

知っておきたいキーワード

ハイパーパラメータ最適化

柳瀬利彦[†][†] 株式会社Preferred Networks

"Hyperparameter Optimization" by Toshihiko Yanase (Preferred Networks, Inc., Tokyo)

キーワード：ブラックボックス最適化，ヒューマンインザループ最適化，深層学習，機械学習，生成AI，Optuna

まえがき

深層学習 (Deep Learning) をはじめとした機械学習 (Machine Learning) 技術は，画像や音声の認識や生成などメディア処理においてもさまざまな場面で活用されており，日々改善が進ん

でいる．機械学習のアルゴリズムを使いこなすためには，学習を始める前に人間が決めておく必要がある設定 (ハイパーパラメータ) を，対象とするデータや環境に適した値に決める必要がある．

本稿では，機械学習のハイパーパラメータの最適化について，アイデアと実行方法について解説する．適切なハイパーパラメータの設定によって，より高い精度や処理速度を得ることが期待できる．

ハイパーパラメータ最適化

機械学習のアルゴリズムには，訓練データを元に，自動的に決定されるパラメータがある．例えば，深層学習の一種である多層パーセプトロン MLP (Multilayer Perceptron) の場合には，各層の重みがパラメータである．一方で，訓練プロセス自体を制御する設定値をハイパーパラメータと呼ぶ．例えば，MLPの学習率やバッチサイズが該当する．これらの値は，訓練の速度やモデルの性能，過学習の可能性などに大きく影響する．

一方で，ハイパーパラメータは，訓練を始める前に決めておく必要がある．初めて手掛けるタスクであれば，ハイパーパラメータ設定は手探りにな

ることが多く，適切な設定値を見つけることが困難な場合がある．

ハイパーパラメータ最適化は，適切な設定値を効率よく発見するための最適化手法である．代表的なアプローチ

であるブラックボックス最適化では，ハイパーパラメータの値を入力，精度などの評価値を出力とする目的関数を想定する (図1)．そして，

ハイパーパラメータ

バッチサイズ，学習率，
etc

目的関数

最適化
アルゴリズム

評価値

accuracy, loss,
etc

図1 ブラックボックス最適化の概念図

一組のハイパーパラメータの評価を1回の試行として，過去の試行履歴を参照しながら反復的に最適化を行う．

🔍 試行錯誤を繰り返し、入力と出力の履歴だけからハイパーパラメータを最適化する。

ブラックボックス最適化には、ベイズ最適化や進化計算など多くのアルゴリズムが提案されている¹⁾が、オープンソースソフトウェアが開発されているため、手間をかけずに最適化実験できる。

例えば、著者も開発に参加しているOptuna (<https://optuna.org>) はPythonで書かれたブラックボックス最適化ライブラリーである²⁾。図2のコード例に示すように、Optunaでは、次の3ステップでハイパーパラメータの最適化を実現できる。

- (1) Optunaをimportする
- (2) 目的関数を定義し、ハイパーパラメータの値を決定し、評価値を返す
- (3) 目的関数を指定して最適化を実行する

```
# 1 Optunaをインポートする
import optuna

# 2 目的関数を定義
def objective (trial):
    model = define_model ()
    # ハイパーパラメータ「学習率」を決定
    lr = trial.suggest_float ('lr', 1e-10, 1e-1, log=True)
    optimizer = SGD (lr=lr)
    # モデルの訓練と評価
    ...
    # 評価値を返す
    return accuracy

# 3 最適化の実行
study = optuna.create_study (direction="maximize")
study.optimize (objective, n_trials=100)
```

図2 Optunaを用いたハイパーパラメータ最適化のコード例

ヒューマンインザループ最適化

近年、生成AI (Generative AI) の研究の進展によって、高品質な画像・動画・音声の生成が可能になってきてい

る。生成AIにも多くの場合、ハイパーパラメータが存在し、生成物の質を高めるために適切な値を設定する必要がある。

しかし、ここで問題になるのは、生

成物の良し悪しを客観指標で評価することが困難な場合が多いことである。例えば、図3のように生成された似顔絵画像の評価は人間の感覚に基づいて行われる。🔍

元画像



ハイパーパラメータを変えて似顔絵変換した生成例



(strength,
guidance_scale) =
(0.19682270766184673,
9.91515320022007)



(strength,
guidance_scale) =
(0.7359708010095322,
16.857315136132183)



(strength,
guidance_scale) =
(0.8829697383545052,
38.26979169437335)



(strength,
guidance_scale) =
(0.5100739765037557,
21.107460954588653)



(strength,
guidance_scale) =
(0.6952179500808431,
16.614689531290757)

Which is the best?

0

1

2

3

4

図3 拡散モデルを用いたプロフィール写真からの似顔絵生成における評価インターフェースの例
元画像への変更の強度 (strength, guidance_scale) のハイパーパラメータを調整する。最も良いと感じる画像に対応するボタンをクリックする。

☞ そのような場合には、人間の主観的な評価に基づいた最適化であるヒューマンインザループ (HITL: Human-in-the-Loop) 最適化が求められる。ヒューマンインザループ最適化では、人間を最適化ループに組み込み、人間の評価をフィードバックして最適化を行う。

評価においてはユーザインタフェースが重要である。一つの試行を絶対評価するだけでなく、複数の生成物をスライダーを用いて複数のハイパーパラ

メータ (に対応する生成物) を直感的に比較するインタフェースなどが提案されている³⁾。

Optuna Dashboard (<https://github.com/optuna/optuna-dashboard>) は、WebベースのOptunaのユーザインタフェースであるが、ヒューマンインザループ最適化を行うための基本的な機能を有している。

具体的には、Optuna Dashboardは、
① 生成した画像ファイルや音声ファイルを上アップロードし画面に表示する

機能や、② ボタンやスライダなど評価値をフィードバックするためのウィジェット、などヒューマンインザループ最適化のためのコンポーネントを提供している。これらは、Pythonでカスタマイズすることができる。Tutorial (<https://optuna-dashboard.readthedocs.io/en/stable/tutorials/hitl.html>) が用意されているので、ぜひ試していただきたい。

むすび

ハイパーパラメータ最適化は、機械学習に幅広く共通して存在する問題である。さらに、ヒューマンインザループ最適化により、客観的な評価が難しい生成AIについても最適化が可能である。Optunaなどのハイパーパラメータ最適化ソフトウェアは、簡単か

つ効率的に最適化を実現する。また、ハイパーパラメータ最適化の項で述べたブラックボックス最適化は、入力と出力のペアが分かれば良い、という非常にゆい条件であるため、ハイパーパラメータ以外にも広く応用できる。拙著にて、ミドルウェア (オンライン広告入札システムの実行環境) のパフォーマンス向上やクッキーのレシビ

改善の事例を紹介している⁴⁾ほか、インターネット上には動画圧縮のパラメータ最適化 (<https://gist.github.com/sile/8aa1ff7808dd55298f51dd70c8b83092>) などさまざまな事例がみられる。今後、読者の皆様にとってハイパーパラメータ最適化がより使いやすくなり、研究に貢献することができれば幸いである。 (2023年7月31日受付)

参考文献

- 1) 尾崎, 野村, 大西: “機械学習におけるハイパーパラメータ最適化手法: 概要と特徴”, 信学論, J103-D, 9, pp.615-631 (2020)
- 2) T. Akiba, S. Sano, T. Yanase, T. Ohta and M. Koyama: "Optuna: A Next-generation Hyperparameter Optimization Framework", In KDD (2019)
- 3) Y. Koyama, I. Sato, D. Sakamoto and T. Igarashi: "Sequential Line Search for Efficient Visual Design Optimization by Crowds", ACM Trans. Graph. **36**, 4, pp.48:1-48:11 (2017)
- 4) 佐野ほか: “Optunaによるブラックボックス最適化”, オーム社 (2023)



柳瀬 利彦

2010年、東京大学大学院新領域創成科学研究科博士後期課程修了。(株)日立製作所でのメディア処理研究を経て、2018年、(株)Preferred Networksに入社。以来、ハイパーパラメータ最適化ソフトウェアOptunaの開発とビジネスへの応用に従事。博士(科学)。

キーワード募集中

この企画で解説して欲しいキーワードを会員の皆様から募集します。ホームページ (<https://www.ite.or.jp/>) の会員の声より入力可能です。また電子メール (ite@ite.or.jp), FAX (03-3432-4675) 等でも受け付けますので、是非、編集部までお寄せください。 (編集委員会)