

AMFEB with Adaptive Fidelity and PCA

Улучшение метода оптимизации гиперпараметров

Студент: Мищук Глеб Александрович

Науч. рук.: Кравцова Ольга Анатольевна

МГУ им. М.В. Ломоносова, ВМК, ММП - 2025

Цель и постановка задачи

Цель:

Улучшить метод AMFEB для оптимизации гиперпараметров с минимальной потерей качества модели.

Проблема:

- При высокой размерности суррогатная модель обучается плохо
- Фиксированная стратегия fidelity не учитывает неопределённость модели

Формальная задача:

$$\lambda^* = \operatorname{argmin} f(\lambda), \text{ где } f - \text{метрика качества на валидационных данных}$$

Критерий:

Сравнение по времени работы при сохранении качества (MAE, RMSE, R2).

Метод решения: базовый AMFEB

AMFEB - гибридный метод: байесовская оптимизация + эволюционные алгоритмы + multi-fidelity оценки.

Проблемы базового AMFEB:

- Проклятие размерности: суррогатная модель деградирует при n больше 10
- Фиксированная fidelity: не адаптируется к неопределённости

Предлагаемые улучшения:

1. PCA-редукция

Снижение размерности пространства гиперпараметров

2. Adaptive Fidelity

Динамический выбор уровня точности

Метод решения: схема алгоритма

Схема выбора fidelity:

Fidelity = z_{low} при высокой неопределённости, z_{high} при низкой неопределённости

Этапы Improved AMFEB:

1. PCA

Снижение размерности

2. GP Model

Суррогатная модель

3. Fidelity

Адаптивный выбор

4. Evolution

Отбор и мутация

Преимущества:

- Высокая fidelity для перспективных кандидатов
- Экономия ресурсов на ранних этапах
- Стабильная работа суррогатной модели

Эксперименты: настройки

Датасеты (OpenML):

- ID 3945 - регрессия
- ID 42362 - регрессия
- ID 45017 - регрессия
- ID 46783 - регрессия

Методы:

- AMFEB - базовый
- BayesOpt - байесовская оптимизация
- ImprovedAMFEB - предложенный

Модель:

Gradient Boosting Regressor, 8 гиперпараметров

Метрики:

- MAE - Mean Absolute Error
- RMSE - Root Mean Squared Error
- R2 - коэффициент детерминации
- Time - время оптимизации (сек)

PCA настройки:

Сохранение 95% дисперсии

Эксперименты: результаты

Метод	3945 MAE	42362 MAE	45017 MAE	46783 MAE	3945 Time	46783 Time
AMFEB	0.559	43.67	0.291	0.652	222.8s	1304.2s
BayesOpt	0.524	51.30	0.289	0.543	40.7s	128.2s
ImprovedAMFEB	0.680	42.17	0.307	0.656	203.5s	358.6s

Ключевые результаты:

- $R^2 > 0.95$ на 3 из 4 датасетов
- Ускорение до 3.6× на датасете 46783

Сравнение времени (датасет 46783):



Выводы

- Разработан улучшенный метод AMFEB с интеграцией PCA и адаптивной fidelity
- PCA-редукция стабилизирует суррогатную модель
- Адаптивный выбор fidelity минимизирует вычислительные затраты

На экспериментах достигнуто:

3.6x

ускорение

0.95+

R2 на 3/4 датасетов

~

качество MAE/RMSE

Метод обеспечивает хороший баланс между точностью и эффективностью для практических задач HPO.

Литература

- Bergstra J., Bengio Y. Random Search for Hyper-Parameter Optimization. JMLR, 2012.
- Snoek J., et al. Practical Bayesian Optimization of ML Algorithms. NeurIPS, 2012.
- Rasmussen C.E., Williams C.K.I. Gaussian Processes for ML. MIT Press, 2006.
- Kandasamy K., et al. Multi-Fidelity Bayesian Optimisation. NeurIPS, 2016.
- Klein A., Falkner S., et al. Fast Bayesian Optimization on Large Datasets. AISTATS, 2017.
- Jolliffe I.T. Principal Component Analysis. Springer, 2002.
- Swersky K., et al. Freeze-Thaw Bayesian Optimization. arXiv:1406.3896, 2014.
- Hutter F., et al. Automated Machine Learning: Methods, Systems, Challenges. Springer, 2019.
- Vanschoren J., et al. OpenML: Networked Science in ML. SIGKDD, 2013.