

ベイズ最適化

岡山大学 異分野基礎科学研究所

大槻純也



複雑な最適化問題

問題設定：

複数の条件から決まる量があって、
その量を最大にする条件を見つけない

例：

化合物の組成
合成条件 (圧力、温度)

例：

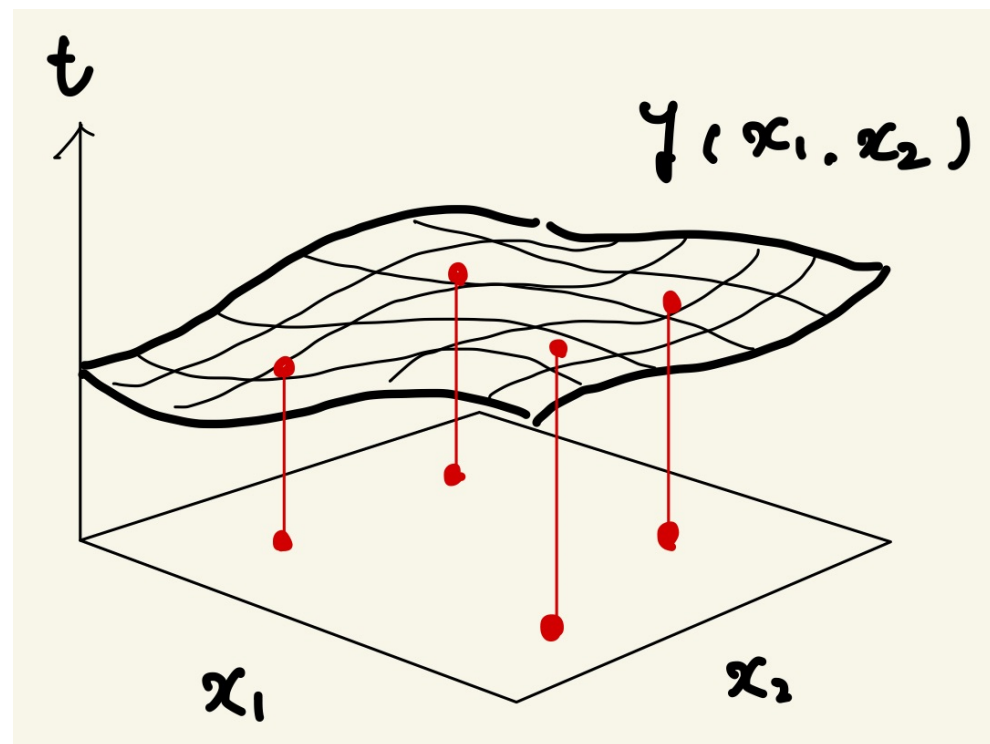
化合物の機能物性
(保磁力、熱起電力、
超伝導転移温度)

ただし、なるべく少ない回数の実験で
最適解にたどり着きたい

実験に時間 or 費用がかかる等

最適化問題として表現：

D 次元空間で定義される未知の目的関数
 $t = y(x_1, \dots, x_D)$ を最大にする $(x_1, \dots, x_D)$
をできるだけ少ない測定回数で求めたい



ベイズ最適化 (Bayesian Optimization)

ベイズ推定を応用して最適化問題を解く

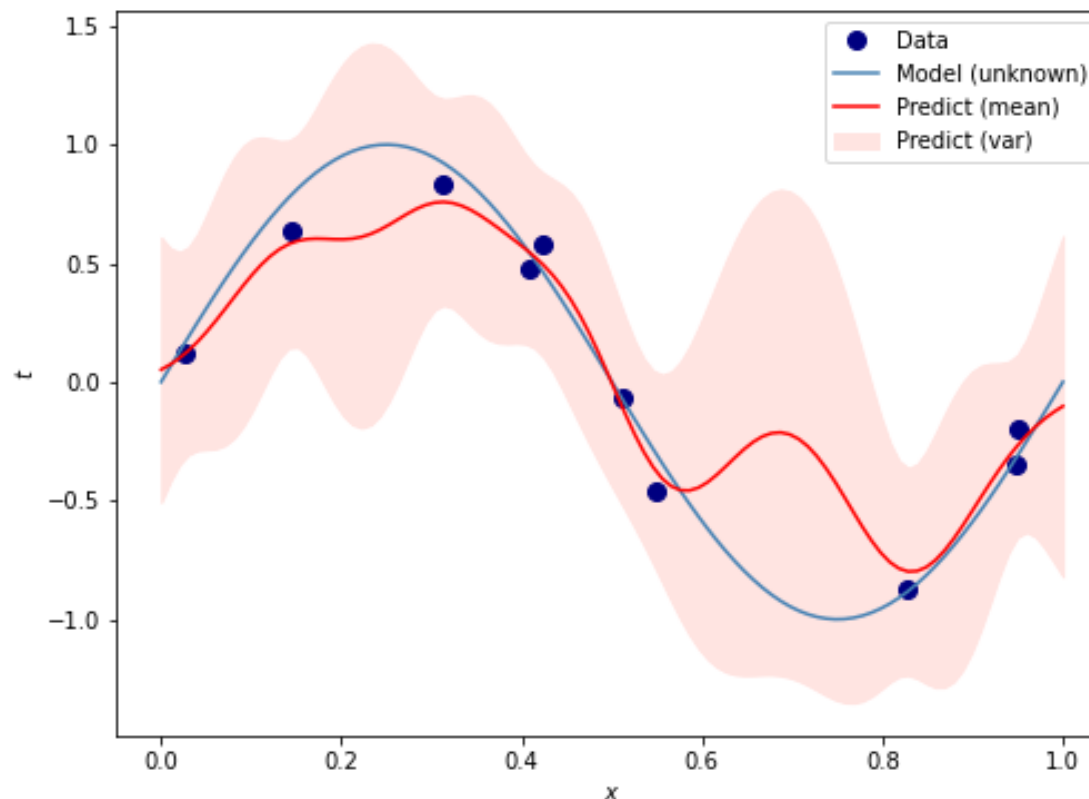
予測分布が平均値だけでなく分散付き、すなわち**不確実性 (uncertainty)** の情報と共に得られているので、それを利用して次に**測定すべき点を決定**し、効率的に最大点を探す

強化学習 (Reinforcement learning) :

累積報酬を最大化することを目的として、現在の情報から取るべき**行動を決定**する学習法。

予測分布の例 (ガウス過程)

$$p(t|\mathbf{t}_N) = \mathcal{N}(t|\mu(\mathbf{x}), \sigma^2(\mathbf{x}))$$





Taking the Human Out of the Loop: A Review of Bayesian Optimization

The paper introduces the reader to Bayesian optimization, highlighting its methodical aspects and showcasing its applications.

By BOBAK SHAHRIARI, KEVIN SWERSKY, ZIYU WANG, RYAN P. ADAMS, AND NANDO DE FREITAS

B. Shahriari, K. Swersky, Z. Wang, R. P. Adams, N. de Freitas,
Proceedings of the IEEE, **104**, 148–175. (2016)
<https://doi.org/10.1109/JPROC.2015.2494218>

「ガウス過程と機械学習」
持橋大地、大羽成征著
(講談社 MLPシリーズ)
の6.2節にも解説あり

Bishop PRML
はベイズ最適化の扱いなし

最適化の流れ

Acquisition function (獲得関数)

$\alpha(\mathbf{x})$

$\mathbf{x}$ が答えになる可能性を数値化

次の測定点

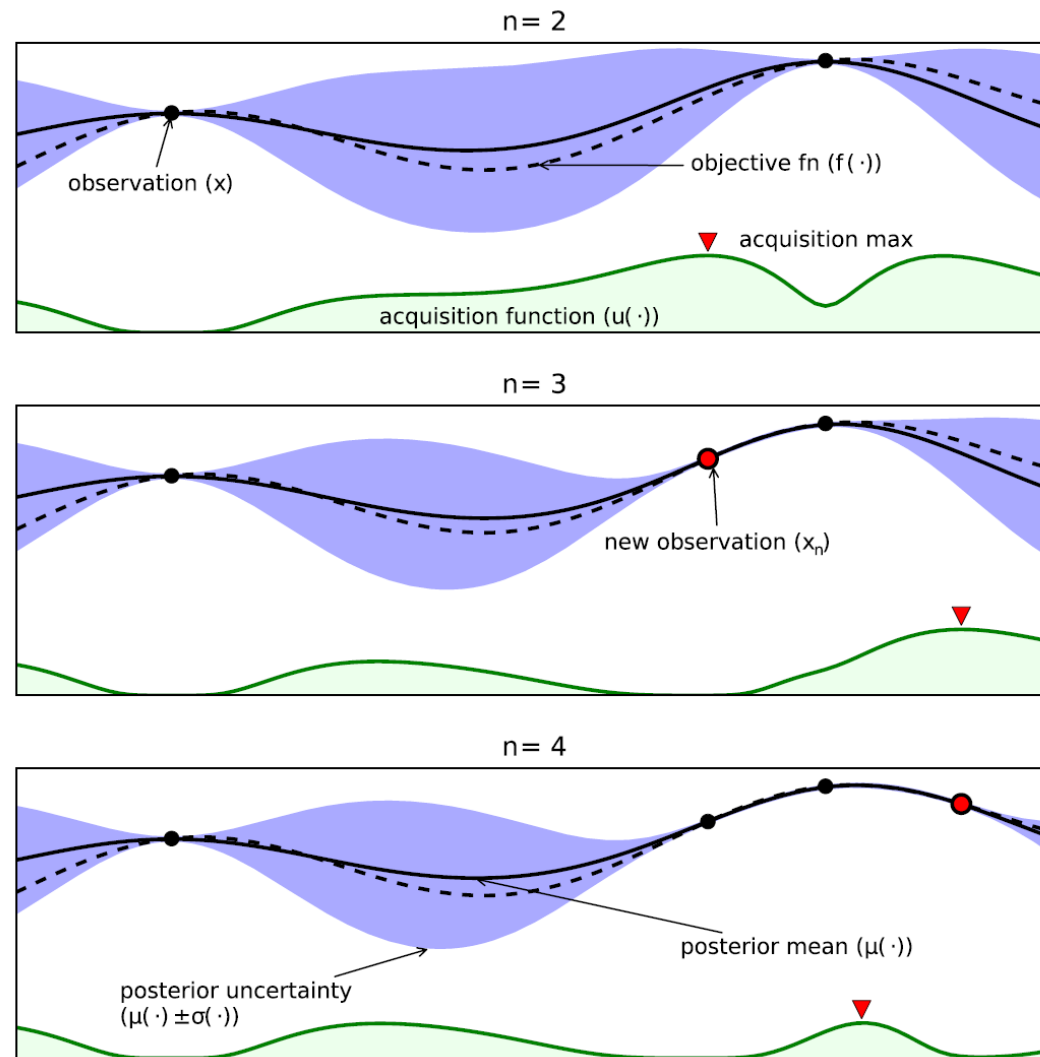
$$\mathbf{x}_{N+1} = \arg \max_{\mathbf{x}} \alpha(\mathbf{x})$$

$\mu(\mathbf{x})$ posterior mean

$\sigma(\mathbf{x})$ posterior uncertainty (standard deviation)

を使って定義する

これらはガウス過程やベイズ線形回帰で得られている



Shahriari et al.

Acquisition function の設計方針 (Policy)

標語：

Exploration-Exploitation tradeoff

探索

活用

新しい鉱山を探す
もっといい鉱山があ
るかもしれない

現在の鉱山で採鉱し続ける
確実に収集できる。でもいずれ
枯れるかもしれない

ベイズ最適化の文脈だと

広く探す

精度を上げる

測定していない領
域に別の極大があ
るかもしれない

測定精度や変数の刻みを上げて
最適解をfine tuningする

アルゴリズム一覧

A) Improvement-Based Policies

- Probability of Improvement (PI)
- Expected Improvement (EI)

B) Optimistic Policies

- Upper Confidence Bound (UCB)

C) Information-Based Policies

- Thompson Sampling (TS)
- Entropy Search (ES)
- Predictive Entropy Search (PES)

Probability of Improvement (PI)

改善確率

$$\alpha_{\text{PI}}(\mathbf{x}) = \mathbb{P}[t > t_{\max}]$$

$$t_{\max} \equiv \max(t_1, \dots, t_N)$$

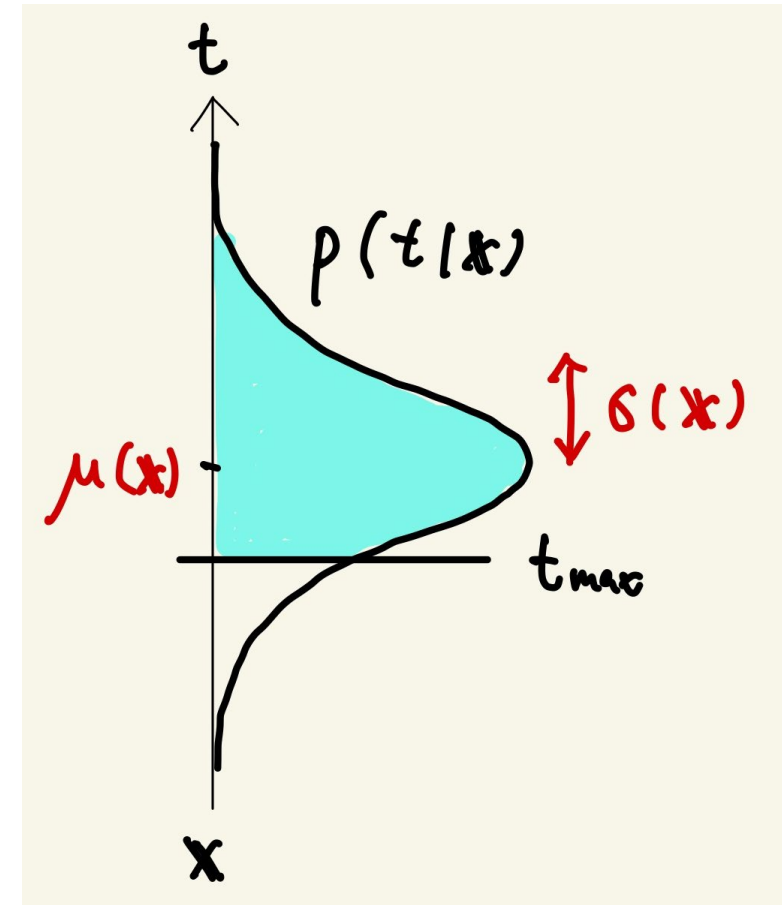
$t_{\max}$ を超える値が観測される確率

積分を評価すると

$$\alpha_{\text{PI}}(\mathbf{x}) = F(\tau) \quad \tau = \frac{\mu(\mathbf{x}) - t_{\max}}{\sigma(\mathbf{x})}$$

standard normal cumulative distribution function
標準正規分布の累積分布関数

$$F(x) = \int_{-\infty}^x \mathcal{N}(x'|0, 1) dx'$$



Expected Improvement (EI)

期待改善度

$$\alpha_{\text{EI}}(\mathbf{x}) = \mathbb{E}[(t - t_{\max})\mathbb{I}(t > t_{\max})]$$

$t_{\max}$ の改善量の期待値

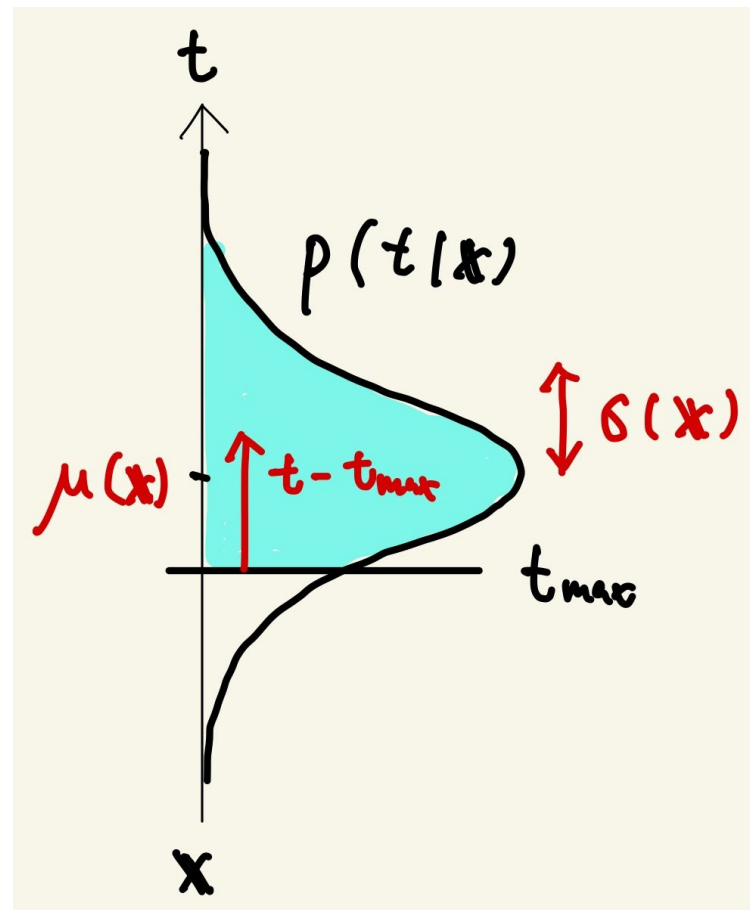
条件が満たされた場合に1,
満たされない場合は0

積分を評価すると

$$\alpha_{\text{EI}}(\mathbf{x}) = \sigma[\tau F(\tau) + f(\tau)] \quad \tau = \frac{\mu(\mathbf{x}) - t_{\max}}{\sigma(\mathbf{x})}$$

standard normal distribution function
標準正規分布

$$f(x) = \mathcal{N}(x|0, 1)$$



Upper Confidence Bound (UCB)

上側信頼限界

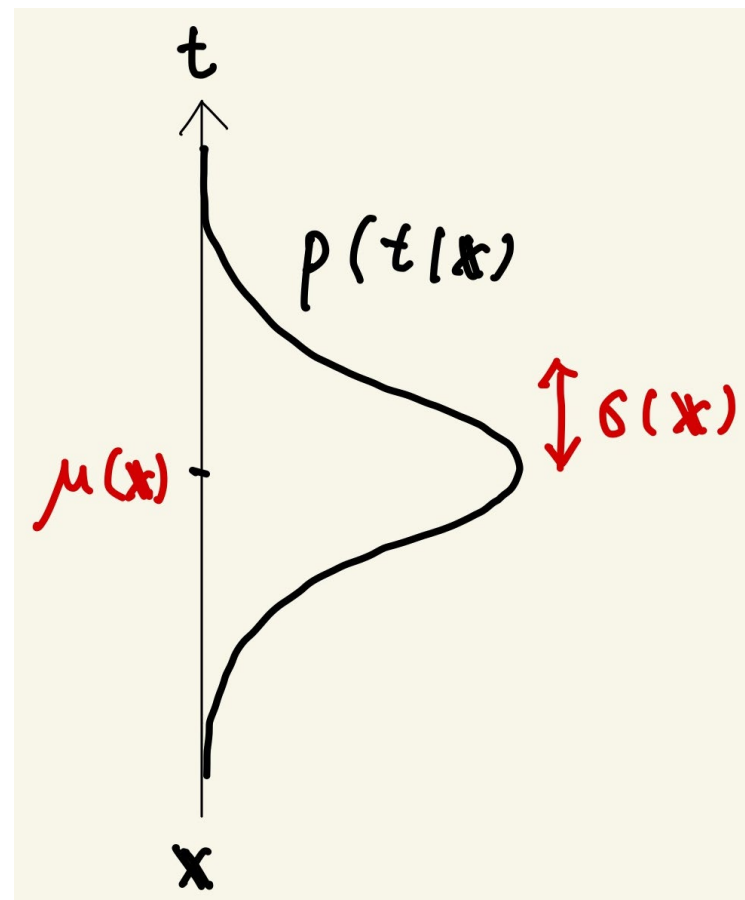
$$\alpha_{\text{UCB}}(\mathbf{x}) = \mu(\mathbf{x}) + \beta_N \sigma(\mathbf{x})$$

1のオーダーの係数

β_N をどう選ぶかが実際のパフォーマンスに大きく影響する
一般に N が大きいほど β_N は小さく取る

$$\beta_N = \sqrt{\frac{\ln N}{N}}$$

「ガウス過程と機械学習」



Thompson Sampling (TS) トンプソンサンプリング

線形回帰の場合

線形モデル

$$y(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \mathbf{w}^T \phi(\mathbf{x})$$

のパラメータ $\mathbf{w}$ に関する事後確率分布

$$p(\mathbf{w}|\mathbf{t})$$

に従って $\mathbf{w}$ のサンプル $\mathbf{w}^*$ を生成し、
それにより定義される曲線を使う

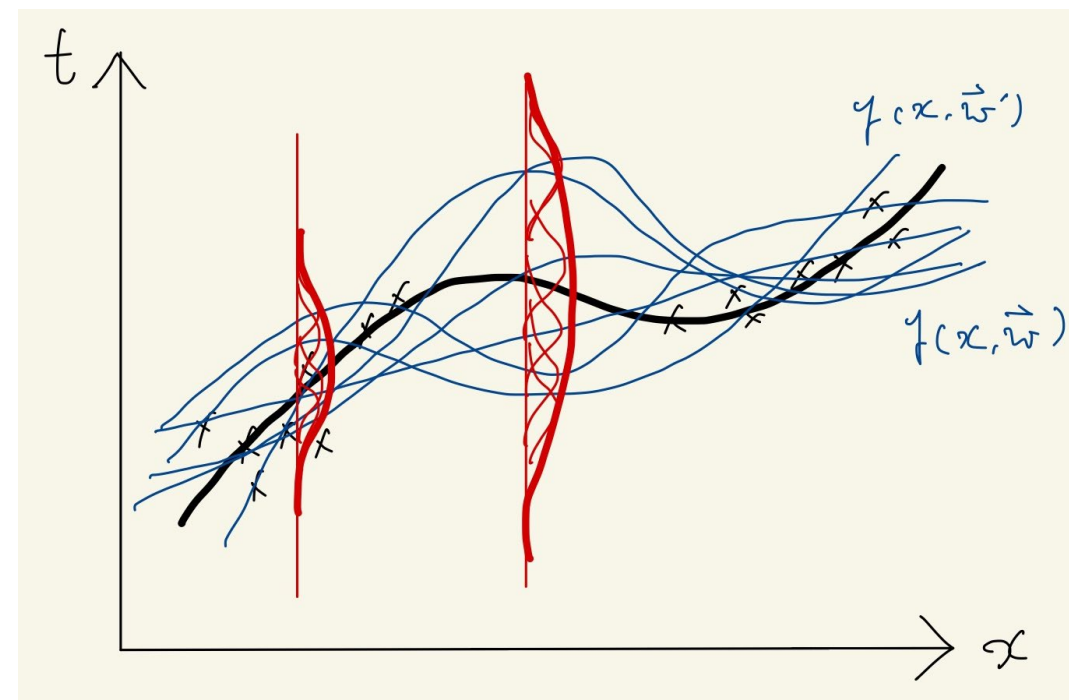
$$\alpha_{\text{PI}}(\mathbf{x}) = y(\mathbf{x}, \mathbf{w}^*)$$

ガウス過程の場合

線形モデルを近似的に作り $p(\mathbf{w}|\mathbf{t})$ を見積もる

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \simeq \phi(\mathbf{x})^T \phi(\mathbf{x}')$$

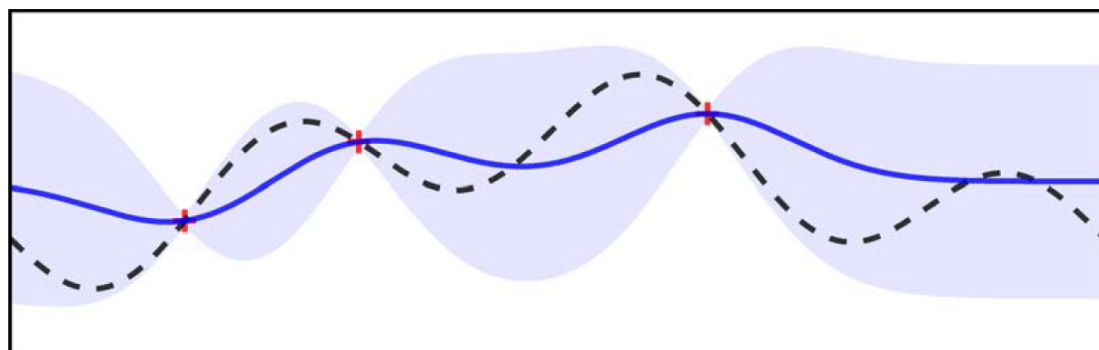
本来、基底関数 $\phi_j(x)$ とパラメータ $\mathbf{w}$ が必要がないのが
ガウス過程の利点だが、計算の都合で基底関数を導入する



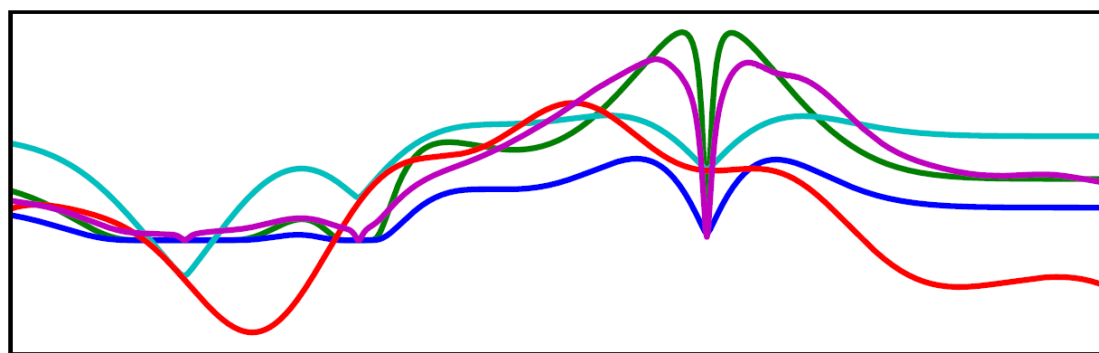
青線：異なる $\mathbf{w}$ に対する曲線 $y(\mathbf{x}, \mathbf{w})$

いずれかの線がランダムに選ばれる

Acquisition functions の比較



点線：実際の目的関数
青線：予測分布の平均



— PI
— EI
— UCB
— TS
— PES

Shahriari et al.

PI, EI :
現在の最大の近くを選ぶ傾向

UCB :
より広い範囲を選ぶ傾向

TS :
積極的に広く探索する傾向