



Duomenų mokslo ir
skaitmeninių technologijų
institutas

Bajeso metodai juodosios dėžės globaliajam optimizavimui

Ataskaita už 2022/2023 I pusmečio mokslo metus

Doktorantūros pradžios ir pabaigos metai: 2019 – 2023

Doktorantas Sauliaus Tautvaišas
Darbo vadovas dr. Julius Žilinskas

2023-03-21

Doktorantūros studijų planas

Studijų metai	Egzaminai	
	Planas	Įvykdyta
I (2019/2020)	2	2
II (2020/2021)	2	2
III (2021/2022)		
IV (2022/2023)		
Iš viso:	4	4

Studijų metai	Dalyvavimas konferencijose				Publikacijos					
	Tarptautinėse		Nacionalinėse		Su citav. rodikliu			Be citav. rodiklio		
	Planas	Įvykdyta	Planas	Įvykdyta	Planas	Įvykdyta	Būklė	Planas	Įvykdyta	Būklė
I (2019/2020)										
II (2020/2021)		1								
III (2021/2022)	1	1			1	1	„Publikuota“			
IV (2022/2023)	1				1	1	„Įteikta“			
Iš viso:	2	2			2	2				

Ataskaitiniai studijų metai (IV: 2022/2023 m.m. I pusmetis)

Publikacijos			
Planas	Įvykdyta	Būklė	Publikacijos tipas
Journal Of Global Optimization	Tautvaišas S., Žilinskas J. "Heteroscedastic Bayesian Optimization using Generalized Product of Experts"	<u>Įteikta: 2022-12-30</u>	Žurnalo 2020 <u>cituojamumo rodiklis</u> (<i>impact factor</i>) CA WoS duomenų bazėje 2.207

Doktorantūros studijų pasiekimai

Dalyvavimas tarptautinėse konferencijose	
	Aprašas
1.	Tautvaišas S., Žilinskas J. , “Scalable Bayesian Optimization with Generalized Product of Experts”, “World Congress on Global Optimization 2021 (WCGO 2021)“, Liepos 7-10 d., 2021 , Atėnai, Graikija. Dalyvauta nuotoliniu būdu.
2.	Tautvaišas S., Žilinskas J. “Noisy Global Bayesian Optimization using Generalized Product of Experts”, “HUGO 2022 - XV. Workshop on Global Optimization“, Rugsėjo 6-8 d., Segedas, Vengrija, 2022. Dalyvauta nuotoliniu būdu.

Publikacijos (tik su citavimo rodikliu)		
	Bibliografinis aprašas	Būklė
1.	Tautvaišas, Saulius; Žilinskas, Julius. Scalable Bayesian optimization with generalized product of experts; Journal of global optimization. Dordrecht : Springer. ISSN 0925-5001. eISSN 1573-2916. 2022, p. [1-26]. DOI: 10.1007/s10898-022-01236-x.	„Publikuota“
2.	Tautvaišas S., Žilinskas J. "Heteroscedastic Bayesian Optimization using Generalized Product of Experts", Journal of global optimization, 2023	<u>Iteikta: 2022-12-30</u> Žiūrėti Priedas A.

Mokslinių tyrimų ir disertacijos rengimo etapai(I)

Darbo pavadinimas	Atlikimo terminai	Pastabos
<p>2.4. Gautų duomenų analizė, apibendrinimas, išvadų parengimas:</p> <p>2.4.1. Teorinio ir empirinio tyrimo apibendrinimas.</p> <p>2.4.2. Palyginti gautus rezultatus su kitų mokslininkų rezultatais.</p> <p>2.4.3. Esminių rezultatų išskyrimas ir rekomendacijų parengimas</p>	<p>2022-10-01 – 2023-03-31</p>	<ul style="list-style-type: none">• Atlikus teorinį tyrimą buvo išskirtos pagrindinės Bajeso optimizavimo probleminės sritys.• Pasiūlytos Bajeso optimizavimo modifikacijos, paspartinančios optimizavimo trukmę ir galinčios modeliuoti duomenis, kai duomenų trukšmo lygis yra kintamas.• Gauti rezultatai parodė, kad pasiūlytos Bajeso optimizavimo algoritmo modifikacijos davė geresnius rezultatus negu egzistuojantys algoritmai.

Mokslinių tyrimų ir disertacijos rengimo etapai(II)

	Darbo pavadinimas	Atlikimo terminai	Pastabos
3.	<p>Atskirų daktaro disertacijos dalių (tyrimo metodikos, rezultatų, ginamų teiginių, išvadų, ir kt.) parengimas:</p> <p>3.1. Apžvalga</p> <p>3.2. Teorinis tyrimas</p> <p>3.3. Eksperimentinis tyrimas</p> <p>3.4. Išvadų parengimas</p>	<p>2019-10-01 – 2020-09-30</p> <p>2020-10-01 – 2021-09-30</p> <p>2021-10-01 – 2022-09-30</p> <p>2022-10-01 – 2023-03-31</p>	<p>Parengta Bajeso ir kitų metodų taikomų globaliajam optimizavimui literatūros apžvalga.</p> <p>Apžvelgti Bajeso metodų trūkumai ir suformuota probleminė sritis. Suformuluoti uždaviniai Bajeso metodų probleminės srities sprendimui. Pasirinkta tyrimo metodika iškeltiems uždaviniams spręsti. Išanalizuoti esami Bajeso optimizacijos algoritmai taikomi aukštos dimensijos problemoms spręsti. Pasiūlyta galima algoritmo modifikacija, galinti padidinti optimizavimo efektyvumą.</p> <p>Sukurtos Bajeso optimizacijos modifikacijos paremtos Gauso ekspertų modeliais. Sukurtų modelių efektyvumas palygintas su kitais BO modeliais. Modeliai įvertinti naudojant skirtingos dimensijos optimizavimo uždavinius ir skirtingus duomenų triukšmo lygius.</p> <p>Apibendrinti gauti rezultatai ir išskirti esminiai rezultatai. Parengtos išvados pagal gautus tyrimo rezultatus.</p>
4.	Daktaro disertacijos parengimas ir svarstymas padalinyje	2023-04-01	
5.	Daktaro disertacijos gynimas	2023-09-30	

Tyrimo objektas ir tikslai

- Tyrimo objektas:
 - Bajeso optimizacijos metodai.
- Tyrimo tikslas:
 - Tobulinti ir modifikuoti esamus Bajeso optimizavimo metodus, siekiant didinti jų efektyvumą.

Tyrimo uždaviniai

- Atlikti naujausios mokslinės literatūros apžvalgą ir analizę Bajeso metodų taikymo globalios optimizacijos srityje;
- Palyginti ir išanalizuoti esamus Bajeso metodus ir jų modifikacijas globaliam optimizavimui;
- Modifikacijų pasiūlymas ir naujų Bajeso optimizacijos metodų kūrimas;
- Sukurtų metodų efektyvumo įvertinimas ir palyginimas su esamais metodais.

2022/2023 m. m. I pusmečio atlikti darbai

➤ Moksliniai tyrimai

- ✓ Parengtas ir įteiktas straipsnis;
- ✓ Apibendrinta gautų duomenų analizė ir parengtos išvados;
- ✓ Esminių rezultatų išskyrimas ir rekomendacijų parengimas.

2022/2023 m. m. I pusmečio mokslinių
rezultatų pristatymas

Black-box Optimization

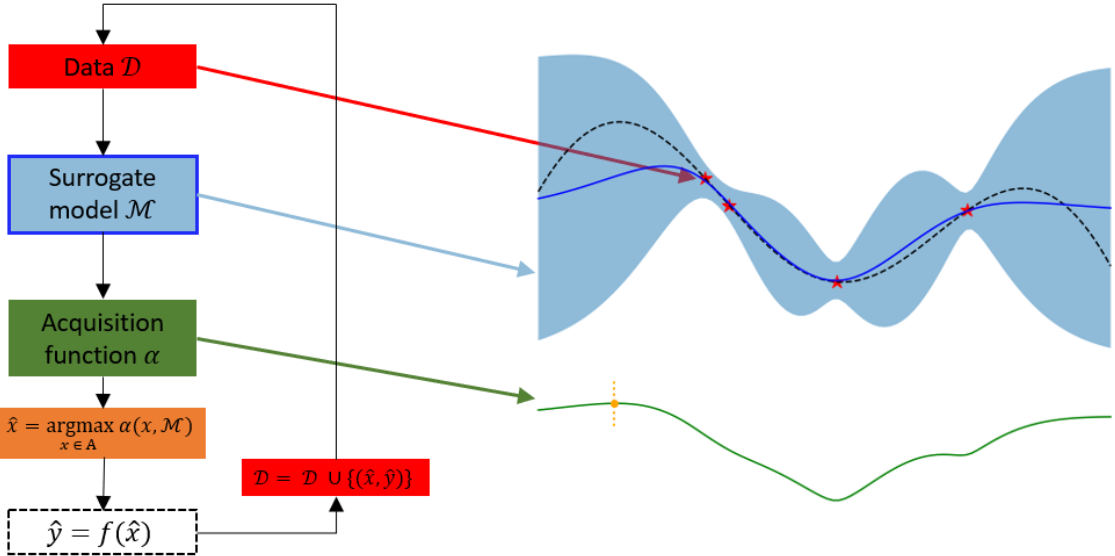
Goal: $x^* = \max_{x \in \mathcal{X} \subset \mathbb{R}^d} f(x)$

Black-box function:

- f is non-convex
- f is expensive to evaluate
- no gradient information
- evaluations can be noisy

Bayesian Optimization

- 1: **Inputs:** objective f , acquisition function α , search space \mathcal{X} , model \mathcal{M} , initial design \mathcal{D}
- 2: **repeat:**
- 3: Fit the *surrogate model* \mathcal{M} to the **data** \mathcal{D}
- 4: Maximize the *acquisition function*: $\hat{x} = \arg \max_{x \in \mathcal{X}} \alpha(x, \mathcal{M})$
- 5: Evaluate the function: $\hat{y} = f(\hat{x})$
- 6: Add the new data to the data set: $\mathcal{D} = \mathcal{D} \cup \{(\hat{x}, \hat{y})\}$
- 7: **until** termination condition is met
- 8: **Output:** the recommendation $x^* = \arg \max_{x \in \mathcal{X}} \mathbb{E}_{\mathcal{M}}[f(x)]$



$$x_* = \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X} \subset \mathbb{R}^d} f(x)$$

unsolvable!



$$x_{t+1} = \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{X} \subset \mathbb{R}^d} \alpha(x, \mathcal{M})$$

solvable!

Limitations of Bayesian Optimization

- **Scalability**

- Training time and space complexity $O(n^3)$ and $O(n^2)$ respectively.

- **Non-stationarity**

- Standard GP model in BO implicitly assume that the noise variance remains constant in the whole search space.

Extending Bayesian Optimization

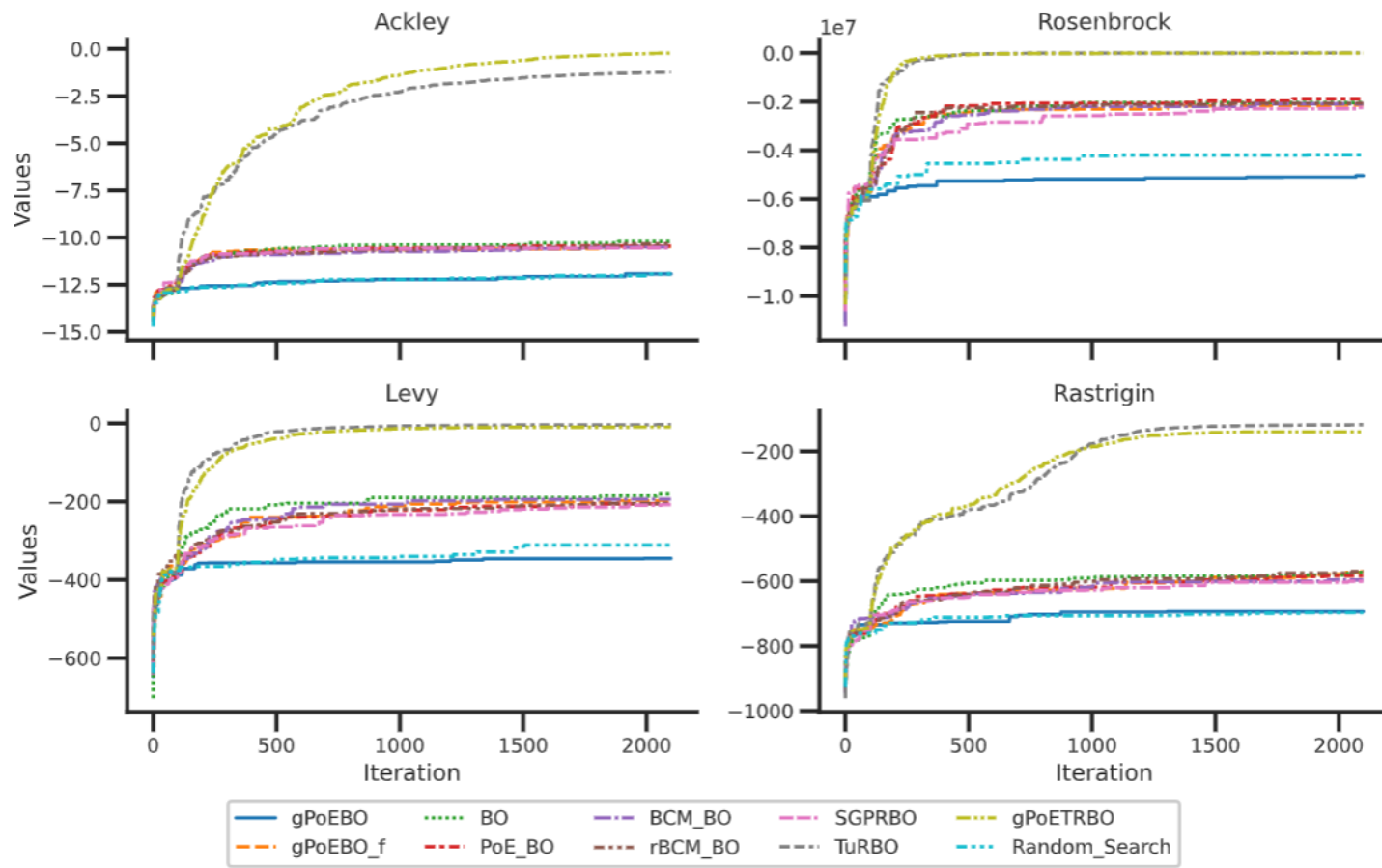
For **scalability**, we proposed two modifications to scale the BO to large number of observations using Generalized Product of Experts model (**gPoEBO**) and trust regions-based algorithm (**gPoEBOTR**).

For **non-stationarity**, we present a heteroscedastic GPOE based BO (GPOEBO) algorithm for global optimization which is capable of optimizing the functions with heteroscedastic noise variance.

Numerical Experiments for Scalable Bayesian Optimization

- **Baseline algorithms**: We compare the performance and running times of our proposed **gPoEBO** and **gPoETRBO** algorithms with other GP experts-based BO models (**PoE BO**, **BCM BO**, **rBCM BO**), sparse GP based BO (**SGPRBO**), standard **BO**, **TuRBO** and **Random Search** algorithms.
- **Benchmarks**: We evaluated and compared the performance for all algorithms on synthetic *20D* and *50D* Rosenbrock, Levy, Ackley, Rastrigin global optimization benchmark functions and on real life 12D Lunar Landing, 14D robot pushing and 60D rover trajectory planning continuous optimal control problems.

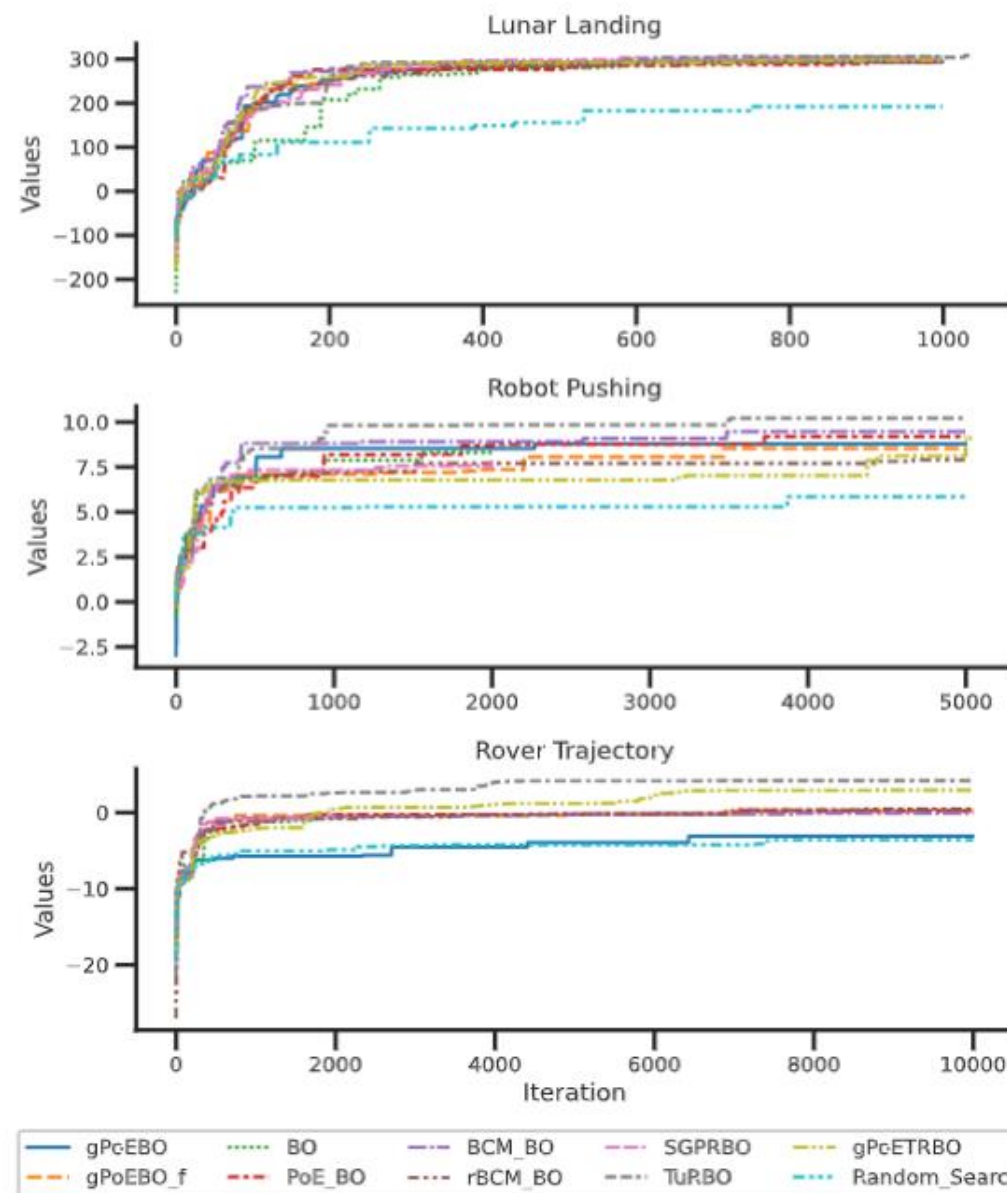
Optimization performance on 50D benchmark functions



Model	Ackley	Rosenbrock	Levy	Rastrigin
BO	17388.273 (1858.737)	19893.231 (2011.091)	25690.148 (997.904)	21093.616 (540.624)
PoE_BO	2244.812 (66.189)	2924.190 (123.574)	3305.685 (139.850)	3886.263 (129.530)
BCM_BO	2269.010 (58.671)	3001.214 (100.393)	3324.535 (128.264)	3984.716 (58.673)
rBCM_BO	2235.832 (55.324)	2920.929 (109.558)	3332.704 (88.607)	3625.325 (201.311)
gPoEBO_f	2200.432 (97.215)	2947.697 (87.119)	3314.335 (125.566)	3717.829 (144.038)
gPoEBO	2123.860 (19.559)	2157.512 (17.734)	2109.236 (17.261)	2116.775 (25.977)
TuRBO	26864.023 (1921.912)	25075.302 (99.474)	26240.322 (289.881)	25365.491 (94.976)
gPoETRBO	2265.742 (56.076)	2058.945 (29.689)	2108.032 (68.645)	2071.761 (33.439)
SGPRBO	9260.272 (138.201)	9430.895 (367.998)	9154.619 (110.815)	9329.038 (185.747)
Random_Search	0.304 (0.018)	0.257 (0.054)	0.512 (0.069)	0.212 (0.032)

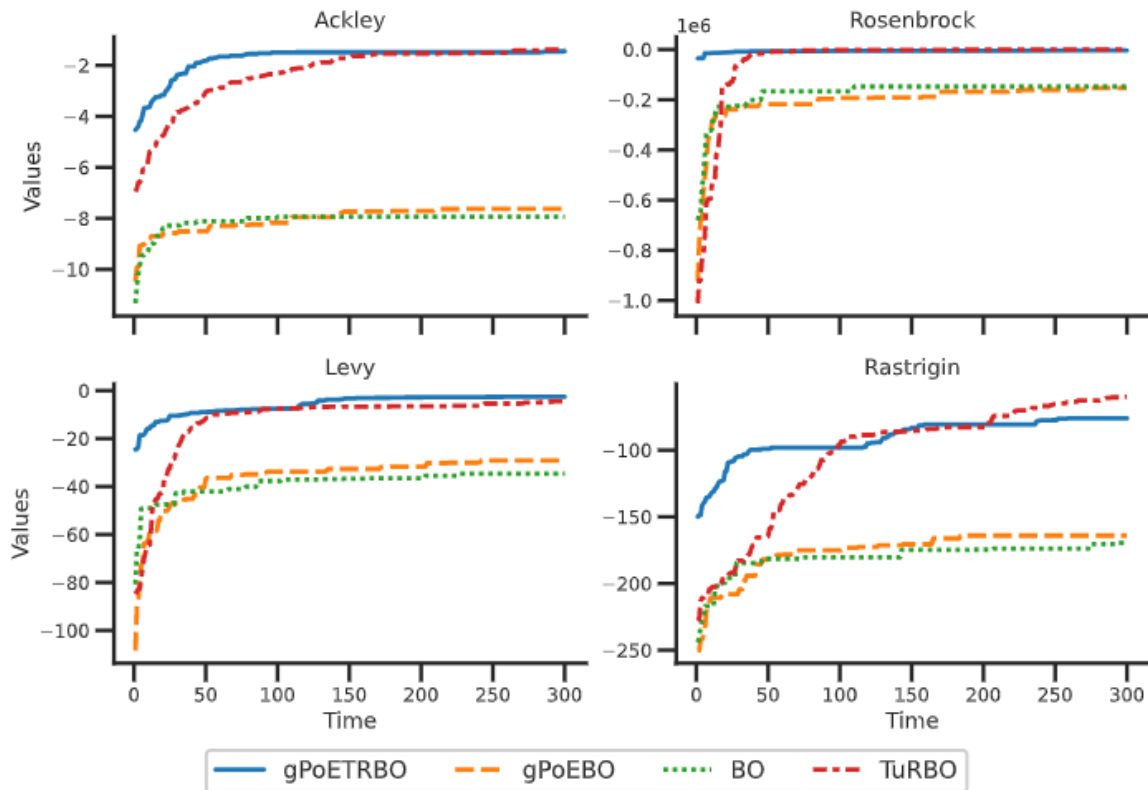
Optimization performance on optimal control problems

Model	12D Lunar Landing	14D Robot Pushing	60D Rover Trajectory
BO	7075.555 (1995.906)	8972.261 (659.187)	11083.001 (121.252)
PoE_BO	1146.710 (139.087)	3550.812 (21.950)	28004.079 (724.833)
BCM_BO	1004.450 (105.564)	3424.899 (39.532)	27947.945 (496.754)
rBCM_BO	987.079 (57.678)	3481.163 (192.793)	31972.164 (1299.382)
gPoEBO_f	962.113 (166.063)	3350.469 (119.729)	27262.038 (389.318)
gPoEBO	664.947 (82.385)	1895.881 (5.192)	5322.493 (54.741)
TuRBO	499.557 (135.357)	1288.586 (39.326)	31219.460 (755.911)
gPoETRBO	426.478 (41.860)	1113.866 (18.665)	4981.538 (89.362)
SGPRBO	970.373 (51.176)	8273.872 (54.583)	9346.468 (442.238)
Random_Search	43.447 (10.320)	24.744 (0.155)	11.893 (1.148)

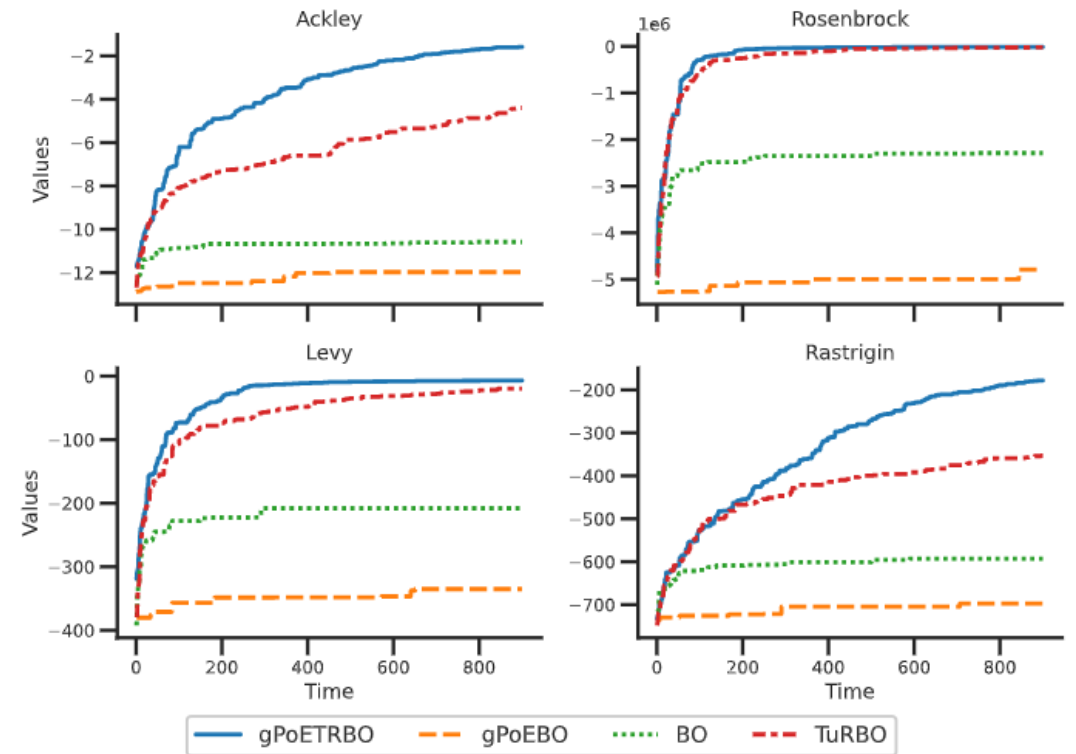


Time restricted optimization experiments

20D benchmark functions



50D benchmark functions



Numerical Experiments for Heteroscedastic Bayesian Optimization

- **Baseline algorithms**: We compare the performance of POE based BO (**POEBO**) and GPOE based BO (**GPOEBO**) using our proposed modifications of acquisition functions (HAEI, ANPEI) against heteroscedastic BO model using MLHGP model (**MLHGPBO**). Also, we include the results of homoscedastic BO with EI (**BO EI**) and AEI(**BO AEI**) acquisition functions.
- **Benchmarks**: We evaluated and compared the performance for all algorithms on 2D (Branin, GoldsteinPrice), 4D (Hartman, Rosenbrock) and 6D (Hartman, Sphere) synthetic global optimization functions and on two real-world scientific datasets.

Synthetic Benchmark Functions Optimization

The optimization performance table (the mean and standard deviation of absolute error between the function value at best found point and the actual function maximum) for all synthetic benchmark functions.

Function	Branin	GoldsteinPrice	Hartmann4D	Rosenbrock	Hartmann6D	Sphere
BO_EI	0.0422 (0.0370)	0.8930 (0.5840)	0.1839 (0.1927)	0.0048 (0.0055)	0.3473 (0.2477)	0.0236 (0.0099)
BO_AEI	0.0422 (0.0322)	0.8966 (0.5946)	0.1734 (0.1858)	0.0055 (0.0064)	0.3056 (0.1999)	0.0235 (0.0098)
GPOEBO_HAEI	0.0333 (0.0273)	0.8265 (0.5558)	0.1759 (0.1517)	0.0039 (0.0034)	0.2932 (0.2144)	0.0156 (0.0063)
GPOEBO_ANPEI	0.0332 (0.0262)	0.8371 (0.5237)	0.1630 (0.1464)	0.0057 (0.0071)	0.3109 (0.2035)	0.0171 (0.0066)
POEBO_HAEI	0.0406 (0.0330)	0.9671 (0.5655)	0.8603 (0.6499)	0.0834 (0.0620)	1.3205 (0.1804)	0.0043 (0.0027)
POEBO_ANPEI	0.0371 (0.0294)	0.9509 (0.5859)	1.0092 (0.5935)	0.0945 (0.0566)	1.3242 (0.1771)	0.0040 (0.0025)
MLHGPBO_HAEI	0.0443 (0.0319)	1.0693 (0.5463)	0.2851 (0.2197)	0.0214 (0.0159)	0.5252 (0.2984)	0.0204 (0.0088)
MLHGPBO_ANPEI	0.0465 (0.0444)	1.0004 (0.6133)	0.3079 (0.2473)	0.0245 (0.0127)	0.5231 (0.3439)	0.0174 (0.0042)
RANDOM_SEARCH	0.0802 (0.0748)	1.5819 (0.5698)	1.0465 (0.4233)	0.0234 (0.0241)	0.9077 (0.2488)	0.0082 (0.0040)

Conclusions

1. To alleviate the scalability issues of standard BO, we proposed two new algorithm gPoEBO and gPoETRBO for global Bayesian Optimization with large number of observations:
 - 1.1 Our proposed gPoETRBO algorithm and TuRBO achieve the best performance on all 50D synthetic benchmark functions compared to other models;
 - 1.2 Trust region based gPoETRBO matches the performance of the state-of-the-art TuRBO algorithm and achieves a better accuracy on the Ackley function. The runtimes for gPoETRBO are up to 10 times shorter than the TuRBO;
 - 1.3 The gPoEBO algorithm showed the best runtimes on all functions and the best performance on Levy and Rastring functions compared to other GP experts-based BO models;
 - 1.4 Experiments on real-life problems with up to 10K observations showed that our proposed algorithms are efficient and scalable. The gPoETRBO achieved better accuracy than standard BO with 8-10 times shorter runtimes and matched the performance of TuRBO with up to 6 times improvement in runtime;
 - 1.5 The experiments with time restricted budget on 20D and 50D synthetic benchmark functions with time budgets of 5 and 15 minutes, showed that gPoETRBO achieved similar or better performance on 20D functions and outperformed other algorithms all 50D benchmark functions.

Conclusions

2. We have presented an approach for performing heteroscedastic Bayesian optimization using the generalized product of experts with excising heteroscedastic acquisition functions:
 - 2.1 The results showed that GPOEBO had at least 20% lower mean absolute error on all synthetic benchmark functions compared to other algorithms except on Sphere function.
 - 2.2 The MAE for GPOEBO was up to 2 times lower compared to MLHGPBO on all benchmark functions;
 - 2.3 Compared to the other product of expert model (POEBO), our proposed GPOEBO model had between 16% to 315% lower MAE on most benchmark functions except on Sphere function, where the MAE was 75% higher.
 - 2.4 The results on real-life scientific problems showed that GPOEBO_HAEI and GPOEBO_ANPEI on average achieved 20-30 % better optimization accuracy compared to MLHGPBO model;
 - 2.5 Finally, we showed that optimization performance for our proposed algorithms is sensitive to the number of points allocated to each GP experts and its performance can degrade significantly if the number is set incorrectly. Our experiments showed that setting 3xD number of points per expert for each problem was the optimal number.

2022/2023 m. m. I pusmečio darbo planas

- Disertacijos rengimo etapas
 - Daktaro disertacijos parengimas.

Ačiū už dėmesį!

Priedas A

← Submissions Being Processed for Author

Page: 1 of 1 (1 total submissions)

Results per page 10

Action	Manuscript Number	Title	Initial Date Submitted	Status Date	Current Status
View Submission View Reference Checking Results Send E-mail	JOGO-D-22-00451	Heteroscedastic Bayesian Optimization using Generalized Product of Experts	30 Dec 2022	20 Feb 2023	Under review

Page: 1 of 1 (1 total submissions)

Results per page 10