

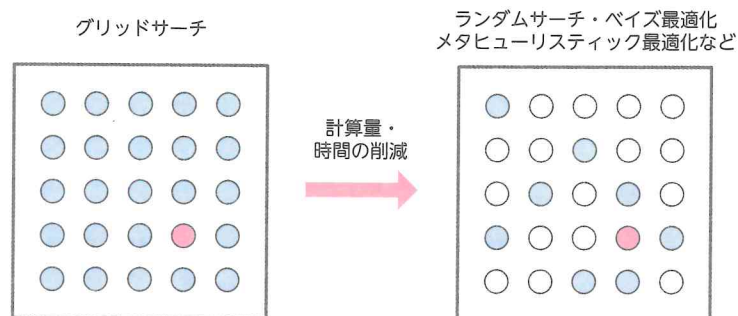
## ○ ハイパーパラメータのオートチューニング

前ページの例は、多項式モデルにおける次数について考えたものですが、実際には利用するモデルそれぞれで決定しなければならないハイパーパラメータが多数存在します。また、前ページの図で示した2次元グラフのように可視化して調整することのできない問題も多いため、**ハイパーパラメータを人がチューニングすることはかなり難しい**のです。

そこでハイパーパラメータを決定するために、機械学習にはさまざまなオート（自動）チューニングの手法が存在します。

一番単純な手法は、すべてのハイパーパラメータ候補の組み合わせを試行し、もっとも性能のよいものを選択するという方法です。この方法は**グリッドサーチ**といい、ハイパーパラメータ候補の中でもっともよいハイパーパラメータを必ず選択できます。ただし、候補の数が多くなると指数的に計算量が増大するため、学習データが多かったりモデルが複雑であったりと、一回の学習で必要となる計算量が大きい場合には利用が困難です。こういった場合にはすべてではなくいくつかの組み合わせを試行し、その中でもっともよいハイパーパラメータを採用する手法が採用されます。このようにさまざまな手法が存在しますが、ここではその中でもよく利用されるものをいくつか紹介します。

### ■ ハイパーパラメータの組み合わせを決める手法



- ・すべての組み合わせを試行するので、もっともよいハイパーパラメータが得られる
- ・しかし計算量が膨大になるため、すべて試行することが難しいケースが多い

- ・いくつかの組み合わせを試行し、その中でもっともよいハイパーパラメータを採用する
- ・試行する組み合わせの決め方でさまざまな手法が存在する

### ■ その他の手法

ランダムサーチ

焼きなまし  
(疑似アニーリング、SA) 法

ベイズ最適化

遺伝的アルゴリズム

ハイパーパラメータの組み合わせをランダムに試行する手法。何パターン試行するかを指定するだけで実行することができるため、かんたんに実装することが可能。

金属加工における「焼きなまし（ある材料を加熱し、その後時間をかけて冷やしていく熱処理のこと）」に似ていることから名付けられた手法。最初はさまざまなパターンを広く試し、徐々に探す範囲を狭くしながらよい組み合わせを探索する。

ガウス過程という回帰モデルを利用して、よいハイパーパラメータを探索する手法。試しにいくつかのパラメータ候補で精度を計算し、その結果をもとに、さらに「精度が高くなりそう」かつ「まだ探索しきれていなさそう」なパラメータ候補を推定することで、効率的に探索を行う。

生物の進化のしくみを模倣した手法。ハイパーパラメータの組み合わせを遺伝子とみなし、淘汰・交叉・突然変異などの処理をくり返し行う（世代交代）ことでよい組み合わせを探索する。



### まとめ

- ハイパーパラメータはモデルの大枠を決める値のこと
- 未学習と過学習に注意する
- ハイパーパラメータを自動で決める手法も存在する