以红色表示），就会触发联锁。如果没有预测模型，束流将立即关停，相当于损失 25 秒的束流时间（以灰色表示）。而如果模型预测到将触发联锁，则可以采取一些可能的恢复操作，以避免突然关停。

本文所用数据采集自2019年10月和11月期间的53天（不包括束流开发日），在此期间共发生1192次联锁。数据集由376个过程变量——即通道 ——以及来自实验物理与工业控制系统（EPICS）的联锁信号组成，这些数据以多变量时间序列的形式记录，并按5 Hz频率插值。数据收集和预处理的详细信息见 [26]第2.1节。如图3所示，我们将联锁预测问题表述为对两类样本进行二元分类。正类由联锁样本 构成，这些样本取自联锁发生前后较近的时段，代表不稳定状态。负类由稳定样本 构成，这些样本取自远离联锁的时段，代表稳定运行状态。

B. 问题形式化

图3展示了联锁发生前若干示例通道的行为。橙色方块表示的联锁样本取自联锁发生前 T_h 秒处，因此 T_h 即为预测时域。绿色方块表示的稳定样本取自远离联锁的稳定运行期间。原则上，每个样本都是长度为 Δt的 $d = 376$多变量时间序列片段。

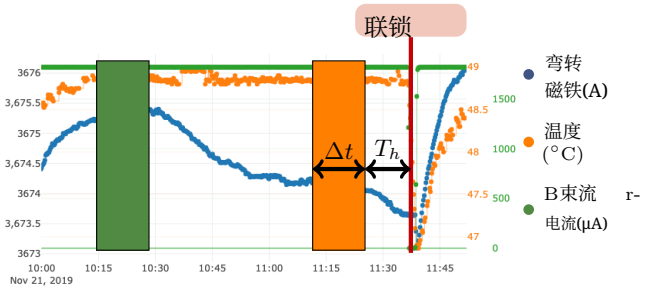


图3. 示例通道、联锁和样本选取示意图。橙色和绿色方块分别表示联锁样本和稳定样本。 T_h 表示预测时域，即提前报警的时间； Δt 表示每个样本的持续时间。

C. 先前的RPCNN模型

在先前的一项研究中 [26], ，我们提出了复现图 - 卷积神经网络（RPCNN）模型，该模型以窗口作为输入，将时间序列转换为图像，然后进行分类。然而，假阳性率高和性能不稳定的问题仍需解决。

RPCNN模型的工作流程如图4所示。首先，我们选取两类时间窗口，一类靠近联锁，另一类远离联锁，窗口长度是可调节的模型参数。具体而言，联锁样本取自联锁前1秒至15秒的滑动窗口。其次，我们将376个通道中每个一维时间序列转换为二维递归图，它可视为时间序列的成对距离度量，并能够提取更精细的动力学模式。随后，我们使用卷积神经网络训练这些图像；事实证明，该网络在图像驱动的模式识别方面表现出色 [29]。输出为范围在 $[0,1]$ 内的概率分数，表示样本属于正类（即靠近联锁）的可能性。更多细节（如模型架构）见文献 [26]。

混淆矩阵中的典型二元分类指标在本文的研究场景中定义并应用。真正例（TP）表示一个联锁样本——即联锁发生前不足 15 s 的样本——被分类为联锁。假正例（FP）表示一个稳定样本——即距离联锁至少 10 分钟的样本——被误判为联锁。真负例（TN）表示一个稳定样本被判定为稳定。其余的假负例（FN）则表示模型未能识别出联锁。

对于二元分类模型的预测，ROC曲线展示了其真正例率（$TPR = \frac{TP}{TP+FN}$）与假阳性率（$FPR = \frac{FP}{FP+TN}$）之间的关系，并将其表示为分类阈值 [30]变化的函数。曲线下面积（AUC）是一项满足 $AUC \in [0,1]$ 的评分，它表示随机抽取的正例（即联锁）样本获得的数值高于随机负例（即稳定）样本的概率。它体现了模型在考虑所有分类阈值时区分这两个类别的总体能力。模型参数根据随机初始化的 25 个模型实例中最高的平均曲线下面积值（AUC=0.71）确定。分类阈值——它直接决定混淆矩阵——通常选取 ROC 曲线上一个能兼顾较高真正例率和较低假阳性率的位置。

由于长期目标是将模型集成到实时运行中，因此除了标准分类指标之外，还需要一种方法来量化模型在实时场景中的性能。我们开发了一种自定义指标，称为每次联锁的平均节省束流时间 T_s，并将实际束流时间损失和可能的恢复方法纳入考量。根据实验和专家咨询，假设通过将束流电流降低 10% 可以避免联锁。随后根据最大T_s来选择分类阈值。然而，该指标对假阳性施加了严格限制。FPR 被降至 0.2% 以下，但真正例率也因此仅达到 4.9%。如后文图 8 和表 IV 所示，分类结果既不如预期，也不稳定。仍然存在大量不需要的假阳性；此外，由于结果存在不可忽略的不确定性，且超参数扫描的收敛效果不理想，也可能发生了过拟合。我们通过可视化、专家知识和统计检验，对输入数据进行更深入的考察，以查明原因，并对自定义实时指标进行修订。

II. 最大均值差异（MMD）与双样本检验

为了确定前兆会在联锁发生前多久出现，我们分别取联锁发生前 t_0 和 t_1 秒的输入数据，并将它们合并为两组。由此，问题可表述为一个统计问题：在不对未知真实分布作任何假设的情况下，判断两个随机变量是否来自相同的分布。为此，我们对联锁发生前不同时间取得的两组数据进行双样本检验 [31]，并对其最大均值差异（MMD）进行统计比较。MMD 可以解释为两个分布之间的距离，MMD 越大，表示两组之间的差异越大。图 5 总体描述了这一过程。

双样本检验是一类旨在判断两组数据是否来自同一分布的统计检验。具体而言，设样本 $X = \{x_1, \cdots, x_m\}$ 独立同分布（ i.i.d. ）地取自分布 p，样本 $Y = \{y_1, \cdots, y_n\}$ 独立同分布地取自分布 q，则双样本检验的原假设为 H_0 ： $p = q$，备择假设为 H_1 ： $p \neq q$。广泛应用的双样本检验包括

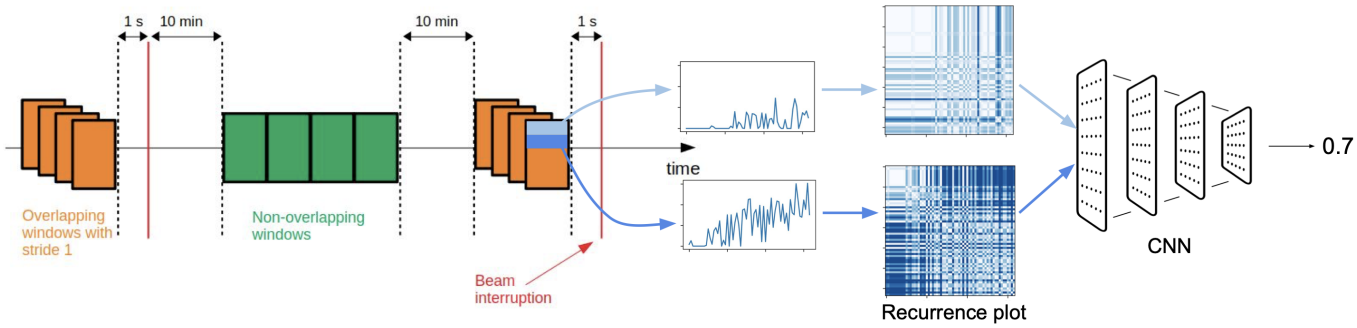


图4. RPCNN模型的工作流程。从原始的376个通道中以窗口形式提取两类样本：正样本（橙色，表示联锁）采用滑动窗口，负样本（绿色，表示稳定运行）采用非重叠窗口。随后，将每个窗口中的一维时间序列转换为复现图（RP），共376幅复现图构成一个样本并输入卷积神经网络（CNN），从而输出一个概率分数。

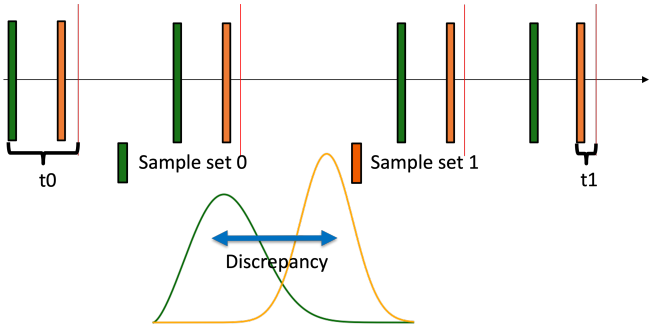


图5. 双样本MMD检验的概要，展示了从联锁发生前 t_0 和 t_1 秒处提取两个数据集的过程。

双样本柯尔莫戈洛夫-斯米尔诺夫（K-S）检验 [32], , 用于比较两个样本的经验累积分布函数；安德森-达林（A-D）检验 [33], , 基于 K-S 检验，并对分布尾部赋予更高权重；以及克拉默-冯·米塞斯检验 [34], , 采用了与 A-D 检验略有不同的度量。上述检验仅适用于单变量问题；否则需要进行多变量推广，正如 Friedman and Rafsky [35] 利用最小生成树或更广义的最近邻方法所展示的那样。

我们选择在高维数据中应用基于最大均值差异（MMD）的双样本检验 [31]。随着数据复杂性不断增加以及机器学习的发展，该方法的应用近来不断扩展，例如用于肺癌识别 [36] 以及对抗神经网络的训练 [37]。MMD是衡量两个概率分布接近程度的距离度量。具体而言，它是再生核希尔伯特空间（RKHS） [38, 39],的单位球内函数期望之间的最大差异；该空间是满足特定连续性条件的函数所构成的希尔伯特空间。

形式上，我们有来自某个拓扑空间 X_0 的观测值 X_1 和 X_0 and X_1 逻辑空间 $\mathcal{X}$，而 p 和 q 分别是它们的博雷尔概率测度。（在我们的实际情形中，$\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$，其中 $d = 376$ 是输入维度或通道数。）最大均值差异（MMD）定义为

$$\mathrm{MMD}(\mathcal{F}, p, q) := \sup_{f \in \mathcal{F}} \left(\mathbf{E}_{x_0}[f(x_0)] - \mathbf{E}_{x_1}[f(x_1)] \right) \quad (1)$$

其中，$\mathcal{F}$ 是函数类 f： $\mathcal{X} \to \mathbb{R}$，而$\mathbf{E}_{x_0}[f(x_0)]$是从$\mathbf{E}_{x_0 \sim p}[f(x_0)]$, 简化而来，后者表示对分布 p取期望。为了作为能够区分不同分布的检验度量，函数类 $\mathcal{F}$需要足够全面，以确保当 $p = q$ 时取值唯一，同时又要受到足够约束，以便进行实际的有限估计。Gretton等人 [31]提出将 $\mathcal{F}$ 设为再生核希尔伯特空间（RKHS） $\mathcal{H}$中的单位球。基于 $\mathcal{H}$的性质，概率分布 p 的均值嵌入 $\mu_p \in \mathcal{H}$ 定义为

$$\mathbf{E}_{x_0} f = \langle f, \mu_p \rangle_{\mathcal{H}} \quad (2)$$

其中，$\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}}$ 表示 $\mathcal{H}$中的内积。由此可以证明，MMD 等于两个均值嵌入之间的距离

$$\mathrm{MMD}(\mathcal{F}, p, q) = \|\mu_p - \mu_q\|_{\mathcal{H}}. \quad (3)$$

还可以进一步证明，若 $\mathcal{F}$ 是紧致度量空间 $\mathcal{X}$ 上具有相应连续核 $k(\cdot,\ \cdot)$的通用再生核希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 中的单位球，则 MMD($\mathcal{F}$, p, q) =0 当且仅当 $p = q$，且唯一性得以保证 [31, 38]。附录中给出了 MMD 的详细推导。

均值嵌入 μ_p 是分布 p的无限维表示。将最大均值差异计算为两个均值嵌入之差的再生核希尔伯特空间范数，包含一个关键的傅里叶变换步骤，需要在无穷多个频率上进行求值。启发式伪距离似乎是可行的解决方案，例如比较特征函数在单个频率 [40]处的取值之差。然而，这类方法高度依赖于待比较分布的先验知识

；而且，特征函数在某些频率区间上的局部一致性可能掩盖其整体差异，从而导致一致性问题。

因此在实践中，我们调整并实现的实际统计检验是一种称为均值嵌入（ME）检验的变体，它基于解析均值嵌入之间的差异 [41]。ME检验无需在整个频域上积分，而是保证几乎必然只需在单个随机频率处进行评估即可。在理论上，已证明该检验对所有分布几乎必然一致；在计算方面，相比原始MMD检验 [31] 的二次时间复杂度，其相对于样本量仅具有线性时间复杂度。

ME检验的过程如下所述

1. 根据某些优化方案 [41]，随机选取一组 J 测试位置 $\{\mathbf{v}_j\}_{j=1}^{J} \subset \mathcal{X}$ （即 $\mathbb{R}^d$）；2. 选取一个正定核 k：$\mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$（通常使用高斯核）；

3. 对来自两组$\{x_{0,i}, x_{1,i}\}_{i=1}^{n}$的每一对原始样本，计算核之间的差异

$$\vec{z}_i := \Big(k(x_{0,i}, v_1) - k(x_{1,i}, v_1), \ldots, k(x_{0,i}, v_J) - k(x_{1,i}, v_J) \Big) \in \mathbb{R}^J \tag{4}$$

这是一个 J–维向量。

4. 计算经验均值差

$$\vec{w}_n = \frac{1}{n} \sum_i \vec{z}_i \tag{5}$$

及其协方差矩阵

$$\mathbf{\Sigma}_n = \frac{1}{n-1} \sum_i (\vec{z}_i - \vec{w}_n)(\vec{z}_i - \vec{w}_n)^T. \tag{6}$$

5. 检验统计量计算如下

$$\widehat{\lambda}_n := n \vec{w}_n \mathbf{\Sigma}_n^{-1} \vec{w}_n \tag{7}$$

在原假设 H_0下，它服从自由度为 J 的 χ^2 分布；

6. 选择阈值 t_α，对应于 $\chi^2(J)$ 分布的 $1-\alpha$分位数；当 λ_n 大于 t_α时，拒绝 H_0。

为考察输入数据中的差异何时开始显现，我们在所有联锁发生前 t 秒处采集样本 $X_t = \{x_t^{I_0}, x_t^{I_1}, x_t^{I_2}, \cdots\}$。每个样本都是一个 $d = 376$ 维向量，其中 $t = 0.2$ 秒0。4 秒 。 。 。 表示采集样本时距离联锁发生的时间，而

表 I. 在联锁前 t_0 秒和 t_1 秒时，取自两个数据集的各组数据对应的 $\widehat{\lambda}_n$ ($J = 5$, $\alpha = 0.01$) 值。粗体数字表示拒绝 H_0，即认为这两个数据集存在差异。

$\mathbf{t_1} \backslash \mathbf{t_0}$ 0.2秒	0.4 秒	0.6 秒	0.8 秒 …	10.0 秒
0.2 秒	1.2	**4935.6**	**8102.1**	**7999.4** …	**7330.0**
0.4 秒	-	5.6	**177.0**	**165.3** …	**215.8**
0.6 秒	-	-	2.6	3.7 …	**103.9**
0。8 秒	-	-	-	3.6	**93.7**

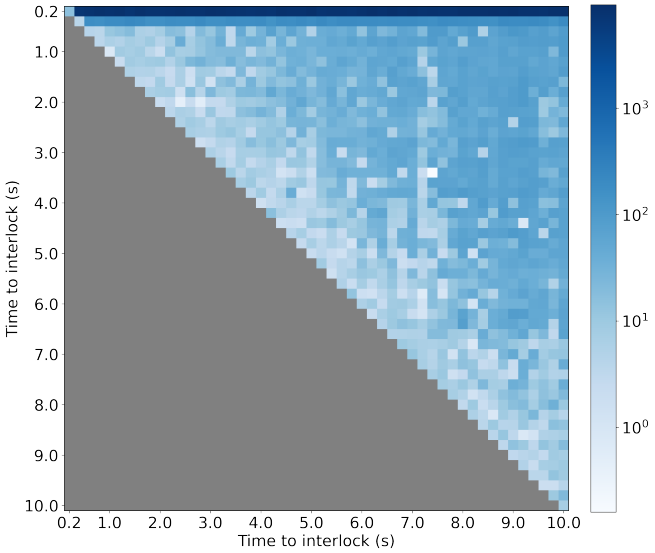


图 6. 比较联锁发生前 t_0 秒和 t_1 秒采集的样本集的成对 ME 检验统计量，时间范围从 0。2 秒到 10 秒。数值经过对数刻度变换，以突出差异。蓝色越深，表示所比较的两个分布之间的差异越显著。由于对称性，下三角区域以灰色遮蔽。

I_0、I_1、.....表示联锁编号。每个 X_t 的样本量是训练数据中可用联锁的数量。我们对每一对样本执行双样本 ME 检验，即计算 $X_{t=0.2\,\mathrm{s}}$与 $X_{t=0.4\,\mathrm{s}}$、$X_{t=0.6\,\mathrm{s}}$、.....之间的 ME 检验统计量，然后计算 $X_{t=0.4\,\mathrm{s}}$与 $X_{t=0.6\,\mathrm{s}}$、$X_{t=0.8\,\mathrm{s}}$、.....之间的检验统计量，依此类推。表 I 列出了在不同 t_0 和 t_1下获取的两组样本中，$J = 5$与 $\alpha = 0.01$ 对应的检验统计量值；图 6 展示了从 0。2 秒到 10 秒、在对数刻度下，t_0 与 t_1 所有样本对的检验统计量值的完整矩阵。可以清楚地看到，在联锁发生前 0。2 秒采集的样本存在显著差异，而 0。4 秒也显示出一些轻微差异。

图 7 展示了联锁发生前 $t_0 = 10$ 秒采集的样本与联锁发生前从 $t_1 = 9.8$ 秒到 0.2 秒采集的样本之间的 ME 检验统计量。将 y 轴设为对数刻度后，可以清楚地看到，显著变化仅出现在联锁发生前不到 0.4 秒的时间内，甚至仅出现在联锁发生前 0.2 秒内。结果表明，联锁大多是突发事件，变化的时间尺度远

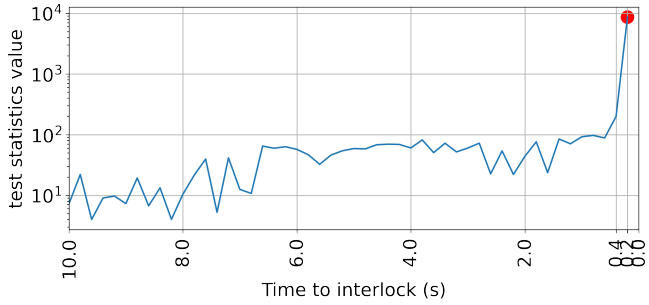


图 7. 在 2019 年的 53 天内，所有联锁发生前 0.2 秒至 9.8 秒采集的数据，与固定在 10 s 的集合 t_0 的检验统计量值进行比较。将检验统计量绘制在对数刻度上，可以看到，只有在联锁发生前约 0.2 秒和 0.4 秒时才出现明显变化。

小于 1 秒。这解释了 RPCNN 分类能力较弱的原因：其输入数据取自联锁发生前 1 秒以上，无法捕捉突发变化。由于数据在大部分时间里都相当相似，模型实际上看到的是对应两个不同类别的相似输入，而大量模型参数可能只捕捉到了训练集特有的虚假模式。这或许也能解释 RPCNN 的过拟合问题。

III. THELASSO模型

基于上述最大均值差异分析，我们对先前二元分类模型的两个类别进行了调整。正类和负类分别由联锁发生前 t_1 秒和 t_0 秒采集的样本组成。与先前的时间窗口不同，现在每个样本都是在单个时间戳采集的一个 (376,) 向量。我们使用 LASSO 回归模型拟合这两类样本。该模型是在标准逻辑回归中加入L_1 正则化项，以减少输入特征数量。

输入记为 $\{x_i \in \mathbb{R}^d\}_{i=1}^n$，其中 $d = 376$，n 为样本数量。类别标签为$\{y_i\}_{i=1}^n \in \{\pm 1\}$，其中 $y = 1$ 表示正样本（即联锁发生前 t_1 秒），$y = -1$ 表示负样本（即联锁发生前 t_0 秒）。目标是通过最小化式 (8) 中的损失来拟合权重$\omega \in \mathbb{R}^d$

$$\min_{\omega} L = \min_{\omega} \Big[\underbrace{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \log\left[1 + \exp\left(-y_i \omega^T \cdot x_i\right)\right]}_{\text{logistic loss}} + \underbrace{\lambda \|\omega\|}_{\text{regularization}} \Big]. \tag{8}$$

输出仍然是范围 $[0, 1]$ 内的概率输出。与 RPCNN 相比，LASSO 简单、线性且稀疏，正则化也有助于提高模型的可解释性。

表II. 二元分类结果以 TPR^c (%)| FPR^c (%) 的形式展示，比较在联锁发生前不同 t_0 和 t_1 秒采集的样本。数据集取自 2019年10月和11月，共有 1192 次联锁。最佳 TPR^c 和 FPR^c 结果以粗体标示。

$t_1 \backslash t_0$	0.4 秒	0.6 秒	1.0 秒	10.0 秒
0.2 秒	93.2 | 2.3	96.8 | 0.5	96.8 | **0.3**	**97.4** | 0.6
0.4 秒	-	52.8 | 22.5	53.2 | 21.6	57.4 | 23.1
0.6 秒	-	-	56.0 | 44.2	58.4 | 41.6
1.0 秒	-	-	-	57.8 | 43.2

我们比较了所有联锁触发前{0.2 秒的不同 t_0 和 t_1 取值：0.4 秒、0.6 秒、1.0 秒和 10.0 秒}，然后训练 LASSO逻辑回归模型，通过 5折交叉验证进行分类，并对正则化参数 λ进行网格搜索。表II汇总了 5 折交叉验证中各折作为测试集时的分类结果。表中分类指标 TPR 和 FPR 的下标 c 表示在输入样本中计算的典型分类指标，以区别于后文第IV B节介绍的定制实时指标。

我们选择 $t_1 = 0.2$ 秒与 $t_0 = 10$ 秒的模型进行实时实现，因为该模型的真正例率最高。现在，正类仅由联锁前 0.2 秒采集的样本组成，而负类则由联锁前 10 秒采集的样本组成。

IV. 模型评估

我们介绍两类评估指标：二元分类中常用的受试者工作特征（ROC）曲线，以及我们为实时场景定义的自定义评估指标束流节省时间 。

A. 分类度量

按照 Li 等人 [26], ，我们继续使用 ROC 曲线及其对应的曲线下面积值来评估二元分类模型的性能。对于 RPCNN 和 Lasso，图8展示了 ROC 曲线和曲线下面积，以及根据各自 25 次试验计算出的不确定性。图中还绘出了理想模型和随机猜测的表现，以供比较。LASSO 的曲线下面积为 0。99，且不确定性窄得多，这表明与 RPCNN 相比，LASSO 不仅分类能力更强，性能也更加稳定。

值得注意的一点是，RPCNN 与 LASSO模型的输入有所不同。RPCNN 使用联锁发生前至少 1 秒的窗口作为输入；然而，根据 MMD检验的结果，变化只发生在 0.2 秒以内，因此联锁窗口与稳定

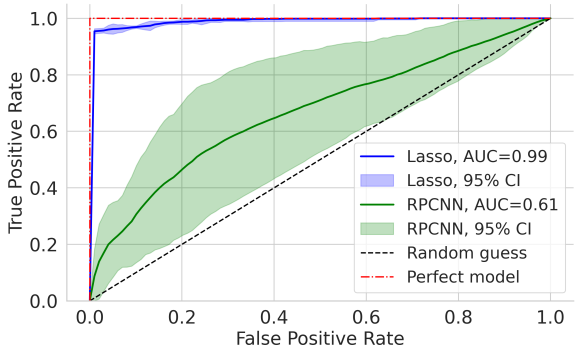


图8. LASSO 和 RPCNN 模型、完美分类器及随机猜测的 ROC 曲线和曲线下面积。图中还以面积形式展示了 95% 置信区间。

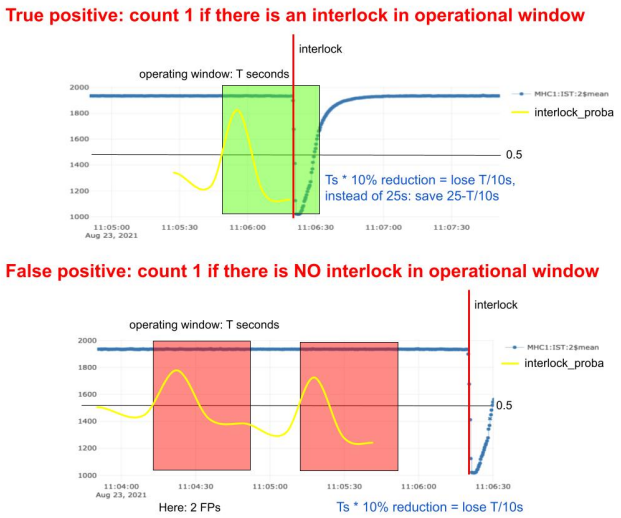


图 9. 实时真正例（TP^r）和假正例（FP^r）的定制定义。模型输出超过阈值时，开始一个 1 分钟的检查窗口。若联锁在此检查窗口内发生，则计为真正例（TP^r）；否则记录为假正例（FP^r）。

窗口（在 RPCNN 中被视为两个不同的类别）的分布相似。这解释了预测中出现的大幅不稳定性和大量假阳性。

B. 实时指标

在 ROC 曲线中，TP^c 和 FP^c 的数量仅根据测试数据集计算。在实际运行中，随着新数据和联锁事件不断记录，这些指标需要持续更新，并且应能根据可调整的预测时域评估模型。为改进先前的束流节省时间指标，我们提出了自定义的实时 TP 和 FP 定义（分别记为 TP^r 和 FP^r），如图9所示。

假设模型在时间 t 的输出高于分类阈值。如果在 t 之后 1 min 的检查窗口内实际发生了联锁，则表示成功预测了该联锁，并计为一个 TP^r；否则，如果 1 min 内未发生联锁，则计为一个 FP^r。TP^r 的数量不能超过联锁总数，而 FP^r 的数量不受限制。因此，可以使用比率 $TPR^r = N_{TP_r}/N_{int}$ 评估模型性能，其中 N_{int} 表示联锁总数。图10展示了实时模型运行中的 TP^r 和 FP^r 示例，符合图9所述的流程。

根据定制的实时真正例（TP^r）和假正例（FP^r）定义，我们构建公式 (9) 中的实时指标 束流节省时间T_s^r，适用于任意给定时间段

$$T_s^r := 19 \cdot \mathrm{TP}^r - 6 \cdot \mathrm{FP}^r \tag{9}$$

其中，TP^r 和 FP^r 分别为相关时间段内实时真正阳性和假阳性的数量。19 和 6 这两个数字源于以下事实：一次常规联锁会造成约 25 s 的束流时间损失；而假设将束流电流降低 10% 即可绕过联锁，这相当于损失 6 s 的束流时间，如图11所示。因此，一个 TP^r 可节省 19 s 的束流时间，而一个 FP^r 会损失 6 s 的束流时间，如表 III 所示。

表 III. 执行 10% 束流缩减前后，TP^r、FP^r 和 FN^r 情况下损失和节省的束流时间（秒）汇总。

条件	真正例^r	假正例^r	FN	r
无恢复操作	-25	0	-25	
束流电流降低 10%	-6	-6	-25	
净节省束流时间（秒）	19	-6	0	

表 IV 列出了上述两个模型的实时指标。LASSO 在所有指标上表现更佳，并且根据所选分类阈值，每天有望节省约 5 分钟的束流时间。随着阈值升高，TP^r（因此 TPR^r 也会）和 FP^r 的数量都会减少，因为这反映了对正例采用了更严格的判定标准。TP^r 和 FP^r 之间的权衡，在T_s^r中由公式 (9) 表示，预示着分类阈值存在一个最优选择——根据当前实验，选择阈值 0.8，以达到最大的 $T_s^r = 5.45$ 分钟/天。表现最佳的 RPCNN模型 [26] 仍造成了额外 0.27 分钟/天的束流时间损失，这是由于其 TP^r 数量相当少，且 FP^r数量较多。TP、FP 和 T_s 的不同定义也会对此产生影响。

图 12 比较了 $\mathrm{RPCNN}_{\mathrm{best}}$和 $\mathrm{LASSO}_{0.8}$ 模型在实时场景中的表现。数据取自 6^{th} 2019 日凌晨 3 点至 4 点，共有 2

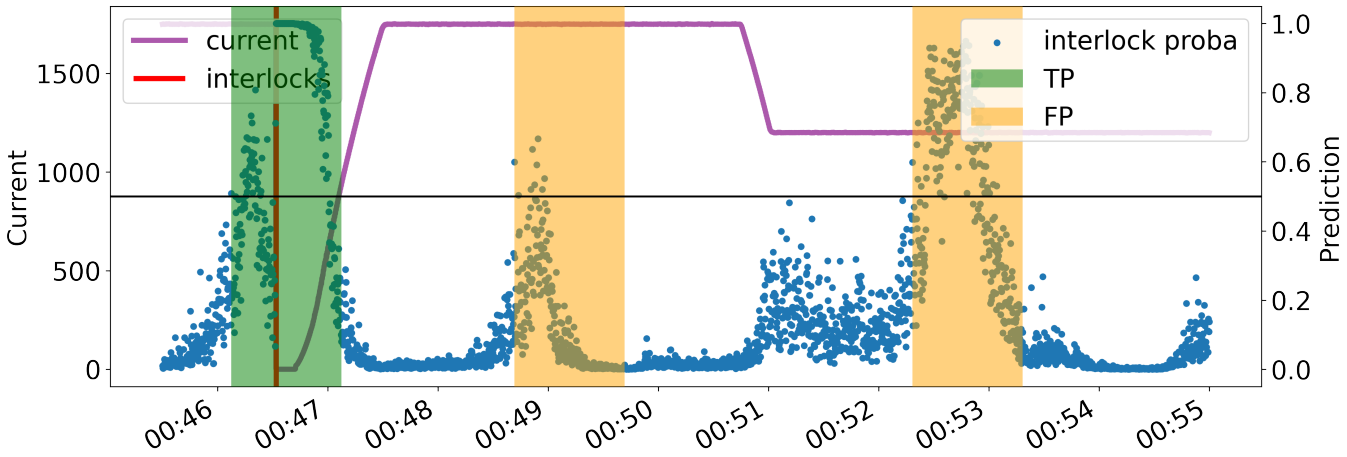


图 10. 某次 LASSO 训练中实时指标的真正例[r]和假正例[r]示例：比较两组 $t_1 = 0.2\,\mathrm{s}$ 和 $t_0 = 0.4\,\mathrm{s}$，并将 0.5 设为分类阈值，数据取自 2019-10-06 的 10 分钟时段。请注意，根据分类和实时指标，这并非表现最佳的模型，此处仅用于说明真正例[r]和假正例[r]的定义。在此示例中，模型提前约 30 秒成功预测了联锁，但也产生了 2 个假正例[r]。因此，该时段内节省的束流时间 T_s^r为 $19 \cdot 1 - 6 \cdot 2 = 7$ 秒。

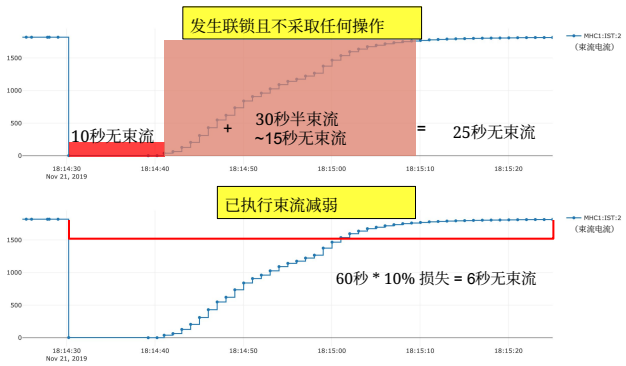


图 11. 联锁发生时以及执行束流减弱时损失的束流时间。由于联锁持续约 1 分钟，降低 10% 的束流电流相当于损失 6 秒束流时间。

表 IV. 两种模型的实时指标。此处将根据先前的平均节省束流时间定义 T_s选出的性能最佳 RPCNN 模型 [26], 列为基准。LASSO 下标中的 0.5 至 0.9 表示不同的分类阈值选项。每列中的最佳值以粗体标出。

模型	真正例[r]	假负例[r]	真阳性率[r](%)	假正例[r]	T_s^r(分钟/天)
$\mathrm{RPCNN}_{\mathrm{best}}$	99	1093	8.3	455	-0.27
$\mathrm{LASSO}_{0.5}$	**1017**	**175**	**85.3**	1405	3.43
$\mathrm{LASSO}_{0.6}$	1004	188	84.2	784	4.52
$\mathrm{LASSO}_{0.7}$	1000	192	83.9	429	5.17
$\mathrm{LASSO}_{0.8}$	983	209	82.5	222	**5.45**
$\mathrm{LASSO}_{0.9}$	956	236	80.2	**182**	5.37

个联锁。LASSO 成功捕捉到两个真正阳性，而 RPCNN 漏掉了一个真正阳性，并且更多 RPCNN 也明显存在假阳性。

由于正样本仅取自 $t_1 = 0.2$ 秒时，大多数联锁预计只能提前 0.2 秒预测。不过，在模型的实时评估中，仍会出现一些更早的前兆，实际预测时域 T_h （如图3所示）也超过了 0.2 秒。图13展示了成功预测的联锁数量的累积分布图（即表 IV 中 $\mathrm{LASSO}_{0.8}$ 模型在总计 1192 个联锁中预测正确的 983 个真正例[r] ），其范围涵盖完整的预测时域 T_h（秒），即从 0.2 秒到 59.8 秒。967 个联锁仅在发生前 0.2 秒被预测，占全部 983 个真正阳性的 98%。不过，最早的一次预测发生在联锁发生前 51.0 秒，此外模型还提前捕捉到了其他几个联锁。这表明该模型具备提前预测的潜力。此外，预测时域与实时指标定义之间的关系仍有待进一步研究。

V. 仪器设备

尽管 $\mathrm{TPR}^r \approx 85\%$ 表明 LASSO模型的性能令人满意，但实际上只能提前 0.2 s 预测联锁。为了及时执行恢复操作——即将束流电流降低 10%——我们需要一种仪器设备，能够在 0.2 s 内实现这种变化。表V列出了 PSI 的多个质子设施中已投入使用的几种可能的仪器设备。

AVKI踢束磁铁是低能束流线中的快速磁踢束器，位于Cockroft–Walton预加速器和72MeV注入回旋加速器之间 [44], ，如图1上半部分所示。它是原有联锁系统的一部分——

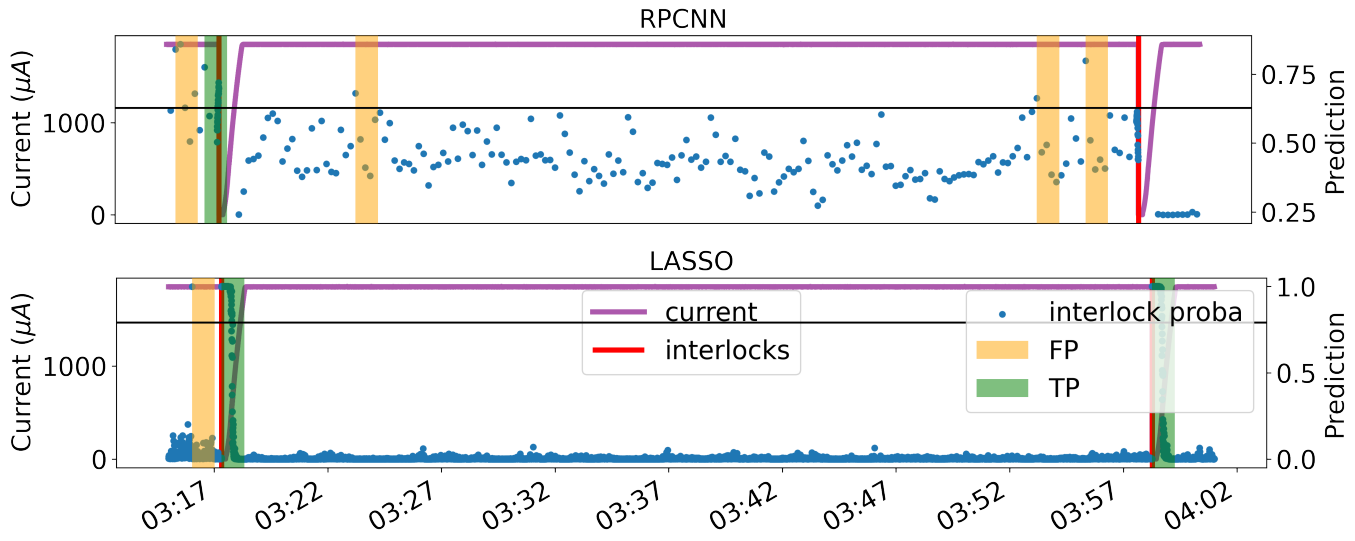


图12。2019-10-06一小时内两个模型的实时性能。

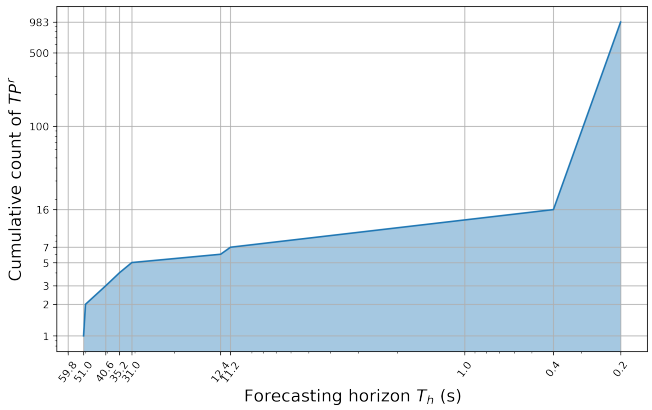


图13。根据预测时域 $T_h(s)$ 绘制的真正例累积分布图[r] 。最早的一次预测发生在 51.0 秒，且有 3 个联锁的预测提前时间超过 40 秒。为突出显示显著数值，x 轴和 y 轴均采用非均匀刻度。

表V。PSI 各类质子设施中用于快速调节束流强度的潜在仪器设备

仪器设备	设施	时间尺度（毫秒）
AVKI快速踢磁铁	HIPA	0.005
踢束磁铁 [42]	PROSCAN	0.05
偏转板 [43] Gantry2		0.2
束流阻挡器 [42]	PROSCAN	60
KIP2准直器	PSI 2号注入器	66.7/0.2 毫安

收到联锁信号后，它会在0.005毫秒内作出响应，将质子束倾倒。

PROSCAN 中的踢束磁铁是点扫描 过程中不可或缺的一部分，在该过程中，经过偏转的束流会被切换这台快速踢束磁铁会在各局部点之间开启和关闭，将束流以局部点的形式照射到患者身上 [42]。

Gantry2中的垂直偏转板（VD）旨在通过精确（精度为 1%）地控制束流强度，实现快速变化期间对肿瘤的连续线扫描。VD通过施加可调节的横向电场，使束流穿过一组准直器狭缝。引出束流与VD电压以及束流能量有关 [45]。

PROSCAN中的束流阻挡器位于每个区域的入口处、降能器之前、上述踢束磁铁之后，以及束流线入口处，用于控制束流强度。区域入口处的束流阻挡器响应时间较短，但无法承受较大的剂量 [42]。

最后，HIPA中的KIP2准直器是一种可移动准直器，用于保持束流光学并控制注入回旋加速器链的注入束流电流。如图 1 [46, 47]所示，它位于72 MeV注入器回旋加速器的第一圈。

所有列出的仪器设备都能够在 0.2 秒内截断束流。踢束磁铁、偏转板和束流阻挡器所列的时间尺度，是它们踢束、偏转或阻挡相应束流所需的响应时间；而准直器 KIP2 [46] 的移动速度为 ~6毫米/秒，按默认束流电流 2 毫安计算，相当于 3 毫安/秒。因此，KIP2 需要 66.7 毫秒才能改变默认束流电流的 10%，即 0.2 毫安。

VI. 结论与展望

我们提出一种基于 LASSO 逻辑回归的方法，将粒子加速器中断预测问题作为二元分类问题处理。我们此前提出的 RPCNN 模型将一维时间序列转换为二维图像，旨在提取更多精

细特征，但其分类能力并未达到预期。一系列双样本MMD检验表明，束流中断比逐渐累积的过程更具突发性。因此，RPCNN表现不佳可能归因于输入数据选择不当以及模型参数过于复杂。基于MMD检验结果，我们建立了一个更简单的LASSO模型，其在标准分类和定制实时指标方面均优于RPCNN。列出的可用于快速调节束流强度的仪器，为未来将该模型集成到实时运行中，并最终根据预测避免触发联锁，提供了参考。

VII. 致谢

我们特别感谢 Mélissa Zacharias 在 RPCNN模型及超参数调优方面所做的工作，感谢 Jaime Coello de Portugal 在数据收集方面所做的工作，也感谢他们二人在实时操作系统图形用户界面方面所做的工作。我们感谢 Davide Reggiani 在 HIPA 和仪器设备方面给予的支持。我们感谢 Anastasia Pentina 以及瑞士数据科学中心的其他同事，在整个研究过程中开展了富有见地的合作并给予慷慨支持。我们还感谢 PSI 的 Hubert Lutz 和 Simon Gregor Ebner，他们对 HIPA归档器有专业的了解，并协助开展数据收集。我们感谢 Derek Feichtinger 和 Marc Caubet 提供的协助，他们帮助我们使用 Merlin集群，使本研究的计算工作得以完成。

附录：最大均值差异的详细推导

我们从再生核希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 和函数 $f: \mathcal{X} \to \mathbb{R} \in \mathcal{F} \in \mathcal{H}$ 出发，其中 $\mathcal{F}$ 是一个单位球。由于求值算子 δ_x [48]的连续性

$$\delta_x : \mathcal{H} \to \mathbb{R}, f \mapsto f(x), \tag{A.1}$$

根据 Riesz表示定理 [49], , 存在一个特征映射 ϕ_x ，即

$$\phi_x = k(x, \cdot) : \mathcal{X} \to \mathbb{R} \tag{A.2}$$

满足

$$\langle f, \phi_x \rangle_{\mathcal{H}} = f(x). \tag{A.3}$$

其中， $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}}$ 表示 $\mathcal{H}$中两个函数的内积。式（A.2）中的核 k： $\mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ 固定一个自变量为 x，另一个自由自变量则作为特征映射 $\phi_x(\cdot)$的输入自变量。具体而言，我们有

$$\langle \phi_{x_0}, \phi_{x_1} \rangle_{\mathcal{H}} = k(x_0, x_1). \tag{A.4}$$

定理 1 （MMD 作为 $\mathcal{H}$ [50]中均值嵌入之间的距离）。若均值嵌入 μ_p 和 μ_q 存在，其中

$$\mathbf{E}_{x_0 \sim p} f = \langle f, \mu_p \rangle_{\mathcal{H}}, \quad \mathbf{E}_{x_1 \sim q} f = \langle f, \mu_q \rangle_{\mathcal{H}}, \quad \forall f \in \mathcal{F}$$

then

$$MMD(\mathcal{F}, p, q) = \|\mu_p - \mu_q\|_{\mathcal{H}}. \tag{A.5}$$

证明。 由式（1）可得

$$\begin{aligned}
\mathrm{MMD}(\mathcal{F}, p, q) &= \sup_{f \in \mathcal{F}} \left(\mathbf{E}_{x_0}[f(x_0)] - \mathbf{E}_{x_1}[f(x_1)] \right) \\
&= \sup_{\|f\|_{\mathcal{H}} \leq 1} \left(\langle f, \mu_p \rangle_{\mathcal{H}} - \langle f, \mu_q \rangle_{\mathcal{H}} \right) \\
&= \sup_{\|f\|_{\mathcal{H}} \leq 1} \left(\langle f, \mu_p - \mu_q \rangle_{\mathcal{H}} \right) \\
&= \left\langle \frac{\mu_p - \mu_q}{\|\mu_p - \mu_q\|_{\mathcal{H}}}, \mu_p - \mu_q \right\rangle_{\mathcal{H}} \\
&= \|\mu_p - \mu_q\|_{\mathcal{H}}
\end{aligned}$$

□

我们知道，当 $k(\cdot, \cdot)$ 可测且 $\mathbf{E}_x \sqrt{k(x, x)} < \infty$ [31]时，均值嵌入存在。除此之外，我们现在给出使最大均值差异成为度量的条件，即当且仅当两个分布相同时，其值唯一为零。

定理 2 （最大均值差异作为度量）。若 $\mathcal{H}$ 是定义在一个紧致度量空间 $\mathcal{X}$ 上的普适再生核希尔伯特空间，且其对应的核 $k(\cdot, \cdot)$ 是连续的，则

$$MMD(\mathcal{F}, p, q) = 0 \iff p = q \tag{A.6}$$

其中 $\mathcal{F}$ 是 $\mathcal{H}$ 上的单位球， p、 q 是来自 $\mathcal{X}$ 的两个分布。

证明。 从 MMD 的表达式（式（1）和式（3））可以明显看出，如果 $p = q$，则 MMD(F, p, q) 为零。因此，我们只需证明从左到右的蕴含关系。

由于 $\mathcal{H}$ 是普适的，核 k 必须是连续的，并且 $\mathcal{H}$ 关于有界连续函数空间 $C(\mathcal{X})$ [51] 中的 L_∞ 范数也是稠密的。换言之， $C(\mathcal{X})$ 中的任意函数都可以用 $\mathcal{H}$ 中的函数任意逼近。因此，对于任意给定的 $\epsilon > 0$ 和任意函数 $g \in C(\mathcal{X})$，都存在一个函数 $h \in \mathcal{H}$ ，使得

$$\|g - h\|_\infty < \epsilon. \tag{A.7}$$

然后我们有

$$\begin{aligned}
|\mathbf{E}_{x_0} g(x_0) - \mathbf{E}_{x_1} g(x_1)| &\leq |\mathbf{E}_{x_0} g(x_0) - \mathbf{E}_{x_0} h(x_0)| \\
&\quad + |\mathbf{E}_{x_0} h(x_0) - \mathbf{E}_{x_0} h(x_1)| \\
&\quad + |\mathbf{E}_{x_1} h(x_1) - \mathbf{E}_{x_1} g(x_1)| \\
&\leq \mathbf{E}_{x_0} |g(x_0) - h(x_0)| \\
&\quad + |\langle h, \mu_p - \mu_q \rangle_{\mathcal{H}}| \\
&\quad + \mathbf{E}_{x_1} |h(x_1) - g(x_1)|
\end{aligned}$$

并且由式 (3) 可知，最大均值差异 $= 0$ 意味着 $\mu_p - \mu_q = 0$；由式 (A.7) 可得 $\mathbf{E}_x|g(x) - h(x)| < \epsilon$。

因此

$$|\mathbf{E}_{x_0} g(x_0) - \mathbf{E}_{x_1} g(x_1)| \leq \epsilon + 0 + \epsilon = 2\epsilon \tag{A.8}$$

对所有 $\epsilon > 0$ 和 $g \in C$（$\mathcal{X}$）均成立。这表明两个分布或博雷尔概率测度 p 和 q 相等 [31, 52]。

□

[1] E. Gibney，《升级后的大型强子对撞机开启史诗般运行，搜寻新物理》，《自然》**607**，219（2022）。[2] C. D. Bowman，《用于核废料嬗变的加速器驱动系统》，《粒子与原子核科学年度评论》**48**，505（1998）。[3] P. K. Nema，《加速器在核系统中的应用：加速器驱动系统（ADS）》，《能源学报》**7**，597（2011）。[4] U. Amaldi，《利用粒子加速器进行癌症治疗》，《核物理 A》**654**，C375（1999）。[5] U. Amaldi，《利用粒子加速器进行癌症治疗的未来趋势》，《医学物理学杂志》**14**，7（2004）。[6] A. L. Edelen、S. Biedron、B. Chase、D. Edstrom、S. Milton 和 P. Stabile，《用于粒子加速器建模与控制的神经网络》，《IEEE 核科学汇刊》**63**，878（2016）。[7] P. Arpaia、G. Azzopardi、F. Blanc、G. Bregliozzi、X. Buffat、L. Coyle、E. Fol、F. Giordano、M. Giovannozzi、T. Pieloni 等，《用于欧洲核子研究中心大型强子对撞机束流动力学研究的机器学习》，《核仪器与方法物理研究 A 辑：加速器、光谱仪、探测器及相关设备》**985**，164652（2020）。[8] A. Edelen、C. Mayes、D. Bowring、D. Ratner、A. Adelmann、R. Ischebeck、J. Snuverink、I. Agapov、R. Kammering、J. Edelen 等，《粒子加速器机器学习的机遇》，arXiv 预印本 arXiv:1811.03172（2018）。[9] W. Zhao、I. Patil、B. Han、Y. Yang、L. Xing 和 E. Schüler，《通过机器学习对直线加速器进行束流数据建模及其在快速、稳健的直线加速器调试和质量保证中的潜在应用》，《放射治疗与肿瘤学》**153**，122（2020）。[10] A. Adelmann，《粒子加速器建模中的非侵入式不确定性量化与代理模型构建》，SIAM/ASA 不确定性量化杂志**7**，383（2019）。[11] J. Kirschner、M. Nonnen macher、M. Mutn`y、A. Krause、N. Hiller、R. Ischebeck 和 A. Adelmann，《利用贝叶斯优化对瑞士自由电子激光器进行快速、安全的参数调优》，载于*FEL2019*，第*39*届国际自由电子激光会议论文集（JACoW Publishing，2019），第707–710页。[12] J. Kirschner、M. Mutný、A. Krause、J. Coello de Portugal、N. Hiller 和 J. Snuverink，《在安全约束下利用贝叶斯优化调优粒子加速器》，《物理评论：加速器与束流》**25**，062802（2022）。[13] E. Fol、J. Coello de Portugal、G. Franchetti 和 R. Tomás，《利用机器学习进行大型强子对撞机的束流光学校正》，载于《*2019*年国际粒子加速器会议论文集

会议，澳大利亚墨尔本 (2019)。[14] G. Azzopardi, A. Muscat, S. Redaelli, B. Salvachua, and G. Valentino，《利用机器学习实现大型强子对撞机准直器对准的运行结果》，载于第*10*届国际粒子加速器会议（*IPAC'19*）论文集，澳大利亚墨尔本，*2019*年*5*月*19*日至*24*日，第10届国际粒子加速器会议（JACoW Publishing，2019），第1208–1211页。[15] Z. Kang, C. Catal, and B. Tekinerdogan，《利用人工神经网络预测生产线设备的剩余使用寿命（RUL）》，《Sensors》**21**，932（2021）。[16] S. Li and A. Adelmann，《时间序列预测方法及其在粒子加速器中的应用》，《物理评论：加速器与束流》**26**，024801（2023）。[17] A. Edelen, S. Biedron, D. Bowring, B. Chase, J. Edelen, S. Milton, and J. Steimel，《PXIE RFQ 冷却系统及其谐振频率响应的神经网络模型》，载于第*7*届国际粒子加速器会议（ 2016 020, 1612 07237 ），[ ]第THPOY页，arXiv：. physics.acc-ph。[18] M. Reščič, R. Seviour, and W. Blokland，《利用二元分类器预测粒子加速器故障》，Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A：加速器、光谱仪、探测器及相关设备**955**，163240（2020）。[19] M. Reščič, R. Seviour, and W. Blokland，《利用二元分类器和降维改进粒子加速器故障的预先识别》，Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A：加速器、光谱仪、探测器及相关设备**1025**，166064（2022）。[20] W. Blokland, K. Rajput, M. Schram, T. Jeske, P. Ramuhalli, C. Peters, Y. Yucesan, and A. Zhukov，《面向不确定性的异常检测：预测橡树岭散裂中子源加速器中的异常束流脉冲》，Physical Review Accelerators and Beams**25**，122802（2022）。[21] G. Koch, R. Zemel, and R. Salakhutdinov，《用于单样本图像识别的孪生神经网络》，载于第*32*届国际机器学习会议论文集，法国里尔，第37卷（2015）。[22] C. Tennant, A. Carpenter, T. Powers, A. S. Solopova, L. Vidyaratne, and K. Iftekharuddin，《杰斐逊实验室利用机器学习进行超导射频腔故障分类》，Physical Review Accelerators and Beams**23**，114601（2020）。[23] M. M. Rahman, K. Iftekharuddin, A. Carpenter, T. McGuckin, C. Tennant, and L. Vidyaratne，《利用深度学习对 CEBAF 腔体故障进行实时预测》（2022），即将在《2022年北美粒子加速器会议（NAPAC）论文集》中发表，阿尔伯克基，

新墨西哥州，2022年8月7日至12日。 [24] A. Eichler, J. Branlard, and J. H. K. Timm, 《利用基于奇偶空间的方法检测欧洲X射线自由电子激光器中的异常》, 《物理评论：加速器与束流》**26**，012801（2023）。 [25] A. Nawaz, S. Pfeiffer, G. Lichtenberg, and P. Rostalski, 《利用非线性奇偶空间方法检测欧洲XFEL中的异常》, IFAC-PapersOnLine**51**, 1379（2018）。 [26] S. Li, M. Zacharias, J. Snuverink, J. Coello de Portugal, F. Perez-Cruz, D. Reggiani, and A. Adelmann, 《粒子加速器中时间序列分类与预测的新方法》, 《Information》**12**，121（2021）。 [27] D. Reggiani, B. Blau, R. Dölling, P. A. Duperrex, D. Kiselev, V. Talanov, J. Welte, and M. Wohlmuther, 《改进 PSI-HIPA 的 SINQ 束流线中的束流模拟以及机器和靶保护》, 《中子研究杂志》**22**, 325（2020）。 [28] A. Kovach, A. Parfenova, J. Grillenberger, and M. Seidel, 《PSI 高强度质子加速器 HIPA 的能源效率与节能潜力分析》, 载于《物理学杂志：会议系列》, 第874卷（IOP出版社，2017），第012058页。 [29] K. O'Shea and R. Nash, 《卷积神经网络简介》, arXiv预印本 arXiv:1511.08458（2015）。 [30] T. Fawcett, 《ROC分析简介》, Pattern Recognition Letters**27**，861（2006）。 [31] A. Gretton, K. M. Borgwardt, M. J. Rasch, B. Sc hölkopf, and A. Smola, 《核双样本检验》, 《机器学习研究杂志》**13**，723（2012）。 [32] F. J. Massey Jr, 《拟合优度的柯尔莫哥洛夫-斯米尔诺夫检验》, 《美国统计学会杂志》**46**, 68（1951）。 [33] F. W. Scholz and M. A. Stephens, 《K样本 Anderson–Darling 检验》, 《美国统计学会杂志》**82**, 918（1987）。 [34] D. A. Darling, 《柯尔莫哥洛夫-斯米尔诺夫检验与克雷默-冯·米塞斯检验》, 《数理统计年刊》**28**, 823（1957）。 [35] J. H. Friedman and L. C. Rafsky, 《沃尔德-沃尔福维茨检验和斯米尔诺夫双样本检验的多变量推广》, 《统计学年刊》, 697（1979）。 [36] Z. Zhao, H. Peng, X. Zhang, Y. Zheng, F. Chen, L. Fang, and J. Li, 《通过核最大均值差异和信息熵识别肺癌基因标志物》, 《BMC医学基因组学》**12**，1（2019）。 [37] G. K. Dziugaite, D. M. Roy, and Z. Ghahramani, 《通过最大均值差异优化训练生成式神经网络》, arXiv预印本 arXiv:1505.03906（2015）。 [38] B. K. Sriperumbudur, A. Gretton, K. Fukumizu, B. Schölkopf, and G. R. Lanckriet, 《希尔伯特空间嵌入与概率测度上的度量》, 《统计学杂志》

机器学习研究 **11**, 1517 (2010). [39] B. K. Sriperumbudur, K. Fukumizu, 和 G. R. Lanckriet, 《普适性、特征核与测度的再生核希尔伯特空间嵌入》, 《机器学习研究》**12** (2011). [40] C. Heathcote, 《对称随机变量拟合优度检验》**1**, **14**, 172 《澳大利亚统计学杂志》(1972). [41] K. P. Chwialkowski, A. Ramdas, D. Sejdinovic, 和 A. Gretton, 《利用概率测度的解析表示进行快速双样本检验》, 神经信息处理系统进展 **28** (2015). [42] I. Jirousek, A. Coray, G. Dave, T. Korhonen, A. Mezger, E. Pedroni, M. Schippers, 等, 《proscan 患者安全系统的概念》, 第9届 ICALEPCS 会议论文集，13 (2003). [43] P. F. Carmona, V. Minnig, G. Klimpki, D. Meer, M. Eichin, C. Bula, 和 D. Weber, 《使用 Simulink 生成的现场可编程门阵列增益调度控制器，对医用质子加速器进行连续束流扫描强度控制》, PCaPAC'12 会议论文集，242 (2018). [44] D. Anicic, M. Daum, G. Dzieglewski, D. George, M. Horvat, G. Janser, F. Jenni, I. Jirousek, K. Kirch, T. Korhonen, 等, 《用于将质子束从 PSI 输送至 PSI 超冷中子源的快速踢束磁铁》, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment **541**, 598 (2005). [45] A. Schätti, D. Meer, 和 A. J. Lomax, 《质子连续线扫描运动补偿的首批实验结果》, 《医学与生物学物理》**59**, 5707 (2014). [46] J. Stetson, S. Adam, M. Humbel, W. Joho, 和 T. Stamm- bach, 《PSI 2号注入器的调试：实现高强度、高品质束流》, 载于第*13*届国际回旋加速器及其应用会议论文集(1992) 第36–39页。[47] M. H. Tahar, D. Kiselev, A. Knecht, D. Laube, D. Reggiani, 和 J. Snuverink, 《探测高功率束流的损失》, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectro meters, Detectors and Associated Equipment **1046**, 167638 (2023). [48] B. Schölkopf, A. J. Smola, F. Bach, 等, 核方法学习：支持向量机、正则化、优化及其他(麻省理工学院出版社，2002). [49] M. Reed, B. Simon, 等，*I*：泛函分析，第1卷（海湾专业出版社，1980）。[50] A. Gretton, K. Borgwardt, M. Rasch, B. Schölkopf, 和 A. Smola, 《双样本问题的核方法》, 神经信息处理系统进展 **19** (2006). [51] C. A. Micchelli, Y. Xu, 和 H. Zhang, 《普适核》, 《机器学习研究》**7** (2006). [52] R. M. Dudley，实分析与概率（CRC出版社，2018）。