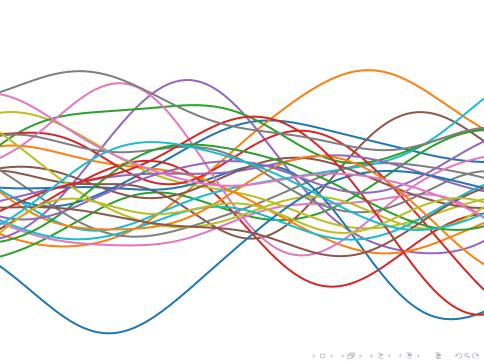
# Лекция 8. Гауссовские процессы. Байесовская оптимизация

#### Петр Мостовский

МКН СП6ГУ

7 апреля 2022





Черный ящик f(x) — сложновычислимая функция. Градиенты f, как правило, недоступны

- ▶ Черный ящик f(x) сложновычислимая функция. Градиенты f, как правило, недоступны
- Хотим найти

$$x_* = \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} f(x)$$

- Черный ящик f(x) сложновычислимая функция. Градиенты f, как правило, недоступны
- ▶ Хотим найти

$$x_* = \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} f(x)$$

Некоторые стратегии

- ▶ Черный ящик f(x) сложновычислимая функция. Градиенты f, как правило, недоступны
- ▶ Хотим найти

$$x_* = \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} f(x)$$

- Некоторые стратегии
  - lacktriangle Grid search. Перестает работать с ростом размерности  ${\mathcal X}$

- Черный ящик f(x) сложновычислимая функция. Градиенты f, как правило, недоступны
- Хотим найти

$$x_* = \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} f(x)$$

- ▶ Некоторые стратегии
  - lacktriangle Grid search. Перестает работать с ростом размерности  ${\mathcal X}$
  - ightharpoonup Random search. Никак не использует доступную информацию об f

- Черный ящик f(x) сложновычислимая функция. Градиенты f, как правило, недоступны
- ▶ Хотим найти

$$x_* = \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} f(x)$$

- ▶ Некоторые стратегии
  - lacktriangle Grid search. Перестает работать с ростом размерности  ${\mathcal X}$
  - ightharpoonup Random search. Никак не использует доступную информацию об f
  - ▶ Численные градиенты. Вычисление градиента так же дорого, как вычисление самой f. Использует только последние несколько значений f

▶ Качество обученной нейросети на валидационном датасете

► Качество обученной нейросети на валидационном датасете (параметры: learning rate, momentum, batch size и т.д.)

- ► Качество обученной нейросети на валидационном датасете (параметры: learning rate, momentum, batch size и т.д.)
- ▶ Дизайн экспериментов

- ► Качество обученной нейросети на валидационном датасете (параметры: learning rate, momentum, batch size и т.д.)
- ▶ Дизайн экспериментов
- ▶ Дизайн машин (например, крыла самолета)

- ► Качество обученной нейросети на валидационном датасете (параметры: learning rate, momentum, batch size и т.д.)
- ▶ Дизайн экспериментов
- ▶ Дизайн машин (например, крыла самолета)
- et cetera...

▶ f сложновычислима

- ▶ f сложновычислима
- ightharpoonup f непрерывная, но у нее нет особой структуры (например, выпуклости)

- ▶ f сложновычислима
- ightharpoonup f непрерывная, но у нее нет особой структуры (например, выпуклости)
- $\triangleright \mathcal{X}$  компактно
- ightharpoonup градиенты f недоступны

- ▶ f сложновычислима
- ightharpoonup f непрерывная, но у нее нет особой структуры (например, выпуклости)
- $\triangleright \mathcal{X}$  компактно
- ightharpoonup градиенты f недоступны
- ▶ значения f могут быть шумными

#### Байесовская оптимизация

▶ Поскольку f — черный ящик, будем воспринимать f как случайную (введем prior p(f))

#### Байесовская оптимизация

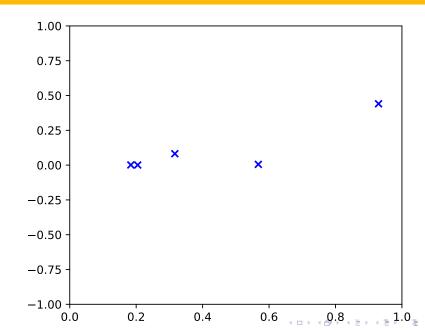
- ▶ Поскольку f черный ящик, будем воспринимать f как случайную (введем prior p(f))
- **Р** Будем обновлять prior с помощью теоремы Байеса, учитывая наблюдаемые значения  $f(x_1), f(x_2), \ldots$

#### Байесовская оптимизация

- ▶ Поскольку f черный ящик, будем воспринимать f как случайную (введем prior p(f))
- **•** Будем обновлять prior с помощью теоремы Байеса, учитывая наблюдаемые значения  $f(x_1), f(x_2), \ldots$
- ightharpoonup Будем искать нужный нам аргмаксимум  $x_*$  исходя из posterior

$$p(f(x_*)|f(x_1), f(x_2),...)$$

## Иллюстративный пример



lacktriangle Нам нужно ввести какое-то априорное распределение на f

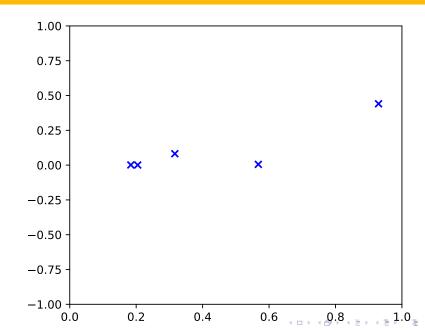
- lacktriangle Нам нужно ввести какое-то априорное распределение на f
- ► Какой подходящий prior выбрать?

- lacktriangle Нам нужно ввести какое-то априорное распределение на f
- ▶ Какой подходящий prior выбрать? Гауссовский процесс!

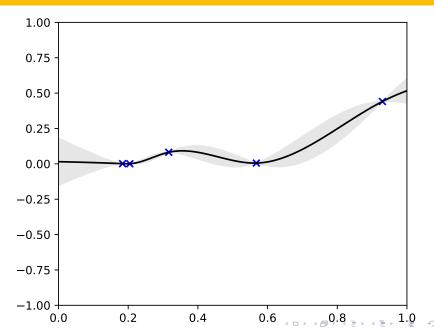
- lacktriangle Нам нужно ввести какое-то априорное распределение на f
- ▶ Какой подходящий prior выбрать? Гауссовский процесс!
- ▶ Используем информацию о всех имеющихся значениях f

- lacktriangle Нам нужно ввести какое-то априорное распределение на f
- ► Какой подходящий prior выбрать? Гауссовский процесс!
- ▶ Используем информацию о всех имеющихся значениях f
- Используем апостериорное распределение, чтобы выбрать кандидата на максимум

## Иллюстративный пример



## Иллюстративный пример



▶ Как выбрать кандидата на максимум?

- ▶ Как выбрать кандидата на максимум?
- У нас есть целое апостериорное распределение, давайте используем его

- Как выбрать кандидата на максимум?
- У нас есть целое апостериорное распределение, давайте используем его
- ► Например, выберем  $x_*$  такой, что

$$x_* = \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} P(f(x) \ge f^+ + \varepsilon),$$

где  $f^+$  – текущее наилучшее значение

- Как выбрать кандидата на максимум?
- У нас есть целое апостериорное распределение, давайте используем его
- ► Например, выберем  $x_*$  такой, что

$$x_* = \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} P(f(x) \ge f^+ + \varepsilon),$$

где  $f^+$  – текущее наилучшее значение

Функция

$$\alpha(x; f^+) := P(h(x) \ge f^+ + \varepsilon)$$

называется Probability of Improvement

- Как выбрать кандидата на максимум?
- У нас есть целое апостериорное распределение, давайте используем его
- ► Например, выберем  $x_*$  такой, что

$$x_* = \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} P(f(x) \ge f^+ + \varepsilon),$$

где  $f^+$  – текущее наилучшее значение

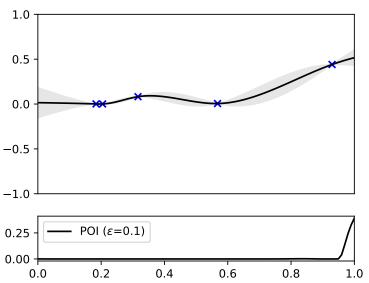
Функция

$$\alpha(x; f^+) := P(h(x) \ge f^+ + \varepsilon)$$

называется Probability of Improvement

 Для GP prior, Probability of Improvement считается аналитически

## Иллюстративный пример



ightharpoonup Более общо, вводится acqusition function lpha(x), которая

- lacktriangle Более общо, вводится acqusition function lpha(x), которая
  - ▶ просто вычислима

- **•** Более общо, вводится acqusition function  $\alpha(x)$ , которая
  - ▶ просто вычислима
  - отражает наши представления о том, где находится кандидат на максимум, исходя из апостериорного распределения

- ightharpoonup Более общо, вводится acqusition function lpha(x), которая
  - ▶ просто вычислима
  - отражает наши представления о том, где находится кандидат на максимум, исходя из апостериорного распределения
- ► Примеры acquisition function

- ightharpoonup Более общо, вводится acqusition function lpha(x), которая
  - просто вычислима
  - отражает наши представления о том, где находится кандидат на максимум, исходя из апостериорного распределения
- ▶ Примеры acquisition function :
  - Expected Improvement

$$\alpha_{EI}(x) = \mathbb{E}(\max(0, h(x) - f^+)|\mathcal{D})$$

- ightharpoonup Более общо, вводится acqusition function lpha(x), которая
  - просто вычислима
  - отражает наши представления о том, где находится кандидат на максимум, исходя из апостериорного распределения
- ▶ Примеры acquisition function :
  - Expected Improvement

$$\alpha_{EI}(x) = \mathbb{E}(\max(0, h(x) - f^+)|\mathcal{D})$$

► Upper Confidence Bound

$$\alpha_{UCB}(x) = \mu(x) + \lambda \sigma(x)$$

- ightharpoonup Более общо, вводится acqusition function lpha(x), которая
  - просто вычислима
  - отражает наши представления о том, где находится кандидат на максимум, исходя из апостериорного распределения
- ▶ Примеры acquisition function :
  - Expected Improvement

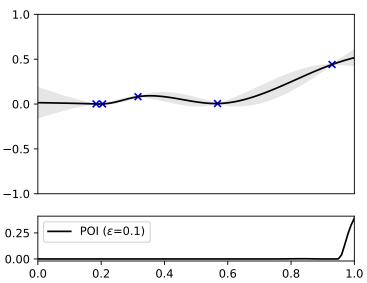
$$\alpha_{EI}(x) = \mathbb{E}(\max(0, h(x) - f^+)|\mathcal{D})$$

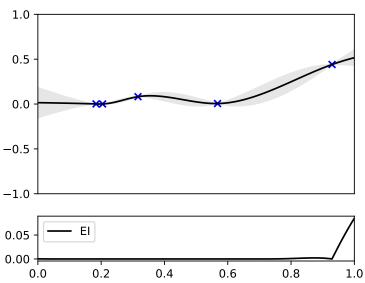
Upper Confidence Bound

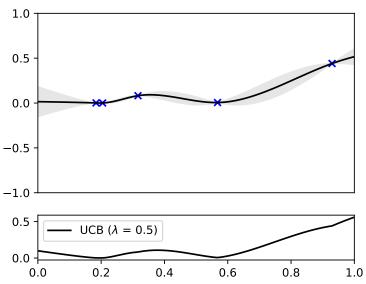
$$\alpha_{UCB}(x) = \mu(x) + \lambda \sigma(x)$$

И другие...









$$\alpha_{POI}(x; f^+) := P(h(x) \ge f^+ + \varepsilon) =$$

$$\alpha_{POI}(x; f^+) := P(h(x) \ge f^+ + \varepsilon) =$$

$$P(\mu(x) + \sigma(x)u \ge f^+ + \varepsilon) =$$

$$\alpha_{POI}(x; f^{+}) := P(h(x) \ge f^{+} + \varepsilon) =$$

$$P(\mu(x) + \sigma(x)u \ge f^{+} + \varepsilon) =$$

$$P(u \ge \frac{f^{+} + \varepsilon - \mu(x)}{\sigma(x)}) =$$

$$\alpha_{POI}(x; f^{+}) := P(h(x) \ge f^{+} + \varepsilon) =$$

$$P(\mu(x) + \sigma(x)u \ge f^{+} + \varepsilon) =$$

$$P(u \ge \frac{f^{+} + \varepsilon - \mu(x)}{\sigma(x)}) =$$

$$1 - P\left(u \le \frac{f^{+} + \varepsilon - \mu(x)}{\sigma(x)}\right) =$$

$$\alpha_{POI}(x; f^{+}) := P(h(x) \ge f^{+} + \varepsilon) =$$

$$P(\mu(x) + \sigma(x)u \ge f^{+} + \varepsilon) =$$

$$P(u \ge \frac{f^{+} + \varepsilon - \mu(x)}{\sigma(x)}) =$$

$$1 - P\left(u \le \frac{f^{+} + \varepsilon - \mu(x)}{\sigma(x)}\right) =$$

$$\Phi\left(-\frac{f^{+} + \varepsilon - \mu(x)}{\sigma(x)}\right)$$

$$\alpha_{EI}(x) = \mathbb{E}(\max(0, h(x) - f^+) =$$

$$lpha_{EI}(x) = \mathbb{E}(\max(0,h(x)-f^+) = \int_{-\infty}^{\infty} \max(0,\mu(x)+\sigma(x)u-f^+)\phi(u)du =$$

$$lpha_{EI}(x) = \mathbb{E}(\max(0, h(x) - f^+)) =$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \max(0, \mu(x) + \sigma(x)u - f^+)\phi(u)du =$$

$$\left[z := \frac{f^+ - \mu(x)}{\sigma(x)}\right]$$

$$\alpha_{EI}(x) = \mathbb{E}(\max(0, h(x) - f^+) =$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \max(0, \mu(x) + \sigma(x)u - f^+)\phi(u)du =$$

$$\left[z := \frac{f^+ - \mu(x)}{\sigma(x)}\right]$$

$$\int_{z}^{\infty} (\mu(x) - f^+ + \sigma(x)u)\phi(u)du =$$

$$\alpha_{EI}(x) = \mathbb{E}(\max(0, h(x) - f^+) =$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \max(0, \mu(x) + \sigma(x)u - f^+)\phi(u)du =$$

$$\left[z := \frac{f^+ - \mu(x)}{\sigma(x)}\right]$$

$$\int_{z}^{\infty} (\mu(x) - f^+ + \sigma(x)u)\phi(u)du =$$

$$(\mu(x) - f^+)\Phi(-z) + \sigma(x)\int_{z}^{\infty} u\phi(u)du =$$

$$\alpha_{EI}(x) = \mathbb{E}(\max(0, h(x) - f^+) =$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \max(0, \mu(x) + \sigma(x)u - f^+)\phi(u)du =$$

$$\left[z := \frac{f^+ - \mu(x)}{\sigma(x)}\right]$$

$$\int_{z}^{\infty} (\mu(x) - f^+ + \sigma(x)u)\phi(u)du =$$

$$(\mu(x) - f^+)\Phi(-z) + \sigma(x)\int_{z}^{\infty} u\phi(u)du =$$

$$(\mu(x) - f^+)\Phi(-z) + \sigma(x)\phi(z)$$

#### Два режима оптимизации:

► Exploration. "Исследование" областей с высокой неопределенностью.

#### Два режима оптимизации:

- ► Exploration. "Исследование" областей с высокой неопределенностью.
- Exploitation. "Использование" знаний об области с правдоподобным максимумом.

#### Два режима оптимизации:

- Exploration. "Исследование" областей с высокой неопределенностью.
- Exploitation. "Использование" знаний об области с правдоподобным максимумом.
- Exploration/exploitation tradeoff хотим исследовать области с высокой неопределенностью, но не хотим тратить слишком много ресурсов

#### Два режима оптимизации:

- ► Exploration. "Исследование" областей с высокой неопределенностью.
- Exploitation. "Использование" знаний об области с правдоподобным максимумом.
- Exploration/exploitation tradeoff хотим исследовать области с высокой неопределенностью, но не хотим тратить слишком много ресурсов
- ▶ В UCB за tradeoff отвечает \( \lambda \)

$$\alpha_{UCB}(x) = \mu(x) + \lambda \sigma(x)$$

1. Warmup. Получим "начальные" значения  $f(x_1), \dots, f(x_n)$ . Датасет  $\mathcal{D}_n := (x_i, y_i)$ 

- 1. Warmup. Получим "начальные" значения  $f(x_1), \dots, f(x_n)$ . Датасет  $\mathcal{D}_n := (x_i, y_i)$
- 2. Обучим гауссовский процесс на данных  $\mathcal{D}_n$

- 1. Warmup. Получим "начальные" значения  $f(x_1), \ldots, f(x_n)$ . Датасет  $\mathcal{D}_n := (x_i, y_i)$
- 2. Обучим гауссовский процесс на данных  $\mathcal{D}_n$
- 3. Найдем кандидата на максимум  $x_{n+1} := \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} \alpha(x)$

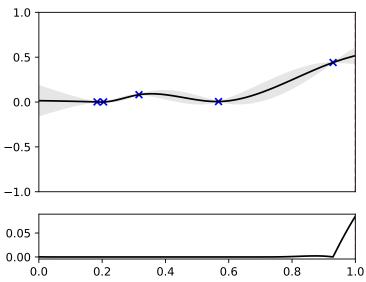
- 1. Warmup. Получим "начальные" значения  $f(x_1), \ldots, f(x_n)$ . Датасет  $\mathcal{D}_n := (x_i, y_i)$
- 2. Обучим гауссовский процесс на данных  $\mathcal{D}_n$
- 3. Найдем кандидата на максимум  $x_{n+1} := \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} \alpha(x)$
- 4. Вычислим значение  $y_{n+1}$  в  $x_{n+1}$

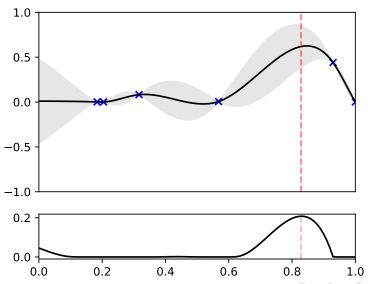
- 1. Warmup. Получим "начальные" значения  $f(x_1), \dots, f(x_n)$ . Датасет  $\mathcal{D}_n := (x_i, y_i)$
- 2. Обучим гауссовский процесс на данных  $\mathcal{D}_n$
- 3. Найдем кандидата на максимум  $x_{n+1} := \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} \alpha(x)$
- 4. Вычислим значение  $y_{n+1}$  в  $x_{n+1}$
- 5. Добавим  $(x_{n+1}, y_{n+1})$  в датасет  $\mathcal{D}_{n+1}$

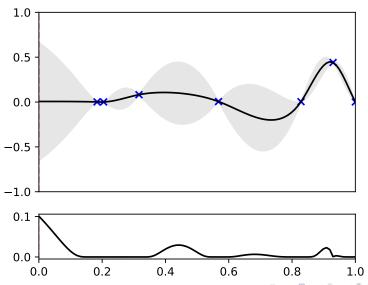
- 1. Warmup. Получим "начальные" значения  $f(x_1), \dots, f(x_n)$ . Датасет  $\mathcal{D}_n := (x_i, y_i)$
- 2. Обучим гауссовский процесс на данных  $\mathcal{D}_n$
- 3. Найдем кандидата на максимум  $x_{n+1} := \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} \alpha(x)$
- 4. Вычислим значение  $y_{n+1}$  в  $x_{n+1}$
- 5. Добавим  $(x_{n+1}, y_{n+1})$  в датасет  $\mathcal{D}_{n+1}$
- 6. Вернемся к пункту 2.

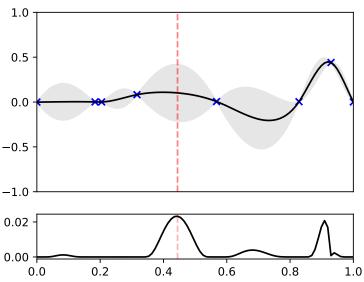
- 1. Warmup. Получим "начальные" значения  $f(x_1), \ldots, f(x_n)$ . Датасет  $\mathcal{D}_n := (x_i, y_i)$
- 2. Обучим гауссовский процесс на данных  $\mathcal{D}_n$
- 3. Найдем кандидата на максимум  $x_{n+1} := \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} \alpha(x)$
- 4. Вычислим значение  $y_{n+1}$  в  $x_{n+1}$
- 5. Добавим  $(x_{n+1}, y_{n+1})$  в датасет  $\mathcal{D}_{n+1}$
- 6. Вернемся к пункту 2.
- 7. ???

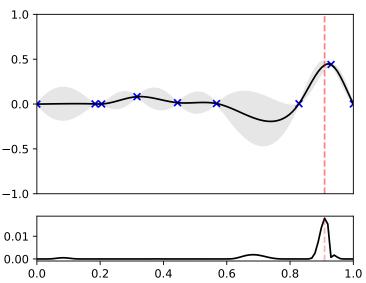
- 1. Warmup. Получим "начальные" значения  $f(x_1), \dots, f(x_n)$ . Датасет  $\mathcal{D}_n := (x_i, y_i)$
- 2. Обучим гауссовский процесс на данных  $\mathcal{D}_n$
- 3. Найдем кандидата на максимум  $x_{n+1} := \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} \alpha(x)$
- 4. Вычислим значение  $y_{n+1}$  в  $x_{n+1}$
- 5. Добавим  $(x_{n+1}, y_{n+1})$  в датасет  $\mathcal{D}_{n+1}$
- 6. Вернемся к пункту 2.
- 7. ???
- 8. PROFIT!

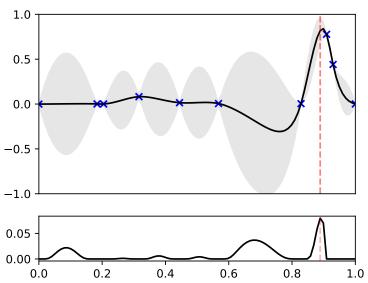


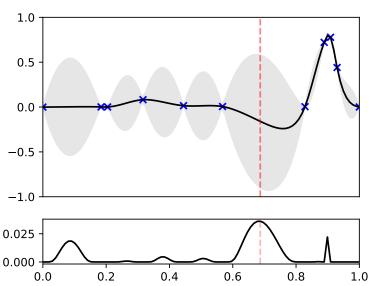


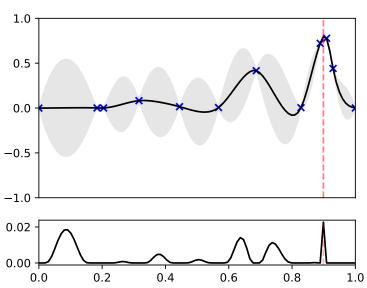


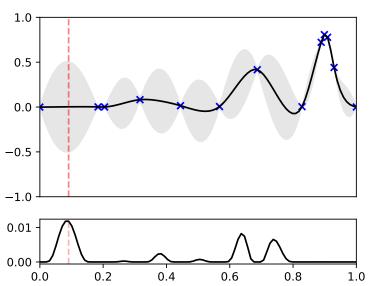


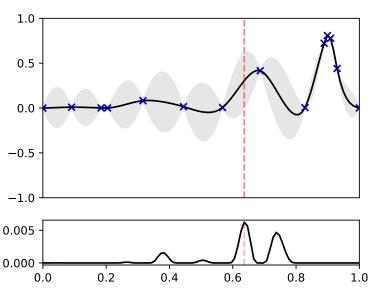


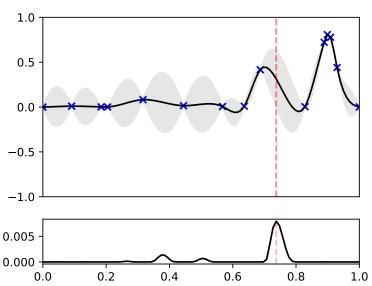


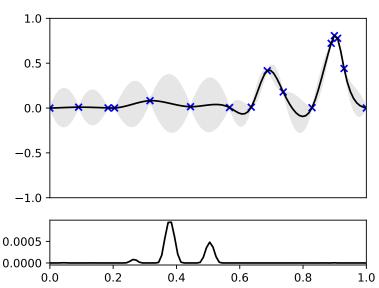


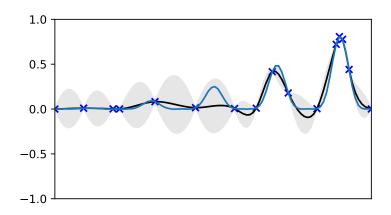












ightharpoonup f случайна, и ее максимум — случайная величина

$$x_* = \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} f(x)$$
  
 $p(x_* | \mathcal{D}) = ?$ 

где  $\mathcal{D}=(x_i,y_i)_{i=1}^n$  — наблюдаемые данные

▶ f случайна, и ее максимум — случайная величина

$$x_* = \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} f(x)$$
  
 $p(x_* | \mathcal{D}) = ?$ 

где  $\mathcal{D} = (x_i, y_i)_{i=1}^n$  — наблюдаемые данные

$$p(x_*|\mathcal{D}) = \int p(x_*|g,\mathcal{D})p(g|\mathcal{D})dg$$

где g — гауссовский процесс,  $p(x_*|g)$  — масса на аргмаксимуме траектории  $g|\mathcal{D}$ .

▶ f случайна, и ее максимум — случайная величина

$$x_* = \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} f(x)$$
  
 $p(x_* | \mathcal{D}) = ?$ 

где  $\mathcal{D}=(x_i,y_i)_{i=1}^n$  — наблюдаемые данные

$$p(x_*|\mathcal{D}) = \int p(x_*|g,\mathcal{D})p(g|\mathcal{D})dg$$

где g — гауссовский процесс,  $p(x_*|g)$  — масса на аргмаксимуме траектории  $g|\mathcal{D}$ .

▶ Thompson sampling

lacktriangledown f случайная величина

$$x_* = \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} f(x)$$
  
 $p(x_* | \mathcal{D}) = ?$ 

где  $\mathcal{D} = (x_i, y_i)_{i=1}^n$  — наблюдаемые данные

$$p(x_*|\mathcal{D}) = \int p(x_*|g,\mathcal{D})p(g|\mathcal{D})dg$$

где g — гауссовский процесс,  $p(x_*|g)$  — масса на аргмаксимуме траектории  $g|\mathcal{D}$ .

- ► Thompson sampling:
  - lacktriangle Сэмплируем траекторию  $g|\mathcal{D}$

lacktriangledown f случайная величина

$$x_* = \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} f(x)$$
  
 $p(x_* | \mathcal{D}) = ?$ 

где  $\mathcal{D}=(x_i,y_i)_{i=1}^n$  — наблюдаемые данные

$$p(x_*|\mathcal{D}) = \int p(x_*|g,\mathcal{D})p(g|\mathcal{D})dg$$

где g — гауссовский процесс,  $p(x_*|g)$  — масса на аргмаксимуме траектории  $g|\mathcal{D}$ .

- ► Thompson sampling:
  - lacktriangle Сэмплируем траекторию  $g|\mathcal{D}$  (формула Матерона)

ightharpoonup f случайная величина

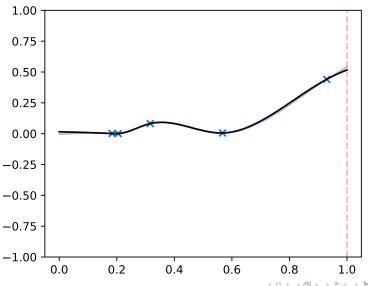
$$x_* = \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X}} f(x)$$
  
 $p(x_* | \mathcal{D}) = ?$ 

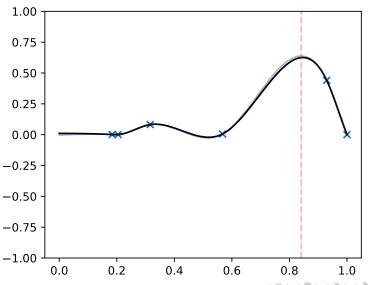
где  $\mathcal{D}=(x_i,y_i)_{i=1}^n$  — наблюдаемые данные

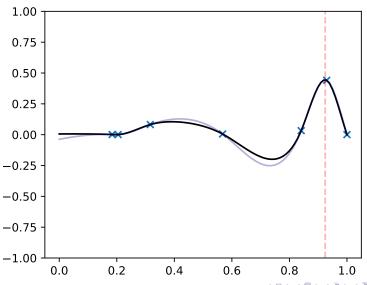
$$p(x_*|\mathcal{D}) = \int p(x_*|g,\mathcal{D})p(g|\mathcal{D})dg$$

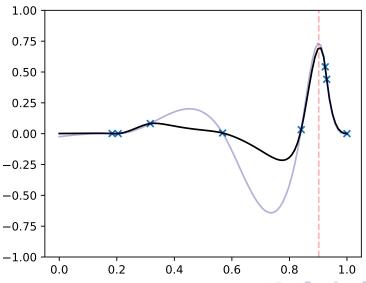
где g – гауссовский процесс,  $p(x_*|g)$  — масса на аргмаксимуме траектории  $g|\mathcal{D}$ .

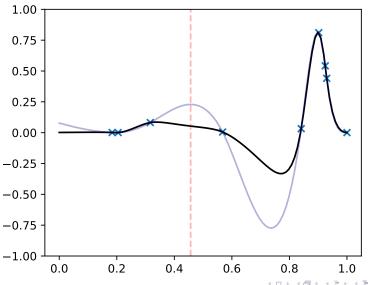
- ► Thompson sampling:
  - ightharpoonup Сэмплируем траекторию  $g|\mathcal{D}$  (формула Матерона)
  - ▶ Находим ее аргмаксимум

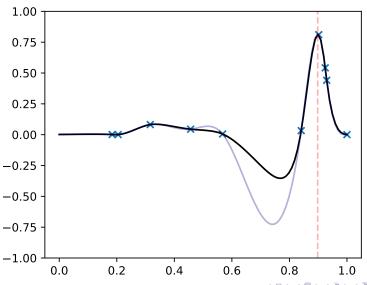


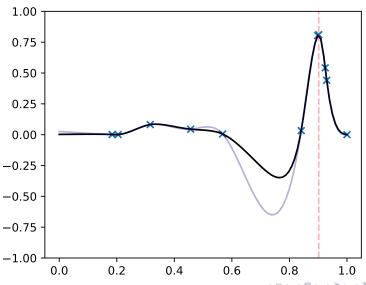












### Regrets

Regret

$$r_n := f(x_*) - f(x_n)$$

► Cumulative regret

$$R_n := \sum_{i=1}^n [f(x_*) - f(x_i)]$$

► No regret:

$$\frac{R_n}{n} \longrightarrow 0$$

#### No Silver Bullet

#### Выбор ядра для априорного гауссовского процесса

Нужно каким-то образом выбирать ядро для  $\Gamma\Pi$  — это вводит новые гиперпараметры, которые мы должны найти, оптимизируя MLL.

#### No Silver Bullet

#### Выбор ядра для априорного гауссовского процесса

Нужно каким-то образом выбирать ядро для  $\Gamma\Pi$  — это вводит новые гиперпараметры, которые мы должны найти, оптимизируя MLL.

#### Внутренняя оптимизация

Оптимизируем acquistion function, чтобы найти кандидата на минимум — нет гарантий сходимости к глобальному максимуму.

#### No Silver Bullet

#### Выбор ядра для априорного гауссовского процесса

Нужно каким-то образом выбирать ядро для  $\Gamma\Pi$  — это вводит новые гиперпараметры, которые мы должны найти, оптимизируя MLL.

#### Внутренняя оптимизация

Оптимизируем acquistion function, чтобы найти кандидата на минимум — нет гарантий сходимости к глобальному максимуму.

#### Проблема Large dimensions

Высокая размерность пространства поиска плохо дружит с байесовской оптимизацией. Rule of thumb — 20D.

#### ARD

▶ Стационарное ядро

$$k(x, x') = k(||x - x'||) = k\left(\sqrt{\sum_{d=1}^{D} (x_d - x'_d)^2}\right)$$

#### **ARD**

Стационарное ядро

$$k(x, x') = k(||x - x'||) = k \left( \sqrt{\sum_{d=1}^{D} (x_d - x'_d)^2} \right)$$

► Параметр масштаба (lengthscale)

$$\frac{\sqrt{\sum_{d=1}^{D}(x_d-x_d')^2}}{\ell}$$

#### **ARD**

Стационарное ядро

$$k(x, x') = k(||x - x'||) = k\left(\sqrt{\sum_{d=1}^{D} (x_d - x_d')^2}\right)$$

► Параметр масштаба (lengthscale)

$$\frac{\sqrt{\sum_{d=1}^{D}(x_d-x_d')^2}}{\ell}$$

Automatic Relevance Determination

$$\sqrt{\sum_{d=1}^{D} \left(\frac{x_d - x_d'}{\ell_d}\right)^2}$$

#### Спасибо!