arXiv:2611.32092v2 [cs.LG] 25 Nov 2026

用于多保真贝叶斯优化的融合高斯过程赌博机框架

Muyun Lu[1] **Jose E Aguilar Escamilla**[2] **Huazheng Wang**[2]

Ying Lin[1]*

[1] 休斯敦大学工业与系统工程系[2] 俄勒冈州立大学电气工程与计算机科学学院

摘要

贝叶斯优化（BO）广泛用于最大化昂贵的黑箱函数，尤其是在直接评估成本高昂时。在许多实际应用中，高保真目标函数可以通过一系列低保真模型进行近似；这些模型以大幅降低的成本提供虽不完整但有价值的信号。多保真贝叶斯优化（MFBO）算法旨在策略性地结合这些信息源，在准确性与评估成本之间实现最佳权衡。然而，现有的多保真贝叶斯优化方法往往过度简化不同保真度层级之间的复杂依赖关系，或依赖缺乏理论性能保证的启发式采集函数。为解决这些局限，我们将多保真贝叶斯优化问题重新表述为融合高斯过程老虎机，并据此提出融合高斯过程上置信界（FGP-UCB）算法。我们的方法通过自回归高斯过程模型融合多保真观测，准确预测高保真函数，并明确量化不同保真度层级参数估计所带来的不确定性。所提出的方法还提供理论上的简单遗憾保证，克服了现有多保真贝叶斯优化算法缺乏可证明性能界这一关键局限。理论分析和实证研究均验证了所提方法的有效性。

1 引言

在计算科学和工程的许多领域，优化评估成本高昂的黑箱函数是一项重大挑战。例如，调整机器学习模型的架构和超参数 [Snoek 等人， 2012], 设计具有理想物理特性的材料 [Ueno 等人, 2016年，Zhang 等人， 2020], 以及在工程设计中优化气动外形 [Marchildon 和 Zingg， 2024] 这些任务都需要反复评估成本高昂的黑箱目标函数。这些复杂系统通常缺乏明确的数学形式或导数信息，因此传统的基于梯度的方法无法适用。此外，由于单次函数评估的计算成本高昂，

需要大量迭代的方法往往并不实用。为了解决这些局限，贝叶斯优化（BO）已成为一种框架，能够在最小评估预算下高效优化此类函数。

贝叶斯优化按顺序进行，通过代理模型和采集函数来确定下一个评估点。代理模型通常采用高斯过程（GP） [Rasmussen， 2004],以概率方式估计高保真函数，同时捕捉预测值及其相关的不确定性。采集函数利用这种不确定性来平衡探索

*通讯作者：ylin53@Central.UH.EDU

预印本。

（搜索新的区域）与利用（细化已知的有希望区域）。常见的采集策略包括期望改进（EI） [Mo˘ckus， 1975], 改进概率（PI） [Kushner，1964], 以及上置信界（UCB） [Auer 等人，2002年，Auer，2002年，Dani 等人， 2008]。其中，基于上置信界的方法具有计算上明确的闭式表达式，并带有可调参数，能够直接控制探索-利用权衡，同时为累积遗憾收敛提供强有力的理论保证。

尽管标准贝叶斯优化具有较高的数据效率，但要实现收敛仍可能需要大量评估。在先进制造或航空航天工程等领域，这会带来巨大挑战，因为查询真正的高保真函数成本高得令人难以承受。例如，在制造过程的序贯实验设计中，质量评估通常依赖离线实验，这类实验虽然准确，但耗时较长 [Zhang 等人， 2023]。同样，在飞机设计中，计算流体力学（CFD）模型等高保真仿真计算成本高昂，限制了传统贝叶斯优化的适用性 [Mackman 等人， 2013]。

为降低这些成本，研究人员提出利用多保真数据，同时纳入高保真度（成本高、精度高）和低保真度（成本低、近似）的评估 [Kandasamy 等人， 2016]。在线传感器或简化仿真等数据源能够更快地提供系统质量估计，尽管其准确度较低。多保真贝叶斯优化（MFBO）利用这些异构数据源加快收敛，同时不牺牲准确性。其核心策略是利用低保真度评估广泛探索设计空间，同时保留高保真度查询，用于优化有希望区域中的解 [Mackman 等人， 2013]。

现有的 MFBO 方法可根据其理论形式大致分为两类：一类立足于多臂老虎机框架，另一类采用决策论或代理模型中心框架。决策论方法和代理模型中心方法——包括基于改进的方法和信息论方法——优先选择能够最大化相对于成本的效用，或减少关于最优值的认知不确定性的样本。例如，增强期望改进 (AEI) [Huang 等人，2006年（b），a]以及多保真知识梯度（MF-KG）等扩展方法 [Poloczek 等人， 2017] 旨在最大化单位成本的期望改进。类似地，多保真度最大值熵搜索（MF-MES）等信息论算法 [Takeno 等人， 2020] 着重查询那些预期能够最大程度降低全局最优值相关不确定性的点。尽管这些方法在实践中往往有效，却没有明确采用面对不确定性保持乐观原则来引导探索–利用权衡。相反，它们优先考虑期望效用或信息增益，因此更难以系统地量化探索并确立理论性能保证。此外，计算方面的挑战（例如，MF-MES 中精确计算互信息难以实现）或深度代理模型对数据的高需求（例如，深度神经网络多保真度贝叶斯优化 [Li 等，2020年，Meng 等人， 2021]限制了这些方法在数据稀缺或高成本场景下的稳健性。

为解决这些框架中缺乏明确的乐观驱动的探索–利用机制这一问题，另一类研究将多保真贝叶斯优化建模为多臂老虎机问题。一种具有代表性的方法是 MF-GP-UCB [Kandasamy 等人， 2019], 该方法通过使用相互独立的高斯过程对每种保真度进行建模，并依据成本加权的上置信界选择查询点，从而扩展了经典 GP-UCB 算法。这一建模方式在优先分配成本低廉的低保真度评估进行广泛探索、随后进行高保真验证的同时，提供了次线性遗憾保证。然而，MF-GP-UCB 存在若干局限性。首先，其建模框架将不同保真度视为相互独立，因此无法充分利用实际应用中普遍存在的丰富跨保真度相关性。其次，其遗憾分析依赖于保真度之间一致有界差异假设；在复杂的现实系统中，近似误差可能随设计空间发生显著变化，这一假设因而具有较强限制性。因此，所得置信界可能过于保守，限制算法有效利用具有信息量的低保真观测的能力，并降低整体样本效率。

这些局限性表明，我们需要一类新算法，将基于老虎机的遗憾最小化的理论严谨性与相关多保真代理模型（如自回归高斯过程（ARGP）或协同克里金模型）的建模能力相结合 [Forrester 等人， 2007]。尽管 ARGP 模型在稀疏建模方面已取得成功，但将其用于多保真老虎机优化仍有待深入研究。一个主要挑战在于模型的结构依赖性：要预测特定位置的高保真响应，通常需要已观测到的低保真度数据；如果缺少此类数据，使用替代预测就会引入额外误差。此外，ARGP

模型通常通过期望最大化（EM）或采样算法进行估计 [Cheng 等人，2021年，Baillie 等人， 2025]。这些算法所得估计量的不确定性在理论上难以量化，而不确定性估计失准会严重削弱采集函数（如上置信界（UCB））的效果，进而导致保真度和查询选择不理想。

为弥补这一空白，本文提出**融合高斯过程上置信界（FGP-UCB）**，这是一种基于老虎机框架的新型多保真贝叶斯优化算法，旨在解决上述局限。我们将自回归高斯过程框架扩展为融合高斯过程代理模型，通过潜在相关结构对高保真和低保真函数进行联合建模，并将其与基于上置信界（UCB）的采集策略相结合，从而提供次线性遗憾保证。FGP-UCB 在预测中明确捕捉保真度间相关性和残差，同时考虑参数不确定性。此外，我们在这一融合高斯过程模型下构建了多保真贝叶斯优化问题，并提出了一种基于上置信界（UCB）原理的新采集策略。我们从后验不确定性推导出一个新参数，其设计灵感源自基于 LinUCB 的遗憾分析 [Abbasi-Yadkori 等人，2011年，Xu 等人， 2020], 并用它来定义置信界。基于这一置信界，FGP-UCB 利用后验方差选择评估位置并确定保真度级别。该算法策略性地将高保真度评估分配给具有较大改进潜力的区域，同时利用低保真观测实现高效探索。我们从理论和实证两方面论证了该方法的合理性。理论上，我们推导出遗憾界，表明与单保真策略或松散耦合的多保真策略相比，FGP-UCB 所需的高保真度查询更少，收敛效率更高。实证方面，我们在合成基准和实际应用中展示了 FGP-UCB 的性能。尤其是在数据有限的场景下，我们的方法在样本效率和简单遗憾方面始终优于现有方法。

本文其余部分安排如下。第 2 节回顾相关文献，第 3 节详细介绍所提出的 FGP-UCB 方法。第 4 节展示实证研究，证明该方法的有效性；第 5 节则总结全文，并提出未来研究方向。

2 文献综述

2.1 多保真贝叶斯优化

贝叶斯优化（BO）是一种用于黑箱函数全局优化的序贯设计策略。这类函数评估成本高昂、非凸，且通常带有噪声。与基于梯度的方法不同，BO 不需要导数信息。相反，它会构建目标函数的概率代理模型，并利用采集函数确定下一个最具信息量的评估点，在探索（对高不确定性区域采样）与利用（对预测为最优的区域采样）之间取得权衡 [Garrido-Merchán， 2025]。

虽然标准贝叶斯优化在优化昂贵的黑箱函数方面非常有效，但获取高质量数据点的高昂成本仍然构成限制。在许多实际的工程和科学应用中，单纯依赖这些昂贵的高保真度评估（例如物理实验或高分辨率模拟），可能会在找到全局最优值之前迅速耗尽计算预算。多保真贝叶斯优化（MFBO）通过引入一种经济高效的信息源层级来应对这一局限。MFBO 利用丰富且成本低廉的低保真近似，对搜索空间进行广泛探索，同时保留昂贵的高保真度评估，用于纠正偏差并细化对潜在优良区域的搜索，从而显著加快收敛，同时最大限度地降低总实验成本 [Alexandrov 等人，1998，Huang 等人，2006a，Forrester 等人，2007，Viana 等人， 2014]。

MFBO 在优化计算成本高昂的目标函数时具有多项独特优势。通过采用多保真代理模型，MFBO 显著减少了所需的高保真度评估次数 [Fernández-Godino， 2016]。这可以通过利用数学结构中的相关性，或借助对底层物理过程的先验知识来实现。此外，MFBO 继承了标准贝叶斯优化采集函数所提供的稳健探索与利用平衡，而并行执行低保真度评估的能力则进一步加快了优化过程 [Takeno 等人， 2020]。最后，该框架具备自适应保真度选择能力，因此能够策略性地确定何时以及何处采集高保真数据。这种自适应

能力使 MFBO 在高保真度评估的成本或可用性随设计空间而变化的情形下尤为有效 [Poloczek 等人, 2017]。

多保真贝叶斯优化已广泛应用于解决科学和工程各领域中的复杂优化难题。在结构和制造领域，保真度等级通常由有限元分析（FEA）中的网格分辨率决定。例如，Huang 等人 [2006a]采用该方法改进金属成形工艺，而Tran 等人 [2020b] 则将其应用于倒装芯片封装设计的热力学模拟。

该方法在流体动力学和气动设计领域同样备受瞩目。Zhang 等人 [2018]采用多保真贝叶斯优化进行翼型优化，在雷诺平均纳维–斯托克斯（RANS）求解器中，通过不同的收敛准则和网格分辨率区分高保真度模型与低保真度模型。类似地，Serani 等人 [2019] 利用自适应网格细化优化 NACA 水翼，并降低驱逐舰型船舶的阻力。其他值得关注的结构应用还包括船舶基座的优化 Shu 等人， 2021] 以及飞机壁板的优化Hao 等人， 2020]。

2.2 多保真代理模型

多保真代理建模是一种战略性框架，旨在通过综合利用来自不同成本和准确度来源的数据，加速工程设计与优化。该方法不再仅依赖计算成本高昂的高保真仿真或可能不够准确的低保真近似，而是构建一个统一的预测模型，以利用二者之间的相关性。通过利用来自低保真模型的大量低成本数据来建立全局趋势，并使用少量高保真数据校准和修正局部偏差，多保真方法能够以显著低于传统单保真方法的计算预算，实现较高的预测准确度 [Wilke, 2024]。

捕捉不同保真度级别之间相关性的多保真代理模型通常分为四类：独立高斯过程、组合、输入增强和调整 [Do andZhang， 2025]。

2.2.1 独立高斯过程。

独立高斯过程方法是最简单的方法，将高保真模型和低保真度模型视为完全独立的过程。该方法针对低保真度数据构建一个标准高斯过程模型，并针对高保真数据构建另一个独立的高斯过程模型，二者之间不直接共享信息或结构。尽管这种方法简单，但它无法捕捉不同保真度级别之间固有的相关性；因此，它通常被视为一种基准方法，而不是真正的多保真方法。

2.2.2 组合。

组合方法包括基于输入-输入映射和输出-输出映射的多保真度技术。输入-输入映射技术 [Bandler 等, 1994年，2004年，Koziel 等，2006年，Robinson 等，2008年，Tao 等， 2019] 通常采用 $f_H(x) = f_L(g(x))$ 的形式，其中$g(\cdot)$将高保真度模型的输入空间映射到低保真度模型的输入空间。相反，输出-输出映射技术 [Li 等，2023年，Hebbal 等，2021年，Cutajar 等，2019年，Jiang 等，2018年，Zhou 等，2017年，Zheng 等， 2014] 通常采用 $f_H(x) = h(f_L(x))$ 的形式，其中$h(\cdot)$将低保真度模型的输出空间映射到高保真度模型的输出空间。

2.2.3 输入增强。

输入增强方法通过将保真度级别作为统一代理模型中的额外输入维度来处理多保真度优化 [Perdikaris 等人，2017年，Kandasamy 等人， 2017, 2019]。具体而言，给定设计输入 x，增强输入定义为（x， m），其中 m 表示保真度级别（例如， $m = 0$ 表示低保真度， $m = 1$ 表示高保真）。通过在该联合空间中处理所有数据源，代理模型能够捕获不同保真度之间的相关结构。虽然该方法在结构上较为直接，但当保真度层级之间的相关性较弱或高度非平稳时，会面临挑战。

2.2.4 调整。

基于调整的多保真方法构建代理模型，利用调整因子更新低保真模型，以表示高保真数据。这些方法通常通过自回归或层次化高斯过程（ARGP 和 HGP）模型 [Kennedy 和 O'Hagan, 2000]来实现。该代理模型的形式可表示为 $f_H = \rho(x) f_L(x) + f_\delta(x)$，其中 $\rho(x)$ 是充当调整系数的链接函数，而 $f_\delta(x)$ 是残差函数，用于量化经过调整的低保真模型与高保真函数之间的差异。
调整代理模型凭借两大优势，在多保真建模中占据重要地位：易于实现且分析简便。其核心理念是对调整后的低保真度数据与高保真数据之间的残差误差进行建模，因此与成熟的单保真代理软件包高度兼容。

此外，这种结构能够清晰地分解总误差。最终高保真预测中的不确定性可直接归因于低保真度模型、调整系数和差异模型各自的不确定性。这种线性关系有助于阐释各保真度级别的贡献，并得出稳健的预测方差估计，这对序贯设计和优化算法至关重要。在本研究中，我们采用基于调整的方法作为多保真代理模型。

2.3 多保真采集函数

多保真贝叶斯优化（MFBO）的一项关键挑战是构建有效的采集函数。与仅在设计空间 $x \in \mathcal{X}$ 上进行优化的标准贝叶斯优化（BO）不同，MFBO 的采集函数必须在由设计参数和保真度级别共同构成的扩展联合空间中进行搜索，该空间定义为积空间 $(x,\ m) \in \mathcal{X} \times \mathcal{M}$。因此，算法必须同时确定采样位置以及查询目标函数时采用的保真度，在信息增益与计算成本之间取得平衡。通常，这些采集策略分为两大类：启发式方法和序贯选择方法。

2.3.1 启发式方法

启发式采集函数通过在由设计参数 x 和保真度级别 m构成的联合空间中进行操作，对标准贝叶斯优化加以扩展。这些方法通常通过引入辅助效率项，改造经典的"一步前瞻"采集函数（如期望改进（EI））而来。这些辅助项会明确权衡特定保真度级别的计算成本，以及该级别对多保真代理模型预测准确度的贡献。由于计算简单且易于实现，启发式方法在工程设计优化中仍被广泛采用 [Huang 等人，2006a，Ghoreishi 和 Allaire，2019年，Di Fiore 等人，2021年，Grassi 等人，2023年，Poloczek 等人， 2017]。

根据这些函数的理论基础，可以将其演变过程分为不同类别。基于改进的方法是最早适配经典策略的方法之一。一个开创性的例子是增强期望改进（AEI），由 Huang 等人 [2006b，a]提出。AEI 实际上通过低保真度结果与高保真真实值之间的相关性，对标准期望改进值进行缩放，并以成本比的倒数加权。
超越短视（一步）启发式方法后，由 Poloczek 等人 [2017], 提出的多保真知识梯度（MF-KG）提供了一种非短视视角。MF-KG 不仅关注即时改进，而是计算在 (x, m)处进行预期采样所带来的高保真函数后验均值最大值的预期增量。

目前，信息论方法代表了最活跃的研究前沿。这些方法能够相对于信息成本自然地量化"信息价值"。该类方法中的代表性方法是多保真最大值熵搜索（MF-MES） [Takeno 等人, 2020], 该方法将优化目标从定位设计点 x 转变为降低关于最优函数值的不确定性 f^*。

2.3.2 序贯选择

序贯选择包括两个步骤。第一步是选择新的设计点，第二步是在第一步找到的设计点上选择保真度。该方法与启发式方法之间的主要区别在于，设计点的选择独立于保真度的选择。这种设计点与保真度选择的解耦，通常是由优化混合整数空间（连续设计点 x 和离散保真度级别m）的困难，以及希望使搜索策略与目标函数保持一致（优化高保真函数）所促成的。随后，将解的改进与对计算成本以及多保真代理模型精度改进的考量分开处理。

利用这种序贯结构的代表性文献，源自将多臂老虎机问题推广到高斯过程，具体见 Kandasamy 等人 [2016, 2017, 2019]。这些工作中的方法采用上置信界策略。其关键思想是定义一个“保真度阈值”。只有当高保真度模型的上置信界高于当前最优值，且低保真度级别的不确定性已得到充分降低时，算法才会查询高保真数据源。

Chen 等人 [2017] 通过从由当前预测均值和方差所刻画的高斯分布中进行抽样，为保真度 m 在位置 x 生成虚拟样本。他们将保真度 m 的标准差降低量量化为融合模型在 x 处当前预测标准差与使用虚拟样本更新后预期后验标准差之差。 Tran 等人 [2020b,a] 采用了类似的保真度查询策略。

鉴于序贯选择框架在效率、稳健性和理论可处理性方面相较于启发式方法具有显著优势，我们的工作优先采用该框架。

在计算方面，序贯方法仅在设计空间上进行优化，从而减轻搜索负担 $\mathcal{X}$，避免了启发式方法所需的昂贵联合优化 $\mathcal{X} \times \mathcal{M}$ 。此外，序贯策略将位置选择与依赖成本的保真度分配分离开来，使高保真度评估能够集中于感兴趣的区域。最后，这种结构通过将高保真目标函数的优化与保真度选择决策分离，有助于进行遗憾分析 [Kandasamy 等人， 2019]。

然而，该领域仍存在一个关键空白：专门针对基于调整的代理模型设计的序贯选择算法，相关研究相对较少。

3 方法论

3.1 多保真贝叶斯优化问题陈述

贝叶斯优化（BO）是一种序贯设计策略，旨在最大化未知且评估成本高昂的黑箱函数 f_H：$\mathcal{X} \to \mathbb{R}$，同时受有限预算 Λ 的约束。搜索空间 $\mathcal{X} \subseteq [0,1]^d$ 通常是有限域或紧致域。在每一轮 t 中，优化器选择一个查询点 $x \in \mathcal{X}$ 进行评估。每次查询高保真函数 f_H 都会产生成本 c_H，并得到含噪观测 $y_H = f_H(x) + \epsilon_H$，其中噪声项是均值为零的次高斯随机噪声，例如 $\epsilon_H \sim N(0,\ \sigma_H^2)$ $\mathbb{E}[\epsilon_H] = 0$。

贝叶斯优化的根本目标是在总预算 Λ 耗尽之前，找到全局最大值点 $x^* = \text{argmax}_{x\in\mathcal{X}} f_H(x)$。为此，算法必须在利用与探索之间保持微妙的平衡：利用是指查询预计 f_H 值较高的区域，而探索是指查询不确定性较高的区域，以改进模型。高效的算法必须妥善处理这种权衡，确保在成本约束范围内找到最优值。

然而，在许多实际应用中，查询高保真函数 f_H 的成本高得令人难以承受，导致数据稀疏，评估次数不足以保证收敛。为克服数据稀缺问题，可以利用低保真近似（例如简化仿真或粗粒度模型）来引导搜索。令 $f_L: \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ 表示目标函数的低保真近似。当在这一低保真度下查询点 x 时，用户会以成本 c_L获得观测 $y_L = f_L(x) + \epsilon_L (\epsilon_L \sim N(0,\ \sigma_L^2))$，使得 $c_L \ll c_H$。尽管成本较低，这些观测通常比目标函数具有更高的噪声方差（$\sigma_L > \sigma_H$）或结构偏差。

这一设定形式化了多保真贝叶斯优化（MFBO）问题。在每次迭代t中，策略必须联合选择一个候选点 x_t 和一个保真度级别 $m_t \in \{L, H\}$，以生成观测 $y_{m_t}(x_t)$。MFBO 的核心挑战在于有效融合来自低成本低保真度查询的信息，以探索搜索空间，同时策略性地保留预算用于高保真度查询，从而准确地利用并验证最优值。
多保真贝叶斯优化算法的性能，以其最小化简单遗憾的能力来衡量 $S(\Lambda)$，其中高保真函数为 f_H。简单遗憾是多保真贝叶斯优化和随机老虎机优化中一项标准的理论性能指标 [Bubeck 等人，2011年，Vakili 等人，2021]。它衡量算法所推荐设计点的质量，依据的是潜在的高保真目标函数，而非含噪观测。采用这种表述是恰当的，因为贝叶斯优化的目标是找出潜在函数的最大化点，而观测到的响应是受测量噪声影响的随机实现，因此无法忠实反映真实的目标函数值。通过依据潜在目标函数评估性能，简单遗憾量化了推荐结果的内在优化误差；由于推荐结果取决于含噪观测，因此该误差仍具有随机性。这为衡量算法性能提供了一种稳定且具有理论意义的指标。值得注意的是，低保真度查询有助于学习目标函数的结构，但不会直接带来优化奖励。与 MF-GP-UCB 中考虑的最佳查询简单遗憾不同 [Kandasamy 等人，2019], 后者评估算法查询过的最佳高保真点，而我们的定义评估算法明确推荐的设计点。由于通常无法在不了解潜在函数值的情况下，仅凭含噪观测识别出查询过的最佳点，因此这种基于推荐的表述能够更直接地评估实践中返回的解的质量。

令 $x^* \in \arg\max_{x\in\mathcal{X}} f_H(x)$ 表示全局最大值点，其中 $f^* = f_H(x^*)$。给定评估预算 Λ，令 $T(\Lambda)$ 表示已完成查询的数量，令 $\mathcal{I}_H(\Lambda) = \{t \le T(\Lambda) : m_t = H\}$表示高保真度查询的索引。算法最终将设计点 x_{out} 推荐为最优解。在 $\mathcal{I}_H(\Lambda) \neq \varnothing$ 的情况下，简单遗憾定义为

$$S(\Lambda) = f^* - f_H(x_{out}) \tag{1}$$

由于假设目标函数受到随机观测噪声的干扰，因此在优化过程中通常无法获得高保真函数值，简单遗憾也就无法在实际应用中直接观测。尽管实践中无法计算简单遗憾的实现值，但它刻画了从含噪观测中识别出的设计点的潜在质量，因此能够直接反映算法推荐结果的可靠性。简单遗憾的界限为算法在随机观测噪声下识别近似最优设计点提供了理论保证。因此，简单遗憾被广泛用于贝叶斯优化算法的理论分析，并且通常在已知真实目标函数的合成基准问题上进行评估 [Kandasamy 等人、2019年、Hu 等人、2025]。对于无法获得真实目标函数的实际应用，则使用可观测量来评估优化性能，例如在可用评估预算下获得的推荐设计点处观测到的高保真度目标函数值 [Hernández-Lobato 等人、2016年、Hvarfner 等人、2024]。在本文中，简单遗憾被用作理论性能标准，而实际研究则使用推荐设计点处观测到的高保真度目标函数值进行评估。

尽管多保真贝叶斯优化在实践中得到广泛应用，但其性能方面的理论保证——尤其是简单遗憾方面——仍大多不够完善。现有的大多数多保真贝叶斯优化算法都是启发式的：它们依据经验相关性或成本启发式方法选择保真度级别，但其简单遗憾没有理论界，这意味着在有限预算下无法保证收敛到真正的高保真最优解 [Huang 等人，2006年（b），a，Poloczek 等人，2017年，Takeno 等人，2020]。近期少数研究提供了简单遗憾保证，但这些研究依赖于限制性假设，例如已知且固定的跨保真度级别相关性，或对保真度级别之间残差误差的严格界限 [Kandasamy 等人，2016, 2017, 2019]。在实际应用中，这些假设很少成立，因为保真度之间的关系可能是非线性的、非平稳的，或依赖于样本。这凸显了开发新型多保真贝叶斯优化框架的必要性，使其能够在不依赖关于跨保真度结构或确定性残差界的不现实假设的情况下，提供可证明的简单遗憾保证。

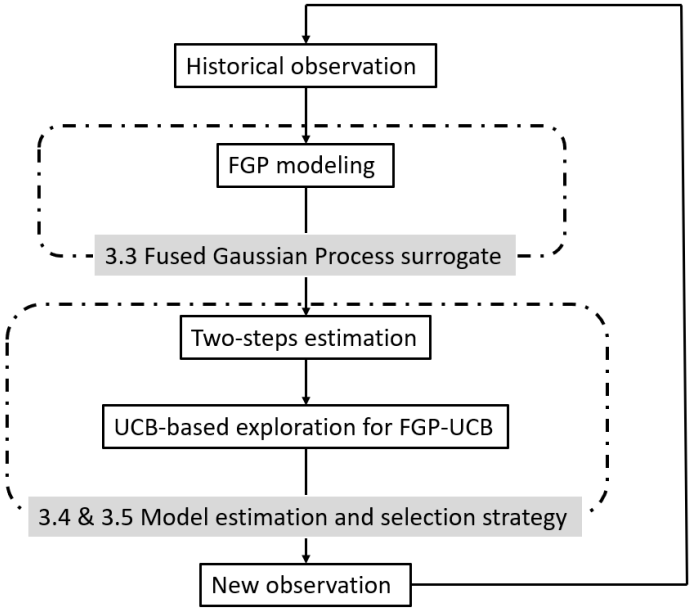


图 1：所提出的融合高斯过程老虎机整体框架

3.2 融合高斯过程老虎机框架

如图 1 所示，所提出的融合高斯过程赌博机框架包含两个主要组成部分：融合高斯过程代理建模和序贯决策策略。在建模阶段，我们提出了一种新颖的基于调整的多保真方法。具体而言，采用两步估计过程对融合高斯过程参数进行校准，从而能够同时量化低保真函数和高保真函数的预测均值与不确定性。随后，设计一个上置信界（UCB）采集函数，通过综合这些预测统计量，识别最优查询配置——依次选择输入位置和保真度级别。最后，获取新的观测并将其纳入数据集，迭代更新模型，并改进后续周期的选择策略。

3.3 融合高斯过程代理模型

为了刻画不同保真度层级之间的关系，同时便于进行严格的遗憾分析，我们假设高保真目标函数 $f_H(x)$ 与低保真函数 $f_L(x)$ 通过融合模型相关联：

$$f_H(x) = \rho(x) f_L(x) + f_\delta(x) \tag{2}$$

$\rho(x) \in \mathbb{R}$ 是一个输入相关链接函数，用于刻画不同保真度层级之间的关系。项 $\rho(x) f_L(x)$ 表示调整后的低保真分量，而 $f_\delta(x)$ 是一个残差函数，用于捕捉调整后的低保真分量与高保真目标函数 $f_H(x)$ 之间的差异。我们使用高斯过程对低保真函数和残差函数进行建模，并将链接函数参数化如下：

1.低保真函数：低保真度由标准高斯过程建模：$f_L(x) \sim \mathcal{GP}(0, k_L(x, x'))$，其中均值函数设为零，核函数 $k_L(x, x')$ 编码了协方差结构。2. 链接函数：链接函数随输入呈线性变化，$\rho(x) = \rho^T x$，其中 $\rho \in \mathbb{R}^d$是一个未知参数向量。当保真度之间的缩放关系在设计域上近似呈线性变化时，这种建模方式可提供一种简单的近似。此外，线性结构还支持闭式参数估计，并能显式量化估计不确定性Le Gratiet and Garnier [2014]。

3. 残差函数：残差函数被建模为独立的高斯过程，$f_\delta(x) \sim \mathcal{GP}(0,\ k_\delta(x,\ x'))$，用于捕捉调整后的低保真函数与高保真目标函数之间的差异。

按照自回归多保真模型的递归形式 [Le Gratiet and Garnier，2014], 我们首先估计低保真后验均值 $\hat{\mu}_L(x)$ 并用它近似融合模型中的低保真函数值。与标准协同克里金 [Forrester 等人，2007],将多保真观测的联合分布一并建模不同，这种序贯形式分别估计低保真和高保真模型。因此，融合模型可表示为：

$$f_H(x) = \rho(x)\hat{\mu}_L(x) + f_\delta(x) \tag{3}$$

这种后验均值近似适用于非共址数据，并显著降低了与大型协方差矩阵相关的计算开销。具体而言，标准协同克里金由于需要对联合协方差矩阵求逆，其计算复杂度随观测总数呈立方增长——$\mathcal{O}((n_L + n_H)^3)$；而按序贯方式处理不同保真度，则可将计算复杂度降至 $\mathcal{O}(n_L^3 + n_H^3)$。

我们的主要贡献在于利用这种解耦结构，为链接函数估计和高保真预测推导严格的置信界，从而为后续遗憾分析奠定基础。通过假设链接函数为线性，并为低保真函数和残差函数分别采用高斯过程模型，我们可以明确分离并量化来自多个来源的不确定性。将这一线性参数化与成熟的线性赌博机浓缩界 [Abbasi-Yadkori 等人，2011] 相结合，使我们能够将这种多源不确定性转化为一种新颖的上置信界（UCB）分数。最终，将这一新的 UCB 分数与我们的序贯保真度选择算法相结合，可为多保真贝叶斯优化提供可证明的理论遗憾保证。

3.4 模型推断

为了利用低保真度和高保真数据集（即 $\mathcal{D}_L = (X_L,\ Y_L)$ 和 $\mathcal{D}_H = (X_H,\ Y_H)$）估计融合高斯过程代理模型，我们采用序贯两步估计策略。首先，利用低保真观测拟合低保真度高斯过程。然后，利用低保真预测和高保真度观测估计链接函数和残差高斯过程。

步骤 *1.* 低保真函数估计

数据集 $\mathcal{D}_L$ 包含含噪低保真样本 $Y_L = [y_{L,1}, ..., y_{L,n_L}]^T$，这些样本位于输入位置 $X_L = [x_{L,1}, ..., x_{L,n_L}]^T$，其中 n_L 是 $\mathcal{D}_L$的大小。观测遵循带有高斯噪声的标准高斯过程模型，即 $y_{L,\ i} = f_L(x_{L,\ i}) + \epsilon_{L,\ i},\ \ \epsilon_{L,\ i} \sim N(0,\ \sigma_L^2)$。以数据集 $\mathcal{D}_L$ 为条件对高斯过程先验进行更新，可得关于 $f_L(x)$的闭式后验分布，该分布完全由预测均值 $\hat{\mu}_L(x)$和预测方差 $\hat{\sigma}_L^2(x)$表征，如下所示：

$$\begin{aligned} f_L(x)|\mathcal{D}_L &\sim N(\hat{\mu}_L(x), \hat{\sigma}_L^2(x)) \\ \hat{\mu}_L(x) &= k_{L,n_L}(x)^T(K_L + \sigma_L^2 I)^{-1} Y_L \\ \hat{\sigma}_L^2(x) &= k_L(x,x) - k_{L,n_L}(x)^T(K_L + \sigma_L^2 I)^{-1} k_{L,n_L}(x) \end{aligned} \tag{4}$$

其中 $k_{L,\ n_L}(x) = [k_L(x_{L,\ 1},\ x)$ ....., $k_L(x_{L,\ n_L},\ x)]^T$，以及 $K_L = [k_L(x_{L,\ i},\ x_{L,\ j})]_{i,\ j=1}^{n_L}$是低保真度核矩阵。

步骤 *2.* 链接函数与残差函数估计

设高保真度观测集合为 $\mathcal{D}_H = \{X_H, Y_H\}$，$X_H = [x_{H,1}, \ldots, x_{H,n_H}]^T$，$Y_H = [y_H(x_{H,1}), \ldots, y_H(x_{H,n_H})]^T$，其中输入位置为 $x_{H,1}, \ldots, x_{H,n_H}$，相应的输出为 $y_H(x_{H,1}), \ldots, y_H(x_{H,n_H})$。此处，$n_H$ 表示高保真度样本的数量。高保真输入 X_H 无需与低保真度输入 X_L重合；两个数据集可能完全不重叠。

基于融合模型假设，我们构造了一个插件式高斯过程高保真度代理模型 $f_H(x) \sim \mathcal{GP}(\rho(x)\hat{\mu}_L(x),\ k_\delta(x,\ x'))$. 链接函数由一个未知参数向量 ρ表征，该参数向量需要根据数据进行估计。给定估计得到的低保真后验均值 $\hat{\mu}_L$、残差高斯过程协方差矩阵 K_δ以及高保真度观测，可通过最大化以下正则化对数似然函数来估计该参数向量：

$$
\begin{aligned}
l_\lambda(\rho|\mathcal{D}_H,\hat{\mu}_L,K_\delta) = &-\frac{1}{2}\log|K_\delta+\sigma_H^2 I| - \frac{\lambda}{2}\|\rho\|_2^2 \\
&-\frac{1}{2}(Y_H-\rho(X_H)\hat{\mu}_L(X_H))^T(K_\delta+\sigma_H^2 I)^{-1}(Y_H-\rho(X_H)\hat{\mu}_L(X_H))
\end{aligned} \tag{5}
$$

假设链接函数 $\rho(x)$ 具有线性结构，则可得到参数向量 ρ 的闭式估计量。所得估计量记为 $\hat{\rho}$，与高保真函数的预测均值 $\hat{\mu}_H(x)$ 和插件预测方差 $\hat{\sigma}_H^2(x)$ 一并表示如下：

$$
\begin{aligned}
\hat{\rho} &= (F_L^T(K_\delta+\sigma_H^2 I)^{-1}F_L+\lambda I)^{-1}F_L^T(K_\delta+\sigma_H^2 I)^{-1}Y_H \\
\hat{\mu}_H(x) &= (\hat{\rho}^T x)\hat{\mu}_L(x) + k_{\delta,n_H}(x)^T(K_\delta+\sigma_H^2 I)^{-1}(Y_H-F_L\hat{\rho}) \\
\hat{\sigma}_H^2(x) &= k_\delta(x,x) - k_{\delta,n_H}(x)^T(K_\delta+\sigma_H^2 I)^{-1}k_{\delta,n_H}(x)
\end{aligned} \tag{6}
$$

其中，$\lambda>0$ 是一个正则化参数，用于确保矩阵 $F_L^T(K_\delta+\sigma_H^2 I)^{-1}F_L+\lambda I$ 为正定矩阵。向量 $k_{\delta,n_H}(x)$ 定义为 $[k_\delta(x_{H,1},x),\ldots,k_\delta(x_{H,n_H},x)]^T$，而 $K_\delta=[k_\delta(x_{H,i},x_{H,j})]_{i,j=1}^{n_H}$ 是残差高斯过程核矩阵。设计矩阵 F_L 通过将每个高保真输入向量与其对应的低保真后验均值相乘来构造：

$$
F_L = \begin{pmatrix}
\hat{\mu}_L(x_{H,1})*(x_{H,1})_1 & \cdots & \hat{\mu}_L(x_{H,1})*(x_{H,1})_d \\
 & \cdots & \\
\hat{\mu}_L(x_{H,n_H})*(x_{H,n_H})_1 & \cdots & \hat{\mu}_L(x_{H,n_H})*(x_{H,n_H})_d
\end{pmatrix}
$$

公式 (6) 中得到的高保真代理模型将低保真后验均值与估计的链接函数和残差高斯过程所产生的调整相结合。该模型能够捕捉从低保真观测中学习到的全局趋势，同时通过残差过程和依赖于输入的调整来校正局部偏差。下一节将详细介绍高保真预测各组成部分的不确定性量化。

3.5 基于融合高斯过程的上置信界

本节提出一种新颖的基于融合高斯过程的上置信界（FGP-UCB）算法，将其作为采集函数，以联合优化设计点和保真度级别的选择，从而最小化简单遗憾。算法设计首先分析式（6）中高保真预测的三个不确定性来源：低保真预测不确定性、链接函数估计不确定性和残差高斯过程预测不确定性。调整后的低保真分量通过传递低保真观测中的信息，在高保真预测中发挥核心作用。值得注意的是，由于链接参数是根据低保真后验预测估计的，这些预测中的误差可能会传播到链接函数估计中，因此有必要联合分析这两个误差来源。具体而言，我们推导出估计的调整后低保真分量（$\hat{\rho}^T x$）$\hat{\mu}_L(x)$的估计误差界，并据此构建高保真预测的统一置信界。这直接引出了所提出的 FGP-UCB 准则。基于该置信界，我们设计了一种序贯采集策略：先选择最有潜力的设计点 x，再确定最合适的待查询保真度级别，从而在探索与利用之间实现有理论依据的平衡。尽管当前形式聚焦于双保真设置，但所提出的框架可通过一系列自回归模型，在理论上推广到包含三个或更多保真度级别的层级结构（例如，将保真度 m 建模为保真度 $m-1$的线性变换）。然而，要将遗憾保证推广到此类模型链，还需进一步分析，尤其是多个链接函数中估计误差的递归传播，以及由此在上置信界中产生的复合不确定性。

3.5.1 不完整不确定性量化

标准上置信界（UCB）准则依赖于两个关键组成部分：预测均值及其相关的认知不确定性。尽管高保真响应的预测均值定义见式（6），但在这种多保真度设置下量化其不确定性要复杂得多。

式（6）中的后验方差无法充分刻画高保真预测不确定性，因为总不确定性包含三个来源：（i）低保真预测中固有的偏差；（ii）链接函数估计的不确定性；以及（iii）残差函数预测的不确定性。残差函数预测的不确定性由式（6）中的后验方差 $\hat{\sigma}_H^2(x)$ 直接刻画。然而，推导调整后低保真预测 $(\hat{\rho}^T x)\,\hat{\mu}_L(x)$ 相关的不确定性并非易事，因为它将低保真估计器的方差与链接函数的估计误差耦合在一起，而链接函数本身又取决于低保真估计器。

链接函数估计误差 我们通过在估计的链接参数中分离预测的低保真度模型和真实低保真度模型的影响来应对这一挑战 $\hat{\rho}$ 在公式（6）中。这使我们能够将估计不确定性与预测偏差分离开来。随后使用解耦后的表达式量化 $\hat{\rho}$ 与真实值 ρ^*之间的差距，从而建立一个同时纳入这两种误差来源的界。对于 ρ 的估计界在引理 3.1 中给出。由于引入了偏差项，该界不同于 Abbasi-Yadkori 等人 [2011] 为线性上下文老虎机建立的标准结果。

引理 3.1（链接函数估计界）。令 $\|\rho^*\|_2 \le M_\rho$、$\lambda > 0$ 和 $A_L = F_L^T Q^{-1} F_L + \lambda I$，其中 $Q = K_\delta + \sigma_H^2 I$ 为正定矩阵。在高概率 $1-\delta$下，

$$\|\hat{\rho} - \rho^* - A_L^{-1} F_L^T Q^{-1}(F_L^* - F_L)\rho^*\|_{A_L} \le \sigma_H \sqrt{2\log\left(\frac{\det(A_L)^{1/2}\det(\lambda I)^{-1/2}}{\delta}\right)} + \lambda^{1/2} M_\rho = \alpha_\rho \tag{7}$$

其中，F_L^* 表示真实低保真设计矩阵，ρ^* 表示链接函数的真实参数

引理 3.1 的证明见附录。涉及 $F_L^* - F_L$ 的项刻画了在高保真观测位置使用低保真后验均值时，链接参数估计值所发生的偏移。于是，整个左侧度量的是减去该偏移后仍然存在的估计误差。右侧给出了该误差的高概率半径 α_ρ。该半径由一个集中项和正则化偏差界组成，其中集中项反映数据中包含的信息，并刻画随机估计误差。

在设计点 x 处，ρ 的变化会通过其与 $x\hat{\mu}_L(x)$ 的内积影响调整后的低保真预测。根据柯西–施瓦茨不等式，估计 ρ 时的剩余误差对 x 处调整后的低保真预测误差的贡献至多为 $\alpha_\rho \|x\hat{\mu}_L(x)\|_{A_L^{-1}}$。定理 3.2 给出了完整高保真预测的置信界。

定理 3.2。令 $\|\rho^*\|_2 \le M_\rho$，并令 $A_{L,t} = F_{L,t}^T Q_t^{-1} F_{L,t} + \lambda I$，其中 $Q_t = K_{\delta,t} + \sigma_H^2 I$ 为正则化信息矩阵。以高概率 $1-\delta$，

$$\|\hat{\mu}_{H,t}(x) - f_H(x)\| \le \alpha_{\rho,t}\|x\hat{\mu}_{L,t}(x)\|_{A_{L,t}^{-1}} + \sqrt{\beta_t}\hat{\sigma}_{\delta,t}(x) \tag{8}$$

其中，缩放因子定义为 $\alpha_{\rho,t} = \lambda^{\frac{1}{2}} M_\rho + \sigma_H \sqrt{2\log\left(\frac{\det(A_{L,t})^{\frac{1}{2}}\det(\lambda I^{-\frac{1}{2}})}{\delta}\right)}$，而 β_t 是探索参数，用于缩放置信区间宽度，以确保覆盖概率。

定理 3.2 的证明见附录。定理 3.2 表明，以高概率计，高保真度函数的预测误差——该函数源自所提出的融合高斯过程代理模型——受到不确定性项分解所给出的界的约束。具体而言，该界由调整后的低保真函数的估计不确定性构成，以加权范数 $\alpha_{\rho,t}\|x\hat{\mu}_{L,t}(x)\|_{A_L^{-1}}$ 表示（其中 $A_{L,t}$ 捕捉了信息在
链接结构）以及残差函数的估计不确定性，记为 $\sqrt{\beta_t}\hat{\sigma}_{\delta,t}(x)$。详细证明见附录。

3.5.2 融合高斯过程采集函数

借助定理 3.2，我们提出了一种新颖的基于融合高斯过程的上置信界（FGP-UCB）准则，定义见式（9）。FGP-UCB准则通过平衡高保真场景下两个相互竞争的目标，确保预算得到高效分配。均值项 $\hat{\mu}_{H,t}(x)$ 利用高保真场景下预测响应较高的潜在最优位置，而

不确定性项则促进对预测变化较大且不确定区域的探索。该准则用作评估查询特定位置 x 的潜在收益的指标。

$$\text{FGP-UCB}_t(x) = \hat{\mu}_{H,t}(x) + \alpha_{\rho,t}\|x\hat{\mu}_{L,t}(x)\|_{A_{L,t}^{-1}} + \sqrt{\beta_t}\hat{\sigma}_{\delta,t}(x) \tag{9}$$

令 $w_t(x) = \alpha_{\rho,t}\|x\hat{\mu}_{L,t}(x)\|_{A_L^{-1},t} + \sqrt{\beta_t}\hat{\sigma}_{\delta,t}(x)$ 表示式 (9) 中的置信半径。相应的融合高斯过程下置信界（FGP-LCB）可表示为：

$$\text{FGP-LCB}_t(x) = \hat{\mu}_{H,t}(x) - w_t(x). \tag{10}$$

这两个置信界均根据第 t 次迭代之前可用的观测计算得出。FGP-UCB 用于查询选择，而 FGP-LCB 用于最终推荐。上置信界准则同时考虑预测的高保真响应及其相关不确定性，在探索与利用之间取得平衡，从而引导查询指向可能的最优位置。相比之下，下置信界准则对高保真响应提供保守估计，使算法能够推荐预测响应较高且不确定性相对较低的已查询设计。

在我们的多保真贝叶斯优化框架中，采集过程按顺序进行：首先确定查询位置 x_t，随后选择要查询的保真度。如前所述，遗憾仅针对高保真度定义，而低保真度查询用于揭示目标函数的结构。因此，查询的位置应在利用高保真度下的最大响应与探索高保真度下的不确定性之间取得最佳平衡。具体做法是选择 FGP-UCB 准则值最大的位置：

$$x_t = \text{argmax}_x \, \text{FGP-UCB}_t(x) \tag{11}$$

最大化式（11）表示在定义域 $\mathcal{X}$ 上的一个非凸优化问题。由于各组成项——包括高斯过程后验均值/方差和加权范数——关于 x 均可微（假设采用平方指数核或Matérn核等标准光滑核函数），因此可以通过解析方法或自动微分计算采集函数的梯度。为解决这一问题，我们采用多起点梯度策略，使用 L-BFGS算法，并以通过拉丁超立方设计 [Diessner 等人, 2025]采样得到的一组多样化点作为初始值。这种方法有助于降低复杂采集函数景观中固有的收敛到局部最优点的风险。尽管理论分析假设该优化预言机能够无误差地精确求解式（11），但在实践中，求解结果是数值近似的，且受优化器收敛容差的限制。为进行遗憾分析，我们假设此数值误差可以忽略不计。

确定最优位置 x_t 后，我们便确定要查询的适当保真度级别。保真度选择决定了策略意图：低保真度查询用于探索，而高保真度查询则用于利用。该决策依据低保真度模型的置信带，其定义为 $CB(x, L) = \sqrt{\beta_t}\hat{\sigma}_{L,t}(x)$。$CB(x, L)$ 的值较大，意味着在选定位置处，低保真函数 $f_L(x)$ 存在较高的不确定性。为降低这种不确定性并提高高保真度估计的准确性，在这种情况下优先进行低保真度查询。反之，如果低保真度的不确定性处于可接受范围内，则直接查询高保真数据源。具体而言，若 $CB(x, L)$ 超过保真度选择阈值 τ_L——该阈值定义为低保真度模型所能容忍的最大认知不确定性——则查询低保真源；否则，为避免对成本较低的保真度过度采样，我们将使用高保真数据源。保真度采集函数 m_t 定义如下：

$$m_t = \begin{cases} L\ , \ CB(x, L) > \tau_L \\ H\ , \ otherwise \end{cases} \tag{12}$$

对于最终推荐，我们在每次高保真查询时存储 $\text{FGP-LCB}_t(x)$。终止时，如果 $\mathcal{I}_H(\Lambda) \neq \varnothing$，我们返回

$$\hat{t} \in \text{argmax}_{t \in \mathcal{I}_H(\Lambda)} \, \text{FGP-LCB}_t(x), \qquad x_{out} = x_{\hat{t}}, \tag{13}$$

若出现并列，则选择索引最小者。该规则选择下置信界最大的已查询设计，无需其潜在高保真值。完整流程总结如下方的算法1。

算法1 基于融合高斯过程的上置信界 (FGP-UCB)

初始化： $f_L \sim \mathcal{GP}(0, k_L)$， $f_\delta \sim \mathcal{GP}(0, k_\delta)$， X_L，Y_L，X_H，Y_H， $\mathcal{I}_H(\Lambda)$ 对于 $t = 1$至 T 执行 选择位置 $x_t = \arg\max_x$ FGP-UCB$_t(x)$，其中 FGP-UCB$_t(x)$ 定义见式(9) 根据式(12)中的采集函数选择保真度 m_t 根据所选位置 x_t 和保真度 m_t观测结果 y_t $X_{m_t} = X_{m_t} \cup x_t$， $Y_{m_t} = Y_{m_t} \cup y_t$如果 $m_t = H$ 则 存储 FGP-LCB$_t(x_t)$、 $\mathcal{I}_H(\Lambda) \leftarrow \mathcal{I}_H(\Lambda) \cup \{t\}$ 使用观测值 X_L， Y_L 更新低保真度模型 f_L，见式 (4) 使用观测值 X_H、 Y_H 和低保真度预测更新链接函数参数 ρ 及高保真度模型 f_H，见式(6) 输出： $x_{out} = x_{\hat{t}}$，根据式(13)

3.6 遗憾分析

本节通过推导式(1)中定义的简单遗憾的界，为 FGP-UCB 算法建立理论保证。尽管单保真度高斯过程老虎机的遗憾分析已相当成熟 [Srinivas等人， 2012], 但多保真度设置在控制保真度分配和融合模型的不确定性方面带来了额外挑战。所得界取决于设计空间高价值区域内残差高斯过程的最大信息增益。

将高价值区域定义为

$$\mathcal{X}_H = \{x \in \mathcal{X} \mid f^* - f_H(x) \leq 3\tau_L\} \tag{14}$$

其中， τ_L 是保真度选择阈值。 $\mathcal{X}_H$ 中的每个点都代表一个近似最优设计点：其潜在高保真度目标值与 f^* 足够接近，因此推荐该点所造成的简单遗憾最多为 $3\tau_L$。较小的 τ_L 要求 $\mathcal{X}_H$ 中的设计点的潜在高保真度目标值与 f^*更加接近，这可能会缩小高价值区域。

令 $\Psi_n(\mathcal{A})$ 表示在位置 $\mathcal{A}$ 处对残差高斯过程进行 n 次含噪观测所获得的最大信息增益，噪声方差为 σ_H^2。由于 $\mathcal{X}_H \subseteq \mathcal{X}$，对于相同的残差核、噪声方差和观测次数， $\Psi_n(\mathcal{X}_H) \leq \Psi_n(\mathcal{X})$。

当置信界成立时，每个选定查询位置处的上置信界至少为 f^*，因为 FGP-UCB 会最大化该置信界。算法推荐具有最大已存储下置信界的高保真设计，因此，推荐设计的值至少与每个已存储的下置信界一样大。由此，任意高保真查询处置信区间的宽度都构成了推荐设计简单遗憾的上界。

定理 3.3 (FGP-UCB的简单遗憾界)。 令 $\delta \in (0,\ 1)$ 和 $\mathcal{X} \subset [0, r]^d$ 为紧致凸集。存在有限的 Λ_*，使得以至少 $1 - 2\delta$ 的概率，由 *FGP-UCB* 推荐的设计 x_{out} 满足

$$S(\Lambda) = f^* - f_H(x_{out}) \leq \sqrt{\frac{16K\beta_{\bar{n}_1}\Psi_{\bar{n}_H}(\mathcal{X}_H)}{\bar{n}_H}}, \qquad \forall \Lambda \geq \Lambda_*, \tag{15}$$

其中， $\bar{n}_1 = \lfloor \Lambda/c_L \rfloor$、 $\bar{n}_H = \lfloor \Lambda/c_H \rfloor$、 $K > 0$ 与 Λ相互独立，探索参数 β_t根据附录中规定的计划选取。

定理 3.3 给出了 FGP-UCB 在评估预算 Λ下所推荐设计点的简单遗憾的高概率界。证明见附录。对于平方指数残差核， $\Psi_n(\mathcal{X}_H) \leq \Psi_n(\mathcal{X}) = O((\log n)^{d+1})$ [Srinivas 等人， 2012]。在指定计划下， β_t 呈对数增长，且查询成本固定，因此随着 Λ 增大，遗憾界趋于零。除这一收敛保证外，与单保真度优化的标准 GP-UCB 遗憾界相比，我们的界的结构还揭示了若干重要见解 [Srinivas 等人， 2012]:

1. **缩小有效搜索空间**：关键差异在于信息增益项：GP-UCB 的 $\Psi_n(\mathcal{X})$ 与 FGP-UCB 的 $\Psi_{\bar{n}_H}(\mathcal{X}_H)$。当低保真度模型具有

信息量时——也就是说，f_L 与 f_H相关性良好——高价值区域 $\mathcal{X}_H$ 仅占完整定义域的一小部分。这直接带来更快的收敛。

2. **体积缩减**：当保真度之间的相关性很强时（即近似$f_L \approx f_H$ 效果良好），高价值集合 $\mathcal{X}_H$ 显著小于完整定义域 $\mathcal{X}$（意味着 $\text{vol}(\mathcal{X}_H) \ll \text{vol}(\mathcal{X})$）。由于 $\Psi_T(\cdot)$随定义域的体积而变化，这种缩减会带来更紧的遗憾界。

3. **稳健性**：在最坏情况下，当低保真度只能提供很少的信息时，集合 $\mathcal{X}_H$会扩展到覆盖 $\mathcal{X}$的大部分区域。在此极限情况下，$\text{vol}(\mathcal{X}_H) \to \text{vol}(\mathcal{X})$，且 FGP-UCB 的遗憾界收敛于标准 GP-UCB 的遗憾界。这保证了多保真度方法的稳健性：当存在相关性时，它能够加速收敛；而当不存在相关性时，其性能不会劣于标准方法。

4. **新颖贡献**：据我们所知，这是首个使用基于调整的代理模型的多保真贝叶斯优化简单遗憾界。相比以往假设高斯过程之间相互独立且相关性界已知的假设 [Kandasamy 等人， 2019] 或使用启发式采集函数的方法 [Poloczek 等人，2017年，Takeno 等人， 2020]。

4 实验

本节通过两个多保真仿真研究（即六峰骆驼和 Park实验）以及一个涉及高温超导体（HTS）制造实验设计的真实案例研究，评估所提出算法的性能。六峰骆驼和 HTS 实验的查询成本分别设为 $c_L = 1$和 $c_H = 10$，Park实验的查询成本设为 $c_L = 1$ 和$c_H = 50$。在仿真研究中，全局高保真度最优值是已知的，因此我们使用简单遗憾 $S(\Lambda)$ 作为评估指标，其中该指标是查询预算 Λ 的函数。具体而言，在每个评估预算下，根据公式（13）从高保真度查询点中选出推荐设计，并使用不含观测噪声的底层高保真函数评估其简单遗憾。相比之下，在真实世界实验中，部署期间无法观测到全局最优值。遵循应用型多保真贝叶斯优化研究中的评估实践，我们评估推荐设计处的观测高保真响应。该指标直接反映了 HTS 实验设计的实际目标：在减少昂贵的高保真度测量次数的同时，识别出具有高质量的工艺条件。

基准模型 为展示所提出的 *FGP-UCB* 算法的有效性，我们将其与三种具有代表性的基线方法进行比较。第一种基线方法 *GP-UCB*采用标准的单保真度贝叶斯优化，仅查询高保真度样本 [Rasmussen， 2004]。尽管其理论基础扎实，但由于没有利用成本低廉的低保真度信息，因此成本显著更高。第二种基线方法 *MF-GP-UCB*是一种广泛使用的多保真高斯过程老虎机算法，它通过独立高斯过程对每种保真度分别建模；它未采用 FGP-UCB 所依托的融合代理结构 [Kandasamy 等人，2019]。第三种基线方法 *MF-MES*是一种信息论驱动的多保真贝叶斯优化方法，采用多任务高斯过程代理模型，并通过最大化互信息来选择下一次查询点 [Takeno 等人，2020]。我们将其作为一种具有代表性的启发式采集函数方法纳入比较，该方法不提供理论性能保证。为确保比较一致，所有方法均采用相同的最终推荐规则，即返回下置信界最大的高保真度已查询点。

模型规格 所有方法均采用平方指数核，$k(x, x') = \exp(-\frac{\|x-x'\|^2}{2l^2})$并在高斯过程中使用零均值先验。用于生成模拟数据的观测噪声水平在第4.1节中单独指定。我们通过最大化初始样本集上的高斯过程边际似然 [Williams 和 Rasmussen， 2006] 来初始化核超参数，随后通过边际似然最大化对其进行更新。对于 MF-GP-UCB 和 FGP-UCB，置信带阈值（τ_L）会根据查询比率进行自适应调整，如Kandasamy 等人[2019]所述。参数 τ_L 可避免在低保真度查询上耗费过多计算资源。如果τ_L 设置得过低，算法可能会过度采样低保真源以降低方差。我们将 τ_L 初始化为一个较小的值；如果算法连续超过

c_H/c_L 次迭代未查询高保真数据源， τ_L 则将其加倍。GP-UCB、MF-GP-UCB 和 F GP-UCB 的探索-利用权衡参数（β_t）设为 $\beta_t = 0.2d\log(2t)$ [Kandasamy 等人， 2019], 其中 d 表示搜索空间维度。此设置兼顾了维度和时间方面的缩放特性。

初始化 遵循Brochu 等人 [2010], 的建议，所有模型均采用均匀随机设计进行初始化。对于六峰骆驼和 HTS 实验，其中 $c_L = 1$且 $c_H = 10$，FGP-UCB、MF-GP-UCB 和 MF-MES 使用 3 个高保真度观测和 20 个低保真观测进行初始化，而 GP-UCB 则以 5 个高保真度观测开始，因此所有方法的初始化成本均为 50。对于 Park 实验，其中 $c_L = 1$ 且 $c_H = 50$，多保真方法仍使用 3 个高保真度观测和 20 个低保真观测进行初始化，初始化成本为 170；而 GP-UCB 则以 4 个高保真度观测开始，初始化成本为 200。每种初始化均重复 20 次，并对每种方法在 20 次独立运行中的表现取平均，以确保统计稳健性。实验图中的阴影区域表示 20 次独立运行的均值 ± 标准误（SEM）。

4.1 仿真研究

考虑了两种常用的多保真仿真研究:

六峰骆驼函数 六峰骆驼函数 [Branin， 1972] 是一种二维多项式基准函数，其起伏的表面由山脊分隔的谷地组成，形似骆驼的背部。该表面包含六个局部极小值，其中有两个深度相同的全局极小值，对称地位于原点两侧。本研究使用真实函数表面作为潜在高保真函数 f_H，并通过对 f_L 应用依赖输入的仿射变换来构造相关低保真函数 f_H。输入域为 $x_1 \in [-2, 2]$ 和 $x_2 \in [-1, 1]$。函数定义如下:

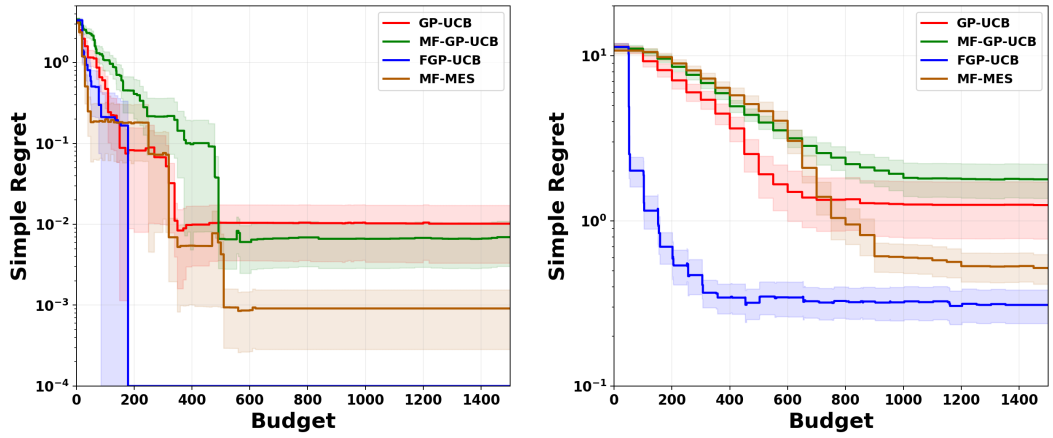
$$
\begin{aligned}
f_H(x) &= 4x_1^2 - 2.1x_1^4 + \frac{1}{3}x_1^6 + x_1x_2 - 4x_2^2 + 4x_2^4 \\
f_L(x) &= (0.5x_1 - 0.3x_2)f_H + (x_1 - 0.5) + 2(x_2 + 0.5) + 2
\end{aligned}
\tag{16}
$$

Park函数 Park函数是由Park[1991] 提出的四维解析基准函数，最初用于计算机代码校准，后来被改用于多保真仿真研究。其平方根、指数和三角函数项在输入变量之间产生非线性交互作用。该四维模型在定义域 $[0, 1]^4$上定义了高保真函数和低保真函数。函数如下:

$$
\begin{aligned}
f_H(x) =& \frac{x_1}{2}\sqrt{1 + (x_2 + x_3^2)\frac{x_4}{x_1^2}} + (x_1 + 3x_4\exp(1 + \sin(x_3))) \\
f_L(x) =& \left(1 + \frac{\sin(x_1)}{10}\right) f_H(x) - 2x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + 0.5
\end{aligned}
\tag{17}
$$

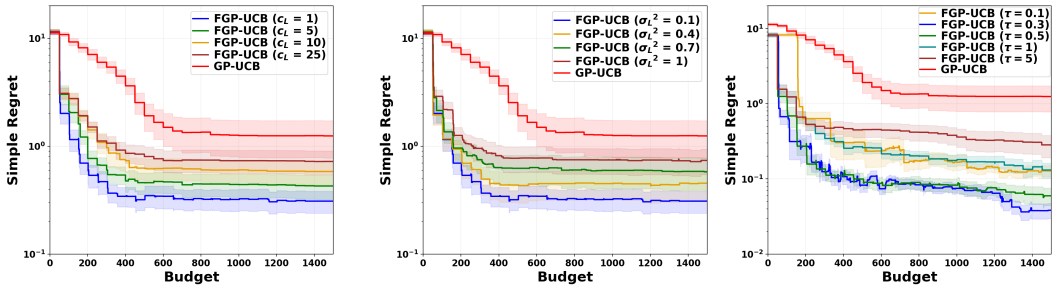
在这两个模拟模型中，每种保真度下的含噪观测均独立生成为 $y_m\ x\ =$ $f_m\ x\ + \epsilon_m \qquad m \in L\ H\ \ \epsilon_L \sim \mathcal{N}\ 0\ \sigma_L^2 \qquad \epsilon_H \sim \mathcal{N}\ 0\ \sigma_H^2$ ( ) ( )，其中,、(,) 和 (,)。观测噪声方差分别设为 $\sigma_L^2 = 0.1$ 和 $\sigma_H^2 = 0.01$。初始化后，总评估预算从 0 变化到 1500，各预算下对应的简单遗憾结果如图 2 所示。

图2a和图2b分别比较了不同方法在六峰骆驼模拟模型和Park函数上的表现。每条曲线显示了在不同预算水平下达到的简单遗憾，并对20次独立运行取平均。在六峰骆驼案例中，FGP-UCB迅速降低简单遗憾，并在相对较小的评估预算后达到接近零的水平，这表明所提出的方法能够在具有信息丰富的低保真结构的低维设置中，快速找到近似最优推荐。在Park案例中，优化问题涉及更高的维度、更复杂的响应面以及更高的高保真查询成本，因此优化设置更具挑战性，在所评估的预算范围内，简单遗憾仍然较高。尽管如此，在大部分预算范围内，FGP-UCB的简单遗憾始终显著低于基线方法。这些结果证明，FGP-UCB能够有效利用多保真信息，在有限的评估预算下找到高质量的推荐。



(a) (b)

图 2：仿真研究中不同方法在不同评估预算下的简单遗憾。(a) 二维六峰骆驼函数。(b) 四维 Park函数。



(a) (b) (c)

图3：FGP-UCB 在四维 Park函数上的敏感性分析。(a) 低保真查询成本（c_L）的影响。(b) 低保真观测噪声方差（σ_L^2）的影响。(c) 固定置信带阈值（τ_L）的影响。

4.2 敏感性分析

低保真查询成本的影响 我们首先考察低保真度评估的成本如何影响所提出的FGP-UCB算法的表现。图3a展示了四维、双保真Park函数在不同低保真成本下的结果（c_L）。高保真成本固定为 $c_H = 50$，而低保真成本在 $c_L = [1, 5, 10, 25]$范围内变化。随着 c_L 增加，表现会变差。这种下降是因为成本更高的低保真度探索会消耗更大比例的预算，留给高保真度评估的资源因而减少，从而减缓简单遗憾的降低。当低保真成本相对较高（$c_L = 25$）时，FGP-UCB的表现最接近 GP-UCB，这表明随着低保真信息成本的增加，利用低保真信息所带来的收益会大幅减小。

低保真噪声的影响 接下来，我们评估算法对低保真观测噪声水平的敏感性。图 3b 展示了 FGP-UCB 在 Park函数上面对一系列低保真噪声方差 σ_L^2 时的性能。高保真噪声方差固定为 $\sigma_H^2 = 0.01$，而低保真噪声方差在 $\sigma_L^2 = 0.1$ 到 $\sigma_L^2 = 1$ 之间变化。随着 σ_L^2 增加，低保真观测所含的信息减少，导致融合代理模型所用的低保真预测不确定性增大。因此，算法性能会下降，因为准确度较低的低保真估计难以有效引导探索，从而导致收敛速度变慢。

置信带阈值的影响我们进一步考察置信带阈值（τ_L）如何影响 FGP-UCB 的性能。图3c比较了 Park函数上不同固定阈值对应的简单遗憾。与先前使用的自适应阈值策略不同，

实验中，τ_L 在整个优化过程中保持恒定，以便单独考察其对保真度选择的影响。该阈值控制着低保真度探索与高保真度利用之间的平衡：阈值越小，低保真度不确定性必须进一步降低后才会进行高保真查询，从而鼓励更多低保真度探索；阈值越大，算法越早切换到高保真度，因而更侧重于利用。如图3c所示，中等阈值（$\tau_L = 0.3$和 $\tau_L = 0.5$）取得了最佳性能，而阈值过小或过大都会导致更高的简单遗憾。这些结果表明，恰当的置信带阈值对于平衡低保真度和高保真度评估的使用，以及实现优异的优化性能至关重要。

4.3 真实世界应用

高温超导带材（HTS）凭借其卓越的高临界电流承载能力，对下一代高场磁体的发展至关重要。高温超导带材的临界电流（I_c）不仅是一项材料属性，更是衡量质量的首要指标，它定义了导体在不产生阻力的情况下能够承载的最大电流。这一参数直接决定了高温超导带材在实际应用中的性能、稳定性和可靠性 [Selvamanickam，2012]。然而，如何调节工艺参数（如加热电压、加热电流及相关热条件）以最大化 I_c，仍是高温超导体制造面临的一项重大挑战。在实际生产中，I_c 需通过高速、高分辨率系统进行离线测量，以绘制带材沿线的磁场分布：卷对卷扫描霍尔探针显微镜（SHPM）。尽管 SHPM 能够提供精确且具空间分辨率的测量结果，但其耗时、成本高昂，而且难以在生产环境中频繁部署，尤其是针对长带材。为缓解这些局限，制造商通常依赖在线监测信号（如基底温度）作为间接质量指标 [Li 等， 2025]。这些测量结果虽保真度较低，却能为 I_c提供有效的代理指标。然而，一个亟待解决的关键问题是，如何系统地将这些低保真信号与稀疏的高保真 SHPM 测量结果结合起来，从而指导工艺控制与优化。
为应对这一挑战，我们将所提出的 FGP-UCB 方法应用于融合在线监测数据与离线质量测量数据，以实现高温超导体制造中的最优实验设计。该方法提供了一种实用且经济高效的策略，可在尽量减少高成本高保真度评估需求的同时，确定最优实验条件。

我们在一个真实世界的高温超导带材数据集上评估 FGP-UCB、GP-UCB、MF-GP-UCB 和 MF-MES。该数据集包含各种工艺设置（包括加热电压和电流），以及对应于一条 0.8 米高温超导带材的基底温度（低保真度）和 I_c（高保真度）测量值。图4展示了沿带材长度方向的 I_c 和基底温度曲线。由于工艺参数的变化，二者均会发生波动。任务是在受限的评估预算下，确定达到最大 I_c 的位置。采集基底温度和 I_c 测量值的成本分别设为 $c_L = 1$ 和 $c_H = 10$。分析前会对两个信号进行归一化，初始化则遵循仿真研究中采用的相同方案。

4.3.1 融合高斯过程模型预测 on

在评估序贯优化性能之前，我们首先考察在仅有有限数量的I_c 测量值可用时，所提出的融合高斯过程代理模型是否能够改善高保真预测。该分析的动机源于 Tran 等人 [2020的研究,], 其中将低保真模型输出与稀疏的高保真度观测相融合，以恢复更准确的高保真响应面。

图5比较了在固定高保真样本数量下的预测值 I_c 与观测到的高保真 I_c。第一个面板仅使用30个高保真 I_c 观测。其余面板保持相同数量的高保真观测，同时增加低保真样本数量，分别从150增加到300和450。虚线对角线表示完美预测。随着低保真样本数量增加，预测点逐渐靠近对角线，且 R^2 值不断增大，表明融合模型能够更准确地恢复高保真 I_c 响应面。

这些结果表明，在高保真采样稀缺的情况下，低保真信息为融合高斯过程代理模型提供了有用的结构。这种改进得益于融合机制，该机制将成本较低的低保真信号中的信息迁移过来，从而改善对成本较高的高保真

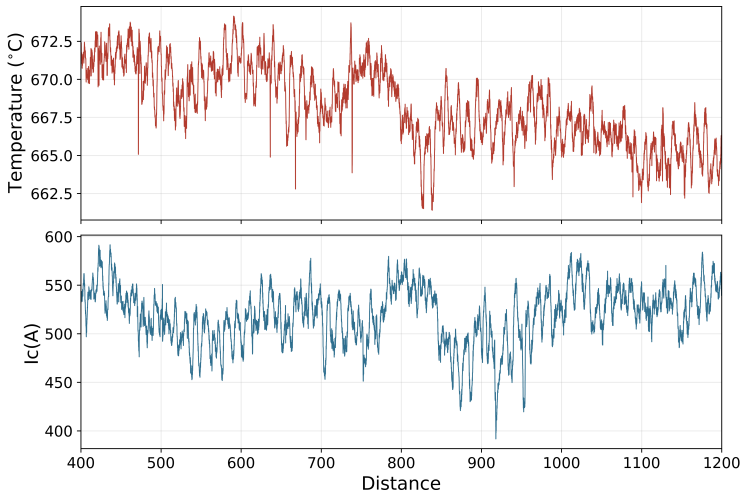
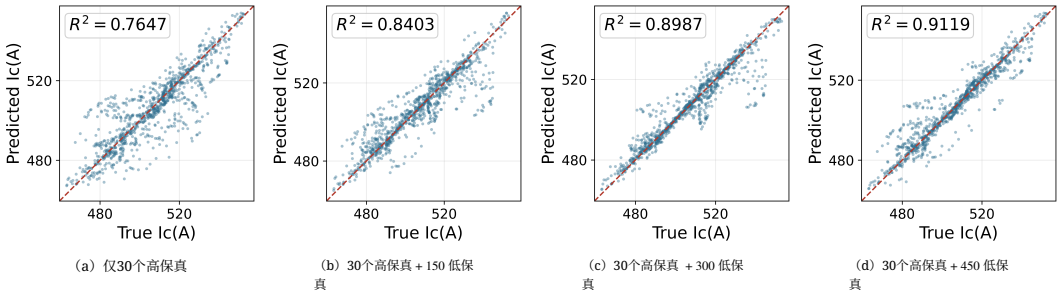


图4：沿高温超导带材长度方向的临界电流（I_c）和基底温度。



（a）仅30个高保真　（b）30个高保真 + 150 低保真　（c）30个高保真 + 300 低保真　（d）30个高保真 + 450 低保真

图5：高保真度模型（5a）与FGP多保真模型（5b、5c、5d）对高温超导体临界电流的预测比较 I_c

响应的预测。这支持在后续的贝叶斯优化实验中使用融合代理模型。

4.3.2 优化性能

在高温超导优化实验中，我们使用推荐设计点处观测到的高保真临界电流（I_c）评估各方法，因为在实际应用中真实最优值未知。按照第 3.5.2 节中的推荐策略，最终设计点从高保真度查询点中选出，依据是已存储的下置信界最大值。这一评估方案与应用型多保真贝叶斯优化研究一致：它们使用可观测的高保真响应而非简单遗憾来评估优化性能 [Mo 等人， 2023]。

图6比较了四种方法在高温超导制造应用中的优化性能。图6a展示了完整评估预算下的结果，图6b则放大显示了后期阶段的结果。每条曲线报告了推荐设计处观测到的高保真临界电流（I_c）随评估预算变化的情况，该结果取20次独立运行的平均值。GP-UCB在搜索初期领先。这一早期优势可能反映了各方法分配预算的方式。GP-UCB将全部预算用于直接测量临界电流，而多保真方法则可以将部分早期预算用于基底温度测量，以指导后续的高保真度评估。FGP-UCB在后期取得领先，并在最大预算下达到最高的平均观测值 I_c，其次是GP-UCB。MF-GP-UCB表现较弱，可能是因为它采用了均匀差异界；在基底温度与临界电流密切相关的区域，这一界可能过于保守。如果其代理模型高估了温度测量对于揭示最大临界电流所能提供的信息量，MF-MES可能会将部分预算用于信息量较低的温度测量。这些结果表明，所提出的融合代理模型能够有效利用基底温度与临界电流之间的相关性，

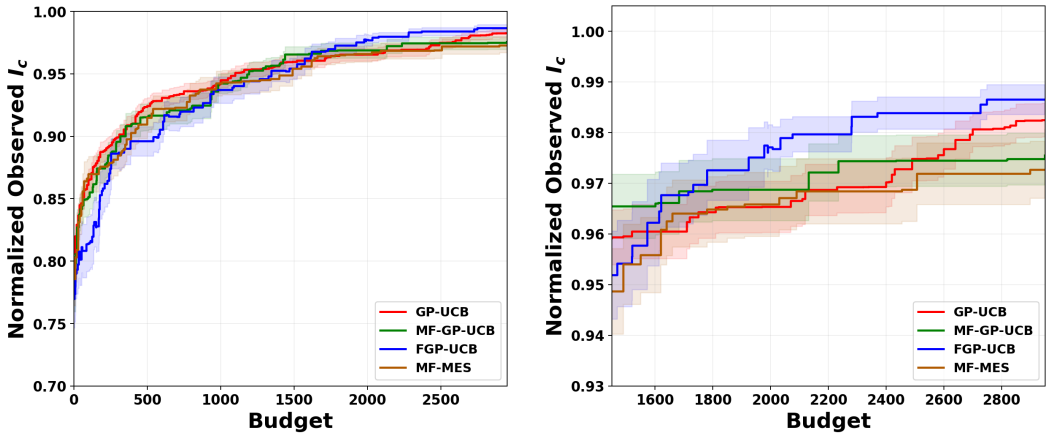


图6：在HTS制造实验中，不同评估预算下推荐设计处观测到的高保真临界电流（I_c）。（a）完整评估预算下的性能。（b）优化后期阶段的放大视图。

利用成本低廉的在线监测信息，引导搜索进入高质量区域，同时减少对昂贵高保真度测量的依赖。

5 结论

本工作解决了多保真贝叶斯优化中的一个根本性缺口：缺乏能够同时（i）利用丰富的跨保真度相关性，以及（ii）提供严格遗憾保证的方法。现有的决策理论方法和代理模型中心方法——尽管在实践中表现有效——却并不以优化遗憾为目标，因此缺乏理论收敛保证。相反，MF-GP-UCB等基于bandit的方法虽然提供遗憾保证，但依赖于限制性较强的独立性和有界差分假设，因而无法充分利用信息丰富的低保真度数据。

为弥合这一缺口，我们提出了一种新颖的算法——基于融合高斯过程的上置信界（FGP-UCB）。该算法将自回归多保真建模与基于UCB的探索、不确定性感知采集以及具有理论依据的遗憾性能相结合。理论分析和模拟结果表明，FGP-UCB能够有效利用低保真度观测来为高保真模型提供信息，与单保真方法和现有MFBO方法相比，取得了更优的遗憾性能。除了理论保证之外，我们还将FGP-UCB应用于高温超导体（HTS）制造中的工艺参数优化，展示了其在提高效率和降低运营成本方面的巨大潜力。

未来的研究可以将所提出的方法扩展到多目标贝叶斯优化，并开发能够捕捉不同目标和保真度层级之间依赖关系的融合高斯过程代理模型。另一个方向是适配随时间演变的低保真近似源，例如自我改进的 LLM 评估器；为此，可根据其近似精度的变化调整置信界和保真度选择策略。

致谢与资金披露

我们感谢休斯敦大学先进制造研究所，在本研究过程中提供了数据集。

参考文献

Yasin Abbasi-Yadkori、Dávid Pál 和 Csaba Szepesvári。线性随机赌博机的改进算法。《神经信息处理系统进展》，24，2011年。Natalia M Alexandrov、John E Dennis Jr、Robert Michael Lewis 和 Virginia Torczon。用于管理优化中近似模型使用的信赖域框架。《结构优化》，15(1):16–23，1998年。Peter Auer。利用置信界权衡利用与探索。《机器学习研究杂志》，3(Nov):397–422，2002年。Peter Auer、Nicolò Cesa-Bianchi 和 Paul Fischer。多臂赌博机问题的有限时间分析。*Machine Learning*，47:235–256，2002年05月。数字对象标识符：10.1023/A:1013689704352。Nils Baillie、Baptiste Kerleguer、Cyril Feau 和 Josselin Garnier。针对含噪输出和非嵌套实验设计的多保真高斯过程回归：递归与非递归形式的比较。*arXiv* 预印本 *arXiv:2511.20183*，2025年。John W Bandler、Radoslaw M Biernacki、Shao Hua Chen、Piotr A Grobelny 和 Ronald H Hemmers。用于电磁优化的空间映射技术。《*IEEE* 微波理论与技术汇刊》，42(12):2536–2544，1994年。John W Bandler、Qingsha S Cheng、Natalia K Nikolova 和 Mostafa A Ismail。利用预先指定参数的隐式空间映射优化。《*IEEE* 微波理论与技术汇刊》，52(1):378–385，2004年。F. H. Branin。求解联立非线性方程多个解的广泛收敛方法。*IBM* 研究与开发杂志，16(5):504–522，1972年9月。ISSN 0018-8646。数字对象标识符：10.1147/rd.165.0504。统一资源定位符 https://doi.org/10.1147/rd.165.0504。Eric Brochu、Vlad M Cora 和 Nando De Freitas。高成本函数贝叶斯优化教程，并应用于主动用户建模和分层强化学习。*arXiv* 预印本 *arXiv:1012.2599*，2010年。Sébastien Bubeck、Rémi Munos 和 Gilles Stoltz。有限臂和连续臂赌博机中的纯探索。《理论计算机科学》，412(19):1832–1852，2011年。Shishi Chen、Zhen Jiang、Shuxing Yang 和 Wei Chen。基于多模型融合的序贯优化。《美国航空航天学会杂志》，55(1):241–254，2017年。Si Cheng、Bledar A Konomi、Jessica L Matthews、Georgios Karagiannis 和 Emily L Kang。层次贝叶斯最近邻协同克里金高斯过程模型：其在卫星间校准中的应用。空间统计，44:100516，2021年。Kurt Cutajar、Mark Pullin、Andreas Damianou、Neil Lawrence 和 Javier González。用于多保真建模的深度高斯过程。*arXiv* 预印本 *arXiv:1903.07320*，2019年。Varsha Dani、Thomas P Hayes 和 Sham M Kakade。赌博机反馈下的随机线性优化。载于第*21*届学习理论年度会议，编号101，第355–366页，2008年。Francesco Di Fiore、Paolo Maggiore 和 Laura Mainini。面向再入飞行器设计的多保真领域感知学习。《结构与多学科优化》，64(5):3017–3035，2021年。Mike Diessner、Kevin J Wilson 和 Richard D Whalley。Nubo：用于贝叶斯优化的透明 Python 软件包。统计软件杂志，114:1–28，2025年。Bach Do 和 Ruda Zhang。多保真贝叶斯优化：综述。《美国航空航天学会杂志》，63(6):2286–2322，2025年。M Giselle Fernández-Godino。多保真模型综述。*arXiv* 预印本 *arXiv:1609.07196*，2016年。

Alexander Forrester、Andras Sobester 和 Andy Keane。通过代理建模实现多保真度优化。《英国皇家学会会刊 A 辑》，463:3251–3269，2007年10月。数字对象标识符：10.1098/rspa.2007.1900。Eduardo C Garrido-Merchán。信息论贝叶斯优化：综述与教程。arXiv 预印本 arXiv:2502.06789，2025年。Seyede Fatemeh Ghoreishi 和 Douglas Allaire。多信息源约束贝叶斯优化。《结构与多学科优化》，59(3):977–991，2019年。Francesco Grassi、Giorgio Manganini、Michele Garraffa 和 Laura Mainini。RAAL：面向资源的主动学习，实现多保真度高效优化。《美国航空航天学会杂志》，61(6):2744–2753，2023年。Peng Hao、Shaojun Feng、Yuwei Li、Bo Wang 和 Huihan Chen。多保真度梯度增强克里金模型的自适应填充采样准则。《结构与多学科优化》，62(1):353–373，2020年。Ali Hebbal、Loic Brevault、Mathieu Balesdent、El-Ghazali Talbi 和 Nouredine Melab。利用深度高斯过程，对采用不同输入域定义的模型进行多保真建模。《结构与多学科优化》，63(5):2267–2288，2021年。José Miguel Hernández-Lobato、Michael A Gelbart、Ryan P Adams、Matthew W Hoffman 和 Zoubin Ghahramani。利用基于信息的搜索进行约束贝叶斯优化的通用框架。《机器学习研究杂志》，17(160):1–53，2016年。Shouri Hu、Haowei Wang、Zhongxiang Dai、Bryan Kian Hsiang Low 和 Szu Hui Ng。用于含噪贝叶斯优化中累积遗憾最小化的调整期望改进。《机器学习研究杂志》，26(46):1–33，2025年。Deng Huang、Theodore T Allen、William I Notz 和 R Allen Miller。利用多保真度评估进行序贯克里金优化。《结构与多学科优化》，32(5):369–382，2006a。Deng Huang、Theodore T Allen、William I Notz 和 Ning Zeng。通过序贯克里金元模型对随机黑箱系统进行全局优化。《全局优化杂志》，34(3):441–466，2006年（b）。Carl Hvarfner、Erik Orm Hellsten 和 Luigi Nardi。标准贝叶斯优化在高维空间中表现出色。arXiv 预印本 arXiv:2402.02229，2024年。Ping Jiang、Tingli Xie、Qi Zhou、Xinyu Shao、Jiexiang Hu 和 Longchao Cao。基于高斯过程模型的可变保真度元建模空间映射方法。《仿真建模实践与理论》，81:64–84，2018年。Kirthevasan Kandasamy、Gautam Dasarathy、Jeff G. Schneider 和 Barnabás Póczos。多保真度多臂老虎机。CoRR，abs/1610.09726，2016年。统一资源定位符：http://arxiv.org/abs/1610.09726。Kirthevasan Kandasamy、Gautam Dasarathy、Jeff Schneider 和 Barnabás Póczos。采用连续近似的多保真度贝叶斯优化。载于《International Conference on Machine Learning》，第1799–1808页。PMLR，2017年。Kirthevasan Kandasamy、Gautam Dasarathy、Junier Oliva、Jeff Schneider 和 Barnabas Poczos。多保真度高斯过程老虎机优化。《人工智能研究杂志》，66:151–196，2019年。Marc C Kennedy 和 Anthony O'Hagan。当复杂计算机代码存在快速近似时预测其输出。《生物计量学》，87(1):1–13，2000年。Slawomir Koziel、John W Bandler 和 Kaj Madsen。工程优化的空间映射框架——理论与实现。《IEEE 微波理论与技术汇刊》，54(10):3721–3730，2006年。Harold J. Kushner。在噪声存在的情况下确定任意多峰曲线最大值点的新方法。《基础工程杂志》，86:97–106，1964年。统一资源定位符：https://api.semanticscholar.org/CorpusID:62599010。

Loic Le Gratiet 和 Josselin Garnier。用于多保真度计算机试验设计的递归协同克里金模型。不确定性量化国际期刊，4(5)，2014年。Kunpeng Li、Qingye Li、Liye Lv、Xueguan Song、Yunsheng Ma 和 Ikjin Lee。基于非线性映射的非线性集成双保真代理模型。结构与多学科优化，66(9):196，2023年。Mai Li、Ying Lin、Qianmei Feng、Wenjiang Fu、Shenglin Peng、Siwei Chen、Mahesh Paidpilli、Chirag Goel、Eduard Galstyan 和 Venkat Selvamanickam。用于高温超导体制造脱落分析的分位数回归增强事件建模框架。智能制造期刊，36(5):3009–3030，2025年。Shibo Li、Wei Xing、Robert Kirby 和 Shandian Zhe。通过深度神经网络实现多保真贝叶斯优化。载于 H. Larochelle、M. Ranzato、R. Hadsell、M.F. Balcan 和 H. Lin 编，《神经信息处理系统进展》，第33卷，第8521–8531页。Curran Associates, Inc.，2020年。统一资源定位符：https://proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/2020/file/60e1deb043af37db5ea4ce9ae8d2c9ea-Paper.pdf。T. J. Mackman、C. B. Allen、M. Ghoreyshi 和 K. J. Badcock。用于生成代理气动模型的自适应采样方法比较。《美国航空航天学会杂志》，51(4):797–808，2013年。数字对象标识符：10.2514/1.J051607。统一资源定位符https://doi.org/10.2514/1.J051607。Andre Marchildon 和 David Zingg。梯度增强贝叶斯优化及其在气动外形优化中的应用。载于 *AIAA*航空论坛与*ASCEND 2024*，第4405页，2024年。Xuhui Meng、Hessam Babaee 和 George Em Karniadakis。多保真贝叶斯神经网络：算法与应用。计算物理学杂志，438:110361，2021年。

Chengyang Mo、Paris Perdikaris 和 Jordan R Raney。利用多保真贝叶斯优化加速结构化材料的设计点设计。工程力学杂志，149(6):04023032，2023年。

J. Moˇckus。关于寻求极值的贝叶斯方法。载于 G. I. Marchuk（编），*IFIP*优化技术会议：新西伯利亚，*1974*年*7*月*1*日至*7*日，第400–404页，柏林、海德堡，1975年。Springer Berlin Heidelberg。国际标准书号 978-3-540-37497-8。

Jeong Soo Park。使复杂计算机代码适配数据与最优设计点。伊利诺伊大学厄巴纳-香槟分校，1991年。

Paris Perdikaris、Maziar Raissi、Andreas Damianou、Neil D Lawrence 和 George Em Karniadakis。面向数据高效多保真建模的非线性信息融合算法。英国皇家学会学报*A*：数学、物理与工程科学，473(2198):20160751，2017年。

Matthias Poloczek、Jialei Wang 和 Peter Frazier。多信息源优化。《神经信息处理系统进展》，30，2017年。

Carl Edward Rasmussen。机器学习中的高斯过程，第 63–71 页。施普林格 柏林 海德堡，柏林，海德堡，2004 年。国际标准书号 978-3-540-28650-9。数字对象标识符：10.1007/978-3-540-28650-9_4。统一资源定位符：https://doi.org/10.1007/978-3-540-28650-9_4。

TD Robinson、Michael S Eldred、Karen E Willcox 和 Robert Haimes。采用可变参数化与校正空间映射的基于代理模型的优化。《美国航空航天学会杂志》，46(11):2814–2822，2008年。V Selvamanickam。高温超导（HTS）线材和带材。载于能源应用中的高温超导体（*HTS*），第34–68页。爱思唯尔，2012年。Andrea Serani、Riccardo Pellegrini、Jeroen Wackers、C-E Jeanson、Patrick Queutey、Michel Visonneau 和 Matteo Diez。通过径向基函数元模型进行基于计算流体动力学的优化的自适应多保真采样。《国际计算流体动力学杂志》，33(6-7):237–255，2019年。

Leshi Shu、Ping Jiang 和 Yan Wang。基于期望进一步改进的多保真贝叶斯优化方法。结构与多学科优化，63(4):1709–1719，2021年。Jasper Snoek、Hugo Larochelle 和 Ryan P Adams。机器学习算法的实用贝叶斯优化。《神经信息处理系统进展》，25，2012年。Niranjan Srinivas、Andreas Krause、Sham M. Kakade 和 Matthias W. Seeger。赌博机设定下高斯过程优化的信息论遗憾界。*IEEETransactions onInformation Theory*，58(5):3250–3265，2012年。数字对象标识符：10.1109/TIT.2011.2182033。Shion Takeno、Hitoshi Fukuoka、Yuhki Tsukada、Toshiyuki Koyama、Motoki Shiga、Ichiro Takeuchi 和 Masayuki Karasuyama。结合最大值熵搜索及其并行化的多保真贝叶斯优化。载于*International Conference on Machine Learning*，第9334–9345页。PMLR，2020年。Siyu Tao、Daniel W Apley、Wei Chen、Andrea Garbo、David J Pate 和 Brian J German。用于模型校准的输入映射及其在机翼空气动力学中的应用。《美国航空航天学会杂志》，57(7): 2734–2745，2019年。Anh Tran、Julien Tranchida、Tim Wildey 和 Aidan P Thompson。面向材料设计的多保真机器学习、不确定性量化与贝叶斯优化：三元随机合金的应用。*The Journal of Chemical Physics*，153(7)，2020a年。Anh Tran、Tim Wildey 和 Scott McCann。smf-bo-2cogp：面向设计应用的序贯多保真约束贝叶斯优化框架。*Journal of Computing and Infor mationScienceinEngineering*，20(3):031007，2020b年。Tsuyoshi Ueno、Trevor David Rhone、Zhufeng Hou、Teruyasu Mizoguchi 和 Koji Tsuda。Combo：面向材料科学的高效贝叶斯优化库。*Materialsdiscovery*，4:18–21，2016年。Sattar Vakili、Nacime Bouziani、Sepehr Jalali、Alberto Bernacchia 和 Da-shan Shiu。高斯过程赌博机的最优阶简单遗憾。《神经信息处理系统进展》，34:21202–21215，2021年。Felipe AC Viana、Timothy W Simpson、Vladimir Balabanov 和 Vasilli Toropov。多学科设计优化专题：多学科设计优化中的元建模——我们究竟取得了多大进展？《美国航空航天学会杂志》，52(4):670–690，2014年。Daniel N Wilke。多保真代理模型：数据融合的新视角。*arXiv*预印本 *arXiv:2404.14456*，2024年。Christopher KI Williams 和 Carl Edward Rasmussen。面向机器学习的高斯过程，第2卷。MIT Press，马萨诸塞州剑桥，2006年。Pan Xu、Zheng Wen、Handong Zhao 和 Quanquan Gu。具有深度表示和浅层探索的神经上下文赌博机，2020年。统一资源定位符 https://arxiv.org/abs/2012.01780。Mimi Zhang、Andrew Parnell、Dermot Brabazon 和 Alessio Benavoli。用于序贯实验设计的贝叶斯优化及其在增材制造中的应用，2023年。统一资源定位符https://arxiv.org/abs/2107.12809。Yichi Zhang、Daniel W Apley 和 Wei Chen。针对混合定量与定性变量的材料设计贝叶斯优化。*Scientific Reports*，10(1):4924，2020年。Yu Zhang、Zhong-Hua Han 和 Ke-Shi Zhang。用于昂贵函数高效全局优化的变保真期望改进方法。结构与多学科优化，58(4):1431–1451，2018年。Jun Zheng、Xinyu Shao、Liang Gao、Ping Jiang 和 Haobo Qiu。一种用于工程设计的基于先验知识输入的LSSVR元建模方法，并采用细胞粒子群优化进行调参。*Expert Systems with Applications*，41(5):2111–2125，2014年。Qi Zhou、Ping Jiang、Xinyu Shao、Jiexiang Hu、Longchao Cao 和 Li Wan。一种基于径向基函数的变保真信息融合方法。*Advanced Engineering Informatics*，32: 26–39，2017年。

引理 3.1 的证明

正则化插件对数似然为

$$l_\lambda(\rho \mid \mathcal{D}_H, \hat{\mu}_L, K_\delta) = -\frac{1}{2}\log|Q| - \frac{\lambda}{2}\|\rho\|_2^2 - \frac{1}{2}(Y_H - F_L\rho)^T Q^{-1}(Y_H - F_L\rho). \tag{18}$$

令 $Q = K_\delta + \sigma_H^2 I$ 和 $A_L = F_L^T Q^{-1} F_L + \lambda I$，则最大化得到 $\hat{}\rho = A_L^{-1} F_L^T Q^{-1} Y_H$。在融合模型下，$Y_H = F_L^* \rho^* + \eta_H$，其中 $\eta_H = f_\delta(X_H) + \epsilon_H$。记 $b_\rho = A_L^{-1} F_L^T Q^{-1}(F_L^* - F_L)\rho^*$，可得

$$\hat{\rho} - \rho^* - b_\rho = A_L^{-1}\big(F_L^T Q^{-1}\eta_H - \lambda\rho^*\big).$$

由于 $A_L \succeq \lambda I$ 和 $\|\rho^*\|_2 \le M_\rho$，由三角不等式可得

$$\|\hat{\rho} - \rho^* - b_\rho\|_{A_L} \le \|F_L^T Q^{-1}\eta_H\|_{A_L^{-1}} + \sqrt{\lambda} M_\rho.$$

For 固定的输入位置和独立的高斯观测噪声下，$U = F_L^T Q^{-1}\eta_H$ 是高斯 n with 在低保真度数据条件下，均值为零，协方差为 $A_L - \lambda I$。因此，

$$\mathbb{E}\Big[\exp\Big(\tfrac{1}{2}\|U\|_{A_L^{-1}}^2\Big)\,\Big|\,\mathcal{D}_L\Big] = \det(A_L)^{1/2}\det(\lambda I)^{-1/2}.$$

马尔可夫不等式给出固定设计集中项 $\sqrt{2\log\big(\det(A_L)^{1/2}\det(\lambda I)^{-1/2}/\delta\big)}$，其尺度为 1。要为自适应设计确定一个置信半径，需要对重新拟合的 $F_{L,\,t}$进行集中分析。

B 定理 3.2 的证明

令 $b_{\rho,\,t}$ 和 $\eta_{H,\,t}$ 表示第 t 轮之前根据数据计算得到的上述量。记

$$h_t(x) = x\hat{\mu}_{L,t}(x) - F_{L,t}^T Q_t^{-1} k_{\delta,t}(x),$$

其中，$k_{\delta,\,t}(x)$ 是残差协方差向量。将 $Y_{H,\,t} = F_{L,\,t}^* \rho^* + \eta_{H,\,t}$ 代入融合预测器，得到

$$\begin{aligned} f_H(x) - \hat{\mu}_{H,t}(x) = {} & h_t(x)^T(\rho^* - \hat{\rho}_t + b_{\rho,t}) \\ & + ((\rho^*)^T x)\big(f_L(x) - \hat{\mu}_{L,t}(x)\big) \\ & - k_{\delta,t}(x)^T Q_t^{-1}(F_{L,t}^* - F_{L,t})\rho^* - h_t(x)^T b_{\rho,t} \\ & + f_\delta(x) - k_{\delta,t}(x)^T Q_t^{-1}\eta_{H,t}. \end{aligned}$$

根据柯西–施瓦茨不等式，第一项的绝对值不超过 $\|h_t(x)\|_{A_L^{-1}\,,\,t}\|\hat{}\rho_t - \rho^* - b_{\rho,\,t}\|_{A_{L,\,t}}$。残差高斯过程置信事件要求满足以下双侧界

$$\big|f_\delta(x) - k_{\delta,t}(x)^T Q_t^{-1}\eta_{H,t}\big| \le \sqrt{\beta_t}\,\hat{\sigma}_{\delta,t}(x)$$

其中将 $\eta_{H,\,t}$ 作为残差观测。要确定定理 3.2 中的置信半径，还需要控制低保真替代项以及通过 $h_t(x)$ 得到的链接贡献。

C 定理 3.3 的证明

引理 C.1. 设 $\{z_s\}_{s=1}^m \subset \mathbb{R}^d$ 满足 $\|z_s\|_2 \le G$，且令 $V_s = \lambda I + \sum_{i=1}^s z_i z_i^T$，其中 $\lambda > 0$。那么

$$\det(V_m) \le \left(\lambda + \frac{mG^2}{d}\right)^d, \qquad \sum_{s=1}^m \|z_s\|_{V_{s-1}^{-1}}^2 \le \left(1 + \frac{G^2}{\lambda}\right) d\log\left(1 + \frac{mG^2}{\lambda d}\right).$$

特别地，当 $\lambda \ge G^2$ 时，因子 $1 + G^2/\lambda$ 可以替换为 2。

证明。 行列式界由 $\mathrm{tr}(V_m) \le \lambda d + mG^2$ 以及算术—几何平均不等式得到。记 $u_s = z_s^T V_{s-1}^{-1} z_s \le G^2/\lambda$。由于对于 $0 \le u \le G^2/\lambda$, $u \le (1+G^2/\lambda)\log(1+u)$，由矩阵行列式引理可得

$$\sum_{s=1}^{m} u_s \le \left(1+\frac{G^2}{\lambda}\right) \log \frac{\det(V_m)}{\det(\lambda I)} \le \left(1+\frac{G^2}{\lambda}\right) d \log\left(1+\frac{mG^2}{\lambda d}\right).$$

□

引理 C.2。 对于一个固定序列 $Z = (x_1, \ldots, x_m)$ 以及具有核函数 k 和方差为 $\sigma^2 > 0$ 的独立高斯观测噪声的高斯过程，令 $s_{i-1}^2(x_i)$ 表示仅基于 $x_1, \ldots, x_{i-1}$ 得到的预测方差。则

$$I(y_Z; f_Z) = \frac{1}{2} \log\det(I_m + \sigma^{-2} K_k(Z,Z)) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \log(1 + \sigma^{-2} s_{i-1}^2(x_i)).$$

若 $k(x,x) \le 1$，则对于任意一个使用 $x_t \in \mathcal{A}$ 和 $|\mathcal{J}| = m$ 查询该高斯过程的迭代子集 $\mathcal{J}$，

$$\sum_{t \in \mathcal{J}} \hat{\sigma}_t^2(x_t) \le \frac{2}{\log(1+\sigma^{-2})} \Psi_m^{k,\sigma}(\mathcal{A}), \tag{19}$$

其中 $\hat{}\sigma_t^2$ 使用该高斯过程在迭代 t 之前的所有可用观测，而 $\Psi^{k}{}_{m}{}^{\sigma}(\mathcal{A})$ 是对 $\mathcal{A}$ 中长度为 m 的点序列的信息增益上确界，允许位置重复。

证明。 行列式恒等式可由连续应用舒尔补得到。按时间顺序排列 $\mathcal{J}$ 中的点。加入更多观测只会降低预测方差，因此对于相应的点，$\hat{}\sigma_t^2(x_t) \le s_{i-1}^2(x_i) \le 1$。不等式

$$v \le \frac{\log(1+\sigma^{-2}v)}{\log(1+\sigma^{-2})}, \qquad 0 \le v \le 1,$$

MIG 的定义给出（19）。行列式和方差不等式适用于每个已实现的序列，包括自适应选择的点和子集。 □

假设 1（稳定链接信息）。令 t_j 表示初始化后第 j次高保真查询所在的轮次，并令 $z_j = x_{t_j} \hat{}\mu_{L,t_j}(x_{t_j})$表示在查询之前计算得到的其特征。对于某个与 Λ无关的常数 $\kappa > 0$，假设

$$A_{L,t_j} \succeq \kappa \left(\lambda I + \sum_{i=1}^{j-1} z_i z_i^T\right) \qquad \text{for all } j.$$

附加条件。核函数和噪声方差是固定的，其中 $k_L(x,x) \le 1, k_\delta(x,x) = 1$，且 $\sigma_L^2, \sigma_H^2 > 0$。预测方差使用相应的高斯过程协方差公式计算。常数 λ, τ_L 为正，$0 < c_L < c_H$，且 β_t 为正且非递减。对于与 Λ无关的常数 $G, a_\rho > 0$，

$$\|z_j\|_2 \le G, \qquad \alpha_{\rho,t_j}^2 \le a_\rho \beta_{t_j} \qquad \text{for all } j. \tag{20}$$

假设假设 1 和（20）以至少为 $1-\delta$的概率在事件 $\mathcal{E}_{\mathrm{link}}$ 上共同成立。令 $\mathcal{E}_{\mathrm{conf}}$ 表示定理 3.2 中的双侧界对所有 t 和$x \in \mathcal{X}$同时成立的事件。在 $1-\delta$水平的同时置信度下，并集界给出 $\Pr(\mathcal{E}) \ge 1-2\delta$，其中$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\mathrm{link}} \cap \mathcal{E}_{\mathrm{conf}}$。记 $\Psi_n^L = \Psi^{k_L}{}_{,n}{}^{\sigma_L}$和 $\Psi_n = \Psi^{k_\delta}{}_{,n}{}^{\sigma_H}$。另外，假设作为 $\Lambda \to \infty$,

$$\beta_{\bar{n}_1} \Psi_{\bar{n}_1}^L(\mathcal{X}) = o(\bar{n}_1), \qquad \beta_{\bar{n}_1} \Psi_{\bar{n}_H}(\mathcal{X}) = o(\bar{n}_H), \tag{21}$$

其中 $\bar{n}_1 = \lfloor \Lambda/c_L \rfloor$ 和 $\bar{n}_H = \lfloor \Lambda/c_H \rfloor$。算法精确地最大化 FGP-UCB 分数，并持续执行，直到剩余预算不足以支付下一次查询。固定的初始化成本（如果有）记为 Λ_0。

定理 *3.3* 的证明。 在 $\mathcal{E}$ 上进行分析。令 N_L 和 N_H 分别表示初始化后低保真度查询和高保真度查询的次数，并令 $\mathcal{I}_H(\Lambda)$ 表示相应的高保真度查询索引。则$T = N_L + N_H \le \bar{n}_1$ 和 $N_H \le \bar{n}_H$。以下所有预测均在对应索引的查询之前计算。将置信半径写作

$$w_t(x) = \alpha_{\rho,t}\|x\hat{\mu}_{L,t}(x)\|_{A_{L,t}^{-1}} + \sqrt{\beta_t}\,\hat{\sigma}_{\delta,t}(x).$$

置信界和 FGP-UCB 的最大化意味着

$$f^* \le \text{FGP-UCB}_t(x_t) = \hat{\mu}_{H,t}(x_t) + w_t(x_t), \qquad f^* - f_H(x_t) \le 2w_t(x_t). \tag{22}$$

累积不确定性。 考虑 $\mathcal{A}$ 中任意大小为 m 的非空子集 $\mathcal{J} \subseteq \mathcal{I}_H(\Lambda)$，且其所有点均属于一个非空集合。将其高保真索引按序记为 t_{j_1}、.....、 t_{j_m}，并定义$W_\ell = \lambda I + \sum_{h=1}^{\ell} z_{j_h} z_{j_h}^T$。由于 $\{j_1, \ldots, j_{\ell-1}\} \subseteq \{1, \ldots, j_\ell - 1\}$，假设 1 给出

$$A_{L,t_{j_\ell}} \succeq \kappa W_{\ell-1}.$$

因此，引理 C.1 和（20）得到

$$\sum_{\ell=1}^{m} \alpha_{\rho,t_{j_\ell}}^2 \|z_{j_\ell}\|_{A_{L,t_{j_\ell}}^{-1}}^2 \le \frac{a_\rho \beta_{\bar{n}_1} d}{\kappa}\left(1 + \frac{G^2}{\lambda}\right)\log\left(1 + \frac{mG^2}{\lambda d}\right). \tag{23}$$

在 $\mathcal{A}$ 的任意点进行重复采样会得到 $\Psi_m(\mathcal{A}) \ge \frac{1}{2}\log(1 + m/\sigma_H^2)$。利用对于 $a,\ v \ge 0$ 有 $\log(1 + av) \le \max\{1, a\}\log(1 + v)$，定义

$$C_\rho = \frac{2a_\rho d}{\kappa}\left(1 + \frac{G^2}{\lambda}\right)\max\left\{1, \frac{\sigma_H^2 G^2}{\lambda d}\right\}, \qquad C_\delta = \frac{2}{\log(1 + \sigma_H^{-2})}, \qquad K = (\sqrt{C_\rho} + \sqrt{C_\delta})^2.$$

因此，（23）至多为 $C_\rho \beta_{\bar{n}_1} \Psi_m(\mathcal{A})$，而引理 C.2 给出

$$\sum_{t\in\mathcal{J}} \beta_t \hat{\sigma}_{\delta,t}^2(x_t) \le C_\delta \beta_{\bar{n}_1} \Psi_m(\mathcal{A}).$$

因此，欧几里得范数的三角不等式意味着

$$\sum_{t\in\mathcal{J}} w_t(x_t)^2 \le K\beta_{\bar{n}_1}\Psi_m(\mathcal{A}). \tag{24}$$

其中的高保真度查询数量 $\mathcal{X}_H$。 一次低保真度查询需要 $\sqrt{\beta_t}\hat{\sigma}_{L,\,t}(x_t) \ge \tau_L$。当$C_L = 2/\log(1 + \sigma_L^{-2})$时，由引理 C.2 可得

$$N_L \tau_L^2 \le \beta_{\bar{n}_1} \sum_{t:\, m_t = L} \hat{\sigma}_{L,t}^2(x_t) \le C_L \beta_{\bar{n}_1} \Psi_{\bar{n}_1}^L(\mathcal{X}).$$

定义

$$B_L(\Lambda) = \frac{C_L \beta_{\bar{n}_1} \Psi_{\bar{n}_1}^L(\mathcal{X})}{\tau_L^2}.$$

未使用预算小于 c_H，因此

$$c_H N_H > \Lambda - \Lambda_0 - c_H - c_L N_L \ge \Lambda - \Lambda_0 - c_H - c_L B_L(\Lambda).$$

由于 $B_L(\Lambda) = o(\Lambda)$，对于所有充分大的 Λ，有 $N_H \ge \bar{n}_H/2$。

令 N_{out} 计数集合 $\mathcal{X}_H$ 之外的高保真度查询。对于每个此类查询，$3\tau_L < f^* - f_H(x_t) \le 2w_t(x_t)$。由 (24) 取 $\mathcal{A} = \mathcal{X}$，

$$N_{\text{out}} \le \frac{4}{9\tau_L^2} \sum_{t\in\mathcal{I}_H(\Lambda)} w_t(x_t)^2 \le \frac{4K\beta_{\bar{n}_1}\Psi_{\bar{n}_H}(\mathcal{X})}{9\tau_L^2} = o(\bar{n}_H).$$

因此，存在有限的 Λ_*，使得对于每个 $\Lambda \ge \Lambda_*$，

$$N_{\text{in}} := N_H - N_{\text{out}} \ge \frac{\bar{n}_H}{4} > 0. \tag{25}$$

推荐遗憾。令 $\mathcal{J}_H = \{t \in \mathcal{I}_H(\Lambda) : x_t \in \mathcal{X}_H\}$，因此 $|\mathcal{J}_H| = N_{\text{in}}$。存储的 FGP-LCB 推荐和置信界给出，对于每个 $t \in \mathcal{J}_H$，

$$\begin{aligned} f_H(x_{out}) &\geq \max_{s \in \mathcal{I}_H(\Lambda)} \text{FGP-LCB}_s(x_s) \\ &\geq \text{FGP-LCB}_t(x_t) = \hat{\mu}_{H,t}(x_t) - w_t(x_t). \end{aligned}$$

将其与（22）结合可得，对于每个 $t \in \mathcal{J}_H$，$S(\Lambda) \leq 2w_t(x_t)$。因此，根据（24）和（25），

$$\begin{aligned} S(\Lambda) &\leq 2 \min_{t \in \mathcal{J}_H} w_t(x_t) \leq 2\sqrt{\frac{\sum_{t \in \mathcal{J}_H} w_t(x_t)^2}{N_{\text{in}}}} \\ &\leq \sqrt{\frac{4K\beta_{\bar{n}_1}\Psi_{N_{\text{in}}}(\mathcal{X}_H)}{N_{\text{in}}}} \leq \sqrt{\frac{16K\beta_{\bar{n}_1}\Psi_{\bar{n}_H}(\mathcal{X}_H)}{\bar{n}_H}}. \end{aligned}$$

最后，$\Psi_{\bar{n}_H}(\mathcal{X}_H) \leq \Psi_{\bar{n}_H}(\mathcal{X})$ 与（21）推出 $S(\Lambda) \to 0$。所有不等式在 $\mathcal{E}$ 上成立。 □