

## 概要

Transformerベースの時系列予測技術Autoformerは高い性能を示しているが、その信頼度推定手法は明らかになっていない。Bayes by Backprop、Deep Ensemble、Monte Carlo Dropoutの3つの信頼度推定をAutoformerに適用した結果を報告する。

## 背景

## Autoformer[1]

- ▶ Transformer構成を用いた時系列予測機構
- ▶ 明示的に自己相関を利用
- ▶ 長い系列に対しても予測が可能

## 信頼度推定手法

- ▶ Bayes by Backprop[2]  
重みを平均値と分散で表現することで確率分布に拡張し、予測時に分布からのサンプリングを行うことで複数の観測値を得る。計算コストは通常のネットワークよりもやや大きい
- ▶ Deep Ensemble  
異なる初期値で複数のネットワークを訓練し、複数の予測値を得る。訓練時の計算量がネットワーク数に比例して増大する
- ▶ Monte Carlo Dropout  
推論時にもドロップアウトを適用して、複数の予測値を得る。訓練時には余分な計算量はかからない

## 実験設定

## データセットとタスク

- ▶ ETTh1: 変電気の温度変動 (15分ごと)
- ▶ 1日のデータで次の1日を予測
- ▶ 10個の予測値を得て、平均と分散を見る

## 予測結果

## Deep Ensemble

変動をよくトレースできている。ノーマルのAutoformerの挙動に近い

## Monte Carlo Dropout 30%

Dropout率によって正則化の強さが変わる。30%では正則化が強すぎて、変動に追従できていない

## Monte Carlo Dropout 20%

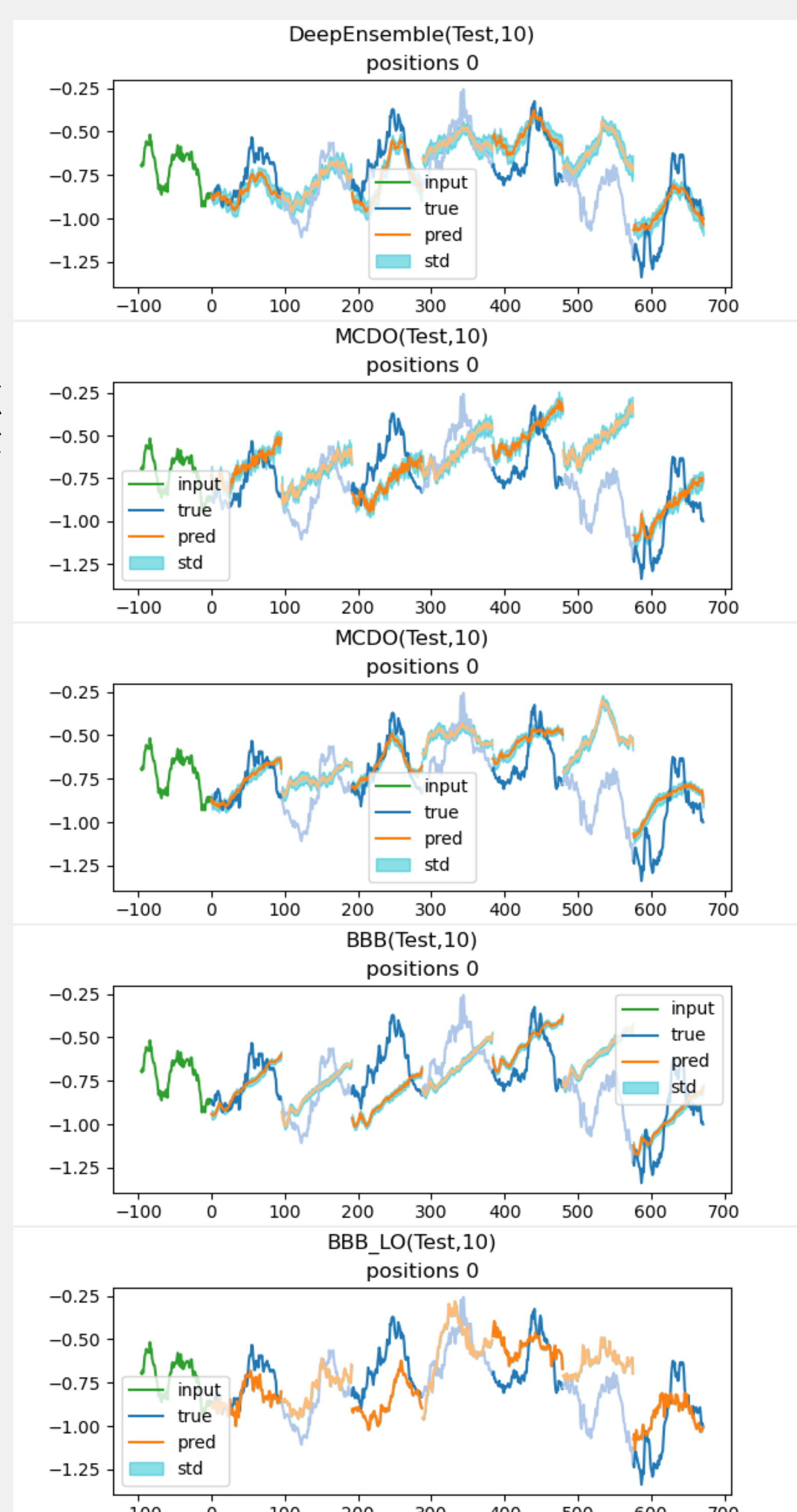
20%では正則化はそれほど強くない

## Bayes by Backprop 全層

周期変動に対応できていない。正則化が強すぎる

## Bayes by Backprop 最終層

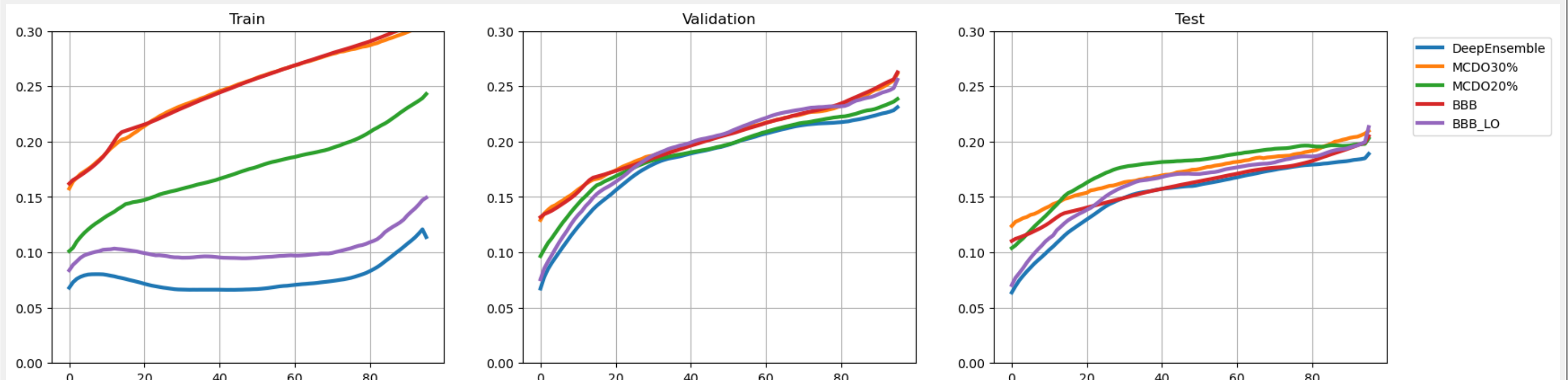
正則化が弱く、通常のAutoformerの挙動に近い



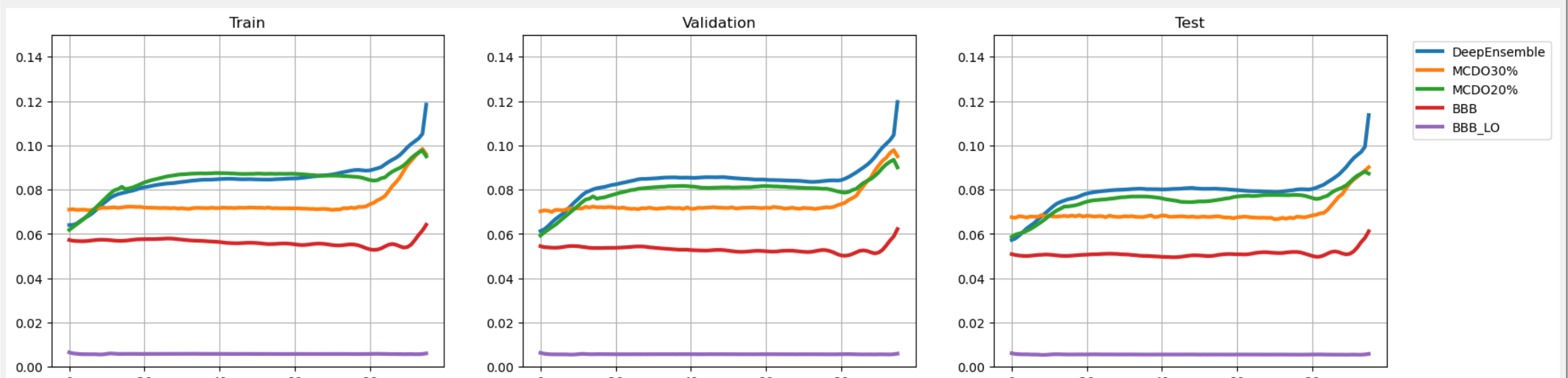
## 誤差と分散

- ▶ Deep Ensemble
- ▶ Monte Carlo Dropout 20% (MCD020%)、30%(MCD030%)
- ▶ Bayes By Backprop
  - ▶ 全層に適用 (BBB)
  - ▶ 最終層のみに適用 (BBB\_LO)

## 予測値の平均絶対誤差

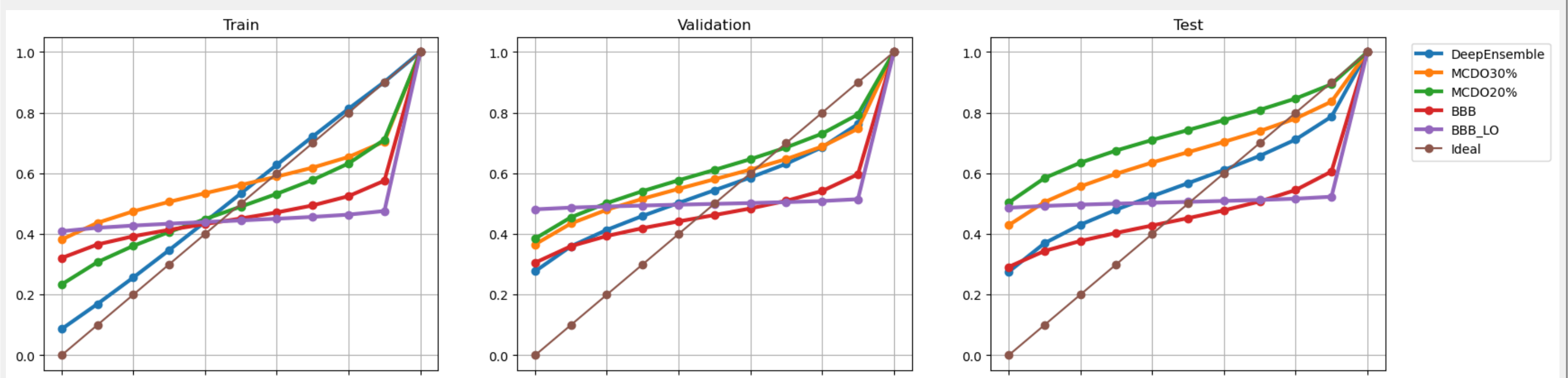


## 予測値の標準偏差



- ▶ 予測値の誤差が拡大するとともに標準偏差(信頼度の指標が)が拡大することが期待される
- ▶ いずれの手法もうまく行っているとは言い難い
- ▶ Bayes by Backprop はいずれも標準偏差がほぼフラットになっている
- ▶ 最終層にのみ適用した場合(BBB\_LO)は特に低い値になっている

## Estimated CDF vs Empirical CDF[3]



- ▶ n%区間に入っている値のパーセンテージをプロット
- ▶ 線形に増大するのが理想
- ▶ Deep Ensembleは最もよい。ただしテスト時には訓練時ほどではない

## まとめ

- ▶ Bayes by Backpropは現状ではうまくいっていない
  - ▶ 全層に導入すると正則化が強すぎ変動の予測がうまくいかない
  - ▶ 最終層のみに導入した場合には、予測は正常だが信頼度推定ができない

## 今後の課題

- ▶ Bayes by Backpropを導入する層の数・位置を調整し、最適な設定を探索する
- ▶ Bayes by Backpropのハイパパラメタの調整を試みる

## 参考文献

- [1] Haixu Wu, Jiehui Xu, Jianmin Wang, and Mingsheng Long. Autoformer: Decomposition transformers with auto-correlation for long-term series forecasting. *CoRR*, abs/2106.13008, 2021.
- [2] Charles Blundell, Julien Cornebise, Koray Kavukcuoglu, and Daan Wierstra. Weight uncertainty in neural networks. In *Proceedings of the 32nd International Conference on Machine Learning (ICML 2015)*, 2015.
- [3] Volodymyr Kuleshov, Nathan Fenner, and Stefano Ermon. Accurate uncertainties for deep learning using calibrated regression. *CoRR*, abs/1807.00263, 2018.

謝辞：この成果の一部は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）の助成事業（JPNP16007）の結果得られたものです。実装にご協力いただいた井上辰彦氏に感謝します。