1S-04

極少サンプル下におけるベイズ最適化の実用的手法と植物工場の収穫量最大化問題への適用

伊藤有気 †　　長尾智晴 ‡
† 横浜国立大学大学院 環境情報学府　‡ 横浜国立大学大学院 環境情報研究院

1　はじめに

少ない探索回数からでも効率的に最適解を発見できるとして，ベイズ最適化という手法が注目を集めている．しかし，既知の探索点が極端に少ない場合には，探索点が不確実性の高い領域に偏ってしまう．本研究では，限られた探索回数からでも安定して優良解を発見することを目的として，次の探索点を既知の探索点の周辺に制限する改良手法を提案する．提案手法をベンチマーク関数に適用し，性能を検証する．また，実問題への適用例として，人工光型植物工場における，収穫量最大化のための環境制御問題に適用する．

2　ベイズ最適化

ベイズ最適化は，有界集合 $\mathbb{R}^D$ で定義される関数 $f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}$ において，最小値をとる入力 $\mathbf{x}^*$ を求める逐次最適化手法である．ガウス過程回帰に基づく f の確率モデル構築と，そのモデルを利用した探索点評価の 2 ステップから構成される．

2.1　ガウス過程回帰

目的関数 $f : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}$ がガウス過程 (Gaussian Process) であるとき，有限集合 $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, ..., \mathbf{x}_n]$，およびそれに対応する関数値 $\mathbf{f} = [f(\mathbf{x}_1), f(\mathbf{x}_2), ..., f(\mathbf{x}_n)]$ は n 次元の多変量ガウス分布に従う．

$$p(\mathbf{f}|\mathbf{X}) = \mathcal{N}(\mathbf{f}; \mu(\mathbf{x}), k(\mathbf{x}, \mathbf{x}))$$

通常は目的関数の真の値を直接得ることはできず，観測値にはノイズが付与される．すなわち，$\mathbf{Y} = [y_1, y_2, ..., y_n]$ に対して $p(\mathbf{Y}|\mathbf{f}) = \mathcal{N}(\mathbf{f}, \sigma_\epsilon^2 \mathbf{I})$ であるノイズが付与されていることを仮定する．このとき，データセット $\mathcal{D} = \{\mathbf{X}, \mathbf{Y}\}$ に対して，未知の点 $\mathbf{x}'$ における関数値の予測分布 $p(f(\mathbf{x}')|\mathcal{D}, \mathbf{x}')$ は次の式で与えられる．

$$p(f(\mathbf{x}')|\mathcal{D}, \mathbf{x}') = \mathcal{N}(\mu_{f|\mathcal{D}}(\mathbf{x}'), \sigma_{f|\mathcal{D}}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'))$$

$$\mu_{f|\mathcal{D}}(\mathbf{x}) = \mu(\mathbf{x}) + k(\mathbf{x}, \mathbf{X})(\mathbf{K} + \sigma_\epsilon^2 \mathbf{I})^{-1}(\mathbf{f} - \mu(\mathbf{x}))$$
$$\sigma_{f|\mathcal{D}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = k(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - k(\mathbf{x}, \mathbf{X})(\mathbf{K} + \sigma_\epsilon^2 \mathbf{I})^{-1} k(\mathbf{X}, \mathbf{x})$$

$\mathbf{K}$ は共分散行列であり，$\mathbf{K}_{i,j} = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ を満たす．k はカーネル関数であり，２つの入力 $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j$ の影響度を評価する．RBF カーネルや Matern5/2 カーネルが一般的に使用される．

2.2　探索点評価

ガウス過程回帰によって得られた予測分布を使用して，未知の探索点 $\mathbf{x}'$ を評価する．このときの評価指標 $a(\mathbf{x}')$ は獲得関数と呼ばれる．代表的な獲得関数の 1 つに Expected Improvement(EI）がある．EI は $f_{best} = \min(\mathbf{f})$ を用いて以下の式で与えられる．

$$\begin{aligned} a_{EI}(\mathbf{x}') &= E[f_{best} - f(\mathbf{x}')] \\ &= (f_{best} - \mu_{f|\mathcal{D}}(\mathbf{x}'))\Phi(\gamma(\mathbf{x}')) + \sigma_{f|\mathcal{D}}(\mathbf{x}')\phi(\gamma(\mathbf{x}')) \end{aligned}$$
$$\gamma(\mathbf{x}') = \frac{f_{best} - \mu_{f|\mathcal{D}}(\mathbf{x}')}{\sigma_{f|\mathcal{D}}(\mathbf{x}')}$$

ここで，Φ，ϕ はそれぞれ正規分布の累積分布関数と確率密度関数である．次の探索点 $\mathbf{x}_{n+1}$ は，獲得関数の値が最大である点を選ぶ．

3　提案手法

既知の探索点が少数である場合，未探索領域の発生は避けられない．こうした領域は予測分散 $\sigma_{f|\mathcal{D}}$ が大きくなるが，一般的な獲得関数による探索点決定方針では，こうした領域が高く評価される．結果として，定義域の境界付近 [1] や距離の離れた探索点の中間からの過剰サンプリングが発生する．しかし探索回数が限られる場合，不確実性の高い領域よりも改善の可能性が高い領域を重点的に探索する方が望ましいと考える．そこで，提案手法では，探索点の位置に制限を与えることで過度な探索を抑制する．提案手法による獲得関数 $a_{|d|<R}(\mathbf{x}')$ を次に示す．

$$a_{|d|<R}(\mathbf{x}') = \begin{cases} a(\mathbf{x}') & \text{if } \exists \mathbf{x}_i \in \mathbf{X}, ||\mathbf{x}' - \exists \mathbf{x}_i|| < R \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

この獲得関数によって，n+1 回目の探索点は，n 回目までのいずれかの探索点との距離が R 以下となる場所に

A practical approach for bayesian optimization under limited samples and application to harvest maximization at plant factory
†Yuki ITO　‡Tomoharu Nagao
†Graduate School of Environment and Information Sciences, Yokohama National University
‡Faculty of Environment and Information Sciences, Yokohama National University

限定される．序盤は限られた範囲から探索を始め，探索を重ねるにつれて徐々に範囲を広げることで段階的に最適解を目指す．

4 ベンチマーク関数を対象とした比較実験

4.1 実験設定

複数のベンチマーク関数を対象に提案手法の性能を検証した．提案手法のハイパーパラメータである制限距離 R は，定義域に対して 5%，10%，20%(R=5，10，20) の 3 種類を実行し，通常のベイズ最適化（Simple BO）と比較した．探索性能の評価式を次に示す．

$$score = \frac{f_{best} - f^*}{f_{best}^{SimpleBO} - f^*}$$

$f_{best}^{SimpleBO}$ は Simple BO の f_{best} であり，f^* は各関数の最適解である．$score$ が 1 よりも小さければ Simple BO よりもよい解を発見できたことを意味する．

対象とする関数は，shpere，alpine，hartmann(全て 6 次元) とし，一様ランダムによる 2 回の初期サンプル生成の後，計 30 回探索を行った．カーネル関数には Matern52 カーネル，獲得関数には EI を使用した．

4.2 実験結果

実験結果を表 1 に示す．提案手法の $score$ はいずれも 1 より小さく，Simple BO よりも優れた解を発見できた．また探索ごとの評価値変動が小さく，提案手法の方が安定した探索であることが確認できた．

5 植物工場の収穫量最大化実験

人工光型植物工場では，栽培空間の温湿度や二酸化炭素濃度など，植物の成長に影響する多数の環境要因を任意に制御することが可能である．植物工場は費用対効果が課題であり，最適な環境条件設定の発見による収穫量の向上が求められている．しかしながら，環境条件設定の評価のためには実際に作物を育てる必要があり，1 回の実験に要する時間コストが非常に大きい．

表 1: ベンチマーク関数での探索結果

	sphere	alpine	hartmann
Simple BO	1	1	1
提案手法 (R=5)	0.030	0.393	0.888
提案手法 (R=10)	0.021	0.663	0.866
提案手法 (R=20)	0.242	0.873	0.894

表 2: 11 日間栽培後の乾燥重量

	乾燥重量 (g)
6 回目までの最大重量	0.032
7 回目の重量	0.045
8 回目の重量	0.025

5.1 実験設定

提案手法を用いて，フリルレタスの環境条件設定の最適化を行った．最適化対象は温湿度など 6 つの環境要因であり，播種から 11 日後の乾燥重量（作物残渣を除去した後十分に乾燥させた重量）で評価した．人手で決定した環境条件設定で 6 回栽培した後，提案手法（$R = 20$）による設定で 2 回栽培を行った．なお，本問題設定は最大化問題であるため，最大値探索の EI（$a_{EI}^{+} = E[f(\mathbf{x}') - f_{best}]$）を使用した．

5.2 実験結果

実験結果を表 2 に示す．7 回目の環境条件設定による栽培実験では，人手の設定による最大値を約 40%上回った．またこの重量は従来の最良値を上回っており，6 つの環境要因に対して計 8 回という限られた実験回数ながら優れた環境条件設定を発見することができた．

6 まとめ

探索回数に強い制約がある問題に対して，探索範囲を既知の探索点の周辺に制限するベイズ最適化の改良手法を提案した．ベンチマーク関数への適用では，Simple BO と比較して優れた解を発見することができた．また，提案手法を植物工場の収穫量最大化問題へ適用し，従来よりも優れた環境条件設定を発見した．今後は，ハイパーパラメータ R の自動調節手法の開発を目指す．

7 謝辞

本研究は株式会社プランテックスとの共同研究として遂行されました．実験装置の作成や栽培指導，結果の評価などで多大なご協力を頂きました坂口俊輔様をはじめご関係の皆様方に深く御礼申し上げます．

参考文献

[1] Eero Siivola, Aki Vehtari, Jarno Vanhatalo, and Javier González. Correcting boundary over-exploration deficiencies in bayesian optimization with virtual derivative sign observations. *arXiv preprint arXiv:1704.00963*, 2017.