

# Gaussian Process Optimization in the Bandit Setting: No Regret and Experimental Design

Niranjan Srinivas, Andreas Krause<sup>†</sup>, Sham Kakade<sup>††</sup>, Matthias Seeger<sup>†††</sup>

<sup>†</sup>: California Institute of Technology

<sup>††</sup>: University of Pennsylvania

<sup>†††</sup>: Saarland University

January 8, 2023

# 目次

- 1 はじめに
- 2 ベイズ最適化
- 3 GP-UCB
- 4 実験
- 5 まとめ

### 1 はじめに

背景

ブラックボックス関数

ベイズ最適化

本論文の貢献

### 2 ベイズ最適化

### 3 GP-UCB

### 4 実験

### 5 まとめ

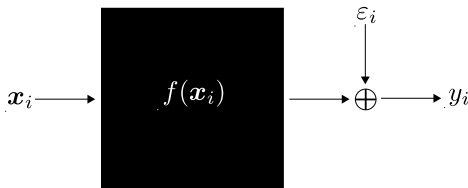
- 多くの実問題は，目的関数に対する最適変数探索問題として定式化できる
  - 耐久性の高いロボットの開発

# ブラックボックス関数

- ブラックボックス関数  $f$

$$y_i = f(x_i) + \varepsilon_i$$

入力： $x_i$ , 出力： $y_i$ , 誤差： $\varepsilon_i$



- 実応用で扱う対象はブラックボックス関数であることが多い
- ブラックボックス関数は、主に以下の2つの性質を持つ
  - 関数の具体的な形状が不明
  - 各入力における関数値を得るには、大きなコストがかかる

- 多くの実問題は，ブラックボックス関数最適化と等価
- できるだけ少ない関数評価回数で最適化を見つけたい
- 有効な手法としてベイズ最適化がある

- 本研究の目的
- 本研究の意義
  - 
  -

## 1 はじめに

## 2 ベイズ最適化

問題設定

ガウス過程

ベイズ最適化 1

獲得関数

従来の獲得関数

## 3 GP-UCB

## 4 実験

## 5 まとめ



- 候補入力  $\mathcal{X} = \{x_1, \dots, x_n\}$  が与えられている
- 関数  $f$  を評価して出力  $y_i = f(x_i)$  を得るにはコストがかかる
- できるだけ少ないコストで関数  $f$  を最大化するパラメータ  $x$  を求めたい

$$x^* = \arg \max_{x \in \mathcal{X}} f(x)$$

- ガウス過程は、確率分布を用いた複雑で非線形な関数を扱うためのモデルである。
- このような複雑で非線形な関数を扱う場合には、一般的な最適化手法では、解決が困難になることがある。

## ガウス過程

\* ガウス過程の定義を記述する

- $f$  にガウス過程事前分布を仮定する
- 訓練データに基づき,  $f$  の事後分布を求める
- 事後分布に基づき最も最大値となりそうな点を次に観測する
- 観測した  $(x_{next}, y_{next})$  を訓練データに追加し, 再び事後分布を求める





1 はじめに

2 ベイズ最適化

3 GP-UCB

提案手法

GP-UCB のアルゴリズム

4 実験

5 まとめ



- 初期化: 最初に,  $f$  の予測分布を設定する. これは  $f$  の予測分布を表すカーネルを選択し, そのカーネルに対応するガウス過程を設定することで行われる.
- アクションの選択: 次に,  $f$  の予測分布から, 次のような式を用いてアクションを選択する

- $$a_t = \operatorname{argmax}_{a \in D} (\mu_t(a) + \beta_t \sigma_t(a))$$

ここで,  $\mu_t(a)$  は, 時刻  $t$  において,  $a$  が選択されると予測される  $f$  の平均値を表します.  $\sigma_t(a)$  は, 時刻  $t$  において,  $a$  が選択されると予測される  $f$  の不確実性を表します.  $\beta_t$  は, 時刻  $t$  においてのアクションの選択におけるリスク係数を表します

- 報酬の観測: 選択したアクション  $a_t$  に対して報酬  $r_t$  を観測する.
- 予測分布の更新: 次に, 最新のアクション  $a_t$  を使用して  $f$  の予測分布を更新する. これは, ガウス過程のアップデートによって行われる.



1 はじめに

2 ベイズ最適化

3 GP-UCB

4 実験

実験手法

実験対象データ

実験結果

5 まとめ



- 人工的に作成した合成データ
  - 長さスケールパラメータ 0.2 の二乗指数カーネルからランダムな関数をサンプリング
  - サンプリングノイズ分散
- 46 個のセンサーを用いて 5 日間に渡って収集された温度データ (Intel Research Berkeley)
  - 具体的に説明
- カリフォルニア州 I-880 South 高速道路に設置された交通センサーのデータ
  - 具体的に説明



- 1 はじめに
- 2 ベイズ最適化
- 3 GP-UCB
- 4 実験
- 5 **まとめ**  
**結論**

