

高次元ベイズ線形モデルにおける confidence region estimation を用いた回帰係数の同定のためのアクティブラーニング

理化学研究所 稲津 佑

名古屋工業大学, JST さきがけ, 物質材料研究機構 烏山 昌幸

東京大学 井上 圭一

名古屋工業大学 神取 秀樹

名古屋工業大学, 理化学研究所, 物質材料研究機構 竹内 一郎

1. はじめに

近年, 多くの分野でベイズ推測に基づいたベイズ最適化が行われている. 例えば, 未知関数 f の最大値をできるだけ少ない評価関数で得ること等が挙げられる. 本研究では, 未知関数は $d(\gg 0)$ 次元の 2 値説明変数ベクトルと回帰係数の線形和で表されるものとし, ベイズ最適化の枠組みの下, できるだけ少ない評価回数で回帰係数の正負を同定する問題を考える. 本報告では, ベイズ信用区間の共通集合として与えられる confidence region を用いた, 回帰係数の効率的な同定のための手法を提案する.

2. 設定

$d(\gg 0)$ 次元 2 値ベクトルの集合 $D = \{0, 1\}^d$ と $\mathbf{x}_t = (x_{t1}, \dots, x_{td})^\top \in D$ に対し, 未知関数 f は $f(\mathbf{x}_t) = \mathbf{x}_t^\top \mathbf{w}$ で与えられるものとし, 回帰係数 $\mathbf{w} = (w_1, \dots, w_d)^\top$ の各成分の符号を同定する問題を考える. 今, 各 \mathbf{x}_t に対し, $f(\mathbf{x}_t)$ は誤差 $\varepsilon_t \sim \mathcal{N}(0, \varsigma^2)$ を通して $y_t = f(\mathbf{x}_t) + \varepsilon_t$ として観測されるとする. このとき, \mathbf{w} に事前分布 $\mathcal{N}_d(\mathbf{0}, \Sigma_0)$ を想定し, ベイズ線形モデルに基づくベイズ最適化により, できるだけ少ないデータ取得回数で \mathbf{w} の各成分の符号の多くを同定することを目指す.

3. Confidence region estimation

データ $\mathbf{X}_t = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_t)^\top$ と $\mathbf{y}_t = (y_1, \dots, y_t)^\top$ が与えられたとき, \mathbf{w} の事後分布は再び多変量正規分布となり, その平均ベクトル $\hat{\mathbf{w}}_t$ と共分散行列 Σ_t は

$$\hat{\mathbf{w}}_t = (\varsigma^{-2} \mathbf{X}_t^\top \mathbf{X}_t + \Sigma_0^{-1})^{-1} \varsigma^{-2} \mathbf{X}_t^\top \mathbf{y}_t, \quad \Sigma_t = (\varsigma^{-2} \mathbf{X}_t^\top \mathbf{X}_t + \Sigma_0^{-1})^{-1}$$

で与えられる. このとき, $\hat{w}_{t,i} = \mathbf{e}_i^\top \hat{\mathbf{w}}_t$, $\hat{\sigma}_{t,i}^2 = \mathbf{e}_i^\top \Sigma_t \mathbf{e}_i$ とすると, w_i に対するベイズ信用区間 $Q_t(w_i)$ と confidence region $C_t(w_i)$ は $\beta_t^{1/2} \geq 0$ を用いて

$$Q_t(w_i) = [\hat{w}_{t,i} - \beta_t^{1/2} \hat{\sigma}_{t,i}, \hat{w}_{t,i} + \beta_t^{1/2} \hat{\sigma}_{t,i}], \quad C_t(w_i) = \bigcap_{u=1}^t Q_u(w_i)$$

で与えられる. このとき, $C_t(w_i)$ の上端と下端をそれぞれ $C_{t,i}^+$, $C_{t,i}^-$ とし, 精度パラメータ $\epsilon > 0$ に対して, $C_{t,i}^- > -\epsilon$ ならば w_i を正, $C_{t,i}^+ < \epsilon$ ならば w_i を負と同定する.

4. 提案手法

本報告では, 次に取得する点 \mathbf{x}_{t+1} に制限を設けることで, 効率的に w_i の符号を同定する方法を提案する. また, 精度に関する妥当性を保証するための理論結果を与え, 最後に, 数値実験を通して提案法の振る舞いについて述べる.