4I3-J-2-01

The 33rd Annual Conference of the Japanese Society for Artificial Intelligence, 2019

評価点勾配に基づく獲得関数のハイパーパラメータの適応的選択

On the adaptive selection of the hyperparameter of aquisition function based on the sample point gradient.

長谷部達也 *1　片岡一朗 *1
Hasebe Tatsuya　Kataoka Ichiro

*1株式会社 日立製作所
Hitachi, Ltd.

In order to easily determine the optimal parameter for acquisition function of bayesian optimization, the adaptive selection criterion for GP-UCB acquisition function parameter based on the sample point gradient is proposed. As a result, an equivalent or superior performance of the proposed method is confirmed by comparing the cummulative regret. Moreover, the round number dependence of the adaptively determined prameter β_t is consistent with the trend of $\beta_{t\mathrm{GP-UCB}}$ which is theoretically derived.

1. 緒言

現在, 多くの場面で, 評価コストの高い関数の最適化が求められている.

例えば, 機械や材料製品の試作実験には多くの時間と費用がかかる. ここでの実験は, 機械や材料の設計値を入力とし性能を返す関数と捉えることができ, 製品の性能向上には, この関数を少ない評価回数で最適化することが求められる.

評価コストの高いブラックボックス関数を最適化する方法として, ガウス過程 [1] を用いたベイズ最適化がある. ベイズ最適化では, ガウス過程回帰により最適化したい未知の関数 f をモデル化した上で, ガウス過程回帰の結果を用いて獲得関数を算出し, 獲得関数が最大となる点を次の評価点とする. 獲得関数としては, 様々な関数が提案されており, 最適値の改善度合いの期待値を表す EI[2] や, 確率的バンディットの枠組みで精度保証がなされている, UCB[3] や MI[4] がある.

ベイズ最適化において問題になるのは, 探索と活用のトレードオフである. 先に挙げた獲得関数はこのバランスを取ることで, データ点を追加した際の報酬を最大化 (Regret を最小化) することを試みている. 一方, 先記の獲得関数には, 探索と活用のトレードオフを調整するハイパーパラメータが存在し, 実用上, このパラメータを適切な値に設定した上で獲得関数を計算する必要がある. しかし, このハイパーパラメータの設定について, 明確な基準は存在しない.

そこで, 本研究では, 獲得関数のハイパーパラメータを調整するための指標を定義することで, 各最適化イテレーションで適応的に適切なハイパーパラメータを設定し, このパラメータのチューニングを容易化することを目的とする.

2. 問題設定

本研究では [3] をベースに問題設定と検証を行う. 未知関数 $f : D \to \mathbb{R}$ を, ラウンド t において, 点 $x_t \in D \subset \mathbb{R}^n$ を選び, その関数の値 $y_t = f(x_t) + \epsilon_t$ を観測することで最適化することを考える. ここで,ϵ_t は観測ノイズとする.

最適化の目的は, 早く最適点 $x^* = \mathrm{argmax}_{x\in D} f(x)$ を見つけることである. 確率的バンディットでは, 下記に定義する Cumulative Regret を評価指標とすることが多い. ラウンド t において選んだデータ点 $x_t \in D$ に対し, Regret を $r_t = f(x^*) - f(x_t)$ と定義する. ラウンド T での Cumulative Regret を Regret の和として定義する:$R_T = \sum_{t=1}^{T} r_t$.

本研究では, f の事前分布としてガウス過程 [1] を仮定する:$f \sim GP(0, k(x, x'))$.

具体的には, 未知関数の $\{x_1, x_2, \ldots, x_T\}$ での観測 $\{y_1, \ldots, y_T | y_t = f(x_t) + \epsilon_t, \epsilon_t \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)\}$ に対し, 事後分布の平均 $\mu_T(x)$, 分散 $\sigma_T^2(x)$ は以下のようになる:

$$\mu_T(x) = k_T(x)^T (K_T + \sigma^2 I_n)^{-1} y_T, \tag{1}$$

$$\sigma_T^2(x) = k(x, x) - k_T(x)^T (K_T + \sigma^2 I_n)^{-1} k_T(x), \tag{2}$$

$$k_T(x) = (k(x_1, x) \ \ldots \ k(x_T, x))^T, \tag{3}$$

$$K_T(x) = (k(x_i, x_j))_{i,j\in[1,T]\subset\mathbb{Z}}. \tag{4}$$

ここで, I_n は n 次元単位行列とする. GP-UCB[3] では下記の方策でラウンド t での評価点を決定する:

$$x_t = \mathrm{argmax}_{x\in D}(\mu_{t-1}(x) + \beta_t \sigma_{t-1}(x)). \tag{5}$$

ここで, β_t は探索と活用のトレードオフを決めるパラメータであり, [3], [5] では, 以下の値が推奨されている:

$$\beta_{t\mathrm{GP-UCB}} = \sqrt{2\nu \log(t^{n/2+2}\pi^2/3\delta)}. \tag{6}$$

この推奨値においても, 未知定数 $\nu \in \mathbb{R}, \delta \in (0, 1]$ が残っており, 問題に応じて, これら係数を適切に決定する必要がある.

3. 提案手法

本研究では, この β_t をラウンド t において適応的に選択することで, Cumulative RegretR_T を小さくすることを試みる. このため, まずラウンド t での評価点 x_t の β_t に対する勾配 (評価点勾配)$v_t(x_t, \beta)$ を以下のように定義する:

$$v_t(\beta) := \left\| \left. \frac{\partial x_t}{\partial \beta_t} \right|_{\beta_t=\beta} \right\| \tag{7}$$

$$= \left\| \left. \frac{\partial \mathrm{argmax}_{x\in D}(\mu_{t-1}(x) + \beta_t^{1/2}\sigma_{t-1}(x))}{\partial \beta_t} \right|_{\beta_t=\beta} \right\|. \tag{8}$$

連絡先: 長谷部達也, 株式会社 日立製作所, 茨城県ひたちなか市堀口 832-2, Tel:070-4209-3721, tatsuya.hasebe.ko@hitachi.com

この評価点勾配を評価指標として，以下の方策で β_t を決定する．つまり，β_t の変化に対して最も x_t の移動距離が大きいときの値を β_t として採用する:

$$\beta_t = \mathrm{argmax}_{\beta} v_t(\beta). \tag{9}$$

上記の方策による β_t の選択について，図 1 に概略図を示す．図 1 は x が小さい図の左側に評価点が多く，x が大きい側では評価点が少ない状況を示している．この状況下での，$\beta_t = 2, 3, 4$ での UCB によって導かれた次の評価点が星で示されている．

図より，$\beta_t = 2$ の場合の最適点 (図 1 左星) は，近傍に観測点が多く活用的であると同時に，獲得関数の形の変化も小さく，v_t の値は小さい値をとっていることがわかる．一方，$\beta_t = 3, 4$ の最適点 (図 1 右側星) は，近傍に観測点が少なく，探索的かつ変化が大きい箇所であるため，v_t 値が大きくなっていることがわかる．したがって，この場合，v_t 値を最大化するよう β_t を選択することで，図右側の最適点が選択されるため，過度な活用を防ぐことができる．このように，v_t 値を最大化するよう β_t を選択することで，過度な活用が防止でき，探索と活用のバランスを取ることが可能となる．

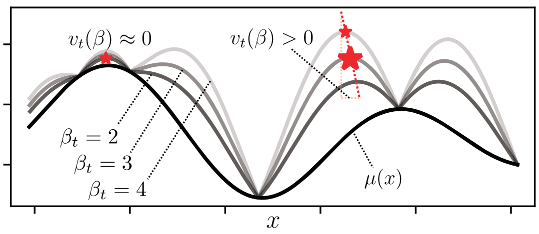


図 1: v_t による β_t の選択．$\beta_t = 2, 3, 4$ に対する UCB(灰色実線)，最適点 (星) と，v_t に基づく最適点 (大星) を示す．赤補助線は，β_t の変化に対する最適点の移動を表す．

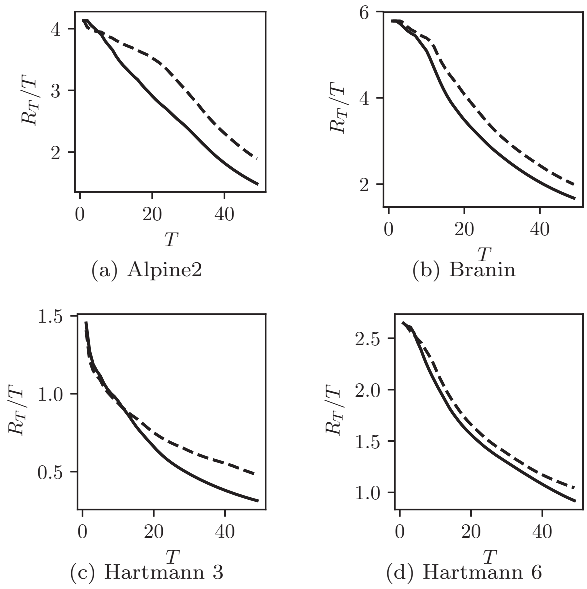
4. 検証方法

検証のため，GP-UCB と提案手法を比較した．GP-UCB の実行には (6) において，$\nu = 0.5, \delta = 0.05$ と設定し，β が約 2 − 4 の範囲で値を取るようにした．提案手法では，各ラウンド t において，$\beta_t \in B := \{2, 2.5, 3, 3.5, 4, 5, 6\}$ として，$v_t(\beta)$ を $\beta \in B$ それぞれに対し差分法により近似計算し,(9) により，最適な β_t を求めた．検証のためのテスト問題として，Alpine2[6], Branin[6], Hartmann3[6], Hartmann6[6] の 4 つを用意し，$T = 50$ までの Cummulative Regret を比較することで性能評価を行った．ここで，Cummulative Regret は 10 回の試行の平均値をとった．ガウス過程のカーネルとして，SE(Squared Exponential) カーネルに定数をかけたものを採用し，SE カーネルのスケールと SE に対する乗数を最尤推定により決定した．初期のサンプル点として，一様乱数により，5 点 $x \in D$ を観測した状態で最適化を開始した．

5. 結果と考察

各最適化問題に対する R_T/T をプロットしたものを図 2 に示す．これより，検証した全ての最適化問題において，提案手法は，GP-UCB よりも Cummulative Regret が同等あるいは小さくなっている．したがって，本手法により適切にパラメータ β_t が選択され，同等かより少ない試行数で最適値を見つけられることが確かめられた．

また，図 3 に本手法による β_t の T 依存性を示している．これを見ると，提案手法の β_t は GP-UCB に似た上昇傾向を示している．したがって，本手法による β_t は，理論的に導かれた式 6 の $\beta_{tGP-UCB}$ と共通した傾向を有することがわかった．



(a) Alpine2 (b) Branin (c) Hartmann 3 (d) Hartmann 6

図 2: 提案手法 (実線) と GP-UCB(点線) の R_T/T の比較

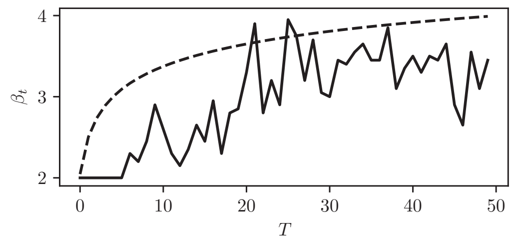


図 3: Branin での提案手法 (実線) と GP-UCB(点線) の β_t

6. 結言

評価コストが高い関数の最適化において，ベイズ最適化の獲得関数のパラメータを適切かつ容易に選択するため，評価点勾配を用いた GP-UCB のハイパーパラメータ β_t の適応的な選択手法を提案した．この結果，提案手法の有効性および，GP-UCB の理論との傾向の一致を確認した．

参考文献

[1] Rasmussen, C. E.: Gaussian processes for machine learning., 2006.

[2] Jones, D. R., et. al.: "Efficient global optimization of expensive black-box functions.", Journal of Global Optimization(13.4), 1998.

[3] Srinivas, N. , et. al.: "Gaussian process optimization in the bandit setting: no regretand experimental design.", ICML, 2010.

[4] Contal, E., et. al.: "Gaussian process optimization with mutual information.", ICML, 2014.

[5] Brochu, E., et. al.: A tutorial on bayesian optimization of expensive cost functions. arXiv:1012.2599,2010.

[6] Jamil, Momin, and Xin-She Yang.: "A literature survey of benchmark functions for global optimization problems.", arXiv:1308.4008, 2013.