Metoda Optymalizacji Bayesowskiej

Paulina Grudzińska

Wydział Matematyki i Nauk Informacyjnych
Politechniki Warszawskiej

08.07.2019

Klasyczny problem optymalizacyjny

Założenia:

1. $A \subset R^d$,
2. A jest zbiorem wypukłym,
3. f znana,
4. f wypukła i różniczkowalna.

Problem

Szukamy minimum/maksimum funkcji f w zbiorze A.

Metoda Optymalizacji Byesowskiej

1. metoda szukania ekstremum funkcji celu kosztownych do szacowania,
2. nie wymaga znajomości postaci funkcji celu,
3. można ją stosować w przypadku braku założenia wypukłości i istnienia pochodnych,
4. efektywność MBO wynika z wykorzystania informacji *a priori* do ukierunkowania próbkowania.

Twierdzenie Bayesa

Twierdzenie

$$\mathbb{P}(f|D_{1:t}) \propto \mathbb{P}(D_{1:t}|f)\mathbb{P}(f),$$

gdzie:
x_i - i-ta obserwacja,
$f(x_i)$ - wartość funkcji celu w punkcie x_i,
$x_{1:t} = \{x_1, ..., x_t\}$,
$D_{1:t} = \{x_{1:t}, f(x_{1:t})\}$,
$\mathbb{P}(f)$ - informacja *a priori* o funkcji celu.

MBO - algorytm

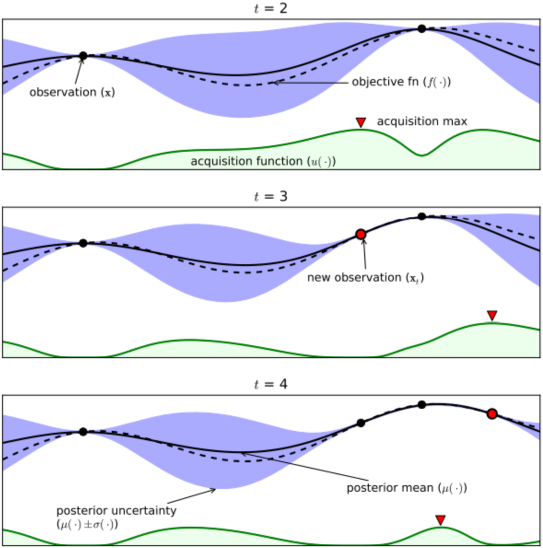
for t = 1, 2, . . . **do**

Znajdź $x_t = argmax_x \; u(x|D_{1:t-1})$.

Wyznacz $y_t = f(x_t) + \varepsilon_t$.

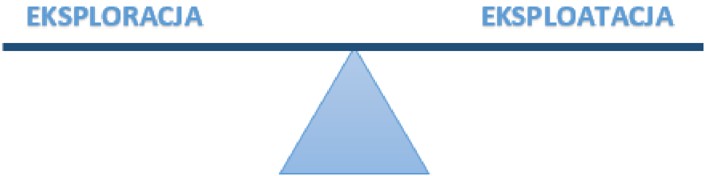
Uaktualnij zbiór danych: $D_{1:t} := \{D_{1:t-1}, (x_t, y_t)\}$.

end for



t = 2
observation (x)
objective fn ($f(\cdot)$)
acquisition max
acquisition function ($u(\cdot)$)
t = 3
new observation (x_t)
t = 4
posterior mean ($\mu(\cdot)$)
posterior uncertainty
($\mu(\cdot) \pm \sigma(\cdot)$)

Funkcja akwizycji u



Funkcja akwizycji oparta na prawdopodobieństwie poprawy

Wersja podstawowa

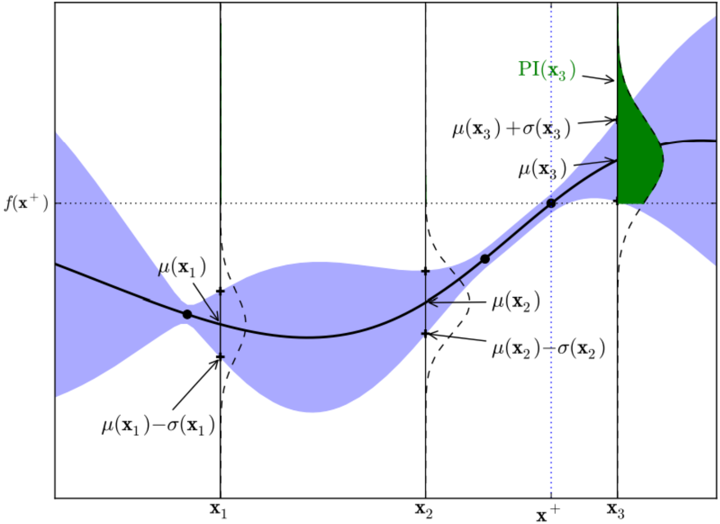
$$PI(x) = \mathbb{P}(f(x) \geqslant f(x^+)),$$

gdzie $x^+ = argmax_{x_i \in x_{1:t}} f(x_i)$.

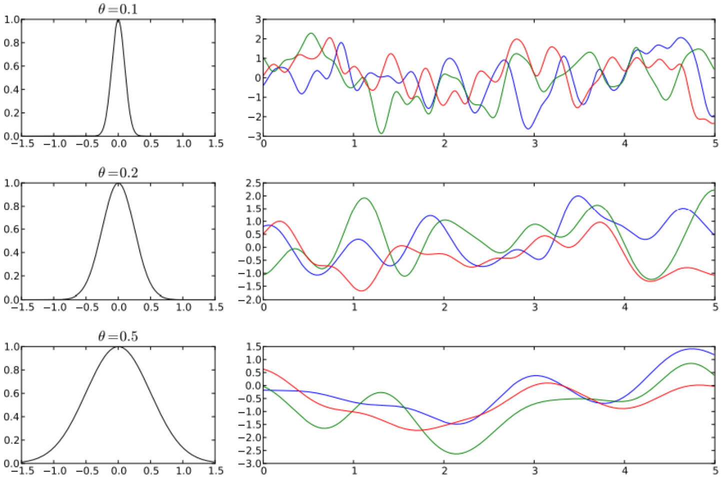
Modyfikacja

$$PI(x) = \mathbb{P}(f(x) \geqslant f(x^+) + \xi).$$

Funkcja akwizycji



Wybór jądra



Bibliography

- Brochu E., Cora V. M., de Freitas N. (2010), A Tutorial on Bayesian Optimization of Expensive Cost Functions, with Application to Active User Modeling and Hierarchical Reinforcement Learning,
- Bischl1 B., Wessing S., Bauer N., Friedrichs K., Weihs C., MOI-MBO: Multiobjective Infill for Parallel Model-Based Optimization.