

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

Niranjan Srinivas, Andreas Krause[†], Sham Kakade^{††}, Matthias Seeger^{†††}

[†]: California Institute of Technology

^{††}: University of Pennsylvania

^{†††}: Saarland University

January 12, 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

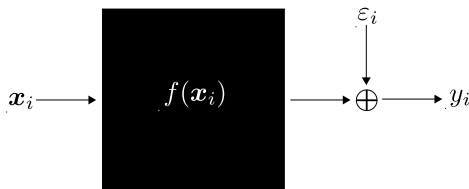
5 まとめ

- 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

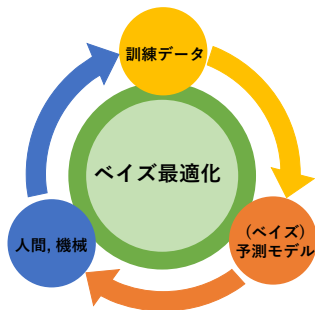
- ブラックボックス関数 f

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

入力： x_i , 出力： y_i , 誤差： ε_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、具体的な形状が不明



➤ **モデリング**
訓練データから
予測モデルを構築

➤ **決定**
予測モデルを最も改良する点を
モデルに基づき決定する

➤ **観測**
選ばれた点を
実際に観測

- 多くの実問題は、ブラックボックス関数最適化と等価
- 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
- 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

任意の入力 $\{x_1, \dots, x_n\}$ に対して $\{f(x_1), \dots, f(x_n)\}$ が n 次元正規分布に従うなら, f はガウス過程に従う.

- 関数 f がガウス過程に従うことを $f(x) \sim \mathcal{GP}(\mu(x), k(x, x'))$
- 平均関数: $\mu(x) = \mathbb{E}[f(x)]$
- 共分散関数 (カーネル関数):
$$k(x, x') = \mathbb{E}[(f(x) - \mu(x))(f(x') - \mu(x'))]$$

- 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



variance only

$$\boldsymbol{x}_t = \arg \max_x \sigma_{t-1}^2(\boldsymbol{x})$$

- 予測分散が最大となる \boldsymbol{x} を選択
⇒ 探索中心

mean only

$$\boldsymbol{x}_t = \arg \max_x \mu_{t-1}(\boldsymbol{x})$$

- 予測平均が最大となる \boldsymbol{x} を選択
⇒ 活用中心

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

- 探索・活用に特化した手法では最適化がうまくいかない場合が多い
⇒ 探索と活用のバランスが取れるような手法を提案

GP-UCB: Gaussian Process Upper Confidence Bound

$$\mathbf{x}_t = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} \mu_{t-1}(\mathbf{x}) + \beta_t^{1/2} \sigma_{t-1}(\mathbf{x}).$$

- β_t は、探索の度合いを表す定数
 - β_t が小さい \Rightarrow 予測平均の比重が大きくなる \Rightarrow 活用重視
 - β_t が大きい \Rightarrow 予測分散の比重が大きくなる \Rightarrow 探索重視

Algorithm 1 The GP-UCB algorithm.

Input: Input space \mathcal{D} ; GP Prior $\mu_0 = 0, \sigma_0, k$

for $t = 1, 2, \dots$ **do**

 Choose $\mathbf{x}_t = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} \mu_{t-1}(\mathbf{x}) + \sqrt{\beta_t} \sigma_{t-1}(\mathbf{x})$

 Sample $y_t \leftarrow f(\mathbf{x}_t) + \varepsilon_t$

 Perform Bayesian update to obtain μ_t and σ_t

end for

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

- 実験手法
 - variance only
 - maximum mean
 - Expected Improvement(EI)
 - Most Probable Improvement(MPI)
 - GP-UCB
- Mean Average Regret を用いた評価
 - $\text{Regret} = (\text{真の関数の最大値}) - (\text{観測済みデータの最大値})$
 - Average Regret : 1 回の試行中の Regret の平均
 - Mean Average Regret : 全試行の Average Regret の平均

1. 合成データ

- $\mathcal{D} \in [0, 1]$ の範囲を一様に 1000 点で区切った点を候補点とする
- $T = 1000, \sigma^2 = 0.025, \delta = 0.1$
- 30 回試行

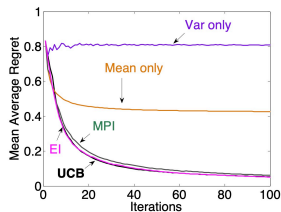
2. 温度データ

- 46 個のセンサーから 1 分間隔で 5 日以上計測された気温
- $T = 46, \sigma^2 = 0.5, \delta = 0.1$
- 2000 回試行

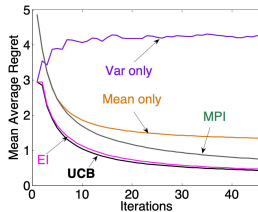
3. 交通データ

- 357 個のセンサーから 1 ヶ月, 午前 6 時から午前までに通過する車の速度
- $T = 357, \sigma^2 = 4.78, \delta = 0.1$

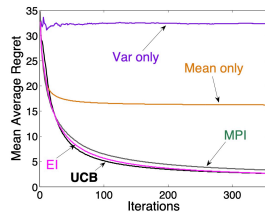
実験結果



(a) Squared exponential



(b) Temperature data



(c) Traffic data

- すべての実験結果において GP-UCB が損失少なく最適化を行なっている
- 既存手法の EI, MP と比較して同等以上の性能を示した

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

