

Advanced Hyperparameter Optimization

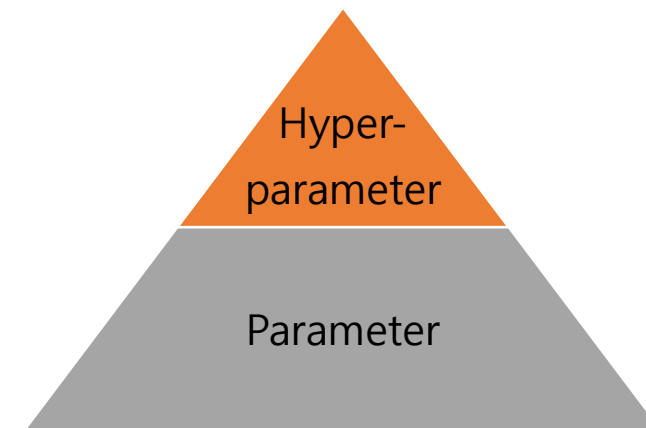
2020-10-16

손형욱

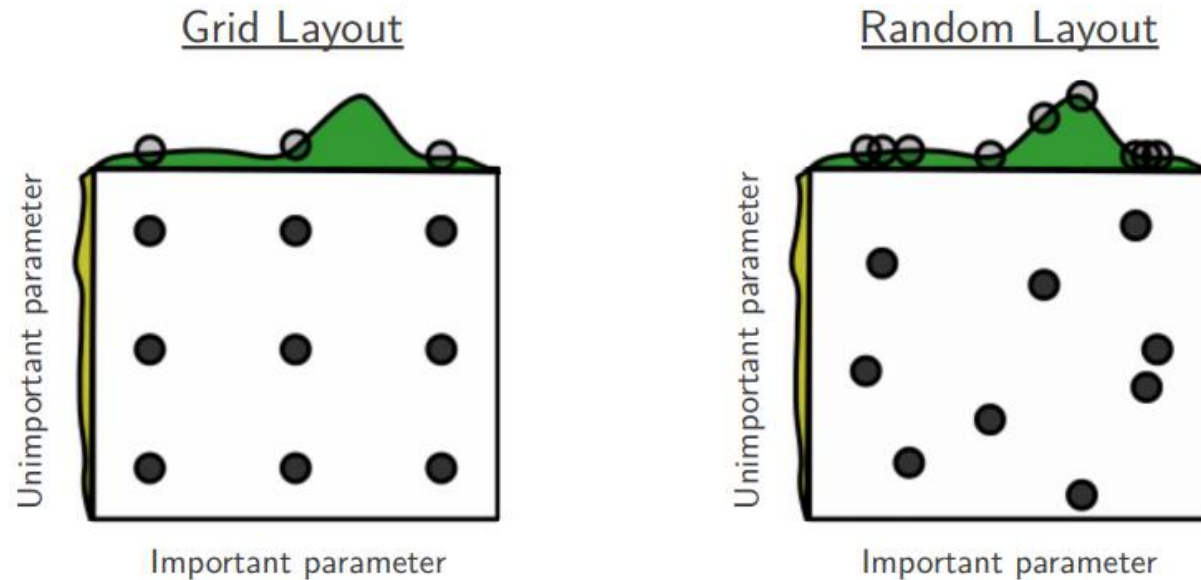
Parameters and Hyperparameters

하이퍼파라미터 최적화 문제

- 파라미터와 하이퍼파라미터:
 - θ = (weight, BN scale factor, ...)
 - η = (레이어 수, learning rate, weight decay, ...)
- Optimization 과 Meta-optimization
 - $\mathcal{L}^* = \min_{\eta} \min_{\theta} \mathcal{L}(x, y; \theta, \eta)$
- 왜 하이퍼파라미터 최적화가 어려운가?
 - $\mathcal{L}(\eta) = \min_{\theta} \mathbb{E}_{\mathcal{D}}[\mathcal{L}(x, y; \theta, \eta)]$ 의 계산이 매우 expensive 함.
 - No access to gradient $\nabla_{\eta} \mathcal{L}(\eta)$.



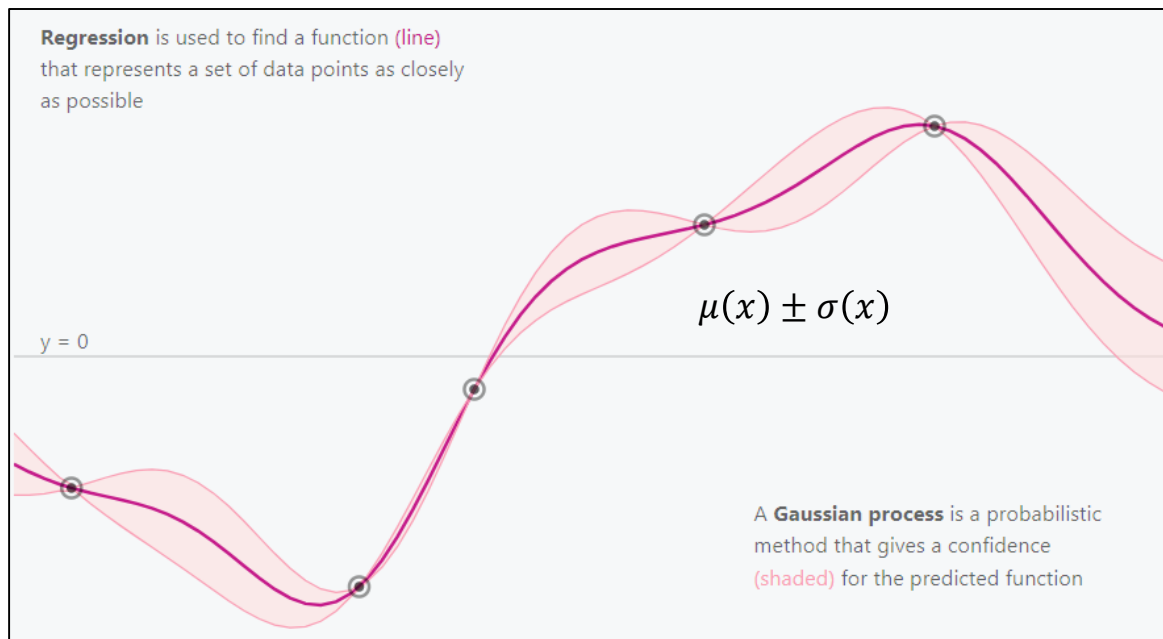
Typical methods (grid, random)



어떻게 하이퍼파라미터 공간을 더 효율적으로 탐색할 수 있을까?
→ 관심없는 영역은 적게 탐색하고, 관심있는 영역은 많이 탐색하자!
→ = Bayesian Optimization (BO)

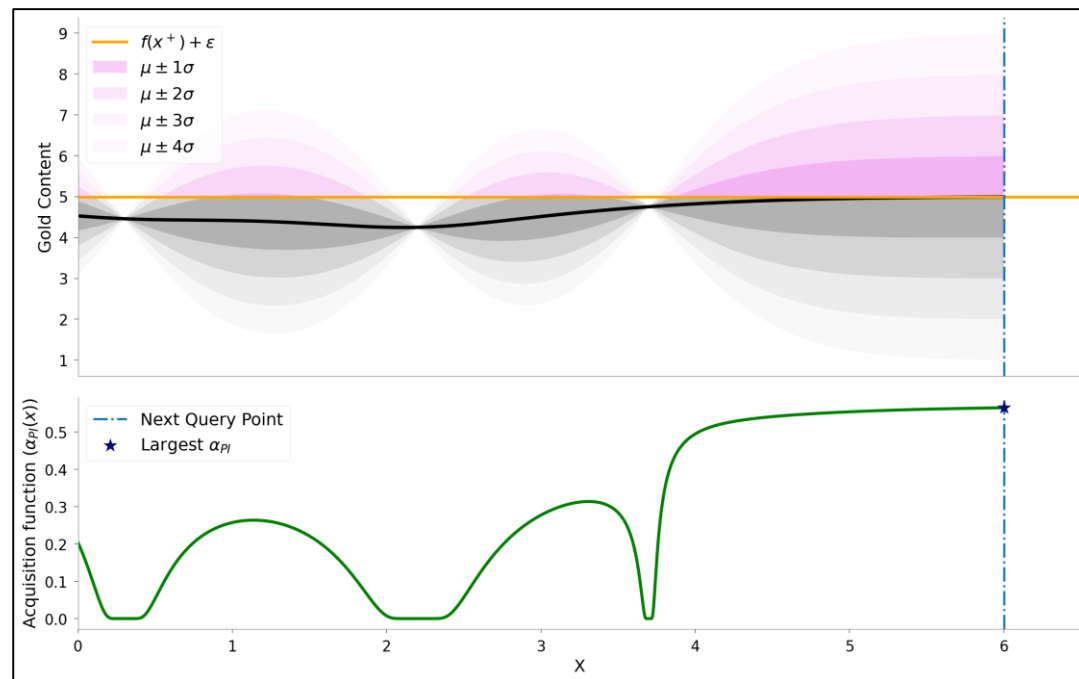
베이지안 최적화의 핵심 요소들

Gaussian Process (GP) regression



GP 는 관측된 값으로 함수의 분포를 모델링한다.

Acquisition function



Acquisition function 을 이용해 query point 를 결정한다.

Gaussian process regression

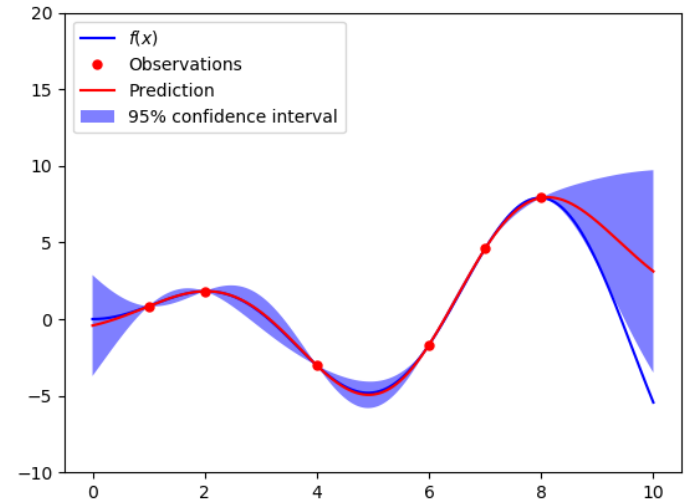
Stochastic processes

- 시계열 데이터를 모델링하는 방법.
 - 관측치 $\mathcal{D} = \{x(t)\}_1^T$ 가 있을 때 결측치를 예측하는 방법? (interpolation 문제)
- Deterministic methods
 - linear/quadratic regression, ...
 - MSE 가 최소인 함수를 선택. (예측값이 deterministic 함)
- Stochastic processes
 - 시퀀스를 확률변수의 집합으로 본다. $\mathbf{X}[t] = (X_1, X_2, \dots, X_n)$
 - 확률변수들의 결합분포 $p(X_1, X_2, \dots, X_n)$ 를 모델링하자. (= 함수 $\mathbf{X}[t]$ 의 분포를 학습)

GP \in Stochastic Processes

- Gaussian Process
 - $p(X_1, X_2, \dots, X_n)$ 를 n 차원 가우시안 분포 $\mathcal{N}(\mu, \Sigma)$ 로 정의함.
 - 목표는 (μ, Σ) 를 학습하는 것.
 - 시간축 t 가 연속이면 $n \rightarrow \infty$ 인 케이스에 해당.
- 학습은 어떻게 하나?
 - 관측치 (t, x_t) 가 주어졌을 때,
 - 조건부 확률분포 $p(X_1, X_2, \dots, X_n | X_t = x_t)$ 를 계산하는 것과 같음.
 - 베이즈 정리를 이용해 조건부 확률분포 계산.

연속시간 GP



$$\mathbf{X}(t) \sim \mathcal{N}(\mu(t), \Sigma(t, t'))$$

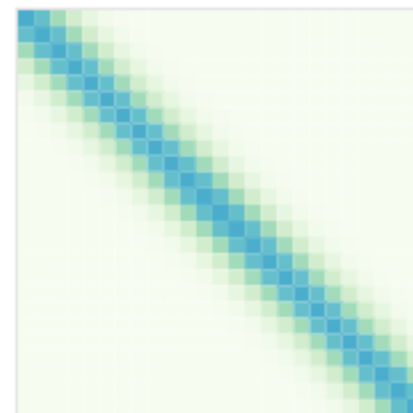
Gaussian Process

- GP에서 결합분포의 공분산 행렬 Σ 을 kernel 이라고 부름.
- Kernel 은 함수 $\kappa: (t, t') \rightarrow \mathbb{R}$ 로 정의됨. (예시 \rightarrow)
- 즉, $\kappa(t, t') = \Sigma_{t, t'} = \text{Cov}(X_t, X_{t'})$ 을 표현함.
- 왜 가우시안 분포를 쓰나?
 - 계산이 간단해지기 때문
 - Conditional distribution 과 marginal distribution 도 가우시안 분포.
 - 결과도 closed-form 으로 나옴.

대표적인 커널의 예시

RBF KERNEL

$$\sigma^2 \exp \left(-\frac{\|t - t'\|^2}{2l^2} \right)$$



Variance σ = 0.8



Length l = 0.8

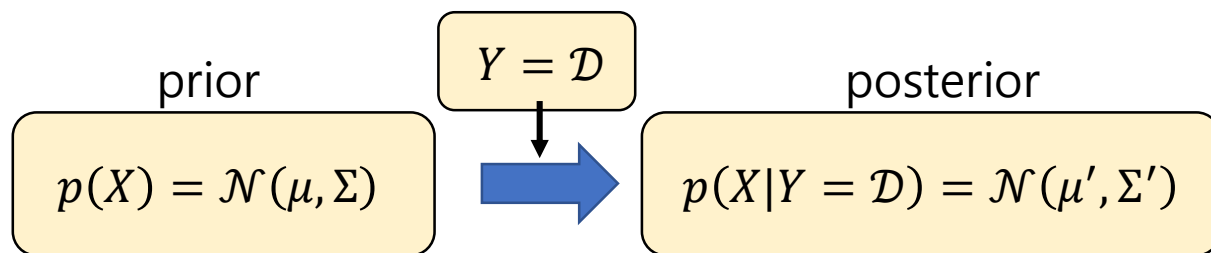


Update rule for GP

- 조건부 확률 계산=Bayesian inference (AKA, Bayesian update rule)

$$p(X|Y) = \frac{p(Y|X)p(X)}{p(Y)}$$

- 관측치 \mathbf{Y} 를 사용해 사전 확률분포 $p(\mathbf{X})$ 로부터 사후 확률분포 $p(\mathbf{X}|\mathbf{Y})$ 를 구한다.



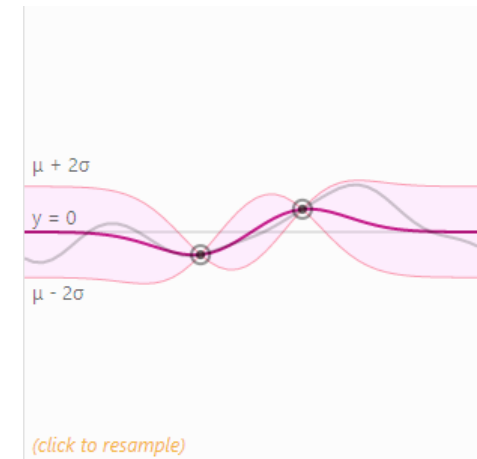
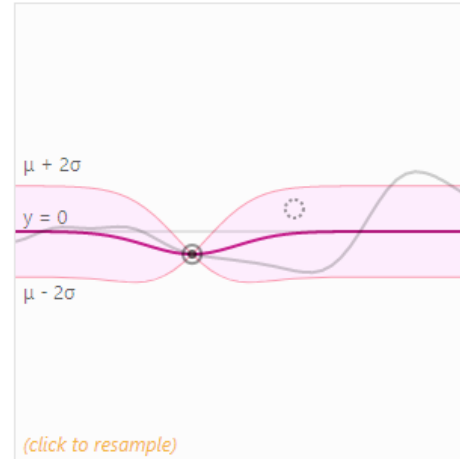
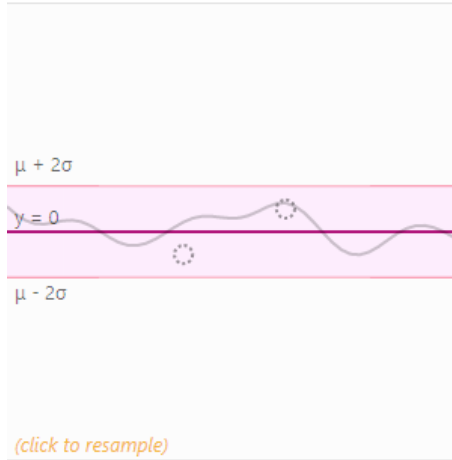
- 가우시안의 조건부 확률분포는 닫힌 해가 계산됨.

$$\mu' = \mu_X + \Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}(Y - \mu_Y)$$

$$\Sigma' = \Sigma_{XX} - \Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}$$

GP after each observations

value
distribution
(marginal
distribution)

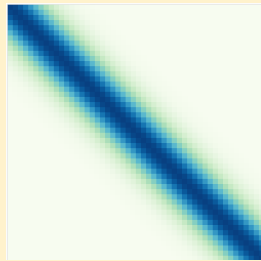


prior

$p(\mathbf{X})$:

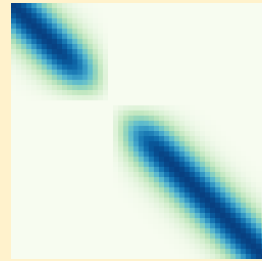
$$p(\mathbf{X}) = \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$$

$\Sigma =$



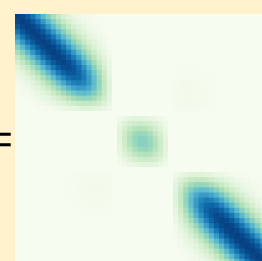
$$p(\mathbf{X}|\mathcal{D}_1) = \mathcal{N}(\mu', \Sigma')$$

$\Sigma' =$



$$p(\mathbf{X}|\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2) = \mathcal{N}(\mu'', \Sigma'')$$

$\Sigma'' =$

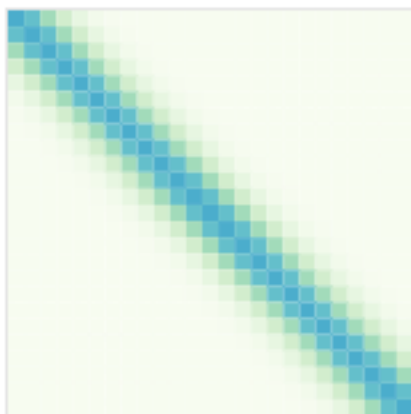


여러 종류의 prior kernel

- Prior 의 kernel 은 예측모형의 성질을 결정함. (locality, periodicity, linearity, ...)
- 여러 종류를 선형 결합해 사용할 수 있음.

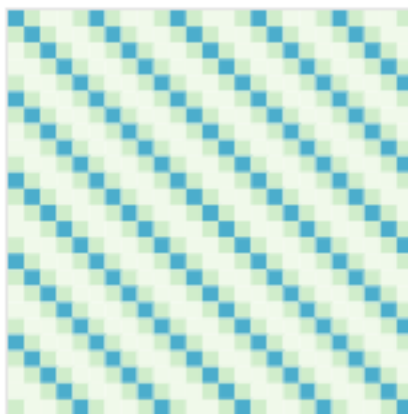
RBF KERNEL

$$\sigma^2 \exp \left(-\frac{\|t-t'\|^2}{2l^2} \right)$$



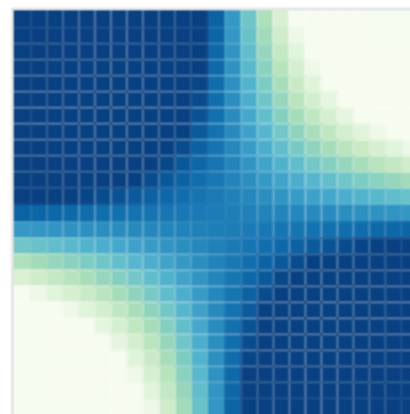
PERIODIC

$$\sigma^2 \exp \left(-\frac{2 \sin^2(\pi |t-t'|/p)}{l^2} \right)$$



LINEAR

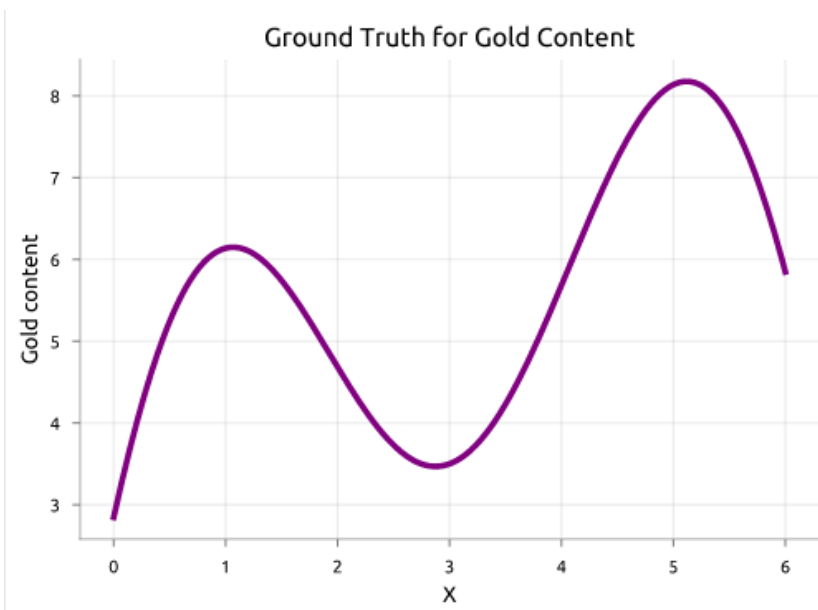
$$\sigma_b^2 + \sigma^2 (t - c)(t' - c)$$



Bayesian Optimization

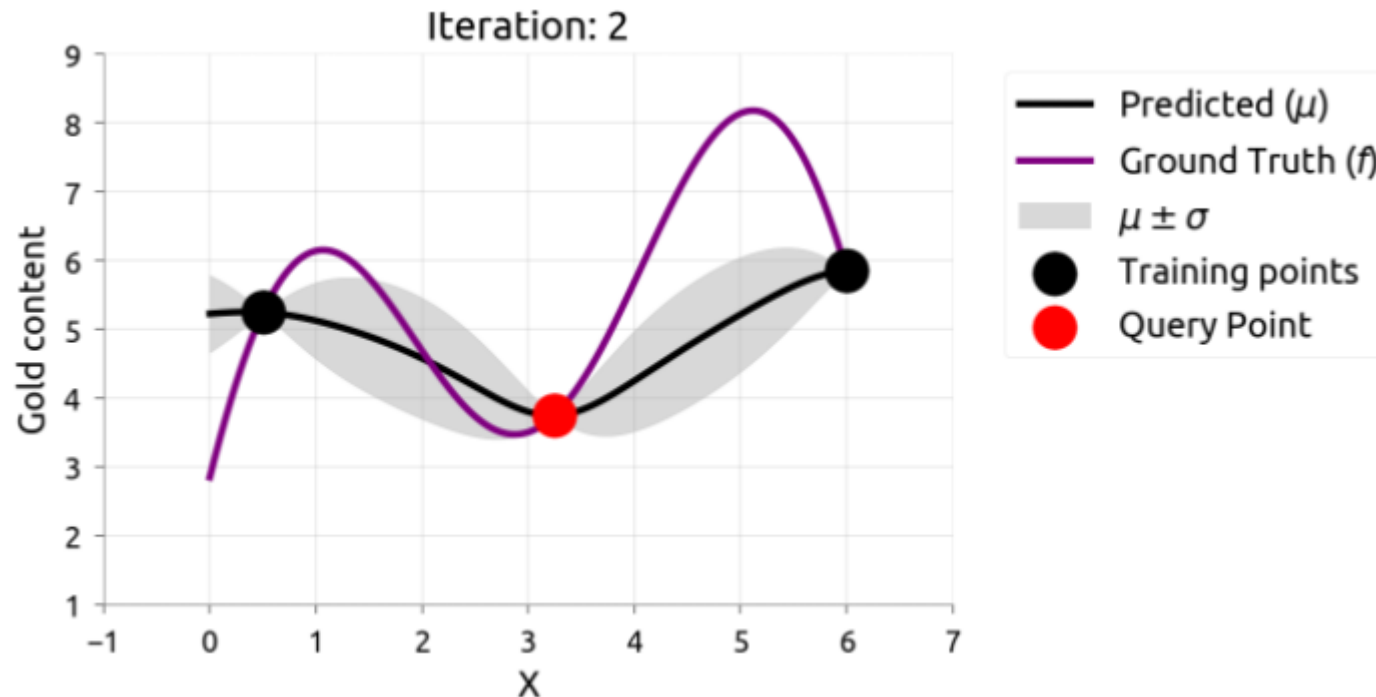
베이지안 최적화

- 몇 번의 실험결과 $\mathcal{D} = \{f(x_i)\}_1^t$ 가 주어졌을 때, query point x_{t+1} 을 고르는 방법?
1. 랜덤하게 t 개의 지점 $\{x_1, x_2, \dots, x_t\}$ 을 선택해 $\mathcal{D} = \{f(x_i)\}_1^t$ 를 계산한다.
 2. $f(x)$ 를 예측하는 surrogate model 을 학습한다. (GP 사용)
 3. 성능이 높을 것으로 예측되는 지점 x_{t+1} 을 query point 로 선택한다.
 4. 관측된 최대값 $\max\{f(x_i)\}$ 가 수렴할 때까지 반복.



Surrogate model

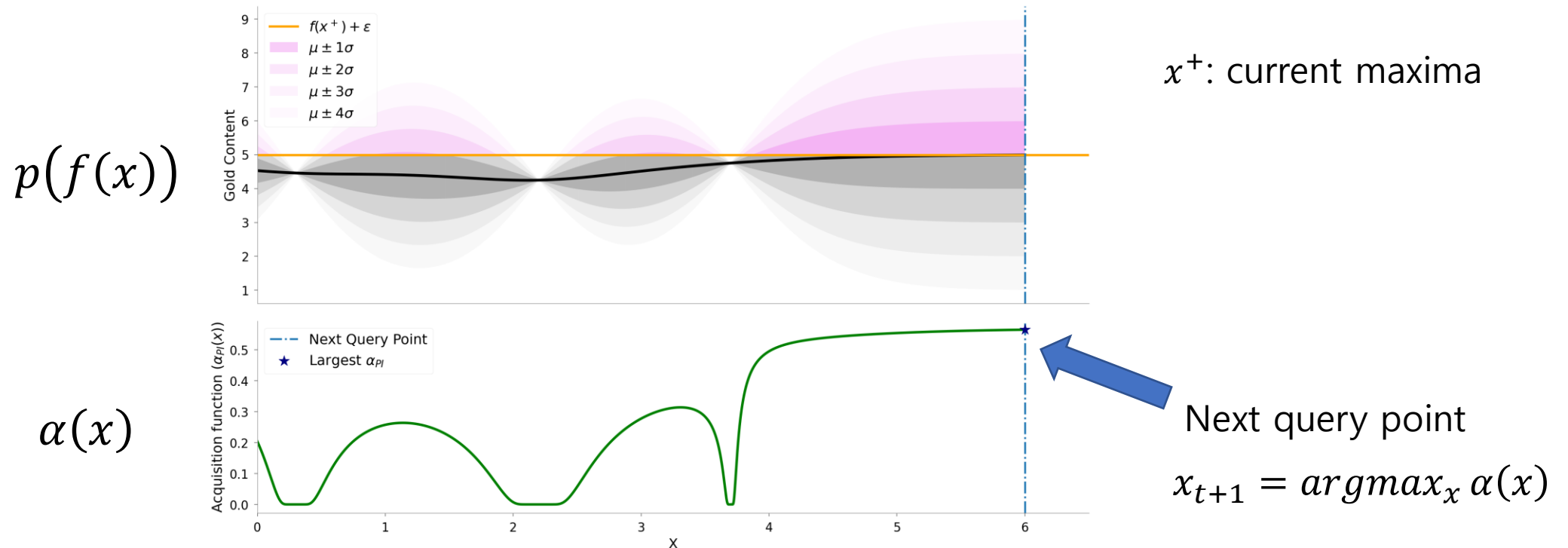
- GP 를 이용해 관측치 $\{f(x_1), f(x_2), \dots\}$ 로부터 $f(x)$ 을 예측하는 모델을 두자.
- 각 지점 x 에서 기대값 $\mu(x)$ 과 uncertainty $\sigma(x)$ 를 예측함.

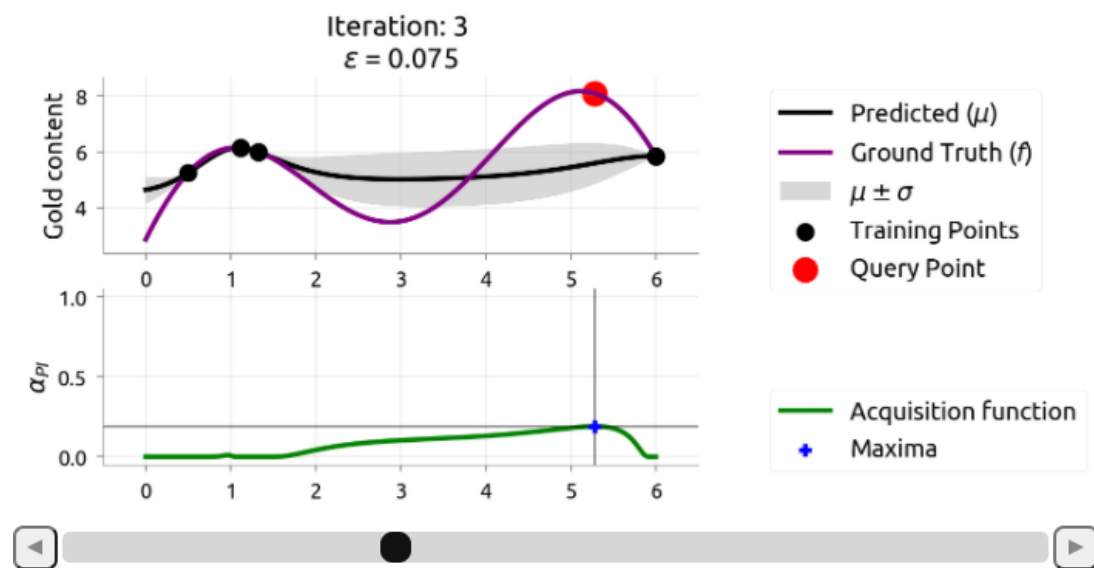
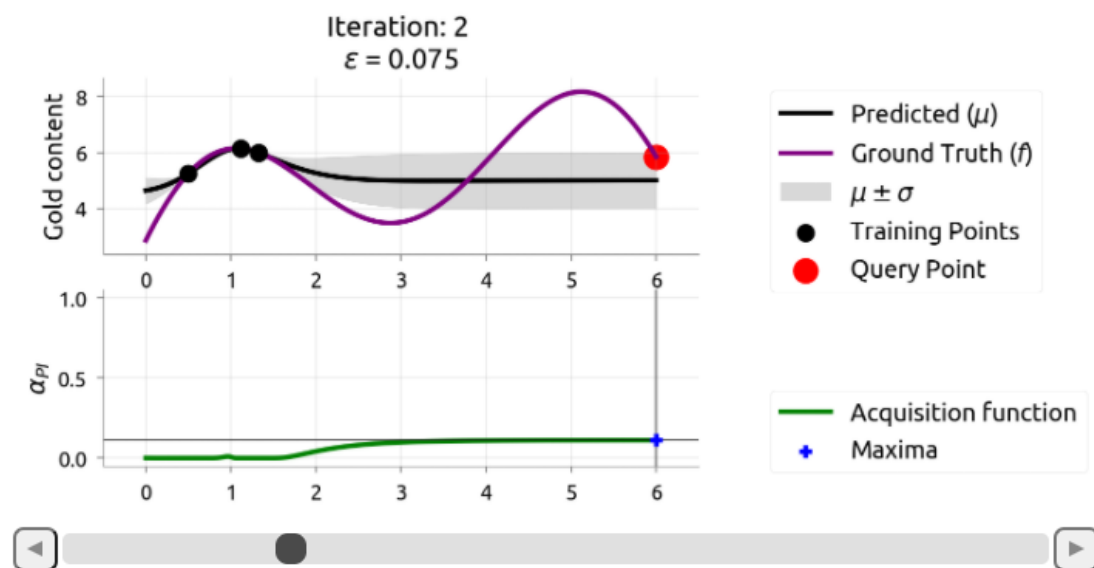
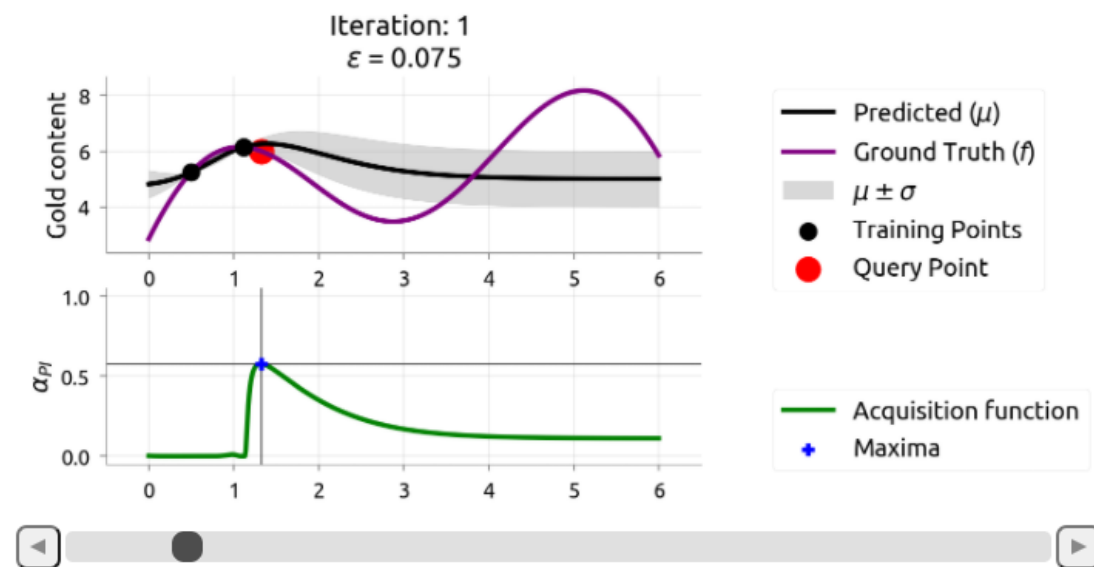
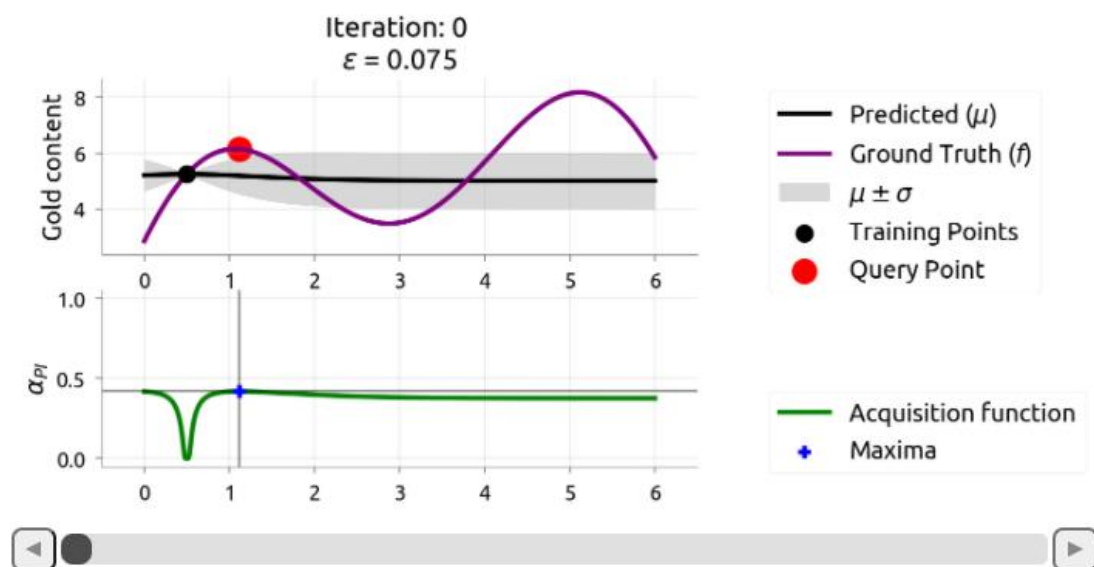


3개 지점을 관측했을 때 GP

Acquisition function

- 현재까지의 샘플을 이용해 다음 query point (x_{t+1}) 을 선택하는 방법?
- GP 모델의 아웃풋이 확률분포임을 이용하자.
- 예를 들어, $\Pr[f(x) > f(x^+)]$ 가 최대가 되는 지점을 query point 로 선택!





다양한 acquisition function 들

Type	Definition
Probability of Improvement (PI)	$\alpha_{\text{PI}}(x) = \Pr[f(x) > f(x^+) + \epsilon]$
Expected Improvement (EI)	$\alpha_{\text{EI}}(x) = \mathbb{E}[\max\{0, f(x) - f(x^+) + \epsilon\}]$
Upper Confidence Bound (UCB)	$\alpha_{\text{UCB}}(x) = \mu(x) + \lambda \times \sigma(x)$
EI 와 PI 의 선형 결합	$\alpha_{\text{EI-PI}}(x) = \alpha_{\text{EI}}(x) + \lambda \alpha_{\text{PI}}(x)$

$$x_{t+1} = \operatorname{argmax}_x \alpha(x)$$

x^+ : current maxima

ϵ : exploration-exploitation rate

A step back: what does BO really do?

- $\max_x f(x)$ 문제를 $\max_x \alpha(x)$ 문제로 대체한 것임.
- 즉 여전히 최적화 문제를 풀어야 함. $\alpha(x)$ 가 convex 하다는 보장도 없음.
- 그럼 왜 원래 문제 대신 $\alpha(x)$ 최적화 문제를 풀까?
- $\rightarrow \alpha(x)$ 와 $\nabla \alpha(x)$ 의 계산이 훨씬 쉽기 때문.

Hands-on

- A number of optimization tools implement BO.
- Scikit-optimize
 - `skopt.gp_minimize()`
 - You define the objective function and search space.

https://colab.research.google.com/drive/1sRgVZtvRt_kS84nHi5JhNAQQOP5me6wS?usp=sharing

Tips

- If your search space has huge dynamic range, perform search in the log-space: $\eta' = \log \eta$ (ex. Learning rate, regularization term)
- BO is designed to minimize the number of evaluations. Also, GP inference is $\mathcal{O}(N^2)$ to number of input points.

BO 가 유용한 경우

- 성능이 하이퍼파라미터에 sensitive 할 때.
- 바뀐 조건 (데이터셋, 네트워크) 에 맞추어 하이퍼파라미터를 fine-tuning 해야 할 때.
- 새로 정의한 하이퍼파라미터의 적합한 range 를 모를 때.

<https://distil.pub>

The people behind Distill

EDITORS



Shan Carter
OpenAI



Chris Olah
OpenAI



Arvind Satyanarayan
MIT CSAIL

STAFF



Ludwig Schubert
OpenAI



Nick Cammarata
OpenAI



Janelle Tam
YCombinator

STEERING COMMITTEE



Yoshua Bengio
Université de Montréal



Mike Bostock
Data-Driven Documents



Amanda Cox
The New York Times



Ian Goodfellow
Apple



Andrej Karpathy
Tesla



Shakir Mohamed
DeepMind



Michael Nielsen
YC Research



Fernanda Viégas
Google Big Picture