

論 文 概 要

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

$\Omega = \{1, 2, \dots, n\}$ 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 $f = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in [0, K]^n$ 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、

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

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、

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

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。

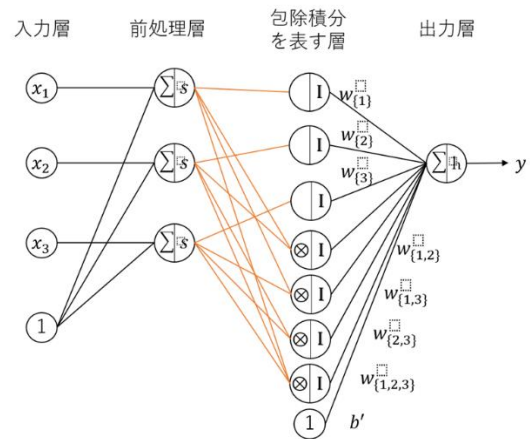


図 1：メビウス型包除積分モデル 1

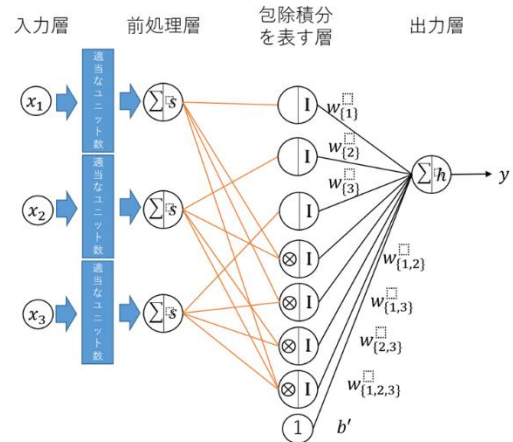


図 2：メビウス型包除積分モデル 2

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 : diabetes 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
ldl	悪玉
hdl	善玉
tch	血清に関する指標
ltg	
glu	
y	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

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] 室伏 敏明： “ファジィ測度を読む技術（Ⅲ）：相互作用指標”, 第 9 回ファジィシステムシンポジウム,pp.693-696,1993