

Оптимизация гиперпараметров

Илья Трофимов

08.09.2016

Машинное обучение и большие данные
ФИВТ, осень 2016

Подбор гиперпараметров

Многие методы машинного обучения имеют гиперпараметры, от которых существенно зависит качество предсказания:

- SVM - параметр C
- Коэффициенты L1/L2 регуляризации
- Gradient Boosted Decision Trees - размер композиции, высота дерева, shrinkage, мин. кол-во объектов в листе.
- Онлайн обучение Vowpal Wabbit: $\eta_t = \lambda d^k \left(\frac{t_0}{t_0 + w_t} \right)^p$, параметры λ, d, t_0, p
- Алгоритм обучения, как правило, сводится к алгоритму численной оптимизации, у которого тоже могут быть параметры.

Базовый алгоритм тестирования гиперпараметров - функция $f(x)$

Вход: вектор гиперпараметров $x \in \mathbb{R}^p$, обучающая выборка, тестовая выборка, алгоритм обучения

- 1 Обучить алгоритм на обучающей выборке, используя параметры x
- 2 Вернуть качество, измеренное по тестовой выборке

Базовый алгоритм тестирования гиперпараметров - функция $f(x)$

Вход: вектор гиперпараметров $x \in \mathbb{R}^p$, обучающая выборка, тестовая выборка, алгоритм обучения

- 1 Обучить алгоритм на обучающей выборке, используя параметры x
- 2 Вернуть качество, измеренное по тестовой выборке

Альтернатива - кросс-валидация

Базовый алгоритм тестирования гиперпараметров - функция $f(x)$

Вход: вектор гиперпараметров $x \in \mathbb{R}^p$, обучающая выборка, тестовая выборка, алгоритм обучения

- 1 Обучить алгоритм на обучающей выборке, используя параметры x
- 2 Вернуть качество, измеренное по тестовой выборке

Альтернатива - кросс-валидация

Задача сводится к оптимизации функции $f(x)$, для которой мы умеем вычислять только значения, а не производные

Подбор гиперпараметров

Что делать?

- Перебор по сетке - нормальное решение, если комбинаций параметров не очень много

Что делать?

- Перебор по сетке - нормальное решение, если комбинаций параметров не очень много
- Для некоторых параметров имеет смысл использовать логарифмическую сетку (например, параметры L1/L2 регуляризации, learning rate)

Что делать?

- Перебор по сетке - нормальное решение, если комбинаций параметров не очень много
- Для некоторых параметров имеет смысл использовать логарифмическую сетку (например, параметры L1/L2 регуляризации, learning rate)
- Разные комбинации можно пробовать параллельно

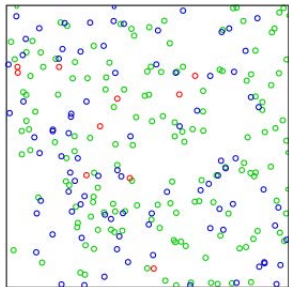
Что делать?

- Перебор по сетке - нормальное решение, если комбинаций параметров не очень много
- Для некоторых параметров имеет смысл использовать логарифмическую сетку (например, параметры L1/L2 регуляризации, learning rate)
- Разные комбинации можно пробовать параллельно
- Можно пробовать случайные точки по сетке

Что делать?

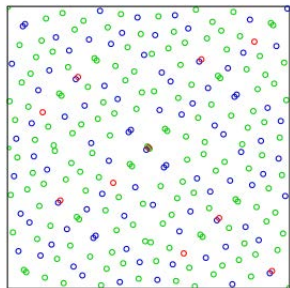
- Перебор по сетке - нормальное решение, если комбинаций параметров не очень много
- Для некоторых параметров имеет смысл использовать логарифмическую сетку (например, параметры L1/L2 регуляризации, learning rate)
- Разные комбинации можно пробовать параллельно
- Можно пробовать случайные точки по сетке
- При разных значениях параметров обучение будет занимать разное время. Например, чем больше нейронная сеть - тем больше вычислений нужно делать.

Случайный поиск



https://en.wikipedia.org/wiki/Sobol_sequence

Последовательность Соболя



https://en.wikipedia.org/wiki/Sobol_sequence

Метод Нелдера-Мида

aka метод деформируемого многогранника, симплекс-метод,
"амеба"

Метод Нелдера-Мида

aka метод деформируемого многогранника, симплекс-метод,
"амеба"

$$\operatorname{argmin}_{x \in D, D - \text{гиперкуб}} f(x)$$

Метод Нелдера-Мида

aka метод деформируемого многогранника, симплекс-метод, "амеба"

$$\operatorname{argmin}_{x \in D, D - \text{гиперкуб}} f(x)$$

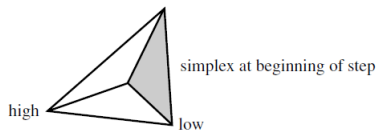
Метод Нелдера-Мида

Вход: Функция $f(\cdot)$, $p + 1$ точек $x_1, \dots, x_{p+1}$

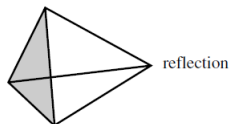
Пока не выполнено условие останова:

- 1 Отсортируем все точки по возрастанию целевой функции:
 $\{x_l, \dots, x_g, x_h\}, \quad f(x_l) < \dots < f(x_g) < f(x_h)$
- 2 Пробуем двигать точку x_h , выполняя отражение, растяжение или сжатие симплекса
- 3 Если не получилось уменьшить $f(x_h)$, то выполняем глобальное сжатие симплекса.

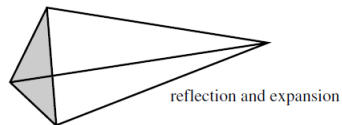
Метод Нелдера-Мида



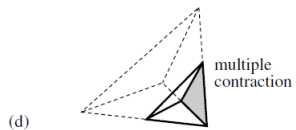
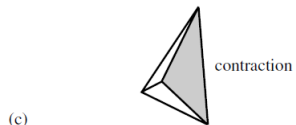
(a)



(b)



Метод Нелдера-Мида



<http://www.youtube.com/watch?v=HUqLxHfxWqU>

- 1 Простой в реализации

Метод Нелдера-Мида

- 1 Простой в реализации
- 2 Не работает с дискретными переменными
- 3 Сходимость зависит от начального приближения, может застрять в локальном минимуме
- 4 Желательно делать мультистарт
- 5 Плохо делает exploration
- 6 Обычно нужно много вычислений $f(\cdot)$

Метод Nelder-Mead

Функция fmin в scipy

<http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.optimize.fmin.html>

Много методов для black-box оптимизации, в т.ч. метод Powell

<http://docs.scipy.org/doc/scipy-0.14.0/reference/tutorial/optimize.html>

HyperOpt (Random Search, TPE)

<https://github.com/hyperopt/hyperopt>

Байесовская оптимизация

Байесовская оптимизация строит распределение
 $P(y|x, \text{предыдущие измерения, априорная информация})$

Байесовская оптимизация

Байесовская оптимизация строит распределение
 $P(y|x, \text{предыдущие измерения, априорная информация})$

Гауссовский случайный процесс

Последовательность $\{y_t\}_{t \in T}$ называется гауссовским случайным процессом, если для любого конечного множества $\{t_1, t_2, \dots, t_n\}$ случайные величины $\{y_{t_1}, y_{t_2}, \dots, y_{t_n}\}$ имеют совместное многомерное нормальное распределение.

Байесовская оптимизация

Байесовская оптимизация строит распределение
 $P(y|x, \text{предыдущие измерения, априорная информация})$

Гауссовский случайный процесс

Последовательность $\{y_t\}_{t \in T}$ называется гауссовским случайным процессом, если для любого конечного множества $\{t_1, t_2, \dots, t_n\}$ случайные величины $\{y_{t_1}, y_{t_2}, \dots, y_{t_n}\}$ имеют совместное многомерное нормальное распределение.

$$y_i = f(x_i)$$

$$[y_{t_1}, y_{t_2}, \dots, y_{t_n}] \sim N(m, \Sigma)$$

Ковариация

Нужно иметь модель для матрицы ковариации:

$$\Sigma_{ij} = \text{cov}(y_i, y_j) = K(x_i, x_j)$$

Ковариация

Нужно иметь модель для матрицы ковариации:

$$\Sigma_{ij} = \text{cov}(y_i, y_j) = K(x_i, x_j)$$

$$r^2(x, x') = \sum_{d=1}^p \frac{(x_d - x'_d)^2}{\theta_d^2}$$

Нужно иметь модель для матрицы ковариации:

$$\Sigma_{ij} = \text{cov}(y_i, y_j) = K(x_i, x_j)$$

$$r^2(x, x') = \sum_{d=1}^p \frac{(x_d - x'_d)^2}{\theta_d^2}$$

Ядро squared exponential

$$K_{SE}(x, x') = \theta_0 \exp\left(-\frac{1}{2}r^2(x, x')\right)$$

Нужно иметь модель для матрицы ковариации:

$$\Sigma_{ij} = \text{cov}(y_i, y_j) = K(x_i, x_j)$$

$$r^2(x, x') = \sum_{d=1}^p \frac{(x_d - x'_d)^2}{\theta_d^2}$$

Ядро squared exponential

$$K_{SE}(x, x') = \theta_0 \exp\left(-\frac{1}{2}r^2(x, x')\right)$$

Ядро ARD Matern 5/2

$$K_{M52}(x, x') = \theta_0 \left(1 + \sqrt{5r^2(x, x')} + \frac{5}{3}r^2(x, x')\right) \exp(-\sqrt{5r^2(x, x')})$$

Оценка функции в новой точке

$(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ - уже проверенные точки, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$

x_{n+1} - новая точка

Оценка функции в новой точке

$(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ - уже проверенные точки, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$

x_{n+1} - новая точка

$$\begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ y_{n+1} \end{bmatrix} \sim N(m, \Sigma)$$

Оценка функции в новой точке

$(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ - уже проверенные точки, $y \in \mathbb{R}^n$

x_{n+1} - новая точка

$$\begin{bmatrix} y \\ y_{n+1} \end{bmatrix} \sim N(m, \Sigma)$$

$$\Sigma = \begin{bmatrix} K & \mathbf{k} \\ \mathbf{k}^T & k(x_{n+1}, x_{n+1}) \end{bmatrix}$$

$$K \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad K_{ij} = k(x_i, x_j)$$

$$\mathbf{k} = [k(x_{n+1}, x_1), k(x_{n+1}, x_2), \dots, k(x_{n+1}, x_n)]$$

Оценка функции в новой точке

$(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ - уже проверенные точки, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$

x_{n+1} - новая точка

$$\begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ y_{n+1} \end{bmatrix} \sim N(m, \Sigma)$$

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{k} \\ \mathbf{k}^T & k(x_{n+1}, x_{n+1}) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad K_{ij} = k(x_i, x_j)$$

$$\mathbf{k} = [k(x_{n+1}, x_1), k(x_{n+1}, x_2), \dots, k(x_{n+1}, x_n)]$$

$$P\left(\begin{bmatrix} y_{n+1} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix}\right) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^k |\Sigma|}} \exp\left(-\frac{\left(\begin{bmatrix} y_{n+1} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix} - m\right)^T \Sigma^{-1} \left(\begin{bmatrix} y_{n+1} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix} - m\right)}{2}\right)$$

Оценка функции в новой точке

$$P(y_{n+1}|x_{n+1}, \{x_i, y_i\}_{i=1}^n) = N(\mu, \sigma)$$

$$\mu = \mathbf{k}^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y}$$

$$\sigma = k(x_{n+1}, x_{n+1}) - \mathbf{k}^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{k}$$

Оценка функции в новой точке

$$P(y_{n+1}|x_{n+1}, \{x_i, y_i\}_{i=1}^n) = N(\mu, \sigma)$$

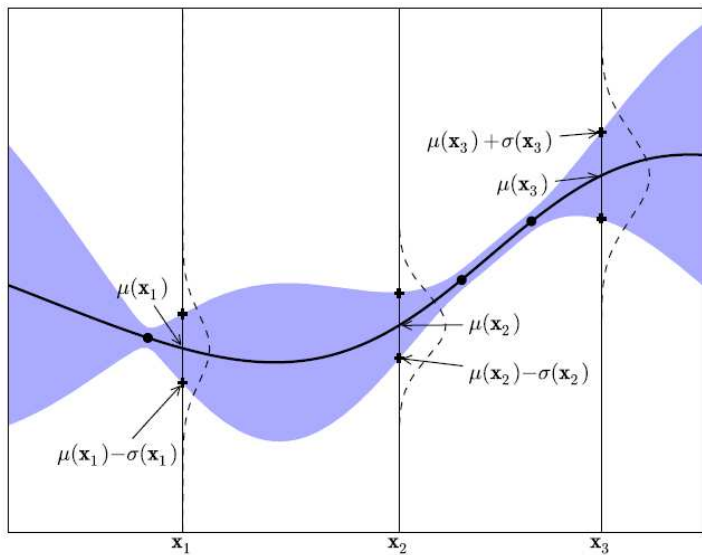
$$\mu = \mathbf{k}^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y}$$

$$\sigma = k(x_{n+1}, x_{n+1}) - \mathbf{k}^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{k}$$

Будем использовать обозначения

$$\mu(x; \{x_i, y_i\}_{i=1}^n, \theta) \quad \sigma^2(x; \{x_i, y_i\}_{i=1}^n, \theta)$$

Оценка функции в новой точке



Функция выгоды $a : X \rightarrow \mathbb{R}$

$$x_{next} = \operatorname{argmax}_x a(x)$$

Будем обозначать эту функцию $a(x; \{x_i, y_i\}_{i=1}^n, \theta)$ где θ - параметры алгоритма гауссовских процессов

Алгоритм Байесовской оптимизации

Алгоритм Байесовской оптимизации

Вход: функция $f(\cdot)$, функция выгоды $a(\cdot)$, макс. кол-во вычислений функции T , начальное множество значений $D = \{x_i, y_i\}_{i=1}^k$

- 1 for $t = 1 \dots T$
- 2 $x_t \leftarrow \operatorname{argmax}_x a(x; D)$
- 3 Вычислить $y_t = f(x_t)$
- 4 $D \leftarrow D \cup \{x_t, y_t\}$

$$x_{best} = \operatorname{argmin}_{x \in \{x_1, \dots, x_n\}} f(x)$$

$$\gamma(x) = \frac{f(x_{best}) - \mu(x; \{x_n, y_n\}, \theta)}{\sigma(x; \{x_n, y_n\}, \theta)}$$

$\Phi(\cdot)$ - кумулятивная функция нормального распределения

Функция выгоды

Варианты для функции выгоды $a(x; \{x_n, y_n\}_{i=1}^n, \theta)$:

Варианты для функции выгоды $a(x; \{x_n, y_n\}_{i=1}^n, \theta)$:

- 1 Вероятность улучшения:

$$a_{PI}(x; \{x_n, y_n\}_{i=1}^n, \theta) = P(y < f(x_{best})) = \Phi(\gamma(x))$$

Варианты для функции выгоды $a(x; \{x_n, y_n\}_{i=1}^n, \theta)$:

- 1 Вероятность улучшения:

$$a_{PI}(x; \{x_n, y_n\}_{i=1}^n, \theta) = P(y < f(x_{best})) = \Phi(\gamma(x))$$

- 2 Ожидаемое улучшение:

$$a_{EI}(x; \{x_n, y_n\}_{i=1}^n, \theta) = \mathbb{E}[(f(x_{best}) - y)_+]$$

Функция выгоды

Варианты для функции выгоды $a(x; \{x_n, y_n\}_{i=1}^n, \theta)$:

- 1 Вероятность улучшения:

$$a_{PI}(x; \{x_n, y_n\}_{i=1}^n, \theta) = P(y < f(x_{best})) = \Phi(\gamma(x))$$

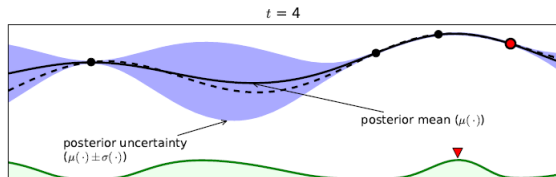
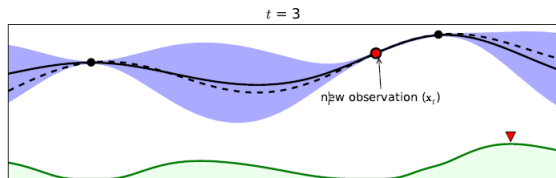
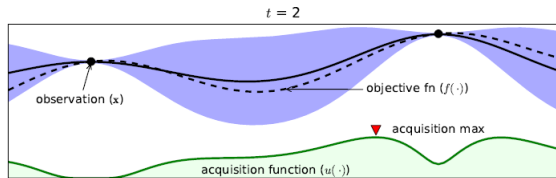
- 2 Ожидаемое улучшение:

$$a_{EI}(x; \{x_n, y_n\}_{i=1}^n, \theta) = \mathbb{E}[(f(x_{best}) - y)_+]$$

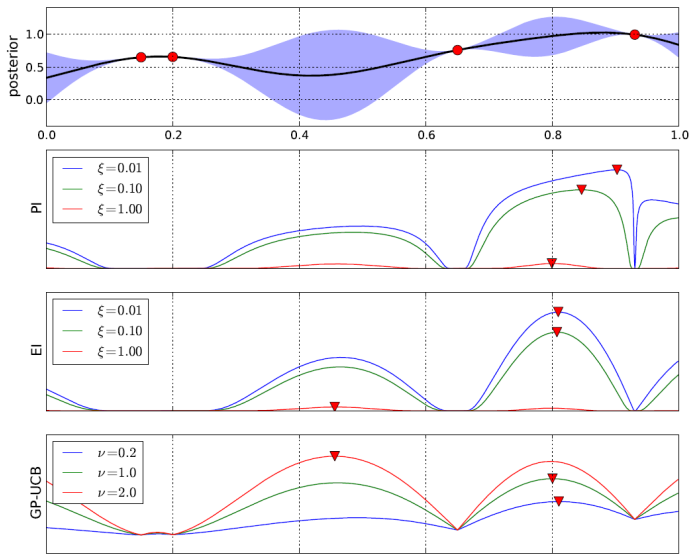
- 3 Нижний доверительный интервал:

$$a_{LCB} = f(x_{best}) - (\mu(x; \{x_n, y_n\}_{i=1}^n, \theta) - \kappa\sigma(x; \{x_n, y_n\}_{i=1}^n, \theta))$$

Эксперименты



Эксперименты



Если значения функции измеряются не точно

$$y_i = f(x_i) + \xi_i$$

$$\xi_i \sim N(0, \nu)$$

Если значения функции измеряются не точно

$$y_i = f(x_i) + \xi_i$$

$$\xi_i \sim N(0, \nu)$$

то ковариационная матрица модифицируется

$$\text{cov}(y_i, y_j) = \text{cov}(f(x_i), f(x_j)) + \nu[i = j] = K_{ij} + \nu[i = j]$$

$$\Sigma \leftarrow \Sigma + \nu I$$

Если значения функции измеряются не точно

$$y_i = f(x_i) + \xi_i$$

$$\xi_i \sim N(0, \nu)$$

то ковариационная матрица модифицируется

$$\text{cov}(y_i, y_j) = \text{cov}(f(x_i), f(x_j)) + \nu[i = j] = K_{ij} + \nu[i = j]$$

$$\Sigma \leftarrow \Sigma + \nu I$$

$$\mu = \mathbf{k}^T (\mathbf{K} + \nu I)^{-1} \mathbf{y}, \quad \sigma = k(x_{n+1}, x_{n+1}) - \mathbf{k}^T (\mathbf{K} + \nu I)^{-1} \mathbf{k}$$

Если значения функции измеряются не точно

$$y_i = f(x_i) + \xi_i$$

$$\xi_i \sim N(0, \nu)$$

то ковариационная матрица модифицируется

$$\text{cov}(y_i, y_j) = \text{cov}(f(x_i), f(x_j)) + \nu[i = j] = K_{ij} + \nu[i = j]$$

$$\Sigma \leftarrow \Sigma + \nu I$$

$$\mu = \mathbf{k}^T (\mathbf{K} + \nu I)^{-1} \mathbf{y}, \quad \sigma = k(x_{n+1}, x_{n+1}) - \mathbf{k}^T (\mathbf{K} + \nu I)^{-1} \mathbf{k}$$

В качестве лучшего найденного значения функции $f(\cdot)$

рекомендуется использовать

$$f(x_{best}) \leftarrow \underset{x \in \{x_1, \dots, x_n\}}{\operatorname{argmin}} \mu(x; \{x_i, y_i\}_{i=1}^n, \theta)$$

Модель с шумом помогает в случае не непрерывных $f(\cdot)$

Проблемы с Байесовской оптимизацией

У алгоритма поиска гиперпараметров тоже есть параметры :(

$$\theta_{1...D}, \theta_0, \nu, m$$

Закмнутый круг?

Проблемы с Байесовской оптимизацией

У алгоритма поиска гиперпараметров тоже есть параметры :(

$$\theta_{1...D}, \theta_0, \nu, m$$

Закмнутый круг?

Варианты решения проблемы:

Проблемы с Байесовской оптимизацией

У алгоритма поиска гиперпараметров тоже есть параметры :(

$$\theta_{1...D}, \theta_0, \nu, m$$

Закнутый круг?

Варианты решения проблемы:

- 1 Найти параметры максимизацией правдоподобия

$$p(y_1, \dots, y_N | x_1, \dots, x_N, \theta, \nu, m) = N(y | m, \Sigma_\theta + \nu I)$$

Проблемы с Байесовской оптимизацией

У алгоритма поиска гиперпараметров тоже есть параметры :(

$$\theta_{1...D}, \theta_0, \nu, m$$

Закнутый круг?

Варианты решения проблемы:

- 1 Найти параметры максимизацией правдоподобия

$$p(y_1, \dots, y_N | x_1, \dots, x_N, \theta, \nu, m) = N(y | m, \Sigma_\theta + \nu I)$$

- 2 Наложить на θ априорное распределение и проинтегрировать по апостериорному распределению θ

$$\hat{a}(x; \{x_n, y_n\}_{i=1}^n) = \int a(x; \{x_n, y_n\}_{i=1}^n, \theta) p(\theta | \{x_n, y_n\}_{i=1}^n) d\theta$$

Вычисляется методом Markov Chain Monte Carlo (MCMC).

Проблемы с Байесовской оптимизацией

Поиск

$$x_{next} = \operatorname{argmax}_x a(x)$$

само по себе является проблемой black-box оптимизации. Байесовскую оптимизацию имеет смысл использовать, если нахождение x_{next} занимает гораздо меньше времени, чем вычисление $f(x_{next})$

Параллельные вычисления

Пусть у нас есть возможность тестировать наборы гиперпараметров параллельно.

Ситуация: в точках $\{x_1, \dots, x_n\}$ вычисления произведены, в точках $\{x_{n+1}, \dots, x_{n+J}\}$ вычисления не закончены. Какую точку выбрать следующей?

Параллельные вычисления

Пусть у нас есть возможность тестировать наборы гиперпараметров параллельно.

Ситуация: в точках $\{x_1, \dots, x_n\}$ вычисления произведены, в точках $\{x_{n+1}, \dots, x_{n+J}\}$ вычисления не закончены. Какую точку выбрать следующей?

Оценим распределение $y_{n+1}, \dots, y_{n+J}$ в точках $\{x_{n+1}, \dots, x_{n+J}\}$ с помощью гауссовских процессов

$$p(y_{n+1}, \dots, y_{n+J}) = p(y_{n+1}, \dots, y_{n+J} | x_{n+1}, \dots, x_{n+J}, \{x_n, y_n\}_{i=1}^n)$$

Параллельные вычисления

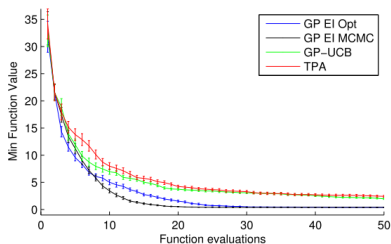
Пусть у нас есть возможность тестировать наборы гиперпараметров параллельно.

Ситуация: в точках $\{x_1, \dots, x_n\}$ вычисления произведены, в точках $\{x_{n+1}, \dots, x_{n+J}\}$ вычисления не закончены. Какую точку выбрать следующей?

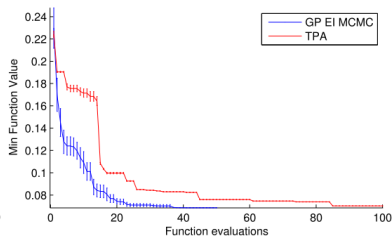
Оценим распределение $y_{n+1}, \dots, y_{n+J}$ в точках $\{x_{n+1}, \dots, x_{n+J}\}$ с помощью гауссовских процессов

$$p(y_{n+1}, \dots, y_{n+J}) = p(y_{n+1}, \dots, y_{n+J} | x_{n+1}, \dots, x_{n+J}, \{x_n, y_n\}_{i=1}^n)$$

$$\begin{aligned} \hat{a}(x; \{x_n, y_n\}_{i=1}^{n+J}; \theta, \{x_j\}) = \\ = \int_{\mathbb{R}^J} a(x; \{x_n, y_n\}_{i=1}^{n+J}, \theta) p(y_{n+1}, \dots, y_{n+J}) dy_{n+1} \dots dy_{n+J} \end{aligned}$$



(a)

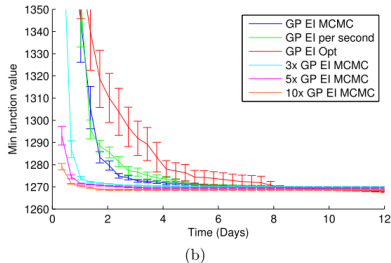
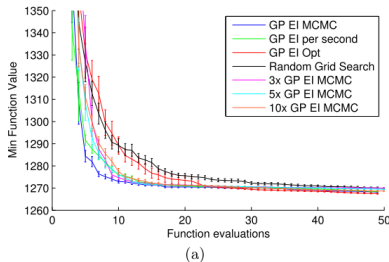


(b)

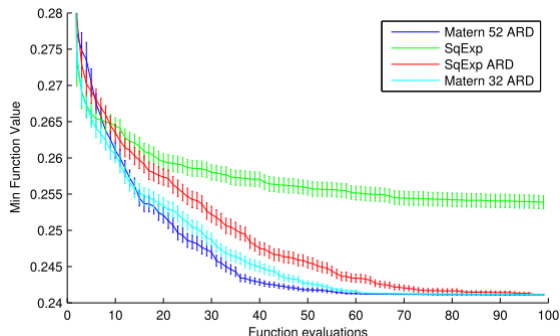
Слева: оптимизация функции Branin-Hoo.

Справа: обучение логистической регрессии на MNIST, изменялись: шаг стох. градиента, размер minibatch, кол-во эпох, параметр L2-регуляризации.

Эксперименты



Online LDA, изменялись параметры τ_0, κ в шаге стохастического градиента $\rho_t = (\tau_0 + t)^{-\kappa}$ а также размер minibatch. Количество тем было зафиксировано и равно 100.



Сравнение различных ядер для задачи motif finding task с помощью Latent Structured Support Vector Machines.

Задача: нужно настроить параметры сервиса (поиск, реклама, музыка ...) для оптимизации целевой метрики.

Вычислительные эксперименты

Задача: нужно настроить параметры сервиса (поиск, реклама, музыка ...) для оптимизации целевой метрики.

Пример: критерий отбора рекламных объявлений

$$P(\text{click})^\alpha \text{Bid} > A.$$

Параметры α , A подбираются исходя из максимизации прибыли $R(\alpha, A)$.

Вычислительные эксперименты

Задача: нужно настроить параметры сервиса (поиск, реклама, музыка ...) для оптимизации целевой метрики.

Пример: критерий отбора рекламных объявлений

$$P(\text{click})^\alpha \text{Bid} > A.$$

Параметры α , A подбираются исходя из максимизации прибыли $R(\alpha, A)$.

Вычисление $R(\alpha, A)$ - это эксперимент на доле пользователей в течение нескольких дней. Результат будет шумным, часто статистически не значимым.

Вычислительные эксперименты

Задача: нужно настроить параметры сервиса (поиск, реклама, музыка ...) для оптимизации целевой метрики.

Пример: критерий отбора рекламных объявлений

$$P(\text{click})^\alpha \text{Bid} > A.$$

Параметры α , A подбираются исходя из максимизации прибыли $R(\alpha, A)$.

Вычисление $R(\alpha, A)$ - это эксперимент на доле пользователей в течение нескольких дней. Результат будет шумным, часто статистически не значимым. Можно попробовать Баевсовскую оптимизацию.

- 1 Более сложная в реализации
- 2 Работает с дискретными переменными
- 3 Сходимость не сильно зависит от начального приближения
- 4 Хорошо делает exploration
- 5 Обычно нужно немного вычислений $f(\cdot)$

Spearmint (★)

<https://github.com/JasperSnoek/spearmint>

Metric Optimization Engine

<https://github.com/Yelp/MOE>

Bayesian Optimization (★)

<https://github.com/fmfn/BayesianOptimization>

(★) - «хорошие»

Метод Кригинга в геологии можно рассматривать как специфичный случай Байесовской оптимизации

Список литературы

tutorial E. Brochu, V. M. Cora and N. de Freitas. A Tutorial on Bayesian Optimization of Expensive Cost Functions, with Application to Active User Modeling and Hierarchical Reinforcement Learning, 2010.
<http://arxiv.org/abs/1012.2599>

practical By Jasper Snoek, Hugo Larochelle and Ryan P. Adams University. Practical Bayesian Optimization of Machine Learning Algorithms, 2012.
<http://arxiv.org/abs/1206.2944>

simplex Press, WH; Teukolsky, SA; Vetterling, WT; Flannery, BP (2007). Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing (3rd ed.). New York: Cambridge University Press.

NN G. Hinton. Bayesian Optimization of Hyperparameters.
<http://www.youtube.com/watch?v=cWQDeB9WqvU>