

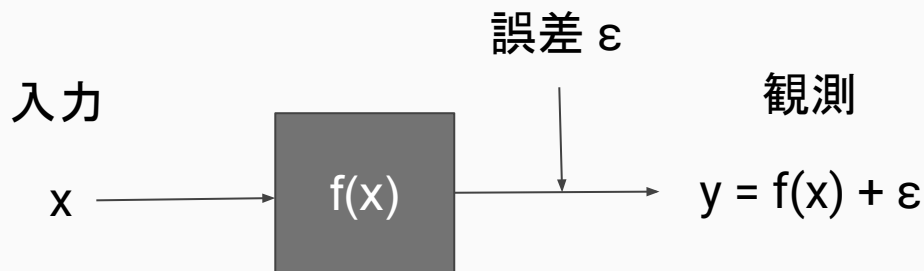
1. ベイズ最適化とはなにか？

- ベイズ最適化で解きたい問題
- ベイズ最適化の概要

ベイズ最適化で解きたい問題(1/4)

ブラックボックス関数の最適化

入力 x と観測 y の関係を数式で陽に表すことができないような関数



問題 この関数の最小値 (or 最大値) を与える入力の値 x^* を求めたい。
なお、この最小値のことを**最適解**という。

ベイズ最適化で解きたい問題(2/4)

従来の方法

- ・ラテン超立方体サンプリング (Latin Hypercube Sampling)

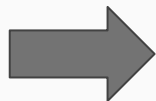
入力 D個の変数

出力 N個の実験候補の入力値

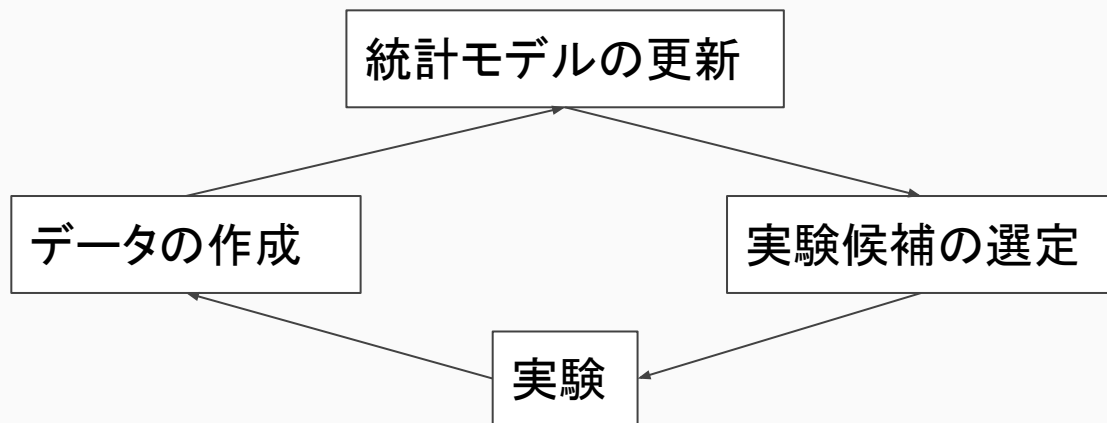
1. 各入力変数をN個の領域に分割する。
 2. 各入力変数dごとに1からNまでの整数を並べ替えて順列 $a[d]$ を作る。
 3. 2で作ったD個の順列の1番目の値 $a1, \dots, a[D](1)$ に対応する分割領域から一様分布に従って一つ値 $x[1]$ を抽出する。順列の2番目、...、N番目についても同様の操作を行い、 $x[2], \dots, x[N]$ を得る。
- 得られた $x[1], \dots, x[N]$ が実験候補の入力値

ベイズ最適化で解きたい問題(3/4)

疑問 各実験で得られる値を次の実験を行う入力値の探索に用いたほうが、固定された実験計画より効率的に最適解を探索できるのではないか？



統計的実験計画



十分に繰り返したら一番小さな観測値が得られた入力値を最適解とする。

ベイズ最適化で解きたい問題(4/4)

従来の方法

- ・応答曲面法(response surface method, RSM)

以下を繰り返す。

1. ブラックボックス関数を近似する2次曲面をデータから推定する。
2. 2次曲面の最小解がある方向に実験の中心点を取り替え、回転可能性をみたすような実験計画を立て直す。(回転可能性 = 予測誤差が実験の中心点からの距離にのみ依存)

欠点 ブラックボックス関数が複雑な場合に、局所最適解に陥りやすい。

→ ベイズ最適化(Bayesian Optimization)

ベイズ最適化の概要(1/1)

