Efficient and Robust Automated Machine Learning

Robert Feldhans

12. Juli 2018

Seminar Musterklassifikation

Inhalt

- 1. Motivation
- 2. Automated Machine Learning in a Nutshell
- 3. Meta Learning
- 4. Ensembles
- 5. Fragerunde

Motivation

Interlude: Hyperparameter I

Was sind Hyperparameter?

- Werden vor dem Lernen definiert
- Sind in der Regel Zahlen oder Funktionen

Interlude: Hyperparameter I

Was sind Hyperparameter?

- Werden vor dem Lernen definiert
- Sind in der Regel Zahlen oder Funktionen

Allgemein

Alles was in irgendeiner Art austauschbar ist in einem speziellen ML-Verfahren und während des Trainings konstant bleibt

Interlude: Hyperparameter II

Beispiele für Hyperparameter

- Lernrate
- Gewichte jeglicher Form
- Anzahl der Cluster in k-means clustering
- Aktivierungsfunktionen
- Anzahl der Hidden Layers in einem Netz
- Breite der Layers in einem Netz

Motivation

- Ein gutes neuronales Netz zu trainieren ist schwer, braucht viel Arbeitszeit und Erfahrung
- Jeder sollte in der Lage sein NN zu trainieren (im besten Fall sogar Maschinen!)

Motivation

- Ein gutes neuronales Netz zu trainieren ist schwer, braucht viel Arbeitszeit und Erfahrung
- Jeder sollte in der Lage sein NN zu trainieren (im besten Fall sogar Maschinen!)

Lösung: Ein automatisches (und effizientes) System, welches gute Hyperparameter auswählt, muss her!

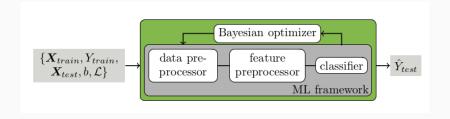
Automated Machine Learning in a Nutshell

Auto-ML I

Grundlegende Idee

- Starten mit irgendwie ausgewählten Hyperparametern
- Classifier trainieren
- Classifier evaluieren
- Hyperparametertuning mithilfe eines Bayesian optimizer
- Wiederholung bis zu einem zufriedenstellenden Ergebnis

Auto-ML II



Initialisierung der Hyperparameter

Bild zu problemen mit der initialisierung von hyperparametern

Rapidly Exploring Random Tree (RTT) I

Idee

- Werte zufällig wählen
- So oft wiederholen, bis man einen guten Überblick über den Searchspace hat

Rapidly Exploring Random Tree (RTT) I

Idee

- Werte zufällig wählen
- So oft wiederholen, bis man einen guten Überblick über den Searchspace hat

Vorteil

Bietet beliebig guten Überblick über den Searchspace

Rapidly Exploring Random Tree (RTT) I

Idee

- Werte zufällig wählen
- So oft wiederholen, bis man einen guten Überblick über den Searchspace hat

Vorteil

Bietet beliebig guten Überblick über den Searchspace

Achtung

RTT bietet einige Fallstricke. Think before use!

Rapidly Exploring Random Tree (RTT) II

C

Probleme

- Ausgesprochen Rechenintensiv
- Unterschiedliche Lernverfahren?
- Es gibt kein "best" Lernverfahren, nur "best at"
- Manche ML-Verfahren erfordern intensive Hyperparameteroptimisierung
- Bayes optimization sollte sich jedoch um dieses Problem kümmern

Meta Learning

Meta Learning

Idee

- Das richte ML-Verfahren für ein bestimmtes Datenset hängt vom Datenset selbst ab
- Ein bestimmter Klassifikator sollte auf ähnlichen Datensets ähnlich gute Ergebnisse liefern

Meta Learning

Idee

- Das richte ML-Verfahren für ein bestimmtes Datenset hängt vom Datenset selbst ab
- Ein bestimmter Klassifikator sollte auf ähnlichen Datensets ähnlich gute Ergebnisse liefern

 \Rightarrow Also bauen wir uns einen Klassifikator, der uns anhand eines neuen Datensets sagt, welche Art von Klassifikator wir trainieren sollten

Im Detail

Ensembles

Bestandsaufnahme

- Mehrere vielversprechende ML-Verfahren ausgewählt
- Jedes davon aufwändig mit Bayesian optimizer im Hinblick auf Hyperparameter getunt
- Das beste der Besten herausgepickt und die anderen weggeworfen

Bestandsaufnahme

- Mehrere vielversprechende ML-Verfahren ausgewählt
- Jedes davon aufwändig mit Bayesian optimizer im Hinblick auf Hyperparameter getunt
- Das beste der Besten herausgepickt und die anderen weggeworfen

Warum eigentlich?

Ensembles

Idee

 Anstatt teuer optimierte Klassifikatoren wegzuwerfen, Kombination der Besten

Ensembles

Idee

 Anstatt teuer optimierte Klassifikatoren wegzuwerfen, Kombination der Besten

Aber wie kombinieren?

- Alle ungewichtet aufsummieren?
- Stacking?
- gradient-free numerical optimization?

Ensemble Selection

Wie baut man ein Ensemble?

- Starte mit einem leeren Ensemble
- Füge den Klassifikator dem Ensemble hinzu, der das Ensemble am besten ergänzt
- Wiederhole bis alle Klassifikatoren enthalten sind oder X mal
- Durchschnitt über alle Predictions bilden für Resultat

Ensemble Selection

Wie baut man ein Ensemble?

- Starte mit einem leeren Ensemble
- Füge den Klassifikator dem Ensemble hinzu, der das Ensemble am besten ergänzt
- Wiederhole bis alle Klassifikatoren enthalten sind oder X mal
- Durchschnitt über alle Predictions bilden für Resultat
- Alle Einträge sind ungewichtet
- Duplikationen sind erlaubt

Vielen Dank für eure Aufmerksamkeit!

Fragerunde

Quellen



M. Feurer, A. Klein, K. Eggensperger, J. Springenberg, M. Blum, and F. Hutter, "Efficient and robust automated machine learning," in *Advances in Neural Information Processing Systems 28* (C. Cortes, N. D. Lawrence, D. D. Lee, M. Sugiyama, and R. Garnett, eds.), pp. 2962–2970, Curran Associates, Inc., 2015.