修士論文概要書

Master's Thesis Summary

Date of submission: 01/11/2022 (MM/DD/YYYY)

専攻名（専門分野） Department	経営システム 工学専攻	氏 名 Name	良川　太河 Taiga Yoshikawa	指 導 教 員 Advisor	後藤　正幸　　印 Seal
研究指導名 Research guidance	情報数理応用研究	学籍番号 Student ID number	CD 5221C046-2		
研究題目 Title	入力依存の分散を考慮したベイズ最適化によるビジネス施策決定モデルの提案 A Proposal of Business Decision-Making Model by Bayesian Optimization Considering Input-Dependent Dispersion				

1. はじめに

近年，オンラインショッピングサイトでは，利益向上のために様々なビジネス施策が行われている．クーポンの発行やポイントの還元などがこれらのビジネス施策に該当し，管理者はクーポンの割引額やポイントの還元額を設定してビジネス施策を行う．このとき，クーポンの割引額などの施策内容は利益に大きな影響を与えるため，利益最大化のためにこれらのビジネス施策を最適化することが重要な課題となっている．従来，実施される施策は経験的な知見に基づき設計されることが多かった．しかし，経験則に基づく属人的な判断は，必ずしも利益を最大化する施策に結びつくとは限らない．そこで，過去のビジネス施策の結果をもとに利益などのアウトカムを最大化するビジネス施策の決定方法が求められている．その方法の 1 つに，入力をビジネス施策，出力をアウトカム変数とした関数を推定し，最適な入力を探索する機械学習のアプローチが存在する．しかし，このような関数は一般的に未知である上に，初めて施策を打つ場合には関数を推定するための学習データが存在しない．そこで，逐次的に学習データを追加しつつ，入力の逐次最適化を行う手法が近年注目されている．

このような入力の逐次最適化手法の 1 つにベイズ最適化 [1] が挙げられる．ベイズ最適化では，学習データから出力の事後分布を推定し，獲得関数と呼ばれる評価指標に基づき，関数の推定と最適化に寄与すると考えられる次のデータ点を決定する．このとき，任意の入力に対する出力は一意に推定されるのではなく，学習データから推定される関数の事後確率を基にした平均と分散を用いて，事後分布により表現される．得られた分布から次のデータの候補点を算出し，データの追加を繰り返すことにより，効率的な入力の逐次最適化を可能にしている．

通常のベイズ最適化は，同一の入力に対する出力が確定的な関数を想定している．その一方で，ビジネス施策を行った際に得られる結果は，その日の状況や，施策を打つ対称群によってアウトカム変数が変化する不確実性を有するため，各入力ごとに出力がばらつきを持つ．そのため，入力に依存する出力の誤差分散を考慮して関数を推定する必要がある．このような手法の 1 つに，Heteroskedastic Gaussian Process[2] (以下 hetGP) が挙げられる．hetGP は，学習データから入力ごとの出力の誤差分散を計算することで，出力が確定的ではなく不確実性を持つ場合でも関数推定を行うことが可能となる．

そのため，ビジネス施策最適化においては hetGP を関数推定法として用い，適切な獲得関数に従って逐次的にデータを取得していくことで，ベイズ最適化を行えば良いと考えられる．しかし，同一の入力に対する出力が確定的な通常の獲得関数を想定した場合，推定に hetGP を適用しても，最適なデータ点を算出することができない．また，hetGP で推定した関数を用いて効率的なビジネス施策最適化を行うためには，通常のベイズ最適化では扱われることのない，各入力の誤差分散の推定精度や一度の探索点における施策対象者数の差異などの，ビジネス施策特有の指標を考慮した最適化を行う必要があると考えられる．

そこで，本研究では hetGP に対して，これらのビジネス施策特有の状況を考慮可能な獲得関数を提案する．はじめに，出力の誤差分散を考慮するために hetGP を用いて関数の推定を行う．その後，データ数に依存する誤差分散の推定精度を考慮するために，hetGP で推定された分散に対して各入力ごとのデータ数による重みを掛け合わせる．最後に，各入力を選択した際の取得データ数を考慮するために，次のステップで各入力のデータが追加された場合の分散の更新率を獲得関数に組み込む.

提案手法により，これまでベイズ最適化では扱われていなかった入力に依存する誤差分散を持つ関数データに対しても効率的な探索を行うことで，ビジネス施策の規則的な最適化が可能になると考えられる．本稿においては，実際のビジネス施策を想定した人工データに対して提案手法を適用し，その有効性を検証する．

2. 準備

ここでは，出力の事後分布を示す関数推定法であるガウス過程回帰と，入力の最適化を行う手法であるベイズ最適化，入力に依存した出力の分散を考慮できる hetGP について概要を示す．

2.1. 変数定義

本研究では，商品販売を想定したビジネス施策を行った際に，利益などのアウトカム変数を最大化する施策を推定するという問題設定を対象とし，これを前提として変数の定義を行う．ここでは，離散のビジネス施策を入力ベクトル $\boldsymbol{x}$ で表し，r 人に施策を打った場合の利益総額を出力 y とする．このときの r 人の集合を 1 ブロックと定義し，以後，1 ブロックを 1 データとする．現状観測されているサイズ $n(\geq 0)$ の学習データ集合を $(\boldsymbol{X}^n, \boldsymbol{Y}^n) = \{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}_{i=1}^n$ とし，入力 $\boldsymbol{x}$ と出力 y の間の関係性 $y = f(\boldsymbol{x}) + \epsilon_{\boldsymbol{x}}$ を推定する．ここで i はデータ番号を，$\epsilon_{\boldsymbol{x}}$ は入力 $\boldsymbol{x}$ に依存する誤差を示し，$\mathbb{E}[\epsilon_{\boldsymbol{x}}] = 0$ である．また，全体の学習データ数 n に対して，入力 $\boldsymbol{x}$ におけるデータ数を $n_{\boldsymbol{x}}$，入力 $\boldsymbol{x}$ における出力 y の平均を $\mu(\boldsymbol{x})$，分散を $\sigma^2(\boldsymbol{x})$ とする．

2.2. ガウス過程回帰

ガウス過程回帰は，入力 $\boldsymbol{x}$ と出力 y の間にある関数 $y = f(\boldsymbol{x})$ を推定する手法の 1 つである．ガウス過程回帰は以下の式 (1)〜式 (4) で表される．ガウス過程回帰の最も重要な特徴として，任意の入力の集合 $\boldsymbol{X}^n = \{\boldsymbol{x}_i\}_{i=1}^n$ が与えられたとき，対応する出力 $\boldsymbol{Y}^n = \{y_i\}_{i=1}^n$ の同時分布 $p(Y^n)$ が多変量ガウス分布に従うという点が挙げられる．これにより，関数のベイズ事後確率に基づく不確実性を表現することが可能である． また，ここでの $k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}), \mathbf{k}(\mathrm{x}), \mathbf{K_N}$ は入力 $\boldsymbol{x}$ に依存した共分散を表す．

$$y \sim N(\mu(\boldsymbol{x}), \sigma^2(\boldsymbol{x})) \tag{1}$$

$$\mu(\boldsymbol{x}) = \mathbf{k}(\mathbf{x})^\top(\mathbf{K}_\mathrm{N}^{-1} + \boldsymbol{\Sigma}_\mathbf{N})\mathrm{Y} \tag{2}$$

$$\sigma^2(\boldsymbol{x}) = k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) - \mathbf{k}(\mathbf{x})^\top(\mathbf{K}_\mathrm{N} + \boldsymbol{\Sigma}_\mathbf{N})^{-\mathbf{1}}\mathbf{k}(\mathrm{x}) \tag{3}$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_\mathbf{N} = \mathrm{Diag}(\epsilon, \cdots, \epsilon) \tag{4}$$

2.3. ベイズ最適化

ベイズ最適化 [1] は，最適化を行いたい関数が陽に与えられない場合に，ガウス過程回帰により関数をデータから学習しつつ，少ない試行回数でその関数の大域的最適解の推定を行う手法である. ベイズ最適化では，ガウス過程回帰によって得られた関数に対し，獲得関数と呼ばれる関数を用いて大域的最適解の推定において最適な入力を推定する．

以下に, 獲得関数の 1 つである GP-UCB[3] を示す．GP-UCB では，推定した関数から得られる平均 $\mu(\boldsymbol{x})$ と分散 $\sigma^2(\boldsymbol{x})$ を基に，それまでに得られている情報に基づく最適解付近 (活用) と，新たな情報を得ることに寄与する新規点 (探索) の選択をバランス良く行う獲得関数である．GP-UCB を式 (5) に示す．このとき，κ は活用と探索のバランスを決めるハイパーパラメータである．

$$UCB(\boldsymbol{x}) = \mu(\boldsymbol{x}) + \kappa\sigma(\boldsymbol{x}) \tag{5}$$

2.4. Heteroskedastic Gaussian Process

Heteroskedastic Gaussian Process (以下，hetGP)[2] は，入力に依存した誤差分散 $\epsilon_{\boldsymbol{x}}$ を考慮したガウス過程回帰モデルである．hetGP では，通常のガウス過程回帰で推定される出力の事後確率に寄与する共分散 $\mathbf{K}_\mathrm{N}^{-1}$ に，推定した誤差分散 $\hat{\epsilon}(\boldsymbol{x})$ を足し合わせることで，出力の分散 $\sigma^2(\boldsymbol{x})$ に出力の事後確率と入力依存の誤差分散を考慮している．ここで，各入力点 $\boldsymbol{x}_l$ における平均 $\hat{\mu}(\boldsymbol{x}_l)$ と誤差分散 $\hat{\epsilon}(\boldsymbol{x}_l)$ は，式 (6) で算出される．ここで，$y_l^{(j)}$ は入力 $\boldsymbol{x}_l$ に対する j 番目のデータの出力を，$\bar{y}_l$ を入力 $\boldsymbol{x}_l$ における出力の平均を表す.

$$\hat{\mu}(\boldsymbol{x}_l) = \frac{1}{n_{\boldsymbol{x}_l}}\sum_{j=1}^{n_{\boldsymbol{x}_l}} y_l^{(j)}, \hat{\epsilon}(\boldsymbol{x}_l) = \frac{1}{n_{\boldsymbol{x}_l} - 1}\sum_{j=1}^{n_{\boldsymbol{x}_l}}(y_l^{(j)} - \bar{y}_l)^2 \tag{6}$$

hetGP では，学習データが存在する領域の入力依存の誤差分散 $\hat{\epsilon}(\boldsymbol{x})$ は式 (6) で定義した値を用いる一方で，それ以外の領域では入力を $\boldsymbol{x}$，出力を分散 $\hat{\epsilon}(\boldsymbol{x})$ とした新たな関数をガウス過程回帰で推定し，元のガウス過程回帰に組み込むことで関数全体の入力に依存した誤差分散を推定している．hetGP は以下の式 (7)〜式 (14) で定義される.

$$y \sim N(\mu(\boldsymbol{x}), \sigma^2(\boldsymbol{x})) \tag{7}$$

$$\mu(\boldsymbol{x}) = \mathbf{k}(\mathbf{x})^\top(\mathbf{K}_N^{-1} + \boldsymbol{S})\mathrm{Y} \tag{8}$$

$$\sigma^2(\boldsymbol{x}) = k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) - \mathbf{k}(\mathbf{x})^\top(\mathbf{K}_N + \boldsymbol{S})^{-1}\mathbf{k}(\mathbf{x}) \tag{9}$$

$$\hat{\epsilon}(\boldsymbol{x}) \sim N(\delta(\boldsymbol{x}), \gamma^2(\boldsymbol{x})) \tag{10}$$

$$\delta(\boldsymbol{x}) = \mathbf{k}(\mathbf{x})^\top\mathbf{K}_\mathrm{N}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_\sigma \tag{11}$$

$$\gamma^2(\boldsymbol{x}) = k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) - \mathbf{k}(\mathbf{x})^\top(\mathbf{K}_\mathrm{N} + \boldsymbol{\Sigma}_\sigma)^{-1}\mathbf{k}(\mathbf{x}) \tag{12}$$

$$\boldsymbol{S} = \mathrm{Diag}(\hat{\epsilon}(\boldsymbol{x}_1)/n_{\boldsymbol{x}_1}, \cdots, \hat{\epsilon}(\boldsymbol{x}_N)/n_{\boldsymbol{x}_N}) \tag{13}$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_\sigma = \mathrm{Diag}(\epsilon', \cdots, \epsilon') \tag{14}$$

3. 提案手法

3.1. 従来手法の問題点

ビジネス施策においては，その日の状況や，施策を打つ対称群によって結果がばらつきを持つなど，入力に依存して出力が誤差分散を持つ．それに対して，2.4 節で述べた hetGP は，入力に依存する出力の誤差分散を考慮した関数推定法であるが，hetGP で推定した関数をベイズ最適化に用いる研究は未だ発展していない.

通常，ベイズ最適化における獲得関数は，関数の分散として表現される不確実性を最適解付近で減少させていくことで最適化を進めている．しかし，hetGP で表現される分散は，出力の事後確率と誤差分散の両方を合わせた不確実性を表現しているため，誤差分散が存在する領域の分散はデータを取得しても減少しない．そのため，通常の獲得関数では最適化が上手く進行しない．また，hetGP では，各入力において誤差分散が適切に推定されている必要があるが，従来のベイズ最適化では誤差分散の推定精度に関する指標が存在しないため，誤差分散の推定精度を判断することができない．さらに，ビジネス施策の場合では，入力である施策額によって，1 ステップの予算における取得データ数が異なることが考えられる．これは，通常のベイズ最

適化の「1 ステップに 1 つのデータを取得する」という仮定に当てはまらないため，本問題設定に適した最適化法の提案が望まれる．

3.2. 提案の着想

本研究では，3.1 節で示した問題点を考慮した上で，商品販売を想定したビジネス施策を対象とし，利益などのアウトカム変数を最大にする施策を導出可能な獲得関数を提案する．3.1 節で示したビジネス施策において考慮すべき特性は以下の通りである．

- 誤差分散の推定精度の考慮
- 入力による取得できるデータ数 $A_{\boldsymbol{x}}$ の考慮

ここで，$A_{\boldsymbol{x}}$ は問題設定によって決定される，入力 $\boldsymbol{x}$ における 1 ステップでの取得データ数である．また，出力に対する誤差分散を持つデータを対象とする場合には，入力の最適解の定義が複数考えられるが，本研究では出力の期待値が最大となる入力を最適解とする．

本提案において，前者の特性については hetGP で推定した入力に依存した分散にその入力のデータ数による重みを掛けることで，データ数による誤差分散の推定精度を考慮した分散を推定する．また，後者の特性を考慮するため，入力に依存する取得データ数を考慮した分散の更新率を獲得関数に組み込む．

3.3. 獲得関数

3.3.1. 誤差分散の推定精度の考慮

hetGP においてデータ数による誤差分散の推定精度を考慮するために，hetGP で推定した入力依存の分散 $\epsilon_h(\boldsymbol{x})$ に，データ数に依存した項を掛け合わせる．更新後の分散 $\epsilon_p(\boldsymbol{x})$ を，以下の式 (15) に示す．ここで，β はデータ数による不確実性の大きさを決めるハイパーパラメータである．

$$\epsilon_p(\boldsymbol{x}) = \left(1 - \frac{n_{\boldsymbol{x}}}{n} + \beta\right)\epsilon_h(\boldsymbol{x}) \tag{15}$$

ここでは，入力ごとのデータ数が多いときには誤差分散の推定精度が高いと考えられるため，更新後の分散 $\epsilon_p(\boldsymbol{x})$ が小さく計算され，その入力におけるデータは取得されにくくなる．一方で，データ数が少ないときには誤差分散の推定精度は低いと考えられるため，更新後の分散 $\epsilon_p(\boldsymbol{x})$ は大きく計算され，その入力におけるデータが取得されやすくなる．

3.3.2. 取得データ数を考慮した分散の更新率の考慮

3.3.1 節で定義した分散 $\epsilon_p(\boldsymbol{x})$ を基に，入力に依存する取得データ数を考慮した分散の更新率を計算する．ここで，ステップ t における分散 $\epsilon_p(\boldsymbol{x})$ を $\epsilon_{p,t}(\boldsymbol{x})$ とすると，ステップ $t+1$ における分散 $\epsilon_{p,t+1}(\boldsymbol{x})$ は以下の式 (16) で表されるとする．

$$\epsilon_{p,t+1}(\boldsymbol{x}) = \left(1 - \frac{n_{\boldsymbol{x}} + A_{\boldsymbol{x}}}{n + A_{\boldsymbol{x}}} + \beta\right)\epsilon_h(\boldsymbol{x}) \tag{16}$$

このとき，ステップ t における分散 $\epsilon_{p,t}(\boldsymbol{x})$ とステップ $t+1$ における分散 $\epsilon_{p,t+1}(\boldsymbol{x})$ の差分を計算することで，次のステップにおいてデータを取得した場合の分散の更新率を計算する．この更新率が大きいほど 1 ステップにおける最適化の進度が大きくなるため，最適化への寄与度を表現できると考えられる．

$$\begin{aligned}\epsilon_{p,t}(\boldsymbol{x}) - \epsilon_{p,t+1}(\boldsymbol{x}) &= \left(\frac{n_{\boldsymbol{x}} + A_{\boldsymbol{x}}}{n + A_{\boldsymbol{x}}} - \frac{n_{\boldsymbol{x}}}{n}\right)\epsilon_h(\boldsymbol{x}) \\ &= \frac{A_x(n - n_{\boldsymbol{x}})}{n(n + A_{\boldsymbol{x}})}\epsilon_h(\boldsymbol{x}) \end{aligned} \tag{17}$$

よって，取得データ数に依存した更新率は式 (17) の $\epsilon_h(\boldsymbol{x})$ における係数部分となる．

3.3.3. 提案する獲得関数

提案手法における獲得関数 $B(\boldsymbol{x})$ は，以下の式 (18) で定義する．

$$B(\boldsymbol{x}) = \mu(\boldsymbol{x}) + \alpha\left(1 + \frac{A_x(n - n_{\boldsymbol{x}})}{n(n + A_{\boldsymbol{x}})}\right)\left(1 - \frac{n_{\boldsymbol{x}} + A_{\boldsymbol{x}}}{n + A_{\boldsymbol{x}}} + \beta\right)\epsilon_h(\boldsymbol{x}) \tag{18}$$

ここでは，第 1 項で関数の期待値を，第 2 項で取得データ数に基づく分散の更新幅を考慮している．特に，第 2 項の前半部分は，入力に依存する取得データ数による分散の更新率を示しており，第 2 項の後半部分は入力に属するデータ数による誤差分散の推定精度を考慮した分散を示している．すなわち，第 1 項では出力の最大値への近さを，第 2 項では属するデータ数に基づく誤差分散の推定精度と，その入力を選択した際の分散の更新幅を基に，入力の最適化への寄与度を示している．α は第 1 項と第 2 項のバランスを決めるハイパーパラメータである．

また，提案手法を用いたベイズ最適化アルゴリズムを以下に示す．

提案手法のアルゴリズム

手順 1 学習データ集合 Z の初期値を設定する．

手順 2 学習データ集合 Z を用いて hetGP を学習する．

手順 3 式 (18) で定義された $B(\boldsymbol{x})$ を用いて，最適な次の入力点を推定する．

手順 4 手順 3 で推定した入力において，データを $A_{\boldsymbol{x}}$ 個取得し，学習データ集合 Z に追加する．

手順 5 最大ステップ数 S に達していればアルゴリズム終了，そうでなければ手順 2 に戻る．

4. 人工データによる評価実験

本章では，1 次元変数 x で表されるビジネス施策を想定した人工データを用いて，提案手法の有意性について示す．

表 1: ステップごとの各手法が示す最適解 x^*

ステップ数 s	GP-UCB(κ=3)	GP-UCB(κ=9)	GP-UCB(κ=20)	提案 ($\alpha = 3, \beta = 0.5$)	提案 ($\alpha = 3, \beta = 0.2$)	提案 ($\alpha = 9, \beta = 0.5$)
3	300	500	200	500	**600**	500
5	300	500	200	**600**	700	700
10	300	500	200	**600**	800	700
15	700	500	200	**600**	800	700
20	**600**	500	200	**600**	800	700

表 2: 人工データセット概要

費用 x（円）	購買確率 p の期待値	購買確率 p の分散	取得データ数 A_x	真の利益の期待値 y（千円）
100	0.02	0.005	100	280
200	0.05	0.020	50	325
300	0.10	0.030	33	400
400	0.18	0.050	25	495
500	0.30	0.020	20	600
600	0.42	0.100	16	630
700	0.50	0.200	14	571
800	0.55	0.200	12	481
900	0.58	0.050	11	387
1000	0.62	0.100	10	310

4.1. 問題設定

本研究においては，初めて施策を打つことを想定し，過去実績に基づく学習データがない場合におけるビジネス施策の最適化実験を行う．本実験では，粗利（販売価格と原価の差分）が 1,500 円の商品に対し，費用が x である施策を施策対象者 100 人に打つことで，表 2 に示す一定の割合で商品が購買され，総額 y 円の利益が得られるという状況を仮定する．このとき，施策対象となった 100 人を 1 ブロックとし，これを 1 つのデータとみなす．なお，本実験における 1 ステップでの予算は 1,000,000 円とし，この予算と費用 x から 1 ステップにおける入力に依存した取得データ数 $A_{\boldsymbol{x}}$ が算出されている．なお，購買確率 p は，入力ごとの購買確率の期待値と分散に基づく正規分布に従うと仮定し，各ステップごとにサンプリングを行う．

本実験の目的は，利益 y を最大とするビジネス施策のパラメータ x の探索である．3.2 節に示す最適解の定義と，表 2 の真の利益の期待値により，本問題設定における最適解は $x^* = 600$ のときとなる．

4.2. 実験条件

本実験では，初期の学習データが存在しない状態を仮定したベイズ最適化に基づき，実験を行う．最大ステップ数は $S = 20$ とし，比較手法には 2.3 節で扱った GP-UCB を用いる．GP-UCB におけるハイパーパラメータ κ は 3, 9, 20 の 3 通りで実験を行った．一方提案手法におけるハイパーパラメータ α, β は (3, 0.5)，(3, 0.2)，(9, 0.5) の 3 通りで実験を行った． 評価指標はステップ数 s が 3, 5, 10, 15, 20 のときの最適解とした．

4.3. 実験結果と考察

表 1 に各手法に関するステップ数ごとの最適解を示す．また，図 1 に一部の従来手法と提案手法の探索の過程を示す．この図においては，丸い点が取得したデータ点を示す．表 1 より，提案手法は従来手法に比べ，少ないステップ数

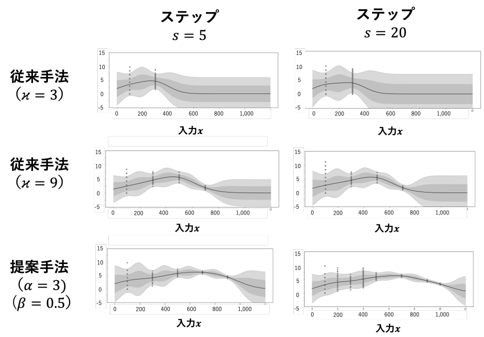

図 1: 従来手法と提案手法の探索の比較

で最適解の探索を行えていることが読み取れる．また，図 1 より，提案手法は従来手法に比べ，様々な入力において探索を行っていることが読み取れる．これは，従来手法の獲得関数が不確実性の高い領域の探索を行ったあとに，その部分の不確実性を表す分散が減少することを仮定しているため，本問題設定のように入力に依存する誤差分散が存在する場合には不確実性の減少が起きず，同じ入力を何度も探索してしまうためだと考えられる．その一方で，提案手法はたとえ入力に依存する誤差分散が大きい入力でも，分散にデータ数による不確実性の重みをかけているため，不要な繰り返しの探索を避けることができていると考えられる．

5. 結論と今後の課題

本研究では，ビジネス施策最適化という問題設定を対象として，ビジネス施策最適化で扱われるデータの特徴に対応した，効率的な入力の最適化法を提案した．提案手法では，データ数による不確実性を考慮した分散を推定すると共に，入力に依存する取得データ数を考慮した不確実性の更新率を獲得関数に組み込んだ．その後，人工データを用いて提案手法の有用性を示した．今後の課題としては，連続的な入力や，より複雑な状況設定におけるビジネス施策の最適化法の考案などが挙げられる．

参考文献

[1] 金子弘昌．Python で学ぶ実験計画法入門 ベイズ最適化によるデータ解析．講談社, 2021.

[2] Mickaël Binois and Robert B Gramacy. hetGP: Heteroskedastic gaussian process modeling and sequential design in R. 2021.

[3] Niranjan Srinivas, Andreas Krause, Sham M Kakade, and Matthias Seeger. Gaussian process optimization in the bandit setting: No regret and experimental design. *arXiv preprint arXiv:0912.3995*, 2009.