

УДК 004.023

РАЗРАБОТКА МЕТОДА ГЕНЕРАЦИИ ИНИЦИАЛИЗИРУЮЩЕГО МНОЖЕСТВА ТОЧЕК ДЛЯ  
УЛУЧШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ БАЙЕСОВСКОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Самсикова М.Д. (Университет ИТМО)

Научный руководитель – аспирант Антонов К.А.

(Университет ИТМО)

**Введение.** Байесовская оптимизация - это итеративный метод поиска оптимума целевой функции, основанный на построении ее вероятностной модели. Целевая функция зачастую является “черным ящиком”, то есть решение оптимизационной задачи осуществляется в условиях полного или почти полного отсутствия информации о структуре функции. Кроме того, на практике вычисление функции требует временно- или ресурсно-дорогих вычислений. Таким образом, данный метод оптимизации применяется в случаях, когда необходимо минимизировать количество вычислений сложной целевой функции с неизвестной структурой и при этом найти решение близкое к оптимальному. Недавние исследования показывают, что байесовская оптимизация является многообещающим инструментом для решения подобных задач [1]. Процесс Байесовской оптимизации состоит из двух этапов: вычисление значений целевой функции на некотором начальном наборе точек и итеративный процесс построения модели. Несмотря на то что вторая часть процесса является хорошо изученной, существует лишь несколько исследований, посвященных первому этапу [2]. Более того, во многих из них данная проблема рассматривается лишь в контексте решения некоторой задачи, например, для поиска гипер-параметров [3]. В число возможных способов инициализации входят такие методы как: использование последовательностей с малым расхождением [4], пустое инициализирующее множество [2], использование методов мета-обучения для построения инициализирующего множества [5].

**Основная часть.** В работе производится сравнение существующих способов инициализации и анализ их недостатков, а также предлагается новый способ, разработанный с учетом сделанных наблюдений. В качестве существующих способов инициализации используются последовательности Соболя и Халтона, выборка Латинского Гиперкуба, равномерно распределенные последовательности, сгенерированные с помощью вихря Мерсенна. Рассматриваются множества размера от шести до шестнадцати, состоящие из точек в пространстве размерности от двух до семи, сгенерированные каждым из рассмотренных методов. Экспериментальный анализ методов происходит на основании сравнения таких множеств по трем критериям:

- 1) Критерий качества решений, полученных после процесса Байесовской оптимизации при использовании инициализирующих множеств, сгенерированных каждым из данных методов;
- 2) Критерий коэффициентов детерминации модели перед началом итеративного процесса оптимизации и после его завершения;
- 3) Критерий расхождения множества точек, оцениваемый как L2-star discrepancy. На основании проведенного анализа предлагается новый метод, показывающий лучший результат по первому и второму критериям на нескольких классах функций и не проигрывающий на остальных рассмотренных классах. Разработанный метод генерирует последовательность из  $N$  точек используя  $N$  последовательных итераций. На каждой их них строится вероятностная модель целевой функции по точкам, сгенерированным ранее. В итоговое множество добавляется точка с максимальным стандартным отклонением, оцененным при помощи модели. Для поиска этой точки решается задача оптимизации функции стандартного отклонения модели.

**Выводы.** Произведен анализ влияния инициализирующих множеств точек на эффективность байесовской оптимизации. Разработан новый метод для генерации инициализирующего множества и показаны его преимущества по сравнению с существующими методами на

различных классах функций. Планируется расширение этого метода на задачи оптимизации с ограничениями.

#### **Список использованных источников:**

1. Shahriari, B., Swersky, K., Wang, Z., Adams R. P. and de Freitas N., 2016. Taking the Human Out of the Loop: A Review of Bayesian Optimization. In Proceedings of the IEEE. (Vol. 104, No 1, pp. 148–175).
2. Bossek, J., Doerr, C. and Kerschke, P., 2020, June. Initial design strategies and their effects on sequential model-based optimization: an exploratory case study based on BBOB. In Proceedings of the 2020 Genetic and Evolutionary Computation Conference (pp. 778-786).
3. Feurer, M., Springenberg, J. and Hutter, F., 2015, February. Initializing bayesian hyperparameter optimization via meta-learning. In Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence (Vol. 29, No. 1).
4. Bossek, J., Kerschke, Neumann, A., Neumann, F. and Doerr, C., 2019. One-Shot Decision-Making with and without Surrogates. CoRR.
5. Souza, A., Nardi, L., Oliveira, L.B., Olukotun, K., Lindauer, M. and Hutter, F., 2021. Bayesian optimization with a prior for the optimum. In Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases. Research Track: European Conference, ECML PKDD 2021, Bilbao, Spain, September 13–17, 2021, Proceedings, Part III 21 (pp. 265-296). Springer International Publishing.