

令和 4 年 6 月 1 日現在

機関番号：10101

研究種目：若手研究

研究期間：2018～2021

課題番号：18K18099

研究課題名（和文）確率的多腕バンディット設定における効率的な良腕識別手法の開発とその応用

研究課題名（英文）Development of efficient multi-armed bandit algorithm for good arm identification and its application

研究代表者

田畑 公次 (Koji, Tabata)

北海道大学・電子科学研究所・准教授

研究者番号：20814445

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,300,000円

研究成果の概要（和文）：本研究は、多腕バンディットという選択と観測を交互に繰り返しながら知識利用と探索のトレードオフを解消するモデルにおいて、与えられた閾値よりも大きな平均報酬を持った選択肢（良腕）を発見するための効率的な手法の開発とその応用のための研究である。ここで効率が良いというのはできるだけ少ない回数で良腕を発見することである。
良腕が存在するかどうかの判定手法と分類バンディットに関してはアルゴリズムの開発と理論解析を行った。また、本研究により開発されたアルゴリズムを使った診断装置の試作機の開発を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

学術的意義としては、病理診断に応用することを考慮した新しい問題設定とそのための良腕探索アルゴリズムの開発を行った。本研究により開発された手法は、病理診断だけではなく、品質保証、品質管理、創薬などへも応用可能である。

また、情報計測の分野にとって避けられない偽陽性・偽陰性が扱えるように、多腕バンディットアルゴリズムの平均報酬にバイアスが存在するような設定を新規に開拓した。

研究成果の概要（英文）：The purpose of this research is development and application of efficient methods to identify good arms, whose expected reward is larger than a given threshold, under the multi-armed bandit setting which is a model of trade-off between knowledge exploration and exploitation. Here, an efficient method means that it can identify the good arm as few samples as possible.

We confirmed that our proposed methods have better performance than existing method. We have also developed a prototype diagnostic device using the algorithm developed in this research.

研究分野：機械学習

キーワード：多腕バンディット 良腕識別 分類バンディット

1. 研究開始当初の背景

近年、癌・非癌などの細胞診においてラマンスペクトラムを特徴に用いた識別が有効であることを示す研究の報告があったが、ラマンイメージング技術を迅速な病理診断へ応用することは、計測時間の長さが大きな障壁となっており、診断の迅速化は喫緊の課題となっていた。

2. 研究の目的

本研究の主目的は、多腕バンディットにおける腕で所与の閾値より大きなものを決定する問題(良腕識別問題)を応用することにより、細胞の癌・非癌の病理診断を迅速な行う手法を確立することであった。これを実現するため、以下の目標を達成するよう研究を進めてきた。(1) 誤診断率の上界の保証を与えたラマンスペクトラムによる病理診断を、固定信頼度設定の良腕識別問題として定式化すること。(2) 定式化した良腕識別問題を解くための効率的なアルゴリズムの開発と理論解析し、シミュレーション実験によりその効果の検証を行うこと。

3. 研究の方法

病理診断はイメージングとは違い、全ピクセルの情報を必要としない。そこで、本研究では診断に必要な計測を間引くことにより診断の高速化を実現する手法の開発を行った。具体的な病理診断の手続きは以下のように行う。図1のように試料をグリッドに分けたときに、「異常である指標」のグリッド内平均が一定の閾値を超えるものがあれば病気と判定し、そのようなグリッドが一つもなければ病気ではないと判断する。

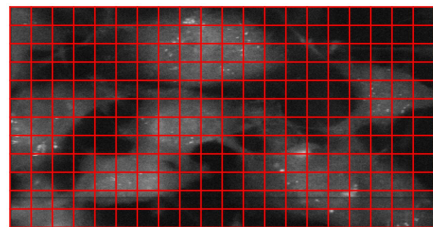


図 1. ヒト甲状腺癌のラマン分光イメージとそのグリッド分割。各グリッドを確率的多腕バンディット設定における腕として扱う。

この手続きで病気の可能性が高いグリッドを集中的に測定することができれば、グリッド内の平均値は早く推定でき、結果そのグリッドが病気であると診断できれば、測定の大部分を省略することができる。

本研究では、この診断を良腕識別問題として定式化し、どのグリッドを選択するかを逐次提案する多腕バンディットアルゴリズムと、任意に与えられた誤診断率 δ に対してアルゴリズムの出力の信頼度が $1 - \delta$ 以上であることを保証する停止条件を開発する。そして、理論解析により、停止までに必要な計測回数の任意のアルゴリズムによる下界と開発したアルゴリズムによる上界の理論的評価を行うとともに、シミュレーション実験による従来法との比較を行った。

4. 研究成果

本研究の成果として以下を挙げる。

- 事前に計測されたラマン分光イメージを用いて、新たに計測したラマンスペクトラムに対してそれが「異常である指標」を計算する手法を確立した。
- 事前に計測されたラマン分光イメージから癌・非癌の診断に適したグリッド分割のサイズや閾値を設定する方法を確立した。

- 良腕識別問題の一つの定式化として、閾値よりも大きなものが存在するかどうかを決定する良腕存在チェック問題を定義し、この問題を効率的に解くアルゴリズムを開発し、アルゴリズムのサンプル複雑性に関する理論解析を行った。またシミュレーション実験により従来法よりも良いパフォーマンスを示すことを確認した[1]。

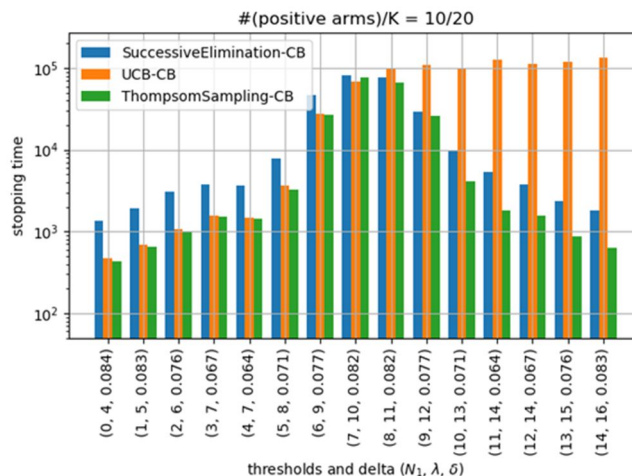


図 2. 腕の個数が $K = 20$ のときに N_1, λ, δ (x軸ラベルに表記) を様々に変えたときの停止時間(y軸)を計測したシミュレーション実験($N_2 = N_1 + 5$)。各設定で 100 回の実行の平均を取っている。停止時間は小さい方がアルゴリズムのパフォーマンスがよい。提案手法(ThompsonSampling-CB)は比較手法に比べて良いことが分かる。

- グリッド内の報酬平均による診断自体に偽陰性・偽陽性による誤診断が起こりえる状況に対応するため、与えられた任意の自然数 N_1, N_2 に対して、異常な腕の個数が N_1 個以下か、 $N_2 (> N_1)$ 個以上かを決定する二つの個数の閾値を持った問題設定(2 閾値分類バンディット)の定式化を行い、これを一つの個数の閾値 λ だけを持った、平均報酬が閾値以上の腕が λ 個以上かどうかを判定する問題へ還元する方法の提案を行い、この問題を効率的に解くアルゴリズムを開発し、シミュレーション実験により従来法よりも良いパフォーマンスを示すことを確認した(図 2)[2]。
- より実際の診断の設定に合わせるため、各時刻で一度に複数点が照射できる設定でのパフォーマンスの低下を抑えるようにアルゴリズムの修正を行ったほか、計測機器による制約を考慮した調整や非還元抽出を考慮した停止条件の改善などを行った。
- ラマン計測装置上に開発したアルゴリズム通りの照射を行うプログラムの実装を行い、病理診断の実証実験を行い、高速化ができていることを確認した。

<引用文献>

- [1] KOJI TABATA, ATSUYOSHI NAKAMURA, TAMIKI KOMATSUZAKI, "CLASSIFICATION BANDITS: CLASSIFICATION USING EXPECTED REWARDS AS IMPERFECT DISCRIMINATORS", PACIFIC-ASIA CONFERENCE ON KNOWLEDGE DISCOVERY AND DATA MINING: PAKDD 2021 INTERNATIONAL WORKSHOPS: PAKDD 2021 WORKSHOPS, WSPA, MLMEIN, SDPRA, DARAI, AND AI4EPT, 57-69, 2021.
- [2] KOJI TABATA, ATSUYOSHI NAKAMURA, JUNYA HONDA AND TAMIKI KOMATSUZAKI, "A BAD ARM EXISTENCE CHECKING PROBLEM: HOW TO UTILIZE ASYMMETRIC PROBLEM STRUCTURE?", MACHINE LEARNING, 109(2), 327-372, 2020.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

| | |
|---|-----------------------|
| 1. 著者名 Tabata, K., Nakamura, A., Honda, J. Komatsuzaki, T. | 4. 巻 109 |
| 2. 論文標題 A bad arm existence checking problem: How to utilize asymmetric problem structure? | 5. 発行年 2020年 |
| 3. 雑誌名 Journal of Machine Learning Research | 6. 最初と最後の頁 327-372 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s10994-019-05854-7 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

〔学会発表〕 計5件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件）

| |
|--|
| 1. 発表者名 Koji Tabata |
| 2. 発表標題 Classification Bandits: Classification Using Expected Rewards as Imperfect Discriminators |
| 3. 学会等名 PAKDD2021 Workshop on Machine Learning for MEasurement INformatics（国際学会） |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 Koji Tabata, Atsuyoshi Nakamura, Tamiki Komatsuzaki |
| 2. 発表標題 Bad Arm Existence Checking Algorithm with Bandit Feedback |
| 3. 学会等名 The 20th RIES-HOKUDAI International Symposium（国際学会） |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 田畑 公次, 中村 篤祥, 小松崎 民樹 |
| 2. 発表標題 非対称なグレイゾーン付き悪腕存在チェックアルゴリズム |
| 3. 学会等名 離散構造処理系プロジェクト「2019年度 初夏のワークショップ」 |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 田畑 公次, 中村 篤祥, 小松崎 民樹 |
| 2. 発表標題 バンディットフィードバック下での良腕悪腕の個数による分類問題 |
| 3. 学会等名 第22回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS 2019) |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|------------------------------------|
| 1. 発表者名 田畑 公次, 中村 篤祥, 小松崎 民樹 |
| 2. 発表標題 非対称性を利用した悪腕存在チェックアルゴリズム |
| 3. 学会等名 平成30年度 情報論的学習理論と機械学習研究会 |
| 4. 発表年 2018年 |

〔図書〕 計0件

〔出願〕 計0件

〔取得〕 計1件

| | | |
|------------------------------------|--|---------------|
| 産業財産権の名称 計測制御装置、分光計測装置、及び計測制御方法 | 発明者 中村 篤祥、田畑 公次、小松崎 民 樹、藤田 克昌 | 権利者 同左 |
| 産業財産権の種類、番号 特許、特開2020-106370 | 取得年 2020年 | 国内・外国の別 国内 |

〔その他〕

6. 研究組織

| 氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号) | 所属研究機関・部局・職 (機関番号) | 備考 |
|---------------------------|-----------------------|----|
|---------------------------|-----------------------|----|

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

| 共同研究相手国 | 相手方研究機関 |
|---------|---------|
|---------|---------|