# ベイズ最適化をいつ停めるか？


日野 英逸　モデリング研究系 教授


## 1 TL;DR

ベイズ最適化はブラックボックス関数の最小化に有用だけど，適切なところで停めないと無駄が多い/良い解が得られない．できるだけ理論的・客観的に，ハイパーパラメタを排除した停止基準が欲しい．単純リグレットと類似した量を最適化の各ステップで計算し，その差分の上界を導出して停止基準とした．閾値を動的に定める方法も提案した．

## 2 ベイズ最適化

未知かつ評価にコストの掛かる関数 $g : \Theta \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ を最小にするパラメタ値 $\theta^* = \mathrm{argmin}_{\theta \in \Theta}\, g(\theta)$ を求める問題を考える．$g(theta)$ の代わりに代理関数 $f(\theta)$ をデータから定めて，代理関数の更新（改善）と代理関数の最小値を与えるパラメタの探索を繰り返す．代理関数としてはガウス過程回帰モデルを用いることが多い．

## 3 最適な停止タイミング

探索されたパラメタの良さを単純リグレット

$$r(\theta_t) = g(\theta_t) - g(\theta^*) = g(\theta_t) - g^* \tag{1}$$

で測るとして，これが閾値 $s_t$ 以下になったら停止する，というのが合理的．しかし，単純リグレットは計算できないし，閾値も適切に決めなければならない．

## 4 期待最小シンプルリグレット

以下の量（Expected minimum simple regret: EMSR）を考える:

$$R_t = \mathbb{E}_{p(f|\boldsymbol{y}_t)}[\min_{\theta \in \Theta}\{f(\theta)\}] - g^*. \tag{2}$$

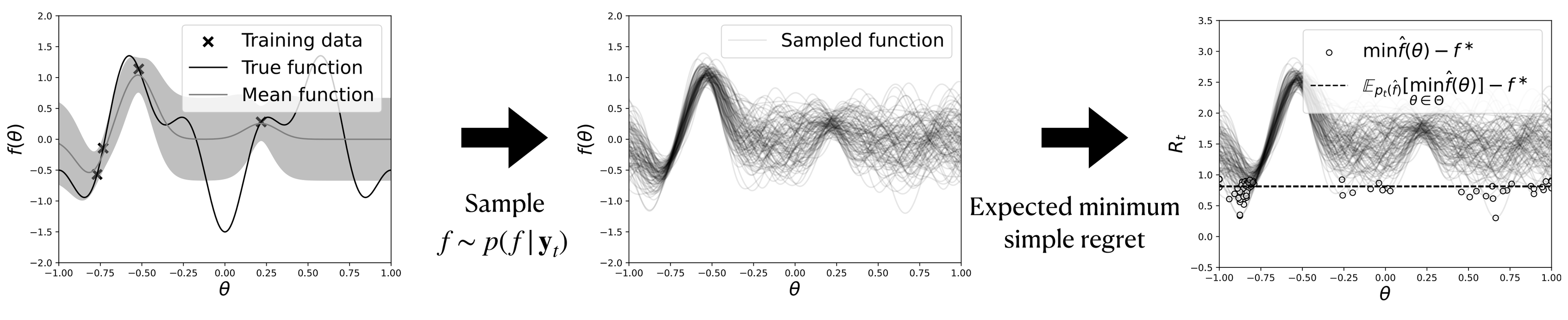


図 1: EMSRの概念図

EMSRは，代理モデルの事後分布からサンプルした関数の最小値の期待値から真の最小値を引いたもの．ベイズ最適化のステップ $t_1$ と $t$ におけるEMSRのギャップの絶対値を考える．

$$\Delta R_t = |R_t - R_{t-1}| \tag{3}$$

## 5 リグレットギャップの上界と収束性

**Theorem 1.** 学習データ $S_t = \{(\Theta_t, \boldsymbol{y}_t)\}$ が得られているときの代理モデル $f$ の事後分布を $p_t(f) = p(f|\boldsymbol{y}_t)$，$\mu_t$ と $\sigma_t$ を $p_t(f)$ の平均関数，共分散関数とする．$\delta \in (0, 1)$ を選び，$\kappa_{t-1} = \min_{\theta \in \Theta_{t-1}} \mathrm{UCB}_\delta(\theta) - \min_{\theta \in \Theta} \mathrm{LCB}_\delta(\theta)$ とすると，少なくとも確率 $1-\delta$ で次の不等式が成り立つ:

$$\begin{aligned}\Delta R_t \leq & v(\phi(g) + g\Phi(g)) \\ & + |\Delta\mu_t^*| + \kappa_{t-1}\sqrt{\frac{1}{2} D_{\mathrm{KL}}[p_t(f)||p_{t-1}(f)]} \\ = & \Delta\tilde{R}_t \end{aligned} \tag{4}$$

ここで $\Delta\mu_t^* = \mu_{t-1}(\theta_{t-1}^*) - \mu_t(\theta_t^*)$,

$$v = \sqrt{\sigma_t^2(\theta_t^*) - 2\sigma_t^2(\theta_t^*, \theta_{t-1}^*) + \sigma_t^2(\theta_{t-1}^*)},$$

$g = (\mu_t(\theta_t^*) - \mu_{t-1}(\theta_{t-1}^*))/v$ である．

←$\Delta R_t$ の上界は，観測データから計算できる．また，式 (4) は一定の条件下で 0 に収束することも示せる．そこで，ある閾値 $s_t > 0$ を用いて $\Delta R_t \leq s_t$ のときにベイズ最適化を停止することを提案する．

## 6 閾値の決め方

閾値の決め方として２つ提案する．

**Adaptive** パラメタ探索の進行状況に応じて動的かつ自動的に閾値を定めることができることが望ましい．そこで，EMSRの上界 $\Delta\tilde{R}_t$ の更に上界を計算してみると，収束が早い項と遅い項に分解できる．収束が遅い項は，観測ノイズ由来の量になっている．これを閾値 $s_t$ として採用して，$\Delta\tilde{R}_t$ が閾値以下，つまり観測ノイズ程度になったら停止する．

**Heuristic** 問題によっては，停止タイミングをコントロールをしたいこともある．できるだけタスクによらず直観的に扱えるヒューリスティックスとして，$\Delta\tilde{R}_t$ の値が初期の $T_{ini}$ 回の探索における $\Delta\tilde{R}_t$ の中央値の $\eta$% になったら停止するようにする．

## 7 実験結果

既存のBO停止手法と提案手法を，6つのテスト関数の最小化問題に適用する．

- Ours-auto：提案法（適応的閾値）
- Ours-med：提案法（発見的閾値, $\eta = 0.01$）
- PI：probability of improvement （閾値 0.1）
- EI-med：expected improvement （閾値 $\eta = 0.01$）
- SR-med：単純リグレットの上界に基づく既存手法（閾値 $\eta = 0.01$）

結果

- 提案法は，PI，EIベースの方法と比べて遅めに停止する
- 提案法はSRとほぼ同じタイミングで停止する．最適解の発見が難しいeasom関数に対しては，提案法はSRより早期に停止する

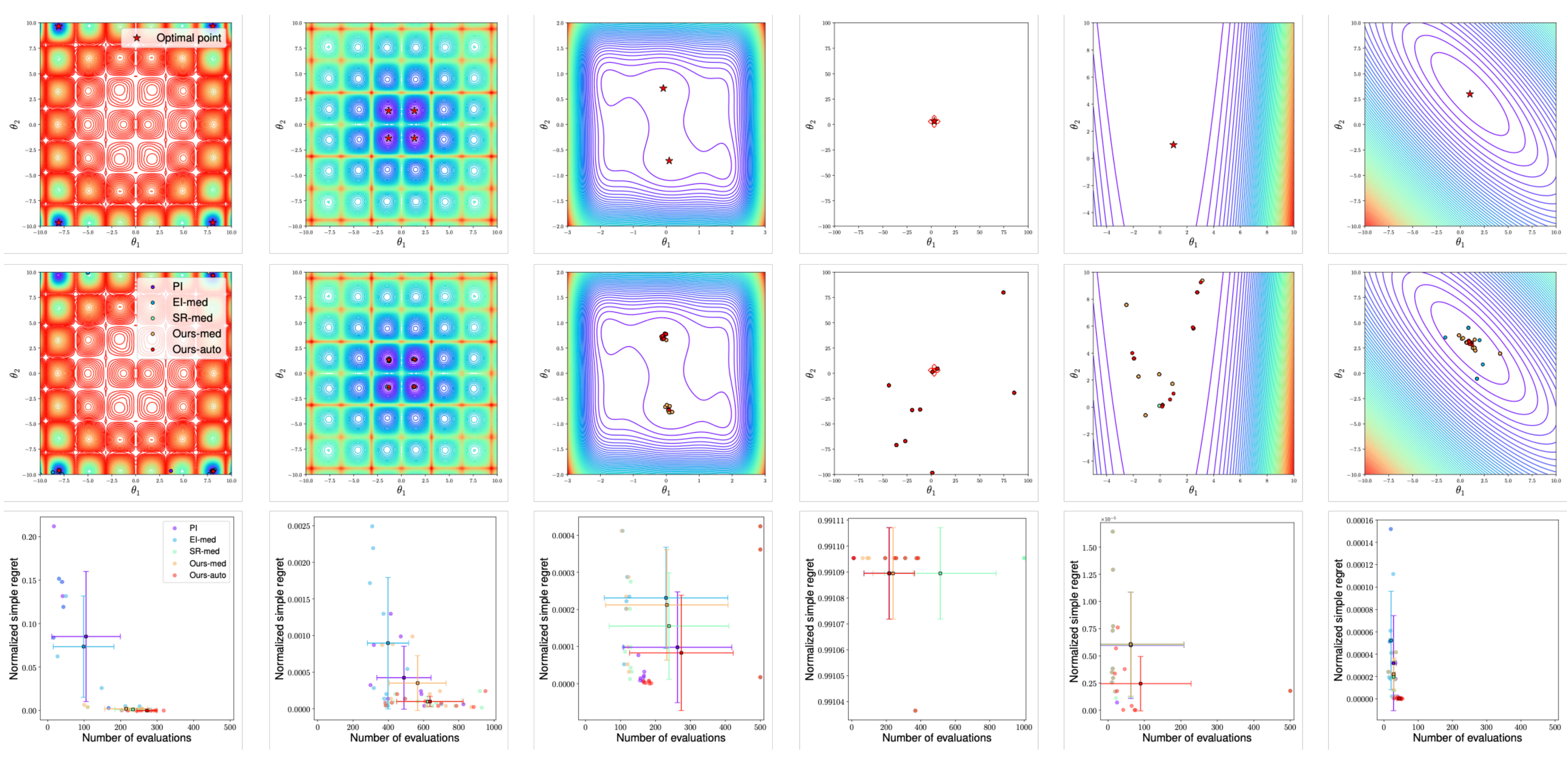

図 2: テスト関数名：順に (a) holder table (b) cross in tray (c) six hump camel (d) easom (e) rosenbrock (f) booth

## 謝辞


本研究は石橋英朗氏（九工大），烏山昌幸氏（名工大），竹内一郎氏（名大/理研）との共同研究です．NEDO(JPNP18002)，CREST(JPMJCR1761)，JST未来社会創造事業(JPMJMI21G2)のサポートを頂きました．