贝叶斯优化

黄政宇
北京大学北京国际数学研究中心
北京大学国际机器学习研究中心

贝叶斯优化

- 目标函数

$$\max f(x)$$

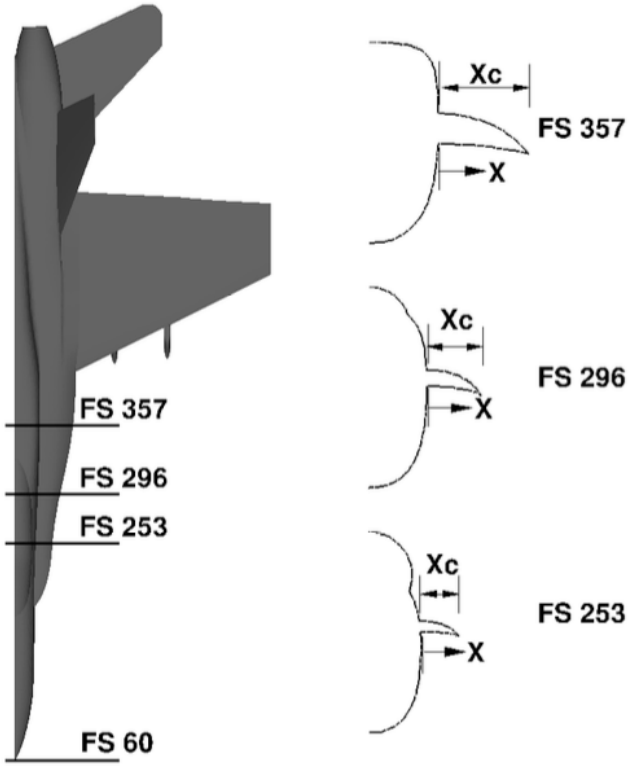
输入(设计、运行条件等)

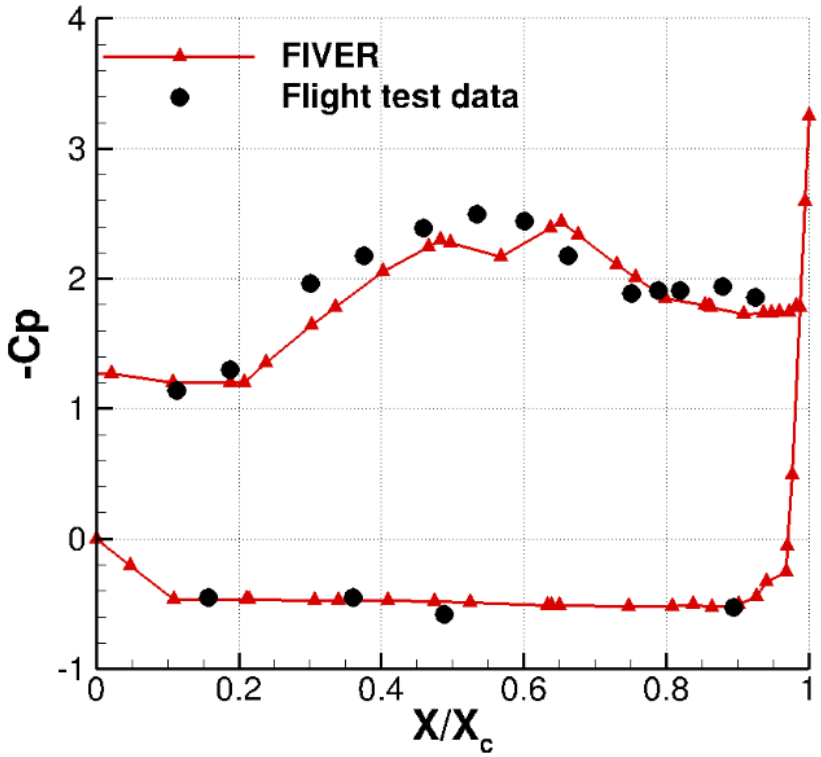
输出(受到的力、结构的响应等和相应的不确定性)

贝叶斯优化

➢ 对不同工况反复求解优化设计

$M_\infty = 0.243$, AoA = 30.3°





4天 1000CPUs

贝叶斯优化

- 挑战

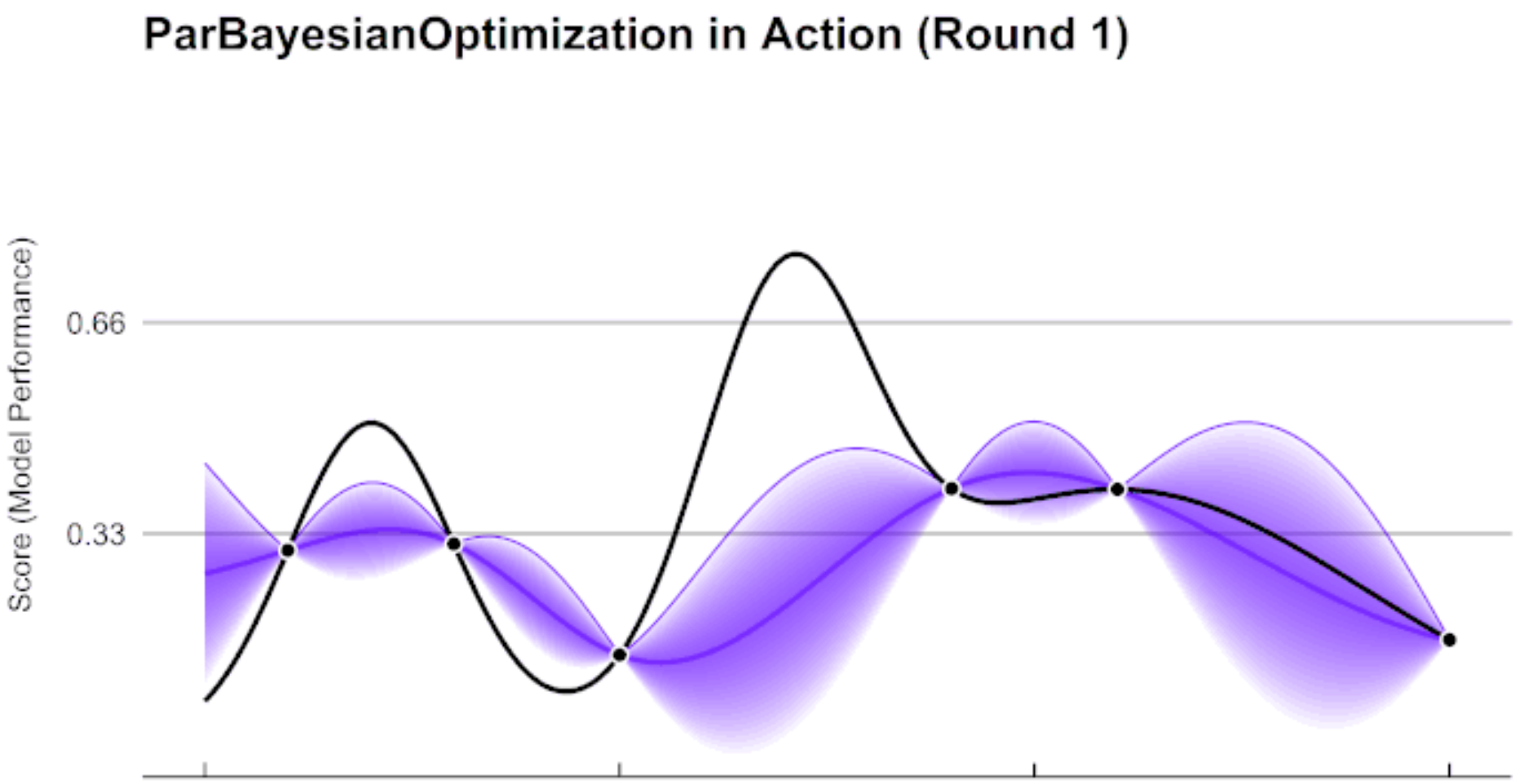
每次计算$f(x)$计算量很大，函数$f(x)$的评估被认为是“昂贵的”，这意味着可以执行的评估次数是有限的，通常只限于几百次。

$f(x)$像由黑盒，函数f缺乏诸如凹性或线性等已知的特殊结构，也难以得到一阶或二阶导数的信息，这些结构会使得利用相关技术来优化函数变得容易并提高效率。我们总结这一点，说f是一个“黑箱”。

关注点在于寻找全局最优解，而非局部最优解

贝叶斯优化

➢ 贝叶斯优化


ParBayesianOptimization in Action (Round 1)
Score (Model Performance)
0.66
0.33

贝叶斯优化

- 贝叶斯优化

给定先验分布 $f(x) \sim GP\big(0, \kappa(x, x')\big)$
给定事先选定的n_0点 $X = \{x_1, x_2, \cdots, x_{n_0}\}$，以及相应的值$y = \{f(x_1), f(x_2), \cdots, f(x_{n_0})\}$

依次添加新的点，根据

计算后验分布 $f|X, y$
根据后验分布，以及给定的采样函数(acquisition function)，选取新的点x_{n+1}，计算$f(x_{n+1})$

采样函数

- 概率改进(Probability of improvement)采样函数

定义$f_n^* = \max_{i \le n} f(x_i)$

当我们选了新点x，我们得到的值为$f(x)$

定义效用函数 $u(f) = \begin{cases} 1 & f \ge f_n^* \\ 0 & f < f_n^* \end{cases}$

我们希望选取新的点x_{n+1}最大化

$$a_{PI}(x) = P(f(x) \ge f_n^*) = \mathbb{E}_{f \sim \rho(f|x, x_i, f(x_i))}[u(f)]$$

$$= \int_{f_n^*}^{+\infty} \mathcal{N}(f; \mu_n(x), \sigma_n(x)^2)\, df$$

最后返回$f_N^* = \max_{m \le N} f(x_m)$

采样函数

- 期望改进 (expected improvement)采样函数

定义$f_n^* = \max_{i \le n} f(x_i)$

当我们选了新点x，我们得到的极大值为$f(x)(f(x) \ge f_n^*)$或$f_n^*(f_n^* \ge f(x))$

最大值增量为$[f(x) - f_n^*]^+ := \max\{0, f(x) - f_n^*\}$

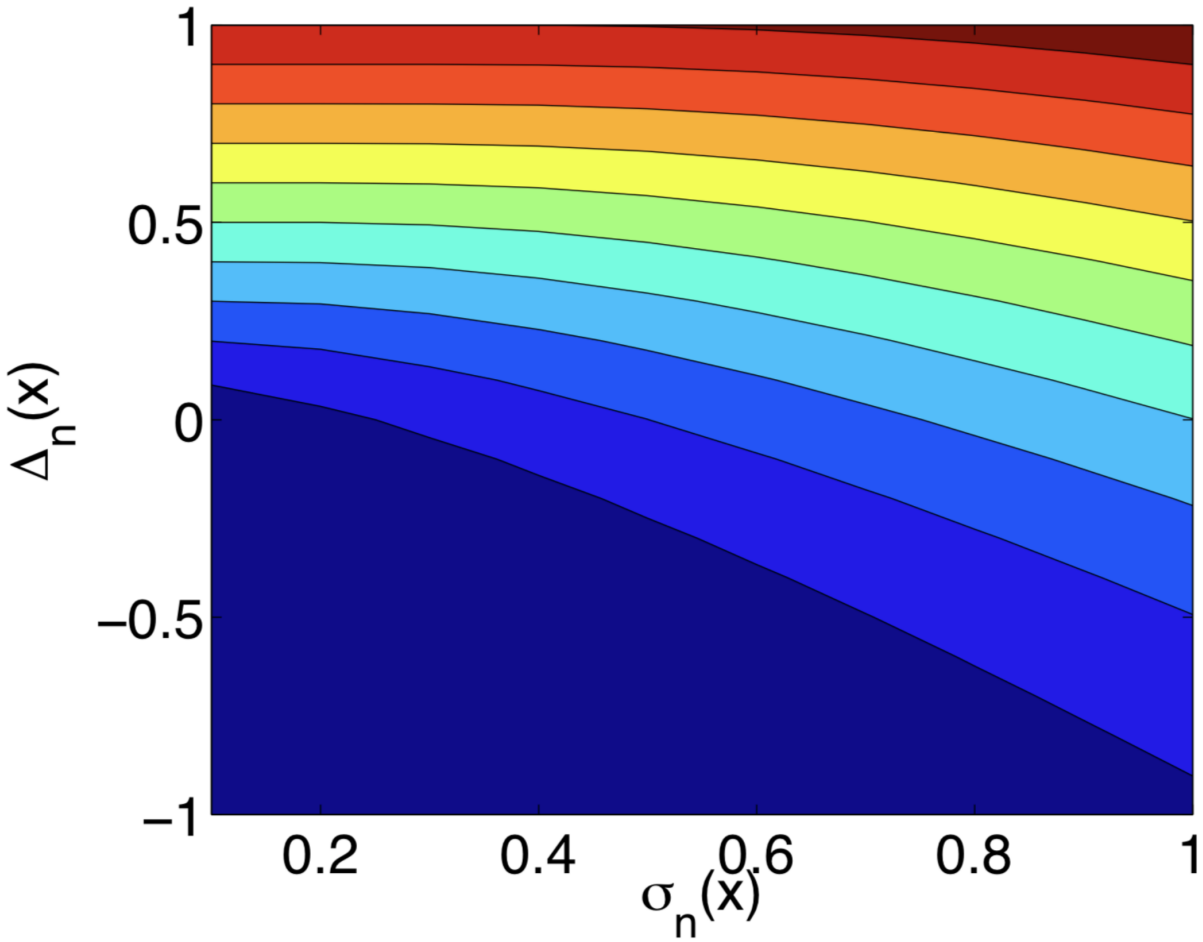
对于后验分布$f(x) \sim \mathcal{N}(\mu_n(x), \sigma_n^2(x))$, 最大化

$$a_{EI}(x) = \mathbb{E}\left[[f(x) - f_n^*]^+\right]$$
$$= \Delta_n(x)\Phi\left(\frac{\Delta_n(x)}{\sigma_n(x)}\right) + \sigma_n\varphi\left(\frac{\Delta_n(x)}{\sigma_n(x)}\right)$$

其中$\Delta_n(x) = \mu_n(x) - f_n^*$。

采样函数

➢ 期望改进 (expected improvement)采样函数



高期望 $\Delta_n(x)$
高不确定性$\sigma_n(x)$

探索与利用的权 (exploration vs. exploitation tradeoff)

采样函数

- 信息增益(information gain)和实验设计(experimental design)

信息增益通常指在观察到新数据点后，对目标函数 $f(x)$ 的认识增加的程度。它通常通过交互信息来量化，

$$I(y;f|X) = H(y|X) - H(y|X,f)$$

这表示观察到新数据后，模型对函数不确定性减少的程度。

假设每次观测有噪音：$y = f(x) + \epsilon \quad \epsilon \sim \mathcal{N}(0,\sigma^2)$

$$I(y;f|X) = \frac{1}{2}\log|2\pi e(K+\sigma^2 I)| - \frac{1}{2}\log|2\pi e\sigma^2 I|$$
$$= \frac{1}{2}\log|\sigma^{-2}K + I|$$

采样函数

- 信息增益(information gain)和实验设计(experimental design)

假设每次观测有噪音：$y = f(x) + \epsilon \quad \epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$

$$I(y; f|X) = \frac{1}{2}\log|2\pi e(K + \sigma^2 I)| - \frac{1}{2}\log|2\pi e\sigma^2 I|$$
$$= \frac{1}{2}\log|\sigma^{-2}K + I|$$

直接确定$X = \{x_1, x_2, \cdots, x_n\}$最大化$\mathrm{argmax}_X I(y; f|X)$比较困难。

贪心法选取X：给定$X = \{x_1, x_2, \cdots, x_\mathrm{n}\}$，选取$x_{n+1}$最大化

$$\frac{1}{2}\log|\sigma^{-2}K + I|$$

$$\Longrightarrow \quad x_{n+1} = \mathrm{argmax}\, \sigma_n(x)$$

采样函数

- 上置信界（upper confidence bound） 采样函数

$$a(x) = \mu(x) + \beta\sigma(x)$$

$\mu(x)$尽量大
$\sigma(x)$不确定性尽量大

$$x_{n+1} = \operatorname{argmax} \mu(x) + \beta\sigma(x)$$

采样函数

收敛性

考虑有限空间D上的优化问题，给定$\delta \in (0,1)$和 $\beta_i = 2\log(\frac{|D|i^2\pi^2}{6\delta^2})$ ，使用上置信界（upper confidence bound）采样函数 的贝叶斯优化满足

$$P\left(R_n \leq \sqrt{\frac{8n\beta_n\gamma_n}{log(1+\sigma^2)}}\right) \geq 1-\delta$$

其中观测误差满足$\epsilon \sim \mathcal{N}(0,\sigma^2)$，$R_n = \sum_{i=1}^{n} r_i$是累计遗憾(cumulative regret)，即时遗憾（regret） $r_i = f(x^*) - f(x_i)$，$\gamma_n = \max_{|X|=n} I(y; f|X)$是$n$轮后最大信息增益。

采样函数

➢ 上置信界（upper confidence bound） 采样函数

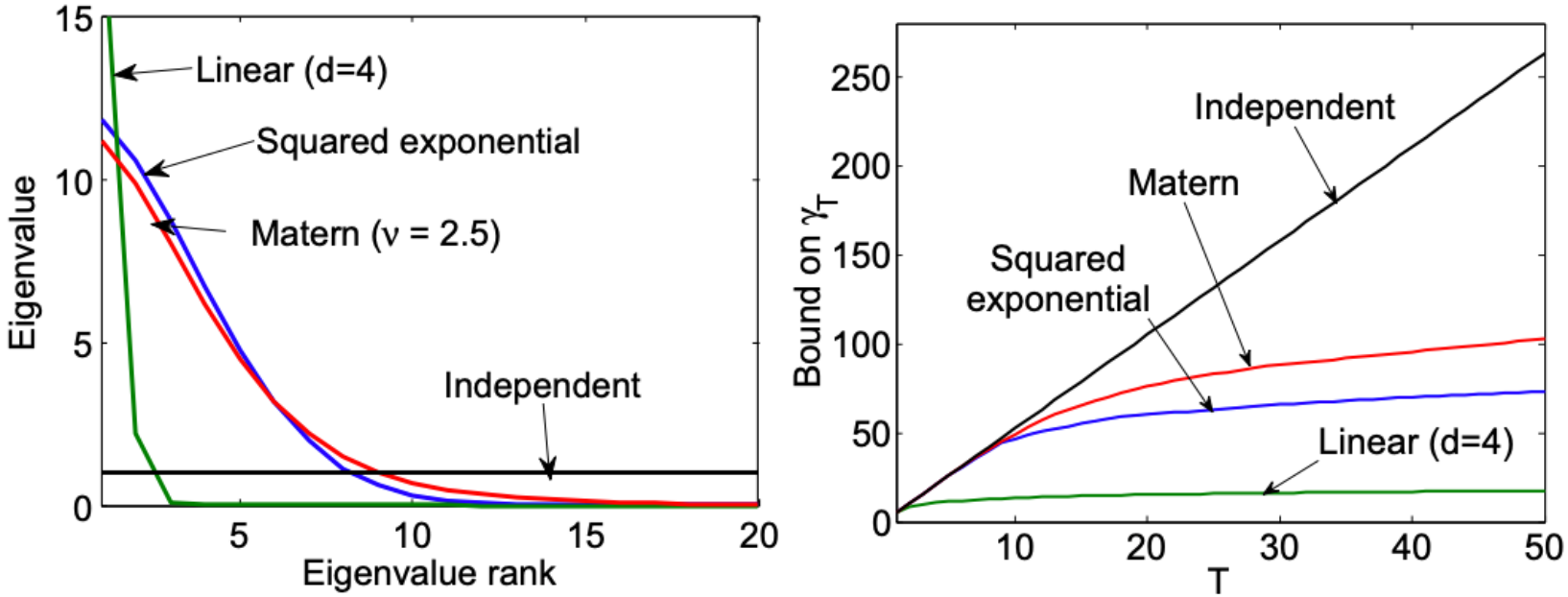


Figure 3. Spectral decay (left) and information gain bound (right) for independent (diagonal), linear, squared exponential and Matérn kernels ($\nu = 2.5$.) with equal trace.

采样函数

上述方法认为我们只愿意将之前评估过的点作为最终解返回。这一假设在评估无噪声且我们极度规避风险的情况下是合理的。但如果我们能够容忍一定的风险，则可能愿意报告带有一定不确定性的解。此外，如果评估存在噪声，那么输出的最终解必然具有不确定性，因为我们几乎不可能对其进行无限次的评估。

输出 $\mu_n^* = \max_x \mu_n(x)$

采样函数

- 知识梯度 (knowledge gradient)采样函数

定义$\mu_n^* = \max_x \mu_n(x)$

当我们选了新点x_{n+1}，我们得到的值为$f(x)$，对于后验分布$f(x) \sim \mathcal{N}(\mu_{n+1}(x), \sigma_{n+1}^2(x))$，那么$\mu_{n+1}^* = \max_x \mu_{n+1}(x)$

$$a_{KG}(x) = \mathbb{E}_{f(x_{n+1})}[\mu_{n+1}^* - \mu_n^* | x_{n+1} = x]$$

随机近似：

$$a_{KG}(x) \approx \mu_{n+1}^*(x; y_{n+1}) - \mu_n^* \quad y_{n+1} \sim \mathcal{N}(\mu_n(x), \sigma_n^2(x))$$

采样函数

- 熵搜索(entropy search)采样函数

熵函数 $H(\rho)=\int \rho(x)\log\frac{1}{\rho(x)}dx$，越小越确定

是在取了n个点，确定了极值点后x_n^*，我们希望极值点的熵尽量小$H(\rho_n(f(x_n^*)))$，其中$x_n^*=\underset{x}{\operatorname{argmax}}\,\mu_n(x)$。

$$a_{ES}(x)$$
$$=H(\rho_n f(x_n^*))-\mathbb{E}_{f(x_{n+1})}H\big(\rho_{n+1}(f(x_{n+1}^*)|x_{n+1}=x,f(x_{n+1}))\big)$$

$$\mathbb{E}_{f(x_{n+1})}H\big(\rho_{n+1}(f(x_{n+1}^*)|x_{n+1}=x,f(x_{n+1}))\big)$$
$$=\int \mathcal{N}(f;\mu_n(x),\sigma_n^2(x))\,H\big(\rho_{n+1}(f(x_{n+1}^*)|x_{n+1}=x,f)\big)df$$

参考文献

参考文献

Frazier, Peter I. "A tutorial on Bayesian optimization." arXiv preprint arXiv:1807.02811 (2018).

Srinivas, Niranjan, Andreas Krause, Sham M. Kakade, and Matthias Seeger. "Gaussian process optimization in the bandit setting: No regret and experimental design." arXiv preprint arXiv:0912.3995 (2009).