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 13, 2023

目次

Next Section

背景

- 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

入力

材料

x_1: 材料1 →

x_2: 材料2 →

⋮

x_d: 材料d →

ロボットの開発

出力

耐久時間

→ y_1

→ y_2

⋮

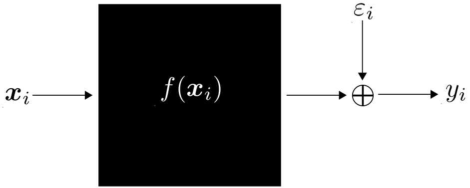
→ y_d

ブラックボックス関数

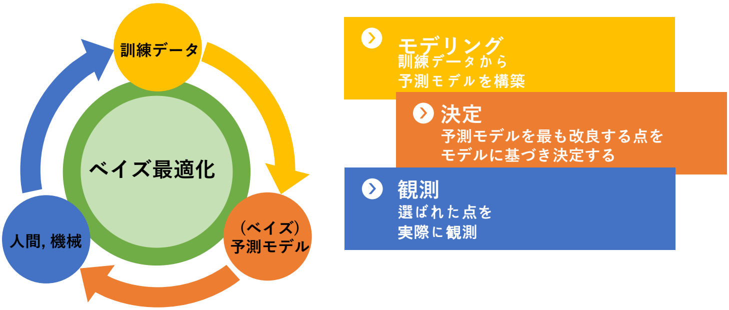
- ブラックボックス関数 f

$$y_i = f(\boldsymbol{x}_i) + \varepsilon_i$$

入力：$\boldsymbol{x}_i$，　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



- 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

本論文の貢献

- 本研究の目的
- 本研究の意義
  -
  -

Next Section

問題設定

- 候補入力 $\mathcal{X} = \{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n\}$ が与えられている
- 関数 f を評価して出力 $y_i = f(\boldsymbol{x}_i)$ 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 $\boldsymbol{x}$ を求めたい

$$\boldsymbol{x}^* = \mathop{\arg\max}_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{X}} f(\boldsymbol{x})$$

  - 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

任意の入力 $\{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n\}$ に対して $\{f(\boldsymbol{x}_1), \ldots, f(\boldsymbol{x}_n)\}$ 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 $f(\boldsymbol{x}) \sim \mathcal{GP}(\mu(\boldsymbol{x}), k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'))$
- 平均関数: $\mu(\boldsymbol{x}) = \mathbb{E}[f(\boldsymbol{x})]$
- 共分散関数 (カーネル関数):
  $k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \mathbb{E}[(f(\boldsymbol{x}) - \mu(\boldsymbol{x}))(f(\boldsymbol{x}') - \mu(\boldsymbol{x}'))]$

ベイズ最適化 1

- 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

獲得関数

-

従来の獲得関数

variance only

$$\boldsymbol{x}_t = \arg\max_{\boldsymbol{x}} \ \sigma^2_{t-1}(\boldsymbol{x})$$

- 予測分散が最大となる x を選択
  $\Rightarrow$ 探索中心

mean only

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

- 予測平均が最大となる x を選択
  $\Rightarrow$ 活用中心

Next Section

提案手法

- 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
  $\Rightarrow$ 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

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

- 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 $\mu_0 = 0$, σ_0, k

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

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

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

Perform Bayesian update to obtaion μ_t and σ_t

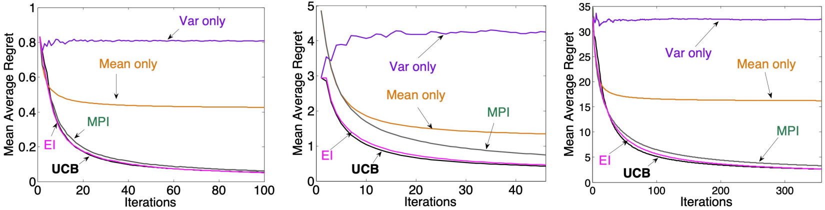
end for

Next Section

- **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**
  - Regret = (**真の関数の最大値**) - (**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**

実験対象データ

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
   - $T = 357,\ \sigma^2 = 4.78,\ \delta = 0.1$



(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

Next Section

結論

-