УНИВЕРСИТЕТ ЛОБАЧЕВСКОГО
ИНСТИТУТ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МАТЕМАТИКИ И МЕХАНИКИ

Настройка гиперпараметров – возможности фреймворка интеллектуальной оптимизации

https://github.com/aimclub/iOpt/

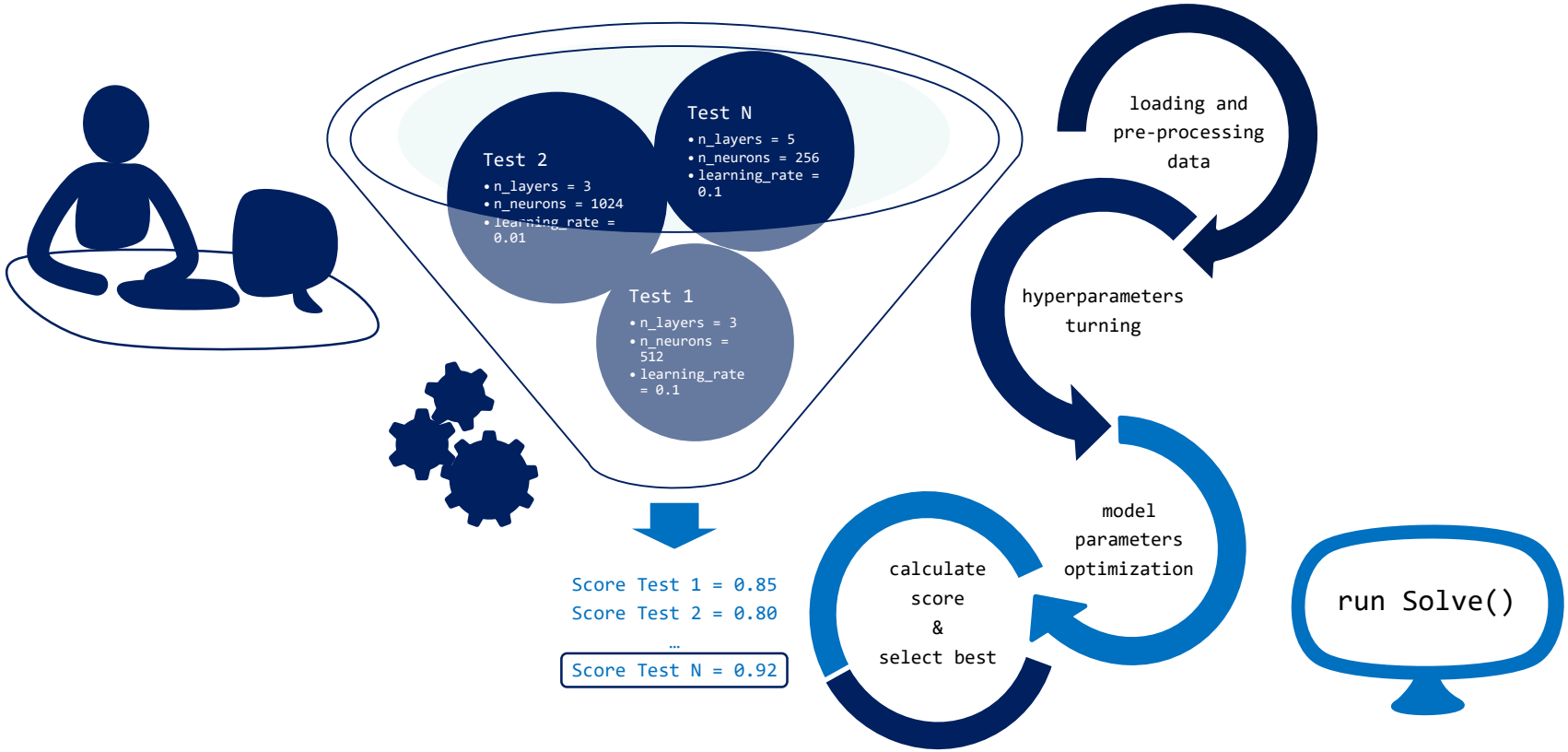
Константин Баркалов, Александр Сысоев, Евгений Козинов, Илья Лебедев
ННГУ им. Н.И. Лобачевского
Университет ИТМО

Содержание

- Настройка гиперпараметров (мета-оптимизация)
- Задачи глобальной оптимизации
- Методы глобальной оптимизации
- Фреймворк iOpt – структура и возможности
- Сравнение iOpt с другими фреймворками

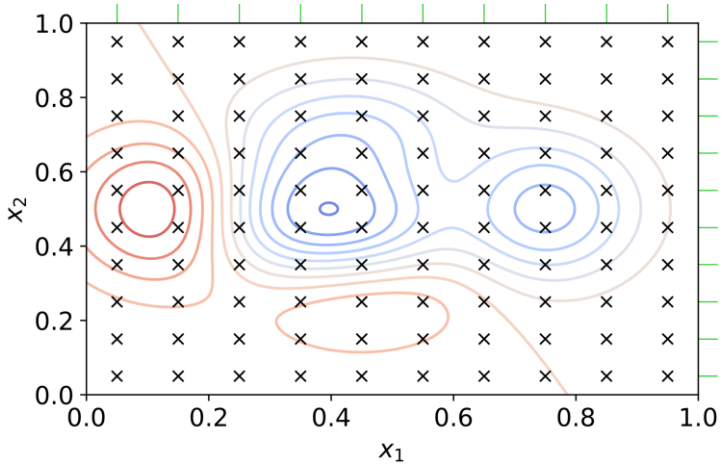
НАСТРОЙКА ГИПЕРПАРАМЕТРОВ (ГЛОБАЛЬНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ)

Настройка гиперпараметров



Методы машинного обучения

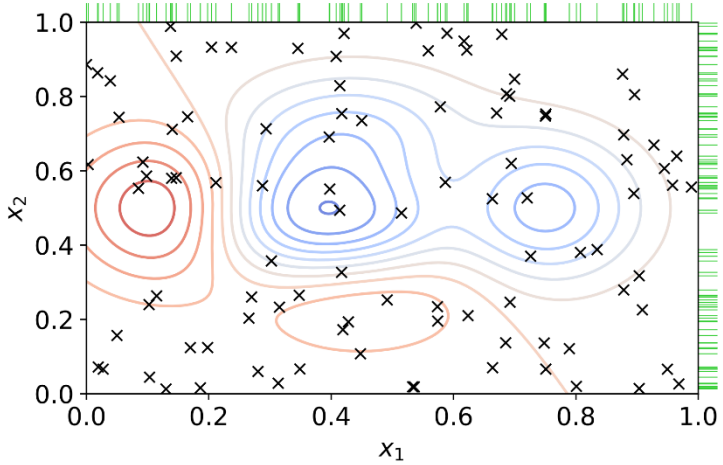
- Минимизация функции потерь (на некотором датасете) в зависимости от набора гиперпараметров метода
- Используемые алгоритмы:
  - **Поиск по равномерной сетке**
  - Случайный поиск
  - Байесовская оптимизация
  - Генетические (эволюционные) алгоритмы
- Доступные реализации (фреймворки)
  - Hyperopt
  - Optuna
  - Sherpa
  - Scikit-Optimize
  - и т.д.



https://ru.wikipedia.org/wiki/Оптимизация_гиперпараметров

Методы машинного обучения

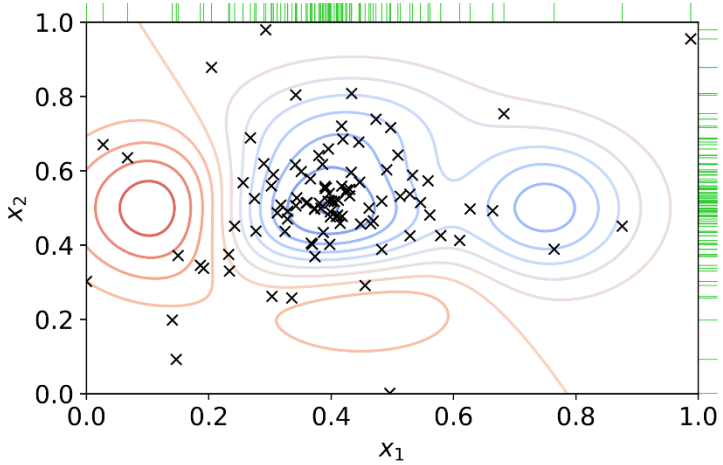
- Минимизация функции потерь (на некотором датасете) в зависимости от набора гиперпараметров метода
- Используемые алгоритмы:
  - Поиск по равномерной сетке
  - **Случайный поиск**
  - Байесовская оптимизация
  - Генетические (эволюционные) алгоритмы
- Доступные реализации (фреймворки)
  - Hyperopt
  - Optuna
  - Sherpa
  - Scikit-Optimize
  - и т.д.



https://ru.wikipedia.org/wiki/Оптимизация_гиперпараметров

Методы машинного обучения

- Минимизация функции потерь (на некотором датасете) в зависимости от набора гиперпараметров метода
- Используемые алгоритмы:
  - Поиск по равномерной сетке
  - Случайный поиск
  - **Байесовская оптимизация**
  - Генетические (эволюционные) алгоритмы
- Доступные реализации (фреймворки)
  - Hyperopt
  - Optuna
  - Sherpa
  - Scikit-Optimize
  - и т.д.



https://ru.wikipedia.org/wiki/Оптимизация_гиперпараметров

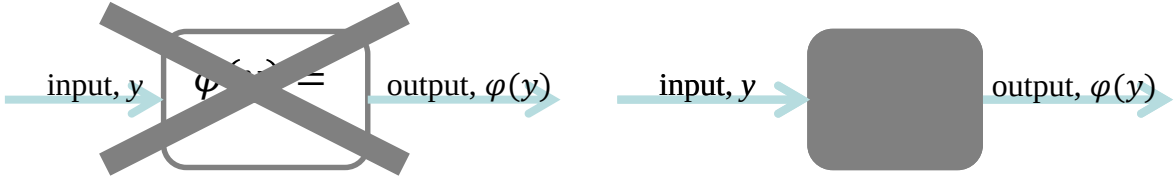
Эвристические алгоритмы глобальной и комбинаторной оптимизации

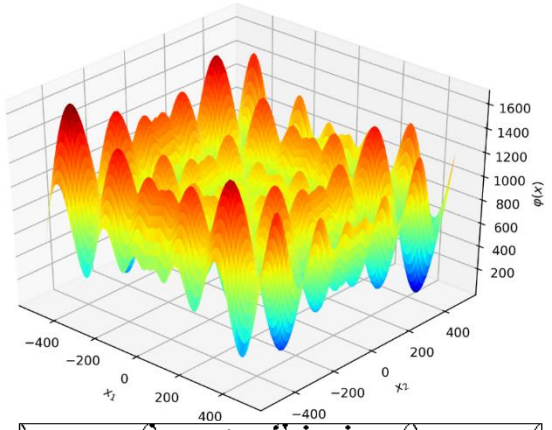
- Различные критерии мета-оптимизации
  - минимизация числа поисковых испытаний при заданной точности решения задачи
  - максимизация числа решенных задач некоторого класса
- Используемые алгоритмы
  - Поиск по равномерной сетке
  - Случайный поиск
  - Классические методы оптимизации 0-го порядка
  - Байесовская оптимизация
- Доступные реализации (фреймворки)
  - Nevergrad
  - ZOOpt
  - SciPy Optimize
  - и т.д.

Задачи глобальной оптимизации

- Найти точку глобального минимума y^*функции $\varphi(y)$

$$\varphi(y^*) = \min\{\varphi(y): y \in D\}, D = y \in R^N, a_i \le y_i \le b_i\}$$





- Оптимизация при наличии ограничений

$$\varphi(y^*) = \min\{\varphi(y): y \in D, g_j(y) \le 0, 1 \le j \le m\}$$

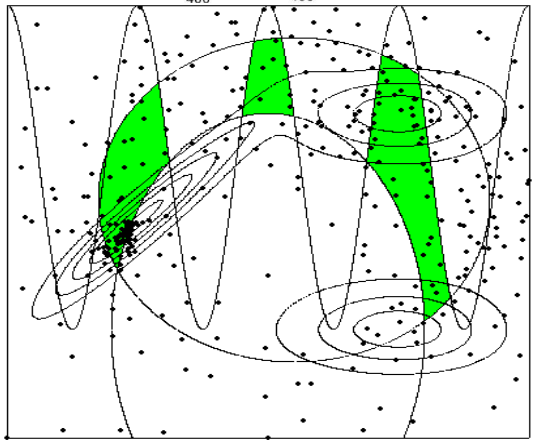
учет функциональных ограничений

- Многокритериальная оптимизация

$$w(y) = (w_1(y), w_2(y), \dots, w_s(y)) \to \min$$

Скаляризация, множество Парето

$$F(x,\lambda) = \max_{1 \le i \le k} (\lambda_i w_i(x)) + \gamma \sum_{i=1}^{k} \lambda_i w_i(x)$$



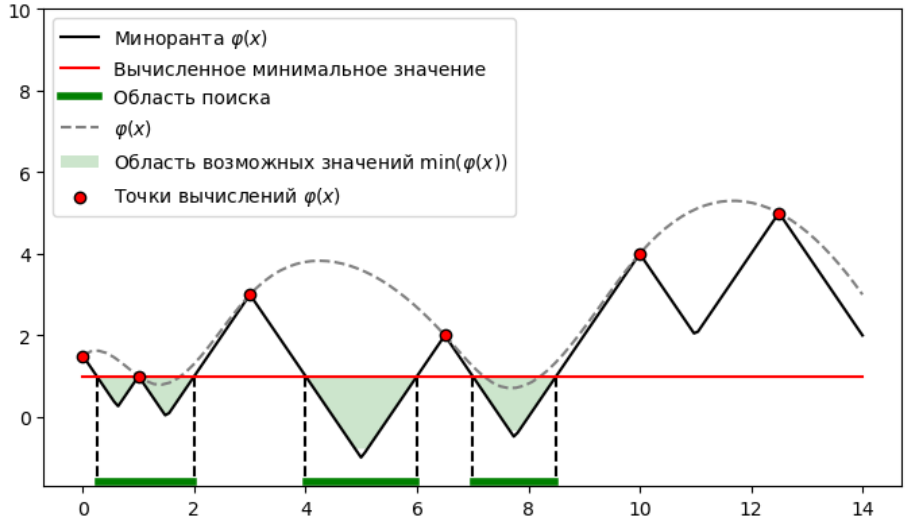
МЕТОДЫ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Методы глобальной оптимизации

- Детерминированные алгоритмы:
  - одинаковый результат при повторном запуске
  - гарантированный результат в задачах малой ($N < 10$) размерности
  - практически не применимы к задачам размерности $N \gg 10$
  - …
- Метаэвристические алгоритмы:
  - Неявно основаны на идеях случайного поиска
  - Требуют нескольких запусков для нахождения наилучшего решения
  - Хороший результат в задачах большой ($N \gg 10$) размерности
  - Содержат параметры, которые сильно влияют на получаемое решение

Липшицева оптимизация

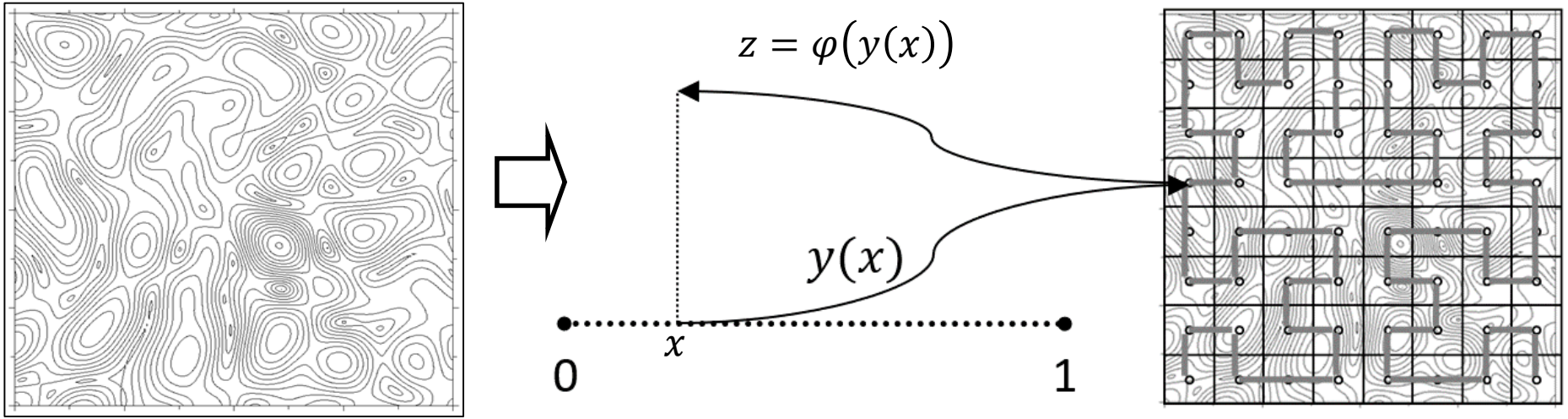
- Предположение: ограниченное изменение аргумента Δy порождает ограниченное изменение значений функции $\Delta\varphi$
- Математическая модель: условие Липшица
  $|\varphi(y') - \varphi(y'')| \leq L\|y' - y''\|, \qquad y', y'' \in D$
- Липшицева оптимизация:
  - С.А. Пиявский, Ю.Г. Евтушенко, М.А. Посыпкин, Я.Д.Сергеев, J. Pinter, P. Hansen, D. Jones, J. Žilinskas, …
  - Р.Г. Стронгин – Нижегородская школа глобальной оптимизации



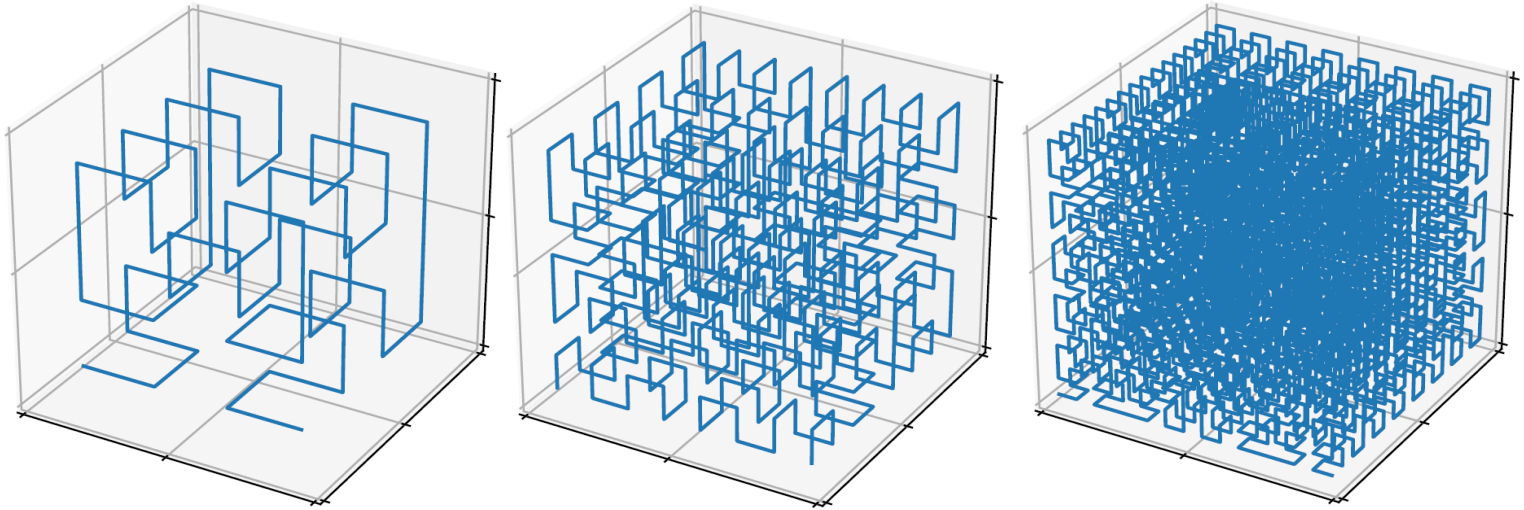
Редукция размерности на основе кривых Пеано

- Наши методы основаны на использовании кривых Пеано $y(x)$, которые однозначно и непрерывно отображают интервал [0,1] на N-мерную область D

$$\min_{y \in D} \varphi(y) = \min_{x \in [0,1]} \varphi\left(y(x)\right)$$



Редукция размерности на основе кривых Пеано



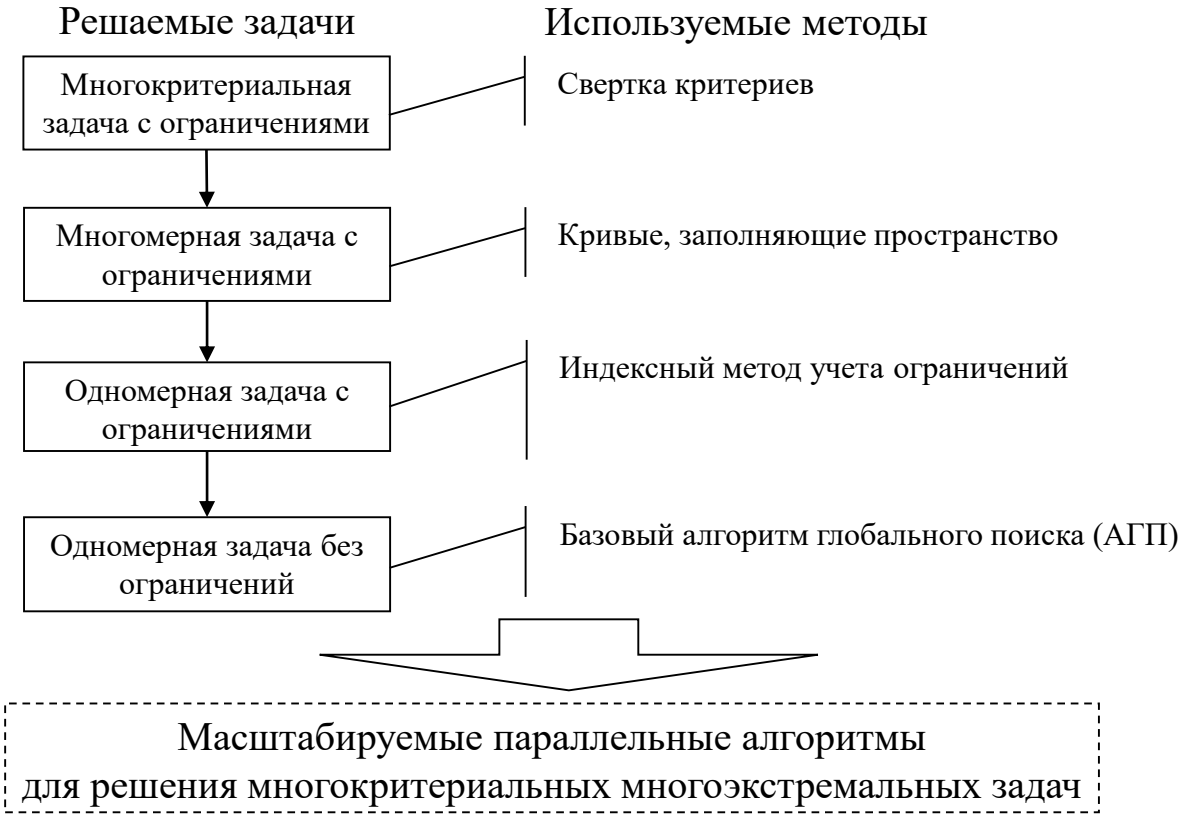
Реализованы быстрые алгоритмы для построения аппроксимаций кривых Пеано (*развертоk*) с заданной точностью для заданной размерности.

Условию Липшица для $\varphi(y)$ будет соответствовать условие Гельдера для $\varphi\big(y(x)\big)$

$$\left|\varphi\big(y(x_1)\big) - \varphi\big(y(x_2)\big)\right| \leq 2L\sqrt{N+3}\,|x_1 - x_2|^{1/N}$$

где $x_1, x_2 \in [0,1]$

Концепция редукции к базовой задаче



ФРЕЙМВОРК iOPT

Фреймворк iOpt

Классы решаемых задач

- Задачи липшицевой глобальной оптимизации (2022)
- Задачи смешанной дискретной оптимизации (2023)
- Задачи многокритериальной оптимизации (2024)

Назначение

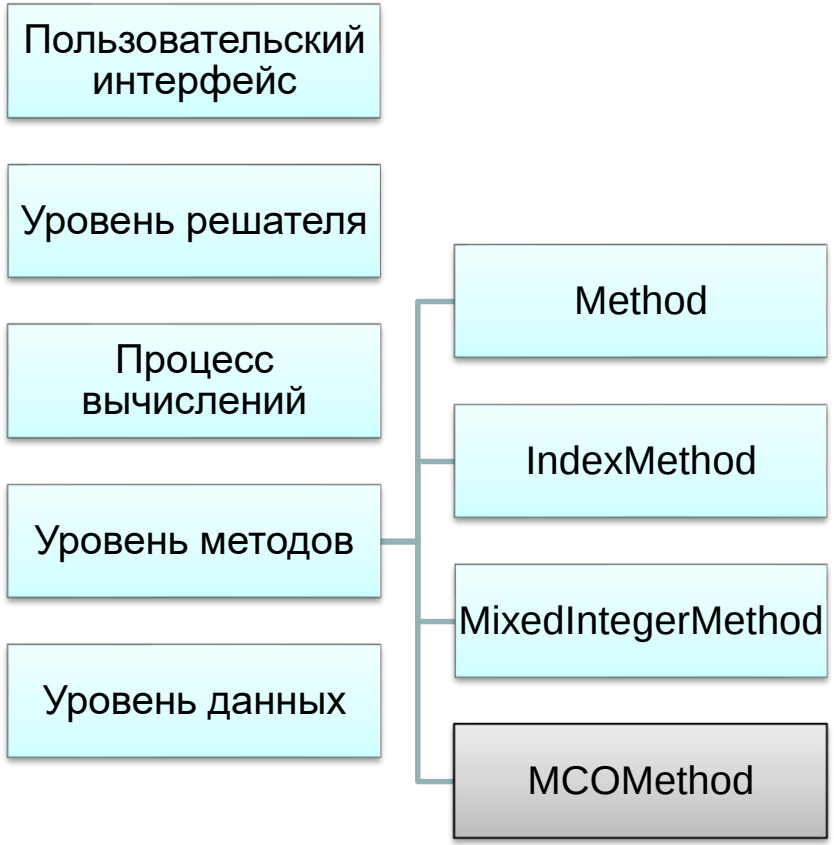
- Выбор значений параметров математических моделей сложных объектов и процессов (методов ИИ и МО, методов дискретной оптимизации, и т.п.)
- Интеграция с внешними библиотеками или фреймворками ИИ и МО, а также предметными моделями
- Автоматизация предварительного анализа исследуемых моделей, например, выделение разных классов зависимостей модели от разных групп параметров
- Визуализация процесса выбора оптимальных параметров

Фреймворк iOpt

- Используется послойная архитектура
  - Уровень данных содержит:
    - Систему классов описания элементов поисковой информации
    - Систему классов для хранения поисковой информации
  - Обеспечивает сохранение и загрузку данных из файла, что позволяет возобновлять процесс вычислений

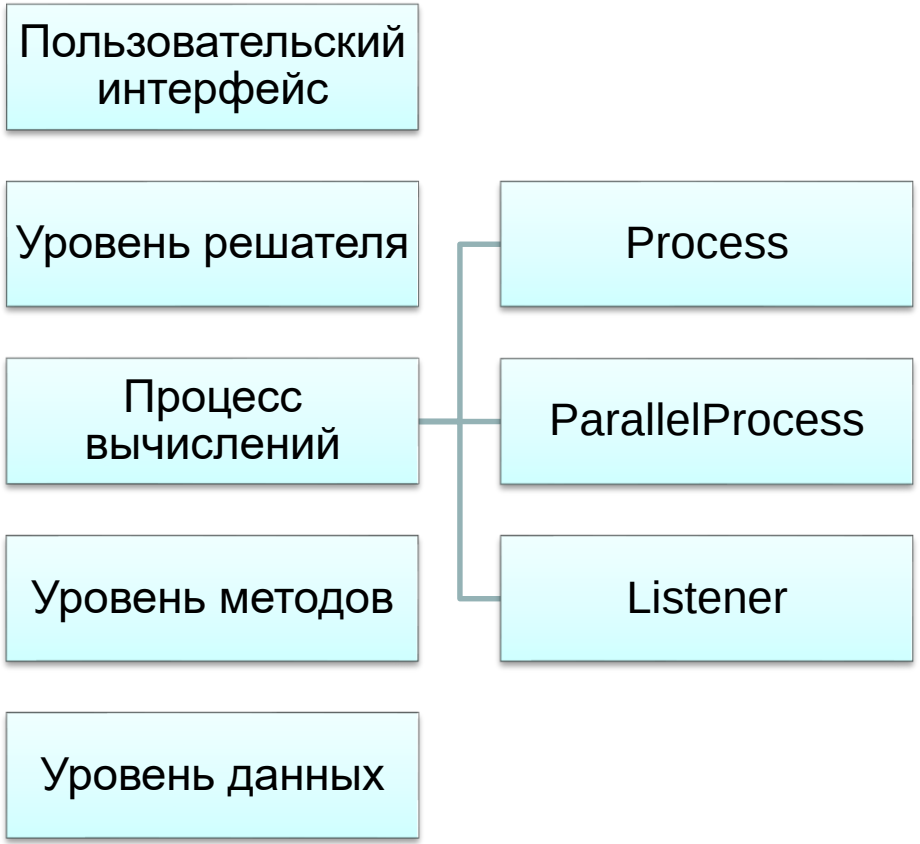
Фреймворк iOpt

- Используется послойная архитектура
  - Уровень методов содержит:
    - Классы описания различных методов выбора точек испытаний
      - Method – однокритериальные задачи без ограничений
      - IndexMethod – однокритериальные задачи с нелинейными ограничениями
      - MixedIntegerMethod – однокритериальные задачи с нелинейными ограничениями и дискретными параметрами
      - MCOMethod – многокритериальные задачи (планируется в будущем)



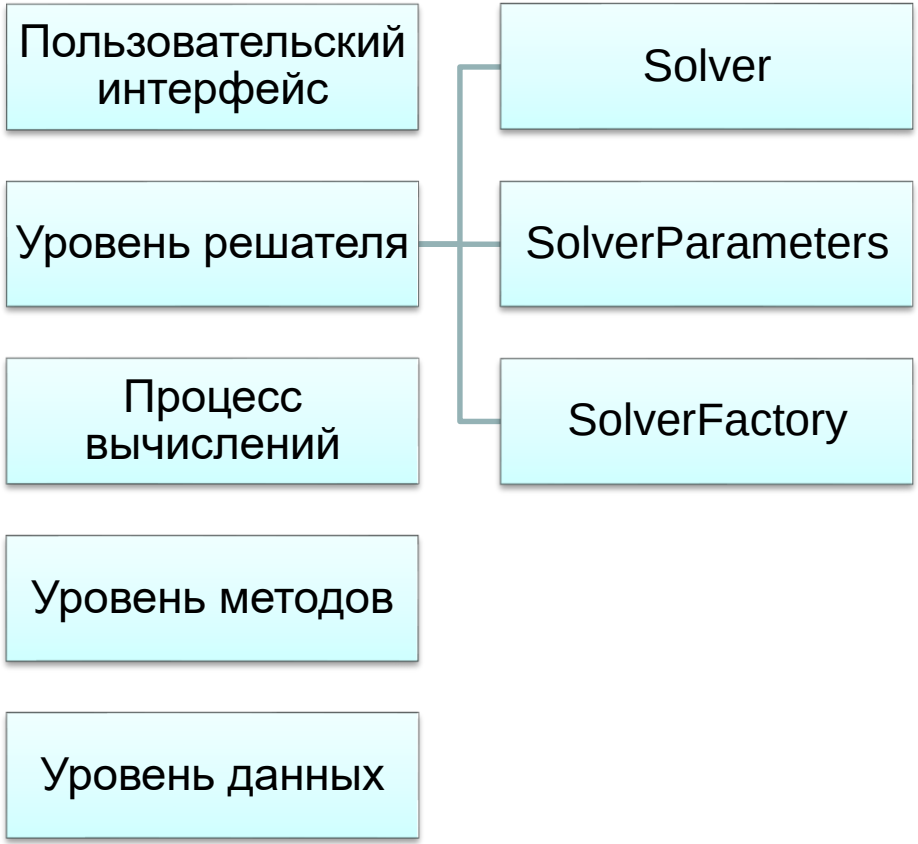
Фреймворк iOpt

- Используется послойная архитектура
  - Уровень процесса вычислений содержит:
    - Классы описания процесса вычислений основанного на выбранном методе
      - Определение точек испытания на основе глобального или локального метода поиска
      - Выполнение испытаний
      - Обновление поисковой информации
      - Проверка условий остановки вычислений
      - Генерация событий в процессе вычислений
        - Начало работы метода
        - Выполнение итерации метода
        - Окончание вычислений



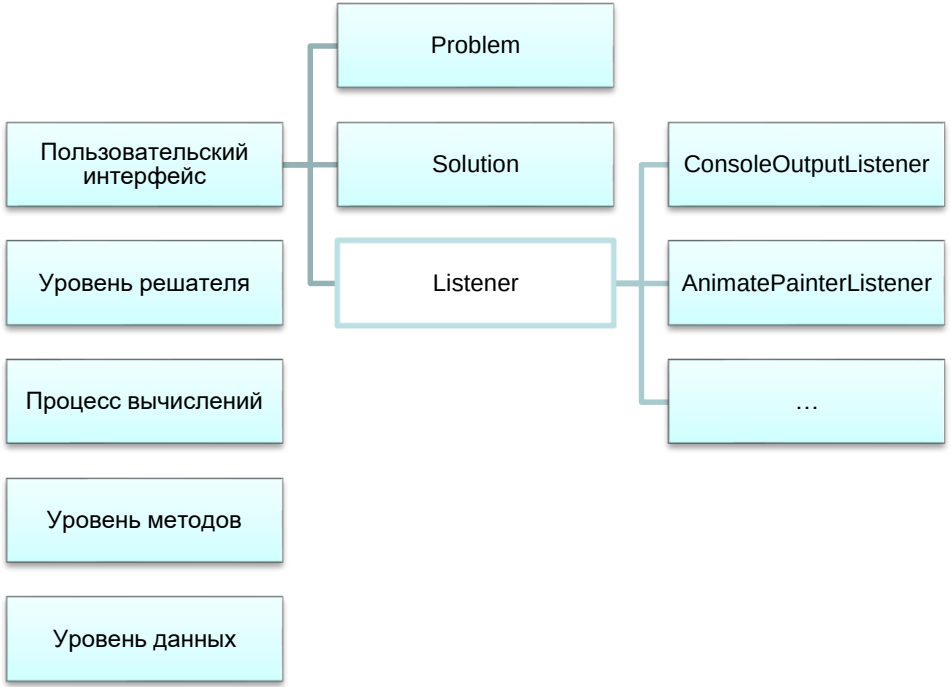
Фреймворк iOpt

- Используется послойная архитектура
  - Уровень решателя содержит:
    - Класс описания параметров метода
    - Класс решателя
      - Проверка исходных данных
      - Порождение объектов процесса вычислений и метода на основе параметров
      - Запуск процесса вычислений
      - Получения результатов вычислений



Фреймворк iOpt

- Используется послойная архитектура
  - Уровень пользовательского интерфейса содержит:
    - Интерфейс определения задач оптимизации
    - Подсистему визуализации процесса вычислений
      - Процесс вычислений может отображаться как в терминале, так и в виде отдельных графиков



Фреймворк iOpt

- Интерфейс определения задач оптимизации

```
class Problem(ABC):
    """Базовый класс для задач оптимизации"""
    def __init__(self):
    """Описание количественных характеристик задачи поиска"""
        self.name: str = ''
        self.numberOfFloatVariables: int = 0
        self.numberOfDisreteVariables: int = 0
        self.numberOfObjectives: int = 0
        self.numberOfConstraints: int = 0
    """Имена оптимизируемых параметров"""
        self.floatVariableNames: np.ndarray(shape=(1), dtype=str) = []
        self.discreteVariableNames: np.ndarray(shape=(1), dtype=str) = []
    """Описание области поиска"""
        self.lowerBoundOfFloatVariables: np.ndarray(shape=(1), dtype=np.double) = []
        self.upperBoundOfFloatVariables: np.ndarray(shape=(1), dtype=np.double) = []
        self.discreteVariableValues: np.ndarray(shape=(1, 1), dtype=str) = []
    """Известное решение (используется для отладки методов)"""
        self.knownOptimum: np.ndarray(shape=(1), dtype=Trial) = []

    """Абстрактный метод проведения испытаний в заданной точке"""
    @abstractmethod
    def Calculate(self, point: Point, functionValue: FunctionValue) -> FunctionValue:
```

Фреймворк iOpt

- Пример описания задачи предсказания рака молочной железы

```
class SVC_2D(Problem):
   def __init__(self, x_dataset: np.ndarray, y_dataset: np.ndarray,
                regularization_bound: Dict[str, float],
                kernel_coefficient_bound: Dict[str, float]):
        """
        x_dataset, y_dataset :    входные данные обучающей выборки
        kernel_coefficient_bound: границы изменения значения параметра регуляризации
        regularization_bound:     границы изменения значения коэффициента ядра
                                  (low - нижняя граница, up - верхняя)
        """
        super(SVC_2D, self).__init__()
        self.numberOfFloatVariables = 2
        self.numberOfObjectives = 1
        self.x = x_dataset
        self.y = y_dataset

        self.floatVariableNames = np.array(["Regularization parameter", "Kernel coefficient"], dtype=str)
        self.lowerBoundOfFloatVariables = np.array([regularization_bound['low'],
                                                    kernel_coefficient_bound['low']],
                                                    dtype=np.double)
        self.upperBoundOfFloatVariables = np.array([regularization_bound['up'],
                                                    kernel_coefficient_bound['up']],
                                                    dtype=np.double)

        …
```

Фреймворк iOpt

- Пример описания задачи предсказания рака молочной железы

```
from sklearn.svm import SVC
from sklearn.model_selection import cross_val_score
…
class SVC_2D(Problem):
…
    def Calculate(self, point: Point, functionValue: FunctionValue) -> FunctionValue:
        """
        Метод расчёта значения целевой функции в точке
        point: Точка испытания
        functionValue: объект хранения значения целевой функции в точке
        """
        cs, gammas = point.floatVariables[0], point.floatVariables[1]
        clf = SVC(C=10 ** cs, gamma=10 ** gammas)
        clf.fit(self.x, self.y)

        functionValue.value = -cross_val_score(clf, self.x, self.y, scoring='f1').mean()
        return functionValue
```

Фреймворк iOpt

- Пример описания задачи предсказания рака молочной железы

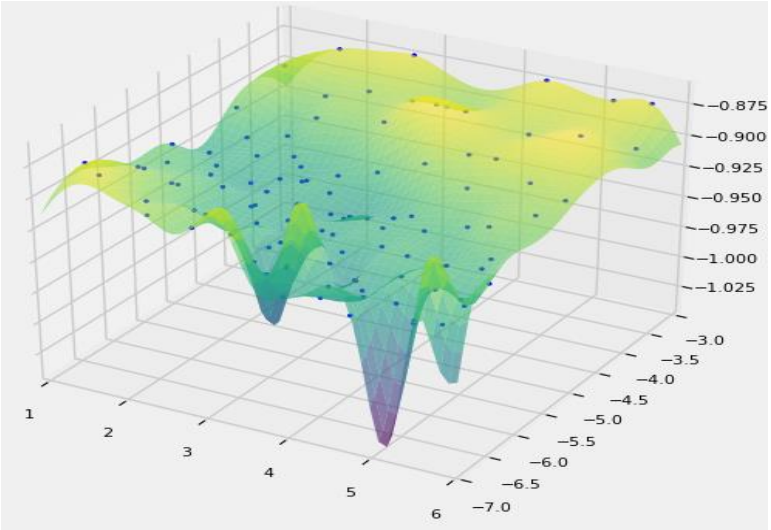
```
# Создание объекта задачи
x, y = load_breast_cancer_data()
regularization_value_bound = {'low': 1, 'up': 6}
kernel_coefficient_bound = {'low': -7, 'up': -3}

problem = SVC_2D(x, y, regularization_value_bound, kernel_coefficient_bound)
# Формируем параметры решателя
method_params = SolverParameters(r=3.0, itersLimit=100, numberOfParallelPoints=4)
# Создаем решатель
solver = Solver(problem, parameters=method_params)
# Добавляем вывод результатов в консоль
cfol = ConsoleOutputListener(mode='result')
solver.AddListener(cfol)
# Добавляем построение 3D визуализации после решения задачи
spl = StaticPainterNDListener("svc2d_stat.png", "output", varsIndxs=[0, 1],
                              mode="surface", calc="interpolation")
solver.AddListener(spl)
```

Фреймворк iOpt

- Пример поиска оптимального решения

```
# Решение задачи
sol = solver.Solve()
# Пользовательский вывод информации
print(sol.numberOfGlobalTrials)
print(sol.numberOfLocalTrials)
print(sol.solvingTime)
print(sol.bestTrials[0].
      functionValues[0].value)
```




```
|                                Result                                |
|----------------------------------------------------------------------|
|     global iteration count:  101                                     |
|      local iteration count:  0                                       |
|               solving time:  1.513753                                |
|            solution point:  [ 3.42919922 -4.99804688]                |
|            solution value:  -0.97354927                              |
|                 accuracy:  0.05590170                                |
```

СРАВНЕНИЕ С ИЗВЕСТНЫМИ ФРЕЙМВОРКАМИ ПРИ РЕШЕНИИ МОДЕЛЬНЫХ ЗАДАЧ

Тестовая инфраструктура

- Вычислительные эксперименты проводились на суперкомпьютере «Лобачевский» Нижегородского государственного университета.
  - В экспериментах использовался вычислительный узел с двумя 64-ядерными процессорами AMD EPYC 7742 (всего 128 вычислительных ядра).
  - На узле установлено 512 Gb оперативной памяти.
  - Операционная система CentOS 7.

Решаемые задачи оптимизации

- Эффективность фреймворка iOpt проверялась на решении следующих задач:
  - Настройка параметров алгоритма машинного обучения для построения модели предсказания рака молочной железы.
  - Настройка параметров генетического алгоритма при решении задачи коммивояжёра.
  - Настройка параметров XGBoost при построении модели на разных наборах данных.

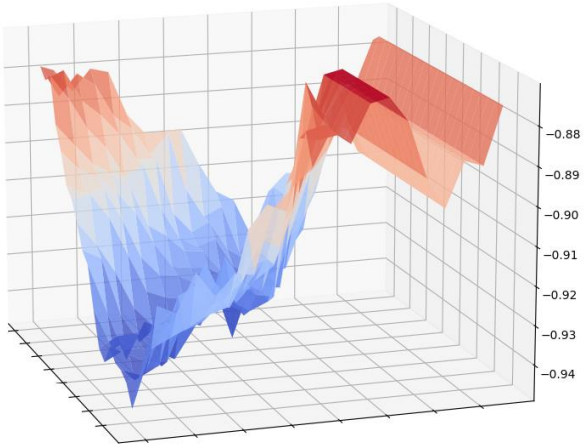
Построения модели предсказания рака молочной железы

Стандартный датасет breast_cancer

Целевая метрика – f1_score, настройка параметров C и gamma (100 испытаний)

Фреймворк	f1_score
----	0.87
Scikit-Optimize	0.90
iOpt	0.94

График целевой функции



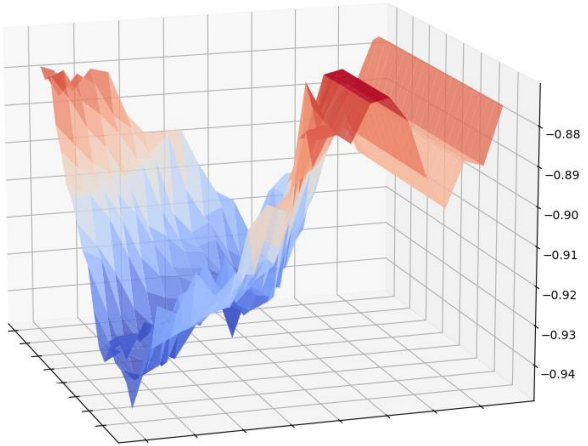
Построения модели предсказания рака молочной железы

Стандартный датасет breast_cancer

Целевая метрика – f1_score, настройка параметров C и gamma (1000 испытаний)

Число процессов	f1_score	Время настройки параметров	Ускорение
1	0,975	31,199	1
5	0,975	7,876	4,0
10	0,975	4,775	6,5
20	0,975	3,251	9,6
40	0,975	2,002	15,6
80	0,975	1,616	19,3

График целевой функции



Решении задачи коммивояжёра

- Решалась задача a280 из базы «TSPLIB is a library of sample instances for the TSP»
  - http://comopt.ifi.uni-heidelberg.de/software/TSPLIB95/
- В рамках исследования применялся генетический алгоритм, реализованный в библиотеке scikit-opt
  - https://github.com/guofei9987/scikit-opt
- Настраиваемые параметры
  - Вероятность мутации
  - Размер популяции
- Число итераций генетического алгоритма было фиксировано и равно 200

* Картинка взята с сайта https://ru.wikipedia.org/wiki/ Задача_коммивояжёра

Решении задачи коммивояжёра

- Длина пути с настройками генетического алгоритма по умолчанию 25835,04
- Эффективность параллельной реализации метода число испытаний при настройке параметров 400

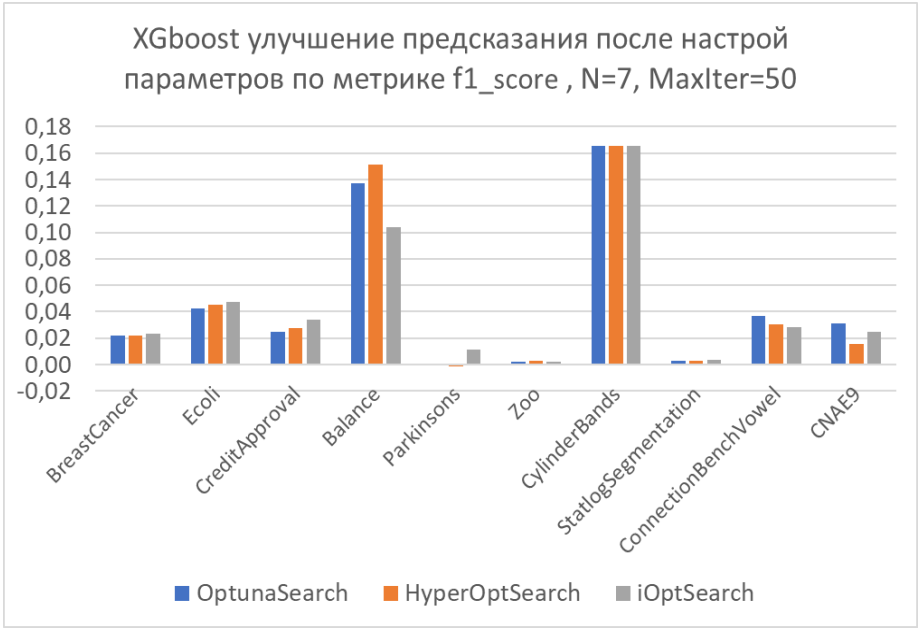
Число процессов	Длина пути (лучше меньше)	Время настройки параметров	Ускорение
1	16040,52	1162,5	1
5	16223,25	316,0	3,7
10	16011,50	164,3	7,1
20	16089,76	90,25	12,9
40	16216,21	54,69	21,3
80	15910,54	34,86	33,3

* Картинка взята с сайта https://ru.wikipedia.org/wiki/ Задача_коммивояжёра

Настройка XGBoost

- XGBoost – одна из реализаций алгоритма градиентного бустинга на деревьях решений.
- Метод построения модели классификации
  - На первом шаге модель строилась с параметрами по умолчанию
  - Далее параметры XGBoost оптимизировались и модель строилась вновь
  - Оптимизируемые параметры

```
params = {
 'n_estimators': (int, 10, 200),
 'max_depth': (int, 5, 20),
 'min_child_weight': (int, 1, 10),
 'gamma': (float, 0.01, 0.6),
 'subsample': (float, 0.05, 0.95),
 'colsample_bytree': (float, 0.05, 0.95),
 'learning_rate': (float, 0.001, 0.1)
}
```



ВОПРОСЫ?

konstantin.barkalov@itmm.unn.ru
evgeny.kozinov@itmm.unn.ru