九州工業大学大学院情報工学府 学際情報工学専攻 システム創成情報工学分野

学生番号	19677501	氏名	板橋	将之
論文題目	包除積分を利用したディープラーニングネットワークの表現力と解釈			

1 序論

この研究の目的は NN (ニューラルネットワーク) を用いた包除積分モデルを構築し、学習した 包除積分モデルから他の機械学習モデルとの相対的な精度の比較と、包除積分モデルから得られるシャープレイ値と XGBOOST で得られるgain や shap 値などの解釈手法と比較することを目的としている。比較対象となる機械学習モデルとしては SVM (サポートベクターマシン)、決定木、ランダムフォレスト、XGBOOST、全結合からなる NN を使用する。

2 数学的定義

 $\Omega = \{1,2,...,n\}$ を有限集合とする。

Aを有限集合、 $P(\Omega)$ を Ω のべき集合、 μ をファジィ測度、 \otimes を[0,K]上のt-ノルムとする。この時 Ω 上の非負有界関数f= $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_n) \in [0,K]^n$ の μ と \otimes による包除積分は

 $\otimes \int f d\mu = \sum_{A \in P(\Omega) \setminus \{\emptyset\}} M^{\otimes}(f|A)\mu(A),$ ただし、

$$M^{\otimes}(f|A) := \sum_{B \in P(\Omega), B \supset A} (-1)^{|B \setminus A|} \bigotimes_{i \in B} x_i,$$

で定義される。この式をメビウスの反転公式を を用いて変換すると包除積分は

$$\otimes \! \int f \, d\mu \! = \! \! \sum_{A \in P(\Omega) \setminus \{\!\! \emptyset \!\!\}} \! \left(\otimes_{i \in A} \! x_i \right) \! m^{\mu}(A),$$

ただし、

 $m^{\mu}(A) := \sum_{B \subset A} (\text{-}1)^{|B\text{-}A|} \mu(B).$

と変形でき、この時の $m^{\mu}(A)$ をエッジの重みとして学習させる。

3 提案手法モデル

包除積分を NN で構築するため図 1, 2 のようなネットワークモデルとした。メビウス型包除積

分モデル 1, 2 では入力層から前処理層にかけて 使用するネットワークが異なり、モデル 1 では前 処理層から出力される波形は sigmoid 関数に ax+b を引数として表現される単純な波形で出力 されるが、モデル 2 では複雑な波形も表現できる ように適当なユニット数の全結合を追加したモ デルとなっている。この二つのモデルを提案手法 モデルとして実験を行う。

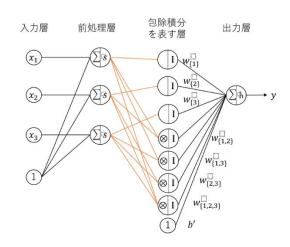


図1:メビウス型包除積分モデル1

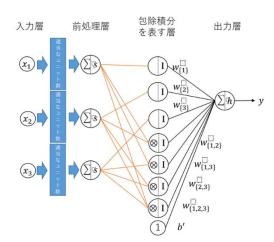


図2:メビウス型包除積分モデル2

4 実験

4.1 使用するデータ

回帰問題として、scikit-learn で提供されている「diabetes」(糖尿病)に関する 442 件のデータを使用し精度や解釈の比較を行った。目的変数は表 1 の 1 年後の疾患進行度とし、それ以外を説明変数としてy の予測を行う。

表 1: diabesets データの変数名

age	年齢	
sex	性別	
bmi	BMI値	
map	平均血圧	
tc	総コレステロール	
1d1	悪玉	
hd1	善玉	
tch		
1tg	血清に関する指標	
glu		
у	1年後の疾患進行度	

分類問題の実験に使用するデータは機械学習用のデータを取り扱っている kaggle で提供されている「Titanic」データを使用した。Titanic データは文字を含むデータセットとなっているため相関が強くなるようデータの調整を施しながら数値化し、次の表 2 のようにまとめた。

表 2: Titanic データの変数

× = . 110		<i>~</i>
目的変数	Survived	0 or 1
説明変数1	タイトルグループ	整数
説明変数2	性別	0 or 1
説明変数3	単独乗船	0 or 1
説明変数4	旅客等級	整数
説明変数5	乗船料金	実数
説明変数6	乗船港	0 or 1
説明変数7	Cabin	整数
説明変数8	Ticket	整数

4.2 実験内容

実験では用意した各データに対して様々な手 法で解析を行い表現力、汎化性能、解釈性につい て比較するため次のような実験を行った。

①提案手法の相対的な表現力を見るためデータ すべてを学習用に用いてどこまで精度を高める ことができるか各手法で実験し比較を行う。 ②提案手法の相対的な汎化性能を調べるために、各手法で 5 分割交差検証を行い平均絶対誤差や平均 2 乗誤差などの指標を用いて比較を行う。 ③他手法の学習モデルと提案手法の学習モデルから得られた解釈により比較を行う。また、シャープレイ値を拡張した値を求め、よりデータを詳細に解釈できるかどうか調べる。

5 結論

メビウス型包除積分モデル2はうまく学習で きず低い精度となってしまった。メビウス型包除 積分モデル1は(学習回数にもよるが)決定木の 深さ5~6程度の精度が得られた。汎化性能は回 帰問題ではテストデータでも優れおり、二値分類 問題では検証用データを考慮すると汎化性能に すぐれている結果が得られた。メビウス型包除積 分モデル2は回帰問題、二値分類問題のどちらで も低い精度となったためうまく学習できていな いと考えられる。そのため前処理層については初 期値を与えるなどの工夫が必要となってくる。解 釈性については重回帰よりも高い精度、汎化性能 を持ち XGBOOST とは同等、あるいはそれ以上の結 果を出しつつ、重回帰よりも正確に解釈でき XGBOOSTよりもより詳細にデータに対して解釈を 行うことができたと考えている。ただし、3 変数 間以上の関係性を図に示すことが難しいため 3 変数以上の解釈が困難であったが、それでも2変 数以下のものは 1 つの図にまとめることができ 新たな解釈を発見することができた。今後の課題 としては前処理層をどのように改良していくか、 単調性条件をどのように満たしていくかが問題 である。

6 参考文献

[1] 本田 あおい: "包除積分数理モデルを 用いた多変量データ解析",知能と情報(日本知能 情報ファジィ学会誌) Vol.30,No.4,pp.183-192,2018

[2] 藤本 勝成: "入門:ファジィ測度とその周辺-第3回:価値を表すファジィ測度(1)-", 知能と情報(日本知能情報ファジィ学会誌) Vol. 20, No. 4, pp. 601-608, 2008