パラメータ付きブラックボックス最適化問題のための
アルゴリズム検討

情報工学EP 白川研究室　藤瀬達哉

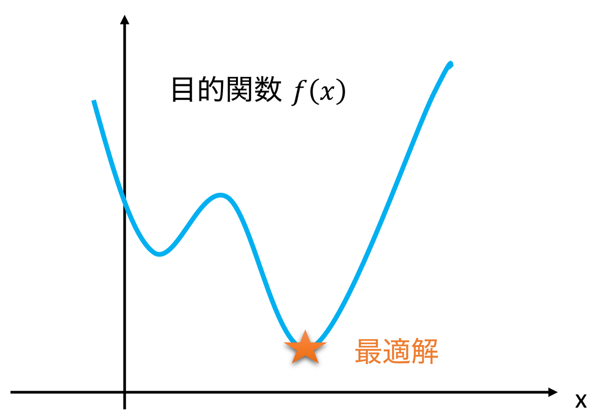
研究概要

ブラックボックス最適化問題

- 最適化問題とは, ある目的関数を最小(最大)にする解を探索し求める問題
- ブラックボックス最適化問題とは, 目的関数に形状(微分情報)が未知の関数を用いた場合の最適化問題

パラメータ付きブラックボックス最適化問題

- パラメータ(条件)のもとでの最適化問題
- (例)野菜の製造過程の最適化(気温, 天気など)
- 目標は各パラメータに対応した最適解の獲得



- 設計変数： $x \in \mathcal{X}$
- パラメータ： $\alpha \in \mathcal{A}$
- 目的関数： $f : \mathcal{X} \times \mathcal{A} \to \mathbb{R}$
- 最小化問題：$x^*(\alpha) = \arg\min_{x \in \mathcal{X}} f(x, \alpha)$

目的

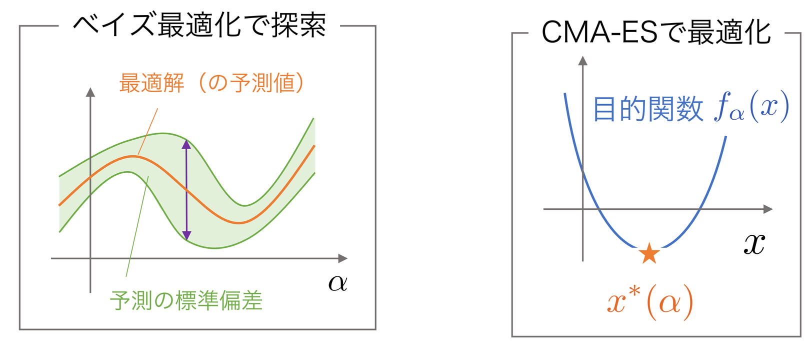
各パラメータ α に対して最適解 $x^*(\alpha)$ を返すモデルの獲得

アプローチ

- ベイズ最適化で予測の分散が大きいパラメータ α を探索し決定
- CMA-ESを用いて, 決定した α の下での目的関数の最適化

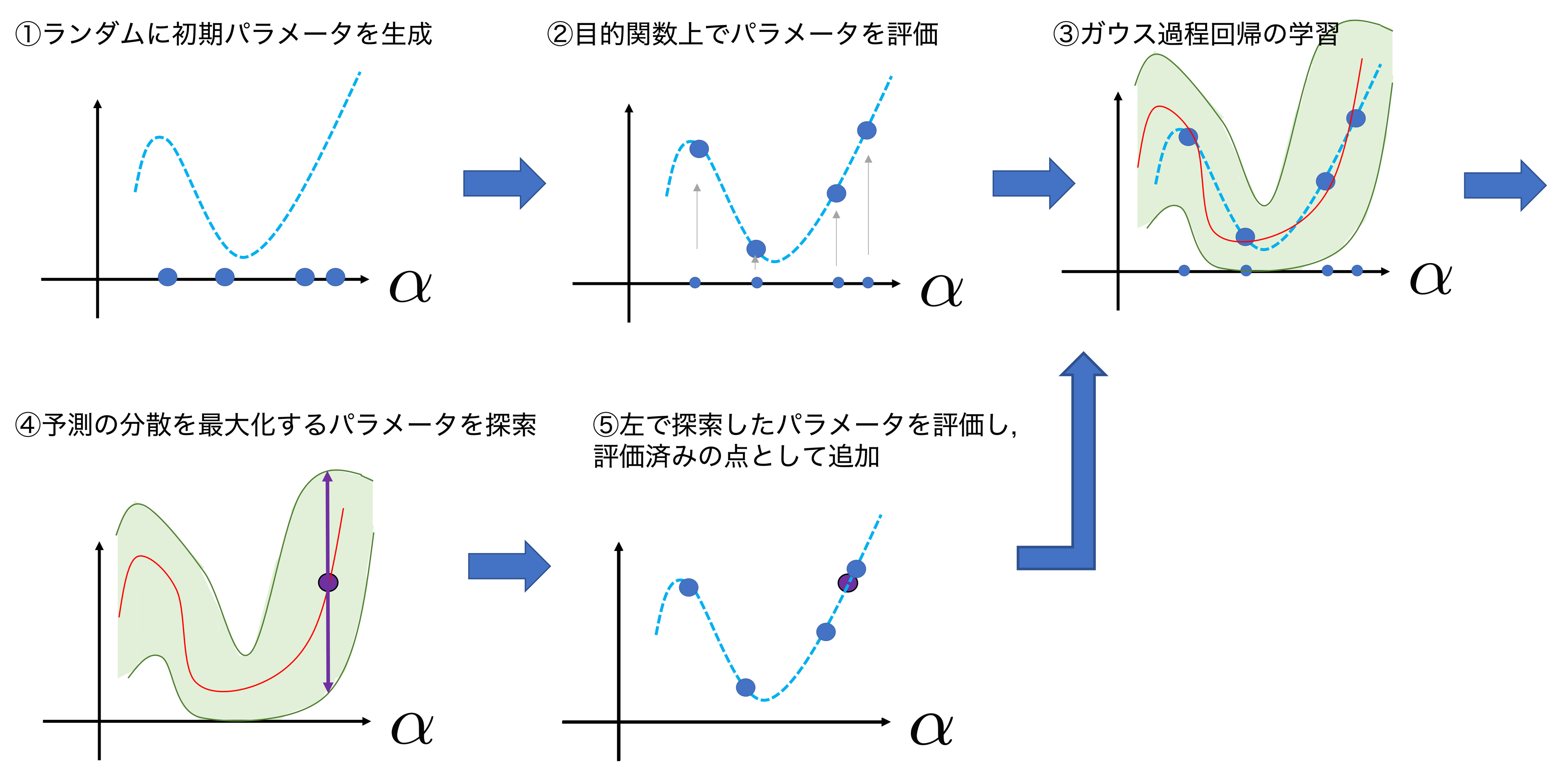
2つの操作を交互に繰り返す

探索する変数は α



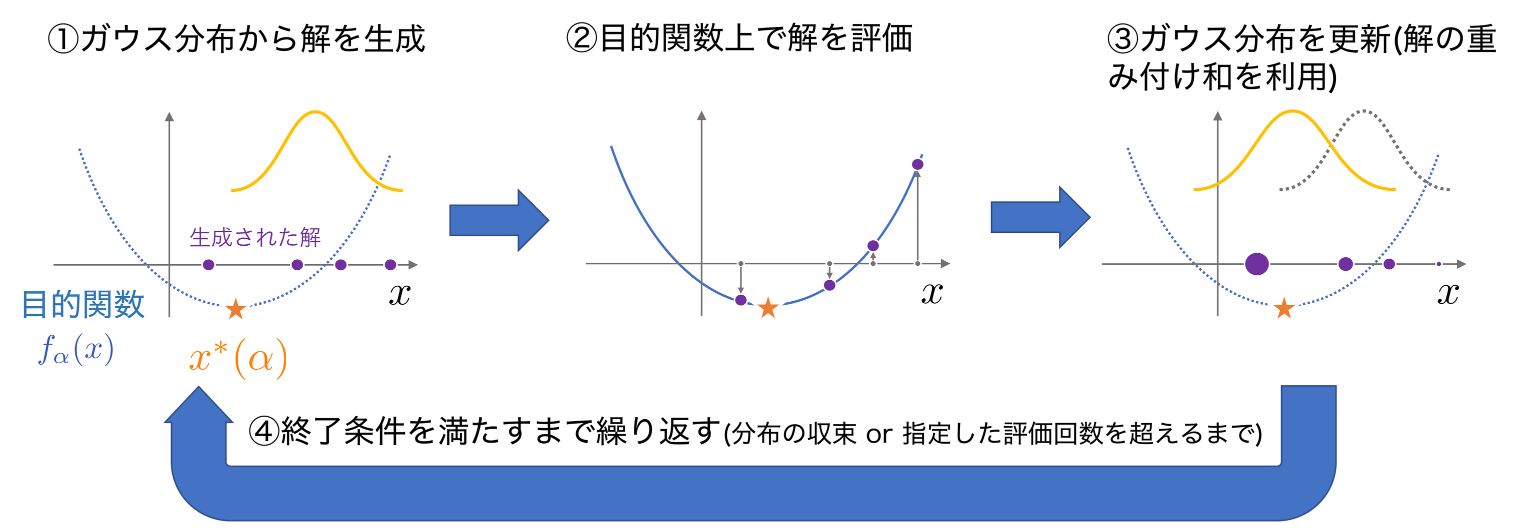
最適化する変数は x

ベイズ最適化を用いたパラメータ α の探索



CMA-ESによる目的関数最適化

Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy (CMA-ES) [N. Hansen and A. Ostermeier, 1996]



- 目的関数：探索した α に対応

$$x^*(\alpha) = \arg\min_{x \in \mathcal{X}} f_\alpha(x)$$

- ガウス分布：平均ベクトル, 標準偏差, 共分散行列により決定

評価実験

ベンチマーク関数

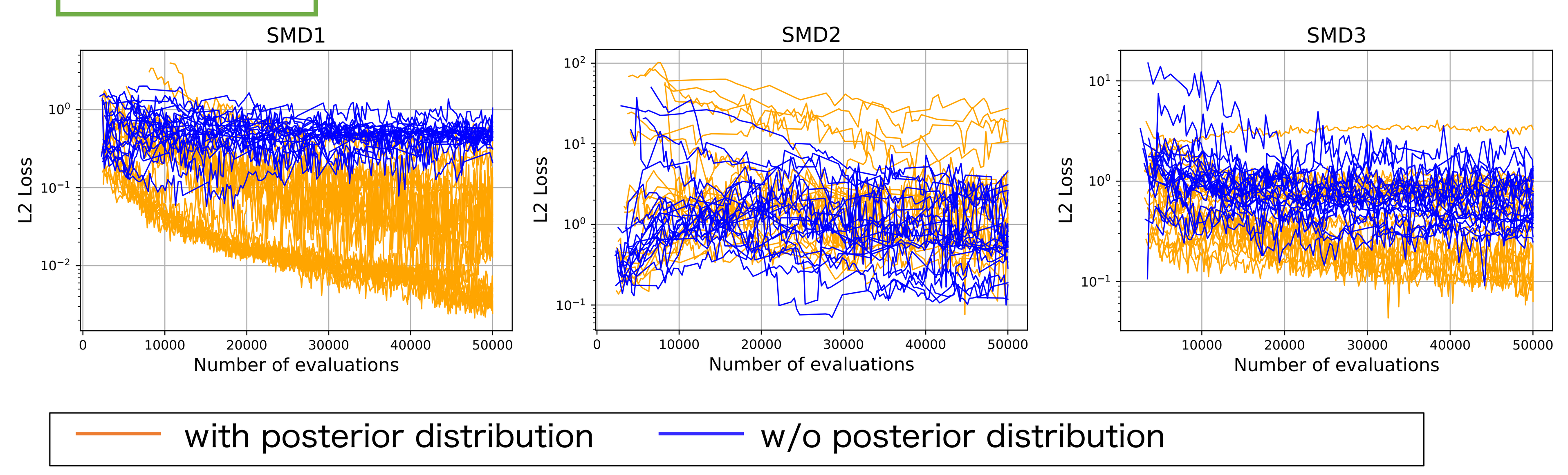
- SMD1
  Tanを用いて作成した関数
- SMD2
  指数関数と対数を用いて作成した関数
- SMD3
  $\tan^2$ を用いて作成した関数

- ベンチマーク関数で評価
- 平均二乗誤差の値で比較
- 次元数：2, サンプル数：8
- noneとmean, sigma, cov全部入りの2つの設定について比較
- 各実験に対して20試行ずつ実行

CMA-ESの初期値

- 初期値の与え方について, none, mean, sigma, covの4つのモードを用意
- none
  - 平均ベクトル：探索範囲でランダムに選択
  - 標準偏差：σ を1に設定
  - 共分散行列：Cを単位行列に設定
- mean：平均ベクトルの初期値をガウス過程回帰におけるパラメータの予測の期待値に設定
- sigma：標準偏差の初期値を予測の分散の大きさに設定
- cov：共分散行列の初期値を予測の分散の形状に設定

実験結果



- SMD1では, 全部入りの場合に最適化が進んでいると言える
- SMD2では, グラフが横ばいになっており最適化がうまく進んでいない
- SMD3では, 最適化が進んでいる場合もあるが横ばいになっている場合もあり, 最適化ができているかどうか分からない
- L2 Loss の値が10^0以下で良いなら実用に足るが, 10^{-4}~10^{-5}以下の精度が必要の場合は改良が必要

まとめと今後の課題

- ブラックボックス最適化問題の各パラメータに対応した最適解を返す手法を検討

[課題] 10^{-4}~10^{-5}以下の精度の実現

参考文献