2024年度 人工知能学会全国大会 (第38回)

論理制約を考慮した テーブルデータを対象とした 予測モデル構築フレームワーク

オーガナイズドセッション » OS-11 AIと制約プログラミング
[2M1-OS-11a-02] 2024年5月29日(水) 09:40 ～ 10:00

尾上圭介，小島諒介
（京都大学 医学研究科）

目次

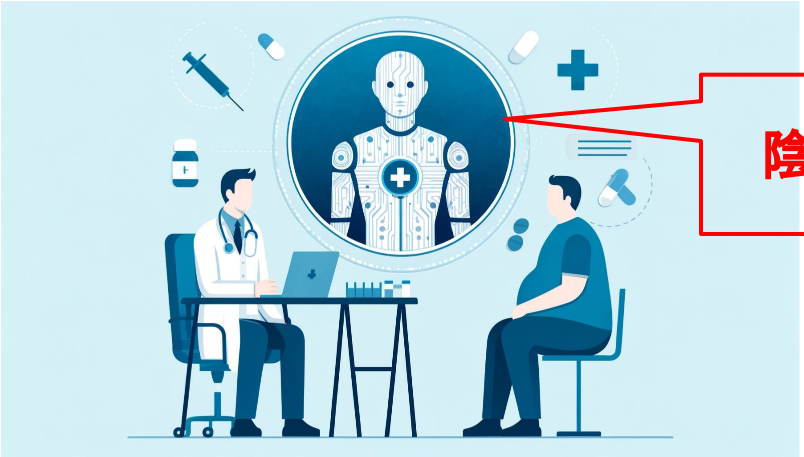
背景：機械学習モデルの良し悪しを決めるのは？

機械学習モデルの実応用は，予測精度と信頼性の両立が重要

糖尿病の診断データ

	BMI	Age	BloodPressure	Glucose	…	糖尿病
患者1	33.6	50	72	**148**	…	**1**
患者2	26.6	31	66	85	…	0
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

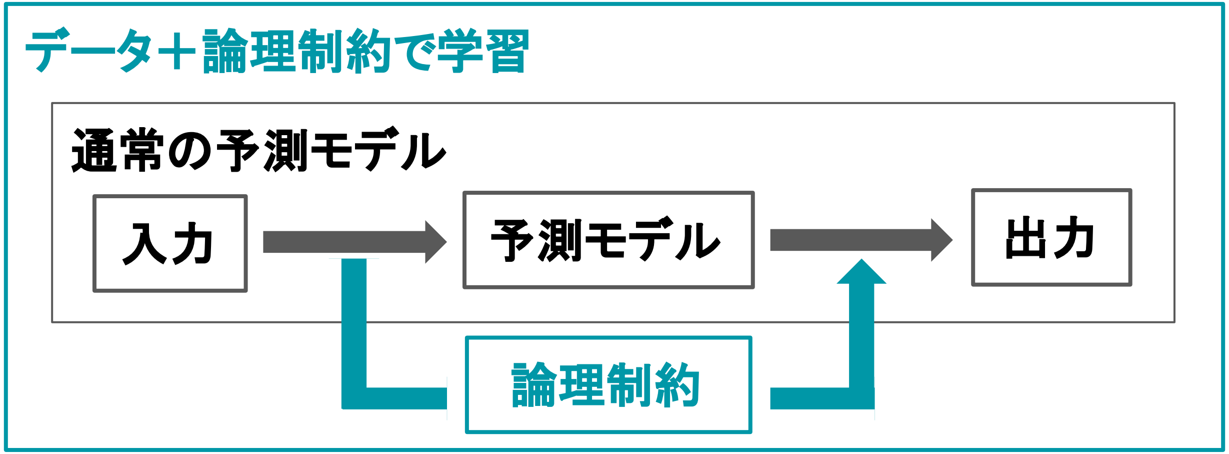
≠



陰性（ 0 ）です

背景：どのように信頼性を確保するのか

→ **背景知識**を**制約**として予測モデルに組み込む



論理制約付き予測モデル

機械学習 ＋ 論理制約	論理制約付きカーネル法 [Giannini (2017)]
	制約充足問題、制約付き最適化 [Goyal (2022)]
深層学習 ＋ 論理制約	深層学習の層への論理制約の組み込み [Wang (2023)]
	損失関数への制約の組み込み [Yang (2022), Roychowdhury (2021)]

背景：課題と本研究でのアプローチ

- 論理制約付き予測モデルの評価の難しさ
  - 予測モデルの学習から評価までの一連の手続きの枠組みを作成（対象となるデータ形式をテーブルデータのみに絞る）
- 手動によって論理制約を設定することによる恣意性
  - 論理制約を自動獲得することによる客観的評価

目次

提案手法

テーブルデータを対象にした，制約付き予測モデル評価フレームワーク

Step. 1 論理制約の自動抽出

⇩

Step. 2 制約論理式の構築

⇩

Step. 3 予測モデルの学習

⇩

Step. 4 予測モデルの評価

Step. 1
論理制約の自動抽出

Step. 2
制約論理式の構築

Step. 3
予測モデルの学習

Step. 4
予測モデルの評価

入力

テーブルデータ

BMI	Age	…	Outcome
33.6	50	…	1
26.6	31	…	0
⋮	⋮	⋮	⋮

離散化
（＋ One-hot encoding）

テーブルデータ（変換後）

BMI=L	BMI=M	BMI=H	Age=L	Age=M	Age=H	…	Outcome
0	1	0	0	0	1	…	1
1	0	0	0	1	0	…	0
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

RuleFit

出力

ルールセット

条件	重み
BMI=L	-0.4
Age=H	0.2
Glucose=L	-0.2
Glucose=H	0.55
BMI=L ∧ ¬Age=M	0.01
BMI=L ∧ Glucose=H	0.8
⋮	⋮

RuleFit [Friedman 08]
特徴量をもとにルールを作成し，そのルールに重みを付けた線形モデルで予測器を構築する．

提案手法

Step. 1
論理制約の自動抽出

**Step. 2
制約論理式の構築**

Step. 3
予測モデルの学習

Step. 4
予測モデルの評価

入力

ルールセット

条件	重み
BMI=L	-0.4
Age=H	0.2
BMI=L ∧ ¬Age=M	0.01
BMI=M ∧ ¬Age=H	-0.5
BMI=L ∧ Glucose=H	0.8
⋮	⋮

出力

制約論理式
BMI_L(x) → ¬Outcome(x)
Age_H(x) → Outcome(x)
BMI_L(x) ∧ ¬Age=M(x) → Outcome(x)
BMI_M(x) ∧ ¬Age_H(x) → ¬Outcome(x)
BMI_L(x) ∧ Glucose_H(x) → Outcome(x)
⋮

ルール

条件：BMI=M ∧ ¬Age=H

重み：- 0.5

論理式化

論理式

BMI_M ∧ ¬Age_H → ¬Outcome

述語化

述語論理

∀x (BMI_M(x) ∧ ¬Age_H(x) → ¬Outcome(x))

※閾値以上の重みのルールに対して

※ x は患者

提案手法

Step. 1
論理制約の自動抽出

Step. 2
制約論理式の構築

Step. 3
予測モデルの学習

Step. 4
予測モデルの評価

ソフトマージン SVM

学習データ

$$\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_i, y_i) : \mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d, y_i \in \{-1, 1\}\}_{i=1}^N$$

目的関数

$$\min \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^N \xi_i$$

制約条件

$$y_i(\mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_i) + b) \geq 1 - \xi_i, \quad \xi_i \geq 0$$

$$\phi(\mathbf{x}_i) : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^D, \quad \mathbf{w} \in \mathbb{R}^D, \quad b \in \mathbb{R}$$

論理制約付き SVM [Giannini (2017)]

$$\mathcal{L}_j = \{(\mathbf{x}_l, y_l^j) : \mathbf{x}_l \in \mathbb{R}^d, y_l^j \in \{0, 1\}\}_{l=1}^L$$

$$\mathcal{U}_j = \{\mathbf{x}_u : \mathbf{x}_u \sim Uniform\}_{u=1}^U$$

$$\min \frac{1}{2}\sum_{j=1}^J \|\mathbf{w}_j\|^2 + C_1 \sum_{j=1}^J \sum_{l=1}^L \xi_{jl} + C_2 \sum_{h=1}^H \xi_h$$

$$y_l^j(2p_j(\mathbf{x}_l) - 1) \geq 1 - 2\xi_{jl}, \quad \xi_{jl} \geq 0$$

$$f_h(\bar{\mathbf{p}}) \geq 1 - \xi_h, \quad \xi_h \geq 0$$

$$0 \leq p_j(\mathbf{x}_s) \leq 1$$

1 に近いほど論理制約
(Łukasiewicz 論理)を
満たす

$$\phi(\mathbf{x}_i) : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^D, \quad \mathbf{w} \in \mathbb{R}^D, \quad b \in \mathbb{R}$$

$$p_j : \mathbf{x} \mapsto \mathbf{w}_j^\top \phi_j(\mathbf{x}) + b_j$$

Step. 1
論理制約の自動抽出

Step. 2
制約論理式の構築

Step. 3
予測モデルの学習

Step. 4
予測モデルの評価

1. 予測精度

従来の精度指標を用いる

2. 論理制約の充足率

- 制約単位

$$\text{充足率} = \frac{\text{満たす論理制約数}}{\text{全論理制約数}}$$

- インスタンス単位(= 患者単位)

$$\text{充足率} = \frac{\text{満たすインスタンス数}}{\text{全論理制約数} \times \text{インスタンス数}}$$

例)制約: BMI_M(x) ∧ ¬ Age_H(x) → ¬ Outcome(x)

	BMI=L	**BMI=M**	BMI=H	Age=L	Age=M	**Age=H**	…	**Outcome**
患者 1	0	**1**	0	0	1	**0**	…	**1**
患者 2	1	0	0	0	1	0	…	0
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

満たさない

目次

実験設定

データセット

Pima Indian Diabetes

糖尿病の医療検査・診断に関するデータセット.
BMI，年齢，インスリンレベル等の8つの検査項目の測定値と糖尿病の診断結果からなる.

タスク

二値分類

各検査項目の測定値から糖尿病であるかどうかを予測する.

評価指標

ROCAUC，論理制約の充足率

予測精度の評価にはArea Under the ROC Curve を用いる.

実験 1：予測モデル間の比較

実験 2：論理制約採用の閾値

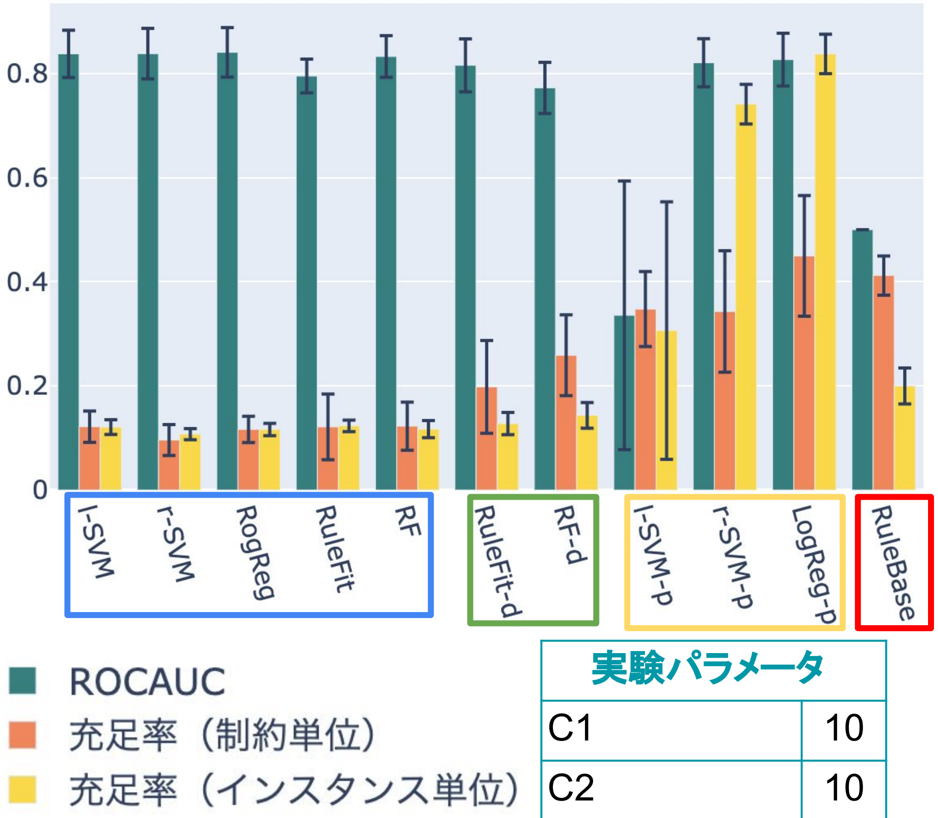
実験 3：自動抽出手法の比較（RuleFit vs Association Rule）

予測モデルとその略称

SVM（線形カーネル）	l-SVM
SVM（RBFカーネル）	r-SVM
ロジスティック回帰	LogReg
RuleFit（連続）	RuleFit
ランダムフォレスト（RuleFit 内の予測器）	RF
RuleFit（離散）	RuleFit-d
ランダムフォレスト（RuleFit-d 内の予測器）	RF-d
論理制約付きSVM（線形カーネル）	l-SVM-p
論理制約付きSVM（RBFカーネル）	r-SVM-p
論理制約付きロジスティック回帰	LogReg-p
ルールの多数決	RuleBase

実験 1

予測モデル間の比較

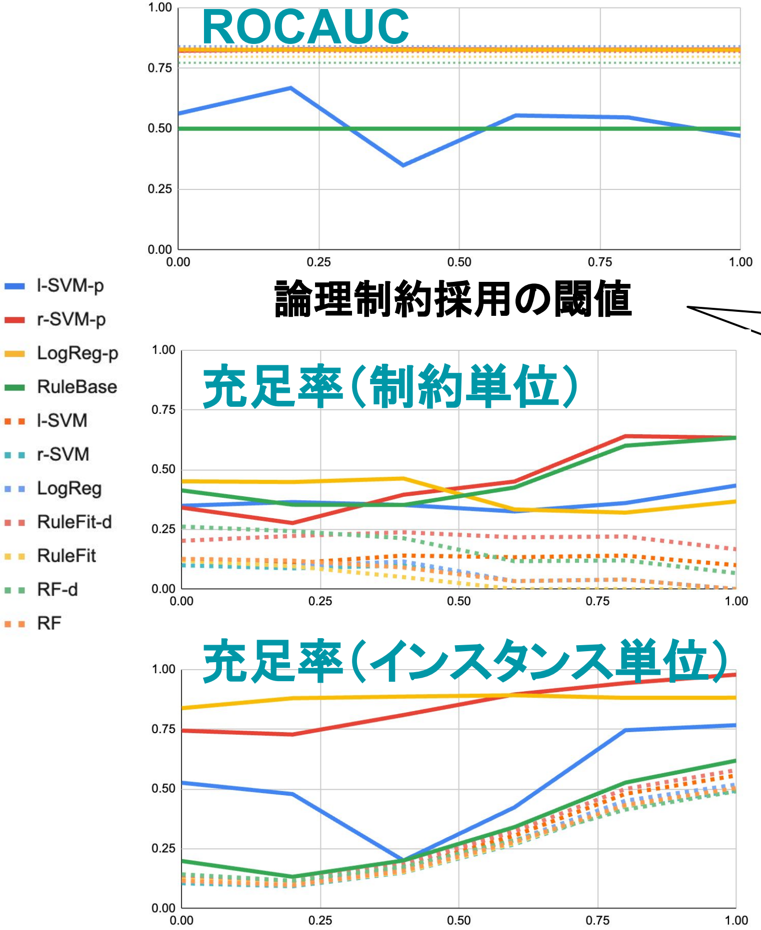


実験パラメータ	
C1	10
C2	10
U	15

- r-SVM-p，LogReg-p の予測精度は論理制約無しのモデルに迫った
- 充足率は，論理制約無しのモデルの中では，制約抽出時に用いた RuleFit が比較的高かった
- 論理制約付きモデルは充足率で RuleFit を上回った
- インスタンス単位の充足率では，特に r-SVM-p，LogReg-p が高かった

実験 2

論理制約採用の閾値



- 予測精度はどの閾値でもほとんど一定

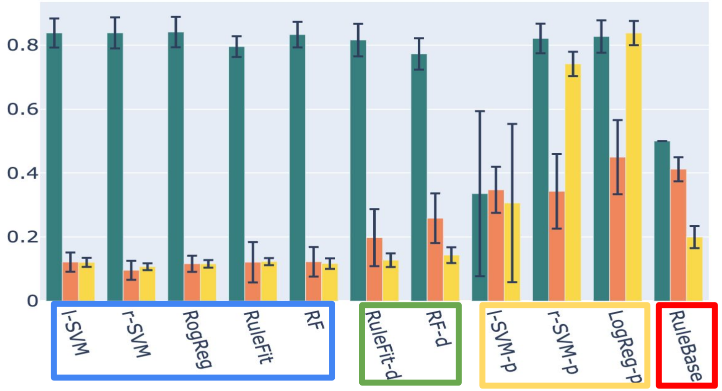
ルール抽出ステップにおいて，各ルールの重みに閾値を設定

- 論理制約付きのモデルは閾値の上昇に従って充足率が上昇した
- SVM や LogReg 等の制約無しモデルでも，インスタンス単位では充足率が上昇した

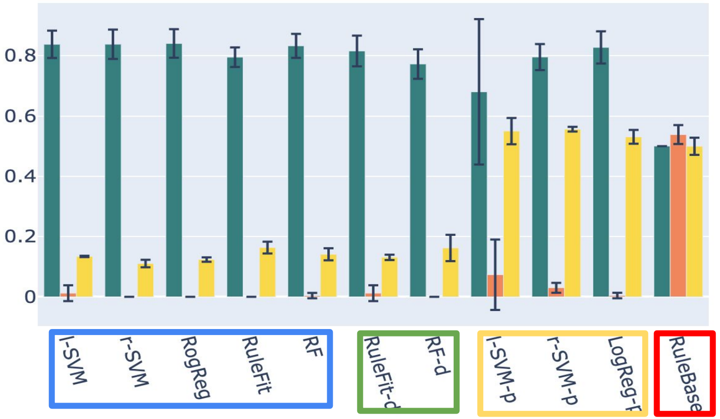
実験 3

RuleFit vs Association Rule

RuleFit



Association Rule



Association Rule

項目の頻出度に基づくルールマイニング手法

- 予測精度と充足率（インスタンス単位）は両手法とも，似た傾向を示した
- Association Rule は RuleFit に比べて充足率（制約単位）が低かった

■ ROCAUC
■ 充足率（制約単位）
■ 充足率（インスタンス単位）

目次

結論，展望

まとめ

- 提案フレームワークを用いて，多種の予測モデルに対して論理制約に関する評価を行った
- r-SVM-p [Giannini (2017)] と LogReg-p は制約無しモデルと比較して，予測性能は同等で，制約の充足率では上回った
- RuleFit は Association Rule と比較して，予測性能と制約充足率を両立できる論理制約を作成することがわかった
- 制約充足率は，制約単位とインスタンス単位では傾向が違うので，両方を用いて評価することが重要

今後の課題

- 現実問題へ適用した際の論理制約の妥当性の確認
- 適用可能なデータ形式の拡張（マルチタスク，マルチラベル）

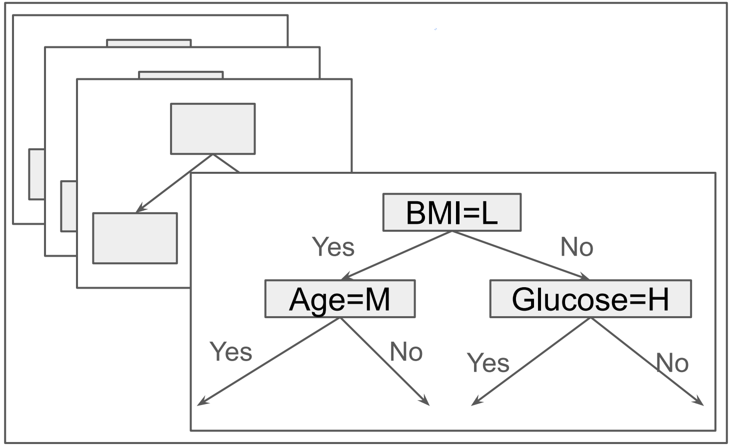
RuleFit

RuleFit による論理制約の抽出

BMI=L	BMI=M	BMI=H	Age=L	Age=M	Age=H	…	Outcome
0	1	0	0	0	1	…	1
1	0	0	0	1	0	…	0
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

RuleFit [Friedman 08]
特徴量をもとにルールを作成し，そのルールに重みを付けた線形モデルで予測器を構築する．

Tree generator



変換

Lasso で
特徴量選択

BMI=L
BMI=L ∧ Age=M
BMI=L ∧ ¬Age=M
BMI=L ∧ Glucose=H
BMI=L ∧
¬Glucose=H
⋮

ルールセット

description	weight
BMI=L	−0.4
Age=H	0.2
Glucose=L	−0.2
Glucose=H	0.55
BMI=L ∧ ¬Age=M	0.01
BMI=L ∧ Glucose=H	0.8
⋮	⋮

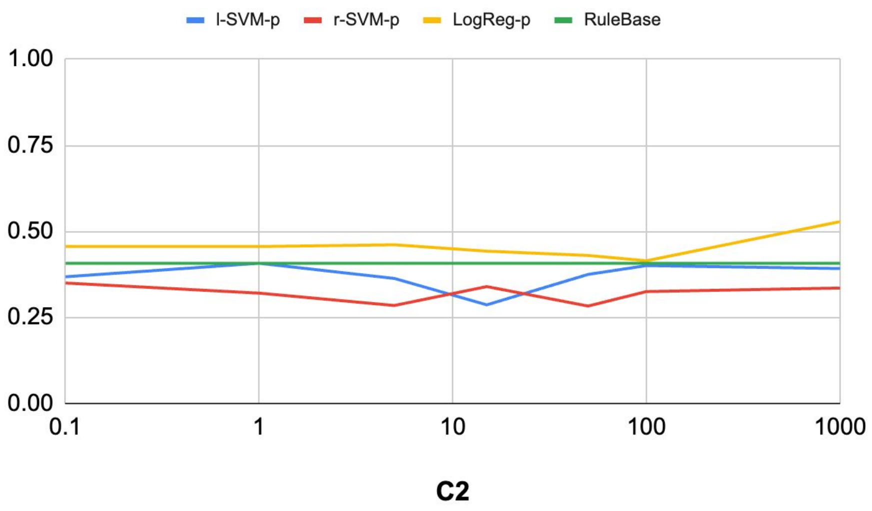
Łukasiewicz logic

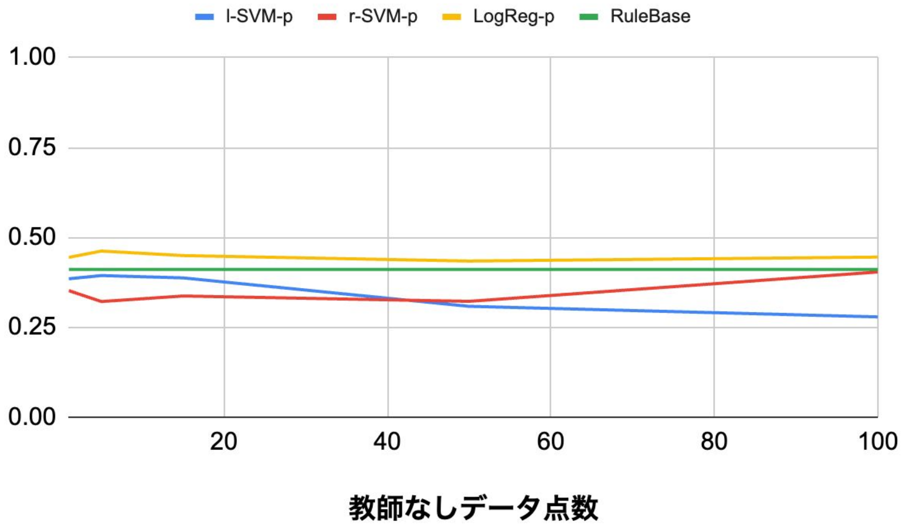
多値論理の一種

	Formula	Operation
強論理積	$x \otimes y$	$\max\{0, x + y - 1\}$
弱論理積	$x \wedge y$	$\min\{x, y\}$
強論理和	$x \oplus y$	$\min\{1, x + y\}$
弱論理和	$x \vee y$	$\max\{x, y\}$
含意	$x \to y$	$\min\{1, 1 - x + y\}$
否定	$\neg x$	$1 - x$

実験パラメータ

パラメータと充足率





参考文献

- [Friedman 08] Friedman, J. H. and Popescu, B. E.:Predictive learning via rule ensembles (2008)

- [Giannini 17] Giannini, F., Diligenti, M., Gori, M., and Maggini, M.: Learning Lukasiewicz Logic Fragments by Quadratic Programming, pp. 410– 426 (2017)

- [Goyal 22] Goyal, K., Dumancic, S., and Blockeel, H.: Sade: Learning models that provably satisfy domain constraints, in Joint European Conference on Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases, pp. 410–425 (2022)
- [Kautz 22] Kautz, H.: The third ai summer: Aaairobert s. engelmore memorial lecture, AI Magazine, Vol. 43, No. 1, pp. 105–125 (2022)
- [Wang 23] Wang, Z., Vijayakumar, S., Lu, K., Ganesh, V., Jha, S., and Fredrikson, M.: Grounding Neural Inference with Satisfiability Modulo Theories, in NeurIPS (2023)

- [Yang 22] Yang, Z., Lee, J., and Park, C.: Injecting logical constraints into neural networks via straight-through estimators, in ICML, pp. 25096-25122PMLR (2022)

- [Roychowdhury 21] Roychowdhury, S., Diligenti, M., and Gori, M.: Regularizing deep networks with prior knowledge: A constraint-based approach, Knowledge-Based Systems, Vol. 222, p. 106989 (2021)