ベイズ最適化のチュートリアル

理化学研究所仁科加速器科学研究センター
森田　泰之

はじめに

実行環境　　Google Colaboratory
https://colab.google/

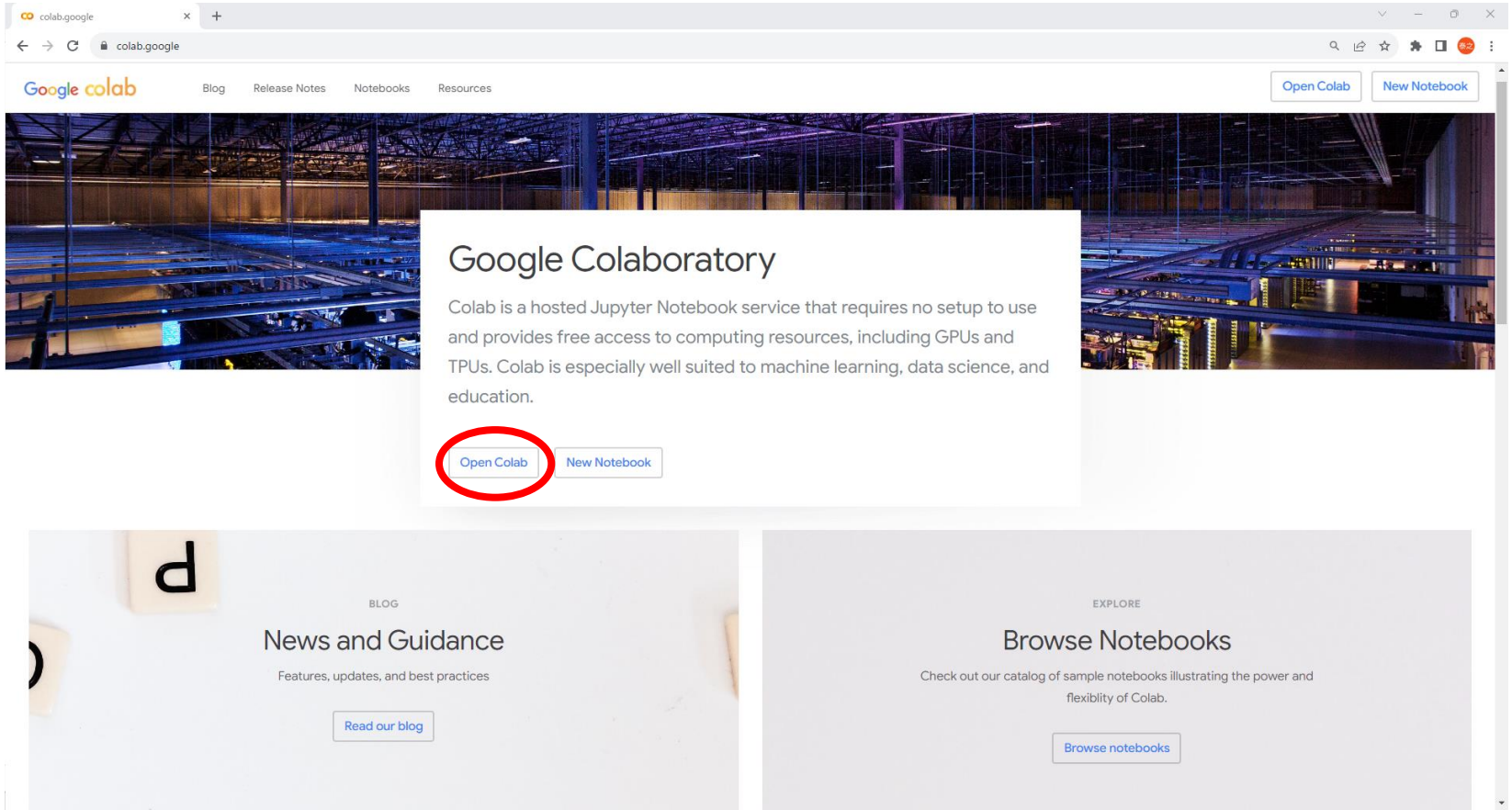
今回使用するファイル
https://github.com/Morita1116/Machine-Learning-Workshop-on-Accelerator-and-Beam-Physics-Tutorial-Materials

- Setup.txt　　Google Colaboratory上に環境を構築するためのコマンド
- BO_2parameters.py　　プログラム例(2パラメーターの最適化)
- BO_4parameters.py　　プログラム例(4パラメーターの最適化)

はじめに

実行環境

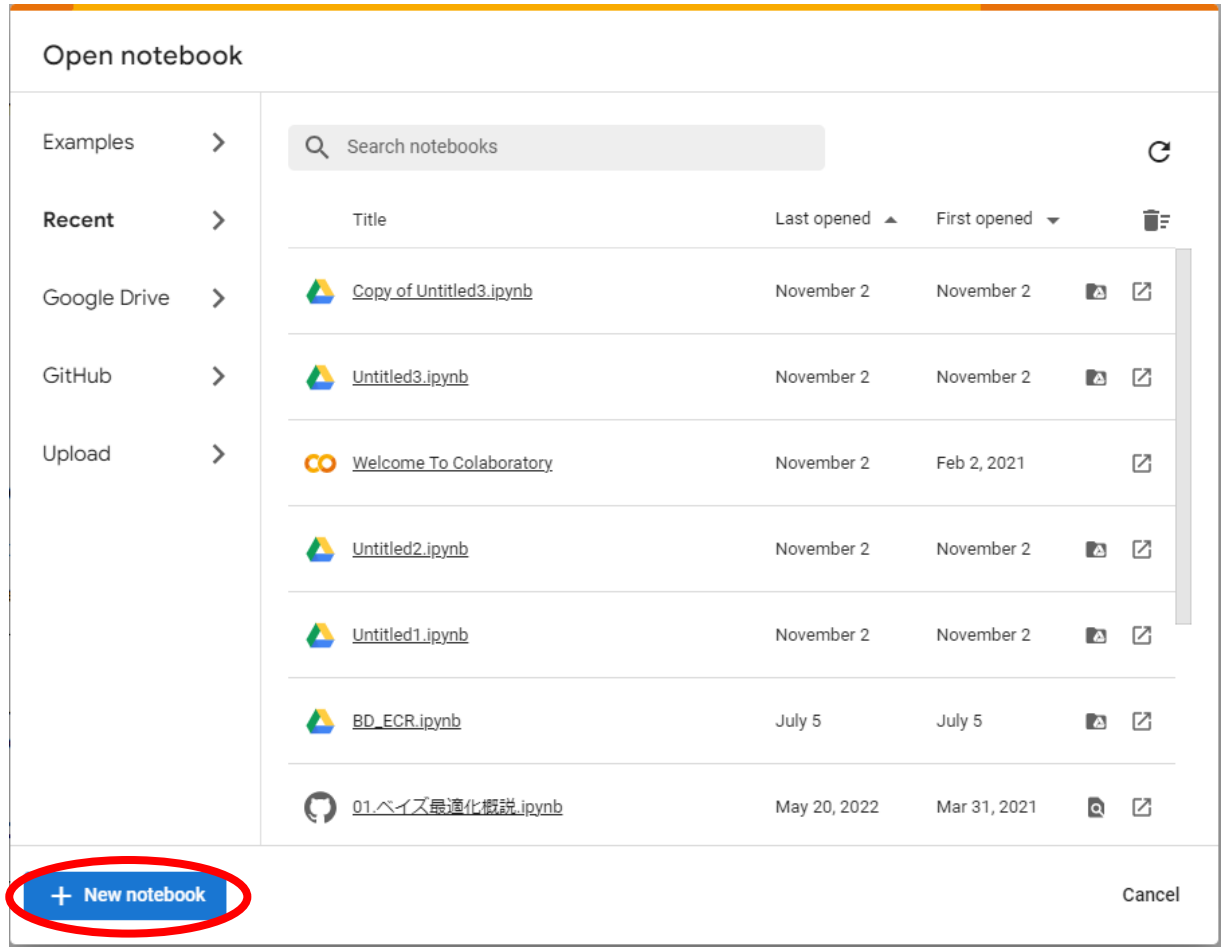
Google Colaboratory
https://colab.google/



はじめに

実行環境

Google Colaboratory
https://colab.google/



実行ファイルの中身1

```
import GPy
import GPyOpt
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
import time

from ocelot import *
```

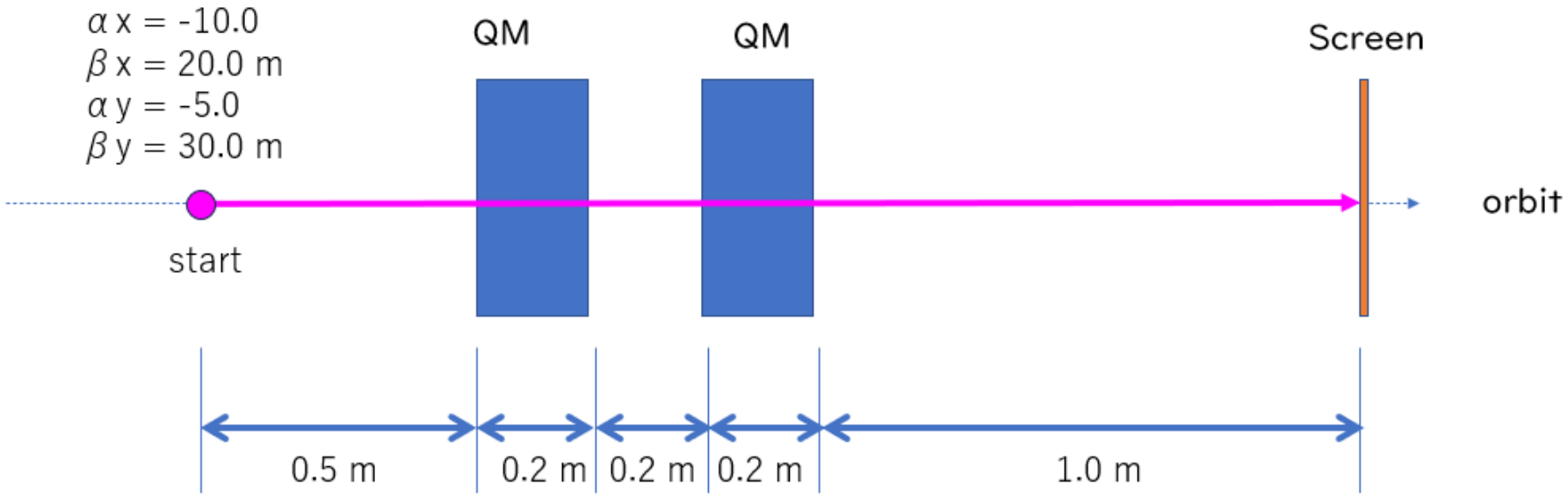
各種ライブラリの読み込み

GPy, GPyOpt	ベイズ最適化計算用のライブラリ
matplotlib.pyplot	グラフ描写用のライブラリ
numpy	配列計算用のライブラリ
time	時間関連の情報や関数のライブラリ
Ocelot	ビーム輸送計算用ライブラリ

実行ファイルの中身2

def calc_resp(x0,x1):　Ocelotによる軌道計算を行う関数

L20, L50	ドリフト空間。それぞれ0.2m,0.5m
QM1, QM2	四重極電磁石(有効磁場長0.2m) ←この磁場を最適化する
cell, lat	ビーム輸送系の配置
tws0	初期条件　$\beta_x, \beta_y, \alpha_x, \alpha_y$, Emittance (x, y)
sx, sy	Screen上でのβ_x, β_y



実行ファイルの中身3

def show_beta(x0,x1): Ocelotの計算結果を描写する関数
matplotlib.pyplotを使って描写される

def eval_func(x): ベイズ最適化の評価関数。この関数の値を指標に最適化を行う。
実機ではビーム強度などの測定値を使う。

評価関数の例

- val = np.abs(sx) + np.abs(sy) ターゲット上のβ_x, β_yの和
- val = np.abs(sx*sy) ターゲット上のβ_x, β_yの積
- val = np.log(np.abs((sx+10)*(sy+10))) ターゲット上のβ_x, β_yの積の対数
- val = -1.0/np.abs((sx+10)*(sy+10)) ターゲット上のβ_x, β_yの積の逆数

その他、

beta_x = [p.beta_x for p in tws], beta_y = [p.beta_y for p in tws]

で全体を計算し、np.max(beta_x)で最大値を考慮するなどの工夫も可能

実行ファイルの中身4

==== Main ====

bounds = ~　　各変数(今回は電磁石)の設定範囲
continuous: 連続的な変数。設定可能範囲をdomainに入力。
discrete: 離散的な変数。設定可能な値を配列としてdomainに入力。

myBopt = ~　　ベイズ最適化のモデル

- **f**　　**評価関数 (eval_func)**
- bounds　　変数の設定範囲
- **initial_design_number**　　**初期条件用のデータサンプリング数**
- acquisition_type　　獲得関数 (LCB,PI,EI)
- acquisition_weight, jitter　　大きいほど探索重視、小さいほど予測重視
- de_duplication　　重複したデータのサンプル(Trueで重複しない)
- normalize_Y　　評価関数の規格化
- maximize　　評価関数の最大化(True) or 最小化(False)

myBopt.run_optimization(max_iter=)**　　**最適化の実行。()内はイタレーション数**
myBopt.plot_acquisition()　　評価関数や獲得関数の描写。3次元以上は不可
myBopt.plot_convergence()　　最適化結果の推移の描写

Setup

Setup.txt中のコマンド

pip install GPy GPyOpt git+https://github.com/ocelot-collab/ocelot.git pyfftw numexpr numba

をGoogle Colaboratoryで実行

GPy, GPyOpt	ベイズ最適化計算用
Ocelot	ビーム軌道計算用
その他	Ocelot計算に必要なあれこれ

がInstallされる

ただしGoogle Colaboratoryの場合、
12時間でリセットされてしまうため注意

実行

Google Colaboratoryにファイルの中身をコピー＆ペーストとして実行

実行すると数字の羅列が表示される
(eval_func中のprint部分)
左から

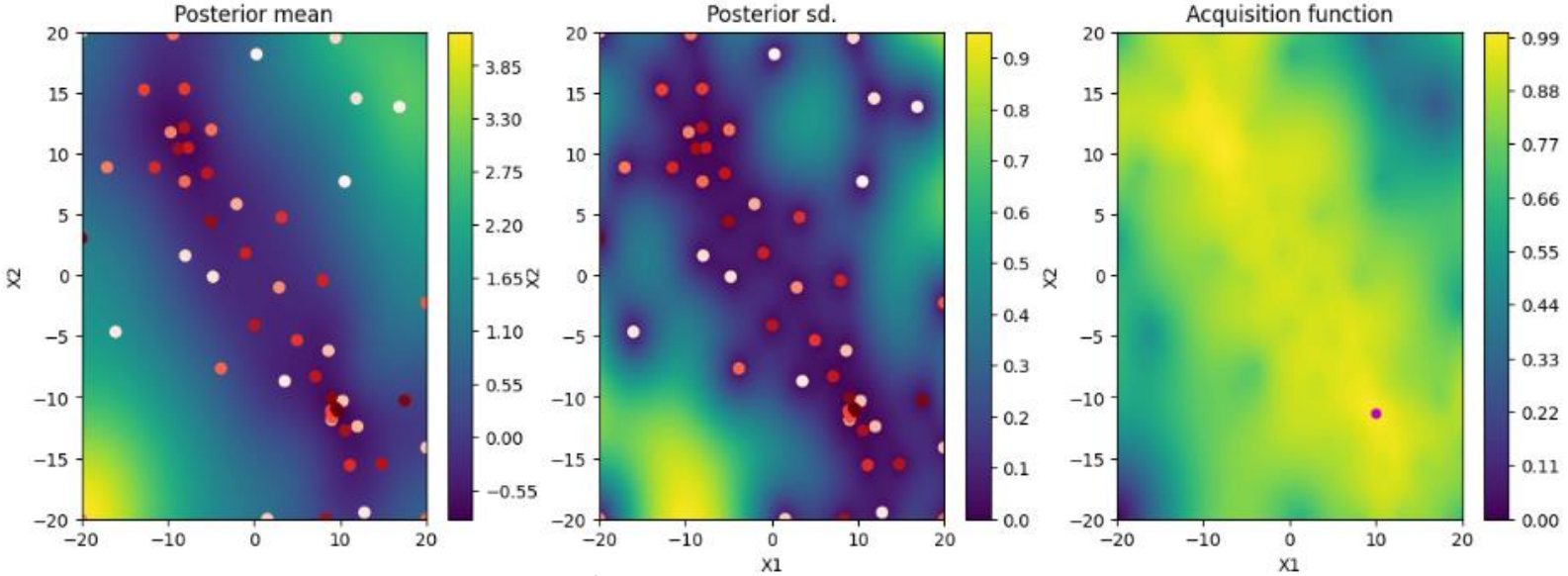
- iteration
- QM1設定値
- QM2設定値
- Screen上のサイズ(x)
- Screen上のサイズ(y)
- 評価関数の値

```
==== start ====
# cnt, x0, x1, sx, sy, eval_val
0:  +10.508,  +7.714, +11.392, +48.520, +59.912
1:   +0.300, +18.167, +14.704, +37.158, +51.862
2:  +16.858, +13.840, +16.079, +91.605,+107.683
3:   +3.560,  -8.673, +13.402,  +0.720, +14.121
4:  -16.036,  -4.628, +55.522, +18.101, +73.623
5:  +12.796, -19.454,  +5.122, +16.845, +21.967
6:   -4.751,  -0.100, +17.908,  +1.049, +18.958
7:   -7.952,  +1.625, +20.017,  +5.258, +25.276
8:  +11.868, +14.532, +14.526, +73.900, +88.426
9:   +9.450, +19.526, +15.920, +79.295, +95.215
10:  -20.000, +20.000, +17.762, +34.210, +51.972
11:   +1.548, -20.000, +36.385, +17.401, +53.786
12:  +20.000, -14.131, +26.241,  +0.511, +26.751
13:  +10.285, -10.301,  +2.157,  +2.536,  +4.693
14:   +8.626,  -6.174,  +0.967,  +9.840, +10.807
15:  +11.990, -12.394,  +5.492,  +0.920,  +6.412
```

実行回数は
initial_design_number + max_iter

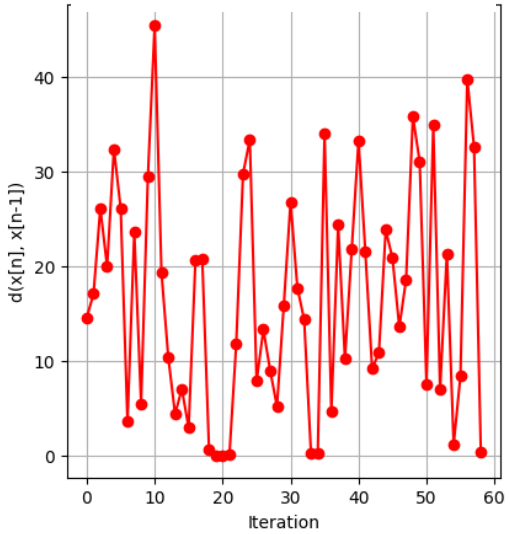
実行結果例

予測値

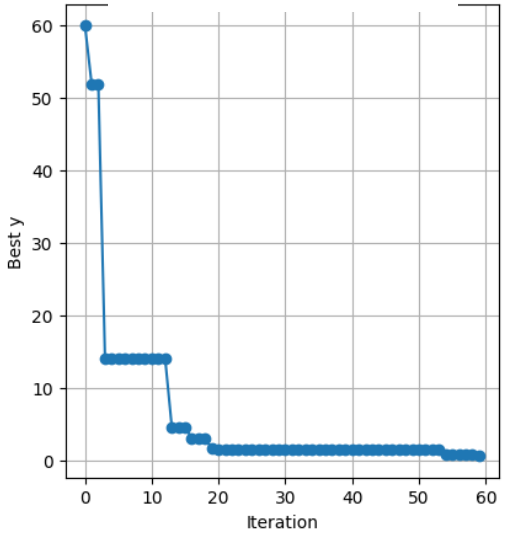


獲得関数

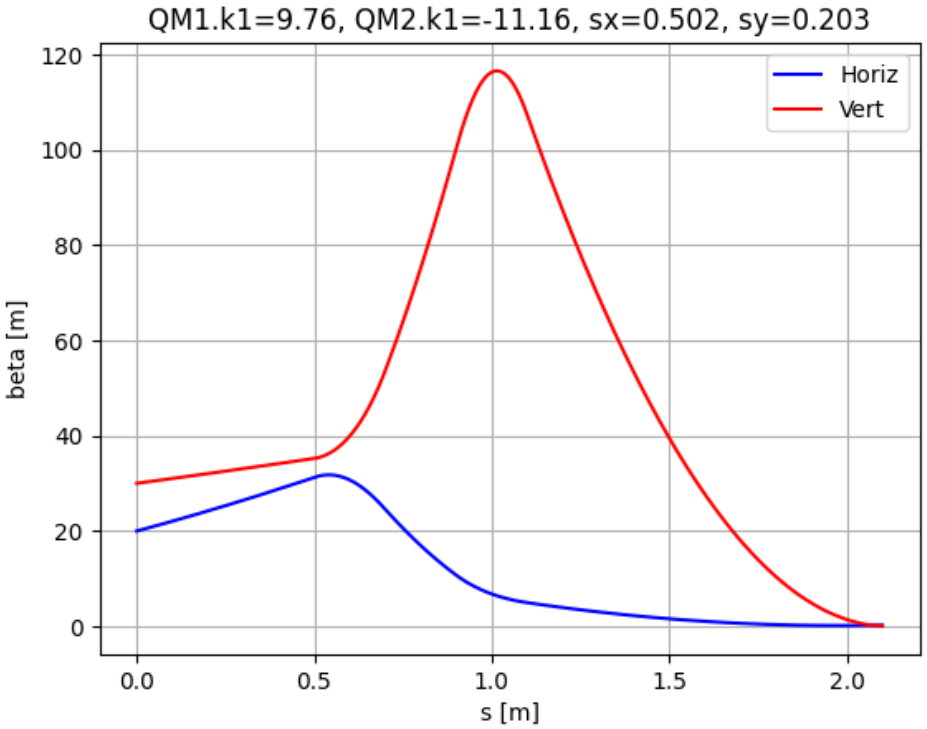
パラメーター変化量



Best Value



Beam envelope



Best Valueでのenvelope

各種設定値を変更すると収束までのiteration数やビームの形状などが変化します。
皆様で各種設定を変更してみてください。

- ビーム初期条件
- 評価関数
- 獲得関数
- acquisition_weight (LCB) / jitter (PI,EI)
- max_iter
- QMの設定範囲
- QMの数(4台: BO_4parameters.py)

etc.

12時ごろまではZoomでも質問を受け付けておりますので、ご気軽にご質問ください。

実行ファイルの中身4

==== Main ====

bounds = ~　　各変数(今回は電磁石)の設定範囲
continuous: 連続的な変数。設定可能範囲をdomainに入力。
discrete: 離散的な変数。設定可能な値を配列としてdomainに入力。

myBopt = ~　　ベイズ最適化のモデル

- f　　評価関数 (eval_func)
- bounds　　変数の設定範囲
- initial_design_number　　初期条件用のデータサンプリング数
- acquisition_type　　獲得関数 (LCB,PI,EI)
- acquisition_weight, jitter　　大きいほど探索重視、小さいほど予測重視
- de_duplication　　重複したデータのサンプル(Trueで重複しない)
- normalize_Y　　評価関数の規格化
- maximize　　評価関数の最大化(True) or 最小化(False)

myBopt.run_optimization(max_iter=**)　　最適化の実行。()内はイタレーション数
myBopt.plot_acquisition()　　評価関数や獲得関数の描写。3次元以上は不可
myBopt.plot_convergence()　　最適化結果の推移の描写