

多目的最適化を用いたリザーバー設計支援ソフトウェアの開発 — 多目的最適化による見せる化で脱・属人化 —

1. 背景

リザーバーコンピューティング（以下：RC）やその代表的モデルである Echo State Network（以下：ESN）は、時系列データの扱いに優れ、小型・軽量かつ低学習コストの AI として時系列予測、異常検知などの多様な時系列パターン認識タスクに適用されている。実際の現場で ESN を利用する場合、タスクに適したリザーバー層のノード数などのハイパーパラメータやネットワーク構造（並列・直列・多層など）を決定する必要がある。しかし、これらの設定の最適化に関しては明確な指針が確立されておらず属人的かつ経験的な調整が必要となることが多い。ハイパーパラメータ最適化（以下：HPO）や構造探索の技術として、Optuna 等の HPO ソフトウェアや Neural Architecture Search（以下：NAS）が存在する。しかし、これらは主に深層学習モデル向けであり、ランダム生成したリザーバー層を固定する ESN 特有の探索には対応しきれていない。また、有識者からのヒアリングを行い、探索の難しさや複数指標での最適化要望などの課題が明らかとなっており、ESN に特化した HPO ソフトウェアが求められている。

2. 目的

ESN のハイパーパラメータが属人的かつ経験的な調整に依存しているという課題を解決することを目的に、多目的最適化手法を用いた RC 専用の HPO ソフトウェアを開発する。多目的最適化という観点を導入することで、異なる評価指標間のトレードオフを可視化し、さらに探索過程におけるハイパーパラメータの重要度、ESN 固有のネットワーク指標などの客観的指標をユーザーへ提供する。これにより、従来の属人的かつ経験的な調整をソフトウェアに代替させ、ユーザーが扱う個別のタスクに適した ESN のハイパーパラメータを選択できる環境を実現する。ESN に基づく時系列データ処理システムの開発負荷を軽減し、ESN の利活用を促進することを目指す。

3. ソフトウェア開発内容

ESN の HPO において、属人的かつ経験的な調整が必要となっている現状の課題を解決するため、多目的最適化を用いた HPO ソフトウェア「MORSe」(Multi-objective Optimization for Reservoir computing parameter Search の頭文字から命名)を開発した(図 1)。MORSe は、HPO を行う「探索基盤」と、HPO 結果の選択、分析・解釈を支援する「可視化 UI」からなる。開発言語は Python を採用し、可視化 UI はブラウザを用いることで、OS に依存しない構成となっている。

- 基本機能

MORSe は、精度最大化・ノード数最小化など異なる評価指標の同時最適化を可能とし、評価指標間のトレードオフの可視化(パレートフロント)、探索時のハイパーパ

ラメータの重要度、ESN 固有のネットワーク指標などユーザーの分析・解釈につながる機能を提供する。ユーザーは、これら機能により要望に適した ESN のハイパーパラメータの選択が可能となる。



図 1. MORSe 画面：ブラウザ上で解の選択とハイパーパラメータの分析を行う。また、探索中のリアルタイム表示、インタラクティブな UI を実現している。

- 多目的最適化アルゴリズムの検討・開発

一般的に、多目的最適化の結果であるパレートフロントを描くためには、集団で探索する進化計算手法がよいとされている。MORSe では、RC がもつ「学習にかかるコストが低い」という特徴から、進化計算手法の「MOEA/D」(図 2)を採用した。オリジナルの MOEA/D は連続変数のみに対応しているが、HPO の探索対象となるハイパーパラメータには「連続値・整数値・カテゴリ変数」が混在するため、混合変数への拡張を行った。また、ESN はハイパーパラメータを変えると計算性能が大きく変わることがあり、ブラックボックス関数最適化問題における「変数間相互作用」と同様の問題が生じていると考える。これに対し、MOEA/D 内の交叉手法についてオリジナルの SBX (Simulated Binary Crossover) 以外にも拡張し、変数間相互作用の影響を加味した独自の混合変数ベンチマーク関数を用いて有用性を確認したうえで、混合変数および変数間相互作用に対応した MOEA/D 拡張を実装した。

MOEA/D処理フローチャート

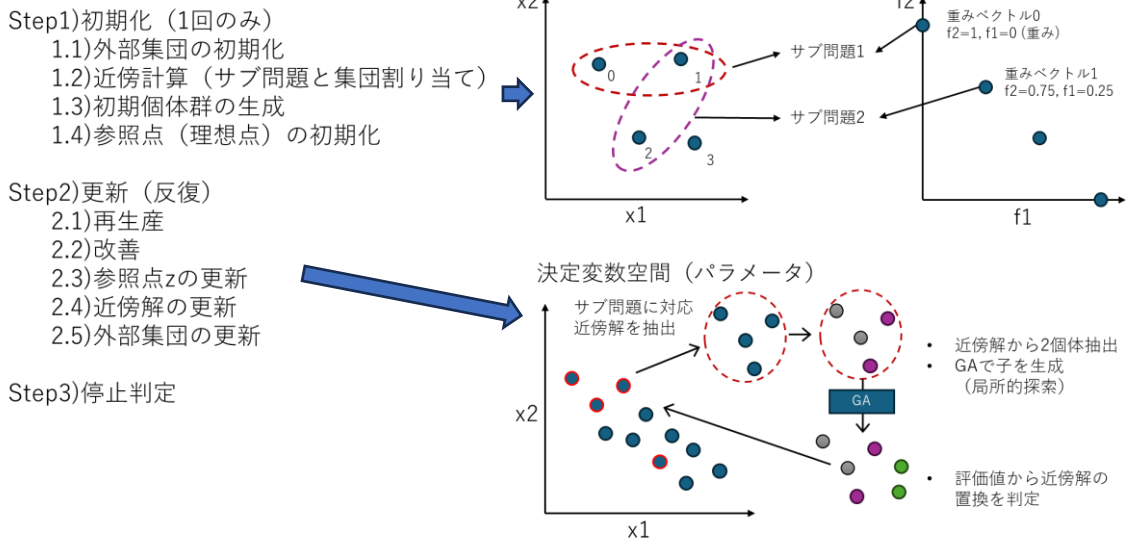


図 2. MOEA/D 処理フローチャート：MOEA/D は多目的最適化問題を単目的最適化の問題に分解してパレートフロントを求める。

- ユーザー独自のタスク・ESN への対応

MORSe には、ユーザーが行いたい独自のタスクや、ESN 実装を追加できる仕組みを持たせている (図 3)。ユーザーは、タスク抽象クラスを継承し、ESN の学習とその評価結果 (精度・誤差やノード数など) を返す処理を記述するのみで、複雑な多目的最適化アルゴリズムなどを意識することなく、HPO と可視化を行うことができる。

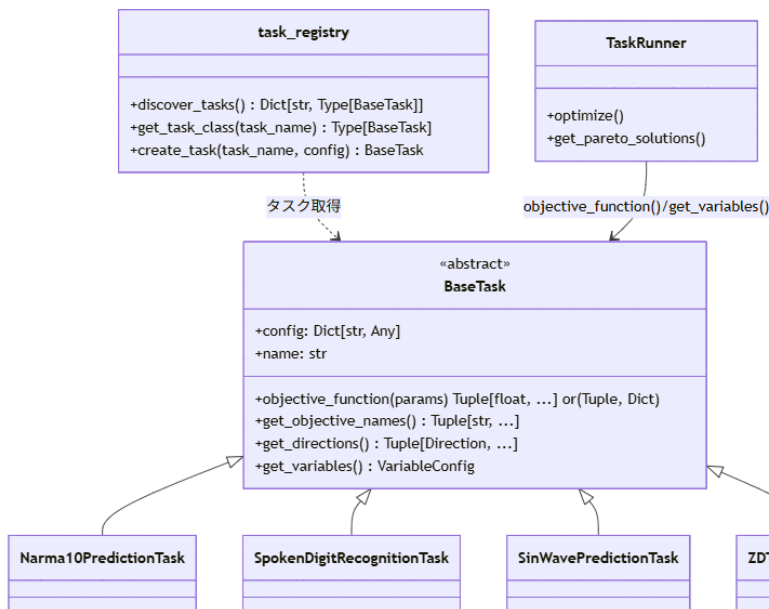


図 3. タスク抽象クラス：BaseTask を継承した具象クラスを作ることによって MORSe からは動的に HPO 対象として認識される。

4. 新規性・優位性

既存の HPO ソフトウェアでは、ESN 向けに多目的最適化や分析機能が十分に整備されていない。ESN 開発フレームワークである ReservoirPy に備わっている HPO は単一指標のみを対象とするのに対し、MORSe は精度とノード数など複数の評価指標を同時に最適化し、その結果をパレートフロントとして可視化することで、ユーザーが行いたいタスクに適したハイパーパラメータを選択できる環境を提供する。汎用的な最適化フレームワークである Optuna でも多目的最適化が可能であり、同一タスクにおいて同等のパレートフロントが得られることを確認した。一方、MORSe では、リザーのネットワーク指標など ESN に特化した分析機能を備えており、ユーザーのハイパーパラメータ選択における解釈・意思決定を支援することができる。第三者評価として、有識者に開発中の MORSe を提示してヒアリングを行ったところ、「公開された場合、使ってみたいか」という質問に対し、平均 4.3/5 (n=3) という肯定的な評価を得た。

5. 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

従来の属人的かつ経験的な調整が必要な ESN の HPO に対し、MORSe は多目的最適化と可視化・分析機能を通じて、探索からタスクに適したハイパーパラメータの選択までを支援する。これにより開発負荷の軽減が見込まれる。さらに、エッジデバイスなど計算資源や消費電力に厳しい制約がある環境においても、性能とコストを両立する「適材適所な AI」の設計を容易にし、製造業をはじめとして様々な分野での ESN の利活用を前進させる価値を提供することが期待される。

6. 氏名 (所属)

- ・ 富田 教幸 (株式会社リコー リコーフューチャーズBU インキュベーションセンター 兼 株式会社 PFU 事業開発本部 次世代事業開発室 技術開発部)
- ・ 砂山 洋祐 (株式会社 PFU コーポレートガバナンス本部 法務・知財統括部 知的財産権部 兼 事業開発本部 次世代事業開発室 技術開発部)

(参考) 関連 URL

- ・ MORSe, <https://github.com/tomitomi3/MORSe> (3 月公開準備中)