

On Bayesian Optimization

Part 1 of 3

July 2, 2025

Donghun Lee

Department of Mathematics
Korea University

Agenda

- 1. 블랙박스 최적화: 문제 상황 정의**
2. 베이지스 추론
3. 베이지안 최적화 (BO)
4. 가우시안 프로세스 (GP)
5. GP Regression: GP + 베이지안 추론
6. 획득 함수 (Acquisition Function)
7. GP기반의 Bayesian Optimization

블랙박스 최적화란?

- 내부 구조를 알 수 없는 함수 $f(x)$ 의 최적값을 찾는 문제
- 함수의 수치값만 얻을 수 있고, 도함수나 분석적 형태는 모름
- 다양한 분야에서 등장:
 - 하이퍼파라미터 튜닝
 - 시뮬레이션 기반 모델 최적화
 - 공학적 실험 설계

수학적 정의

블랙박스 최적화

$$x^* = \arg \min_{x \in \mathcal{X}} f(x)$$

- $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$, f 의 closed-form은 알 수 없고, $f(x)$ 값들을 하나씩 평가할 수 있음
- $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^d$: 제한된 입력공간
- 목적: 적은 수의 함수값 평가로 x^* 를 잘 근사해낸다

블랙박스 최적화의 어려움

- **고비용 평가:** 하나의 함수 계산이 시뮬레이션이나 실험 등으로 수분 수시간 소요
- **도함수 부재:** 기울기 기반 방법 사용 불가
- **노이즈 포함:** 측정 또는 시뮬레이션에 노이즈 존재 가능
- **비볼록성 / 복잡한 형태:** 로컬 최적점 다수 존재 가능

접근 전략: 모델 기반 최적화

- 반복적으로 f 를 모델링하고 다음 후보점을 선택하는 방식
- 대표적인 방법: **베이지안 최적화**
- 핵심 구성 요소:
 - 확률적 서로 다른 모델 (e.g. 가우시안 프로세스)
 - 탐색 기준 (획득 함수)

블랙박스 최적화의 핵심 가정

- **블랙박스 함수의 연속성 또는 스무스함:** 함수가 갑작스럽게 튀지 않는다는 전제 e.g. Lipschitz-ness
- **함수 평가가 가능해야 함:** 입력에 대해 함수 평가 결과는 반드시 획득 가능 (노이즈가 낄 수는 있음)
- **사전 정보 반영:** 함수 평가를 하기 전에 갖고 있는 *a priori*(사전) 정보를 반영할 수 있어야 함
- **함수 호출 횟수 (예산)에 대한 제한:** 제한된 예산 내에서 효율적인 탐색을 강제하게 됨

Agenda

1. 블랙박스 최적화: 문제 상황 정의
- 2. 베이지스 추론**
3. 베이지안 최적화 (BO)
4. 가우시안 프로세스 (GP)
5. GP Regression: GP + 베이지안 추론
6. 획득 함수 (Acquisition Function)
7. GP기반의 Bayesian Optimization

베이지안 추론이란?

- **미지의 변수**에 대한 **확률적 신념**을 관측된 데이터에 기반하여 갱신하는 방법
- 베이지 정리를 기반으로 사전 지식(prior)을 사후 분포(posterior)로 업데이트
- 불확실성을 모델링하는 데 핵심적인 도구

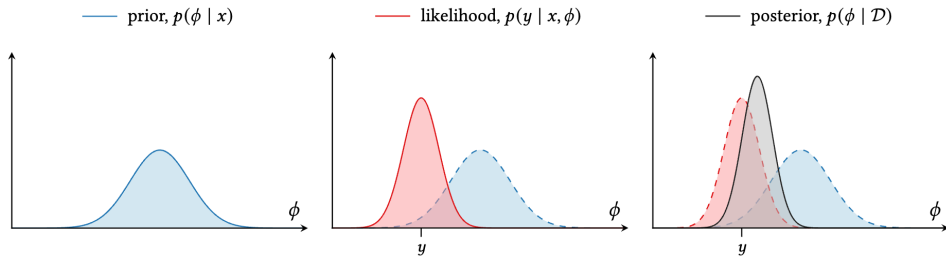


Figure: Example of prior, likelihood, and posterior in Bayesian inference

Bayes 정리: 수학적 정의

Bayes 정리

$$p(\theta \mid \mathcal{D}) = \frac{p(\mathcal{D} \mid \theta) \cdot p(\theta)}{p(\mathcal{D})}$$

- θ : 추정하려는 모수 또는 변수
- \mathcal{D} : 관측 데이터
- $p(\theta)$: 사전 분포 (Prior)
- $p(\mathcal{D} \mid \theta)$: 우도 함수 (Likelihood)
- $p(\theta \mid \mathcal{D})$: 사후 분포 (Posterior)

베이지안 추론의 직관

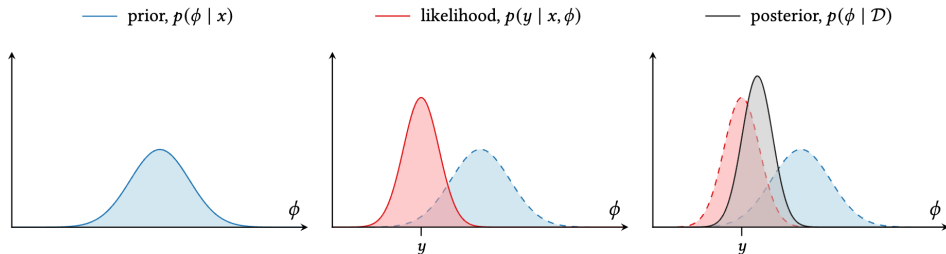
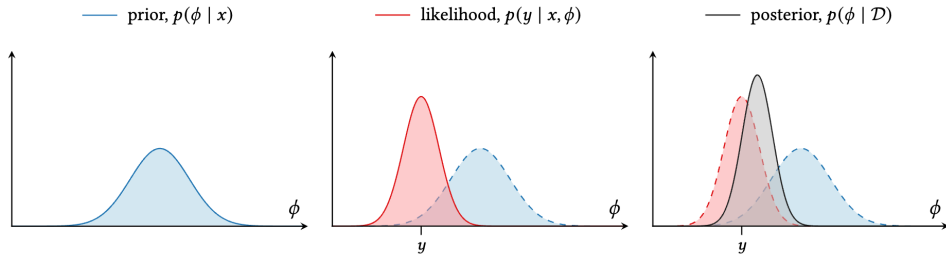


Figure: Example of prior, likelihood, and posterior in Bayesian inference

- 사전 지식 $p(\theta)$ + 데이터 $\mathcal{D} \rightarrow$ 새로운 신념 $p(\theta | \mathcal{D})$
- 학습을 “신념의 업데이트”로 표현함
- 관측이 많아질수록 사후 분포는 특정 값으로 수렴

조건부 확률로 본 베이지스 추론



$$p(\theta | \mathcal{D}) \propto p(\mathcal{D} | \theta) \cdot p(\theta)$$

- $p(\mathcal{D})$ 정규화를 위한 상수. 계산 시 생략 가능
- 중요한 것은 **사후 분포는 우도와 사전 분포의 곱에 비례**
- “베이지안” 모델링의 기반 그 자체

예시: 동전의 앞면 확률 추정

- 모수 θ : 앞면이 나올 확률
- 사전: $\theta \sim \text{Beta}(\alpha, \beta)$
- 관측: H 번 앞면, T 번 뒷면 \rightarrow 우도: $\theta^H(1 - \theta)^T$
- 사후: $\theta \mid \mathcal{D} \sim \text{Beta}(\alpha + H, \beta + T)$
- 조심: 하이퍼파라미터 α, β

베이지안 추론의 장점

- **불확실성 정량화**: 점 추정이 아닌 분포를 추정
- **사전 지식 활용**: 이전 경험을 모델에 통합 가능
- **적은 데이터에도 유리**: MLE보다 일반화 성능이 좋을 수 있음
- **비결정론적 의사결정**: 탐색적 접근과 의사결정에 유리

Agenda

1. 블랙박스 최적화: 문제 상황 정의
2. 베이지 추론
- 3. 베이지안 최적화 (BO)**
4. 가우시안 프로세스 (GP)
5. GP Regression: GP + 베이지안 추론
6. 획득 함수 (Acquisition Function)
7. GP기반의 Bayesian Optimization

베이지안 최적화란?

- 확률적 모델을 사용하여 고비용 블랙박스 함수의 최적값을 찾는 최적화 기법
- 함수 $f(x)$ 의 수치만 얻을 수 있는 상황에서 유용
- 불확실성을 정량화하고, 그 정보를 활용하여 효율적인 탐색 가능

최적화 문제 형식

$$x^* = \arg \min_{x \in \mathcal{X}} f(x)$$

- 단, $f(x)$ 는 고비용 평가 또는 도함수 미제공 함수
- f 에 대한 모델 $\hat{f}(x)$ 을 학습하여 탐색 수행
- 탐색 효율을 높이기 위해 **확률 모델**과 **획득 함수** 사용

BO 알고리즘 개요

1. 초기 관측 데이터 $\mathcal{D}_0 = \{(x_i, f(x_i))\}_{i=1}^n$
2. 확률 모델 학습 (예: Gaussian Process)
3. 획득 함수 $\alpha(x)$ 계산
4. 다음 평가 지점 $x_{t+1} = \arg \max_x \alpha(x)$
5. $f(x_{t+1})$ 평가 후 \mathcal{D}_{t+1} 에 추가
6. 수렴 조건 만족하면 종료, 아니면 “학습”단계로 돌아감

BO의 핵심 구성 요소

- **함수 근사 모델 (Surrogate model):**
 - 주로 Gaussian Process 사용
 - 목적함수 $f(x)$ 를 근사할 수 있는 도구면 가능
- **획득 함수 (Acquisition function):**
 - 모델 기반 예측을 활용하여 다음 탐색 위치 결정
 - 탐색(exploration)과 활용(exploitation)의 균형 조절

불확실성 활용의 중요성

- BO는 단순히 예측값 $\mu(x)$ 만 고려하지 않음
- 예측의 **불확실성** $\sigma(x)$ 도 반영하여 탐색을 유도
- 탐색 성향을 조절할 수 있어 로컬 최적 해에 빠지는 것을 방지

핵심 아이디어

“불확실성이 클수록 탐색 가치가 높다”

베이지안 최적화 순서 요약

사전 정보 반영 → 관측 → 학습 → 관측-학습 반복 또는 종료

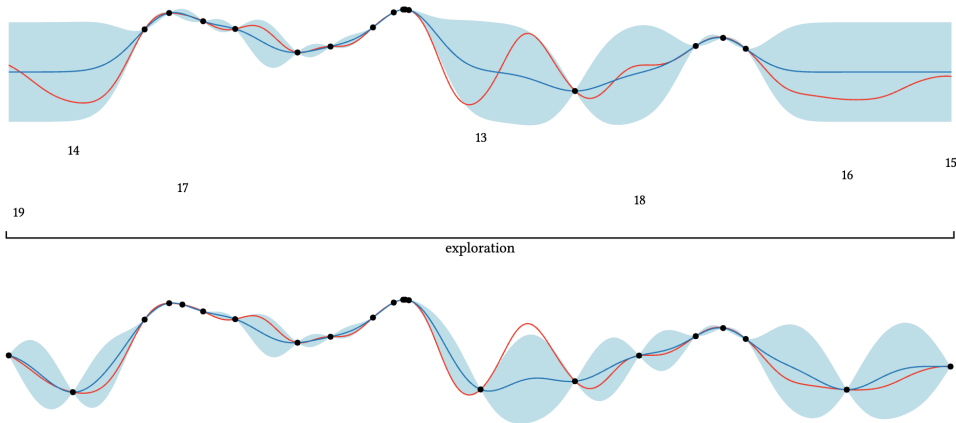


Figure: 이미 상당히 많이 관측한 $f(x)$ 를 7번 추가로 탐색 관측하고 학습

Agenda

1. 블랙박스 최적화: 문제 상황 정의
2. 베이지스 추론
3. 베이지안 최적화 (BO)
- 4. 가우시안 프로세스 (GP)**
5. GP Regression: GP + 베이지안 추론
6. 획득 함수 (Acquisition Function)
7. GP기반의 Bayesian Optimization

가우시안 확률과정(GP)란?

- 연속적인 입력공간에서 정의된 무한 차원의 확률 분포
- 모든 유한한 입력 집합에 대해 다변량 정규분포를 정의
- 함수값과 그 불확실성을 동시에 모델링하는 데 매우 매우 자주 사용됨 (BO에서)

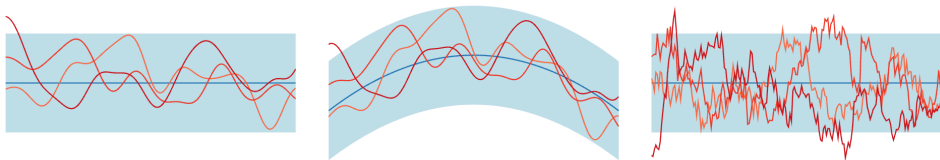


Figure: GP로 표현가능한 몇 가지 함수들 예시

GP를 표현해보기

GP를 표현하려면 평균함수와 공분산함수가 필요합니다

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

- $m(x) = \mathbb{E}[f(x)]$: 평균 함수
- $k(x, x') = \text{Cov}(f(x), f(x'))$: 공분산 함수 (커널)
- 임의의 입력 집합 $\{x_1, \dots, x_n\}$ 에 대해:

$$\mathbf{f} = [f(x_1), \dots, f(x_n)]^\top \sim \mathcal{N}(\mathbf{m}, \mathbf{K})$$

GP의 구성요소: 평균과 커널

- 평균 함수 $m(x)$: 보통 0으로 설정 ($m(x) = 0$) \rightarrow 사전 지식 없을 때
- 커널 함수 $k(x, x')$: 두 점 간의 유사도를 측정
- 커널은 함수의 smoothness, periodicity, 선형성 등 특징을 반영
- GP에 대한 과도한 디테일은 [?]를 참조

대표적인 커널 함수들

- **RBF (Radial Basis Function) / Gaussian kernel**

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sigma^2 \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2}{2\ell^2}\right)$$

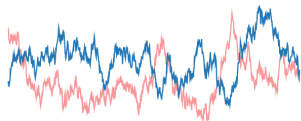
- RBF커널의 파라미터
 - σ^2 : 출력 분산
 - ℓ : 길이 척도 (length-scale)
- Linear, polynomial, periodic 커널들도 있음

대표적인 커널 함수들

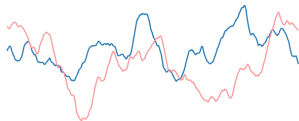
- **Matérn kernel**

$$C_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sigma^2 \cdot \frac{2^{1-\nu}}{\Gamma(\nu)} \left(\sqrt{2\nu} \cdot \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|}{\rho} \right)^\nu K_\nu \left(\sqrt{2\nu} \cdot \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|}{\rho} \right),$$

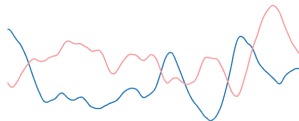
- $\Gamma(\nu)$ is the gamma function
- K_ν is the modified Bessel function of the second kind
- Parameters: ρ, ν, σ^2



$\nu = 1/2, (3.11)$



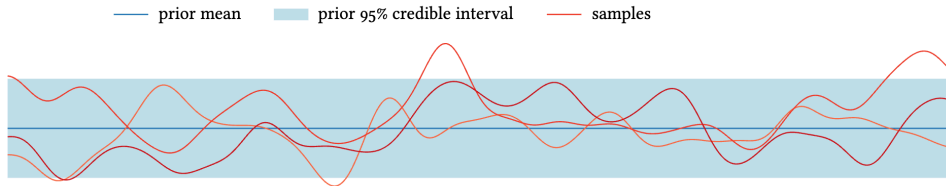
$\nu = 3/2, (3.13)$



$\nu = 5/2, (3.14)$

Figure: Matérn 커널의 파라미터 ν : 1증가하면 한번씩 미분가능한 숫자가 늘어난다

GP의 샘플 함수 시각화



- 커널에 따라 함수의 샘플 경향이 다르게 나타남
 - e.g. RBF 커널은 부드러운 함수 생성
- 데이터가 주어지면 사후 분포는 데이터에 맞게 수정됨

GP 조건부 분포 유도

- 관측 데이터: $\mathcal{D} = \{X, \mathbf{y}\}$
- 새로운 입력 x_* 에 대한 사후 분포:

$$f(x_*) \mid \mathcal{D}, x_* \sim \mathcal{N}(\mu(x_*), \sigma^2(x_*))$$

- 평균:

$$\mu(x_*) = k(x_*, X)[K + \sigma_n^2 I]^{-1} \mathbf{y}$$

- 분산:

$$\sigma^2(x_*) = k(x_*, x_*) - k(x_*, X)[K + \sigma_n^2 I]^{-1} k(X, x_*)$$

GP 요약

- 함수 공간을 직접 확률적으로 모델링
- 평균 + 커널 함수로 정의되는 분포
- 예측값과 예측 불확실성 동시 제공
- 베이지안 최적화의 핵심 구성 요소로 활용됨

Agenda

1. 블랙박스 최적화: 문제 상황 정의
2. 베이지 추론
3. 베이지안 최적화 (BO)
4. 가우시안 프로세스 (GP)
- 5. GP Regression: GP + 베이지안 추론**
6. 획득 함수 (Acquisition Function)
7. GP기반의 Bayesian Optimization

GP를 활용한 베이지안 추론이란?

- 관측 데이터를 바탕으로 새로운 지점에서의 함수값 분포 추론
- 사후 분포: 평균과 불확실성을 동시에 제공
- GP의 장점: **closed-form solution**으로 사후 분포 계산 가능

조건부 분포 공식

- 관측: $\mathcal{D} = \{X, y\}$, 예측 대상: x_*

- **예측 평균:**

$$\mu(x_*) = k(x_*, X)[K + \sigma_n^2 I]^{-1}y$$

- **예측 분산:**

$$\sigma^2(x_*) = k(x_*, x_*) - k(x_*, X)[K + \sigma_n^2 I]^{-1}k(X, x_*)$$

- K : X 의 커널 행렬

예측 평균 $\mu(x_*)$ 의 의미

$$\mu(x_*) = k(x_*, X)[K + \sigma_n^2 I]^{-1} \mathbf{y}$$

- $\mu(x_*)$ 는 데이터로부터 학습한 함수의 기대값
- 관측값 \mathbf{y} 의 선형 결합 형태
- 예측은 과거 관측값의 **유사도 기반 보간**

GP 예측 평균에 대한 핵심 직관

$\mu(x_*)$ = “관측된 이웃 데이터들의 가중 평균. 단, 가중치는 커널에 기반한 내재적 유사성”

예측 분산 $\sigma^2(x_*)$ 의 의미

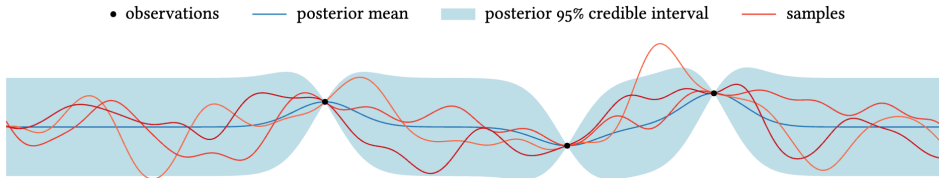
$$\sigma^2(x_*) = \underbrace{k(x_*, x_*)}_{(A)} - \underbrace{k(x_*, X)[K + \sigma_n^2 I]^{-1}k(X, x_*)}_{(B)}$$

- x_* 가 관측점과 가까울수록 분산은 작아짐
- 데이터가 없는 영역에서는 불확실성이 큼
- 탐색이 필요한 영역을 식별하는 데 사용할 수 있음

GP 예측 분산에 대한 핵심 직관

$\sigma^2(x_*)$ = “내재적 자체 분산치(A)에서 근처 관측에 의해 확정된 효과(B)를 제한 값”

GP 사후 예측 시각화



- 파란 실선: 예측 평균 $\mu(x)$
- 그림자 영역: 95% 신뢰구간 ($\approx \pm 2$ 표준편차)
- 데이터 주변 영역에서는 신뢰구간이 좁고, 아닌 구간은 넓음

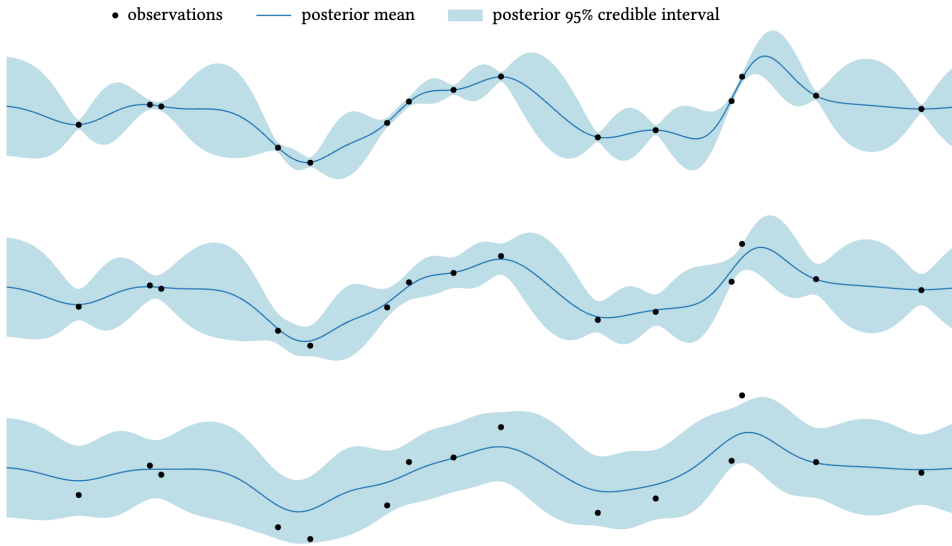
노이즈 모델링 포함

- 현실에서는 관측값 $y = f(x) + \epsilon, \epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma_n^2)$
- 커널 행렬에 노이즈 항을 추가:

$$K + \sigma_n^2 I$$

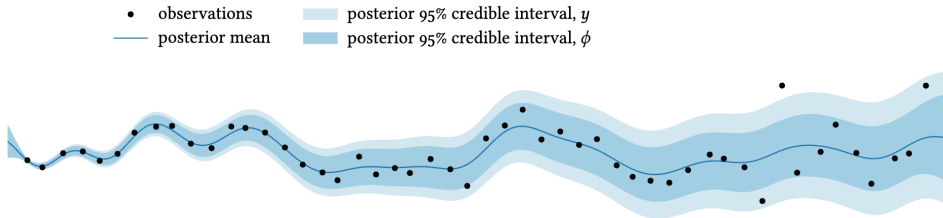
- 이는 모델이 노이즈를 고려하여 더 유연하게 예측하게 함

노이즈 모델링 차이에 대한 시각화



노이즈 모델링 차이에 대한 시각화

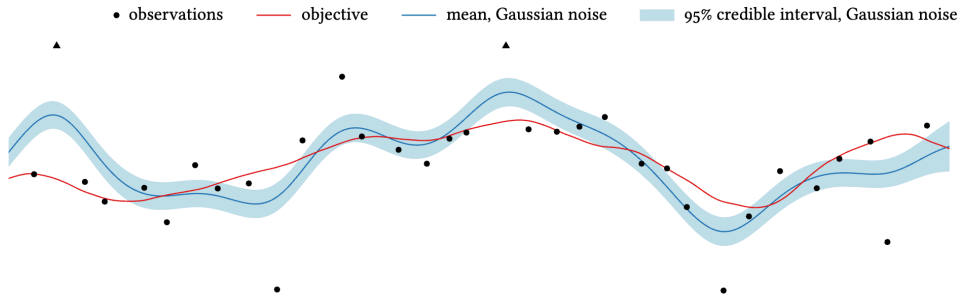
Heteroscedastic한 노이즈 모델링도 가능!



- x 값이 커지면 노이즈가 커지는 heteroscedasticity 상황
- 파란 실선: 예측 평균 $\mu(x)$
- 그림자 영역: 95% 신뢰구간 ($\approx \pm 2$ 표준편차)

노이즈 모델링 차이에 대한 시각화

Heavy tail 노이즈 모델링도 가능! (이러시면 우리 GP가 힘듭니다)



- GP가 추정한 예측평균이 실제 f 보다 heavy-tailed outlier들에 더 큰 영향을 받음
- GP에다 무언가를 추가해주어야 robustness를 얻을 수 있음 (하지만 애당초 low noise가 더 좋음!)

정리 요약

- GP는 관측 기반 함수 추정에 효과적인 베이지안 모델
- 폐쇄형 수식으로 평균과 분산을 동시에 계산 가능
- 예측은 보간(interpolation) + 불확실성 추론을 포함
- 이는 BO의 핵심 탐색 메커니즘으로 활용됨
- 다양한 노이즈 모델링을 추가할 수 있고, GP가 이를 감당할 수 있는가는 별개임

Agenda

1. 블랙박스 최적화: 문제 상황 정의
2. 베이지 추론
3. 베이지안 최적화 (BO)
4. 가우시안 프로세스 (GP)
5. GP Regression: GP + 베이지안 추론
- 6. 획득 함수 (Acquisition Function)**
7. GP기반의 Bayesian Optimization

획득함수란?

- 베이지안 최적화에서 다음 평가할 지점을 결정하는 함수
- 확률 모델의 예측 평균과 분산을 모두 고려
- **탐색** (exploration) vs **활용** (exploitation)의 균형 조절

획득함수의 기본 활용 형태

다음 선택/샘플링할 x_{next} 를 아래와 같이 획득함수 α 를 사용해 선택한다

$$x_{\text{next}} = \arg \max_{x \in \mathcal{X}} \alpha(x)$$

GP와 획득함수의 관계 시각화

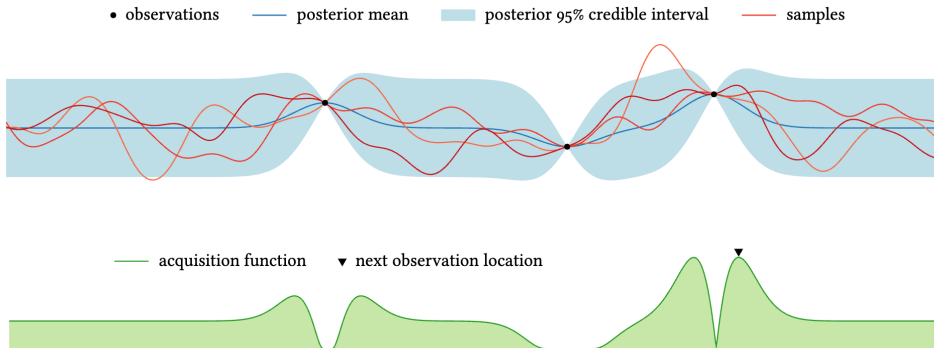


Figure: GP regression과 acquisition function, 축 맞추어 그려보았습니다

최적값 대비 향상량 (Improvement)

목표: 현재까지 관측된 최적값 f_{best} 대비, 새로운 점 x 가 얼마나 더 나은지 예측

향상 함수 (Improvement Function):

$$I(x) = \max(f(x) - f_{\text{best}}, 0)$$

- f_{best} : 지금까지 실제 관측한 함수값들 중 최고치
- $f(x)$: x 에서의 실제 함수값 (unknown)
- 실제 계산에서는 $f(x)$ 대신 GP의 예측 평균을 사용함: i.e. $f(x) \approx \mu(x)$

향상량 기반 획득함수의 핵심원리

$I(x)$ 가 큰 x 를 시도해보면 좋은 $f(x)$ 를 찾을 수 있지 않을까?

향상치 기반 획득함수 대표사례

- **PI (Probability of Improvement)**: 향상치 확률값 기반
- **EI (Expected Improvement)**: 향상치의 기대값 기반
- **KG (Knowledge Gradient)**: 지식 경사값 기반
- **UCB (Upper Confidence Bound)**: 신뢰 구간값 기반

각 획득함수들은 약간씩 상이한 탐색 행동을 유도하며, 목적 및 문제 상황에 따라 성능이 달라짐

Probability of Improvement (PI)

- x 를 관측한다면, 최적 관측값이 향상될 확률(Probability of Improvement)은?

$$\text{PI}(x) = \mathbb{P} \left[\underbrace{f(x) > f_{\text{best}}}_{\text{최적 관측값이 향상됨}} \right] = 1 - \Phi \left(\frac{f_{\text{best}} - \mu(x)}{\sigma(x)} \right)$$

- 단점: 분산 $\sigma(x)$ 이 너무 작으면 선택 가능성이 낮아짐

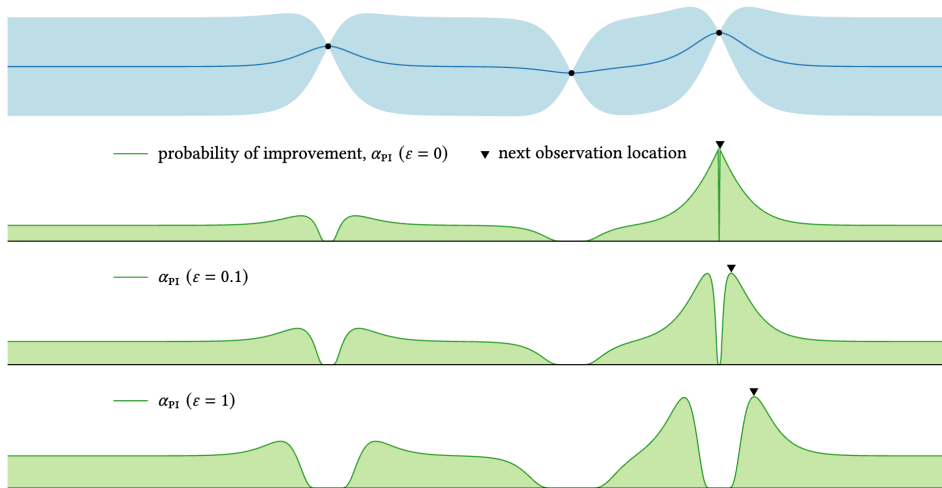
Probability of Improvement (PI) [1]

- x 를 관측한다면, 최적 관측값이 향상될 확률(Probability of Improvement)은?

$$\text{PI}(x) = \mathbb{P} \left[\underbrace{f(x) > f_{\text{best}} - \epsilon}_{\text{최적 관측값이 향상됨}} \right] = 1 - \Phi \left(\frac{f_{\text{best}} - \mu(x) - \epsilon}{\sigma(x)} \right)$$

- $\epsilon \geq 0$: 탐색 정도를 조절하는 하이퍼파라미터 (cf. slack parameter in SVM)
- 분산 $\sigma(x)$ 이 너무 작더라도, ϵ 가 어느정도 크면 선택가능
- 단점: ϵ 는 어떻게 설정해야 하지?

Probability of Improvement (PI) [1] 시각화



Expected Improvement (EI) [1]

- x 를 관측한다면, 최적 관측값 향상치의 **기대값**(Expected Improvement)은 얼마?

$$\text{EI}(x) = \mathbb{E} [\max(0, f_{\text{best}} - f(x))]$$

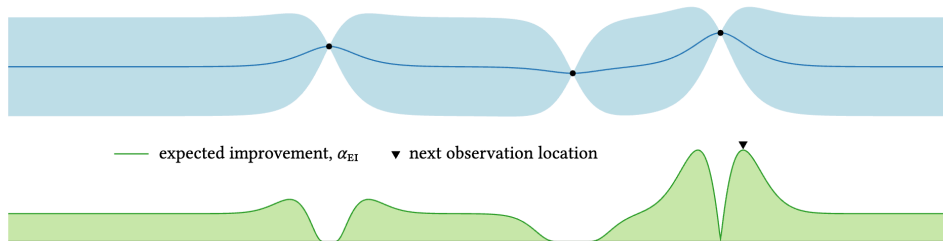
- $f(x)$ 가 정규분포를 따른다면 (i.e. $f(x) \sim \mathcal{N}(\mu(x), \sigma(x))$), closed form 계산가능:

$$\text{EI}(x) = (f_{\text{best}} - \mu(x))\Phi(z) + \sigma(x)\phi(z)$$

$$z = \frac{f_{\text{best}} - \mu(x)}{\sigma(x)}$$

- Φ : standard normal CDF, ϕ : standard normal PDF

Expected Improvement (EI) [1] 시각화



Upper Confidence Bound (UCB) [2]

- 직관: $f(x)$ 의 기대값에, 표준편차를 불확실성 보너스로 추가하여 다음 x 를 결정
- 계산 방법: 평균과 분산의 적절한 선형합

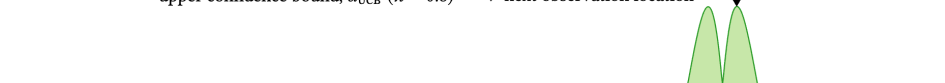
$$\text{UCB}(x) = \underbrace{f(x)\text{의 평균 예상치}}_{\mu(x)} + \kappa \cdot \underbrace{f(x)\text{의 표준편차 예상치}}_{\sigma(x)}$$

- $\kappa > 0$: 하이퍼파라미터. 크게 설정하면 탐색을 더 선호
- 원래 multi-armed bandit 연구에서 사용되던 개념

Upper Confidence Bound (UCB) [2] 시각화



— upper confidence bound, $\alpha_{\text{UCB}} (\pi = 0.8)$ ▼ next observation location



— $\alpha_{\text{UCB}} (\pi = 0.95)$



— $\alpha_{\text{UCB}} (\pi = 0.999)$



정리

- 획득함수는 다음 평가 위치를 효율적으로 선택
- 예측값 + 불확실성 모두 반영하는 설계
- 목적에 따라 EI, PI, UCB 등을 선택
- 탐색과 활용의 균형이 성능에 결정적 영향

Agenda

1. 블랙박스 최적화: 문제 상황 정의
2. 베이지 추론
3. 베이지안 최적화 (BO)
4. 가우시안 프로세스 (GP)
5. GP Regression: GP + 베이지안 추론
6. 획득 함수 (Acquisition Function)
- 7. GP기반의 Bayesian Optimization**

GPBO 전체 요약

1. 초기 데이터 $\mathcal{D}_0 = \{(x_i, f(x_i))\}$
2. 확률 모델 학습 (GP)
3. 획득함수 $\alpha(x)$ 계산
4. 다음 평가점 $x_{t+1} = \arg \max \alpha(x)$
5. $f(x_{t+1})$ 평가 후 \mathcal{D}_{t+1} 갱신
6. 수렴 조건 만족 시까지 반복

GPBO 예시 시각화 1

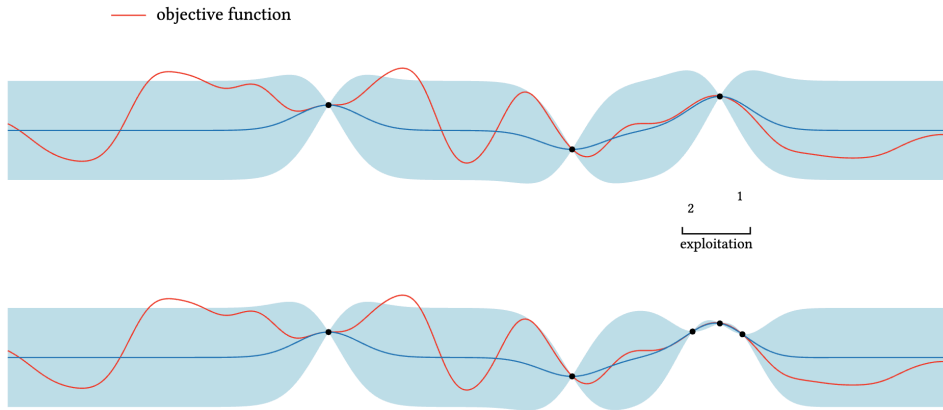


Figure: $f(x)$ 를 두 번 Exploitation 스타일로 관측하고 학습

GPBO 예시 시각화 2

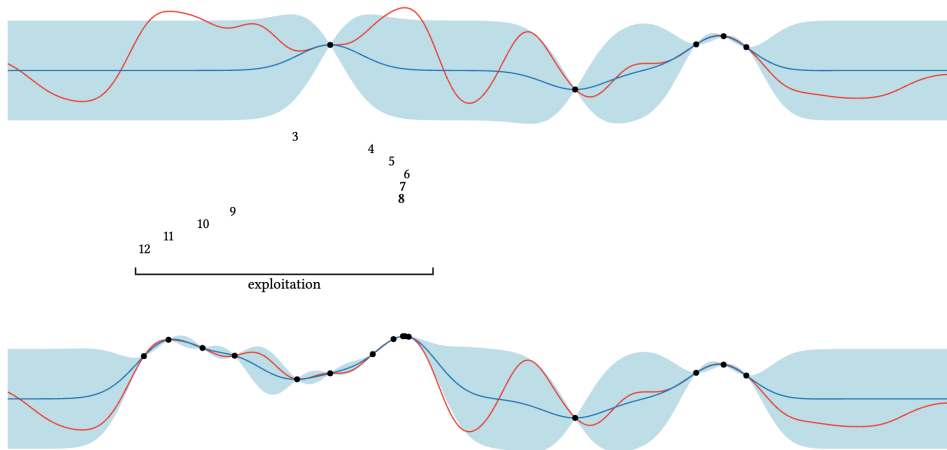


Figure: $f(x)$ 를 10번 더 Exploitation 스타일로 관측하고 학습

GPBO 예시 시각화 3

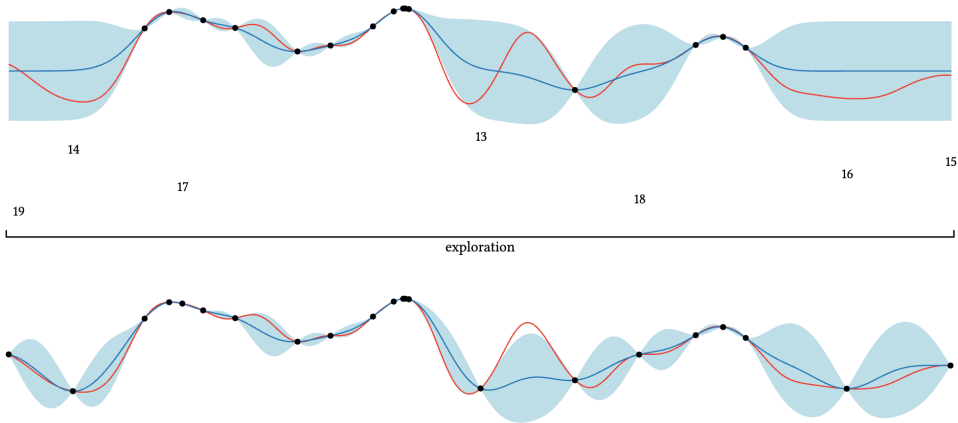


Figure: $f(x)$ 를 7번 Exploration 스타일로 관측하고 학습

반복 종료 조건

- BO는 일반적으로 다음 중 하나가 만족되면 종료:
 - 반복 횟수 T 도달
 - 획득함수 최대값이 작아짐 ($\alpha(x) < \varepsilon$)
 - 함수 평가 예산 소진
- 실전에서는 성능 모니터링과 병행함

베이지안 최적화의 장점 및 유의점

GPBO의 특징점

- **고비용 함수에 적합**: 최소 평가로 최적값 수렴
- **예측 + 불확실성 활용**: 확률 기반의 효율적 탐색
- **함수 미분 불필요**: 도함수 없이도 가능
- **탐색/활용 균형 조절 가능**

실전 적용시 유의점

- 초기 샘플은 다양하게 분포시킬 것
- 커널 선택 및 하이퍼파라미터 튜닝 필요
- 획득함수 선택은 문제 특성에 맞게
- 예측 모델 재학습 비용도 고려

In Summary

- GPBO는 베이지안 학습에 기반한 효율적인 최적화 프레임워크
- 핵심 구성요소:
 - 근사 모델 (GP)
 - 획득 함수 (EI, PI, UCB 등)
- 탐색-활용의 균형을 잡아주는것이 성능에 직결됨
- 다양한 산업/과학 분야에서 실제로 활용됨 (really?)

BO 적용한 실제 문제풀이 예시 (AI/ML 분야는 제외)





- 화학: 촉매설계 [3], 화학반응설계 [4], 아미노산conformer분자구조설계 [5]
- 배터리/자동차공학: 수명예측 [6], 충전프로토콜설계 [7], 서스펜션 설계 [8], 하이브리드 차량 동력계 설계 [9]
- 전기전자: 전력전송시스템설계 [10], 아날로그칩셋설계 [11], 디지털회로설계 [12]
- 재료공학: 유리재료설계 [13], 합금설계 [14], 기능성물질 구조분석 [15]
- 물리학: 입자가속기 튜닝 [16], 응집물리(Bose-Einstein condensate) [17], 천체물리 [18], 양자scattering [19]
- 농/생명공학: 종자발아 [20], 단백질분자공학 [21]
- 의/약학: 환자상태 모니터링 [22], 가상약물실험 [23], 생체조직공학[24]
- 로봇공학: 요리로봇 성능개선 [25], 전신자세제어 [26], 로봇 파라미터의 안전한 튜닝법 [27], 자율주행차 비전의 적대적공격법 [28]
- 도시/환경/구조공학: 바닷물 침습 판별 [29], 태풍이 교량에 주는 영향분석 [30]
- 기계/항공공학: 용접파라미터 최적화 [31], 비행기 구조설계 [32], 비행기 날개 동역학 최적화 [33]

Break Time




- Questions? » holy@korea.ac.kr
- Slides? » QR
- AIML@K? » Barcode






References I

-  J. Mockus, “On bayesian methods for seeking the extremum,” in *Optimization Techniques IFIP Technical Conference Novosibirsk, July 1–7, 1974* (G. I. Marchuk, ed.), (Berlin, Heidelberg), pp. 400–404, Springer Berlin Heidelberg, 1975.
-  E. Kaufmann, O. Cappe, and A. Garivier, “On Bayesian Upper Confidence Bounds for Bandit Problems,” in *Proceedings of the Fifteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics* (N. D. Lawrence and M. Girolami, eds.), vol. 22 of *Proceedings of Machine Learning Research*, (La Palma, Canary Islands), pp. 592–600, PMLR, 2012.
-  X. Li, Y. Che, L. Chen, T. Liu, K. Wang, L. Liu, H. Yang, E. O. Pyzer-Knapp, and A. I. Cooper, “Sequential closed-loop Bayesian optimization as a guide for organic molecular metallophotocatalyst formulation discovery,” *Nature Chemistry*, vol. 16, pp. 1286–1294, Aug. 2024.
-  B. J. Shields, J. Stevens, J. Li, M. Parasram, F. Damani, J. I. M. Alvarado, J. M. Janey, R. P. Adams, and A. G. Doyle, “Bayesian reaction optimization as a tool for chemical synthesis,” *Nature*, vol. 590, pp. 89–96, Feb. 2021.






References II

-  L. Fang, E. Makkonen, M. Todorovic, P. Rinke, and X. Chen, “Efficient Amino Acid Conformer Search with Bayesian Optimization,” *Journal of Chemical Theory and Computation*, vol. 17, pp. 1955–1966, Mar. 2021.
-  K. A. Severson, P. M. Attia, N. Jin, N. Perkins, B. Jiang, Z. Yang, M. H. Chen, M. Aykol, P. K. Herring, D. Fraggadakis, M. Z. Bazant, S. J. Harris, W. C. Chueh, and R. D. Braatz, “Data-driven prediction of battery cycle life before capacity degradation,” *Nature Energy*, vol. 4, pp. 383–391, Mar. 2019.
-  P. M. Attia, A. Grover, N. Jin, K. A. Severson, T. M. Markov, Y.-H. Liao, M. H. Chen, B. Cheong, N. Perkins, Z. Yang, P. K. Herring, M. Aykol, S. J. Harris, R. D. Braatz, S. Ermon, and W. C. Chueh, “Closed-loop optimization of fast-charging protocols for batteries with machine learning,” *Nature*, vol. 578, pp. 397–402, Feb. 2020.






References III

-  S. S. Thomas, J. Palandri, M. Lakehal-Ayat, P. Chakravarty, F. Wolf-Monheim, and M. Blaschko, “Designing MacPherson Suspension Architectures using Bayesian Optimization,” in *Proceedings of the 31st Benelux Conference on Artificial Intelligence (BNAIC 2019) and the 28th Belgian Dutch Conference on Machine Learning (Benelearn 2019), CEUR Workshop Proceedings (CEUR-WS.org), Vol-2491, RP1: Applied Machine Learning / Beuls, K.; Bogaerts, B.; Bontempi, G.; Geurts, P.; Harley, N.; Lebichot, B.; Lenaerts, T.; Louppe, G. and Van Eecke, P. (editors), vol. 2491 of CEUR workshop proceedings, (Aachen), p. aper104, RWTH Aachen University, Nov. 2019.*
-  R. Liessner, A. Lorenz, J. Schmitt, A. Dietermann, and B. Baker, “Simultaneous Electric Powertrain Hardware and Energy Management Optimization of a Hybrid Electric Vehicle Using Deep Reinforcement Learning and Bayesian Optimization,” pp. 1–6, 2019.
-  Y. Fang and M. H. Pong, “A Bayesian Optimization and Partial Element Equivalent Circuit Approach to Coil Design in Inductive Power Transfer Systems,” in *2018 IEEE PELS Workshop on Emerging Technologies: Wireless Power Transfer (Wow)*, pp. 1–5, 2018.





References IV

-  W. Lyu, P. Xue, F. Yang, C. Yan, Z. Hong, X. Zeng, and D. Zhou, “An Efficient Bayesian Optimization Approach for Automated Optimization of Analog Circuits,” *IEEE Transactions on Circuits and Systems I: Regular Papers*, vol. 65, no. 6, pp. 1954–1967, 2018.
-  H. M. Torun, M. Swaminathan, A. Kavungal Davis, and M. L. F. Bellaredj, “A Global Bayesian Optimization Algorithm and Its Application to Integrated System Design,” *IEEE Transactions on Very Large Scale Integration (VLSI) Systems*, vol. 26, no. 4, pp. 792–802, 2018.
-  K. Nakamura, N. Otani, and T. Koike, “Multi-objective Bayesian optimization of optical glass compositions,” *Ceramics International*, vol. 47, no. 11, pp. 15819–15824, 2021.
-  A. S. Nugraha, G. Lambard, J. Na, M. S. A. Hossain, T. Asahi, W. Chaikittisilp, and Y. Yamauchi, “Mesoporous trimetallic PtPdAu alloy films toward enhanced electrocatalytic activity in methanol oxidation: unexpected chemical compositions discovered by Bayesian optimization,” *J. Mater. Chem. A*, vol. 8, pp. 13532–13540, 2020.
-  M. Todorovic, M. U. Gutmann, J. Corander, and P. Rinke, “Bayesian inference of atomistic structure in functional materials,” *npj Computational Materials*, vol. 5, p. 35, Mar. 2019.





References V

-  R. Roussel, A. Hanuka, and A. Edelen, “Multiobjective Bayesian optimization for online accelerator tuning,” *Phys. Rev. Accel. Beams*, vol. 24, p. 062801, June 2021.
-  P. B. Wigley, P. J. Everitt, A. van den Hengel, J. W. Bastian, M. A. Sooriyabandara, G. D. McDonald, K. S. Hardman, C. D. Quinlivan, P. Manju, C. C. N. Kuhn, I. R. Petersen, A. N. Luiten, J. J. Hope, N. P. Robins, and M. R. Hush, “Fast machine-learning online optimization of ultra-cold-atom experiments,” *Scientific Reports*, vol. 6, p. 25890, May 2016.
-  K. K. Rogers, H. V. Peiris, A. Pontzen, S. Bird, L. Verde, and A. Font-Ribera, “Bayesian emulator optimisation for cosmology: application to the Lyman-alpha forest,” *Journal of Cosmology and Astroparticle Physics*, vol. 2019, p. 031, Feb. 2019.
-  R. A. Vargas-Hernández, Y. Guan, D. H. Zhang, and R. V. Krems, “Bayesian optimization for the inverse scattering problem in quantum reaction dynamics,” *New Journal of Physics*, vol. 21, p. 022001, Feb. 2019.
-  A. Nikitin, I. Fastovets, D. Shadrin, M. Pukalchik, and I. Oseledets, “Bayesian optimization for seed germination,” *Plant Methods*, vol. 15, p. 43, Apr. 2019.

References VI

-  K. K. Yang, Z. Wu, and F. H. Arnold, “Machine-learning-guided directed evolution for protein engineering,” *Nature Methods*, vol. 16, pp. 687–694, Aug. 2019.
-  G. W. Colopy, S. J. Roberts, and D. A. Clifton, “Bayesian optimization of personalized models for patient vital-sign monitoring,” *IEEE journal of biomedical and health informatics*, vol. 22, pp. 301–310, Mar. 2018.
-  D. E. Graff, E. I. Shakhnovich, and C. W. Coley, “Accelerating high-throughput virtual screening through molecular pool-based active learning,” *Chem. Sci.*, vol. 12, pp. 7866–7881, 2021.
-  S. Olofsson, M. Mehrian, R. Calandra, L. Geris, M. P. Deisenroth, and R. Misener, “Bayesian multiobjective optimisation with mixed analytical and black-box functions: Application to tissue engineering,” *IEEE transactions on bio-medical engineering*, vol. 66, pp. 727–739, Mar. 2019.

References VII

-  K. Junge, J. Hughes, T. G. Thuruthel, and F. Iida, “Improving Robotic Cooking Using Batch Bayesian Optimization,” *IEEE Robotics and Automation Letters*, vol. 5, no. 2, pp. 760–765, 2020.
-  K. Yuan, I. Chatzinikolaïdis, and Z. Li, “Bayesian Optimization for Whole-Body Control of High-Degree-of-Freedom Robots Through Reduction of Dimensionality,” *IEEE Robotics and Automation Letters*, vol. 4, no. 3, pp. 2268–2275, 2019.
-  F. Berkenkamp, A. Krause, and A. P. Schoellig, “Bayesian optimization with safety constraints: safe and automatic parameter tuning in robotics,” *Machine Learning*, vol. 112, pp. 3713–3747, Oct. 2023.
-  A. Bloor, K. Garimella, X. He, C. Gill, Y. Vorobeychik, and X. Zhang, “Attacking vision-based perception in end-to-end autonomous driving models,” *Journal of Systems Architecture*, vol. 110, p. 101766, 2020.

References VIII

-  G. Kopsiaftis, E. Protopapadakis, A. Voulodimos, N. Doulamis, and A. Mantoglou, “Gaussian Process Regression Tuned by Bayesian Optimization for Seawater Intrusion Prediction,” *Computational Intelligence and Neuroscience*, vol. 2019, no. 1, p. 2859429, 2019.
-  Y.-M. Zhang, H. Wang, J.-X. Mao, Z.-D. Xu, and Y.-F. Zhang, “Probabilistic Framework with Bayesian Optimization for Predicting Typhoon-Induced Dynamic Responses of a Long-Span Bridge,” *Journal of Structural Engineering*, vol. 147, no. 1, p. 04020297, 2021.
-  D. Sterling, T. Sterling, Y. Zhang, and H. Chen, “Welding parameter optimization based on Gaussian process regression Bayesian optimization algorithm,” in *2015 IEEE International Conference on Automation Science and Engineering (CASE)*, pp. 1490–1496, 2015.
-  A. Hebbal, L. Brevault, M. Balesdent, E.-G. Talbi, and N. Melab, “Multi-objective optimization using Deep Gaussian Processes: Application to Aerospace Vehicle Design,” in *AIAA Scitech 2019 Forum*.
-  H. Zheng, F. Xie, T. Ji, Z. Zhu, and Y. Zheng, “Multifidelity kinematic parameter optimization of a flapping airfoil,” *Phys. Rev. E*, vol. 101, p. 013107, Jan. 2020.