贝叶斯优化的迁移学习 bo代码的基础

怎么确定条件参数的关联性，

不管是否关联，对过去数据加一个权重

细读第七页之前的东西 Analytic function test

怎么复现，想办法找

1. 解决了什么问题，一两句话说清
2. 怎么解决的，推导公式什么意义
3. 数据哪来的
4. 亮点是什么
5. 有没有不足

文章构建了一个贝叶斯优化框架semopt，它利用神经过程（NP）来偏置bo搜索空间，这就加快了优化速度，而且通过加权降低了源活动对目标活动的影响。

通常bo优化前要随机或者网格选点，

**为具有语义记忆的自驱动实验室配备数据驱动的实验计划：化学反应优化中迁移学习的案例研究**

ML算法与自动化实验室设备与Atinary的编排软件平台SDLabs结合时，还可以获得其他好处，这些技术的协同作用被称为自动驾驶实验室。我们介绍了Atinary的转移学习算法SeMOpt，这是一个通用的贝叶斯优化框架，它使用元-小样本学习，通过复合获取函数将知识从相关历史实验和数据库有效地转移到一个新的实验活动中。我们将SeMOpt应用于化学反应优化，我们进行了两个案例研究：i）五个模拟交叉偶联反应的优化，ii）在存在潜在抑制添加剂的情况下，优化钯催化的芳基卤化物与4-甲基苯胺的Buchwald-Hartwig交叉偶联。与标准的单任务ML优化器（那些没有利用历史实验或数据库的转移学习能力的优化器）相比，SeMOpt将优化速度提高了10倍或更多。

**I.INTRODUCTION**

迁移学习技术的核心：从一个问题中获得的知识被应用到一个不同但相关的问题中，SeMOpt利用神经过程（NP）来偏置BO策略运行的搜索空间。

第二节中，我们正式介绍了元学习优化问题设置，这是本文的重点。

第三节讨论了广泛关注优化活动之间知识转移策略的相关研究，以及化学中知识转移问题特有的某些考虑因素，

第四节详细阐述了我们的方法。

第五节中使用分析基准函数比较了基线优化策略方法的优化性能。最后，我们展示了如果相关反应的产率测量可用，则使用SeMOpt如何加速化学反应优化。

**II. PROBLEM SETUP**

引入函数参数空间X，非函数参数空间Xo。x∗使得f(x)最好。

两种优化类型，目标优化，源优化。

我们将在不访问源活动的情况下优化目标活动的策略称为单一任务策略，而将访问源活动数据的策略称之为元学习策略。

**III. RELATED WORK**

知识转移的三种广泛形式：

1. 来自人类专家的知识转移。通过定义参数空间的约束或参数的先验分布，专家用户可以手动注入关于搜索空间的哪些区域有望产生有希望的属性值的知识的策略。
2. 来自代理活动的知识传授。选择代理活动与目标活动并行执行，并在两个活动中进行测量时，从代理到目标动态传输知识。
3. 从现有活动中传授知识。以前完成的活动用于将知识转移到目标活动

**2和3区别：**代理活动是根据目标活动的测量值进行查询的，而源活动是在目标活动启动之前完成的。代理活动是根据用户的先验知识或信念精心选择的，单个源活动可能与目标活动表现出不同程度的相关性。

ML社区已经提出了从现有活动中转移知识的几种策略。将GP单独安装到每个源活动来解决训练复杂性，将源代理模型预测及其权重与目标活动代理相结合，以确定要测量的下一个参数可以通过i）更新目标战役中学习的替代模型的预测均值和方差或ii）通过采集函数集合来实现，第二种更好。

OpenML使超参数优化任务通常包括大量源活动和每个源活动的大量测量。然而，在化学和材料科学中，源信息的获取成本可能要高得多，而且往往缺乏标准化和组织化。因此，我们专注于为来源营销活动信息稀缺（总来源活动测量值为10秒至1000秒）的制度制定知识转移战略。

**IV. METHODS**

我们提出了一个迁移学习框架SeMOpt，它选择性地利用源活动信息来加快目标活动的优化速度。SeMOpt与方法无关，即用户不受目标活动代理模型和采集函数的任何特定选择的限制。SeMOpt通过复合采集函数评估潜在参数候选。

SeMOpt的复合采集功能受到约束采集函数（cAFs）的启发

与大多数cAF不同，SeMOpt复合捕获函数的两个术语都基于DkT动态更新，在每次目标战役迭代后都会进行扩展。

我们选择模型h作为元学习ML模型，在目标战役优化程序开始之前，h接受了关于D的元培训

在这项工作中，h属于神经过程（NP），NP假设测量值y是从函数P上的概率分布中采样的函数f的实现。概率分布P用神经网络建模，其参数通过梯度下降学习。

**V. ANALYTICAL BENCHMARKS**

五个分析基准函数，三个具有连续值参数，两个具有分类值参数，用于检查SeMOpt方法相对于基线单任务策略和相关元学习策略的性能

A、 相关源活动的连续和分类分析测试

为了生成连续参考函数的源数据，我们对应用于参考曲面的偏移和尺度扰动进行采样。

对于连续函数，优化性能是使用目标优化活动每次迭代中找到的最佳函数值与全局最优值之间的距离（称为遗憾）来评估的

作为基线，我们测试了五种单一任务策略，总之， SeMOpt策略要么表现出色，要么与其他既定技术相当

B、 不同源战役信息对优化性能的影响

为了检验源和目标活动的相似性对元学习优化器性能的影响，研究了三种场景，均使用三维AckleyPath函数作为参考：i）相关源活动ii）双模源活动iii）不相关的源活动。这些结果证实，使用我们的复合获取函数是对无信息源数据的更可靠的保护。

**六、 模拟交叉耦合反应的优化**

我们考虑了Reizmann[71，72]研究的五个模拟案例，这些案例旨在测试我们的策略在对具有未知影响的相关反应数据（如副反应的存在、催化剂失活和实验测量噪声）进行训练时，如何适应目标反应优化活动。

**七、钯催化的卤代芳烃BUCHWALD-HARTWI交叉偶联的优化**

我们考虑Ahneman等人[76]介绍的数据集，它包含在不同异恶唑添加剂、钯催化剂配体和碱的存在下，通过高通量实验获得钯催化的卤代芳烃与4-甲基苯胺的Buchwald-Hartwig交叉偶联的产率值。

假设可以访问历史数据和连续实验，在这种特定情况下使用SeMOpt将导致总实验时间和所需试剂成本大约减少10倍去找到有希望的分类反应参数

**八、讨论和总结**

A、 局限性和未来发展

首先，我们只研究了标量值目标的优化。然而，反应条件、功能分子和先进材料的设计本质上是一个多目标优化问题。

第二，我们没有考虑分类变量选项的分子描述符，因为我们试图在基准实验中隔离单一任务和元学习策略之间的比较。这项工作中的所有分子表示都是一个热编码。 分子表征对反应优化性能的影响仍然是一个活跃的研究领域，应该在未来的研究中加以解决

最后，元学习策略的优化性能（相对于单个任务策略）与目标和源活动之间的“相似性”之间的关系还没有很好地理解。今后的工作应设法确定哪一个类似的指标最能描述这种关系。

B、 结论

**九、 神经过程模型细节**

NP架构由三个模型组成：确定性编码器、潜在编码器和解码器。每个模型都是一个完全连接的多层感知器（MLP）。

A、 注意力神经过程

平均值会给每个上下文点带来同等的权重，注意神经过程（ANP）通过用交叉注意机制代替平均聚集步骤来解决这个问题。

B、 神经过程超参数

**十、 相关元学习贝叶斯优化策略的实现细节**

所有策略都使用BoTorch库在内部实施

1. 传输采集功能实现细节

Transfer acquisition functions (TAFs)

1. 秩加权高斯过程集成实现细节

异或的数学符号为“⊕”，同为0，异为1

1. 多任务高斯流程实现细节

但该方法存在训练复杂性，当源活动数据丰富时，该方法无法实际使用

1. 深层内核传输实现的详细信息

**十一、目标活动获取功能**

**十二、分析基准**

1. 连续曲面
2. 分类曲面

**十三、模拟反应优化实验的完整结果**

**十四、BUCHW-ALD-HARTWIG反应优化实验的完整结果和细节**

* 1. 有没有可能是模型加权重，而不是获取函数
  2. 留一交叉验证是每一个点都去掉一次 建模 算rank loss 。