

IPW を用いた医療における多種類介入のバイアス除去学習

05001222 東京工業大学 *住谷有規 SUMIYA Yuki
東京工業大学 近藤謙将 KONDO Kensho
株式会社ログビー 松田敦義 MATSUDA Atsuyoshi
01405430 東京工業大学 中田和秀 NAKATA Kazuhide

1. はじめに

近年、ビックデータの活用が様々な業界で行われている。医療業界も例外ではなく、蓄積された電子カルテなどのデータを活用する動きが広がっている。活用は多岐に渡るが、その中の一つに治療効果予測が挙げられる。患者ごとに治療の効果を事前に予測することができれば、治療方針の意思決定の助けとなることが期待される。

重症患者には大規模な治療や強力な薬剤を投与し、軽傷患者にはそのような介入が行われることは多くない。このように医療の現場では、一般的に患者の「状態」から医師の「介入」が決定される。そして、患者の「状態」および医師の「介入」は、疾病の発症や重症度といった「結果」に影響を与える。この一連のプロセスにおいて注目すべきは、医師の「介入」が患者の「状態」に依存していることであり、医師の意思決定の傾向が背景に存在している医療データにはこのような「バイアス」の存在が考えられる。「結果」を予測するタスクについて、バイアスが生じているデータを用いて一般的な機械学習モデルで学習を行うと、モデルは元の傾向とは異なる事象（介入）が生じた場合に正しく予測を行うことが困難になる。

以上の内容を踏まえて、本研究ではデータに存在しているバイアスを除去しながら学習ができる手法に関して分析を行う。一般的に介入が1種類の場合を想定した学習方法が多く報告されているが、本研究では介入が多種類の場合に正しく学習を行うことを可能にする手法を提案する。実データでの適用を見据えつつ、まずはその前段階として人工データを用いた実験を行った。

2. 提案手法

2.1. IPW によるバイアス除去学習

本研究では、バイアスを除去した学習方法として、傾向スコアの逆数（Inverse Propensity Score,

以下 IPS）を各データの損失の重みにした重みづけ法である IPW（Inverse Probability Weighting, 以下 IPW）を用いる。IPW は近年機械学習の分野においても研究が進んでおり、例えば選択バイアスの存在するデータにおける推薦システムの学習・評価についての手法 [1] などが提案されている。

はじめに、医師の介入が1種類の場合を考える。患者 i ($i \in \{1, \dots, n\}$) の状態を $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ 、患者 i に対する医師の介入を $z_i \in \{0, 1\}$ （介入を施した場合に $z_i = 1$ 、施さなかった場合に $z_i = 0$ ）、患者 i に介入 z_i を適用した場合の結果を $y_i \in \mathbb{R}$ とすると、各患者の傾向スコアは、患者の状態 \mathbf{x}_i が与えられたときに医師の介入が z_i である確率 $p(z_i|\mathbf{x}_i)$ として定義される。そして、各患者のデータの損失 $L = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$ (\hat{y}_i は機械学習による結果の予測値) について IPW によって重み付けした

$$L_{IPW} = \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - \hat{y}_i)^2}{p(z_i|\mathbf{x}_i)} \quad (1)$$

を損失関数に用いることで、データのバイアスを取り除いた学習を行うことができる。

また、今回は医療の現場で用いることができる手法を開発することを目標にしている。多くの先行研究では1種類の介入を前提にしているが、医療の現場では通常、複数の介入が存在すると考えられる。介入の種類数を2以上とした場合、患者 i の介入は、 $\mathbf{z}_i = (z_{i1}, z_{i2}, \dots, z_{iK}) \in \{0, 1\}^K$ と表現できる。これより、患者 i の傾向スコアは $p(\mathbf{z}_i|\mathbf{x}_i)$ となり、(1) は次のように変形される。

$$L_{IPW} = \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - \hat{y}_i)^2}{p(\mathbf{z}_i|\mathbf{x}_i)} \quad (2)$$

本研究では、複数の介入が存在する状況において、(2) を損失関数として用いることを提案する。

2.2. 因果探索による傾向スコア評価

2.1 節で、複数の介入がある場合の傾向スコアを $p(\mathbf{z}|\mathbf{x})$ と定義した（この節では簡単のため患者を

指定する添字を外す). しかし, 介入の数が増えるとその組み合わせの数は指数的に増加し, データ数の観点から, すべての事例に対して1つの分類器で評価を行うことは困難になる. そこで, 各介入 z_k ($k \in \{1, \dots, K\}$) が状態 \mathbf{x} を与えたもとの条件付き独立であると仮定すれば,

$$p(\mathbf{z}|\mathbf{x}) = p(z_1|\mathbf{x}) \cdot p(z_2|\mathbf{x}) \cdots p(z_K|\mathbf{x}) \quad (3)$$

と K 個の2値分類器の値の積によって評価できる. しかし, 実際の介入 z_k が条件付き独立になるとは言い切れない. 例えば, 胃が荒れる副作用がある薬を処方したときに補助的に胃腸薬を処方するケースでは, 各介入 z_k が影響を及ぼしあっていると考える方が自然である. このように介入間が状態 \mathbf{x} を与えたもとの条件付き独立でない場合には, 介入間の因果構造を明らかにし, $p(\mathbf{z}|\mathbf{x})$ をより厳密に評価する必要がある (例えば, z_1 が z_2 より影響を与えられることが明らかになった場合, 上式 (3) の $p(z_1|\mathbf{x})$ の代わりに $p(z_1|\mathbf{x}, z_2)$ を用いる). そこで, その因果構造を明らかにする方法として, 本研究では因果探索を用いる方法を提案する.

2値変数における因果探索には, BExSAM[2] などの手法が有名だが, 今回の問題設定では適用することができない. また, 因果探索は変数が多くなるほど組み合わせの数が爆発的に増加し, 全探索は困難になる. そこで, 本研究では, 貪欲的に探索を行うことを提案する. 以下にそのアルゴリズム (Algorithm 1) と, イメージ (図1) を示す.

3. 数値実験

実データには各患者に対して反事実の介入事例が存在しないため, 手法の予測精度について定量評価を行うのは困難である. そのため本研究においては, 納得性が高く, かつ状況に応じて調整可能である人工データの生成方法を開発し, これを用いて各手法の評価を行った.

学習はバイアスのある (介入 \mathbf{z} が状態 \mathbf{x} から確率的に生成される) データを用いて行い, テストとしてバイアスのないデータにて結果 y を予測し, その精度を比較した. その結果, 提案手法は他の手法よりも高精度であり, 最もバイアスの影響を除去できていることを示した. 実験結果の詳細については, 発表会にて報告する.

Algorithm 1 貪欲アルゴリズム

Input: $p(z_k|\mathbf{x})$ ($k = 1, 2, \dots, K$), およびそれらの予測精度 (AUC など). 改善値の下限 Δ .

Output: 介入 z_k ($k = 1, 2, \dots, K$) 間の因果構造

- 1: **while** 最大の改善値 $\geq \Delta$ **do**
- 2: **for** $k = 1, 2, \dots, K$ **do**
- 3: **for** $k' = 1, 2, \dots, K$ ($k' \neq k$) **do**
- 4: **if** 因果関係 $z_{k'} \rightarrow z_k$ が元々存在せず, 加えても有向非巡回でない. **then**
- 5: z_k を目的とする予測に $z_{k'}$ を一時的に条件 (説明変数) として加え, z_k の予測精度およびその改善値を求める.
- 6: **end if**
- 7: **end for**
- 8: **end for**
- 9: 最大の改善値を得られる因果関係について, Δ 以上の場合に認め, 因果構造に加える.
- 10: **end while**

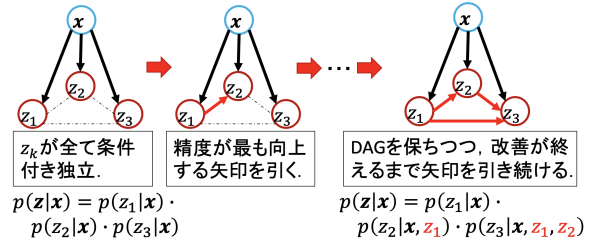


図 1: 提案アルゴリズムのイメージ

参考文献

- [1] T.Chnabel, A.Swaminathan, A.Singh, N.Chandak, T.Joachims, Recommendations as Treatments: Debiasing Learning and Evaluation, ICML'16 Proceedings of the 33rd International Conference on International Conference on Machine Learning - Vol.48, 1670–1679, 2016.
- [2] T.Inazumi, T.Washio, S.Shimizu, J.Suzuki, A.Yamamoto, Y.Kawahara, Discovering causal structures in binary exclusive-or skew acyclic models, In Proc. 27th Conf. on Uncertainty in Artificial Intelligence, 373–382, 2011.