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

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

ICML 2020 Test of time Award

†: California Institute of Technology
††: University of Pennsylvania
†††: Saarland University

Presenter 石倉　雅紀

目次

Next Section

背景

- 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問題を考える
  - 耐久性の高いロボットの開発

入力		出力
材料		耐久時間
x_1: 材料1 →		→ y_1
x_2: 材料2 →		→ y_2
⋮		⋮
x_d: 材料d →		→ y_d

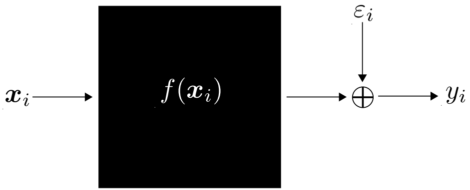
ロボットの開発

ブラックボックス関数

- ブラックボックス関数 f

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

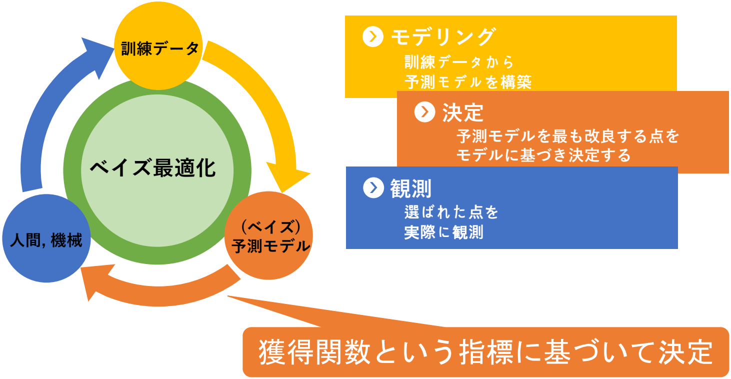
入力：$\boldsymbol{x}_i$，　出力：y_i，　誤差：ε_i



- ブラックボックス関数 f
  - 具体的な形状が不明
- ブラックボックス関数を扱う実問題も多く存在する

ベイズ最適化

- ブラックボックス関数を最適化する問題を考える
- できるだけ少ない関数評価回数で最適値を見つけたい
  - 特に関数値を得るコストが高い場合
- 有効な手法としてベイズ最適化がある



本論文の貢献

貢献

- ガウス過程を用いたベイズ最適化の獲得関数を提案
  - Gaussian Process Upper Confidence Bound(GP-UCB)
- 実データ実験において優れた性能を発揮

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
  ブラックボックス関数 f を最大化するパラメータ x を求めたい

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

ガウス過程回帰

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: $k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \mathbb{E}[(f(\boldsymbol{x}) - \mu(\boldsymbol{x}))(f(\boldsymbol{x}') - \mu(\boldsymbol{x}'))]$

ガウス過程回帰

- f の事前分布がガウス過程であると仮定: $f(\boldsymbol{x}) \sim \mathcal{GP}(0, k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'))$
- 観測データ $(X, \boldsymbol{y}) = \{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{t} = \mathcal{A}$ が与えられた下での事後分布

$$f(\boldsymbol{x}_*) \mid \mathcal{A} \sim N\left(\boldsymbol{k}_{\mathcal{A},\boldsymbol{x}_*}^{\top} K_{\mathcal{A}\mathcal{A}}^{-1} \boldsymbol{y}, k_{\boldsymbol{x}_*\boldsymbol{x}_*} - \boldsymbol{k}_{\mathcal{A},\boldsymbol{x}_*}^{\top} K_{\mathcal{A}\mathcal{A}}^{-1} \boldsymbol{k}_{\mathcal{A},\boldsymbol{x}_*}\right)$$

$$K_{\mathcal{A}\mathcal{A}} = \begin{pmatrix} k(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_1) & \cdots & k(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_t) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ k(\boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_1) & \cdots & k(\boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_t) \end{pmatrix}, \boldsymbol{k}_{\mathcal{A},\boldsymbol{x}_*} = \begin{pmatrix} k(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_*) \\ \vdots \\ k(\boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_*) \end{pmatrix}, k_{\boldsymbol{x}_*,\boldsymbol{x}_*} = k(\boldsymbol{x}_*, \boldsymbol{x}_*)$$

ガウス過程回帰

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: $k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \mathbb{E}[(f(\boldsymbol{x}) - \mu(\boldsymbol{x}))(f(\boldsymbol{x}') - \mu(\boldsymbol{x}'))]$

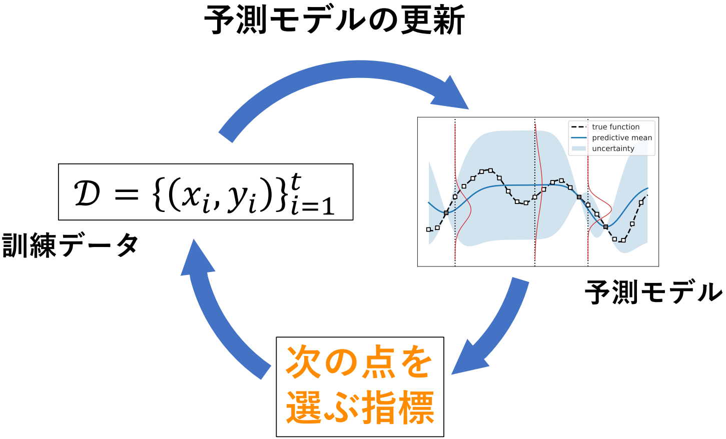
ガウス過程回帰

- f の事前分布がガウス過程であると仮定: $f(\boldsymbol{x}) \sim \mathcal{GP}(0, k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'))$
- 観測データ $(X, \boldsymbol{y}) = \{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{t} = \mathcal{A}$ が与えられた下での事後分布

$$f(\boldsymbol{x}_*) \mid \mathcal{A} \sim N\left(\boldsymbol{k}_{\mathcal{A},\boldsymbol{x}_*}^{\top} K_{\mathcal{A}\mathcal{A}}^{-1} \boldsymbol{y}, k_{\boldsymbol{x}_*\boldsymbol{x}_*} - \boldsymbol{k}_{\mathcal{A},\boldsymbol{x}_*}^{\top} K_{\mathcal{A}\mathcal{A}}^{-1} \boldsymbol{k}_{\mathcal{A},\boldsymbol{x}_*}\right)$$

$\Rightarrow$ 解析的に事後分布のパラメータが求まる

- $f(\boldsymbol{x}) \sim \mathcal{GP}(0, k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'))$ を仮定する



- 訓練データ $\mathcal{D} = (X, \boldsymbol{y}) = \{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{t}$ に基づき予測モデルを更新
- 予測モデルに基づき次の点を選ぶ指標を用いて最適な点を次に観測

獲得関数

獲得関数

探索する点を選択するために使用される関数

- 獲得関数をを $\alpha(x)$ とすると次に観測する点 x_t は以下のように決定

$$\boldsymbol{x}_t = \arg\max_{\boldsymbol{x}} \ \alpha(\boldsymbol{x})$$

獲得関数の設計指針

活用と探索のバランスを考慮して設計する

- 活用: 最適解がありそうな点を探索すること
  - 活用重視のとき局所解に陥りやすい
- 探索: 未知の領域を探索し新しい知見を得ること
  - 最適解にたどり着くまでに時間を要する

従来の獲得関数

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

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

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

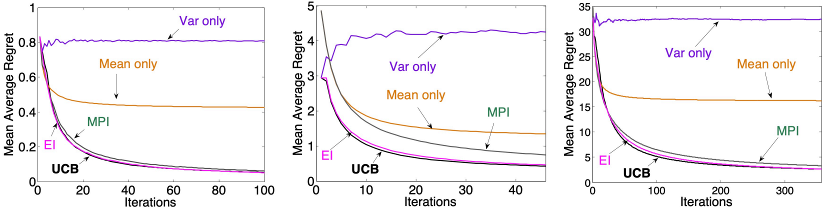
- **実験手法**
  - variance only
  - mean only
  - Expected Improvement(EI)
    - ★ 目的関数の改善量の期待値を最大化する指標
  - Most Probable Improvement(MPI)
    - ★ 目的関数が改善する確率が高い点を選択する指標
  - GP-UCB

- Mean Average Regret **を用いた評価**
  - cumulative regret: $R_t = \sum_{t=1}^{T} \{f(\boldsymbol{x}^*) - f(\boldsymbol{x}^t)\}$
    - ★ 評価対象の関数 f の最大値 $f(\boldsymbol{x}^*)$
    - ★ 時点 t において選ばれた関数値 $f(\boldsymbol{x}^t)$
  - Average Regret: cumulative regret をイテレーション数 T で割ったもの
  - 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 ヶ月間午前 6 時から 11 時に通過する車の速度
   - $T = 357,\ \sigma^2 = 4.78,\ \delta = 0.1$
   - 900 回試行

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 が小さいリグレットで最適化を行なっている
- 既存手法の EI,MPI と比較して同等以上の性能を示した

Next Section

まとめ

- GP-UCB というベイズ最適化の獲得関数を新たに提案
  - GP-UCB は探索と活用を両立する獲得関数
- GP-UCB は既存の手法と同等以上の性能を示した
  - Mean Average Regret の観点で実データと合成データにおける性能を発揮

参考文献

- Mockus, J. Bayesian Approach to Global Optimization. Kluwer Academic Publishers, 1989.
- Mockus, J., Tiesis, V., and Zilinskas, A. Toward Global Optimization, volume 2, chapter Bayesian Methods for Seeking the Extremum, pp. 117–128. 1978.
- C.K. Williams and C.E. Rasmussen, Gaussian processes for machine learning, vol.2, MIT press Cambridge, MA, 2006.