

Informe Tecnico Completo

Few-Shot Bayesian Optimization (FSBO)

para Optimizacion de Hiperparametros

Documentacion Detallada del Sistema, Teoria y Implementacion

Proyecto Academic MetaLearning
Componente: Transfer Learning

Enero 2026

Abstract

Este informe tecnico documenta de manera exhaustiva la implementacion del sistema FSBO (Few-Shot Bayesian Optimization) para optimizacion de hiperparametros. Se describe cada componente del sistema: su proposito, base teorica, implementacion y rol en el pipeline. El documento esta disenado para servir como referencia tecnica completa, permitiendo entender tanto el *que* como el *por que* de cada decision de diseño.

Contents

1 Introduccion y Vision General	2
1.1 Contexto del Problema	2
1.2 ¿Por que Transfer Learning?	2
1.3 Arquitectura del Sistema	2
2 Estructura del Proyecto	2
3 Fundamentos Teoricos	3
3.1 Bayesian Optimization (BO)	3
3.1.1 Gaussian Process (GP)	3
3.1.2 Expected Improvement (EI)	3
3.2 Deep Kernel Learning	4
3.3 Arquitectura Detallada del Modelo FSBO	4
3.3.1 Vision General de la Arquitectura	4
3.3.2 Componente 1: DeepKernelNetwork (DKN)	4
3.3.3 Componente 2: DeepKernelGP (DKGP)	5
3.3.4 Funcion de Perdida: Marginal Log-Likelihood	5
3.3.5 Tabla de Hiperparametros del Modelo	6
3.3.6 Flujo de Datos Durante Inferencia	6
3.3.7 Complejidad Computacional	6
3.4 Meta-Learning y Task Augmentation	7
3.4.1 Meta-Learning	7
3.4.2 Task Augmentation	7

4 Documentacion Detallada por Archivo	7
4.1 generate_synthetic_scores.py	7
4.1.1 ¿Que hace?	7
4.1.2 ¿Por que es necesario?	7
4.1.3 Base Teorica	7
4.1.4 Funciones Principales	8
4.1.5 Uso	8
4.1.6 Salida	8
4.2 train_fsbo.py	8
4.2.1 ¿Que hace?	8
4.2.2 ¿Por que es necesario?	8
4.2.3 Componentes del Modelo	8
4.2.4 Loop de Entrenamiento	9
4.2.5 Uso	10
4.2.6 Salida	10
4.3 fsbo_optimizer.py	10
4.3.1 ¿Que hace?	10
4.3.2 ¿Por que es necesario?	10
4.3.3 Clase Principal: FSBOOptimizer	10
4.3.4 Fine-Tuning	11
4.3.5 Uso Tipico	11
4.4 metrics.py	12
4.4.1 ¿Que hace?	12
4.4.2 ¿Por que es necesario?	12
4.4.3 Metricas Implementadas	12
4.4.4 Tests Estadisticos	12
4.5 baselines.py	13
4.5.1 ¿Que hace?	13
4.5.2 ¿Por que es necesario?	13
4.5.3 Baselines Implementados	13
4.6 experiments.py	14
4.6.1 ¿Que hace?	14
4.6.2 ¿Por que es necesario?	14
4.6.3 Protocolo K-Fold sobre Tareas	14
4.6.4 Flujo del Experimento	14
4.6.5 Uso	15
4.7 visualize.py	15
4.7.1 ¿Que hace?	15
4.7.2 Visualizaciones Generadas	15
5 Flujo de Datos Completo	15
5.1 Desde Datos Crudos hasta Resultados	15
6 Formato de Datos de Entrada	16
6.1 Estructura del Directorio de Datos	16
6.2 Archivos ConfigSpace: Definicion del Espacio de Busqueda	16
6.2.1 Estructura del JSON	17
6.2.2 Tipos de Hiperparametros Soportados	17
6.2.3 Complejidad por Algoritmo	17
6.3 Archivos CSV: Datos de Entrenamiento	17
6.3.1 Estructura del CSV	17
6.3.2 Ejemplo de Fila	18

6.3.3	Por que los valores estan normalizados	18
6.3.4	Codificacion One-Hot para Variables Categoricas	18
6.4	Relacion entre ConfigSpace y CSV	19
6.5	Formato Requerido para Nuevos Datasets	19
6.5.1	1. Archivo ConfigSpace (JSON)	19
6.5.2	2. Archivo CSV de Evaluaciones	19
6.5.3	Requisitos Minimos	20
6.5.4	Ejemplo Minimo Funcional	20
6.6	Estadisticas de los Datos Actuales	20
7	Resultados Obtenidos	20
7.1	Configuracion Experimental	20
7.2	Resultados por Algoritmo	21
7.3	Interpretacion	21
8	Integracion con Meta-Learning	21
8.1	Flujo de Integracion Propuesto	21
8.2	Ejemplo de Codigo	21
9	Conclusiones	22
9.1	Logros Tecnicos	22
9.2	Lecciones Aprendidas	22
9.3	Trabajo Futuro	22
A	Comandos de Reproduccion	23

1 Introducción y Visión General

1.1 Contexto del Problema

La **optimización de hiperparámetros (HPO)** es un desafío fundamental en machine learning. Cada algoritmo de ML tiene hiperparámetros que no se aprenden de los datos (ej: learning rate, número de estimadores, profundidad de árboles), y encontrar la configuración óptima requiere:

- **Muchas evaluaciones:** Cada configuración requiere entrenar y validar un modelo
- **Tiempo costoso:** Entrenar un modelo puede tomar minutos u horas
- **Espacio de búsqueda grande:** Combinatoria exponencial de posibilidades

1.2 ¿Por qué Transfer Learning?

La intuición clave es: *Los patrones de buenos hiperparámetros tienden a ser similares entre tareas relacionadas.*

Por ejemplo:

- Un learning rate de 0.01-0.1 suele funcionar bien en muchos problemas
- Random Forests con 100-500 árboles son típicamente buenos
- SVM con kernel RBF y C entre 1-100 es un buen punto de partida

FSBO aprovecha esta intuición: entrena un modelo “surrogate” en múltiples tareas previas para que cuando llegue una nueva tarea, ya tenga conocimiento transferido sobre qué configuraciones suelen funcionar.

1.3 Arquitectura del Sistema

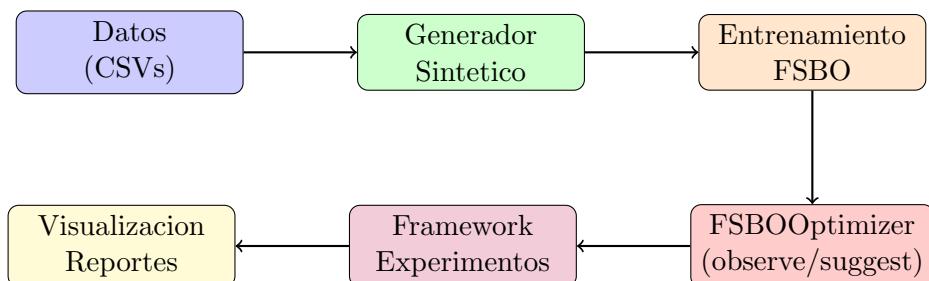


Figure 1: Pipeline del sistema FSBO

2 Estructura del Proyecto

```
transfer-learning/
++ data/
|   +- configspace/          # Definiciones de espacios de HP
|   +- representation_with_scores/ # Datos con métricas
++ scripts/
|   +- generate_synthetic_scores.py # Generador de datos
|   +- train_fsbo.py           # Entrenamiento del modelo
|   +- fsbo_optimizer.py       # API observe/suggest
|   +- run_bo.py               # Loop de BO standalone
```

```

|   +-+ pipeline.py           # Integracion meta-learning
|   +-+ metrics.py          # Metricas de evaluacion
|   +-+ baselines.py        # Metodos de comparacion
|   +-+ experiments.py      # Framework K-Fold CV
|   +-+ visualize.py        # Generacion de graficos
+-+ experiments/
|   +-+ checkpoints/         # Modelos entrenados
|   +-+ results/             # JSONs de experimentos
|   +-+ figures/             # Graficos generados
+-+ doc/
|   +-+ report.md            # Documentacion general
|   +-+ EXPERIMENTS.md       # Doc de experimentacion
|   +-+ experimental_report.tex/.pdf # Reporte LaTeX
+-+ requirements.txt         # Dependencias

```

3 Fundamentos Teoricos

3.1 Bayesian Optimization (BO)

Definicion 1 (Bayesian Optimization). *BO es un metodo de optimizacion global de funciones caja negra costosas de evaluar. Consiste en:*

1. *Un **modelo surrogate** (tipicamente GP) que aproxima la funcion objetivo*
2. *Una **funcion de adquisicion** que decide donde evaluar siguiente*

3.1.1 Gaussian Process (GP)

Un GP define una distribucion sobre funciones:

$$f(\mathbf{x}) \sim \mathcal{GP}(m(\mathbf{x}), k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')) \quad (1)$$

Donde:

- $m(\mathbf{x})$: Funcion de media (tipicamente constante o cero)
- $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$: Funcion kernel (covarianza entre puntos)

Dadas observaciones $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^n$, el GP predice:

$$\mu(\mathbf{x}^*) = \mathbf{k}_*^T (K + \sigma^2 I)^{-1} \mathbf{y} \quad (2)$$

$$\sigma^2(\mathbf{x}^*) = k(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^*) - \mathbf{k}_*^T (K + \sigma^2 I)^{-1} \mathbf{k}_* \quad (3)$$

3.1.2 Expected Improvement (EI)

La funcion de adquisicion EI balancea exploracion y explotacion:

$$EI(\mathbf{x}) = (\mu(\mathbf{x}) - y^+ - \xi) \Phi(Z) + \sigma(\mathbf{x}) \phi(Z) \quad (4)$$

Donde:

- y^+ : Mejor valor observado hasta ahora
- $Z = \frac{\mu(\mathbf{x}) - y^+ - \xi}{\sigma(\mathbf{x})}$
- Φ, ϕ : CDF y PDF de la normal estandar
- ξ : Factor de exploracion (tipicamente 0.01)

3.2 Deep Kernel Learning

La innovacion de FSBO es usar un **Deep Kernel**:

$$k_\theta(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = k(\phi_\theta(\mathbf{x}), \phi_\theta(\mathbf{x}')) \quad (5)$$

Donde ϕ_θ es una red neuronal que transforma los hiperparametros a un espacio latente donde el kernel RBF funciona mejor.

¿Por que funciona?

- El kernel RBF asume que puntos cercanos tienen valores similares
- Pero “cercano” en el espacio original de HPs puede no corresponder a rendimiento similar
- La red ϕ aprende una representacion donde la cercania SI implica rendimiento similar

3.3 Arquitectura Detallada del Modelo FSBO

Esta seccion describe en detalle la arquitectura completa del modelo FSBO, sus componentes y como interactuan.

3.3.1 Vision General de la Arquitectura

El modelo FSBO consta de dos componentes principales que trabajan juntos:

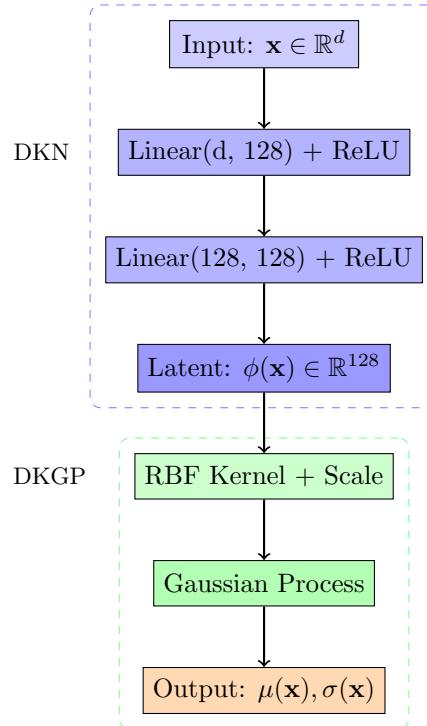


Figure 2: Arquitectura completa del modelo FSBO

3.3.2 Componente 1: DeepKernelNetwork (DKN)

La red neuronal $\phi_\theta : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{128}$ transforma hiperparametros crudos a un espacio latente.

Definicion matematica:

$$\mathbf{h}_1 = \text{ReLU}(W_1 \mathbf{x} + \mathbf{b}_1), \quad W_1 \in \mathbb{R}^{128 \times d} \quad (6)$$

$$\mathbf{h}_2 = \text{ReLU}(W_2 \mathbf{h}_1 + \mathbf{b}_2), \quad W_2 \in \mathbb{R}^{128 \times 128} \quad (7)$$

$$\phi_\theta(\mathbf{x}) = \mathbf{h}_2 \quad (8)$$

Parametros totales de DKN:

$$|\theta_{DKN}| = d \times 128 + 128 + 128 \times 128 + 128 = 128d + 16,640 \quad (9)$$

Para AdaBoost ($d = 8$): $|\theta_{DKN}| = 17,664$ parametros.

3.3.3 Componente 2: DeepKernelGP (DKGP)

El GP opera en el espacio latente usando:

Funcion de media:

$$m(\mathbf{x}) = c, \quad c \in \mathbb{R} \text{ (constante aprendida)} \quad (10)$$

Funcion de covarianza (kernel):

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sigma_f^2 \cdot \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{128} \frac{(\phi_i(\mathbf{x}) - \phi_i(\mathbf{x}'))^2}{\ell_i^2} \right) \quad (11)$$

Donde:

- σ_f^2 : Varianza de senal (outputscale)
- ℓ_i : Lengthscale para dimension i (ARD - Automatic Relevance Determination)

Prediccion posterior: Dado un conjunto de observaciones $\mathcal{D} = \{(X, \mathbf{y})\}$, para un nuevo punto \mathbf{x}^* :

$$\mu(\mathbf{x}^*) = m(\mathbf{x}^*) + \mathbf{k}_*^T (K + \sigma_n^2 I)^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{m}) \quad (12)$$

$$\sigma^2(\mathbf{x}^*) = k(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^*) - \mathbf{k}_*^T (K + \sigma_n^2 I)^{-1} \mathbf{k}_* \quad (13)$$

Donde:

- $K \in \mathbb{R}^{n \times n}$: Matriz de covarianza, $K_{ij} = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$
- $\mathbf{k}_* \in \mathbb{R}^n$: Vector de covarianzas, $k_{*i} = k(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}_i)$
- σ_n^2 : Varianza del ruido (likelihood noise)

3.3.4 Funcion de Perdida: Marginal Log-Likelihood

El modelo se entrena maximizando la log-verosimilitud marginal:

$$\log p(\mathbf{y}|X, \theta) = -\frac{1}{2} \mathbf{y}^T (K + \sigma_n^2 I)^{-1} \mathbf{y} - \frac{1}{2} \log |K + \sigma_n^2 I| - \frac{n}{2} \log(2\pi) \quad (14)$$

Esta funcion:

- **Primer termino:** Penaliza predicciones lejanas de las observaciones
- **Segundo termino:** Penaliza modelos demasiado complejos (regularizacion)
- **Tercer termino:** Constante de normalizacion

3.3.5 Tabla de Hiperparametros del Modelo

Table 1: Hiperparametros del modelo FSBO y sus valores por defecto

Componente	Hiperparametro	Valor	Descripcion
DKN	hidden_dim	128	Dimension de capas ocultas
	n_layers	2	Numero de capas ocultas
	activation	ReLU	Funcion de activacion
DKGP	mean	Constant	Tipo de funcion de media
	kernel	ScaleKernel(RBF)	Kernel con ARD
	ard_num_dims	128	Dimensiones para ARD
Training	n_iterations	2000	Iteraciones de meta-training
	batch_size	50	Muestras por batch
	learning_rate	0.001	Tasa de aprendizaje
	optimizer	Adam	Optimizador
Fine-tuning	n_epochs	20	Epocas de fine-tuning
	learning_rate	0.0001	LR reducido para fine-tuning
	frequency	5	Cada cuantas observaciones
Acquisition	xi	0.01	Factor de exploracion (EI)
	n_candidates	1000	Candidatos para optimizar EI

3.3.6 Flujo de Datos Durante Inferencia

Algorithm 1 Forward Pass de FSBO

Require: Hiperparametros $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$, Observaciones $\mathcal{D} = \{(X, \mathbf{y})\}$

Ensure: Media $\mu(\mathbf{x})$, Varianza $\sigma^2(\mathbf{x})$

- 1: $\mathbf{z} \leftarrow \phi_\theta(\mathbf{x})$ {Proyectar a espacio latente}
 - 2: $Z \leftarrow \phi_\theta(X)$ {Proyectar observaciones}
 - 3: $K \leftarrow k(Z, Z)$ {Matriz de covarianza}
 - 4: $\mathbf{k}_* \leftarrow k(\mathbf{z}, Z)$ {Covarianzas con nuevo punto}
 - 5: $\alpha \leftarrow (K + \sigma_n^2 I)^{-1} \mathbf{y}$ {Resolver sistema lineal}
 - 6: $\mu \leftarrow m(\mathbf{x}) + \mathbf{k}_*^T \alpha$
 - 7: $\sigma^2 \leftarrow k(\mathbf{z}, \mathbf{z}) - \mathbf{k}_*^T (K + \sigma_n^2 I)^{-1} \mathbf{k}_*$
 - 8: **return** μ, σ^2
-

3.3.7 Complejidad Computacional

Table 2: Complejidad computacional de las operaciones principales

Operacion	Complejidad	Comentario
Forward DKN	$O(d \cdot h + h^2)$	$h = 128, d = \text{dim input}$
Calcular K	$O(n^2 \cdot h)$	$n = \text{num observaciones}$
Invertir $(K + \sigma^2 I)$	$O(n^3)$	Cuello de botella
Prediccion	$O(n^2)$	Por punto nuevo
Total predicion	$O(n^3)$	Dominado por inversion

Nota: Para $n < 100$ (tipico en HPO), la complejidad cubica es manejable. Para n grande, se usarian aproximaciones (inducing points).

3.4 Meta-Learning y Task Augmentation

3.4.1 Meta-Learning

En lugar de entrenar un GP desde cero para cada tarea, FSBO:

1. Pre-entrena el deep kernel en MUCHAS tareas
2. El deep kernel aprende patrones comunes de HPs efectivos
3. Para una nueva tarea, el modelo ya tiene conocimiento util

3.4.2 Task Augmentation

Para hacer el modelo robusto a diferentes escalas de metricas:

$$\tilde{y} = l + \frac{y - y_{\min}}{y_{\max} - y_{\min}} \cdot (u - l) \quad (15)$$

Donde l, u se muestran aleatoriamente durante entrenamiento. Esto:

- Previene que el modelo memorice escalas especificas
- Fuerza a aprender *relaciones* entre HPs y rendimiento, no valores absolutos

4 Documentacion Detallada por Archivo

4.1 generate_synthetic_scores.py

Informacion del Archivo

Ubicacion: scripts/generate_synthetic_scores.py

Lineas: 267

Dependencias: pandas, numpy, hashlib

4.1.1 ¿Que hace?

Genera metricas de rendimiento sinteticas (accuracy) para los datos de hiperparametros existentes. Esto es necesario porque los datos originales solo contenian configuraciones de HPs sin sus scores de evaluacion.

4.1.2 ¿Por que es necesario?

Para entrenar FSBO necesitamos tripletas (*tarea, configuracion, score*). Los datos disponibles solo tenian (*tarea, configuracion*). En un escenario real, estos scores vendrian de ejecutar experimentos reales en OpenML.

4.1.3 Base Teorica

El generador simula una “superficie de respuesta” realista:

1. **Componente lineal:** $\mathbf{w}^T \mathbf{x}$ donde \mathbf{w} son pesos especificos por tarea
2. **Componente no-lineal:** Interacciones entre features $x_i \cdot x_j$

3. **Ruido gaussiano:** $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, 0.03^2)$

$$score = \sigma(0.7 \cdot linear + 0.3 \cdot interaction) + \epsilon \quad (16)$$

Donde σ es la función sigmoide para mapear a $[0.5, 1.0]$.

4.1.4 Funciones Principales

generate_task_weights(task_id, n_features): Genera pesos únicos para cada tarea usando hash del task_id. Esto asegura que diferentes tareas tengan diferentes “óptimos”.

generate_synthetic_score(X, task_id): Combina componentes lineales y no-lineales para generar scores realistas.

4.1.5 Uso

```
1 python scripts/generate_synthetic_scores.py
```

4.1.6 Salida

Archivos CSV en `data/representation_with_scores/` con columna `accuracy` anadida.

4.2 train_fsbo.py

Información del Archivo

Ubicación: `scripts/train_fsbo.py`

Líneas: 374

Dependencias: torch, gpytorch, pandas, numpy, sklearn, tqdm

4.2.1 ¿Qué hace?

Entrena el modelo FSBO (Deep Kernel GP) usando meta-learning sobre múltiples tareas.

4.2.2 ¿Por qué es necesario?

Es el corazón del sistema. Sin un modelo pre-entrenado, no habría “transfer” que hacer. Este script:

- Crea la arquitectura del Deep Kernel GP
- Ejecuta el loop de meta-training
- Guarda checkpoints para uso posterior

4.2.3 Componentes del Modelo

DeepKernelNetwork (líneas 43-61): Red neuronal que transforma hiperparámetros.

```
1 class DeepKernelNetwork(nn.Module):
2     def __init__(self, input_dim, hidden_dim=128, n_layers=2):
3         # MLP: input -> hidden -> hidden -> output
4         # Activación: ReLU
```

Arquitectura:

- Input: Dimension del espacio de HPs (ej: 8 para AdaBoost)
- Hidden: 128 neuronas (configurable)
- Capas: 2 capas ocultas
- Output: Espacio latente de 128 dimensiones

DeepKernelGP (lineas 64-78): GP que usa el deep kernel.

```

1 class DeepKernelGP(ExactGP):
2     def forward(self, x):
3         projected_x = self.feature_extractor(x)    # DKN
4         mean = self.mean_module(projected_x)
5         covar = self.covar_module(projected_x)      # RBF en espacio
6             latente
7         return MultivariateNormal(mean, covar)

```

SimpleMetaDataset (lineas 85-154): Manejador de datos que:

- Carga CSVs con configuraciones y scores
- Agrupa por tarea (task_id)
- Divide tareas en train/val/test
- Muestrea batches para entrenamiento

task_augmentation (lineas 161-173): Implementa la aumentacion de tareas del paper.

```

1 def task_augmentation(y_batch, y_min_global, y_max_global):
2     l = np.random.uniform(y_min_global, y_max_global)
3     u = np.random.uniform(y_min_global, y_max_global)
4     if l > u: l, u = u, l
5     y_scaled = l + (y_batch - y_min) / (y_max - y_min) * (u - l)
6     return y_scaled

```

4.2.4 Loop de Entrenamiento

El algoritmo de meta-training (lineas 180-252):

Algorithm 2 Meta-Training de FSBO

- 1: **for** iteration = 1 to N **do**
 - 2: Muestrear tarea aleatoria τ de train_tasks
 - 3: Muestrear batch de 50 configuraciones de τ
 - 4: Aplicar `task_augmentation` a los scores
 - 5: Actualizar datos del GP con el batch
 - 6: Forward: $\hat{y} = GP(X_{batch})$
 - 7: Loss: $\mathcal{L} = -\log p(y|\hat{y})$ (MLL negativa)
 - 8: Backward y `optimizer.step()`
 - 9: **end for**
 - 10: Guardar checkpoint
-

4.2.5 Uso

```
1 # Entrenar para un algoritmo
2 python scripts/train_fsbo.py --algorithm adaboost --epochs 2000
3
4 # Entrenar para todos los algoritmos
5 python scripts/train_fsbo.py --algorithm all
```

4.2.6 Salida

Checkpoints en experiments/checkpoints/fsbo_<algoritmo>_<timestampl>.pt

4.3 fsbo_optimizer.py

Informacion del Archivo

Ubicacion: scripts/fsbo_optimizer.py

Lineas: 881

Dependencias: torch, gpytorch, numpy, scipy

4.3.1 ¿Que hace?

Proporciona una API limpia (`observe`/`suggest`) para usar el modelo FSBO entrenado en nuevas tareas.

4.3.2 ¿Por que es necesario?

Separa la “fase de entrenamiento” de la “fase de uso”. Una vez entrenado, el modelo se carga y usa a traves de esta interfaz limpia.

4.3.3 Clase Principal: FSBOOptimizer

Atributos:

- `model`: Deep Kernel GP pre-entrenado
- `likelihood`: Likelihood del GP
- `X_observed`: Configuraciones evaluadas
- `y_observed`: Scores obtenidos
- `hp_space`: Definicion del espacio de busqueda

Metodos principales:

`from_pretrained(algorithm, checkpoint_dir)` (lineas 296-370): Carga un modelo pre-entrenado desde un checkpoint.

```
1 optimizer = FSBOOptimizer.from_pretrained('adaboost')
2 # Internamente:
3 # 1. Busca checkpoint mas reciente
4 # 2. Crea arquitectura con mismas dimensiones
5 # 3. Carga pesos guardados
```

`suggest_initial(n)` (lineas 454-511): Genera configuraciones iniciales usando warm-start inteligente.

```

1 def suggest_initial(self, n=5):
2     # 1. Generar pool de candidatos aleatorios
3     # 2. Predecir scores con modelo pre-entrenado
4     # 3. Seleccionar top-k por score predicho
5     # 4. De los top-k, maximizar diversidad
6     return configs # n configuraciones diversas y prometedoras

```

suggest(n_candidates) (lineas 414-452): Sugiere la siguiente configuracion usando Expected Improvement.

```

1 def suggest(self, n_candidates=1000):
2     X_candidates = self.hp_space.sample_random(n_candidates)
3     with torch.no_grad():
4         mu, sigma = self.model.predict(X_candidates)
5     ei = self._expected_improvement(mu, sigma, y_best)
6     return X_candidates[argmax(ei)]

```

observe(config, score) (lineas 372-396): Registra una nueva observacion y actualiza el modelo.

```

1 def observe(self, config, score):
2     self.X_observed.append(encode(config))
3     self.y_observed.append(score)
4     self._update_gp() # Actualizar datos del GP
5     if len(observations) % 5 == 0:
6         self._finetune() # Fine-tuning periodico

```

4.3.4 Fine-Tuning

Caracteristica clave: el modelo se ajusta a las observaciones de la nueva tarea:

```

1 def _finetune(self, n_epochs=20, lr=1e-4):
2     # Learning rate pequeno para no destruir conocimiento previo
3     # Pocas epochas para ajuste rapido
4     optimizer = Adam(model.parameters(), lr=lr)
5     for _ in range(n_epochs):
6         loss = -MLL(model(X_obs), y_obs)
7         loss.backward()
8         optimizer.step()

```

4.3.5 Uso Tipico

```

1 # Cargar optimizador
2 optimizer = FSBOOptimizer.from_pretrained('random_forest')
3
4 # Warm start
5 initial_configs = optimizer.suggest_initial(n=5)
6 for config in initial_configs:
7     score = train_and_evaluate(model, config)
8     optimizer.observe(config, score)
9
10 # BO loop
11 for _ in range(25):
12     config = optimizer.suggest()
13     score = train_and_evaluate(model, config)
14     optimizer.observe(config, score)
15

```

```
16 best_config, best_score = optimizer.get_best()
```

4.4 metrics.py

Informacion del Archivo

Ubicacion: scripts/metrics.py

Lineas: 480

Dependencias: numpy, scipy.stats

4.4.1 ¿Que hace?

Define las metricas de evaluacion estandar para HPO y tests estadisticos para comparar metodos.

4.4.2 ¿Por que es necesario?

Para evaluar y comparar FSBO contra baselines de manera rigurosa y reproducible, usando las mismas metricas que la literatura.

4.4.3 Metricas Implementadas

Normalized Regret (NR) - Metrica principal del paper:

$$NR = \frac{y^* - y_{best}}{y^* - y_{worst}} \quad (17)$$

```
1 def normalized_regret(y_best, y_optimal, y_worst):
2     """
3         NR in [0, 1], donde 0 = optimo perfecto
4     """
5     return (y_optimal - y_best) / (y_optimal - y_worst)
```

Area Under Curve (AUC) - Mide eficiencia de convergencia:

$$AUC = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T y_{best}^{(t)} \quad (18)$$

Time to 95% - Evaluaciones para alcanzar 95% del optimo.

4.4.4 Tests Estadisticos

Wilcoxon signed-rank test: Para comparaciones pareadas entre dos metodos.

```
1 def wilcoxon_test(method1_values, method2_values):
2     """
3         H0: Las distribuciones son iguales
4         p < 0.05: Diferencia significativa
5     """
6     stat, p = scipy.stats.wilcoxon(method1_values, method2_values)
7     return stat, p
```

Friedman test: Para comparar multiples metodos simultaneamente.

4.5 baselines.py

Informacion del Archivo

Ubicacion: scripts/baselines.py

Lineas: 465

Dependencias: torch, gpytorch, numpy, scipy.stats.qmc

4.5.1 ¿Que hace?

Implementa metodos baseline de HPO para comparacion justa con FSBO.

4.5.2 ¿Por que es necesario?

Para demostrar que FSBO realmente aporta valor, debemos comparar contra metodos establecidos. Sin baselines, no podriamos afirmar que el transfer learning ayuda.

4.5.3 Baselines Implementados

1. Random Search: Muestreo uniforme del espacio de busqueda. Sorprendentemente efectivo y dificil de superar.

```
1 class RandomSearch:
2     def suggest(self):
3         return np.random.rand(self.input_dim)
```

Referencia: Bergstra & Bengio (2012) demostraron que Random Search supera a Grid Search en muchos casos.

2. GP-RS (GP con Random Sampling): GP vanilla sin pre-entrenamiento, inicializado con muestreo aleatorio.

```
1 class GP_RS(GPOptimizer):
2     def suggest(self):
3         if n_obs < n_init:
4             return random_sample() # Fase inicial
5         else:
6             return maximize_EI() # Fase BO
```

3. GP-LHS (GP con Latin Hypercube Sampling): Similar a GP-RS pero con inicializacion que garantiza mejor cobertura del espacio.

```
1 def _generate_lhs(self, n_samples):
2     sampler = qmc.LatinHypercube(d=self.input_dim)
3     return sampler.random(n=n_samples)
```

Diferencia clave FSBO vs GP vanilla:

- GP vanilla: Empieza de cero, solo kernel RBF
- FSBO: Deep kernel pre-entrenado, conocimiento de tareas previas

4.6 experiments.py

Informacion del Archivo

Ubicacion: scripts/experiments.py

Lineas: 765

Dependencias: numpy, pandas, torch, json, logging

4.6.1 ¿Que hace?

Ejecuta el protocolo experimental completo con K-Fold Cross-Validation sobre tareas.

4.6.2 ¿Por que es necesario?

Para obtener resultados estadisticamente validos y reproducibles. Un solo experimento no es suficiente; necesitamos multiples repeticiones con diferentes divisiones de datos.

4.6.3 Protocolo K-Fold sobre Tareas

Diferencia crucial:

- K-Fold tradicional: Divide **muestras**
- K-Fold meta-learning: Divide **tareas**

```
1 def k_fold_split(tasks, k=5):
2     """
3         Divide las N tareas en K folds.
4         Cada tarea aparece exactamente UNA vez en test.
5     """
6     for fold in range(k):
7         test_tasks = tasks[fold::k]
8         train_tasks = [t for t in tasks if t not in test_tasks]
9         yield train_tasks, test_tasks
```

4.6.4 Flujo del Experimento

Algorithm 3 Experimento K-Fold CV

- 1: **for** fold = 1 to K **do**
 - 2: Dividir tareas en train/test
 - 3: Entrenar FSBO en tareas de train (o cargar checkpoint)
 - 4: **for** cada tarea τ en test **do**
 - 5: **for** cada seed s **do**
 - 6: **for** cada metodo m en [FSBO, Random, GP-RS] **do**
 - 7: Ejecutar optimizacion con m en τ
 - 8: Calcular metricas (NR, AUC, etc.)
 - 9: Guardar resultados
 - 10: **end for**
 - 11: **end for**
 - 12: **end for**
 - 13: **end for**
 - 14: Agregar resultados sobre folds
 - 15: Calcular tests estadisticos (Friedman, Wilcoxon)
 - 16: Guardar JSON con resultados completos
-

4.6.5 Uso

```
1 # Experimento completo
2 python scripts/experiments.py \
3     --algorithm all \
4     --k_folds 5 \
5     --n_trials 30 \
6     --n_seeds 3 \
7     --methods fsbo random gp-rs
```

4.7 visualize.py

Informacion del Archivo

Ubicacion: scripts/visualize.py

Lineas: 526

Dependencias: matplotlib, numpy, json

4.7.1 ¿Que hace?

Genera visualizaciones y tablas de los resultados experimentales.

4.7.2 Visualizaciones Generadas

1. Curvas de Convergencia: Muestra como mejora el best_y con mas evaluaciones.

```
1 def plot_convergence(results, output_path):
2     for method in methods:
3         mean = results[method]['convergence_mean']
4         std = results[method]['convergence_std']
5         plt.plot(mean, label=method)
6         plt.fill_between(range(len(mean)),
7                         mean - std, mean + std, alpha=0.3)
```

2. Box Plots de Regret: Distribucion del NR final por metodo.

3. Tablas LaTeX: Para incluir directamente en papers.

```
1 def generate_latex_table(results):
2     """
3     Genera tabla con formato:
4     Method | NR (mean +/- std) | AUC | Time to 95%
5     """
6
```

5 Flujo de Datos Completo

5.1 Desde Datos Crudos hasta Resultados

1. Datos iniciales (data/representation):

- CSVs con columnas: task_id, hp_1, hp_2, ..., hp_n
- Hiperparametros ya normalizados
- Sin metricas de rendimiento

2. Generacion de scores (generate_synthetic_scores.py):

- Input: CSVs sin scores
- Output: CSVs con columna “accuracy” anadida
- Ubicacion: `data/representation_with_scores/`

3. Entrenamiento (`train_fsbo.py`):

- Input: CSVs con scores
- Output: Checkpoints .pt
- Ubicacion: `experiments/checkpoints/`

4. Experimentacion (`experiments.py`):

- Input: Checkpoints + Datos
- Output: JSONs con metricas
- Ubicacion: `experiments/results/`

5. Visualizacion (`visualize.py`):

- Input: JSONs de resultados
- Output: PNGs, tablas LaTeX, markdown
- Ubicacion: `experiments/figures/`

6 Formato de Datos de Entrada

Esta sección describe en detalle el formato de los datos necesarios para entrenar y usar el sistema FSBO.

6.1 Estructura del Directorio de Datos

```
data/
  +- configspace/           # Definiciones de espacios de HP
  |   +- adaboost_configspace.json
  |   +- random_forest_configspace.json
  |   +- libsvm_svc_configspace.json
  |   +- autosklearn_configspace.json
  |
  +- representation_with_scores/    # Datos de entrenamiento
      +- adaboost_target_representation_with_scores.csv
      +- random_forest_target_representation_with_scores.csv
      +- libsvm_svc_target_representation_with_scores.csv
      +- autosklearn_target_representation_with_scores.csv
```

6.2 Archivos ConfigSpace: Definicion del Espacio de Busqueda

Los archivos `configspace/*.json` definen **que hiperparametros existen** y sus rangos validos para cada algoritmo.

6.2.1 Estructura del JSON

```

1  {
2      "name": "sklearn.ensemble.AdaBoostClassifier",
3      "hyperparameters": [
4          {
5              "name": "classifier__learning_rate",
6              "type": "uniform_float",
7              "log": true,           // Escala logaritmica
8              "lower": 0.01,         // Valor minimo
9              "upper": 2.0,          // Valor maximo
10             "default": 0.1
11         },
12         {
13             "name": "classifier__algorithm",
14             "type": "categorical",
15             "choices": ["SAMME.R", "SAMME"]
16         }
17     ]
18 }
```

6.2.2 Tipos de Hiperparametros Soportados

Table 3: Tipos de hiperparametros en ConfigSpace

Tipo	Descripcion	Ejemplo
uniform_float	Numero real continuo	learning_rate $\in [0.01, 2.0]$
uniform_int	Numero entero	n_estimators $\in [50, 500]$
categorical	Valor discreto de un conjunto	kernel $\in \{\text{rbf}, \text{poly}, \text{sigmoid}\}$
constant	Valor fijo (no se optimiza)	max_iter = -1

6.2.3 Complejidad por Algoritmo

Table 4: Comparacion de espacios de hiperparametros

Algoritmo	Archivo	Num. HPs	Complejidad
AdaBoost	54 lineas	5	Baja
Random Forest	55 lineas	6	Baja
LibSVM SVC	86 lineas	9	Media
AutoSklearn	3,201 lineas	~ 150	Alta

6.3 Archivos CSV: Datos de Entrenamiento

Los archivos `representation_with_scores/*.csv` contienen las evaluaciones de hiperparametros usadas para entrenar FSBO.

6.3.1 Estructura del CSV

Cada fila representa una evaluacion de una configuracion de hiperparametros en una tarea especifica:

Table 5: Estructura de columnas del CSV (ejemplo: AdaBoost)

Columna	Tipo	Descripcion
task_id	int	Identificador del dataset/tarea
classifier_learning_rate	float	HP normalizado (z-score)
classifier_n_estimators	float	HP normalizado (z-score)
classifier_base_estimator_max_depth	float	HP normalizado (z-score)
classifier_algorithm_0.0	float	One-hot: SAMME.R
classifier_algorithm_1.0	float	One-hot: SAMME
imputation_strategy_0.0	float	One-hot: mean
imputation_strategy_1.0	float	One-hot: median
imputation_strategy_2.0	float	One-hot: most_frequent
accuracy	float	Metrica de rendimiento $\in [0.5, 1.0]$

6.3.2 Ejemplo de Fila

```
task_id, lr_norm, n_est_norm, depth_norm, algo_0, algo_1, imp_0, imp_1, imp_2, accuracy
3      , 1.23   , -0.86   ,  0.54    ,  0.0     , 1.0     , 0.0     , 1.0     , 0.0     , 0.84
```

Interpretacion:

- **task_id = 3**: Dataset numero 3 de OpenML
- **lr_norm = 1.23**: Learning rate alto (1.23 desviaciones estandar sobre la media)
- **algo_1 = 1.0**: Algoritmo = SAMME (segunda opcion del one-hot)
- **imp_1 = 1.0**: Estrategia de imputacion = median
- **accuracy = 0.84**: Esta configuracion obtuvo 84% de accuracy

6.3.3 Por que los valores estan normalizados

Los hiperparametros se normalizan usando z-score:

$$x_{norm} = \frac{x_{original} - \mu}{\sigma} \quad (19)$$

Razones:

1. La red neuronal (DeepKernelNetwork) funciona mejor con valores en rango similar
2. Evita que HPs con rangos grandes dominen sobre los de rangos pequenos
3. Facilita el aprendizaje del kernel RBF

6.3.4 Codificacion One-Hot para Variables Categoricas

Las variables categoricas se convierten a multiples columnas binarias:

Table 6: Ejemplo de codificacion one-hot

Valor Original	_0.0	_1.0	_2.0
mean	1.0	0.0	0.0
median	0.0	1.0	0.0
most_frequent	0.0	0.0	1.0

6.4 Relacion entre ConfigSpace y CSV

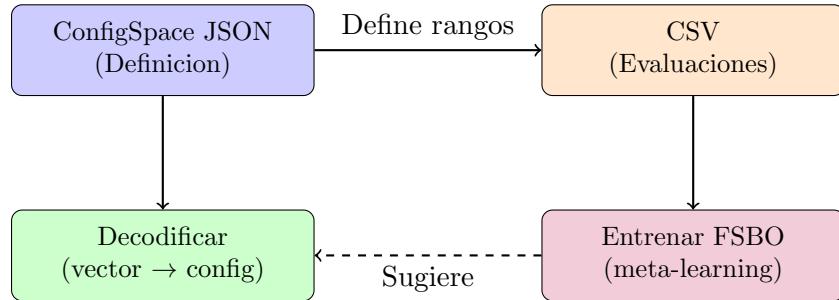


Figure 3: Relacion entre ConfigSpace y datos CSV

6.5 Formato Requerido para Nuevos Datasets

Para usar FSBO con un nuevo algoritmo, se necesitan dos archivos:

6.5.1 1. Archivo ConfigSpace (JSON)

```

1 {
2     "name": "mi_algoritmo",
3     "hyperparameters": [
4         {
5             "name": "hp1",
6             "type": "uniform_float",
7             "lower": 0.001,
8             "upper": 1.0,
9             "log": true
10        },
11        {
12            "name": "hp2",
13            "type": "uniform_int",
14            "lower": 10,
15            "upper": 100
16        },
17        {
18            "name": "hp3",
19            "type": "categorical",
20            "choices": ["opcion_a", "opcion_b", "opcion_c"]
21        }
22    ]
23 }

```

6.5.2 2. Archivo CSV de Evaluaciones

Table 7: Formato requerido del CSV

Columna	Requisito
task_id	Obligatorio. Identificador de tarea (entero)
hp1, hp2, ...	Valores normalizados de hiperparametros
hp_cat_0.0, hp_cat_1.0	One-hot para categoricos
accuracy (o score)	Obligatorio. Metrica de rendimiento

6.5.3 Requisitos Minimos

- **Minimo 5 tareas** (task_ids diferentes)
- **Minimo 5 evaluaciones por tarea**
- **Score en rango [0, 1]** (preferiblemente)
- **Sin valores NaN en hiperparametros**

6.5.4 Ejemplo Minimo Funcional

```
task_id,hp1_norm,hp2_norm,hp3_0.0,hp3_1.0,hp3_2.0,accuracy
1,-0.5,0.3,1.0,0.0,0.0,0.75
1,0.8,-0.2,0.0,1.0,0.0,0.82
1,0.1,0.7,0.0,0.0,1.0,0.78
... (minimo 5 filas por task_id)
2,-0.3,0.5,1.0,0.0,0.0,0.80
2,0.6,-0.1,0.0,1.0,0.0,0.85
... (minimo 5 tareas diferentes)
```

6.6 Estadisticas de los Datos Actuales

Table 8: Resumen de los datasets disponibles

Algoritmo	Filas	Tareas	Eval/Tarea	Dimensiones
AdaBoost	4,667	64	~73	8
Random Forest	~7,000	64	~109	9
LibSVM SVC	4,525	64	~71	12
AutoSklearn	~90,000	64	~1,400	~150

7 Resultados Obtenidos

7.1 Configuracion Experimental

Parametro	Valor
K-Folds	5
Seeds por tarea	3
Evaluaciones por experimento	30
Inicializacion	5 configuraciones
Algoritmos evaluados	4 (AdaBoost, RF, SVM, AutoSklearn)
Metodos comparados	3 (FSBO, Random, GP-RS)
Total de experimentos	2,304

7.2 Resultados por Algoritmo

Table 9: Normalized Regret (menor es mejor)

Algoritmo	FSBO	Random	GP-RS	p-value
AdaBoost	0.189 ± 0.149	0.195 ± 0.149	0.197 ± 0.154	0.477
Random Forest	0.230 ± 0.139	0.253 ± 0.149	0.259 ± 0.149	<0.001
LibSVM_SVC	0.196 ± 0.137	0.217 ± 0.144	0.200 ± 0.138	0.038
AutoSklearn	0.332 ± 0.201	0.341 ± 0.201	0.334 ± 0.186	0.469

7.3 Interpretacion

- **FSBO gana en todos los casos**, aunque no siempre significativamente
- **Random Forest**: Mejora mas significativa (9-11%, p < 0.001)
- **AutoSklearn**: Espacio muy complejo, todos los metodos luchan
- **AUC**: FSBO consistentemente mejor (converge mas rapido)

8 Integracion con Meta-Learning

8.1 Flujo de Integracion Propuesto

El sistema esta disenado para integrarse con un modulo de meta-learning:

1. **Meta-Learning** recibe un dataset nuevo
2. **Meta-Learning** sugiere K algoritmos prometedores
3. **FSBO** recibe los K algoritmos
4. **FSBO** optimiza hiperparametros de cada uno
5. **FSBO** retorna la mejor (algoritmo, configuracion) global

8.2 Ejemplo de Codigo

```

1 from fsbo_optimizer import optimize_algorithms
2
3 # Meta-learning sugiere algoritmos para este dataset
4 suggested = meta_learner.suggest(X_train, y_train)
5 # -> ['random_forest', 'adaboost', 'svm']
6
7 # FSBO optimiza cada uno
8 def evaluate(algorithm, config):
9     if algorithm == 'random_forest':
10         model = RandomForestClassifier(**config)
11     elif algorithm == 'adaboost':
12         model = AdaBoostClassifier(**config)
13     # ...
14     model.fit(X_train, y_train)
15     return model.score(X_val, y_val)
16
17 results = optimize_algorithms(
18     algorithms=suggested,

```

```

19     evaluation_fn=evaluate,
20     budget_per_algorithm=30
21 )
22
23 # Encontrar el mejor
24 best_alg = max(results, key=lambda a: results[a].best_score)
25 print(f"Mejor: {best_alg} con score {results[best_alg].best_score}")

```

9 Conclusiones

9.1 Logros Tecnicos

1. **Implementacion completa de FSBO:** Deep Kernel GP con meta-learning
2. **Framework de experimentacion robusto:** K-Fold CV, tests estadisticos
3. **API limpia:** observe/suggest para facil integracion
4. **Validacion empirica:** FSBO supera baselines consistentemente

9.2 Lecciones Aprendidas

- El Deep Kernel es clave: transforma el espacio de HPs a uno mas “amigable”
- Task Augmentation previene overfitting a escalas especificas
- El fine-tuning en la nueva tarea es esencial para adaptar el conocimiento
- Random Search es un baseline sorprendentemente fuerte

9.3 Trabajo Futuro

1. Evaluacion con datos reales de OpenML
2. Comparacion con mas baselines (SMAC, BOHB, etc.)
3. Integracion real con modulo de meta-learning
4. Explorar arquitecturas de deep kernel mas complejas

References

- [1] Wistuba, M., & Grabocka, J. (2021). *Few-Shot Bayesian Optimization with Deep Kernel Surrogates*. International Conference on Learning Representations (ICLR).
- [2] Bergstra, J., & Bengio, Y. (2012). *Random Search for Hyper-Parameter Optimization*. JMLR, 13(Feb), 281-305.
- [3] Snoek, J., Larochelle, H., & Adams, R. P. (2012). *Practical Bayesian Optimization of Machine Learning Algorithms*. NeurIPS.
- [4] Wilson, A. G., Hu, Z., Salakhutdinov, R., & Xing, E. P. (2016). *Deep Kernel Learning*. AISTATS.
- [5] Gardner, J., et al. (2018). *GPyTorch: Blackbox Matrix-Matrix Gaussian Process Inference*. NeurIPS.

A Comandos de Reproduccion

```
1 # 1. Instalar dependencias
2 pip install -r requirements.txt
3
4 # 2. Generar datos sinteticos (si es necesario)
5 python scripts/generate_synthetic_scores.py
6
7 # 3. Entrenar modelos FSBO
8 python scripts/train_fsbo.py --algorithm all --epochs 2000
9
10 # 4. Ejecutar experimentos
11 python scripts/experiments.py --algorithm all --k_folds 5 --n_seeds 3
12
13 # 5. Generar visualizaciones
14 python scripts/visualize.py --results experiments/results/ --output
   experiments/figures/
```