

機械学習を 解釈する技術3

廣田雄亮

3章 特徴量の需要度を知る PFI

特徴量の重要度を知る必要性

特徴量の重要度とは

どの特徴量がモデルの予測に強く影響し、
どの特徴量は影響しないのか

特徴量の重要度がわかると実務で

- 重要度がドメイン知識に沿っているかを確認 → デバッグ
直感的に重要そうな特徴量の重要度が低い
あまり重要そうでない特徴量の重要度が高い
- KPIを効率よく改善できる
重要度が高い特徴量に重要的に介入する

モデルの振る舞いを確認し、現実のアクションにつながる

回帰係数について

回帰係数を用いることで特徴量の重要度を確認できた



Random Forest や GBDT といった機械学習モデルには線形回帰モデルにおける**回帰係数に相当するものがない**

→ パラメータから重要度を確認することが困難

どのようなモデルでも計算できる予測誤差を用いたアプローチが必要

回帰係数について

回帰係数を用いることで特徴量の重要度を確認できた
ある特徴量が使えない場合の予測誤差
と

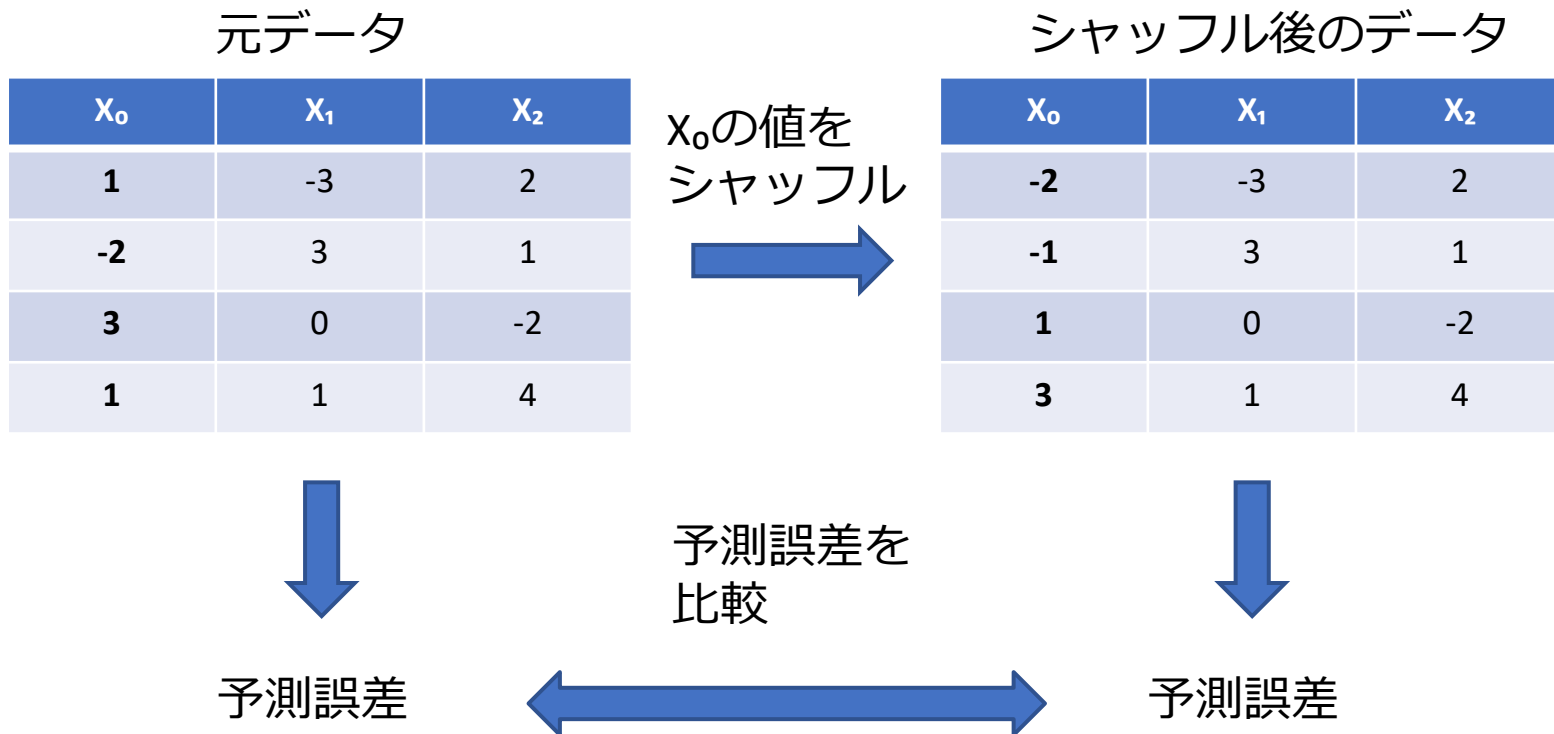
すべての特徴量が使える場合の予測誤差
Random Forest や GBDT といった機械学習モデルには線形回帰
モデルにおける回帰係数に相当するものがない
を比較

→ パラメータから重要度を確認することが困難

予測誤差が大きく変化する場合
どのようなモデルでも特徴量で予測精度を上げたアプローチ
その特徴量は重要と判断する
が必要

PFI (Permutation Feature Importance) 3/3

特徴量の値をシャッフル(permutation)することで
その特徴量の情報が**使えない状態**にする



PFI (Permutation Feature Importance) 2/3

アルゴリズム

X_0	X_1	X_2
1	-3	2
-2	3	1
3	0	-2
1	1	4



1つ1つのインデックスの
関係性が情報を持つ.



インデックスの関係に
よってモデルの結果が
導かれる.

シャッフルすることにより, 持っている関係性が崩れる.
→ シャッフルしたデータが使えなくなる.

PFI (Permutation Feature Importance) 3/3

問題点

相関の高い特徴量を同時に投入している場合

→ 重要度が分散し、両方の特徴量が低くなる

LOCOFI (Leave One Covariate Importance) 1/2

特徴量の値を使わないことで
その特徴量の情報が**使えない**状態にする

元データ

x_0	x_1	x_2
1	-3	2
-2	3	1
3	0	-2
1	1	4

x_0 の値を
使用しない



x_0	x_1	x_2
-2	-3	2
-1	3	1
1	0	-2
3	1	4



予測誤差

予測誤差を
比較



予測誤差

LOCOFI (Leave One Covariate Importance) 2/2

問題点

1. 特徴量の数だけモデルが必要になり, 再学習が必要
(計算時間がかかる)
2. 振る舞いを理解したモデルと別のモデルを作成して重要度の評価を行っている
→ 真に知りたいことではない

2つ目に関して

「全特徴量を使ったモデル」と「ある特徴量を落として作ったモデル」は別のモデルと言える.

知りたいことは, あくまでも「全特徴量を使ったモデル」が特定の特徴量をどの程度重要視しているか

PFI と LOCOFI

2つは互いに類似した発想の手法

しかし、双方の問題点を踏まえると

実践的には、PFI を用いるほうが良い、と言える。

GPFI(Grouped Permutation Feature Importance) 1/2

PFIの問題点として、相関が高い特徴量を投入すると重要度が分散し、両方の重要度が低くなる、ことがある。



そこで、それらをまとめてシャッフルする **GPFI** を用いる。

元データ

X_0	X_1	X_2
1	-3	2
-2	3	1
3	0	-2
1	1	4

X_0 の値を
シャッフル



シャッフル後のデータ

X_0	X_1	X_2
-2	3	2
-1	1	1
1	-3	-2
3	0	4



予測誤差

予測誤差を
比較



予測誤差

GPFI(Grouped Permutation Feature Importance) 2/2

例

- 売上予測の場合：「今日の売上」「昨日の予測」→「過去の予測」

これらとは別に以下の場合にもGPFIが有効

- **特徴量をまとめた特徴量群の方が解釈性が向上するケース**

「住所データ」「郵便番号」→「住所- 郵便番号データ」

「緯度」「経度」→「位置データ」

- **カテゴリー変数**

職業カテゴリ「学生」「会社員」「自営業」←「1」「1」「0」

このような場合は起き得ない、とされる。

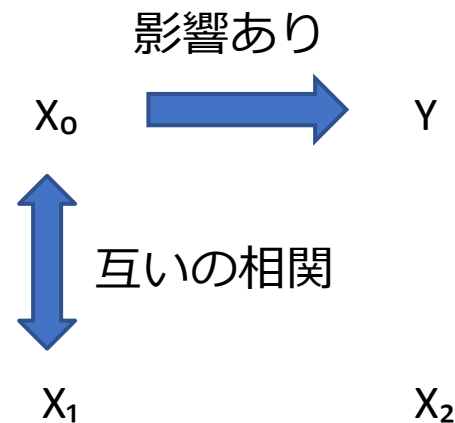
特徴量重要度は因果関係として解釈できるか? 1/2

特徴量重要度を**因果関係として解釈することは危険**である.

その理由の一つとして

疑似相関

がある.



特徴量重要度は因果関係として解釈できるか? 2/2

疑似相関あるとどうなるのか?

本来モデルに入れるべき特徴量が入っていない場合に、
影響を与えない特徴量が影響を与えると解釈してしまう。



重要な特徴量である ≠ 目的変数と因果関係がある

PFIの結果は**モデル上の振る舞い**
であって因果関係ではない

まとめ

PFIのメリット・デメリット

メリット

- どのようなモデルに対しても, 同じ方法で特徴量の重要度を計算できる
- 直感的に理解しやすい
- 計算時間が短い

デメリット

- 強く相関する特徴量の扱いに注意が必要
- 因果関係としては解釈できない