

不等式制約を伴う選好ベイズ最適化

Preferential Bayesian Optimization with Inequality Constraints

岩井皓暉^{*1}
Koki Iwai熊谷雄介^{*1}
Yusuke Kumagai小山裕己^{*2}
Yuki Koyama濱崎雅弘^{*2}
Masahiro Hamasaki後藤真孝^{*2}
Masataka Goto^{*1}株式会社博報堂 DY ホールディングス
Hakuhodo DY Holdings Inc.^{*2}産業技術総合研究所
National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

Preferential Bayesian Optimization (PBO) is a method for creating efficient human-in-the-loop optimization systems that treat human preferences as an objective function to be maximized. PBO has been successfully applied to simple design scenarios. However, design tasks often involve more complex challenges where finding the optimal design requires considering not only subjective preferences but also design constraints. This paper presents a new method to integrate additional criteria in the form of inequality constraints into PBO. We specifically propose a new acquisition function to enable this integration. Our evaluation using synthetic functions shows that our method identifies optimal solutions by effectively focusing on feasible solutions.

1. はじめに

選好ベイズ最適化 (Preferential Bayesian Optimization; PBO) は、人間の主観的な好ましさを目的関数として扱い、人間が評価者として振る舞う **human-in-the-loop 最適化** を実現する手法である [Brochu 07, Koyama 22a, Koyama 22b]. PBO は、ベイズ最適化 (Bayesian Optimization; BO) [Shahriari 16] の派生手法であり、BO が目的関数の絶対評価 (評価値そのもの) を観測データとして扱うのに対し、PBO では目的関数の相対評価 (評価値の大小関係) を観測データとして扱う。人間は絶対評価よりも相対評価が得意であるため、人間の主観的な好ましさを扱う問題設定において、PBO はより適した手法である。

これまでに、写真の色調補正 [Koyama 20]、照明デバイスの設定 [Yamamoto 22]、アニメーションデザインの生成 [Brochu 10] など、デザイナーの主観的な好ましさのみを考慮するシンプルなデザインタスクで PBO が用いられてきた。

一方で、デザイナーは主観的な好ましさに加え、デザインの性能も考慮して最適なデザインを発見したいケースがある。例えば、バナー広告のデザイン制作では、デザイナーは主観的な好ましさと、クリック率 (Click-Through Rate; CTR) などの、生活者の反応による客観的な指標の良さとの、両方が備わった広告クリエイティブの制作を目指す。この例において、デザイナーが好むデザインであれば必ずしも CTR が高くなるとは限らず、高い CTR を伴うものの好ましくないデザインも存在する。このように、デザイナーの主観的な好ましさと、デザインの性能は相関するとは限らず、それぞれを適切に考慮する必要がある。

しかし、従来の選好ベイズ最適化手法では、相対的な好ましさの情報と、それ以外の複数の指標とを同時に考慮することができない。つまり、デザイナーの主観的な好ましさという単一の指標しか考慮できず、デザインの性能などの指標を最適化に組み込むことができない。

そこで本研究では、選好ベイズ最適化に不等式制約という形式で別の指標を組み込むことを可能にする最初の手法を提案する。具体的には、選好ベイズ最適化のための獲得関数である EUBO (Expected Utility of the Best Option) [Lin 22] を拡張して不等式制約を扱えるようにする定式化を行う。さらに、テスト関数を用いたシミュレーション実験により、提案手法の数理的な側面を評価する。

2. 関連研究

本章では、ベイズ最適化とその派生手法である選好ベイズ最適化、制約付きベイズ最適化 (Constrained Bayesian Optimization; CBO) について説明する。

2.1 ベイズ最適化

ベイズ最適化 [Shahriari 16] は、式として陽に表わせないブラックボックス関数 f を効率的に最適化するための手法である。ベイズ最適化では、これまでに観測されたデータをもとに次に観測すべき探索点が決定され、これを反復することで最終的な解が得られる。比較的少ない反復回数で解を得られることから、1 回あたりの観測に高いコスト (金銭のコスト、時間のコストなど) がかかる問題に適用されることが多い。

典型的な数理最適化問題と同様、以下の最適化問題を考える。

$$\mathbf{x}^* = \underset{\mathbf{x}}{\operatorname{argmin}} f(\mathbf{x}) \quad (1)$$

ここで $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ であり、また、目的関数はその値 $f(\mathbf{x})$ のみが観測可能である。

ベイズ最適化では、ブラックボックス関数に代理モデルとある確率モデルを仮定し、観測されたデータからベイズ推論によって代理モデルを更新する。代理モデルとしては、幅広い関数の形状を柔軟に表現できるという利点からガウス過程 [Rasmussen 05] がよく用いられ、本研究でもガウス過程を採用する。

そして、更新された代理モデルを用いて構成される獲得関数を最大化することで、次に観測すべき探索点を求める。獲得関数は、直感的には次の探索点の良さを表す関数であり、ベイズ

連絡先: 岩井皓暉, 株式会社博報堂 DY ホールディングス, 107-6322 東京都港区赤坂 5-3-1 赤坂 Biz タワー, koki.iwai@hakuhodo.co.jp

最適化において探索点を決めるための重要な関数である。獲得関数の設計では、まだ目的関数の振る舞いが未知の領域の探索と、すでに目的関数値が良いことが分かっている有望な領域の活用とのトレードオフが考慮される。これまでに、このトレードオフを考慮した多岐にわたる BO の獲得関数が提案されている [Shahriari 16]。

2.2 選好ベイズ最適化

選好ベイズ最適化 [Brochu 07, Koyama 22a] は、ベイズ最適化において特に、目的関数値 $f(\mathbf{x})$ 自体を観測することができず、複数の探索点における目的関数値の選好、つまり相対評価のみが得られる場合を前提とした手法である。本稿では特に、一対比較により 1 度の観測で 2 点間の選好が得られるものとする。

この前提において、ある選好データ $d = \mathbf{x}^{(i)} \succ \mathbf{x}^{(j)}$ ($\mathbf{x}^{(i)}$ のほうが $\mathbf{x}^{(j)}$ より好まれた) が得られたときの尤度は、Thurstone-Mosteller model [Chu 05] を用いた場合に以下で表すことができる。

$$P(d|f) = \Phi\left(\frac{f(\mathbf{x}^{(i)}) - f(\mathbf{x}^{(j)})}{\sqrt{2}\sigma}\right) \quad (2)$$

ここで、 $\Phi(\cdot)$ は標準正規分布の累積分布関数であり、 σ はガウシアンノイズの標準偏差である。複数の選好データ $\mathcal{D} = \{d_1, d_2, \dots\}$ が得られたときの尤度は $P(\mathcal{D}|f) = \prod_i P(d_i|f)$ となる。この尤度を用いて、通常の BO と同様に代理モデルを更新することができる [Rasmussen 05, Chu 05]。

これまで、PBO のための獲得関数がいくつか提案されてきた。PBO の最初の研究 [Brochu 07, Brochu 10] では、標準的な BO の獲得関数である期待改善 (Expected Improvement; EI) を PBO に適用させている。Dueling-Thompson sampling [Gonzalez 17] は、多腕バンディットアルゴリズムで用いられる Thompson Sampling を応用している。Multi Predictive Entropy Search [Nguyen 21] は、情報量を用いた BO の獲得関数を PBO に応用している。本研究では効率の高さと計算の簡便さが備わっているという点から、EUBO [Lin 22] をベースとした獲得関数を提案する。

EUBO は以下のような閉形式で表すことができる。

$$\begin{aligned} \text{EUBO}(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)}) &= \mathbb{E}[\max\{f(\mathbf{x}^{(i)}), f(\mathbf{x}^{(j)})\}] \\ &= \Delta\Phi\left(\frac{\Delta}{\sigma}\right) + \sigma\phi\left(\frac{\Delta}{\sigma}\right) + \mu^f(\mathbf{x}^{(j)}) \end{aligned} \quad (3)$$

ここで、 $\phi(\cdot)$ は標準正規分布の確率密度関数であり、 $\Delta = \mathbb{E}[f(\mathbf{x}^{(i)}) - f(\mathbf{x}^{(j)})]$ 、 $\sigma^2 = \text{Var}[f(\mathbf{x}^{(i)}) - f(\mathbf{x}^{(j)})]$ 、 $\mu^f(\mathbf{x}^{(j)}) = \mathbb{E}[f(\mathbf{x}^{(j)})]$ である。

2.3 制約付きベイズ最適化

制約付きベイズ最適化は、ブラックボックスな制約関数 $c(\mathbf{x})$ による制約を伴った設定でのベイズ最適化である。具体的には、制約の閾値を λ 、 $c(\mathbf{x}) \leq \lambda$ を制約条件として、以下の問題設定を考える。

$$\mathbf{x}^* = \underset{\mathbf{x}}{\operatorname{argmin}} f(\mathbf{x}) \quad \text{s.t.} \quad c(\mathbf{x}) \leq \lambda \quad (4)$$

CBO のための獲得関数である EIC (Expected Improvement with Constraints) [Gardner 14] では、制約関数 $c(\mathbf{x})$ をガウス過程でモデリングし、EI に制約の実現可能性を乗算した。

$$\text{EIC}(\mathbf{x}^{(i)}) = P(c(\mathbf{x}^{(i)}) \leq \lambda) \text{EI}(\mathbf{x}^{(i)}) \quad (5)$$

本研究はこの考えを PBO に応用したものである。

Algorithm 1 CPBO with pairwise comparison queries

Result: An optimal parameter set \mathbf{x}^*

- 1: Set X to random points
- 2: Query constraint function to obtain $c(X)$
- 3: Update c
- 4: **for** $n=1,2,\dots$, **do**
- 5: select new $\mathbf{x}_{n+1}^{(i)}, \mathbf{x}_{n+1}^{(j)}$ by optimizing EUBOC

$$\mathbf{x}_{n+1}^{(i)}, \mathbf{x}_{n+1}^{(j)} = \underset{\mathbf{x}}{\operatorname{argmax}} \text{EUBOC}(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)})$$

- 6: Ask the evaluator to compare $\mathbf{x}_{n+1}^{(i)}$ and $\mathbf{x}_{n+1}^{(j)}$
- 7: Query constraint function to obtain $c(\mathbf{x}_{n+1}^{(i)})$ and $c(\mathbf{x}_{n+1}^{(j)})$
- 8: **if** $c(\mathbf{x}_{n+1}^{(i)}) \leq \lambda$ **then**
- 9: $\mathbf{x}^* \leftarrow \min(\mathbf{x}^*, \mu^f(\mathbf{x}_{n+1}^{(i)}))$
- 10: **end if**
- 11: **if** $c(\mathbf{x}_{n+1}^{(j)}) \leq \lambda$ **then**
- 12: $\mathbf{x}^* \leftarrow \min(\mathbf{x}^*, \mu^f(\mathbf{x}_{n+1}^{(j)}))$
- 13: **end if**
- 14: Update f and c
- 15: **end for**

3. 提案手法

本稿では制約付き選好ベイズ最適化 (Constrained Preferential Bayesian Optimization; CPBO) を提案する。(4) 式と同様の定式化を考えるが、CBO と異なり $f(\mathbf{x})$ を直接観測できない PBO を前提とした問題設定を考える。また、 $c(\mathbf{x})$ は人間の主観によらず客観的に定まり、直接観測できる問題設定を考える。

3.1 獲得関数

CPBO のための新たな獲得関数として、PBO の獲得関数である EUBO と EIC を数理的に統合した **EUBOC (Expected Utility of the Best Option with Constraints)** を提案する。具体的には、EUBO に対して 2 点の制約の実現可能性を乗算することを考える。

$$\begin{aligned} \text{EUBOC}(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)}) \\ = P(c(\mathbf{x}^{(i)}) \leq \lambda, c(\mathbf{x}^{(j)}) \leq \lambda) \text{EUBO}(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)}) \end{aligned} \quad (6)$$

制約関数 $c(\cdot)$ にガウス過程を仮定すると、 $(c(\mathbf{x}^{(i)}), c(\mathbf{x}^{(j)}))$ は 2 変量正規分布に従う。したがって、不等式制約を満たす確率を以下となる。

$$\begin{aligned} P(c(\mathbf{x}^{(i)}) \leq \lambda, c(\mathbf{x}^{(j)}) \leq \lambda) \\ = \int_{-\infty}^{\lambda} \int_{-\infty}^{\lambda} P(c(\mathbf{x}^{(i)}), c(\mathbf{x}^{(j)})) dc(\mathbf{x}^{(i)}) dc(\mathbf{x}^{(j)}) \end{aligned} \quad (7)$$

ガウス過程を仮定していることから、一般に $c(\mathbf{x}^{(i)}), c(\mathbf{x}^{(j)})$ の間には相関が存在する。しかし、2 変量正規分布の累積分布関数の値を解析的に導出することは困難である。ここでは、 $c(\mathbf{x}^{(i)}), c(\mathbf{x}^{(j)})$ が互いに無相関であるとした以下の近似を行う。

$$\begin{aligned} P(c(\mathbf{x}^{(i)}) \leq \lambda, c(\mathbf{x}^{(j)}) \leq \lambda) \\ \approx \int_{-\infty}^{\lambda} P(c(\mathbf{x}^{(i)})) dc(\mathbf{x}^{(i)}) \int_{-\infty}^{\lambda} P(c(\mathbf{x}^{(j)})) dc(\mathbf{x}^{(j)}) \\ = \Phi\left(\frac{\lambda - \mu^c(\mathbf{x}^{(i)})}{\sigma^c(\mathbf{x}^{(i)})}\right) \Phi\left(\frac{\lambda - \mu^c(\mathbf{x}^{(j)})}{\sigma^c(\mathbf{x}^{(j)})}\right) \end{aligned} \quad (8)$$

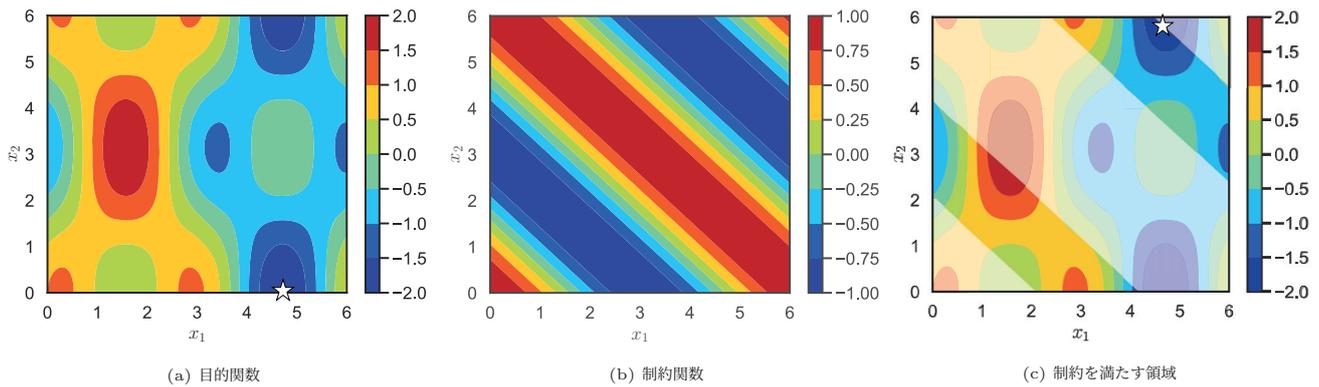


図 1: 評価で用いるテスト関数. (a) に目的関数, (b) に制約関数を示している. (c) では目的関数に制約関数を重ね合わせており, 薄く白く塗られた領域は制約を満たさない領域を示している. また, (a) における星印は目的関数の最小値を示し, (c) における星印は制約を満たす最適解を示している.

ここで, $\mu^c(\mathbf{x}^{(i)}) = \mathbb{E}[c(\mathbf{x}^{(i)})]$, $\sigma^c(\mathbf{x}^{(i)}) = \sqrt{\text{Var}[c(\mathbf{x}^{(i)})]}$,
 $\mu^c(\mathbf{x}^{(j)}) = \mathbb{E}[c(\mathbf{x}^{(j)})]$, $\sigma^c(\mathbf{x}^{(j)}) = \sqrt{\text{Var}[c(\mathbf{x}^{(j)})]}$ である.

3.2 アルゴリズム

本研究では制約関数の評価には人間が介入しないことを想定しているため, 人間が介入する最適化の反復を開始する前に制約関数を事前学習しておくことが可能である. これにより, 制約に関しての不確実性が低い状態で最適化を始めることができるため, 最適化の効率が向上することが期待できる. 探索空間のランダムな点を用いて制約関数の事前学習を行った予備実験により, このアプローチが有効であることが確認できたため, 我々はこのアプローチを採用する. Algorithm 1に提案のアルゴリズムを示す. なお提案手法は, 制約関数を事前学習せずに最適化の反復の中で学習するアプローチ [Gardner 14] とともに用いることも可能である.

4. 実験

提案手法が不等式制約条件を満たす解を発見できることを確認し, その効率性を評価するために, テスト関数を用いたシミュレーション実験を行う.

4.1 条件

テスト関数として, EIC [Gardner 14] の実験で用いられた関数を採用する. 具体的には, 目的関数として以下を用いる.

$$f(x_1, x_2) = \cos(2x_1) \cos(x_2) + \sin(x_1) \quad (9)$$

また, 制約関数としては以下を用いる.

$$c(x_1, x_2) = \cos(x_1) \cos(x_2) - \sin(x_1) \sin(x_2) \quad (10)$$

不等式制約条件は $c(x_1, x_2) \leq -0.5$ とし, 探索空間は $x_1, x_2 \in [0.0, 6.0]$ とする. 図 1に目的関数, 制約関数, 制約を満たす領域を示す.

提案手法は一対比較を観測することを前提としているため, 目的関数については 2つの探索点間の大小関係のみが得られるとする. 一方, 制約関数については $c(x_1, x_2)$ の値が観測できるとする.

比較対象の手法として, 選好ベイズ最適化の獲得関数である EUBO (ただし制約条件を考慮できない) と, ランダムサンプリング (制約条件を満たさないときにはサンプリング点を棄却する) による探索を考える.

評価指標としては, 以下を用いる.

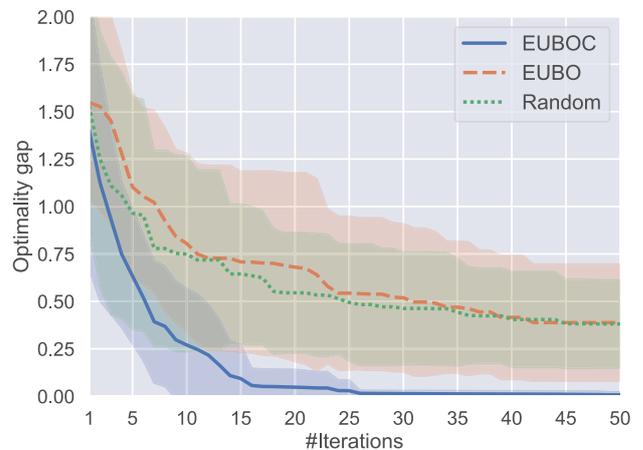


図 2: 最適解との絶対誤差. 横軸にイテレーション, 縦軸に最適解との絶対誤差を示しており, この値が小さいほど良い. 各手法ごとに 50 回のイテレーションを初期値を変えて 20 回シミュレーションし, 線分が平均, 薄く塗りつぶされている領域が標準偏差を示している. 提案手法は実線で示している.

- 最適解との絶対誤差 (Optimality gap): 各イテレーションにおける, これまでの最適解との絶対誤差の最小値
- 制約を満たすサンプル点の割合 (Feasible): 各イテレーションにおける, これまでの累積での制約を満たしたサンプル点の割合

最適解との絶対誤差を用いて, 各手法がどの程度効率的に最適解を探索できるかを評価する. また, 制約を満たすサンプル点の割合を用いて, 提案手法が適切に制約を満たす探索空間からサンプルできているかどうかを評価する.

イテレーション回数は 50 回とし, 初期値を変えて 20 回シミュレーションを行い, 平均と標準偏差を用いて評価する.

4.2 結果

図 2に, 各手法の最適解との絶対誤差の推移を示す. 提案手法では, 15 回程度の反復で最適解との誤差が 0.1 程度, 25 回程度の反復で誤差がほとんど 0 となり, 比較的少ない反復回数で最適解へ収束していることがわかる. 一方, EUBO や Random では, 50 回のイテレーションで最適解へ上手く到達できない. EUBO で Random と同程度の誤差となる理由として, 今回のテスト関数では目的関数の最小値は制約を満たさない領域であり, 制約を考慮しない EUBO でその周辺の探索回数が増えることで, 上手く最適解との誤差を小さくできないためであると

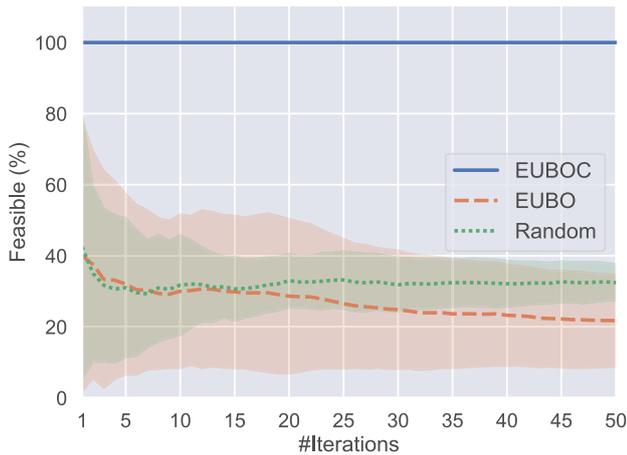


図 3: 制約を満たすサンプル点の割合. 横軸にイテレーション, 縦軸に制約を満たすサンプル点の割合を示しており, この値が大きいほど制約を満たす点を探索できている. 各手法ごとに 50 回のイテレーションを初期値を変えて 20 回シミュレーションし, 線分が平均, 薄く塗りつぶされている領域が標準偏差を示している. 提案手法は実線で示している.

考えられる. また, 提案手法では標準偏差が他より小さくなっており, どの初期値から始めたとしても少ない反復回数で最適解へ収束することがわかる.

図 3 に, 各手法の制約を満たすサンプル点の割合の推移を示す. 提案手法では, 全てのイテレーションで制約を満たす領域のみを探索している. これは, 提案手法で事前にランダムな点の制約関数の値を観測しており, 制約関数の形状を学習できているためであると考えられる. EUBO で Random よりも制約を満たす割合が小さくなるのは, 制約を満たさない目的関数の最小値付近の探索回数が増えるためであると考えられる.

5. 議論

5.1 実問題への適用

本稿では, 数理的な側面の評価としてシミュレーション実験の結果のみを報告した. 提案手法は, 特定のデザイン問題に閉じない汎用的な手法であると考えているが, 実問題に適用した際の有用性の評価についてはさらなる研究が必要である.

5.2 高次元空間での探索効率

本稿では, テスト関数として 2 次元の低次元な探索空間を用いた評価結果を報告した. 一方, 実際のデザインタスクではより高次元な探索空間となることが想定される. 高次元な探索空間における BO は一般に困難であることが知られている [Binois 22] が, CPBO においてより高次元な探索空間での挙動についてはさらなる検証が必要である.

5.3 1 度に比較する探索点の数

提案のフレームワークは, PBO における最も簡単な問題設定である一対比較を前提としたが, 1 度により多くの探索点を評価することによって探索効率を高められる可能性がある [Koyama 20, Nguyen 21]. 特に, qEUBO [Astudillo 23] は EUBO の発展的な獲得関数で, 多くの探索点を 1 度にサンプルすることができ, これを拡張して CPBO に適用できるかどうかはさらなる研究が必要である. また, 1 度により多くの探索点を評価することで探索効率を高めることができる一方, 実際のデザインタスクを想定すると, 評価を行うデザイナーの認知負荷は増大することが予想され, これらのトレードオフを適切に考慮する必要がある.

6. おわりに

本稿では, 選好ベイズ最適化に不等式制約という形式で別の指標を組み込むことを可能にする手法を提案した. 実験では, 提案手法が制約を上手く考慮した上で, 効率的に最適解を探索している様子を示した. 今後, 実問題への適用を含め提案の応用可能性について検証する.

参考文献

- [Astudillo 23] Astudillo, R., Lin, Z. J., Bakshy, E., and Frazier, P. I.: qEUBO: A Decision-Theoretic Acquisition Function for Preferential Bayesian Optimization, in *Proc. AISTATS* (2023)
- [Binois 22] Binois, M. and Wycoff, N.: A Survey on High-dimensional Gaussian Process Modeling with Application to Bayesian Optimization, *ACM Trans. Evol. Learn. Optim.*, Vol. 2, No. 2, pp. 1–26 (2022)
- [Brochu 07] Brochu, E., De Freitas, N., and Ghosh, A.: Active Preference Learning with Discrete Choice Data, in *Proc. NeurIPS* (2007)
- [Brochu 10] Brochu, E., Brochu, T., and De Freitas, N.: A Bayesian Interactive Optimization Approach to Procedural Animation Design, in *Proc. ACM SIGGRAPH/Eurograph. Symp.* (2010)
- [Chu 05] Chu, W. and Ghahramani, Z.: Preference Learning with Gaussian Processes, in *Proc. ICML* (2005)
- [Gardner 14] Gardner, J. R. and Kusner, M. J.: Bayesian Optimization with Inequality Constraints, in *Proc. ICML* (2014)
- [Gonzalez 17] Gonzalez, J., Dai, Z., Damianou, A., and Lawrence, N. D.: Preferential Bayesian Optimization, in *Proc. ICML* (2017)
- [Koyama 20] Koyama, Y., Sato, I., and Goto, M.: Sequential Gallery for Interactive Visual Design Optimization, *ACM Trans. Graph.*, Vol. 39, No. 4, pp. 88:1–88:12 (2020)
- [Koyama 22a] Koyama, Y., Chong, T., and Igarashi, T.: Preferential Bayesian Optimisation for Visual Design, in Williamson, J. H., Oulasvirta, A., Kristensson, P. O., and Banovic, N. eds., *Bayesian Methods for Interaction and Design*, chapter 8, pp. 239–258, Cambridge University Press (2022)
- [Koyama 22b] Koyama, Y. and Goto, M.: BO as Assistant: Using Bayesian Optimization for Asynchronously Generating Design Suggestions, in *Proc. UIST* (2022)
- [Lin 22] Lin, Z. J., Astudillo, R., Frazier, P. I., and Bakshy, E.: Preference Exploration for Efficient Bayesian Optimization with Multiple Outcomes, in *Proc. AISTATS* (2022)
- [Nguyen 21] Nguyen, Q. P., Tay, S., Low, B. K. H., and Jaillet, P.: Top- k Ranking Bayesian Optimization, in *Proc. AAAI* (2021)
- [Rasmussen 05] Rasmussen, C. E. and Williams, C. K. I.: *Gaussian processes for machine learning*, Adaptive Computation and Machine Learning series, MIT Press (2005)
- [Shahriari 16] Shahriari, B., Swersky, K., Wang, Z., Adams, R. P., and De Freitas, N.: Taking the Human Out of the Loop: A Review of Bayesian Optimization, *Proc. IEEE*, Vol. 104, No. 1, pp. 148–175 (2016)
- [Yamamoto 22] Yamamoto, K., Koyama, Y., and Ochiai, Y.: Photographic Lighting Design with Photographer-in-the-Loop Bayesian Optimization, in *Proc. UIST* (2022)