

Fakultät Für Informatik und Mathematik
Stochastic Engineering in Business and Finance

Master-Thesis

Interpretation of linear models with SHAP

Interpretation linearer Modelle mit SHAP

Betreuer: Prof. Dr. Andreas Zielke

Eingereicht von:
Simon Symhoven, 49651418
Boschetsriederstraße 59A, D-81379 München
simon.symhoven@hm.edu

Eingereicht am:
München, den 10. November 2023

Abstract

Diese Masterarbeit beleuchtet die Interpretation linearer Modelle mit Shapley Additive exPlanations (SHAP), welches seine theoretische Basis in den Shapley-Werten der kooperativen Spieltheorie findet. Nach einer historischen Einordnung und Begriffsdefinition werden die Shapley-Werte formal hergeleitet und deren axiomatische Grundlagen beleuchtet. Der Übergang von Shapley-Werten zu SHAP wird zeigen wie Beiträge einzelner Merkmale zur Modellvorhersage beitragen. Am Beispiel einer ausgewählten Modellklasse und unter Verwendung des shap Python-Pakets wird die praktische Anwendbarkeit von SHAP auf einen konkreten Datensatz demonstriert. Die Arbeit schließt mit einer Diskussion über die Grenzen von SHAP und bietet einen Ausblick auf dessen Einsatzmöglichkeiten für transparente und nachvollziehbare Modellentscheidungen in der Datenwissenschaft.

Inhaltsverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis	v
Symbolverzeichnis	vii
1 Einleitung	1
2 Historischer Kontext und Begriffsdefinitionen	3
2.1 Die Genese der Shapley-Werte in der kooperativen Spieltheorie	3
2.2 Shapley-Werte, SHAP, SHAP-Werte und <code>shap</code>	4
3 Theorie der Shapley-Werte	5
3.1 Wie lässt sich der Gewinn gerecht aufteilen?	5
3.2 Formale Definition	8
3.3 Axiome	10
4 Von Shapley-Werten zu SHAP: Brückenschlag zur Modellinterpretation	13
5 Praktische Anwendung von SHAP auf lineare Modelle	15
5.1 Lineare Modelle als analytische Grundlage	15
5.2 Einführung in das <code>shap</code> Python-Paket	17
5.3 Einführung in den Datensatz	18
5.4 Modellierung der linearen Regression	18
6 Ergebnisse	19
6.1 Berechnung von SHAP-Werten	19
6.2 Interpretation	19
6.2.1 Lokale Interpretation	19

6.2.2 Globale Interpretation	19
7 Ausblick	21
8 Fazit	23
Literaturverzeichnis	25
Abbildungsverzeichnis	27
Tabellenverzeichnis	29
Quellcodeverzeichnis	31
Eidesstattliche Erklärung	33
Anhänge	35
Anhang A Quellcode	35

Abkürzungsverzeichnis

SHAP Shapley Additive exPlanations

Symbolverzeichnis

$1, \dots, \mathcal{N} $	Mögliche Spieler einer Koalition
\emptyset	Leere Menge (leere Koalition)
\mathcal{N}	Große Koalition (Koalition aller Spieler)
\mathcal{P}	Potenzmenge
\mathcal{S}	Koalition, mit $\mathcal{S} \subseteq \mathcal{N}$
$\varphi_i(\mathcal{N}, v)$	Der Shapley-Wert eines Spielers i
$ \mathcal{S} $	Größe der Koalition \mathcal{S}
v	Koalitionsfunktion
$v(\mathcal{S})$	Wert der Koalition \mathcal{S}
β_0	Achsenabschnitt im linearen Model (Intercept)
β_j	Koeffizient oder Gewichtung des Prädiktors j im linearen Modell
$\epsilon^{(i)}$	Residuum für die Beobachtung i
i	Index für die Beobachtungseinheiten
j	Index für die Prädiktoren
p	Anzahl der Prädiktoren im Modell
$x_j^{(i)}$	Wert der unabhängigen Variablen j für die Beobachtung i
$y^{(i)}$	Zielgröße, abhängige Variable

1. Einleitung

In einer Zeit, in der datengetriebene Ansätze und automatisierte Modelle immer größere Relevanz erlangen, rückt die Notwendigkeit der Erklärbarkeit und Interpretierbarkeit von Modellen in den Vordergrund. Eines der vielversprechendsten Konzepte, das sich dieser Herausforderung annimmt, sind die sogenannten Shapley-Werte. Diese Masterarbeit erkundet die tiefgreifenden Konzepte der Shapley-Werte, ihre Anwendungen im Kontext von Machine Learning-Modellen und ihre praktische Umsetzung auf reale Datensätze.

Die Arbeit beginnt mit einer umfassenden Einführung in die Shapley-Werte und ihre historischen Wurzeln. Dabei wird insbesondere auf die kooperative Spieltheorie als Ursprung dieser Konzepte eingegangen. Anhand ausgewählter Literatur werden die theoretischen Grundlagen erörtert und der Forschungsstand auf diesem Gebiet aufgezeigt.

Im Anschluss daran wird die Brücke zur aktuellen Landschaft des maschinellen Lernens geschlagen. Es wird beleuchtet, wie die Shapley-Werte adaptiert werden können, um Einblicke in die Gewichtung von Merkmalen in komplexen Machine Learning-Modellen zu gewinnen. Dabei wird auf bestehende Methoden und Ansätze Bezug genommen und diskutiert, wie diese auf verschiedene Modelle angewendet werden können.

Ein zentraler Schwerpunkt der Arbeit liegt auf der praktischen Anwendung der Shapley-Werte. Ein realer Datensatz wird vorgestellt und die Methodik wird auf diesen angewendet, um die Wirksamkeit und Aussagekraft der Shapley-Werte in der Praxis zu evaluieren. Dies ermöglicht eine kritische Reflexion über die Stärken und Limitationen dieses Ansatzes im Kontext der Datenerklärung.

Abschließend werden die gewonnenen Erkenntnisse zusammengeführt und ein Ausblick auf zukünftige Entwicklungen und Forschungsrichtungen gegeben. Die Arbeit trägt somit dazu bei, das Verständnis für die Shapley-Werte als Instrument der Erklärbarkeit in komplexen Modellen zu vertiefen und ihre praktische Anwendbarkeit zu beleuchten.

2. Historischer Kontext und Begriffsdefinitionen

2.1. Die Genese der Shapley-Werte in der kooperativen Spieltheorie

Der Ursprung der Shapley-Werte liegt in der kooperativen Spieltheorie, einem fundamentalen Zweig der Spieltheorie. Dieser Bereich beschäftigt sich mit der Analyse von Situationen, in denen Akteure zusammenarbeiten, um gemeinsame Ziele zu erreichen. Zentrales Anliegen ist dabei die gerechte Verteilung der entstehenden Gewinne unter den Akteuren. Ein Schlüsselkonzept dieser Theorie ist die sogenannte „Charakteristische Funktion“, welche die Bewertung der Gewinnverteilung einer Koalition von Akteuren ermöglicht.

Die Shapley-Werte, entwickelt von Lloyd Shapley in den 1950er Jahren, bieten einen methodischen Ansatz, um den individuellen Beitrag eines jeden Akteurs zur kooperativen Zusammenarbeit gerecht zu bewerten. Dies geschieht durch die Durchschnittsbewertung der Beiträge über sämtliche mögliche Koalitionen hinweg. Diese Methode erweist sich als äußerst nützlich, um eine gerechte und rationale Verteilung von Gewinnen in vielfältigen Szenarien zu ermöglichen, sei es in wirtschaftlichen Verhandlungen oder der Aufteilung von Ressourcen.

Das Verständnis der kooperativen Spieltheorie und ihrer Anwendung in Form der Shapley-Werte ermöglicht es, dieses theoretische Konzept auf den Bereich des maschinellen Lernens zu übertragen. In dieser Arbeit wird der Übergang von abstrakten Spieltheorie-Konzepten zu konkreten Anwendungen in der Welt der datengetriebenen Modelle erforscht.

Zur Erreichung dieses Ziels werden in den kommenden Abschnitten nicht nur die formalen Definitionen und Eigenschaften der Shapley-Werte erläutert, sondern auch ihre Adaption und Anwendung auf Machine Learning-Modelle in Betracht gezogen. Die Anwendbarkeit wird durch die praktische Anwendung auf einen realen Datensatz verdeutlicht.

2.2. Shapley-Werte, SHAP, SHAP-Werte und shap

Zur Verdeutlichung und Abgrenzung der verschiedenen, jedoch verwandten Begrifflichkeiten, die im Kontext dieser Arbeit Verwendung finden, ist eine kurze Einordnung essenziell.

Beginnend mit den Shapley-Werten, entstammt dieser Begriff der kooperativen Spieltheorie und beschreibt eine Methode, um den fairen Beitrag eines Spielers zu der Gesamtauszahlung eines kooperativen Spiels zu bestimmen.

Shapley Additive exPlanations (SHAP) ist ein Interpretationsframework, das die Shapley-Werte in den Bereich des maschinellen Lernens überträgt. Der Begriff wurde erstmals von Lundberg und Lee eingeführt [6, S. 1].

Die SHAP-Werte sind dann die konkreten quantitativen Beiträge der einzelnen Merkmale zu einer bestimmten Vorhersage, berechnet basierend auf dem SHAP-Framework.

Das Python-Paket **shap** schließlich ist eine Implementierung, die es praktikabel macht, SHAP-Werte in der Anwendung zu berechnen und zu visualisieren. Es stellt eine reiche Auswahl an Werkzeugen zur Verfügung, um diese Werte und ihre Auswirkungen zu interpretieren.

3. Theorie der Shapley-Werte

In diesem Kapitel werden die Shapley-Werte als Instrument zur gerechten Aufteilung von Gewinnen in kooperativen Spielen vorgestellt. Durch die Verwendung eines praktischen Beispiels – der Aufteilung eines Preisgeldes aus einem Designwettbewerb unter den Gewinnern – wird zunächst eine intuitive Einführung in das Konzept gegeben. Anschließend wird die formale Definition der Shapley-Werte erläutert, um die theoretischen Grundlagen für ihre Berechnung und Anwendung zu legen.

3.1. Wie lässt sich der Gewinn gerecht aufteilen?

Angenommen, drei Teilnehmer, Anna, Ben und Carla, haben als Team kooperiert und den ersten Platz bei einem Designwettbewerb belegt¹. Dieser Erfolg führt zu einem Gesamtgewinn von 1000 €. Das Preisgeld für den zweiten Platz beträgt 750 € und 500 € für den dritten Platz. Die Herausforderung besteht nun darin, den Gewinn auf eine Weise zu verteilen, die den individuellen Beitrag jedes Teilnehmers zur Erzielung des ersten Platzes gerecht widerspiegelt.

Die Situation wird komplizierter, wenn man bedenkt, dass jeder Teilnehmer unterschiedlich zu dem Erfolg beigetragen hat und ihre individuellen Leistungen auch zu verschiedenen Ausgängen geführt hätten, wenn sie alleine oder in anderen Teilkonstellationen angetreten wären.

Um eine faire Aufteilung des Preisgeldes zu erreichen, betrachten wir die hypothetischen Gewinne, die Anna, Ben und Carla erzielt hätten, wenn sie in unterschiedlichen Konstellationen am Wettbewerb teilgenommen hätten. Tabelle 1 zeigt die gegebene Gewinnverteilung der verschiedenen Koalitionen. Die Koalition \emptyset entspricht dabei der leeren Koalition – der Nichtteilnahme an dem Wettbewerb.

¹In Anlehnung an Beispiel aus Kapitel 4 „Who’s going to pay for that taxi?“[8, S.17-20].

Koalition	Gewinn	Bemerkung
\emptyset	0 €	Keine Teilnahme
{Anna}	500 €	3. Platz als Einzelteilnehmerin
{Ben}	750 €	2. Platz als Einzelteilnehmer
{Carla}	0 €	Kein Gewinn als Einzelteilnehmerin
{Anna, Ben}	750 €	2. Platz als Team ohne Carla
{Anna, Carla}	750 €	2. Platz als Team ohne Ben
{Ben, Carla}	500 €	3. Platz als Team ohne Anna
{Anna, Ben, Carla}	1000 €	1. Platz als Gesamtteam

Tabelle 1.: Potenzielle Gewinne für verschiedene Teilnehmerkonstellationen im Designwettbewerb.

Zur Berechnung der Shapley-Werte ist es erforderlich, den marginalen Beitrag jedes Spielers zu erfassen. Marginalbeiträge in der Spieltheorie, und speziell im Kontext der Shapley-Werte, sind die zusätzlichen Beiträge, die ein Spieler (Teilnehmer) zum Gesamtgewinn einer Koalition beiträgt, wenn er dieser beiträgt. Die Berechnung des marginalen Beitrags eines Teilnehmers erfolgt, indem man den Wert der Koalition ohne diesen Teilnehmer vom Wert der Koalition mit dem Teilnehmer subtrahiert [8, S. 18].

In diesem Beispiel mit Anna, Ben und Carla, die an einem Designwettbewerb teilnehmen, ist der marginale Beitrag von Anna zur Koalition von {Ben} der zusätzliche Wert, den sie einbringt, wenn sie sich Ben anschließt, ausgehend von Bens individuellem Gewinn.

Teilnehmer	Zur Koalition	Gewinn vorher	Gewinn nachher	Marginalbeitrag
Anna	\emptyset	0 €	500 €	500 €
Anna	{Ben}	750 €	750 €	0 €
Anna	{Carla}	0 €	750 €	750 €
Anna	{Ben, Carla}	500 €	1000 €	500 €
Ben	\emptyset	0 €	750 €	750 €
Ben	{Anna}	500 €	750 €	250 €
Ben	{Carla}	0 €	500 €	500 €
Ben	{Anna, Carla}	750 €	1000 €	250 €
Carla	\emptyset	0 €	0 €	0 €
Carla	{Anna}	500 €	750 €	250 €
Carla	{Ben}	750 €	500 €	-250 €
Carla	{Anna, Ben}	750 €	1000 €	250 €

Tabelle 2.: Marginalbeiträge der einzelnen Teilnehmer zu den möglichen Koalitionen.

Die Tabelle 2 illustriert den Gewinn jeder möglichen Koalition ohne den betrachteten Spieler und den neuen Gesamtgewinn, sobald dieser Spieler der Koalition beitrifft. Der marginale Beitrag jedes Spielers wird dann als die Differenz zwischen diesen beiden Werten berechnet und gibt Aufschluss über den individuellen Wertbeitrag zum gemeinschaftlichen Erfolg.

Nachdem die marginalen Beiträge jedes Teilnehmers für die verschiedenen Koalitionen festgestellt wurden, ist der nächste Schritt, die Shapley-Werte zu bestimmen, welche eine faire Aufteilung des Gesamtgewinns erlauben. Hierzu wird jede mögliche Reihenfolge (Permutation) betrachtet, in der die Spieler der Koalition beitreten könnten. Jede dieser Permutationen liefert unterschiedliche marginale Beiträge für die Spieler, je nach der Reihenfolge ihres Beitritts [11, S. 307ff].

Im Falle dieses Beispiels mit Anna, Ben und Carla bedeutet dies, dass alle möglichen Reihenfolgen berücksichtigt werden müssen, in denen sie zum ersten Platz beigetragen haben könnten. Die Shapley-Werte werden dann als Durchschnitt der marginalen Beiträge über alle Permutationen berechnet. Dies gewährleistet, dass jeder Spieler einen Anteil des Preisgeldes erhält, der seinem durchschnittlichen Beitrag zum Erfolg entspricht.

Bei drei Teilnehmern existieren $3! = 3 \cdot 2 \cdot 1 = 6$ Permutationen:

1. Anna, Ben, Carla
2. Anna, Carla, Ben
3. Ben, Anna, Carla
4. Carla, Anna, Ben
5. Ben, Carla, Anna
6. Carla, Ben, Anna

Jede Permutation entspricht einer Koalitionsbildung. Anna wird in zwei Koalitionsbildungen (1. und 2.) einer leeren Koalition hinzugefügt. In weiteren zwei Koalitionsbildungen (5. und 6.) wird Anna der bestehenden Koalition aus Ben und Carla hinzugefügt. In den beiden übrigen Koalitionsbildungen wird Anna einmal der Koalition bestehend aus Ben (3.) und einmal der Koalition bestehend aus Carla (4.) hinzugefügt.

Daraus lässt sich nun der Shapley-Wert mit den gewichteten durchschnittlichen marginalen Beiträge für Anna berechnen:

$$\frac{1}{6}(\underbrace{2 \cdot 500\text{€}}_{A \rightarrow \{\emptyset\}} + \underbrace{1 \cdot 0\text{€}}_{A \rightarrow \{B\}} + \underbrace{1 \cdot 750\text{€}}_{A \rightarrow \{C\}} + \underbrace{2 \cdot 500\text{€}}_{A \rightarrow \{B, C\}}) \approx 458,34\text{€} \quad (3.1)$$

Analog gilt das für Ben:

$$\frac{1}{6}(\underbrace{2 \cdot 750\text{€}}_{B \rightarrow \{\emptyset\}} + \underbrace{1 \cdot 250\text{€}}_{B \rightarrow \{A\}} + \underbrace{1 \cdot 500\text{€}}_{B \rightarrow \{C\}} + \underbrace{2 \cdot 250\text{€}}_{B \rightarrow \{A, C\}}) \approx 458,34\text{€} \quad (3.2)$$

und Carla:

$$\frac{1}{6}(\underbrace{2 \cdot 0\text{€}}_{C \rightarrow \{\emptyset\}} + \underbrace{1 \cdot 250\text{€}}_{C \rightarrow \{A\}} + \underbrace{1 \cdot (-250\text{€})}_{C \rightarrow \{B\}} + \underbrace{2 \cdot 250\text{€}}_{C \rightarrow \{A, B\}}) \approx 83,34\text{€} \quad (3.3)$$

Auf Basis der gewichteten durchschnittlichen marginalen Beiträge lässt sich feststellen, dass Anna und Ben jeweils einen Shapley-Wert von ungefähr 458,34 € erhalten, während Carla einen Shapley-Wert von etwa 83,34 € zugewiesen bekommt. Diese Werte spiegeln den fairen Anteil jedes Teilnehmers an der Gesamtprämie wider, basierend auf ihrem individuellen Beitrag zum Erfolg des Teams. Mit dieser konkreten Anwendung der Shapley-Werte auf ein alltagsnahes Beispiel wird nun die zugrunde liegende Theorie und die formale Definition der Shapley-Werte, die diese Berechnungen ermöglichen, detaillierter betrachtet.

3.2. Formale Definition

Sei $\mathcal{N} = \{1, \dots, n\}$ eine endliche Spielermenge mit $n := |\mathcal{N}|$ Elementen. Sei v die Koalitionsfunktion, die jeder Teilmenge von \mathcal{N} eine reelle Zahl zuweist und insbesondere der leeren Koalition den Wert 0 gibt.

$$\begin{aligned} v &: \mathcal{P}(\mathcal{N}) \longrightarrow \mathbb{R} \\ &: v(\emptyset) \mapsto 0 \end{aligned}$$

Eine nicht leere Teilmenge der Spieler $\mathcal{S} \subseteq \mathcal{N}$ heißt Koalition. \mathcal{N} selbst bezeichnet die große Koalition. Den Ausdruck $v(\mathcal{S})$ nennt man den Wert der Koalition \mathcal{S} . Der Shapley-Wert ordnet nun jedem Spieler aus \mathcal{N} eine Auszahlung für das Spiel v zu.

Der marginale Beitrag eines Spieler $i \in \mathcal{N}$, also der Wertbeitrag eines Spielers zu einer Koalition $\mathcal{S} \subseteq \mathcal{N}$, durch seinen Beitritt, ist

$$v(\mathcal{S} \cup \{i\}) - v(\mathcal{S}). \quad (3.4)$$

Sei $i = \text{Anna}$ und $\mathcal{S} = \{\text{Ben}\}$, dann ist $v(\{\text{Ben}\} \cup \{\text{Anna}\}) - v(\{\text{Ben}\})$ das zusätzliche Preisgeld, welches gewonnen wird, wenn Anna der Koalition mit Ben beitrifft.

Der Shapley-Wert eines Spielers i errechnet sich als das gewichtete Mittel der marginalen Beiträge zu allen möglichen Koalitionen:

$$\varphi_i(\mathcal{N}, v) = \sum_{\mathcal{S} \subseteq \mathcal{N} \setminus \{i\}} \underbrace{\frac{|\mathcal{S}|! \cdot (n - 1 - |\mathcal{S}|)!}{n!}}_{\text{Gewicht}} \underbrace{v(\mathcal{S} \cup \{i\}) - v(\mathcal{S})}_{\text{marginaler Beitrag von Spieler } i \text{ zur Koalition } \mathcal{S}}. \quad (3.5)$$

Die Summationsnotation $\sum_{\mathcal{S} \subseteq \mathcal{N} \setminus \{i\}}$ erfasst die marginalen Beiträge, die der Spieler i zu allen Koalitionen leistet, die diesen noch nicht einschließen. Die Verwendung von $\mathcal{N} \setminus \{i\}$ stellt sicher, dass Spieler i nur für jene Koalitionen berücksichtigt wird, zu denen er noch beitragen kann. Im Falle von Anna etwa, beziehen sich die Berechnungen auf die Koalitionen bestehend aus der leeren Koalition \emptyset , aus $\{\text{Ben}\}$, $\{\text{Carla}\}$, oder beiden zusammen $\{\text{Ben}, \text{Carla}\}$ (vgl. Berechnung 3.1).

Die Formel $\frac{|\mathcal{S}|! \cdot (n-1-|\mathcal{S}|)!}{n!}$ in der Shapley-Wert-Berechnung reflektiert den Gewichtungsfaktor für die marginalen Beiträge eines Spielers. Hierbei gibt $|\mathcal{S}|!$ die Permutationen der Spieler innerhalb der Koalition \mathcal{S} an, während $(n-1-|\mathcal{S}|)!$ die Anordnungen der außenstehenden Spieler repräsentiert, nachdem der betrachtete Spieler beigetreten ist. Der Bruchteil $\frac{1}{n!}$ normalisiert diesen Wert über alle möglichen Koalitionszusammensetzungen, wodurch die Wahrscheinlichkeit der Bildung einer spezifischen Koalition ausgedrückt wird.

Betrachten wir Anna als den Spieler i und die Koalition $\mathcal{S} = \{\text{Ben}, \text{Carla}\}$. Die Formel $\frac{|\mathcal{S}|! \cdot (n-1-|\mathcal{S}|)!}{n!}$ berechnet den Gewichtungsfaktor für Annas marginalen Beitrag zur Koalition \mathcal{S} . In diesem Fall ist $|\mathcal{S}| = 2$ und $n = 3$. Somit ergibt sich $|\mathcal{S}|! = 2!$ und $n - 1 - |\mathcal{S}| = 0!$, da nach dem Beitritt von Anna keine weiteren Spieler übrig sind. Der Normalisierungsfaktor ist $n! = 3! = 6$. Daraus folgt:

$$\frac{2! \cdot 0!}{3!} = \frac{2 \cdot 1}{6} = \frac{1}{3}. \quad (3.6)$$

Dies bedeutet, dass unter allen möglichen Permutationen der Spielerreihenfolge, Annas Beitritt zu der Koalition $\{\text{Ben}, \text{Carla}\}$ genau ein Drittel der Zeit am Ende geschieht. Somit wird ihr marginaler Beitrag mit diesem Faktor gewichtet, um den Shapley-Wert zu berechnen (vgl. Berechnung 3.1) [8, S. 21f].

3.3. Axiome

Nachdem die Berechnung des Shapley-Werts für das Beispiel konkretisiert wurde, ist es nun von Bedeutung, die zugrundeliegenden Axiome zu betrachten, welche die theoretische Rechtfertigung für die Methode liefern. Der Shapley-Wert wird nicht nur durch seine Berechnungsmethode, sondern auch durch eine Reihe von Axiomen charakterisiert, die seine Fairness und Kohärenz im Kontext kooperativer Spiele sicherstellen. Lloyd Shapley leitete den Shapley-Wert ursprünglich aus diesen Axiomen ab und bewies, dass dieser der einzige ist, der den Axiomen genügt². Diese Axiome sind wesentliche Bestandteile, die die Einzigartigkeit und die wünschenswerten Eigenschaften des Shapley-Werts als Lösungskonzept definieren [8, S. 22].

Effizienz Der Wert der großen Koalition wird an die Spieler verteilt:

$$\sum_{i \in \mathcal{N}} \varphi_i(\mathcal{N}, v) = v(\mathcal{N}). \quad (3.7)$$

Dies bedeutet, dass die Summe der Shapley-Werte aller Spieler dem Gesamtwert entspricht, den die Koalition aller Spieler zusammen erreichen kann. Der Gesamtwert, den die große Koalition \mathcal{N} , bestehend aus Anna, Ben und Carla, generiert, wird komplett unter den Spielern aufgeteilt [8, S. 22]. Unter Vernachlässigung minimaler Rundungsdifferenzen entspricht die Summe der Shapley-Werte, berechnet in den Gleichungen 3.1, 3.2 und 3.3, dem kollektiven Ertrag der großen Koalition:

$$458,34\text{€} + 458,34\text{€} + 83,32\text{€} \approx 1000\text{€} \quad (3.8)$$

Symmetrie Zwei Spieler i und j , die die gleichen marginalen Beiträgen zu jeder Koalition haben,

$$v(\mathcal{S} \cup \{i\}) = v(\mathcal{S} \cup \{j\}), \quad \forall \mathcal{S} \subseteq \mathcal{N} \setminus \{i, j\} \quad (3.9)$$

erhalten das Gleiche:

²Eine detaillierte Darstellung dieser Axiome und des Beweises ihrer Einzigartigkeit findet sich in Shapleys Originalarbeit, deren umfassende Behandlung jedoch den Rahmen dieser Arbeit überschreiten würde [11, S. 307-318].

$$\varphi_i(\mathcal{N}, v) = \varphi_j(\mathcal{N}, v), \quad (3.10)$$

[8, S. 22]. Obwohl Anna und Ben den gleichen Shapley-Wert erhalten, ist dies nicht auf das Symmetrieaxiom zurückzuführen, da ihre marginalen Beiträge zu den Koalitionen variieren. Zum Beispiel leistet Anna keinen Beitrag zur Koalition, wenn Ben bereits Teil davon ist, während Ben einen positiven Beitrag leistet, wenn Anna bereits zur Koalition gehört (vgl. Tabelle 2). Dies zeigt, dass die Gleichheit ihrer Shapley-Werte ein Ergebnis der spezifischen Zahlenkonstellation in diesem Szenario ist und nicht aus der symmetrischen Interaktion zwischen den beiden Spielern resultiert.

Null-Spieler-Eigenschaft (Dummy-Spieler-Eigenschaft) Ein Spieler i der zu jeder Koalition nichts beiträgt:

$$v(\mathcal{S} \cup \{i\}) = v(\mathcal{S}), \quad \forall \mathcal{S} \subseteq \mathcal{N} \setminus \{i\}, \quad (3.11)$$

erhält den Wert null:

$$\varphi_i(\mathcal{N}, v) = 0, \quad (3.12)$$

[8, S. 22]. Dies stellt sicher, dass ein Spieler, der keinen Beitrag leistet, auch nicht belohnt wird.

Additivität Wenn das Spiel in zwei unabhängige Spiele zerlegt werden kann, dann ist die Auszahlung jedes Spielers im zusammengesetzten Spiel die Summe der Auszahlungen in den aufgeteilten Spielen:

$$\varphi_i(\mathcal{N}, v + w) = \varphi_i(\mathcal{N}, v) + \varphi_i(\mathcal{N}, w). \quad (3.13)$$

[8, S. 22, 23]. Wenn Anna, Ben und Carla neben dem ersten Wettbewerb an einem zweiten, unabhängigen Wettbewerb teilnehmen, besagt das Additivitätsaxiom, dass die Shapley-Werte jedes Spielers aus beiden Wettbewerben einfach die Summe ihrer individuellen Shapley-Werte aus jedem einzelnen Wettbewerb sind. Dies impliziert, dass die faire Aufteilung der Gewinne aus beiden Wettbewerben konsistent bleibt, indem die aus dem ersten Wettbewerb abgeleiteten Prinzipien auf den zweiten Wettbewerb übertragen und dann addiert werden.

4. Von Shapley-Werten zu SHAP: Brückenschlag zur Modellinterpretation

Im Rahmen der kooperativen Spieltheorie ermöglichen die Shapley-Werte eine faire Verteilung des kollektiv erwirtschafteten Nutzens auf die beteiligten Akteure. Diese Methodik findet eine analoge Anwendung in der Welt des maschinellen Lernens, um die Beiträge einzelner Merkmale (Features) zur Vorhersageleistung eines Modells zu bewerten. Hier wird die Terminologie der Shapley-Werte in den Kontext von Machine Learning Modellen übertragen, wobei jedes Feature als „Spieler“ betrachtet wird, dessen Beitrag zur „Auszahlung“ – der Vorhersage des Modells – evaluiert werden soll.

Terminologie Konzept	Terminologie Machine Learning	Ausdruck
Spieler	Feature Index	j
Anzahl aller Spieler	Anzahl aller Features	p
Große Koalition	Menge aller Features	$\mathcal{N} = \{1, \dots, p\}$
Koalition	Menge von Features	$\mathcal{S} \subseteq \mathcal{N}$
Größe der Koalition	Anzahl der Features der Koalition \mathcal{S}	$ \mathcal{S} $
Spieler, die nicht in der Koalition sind	Features, die nicht in der Koalition sind	$C : C = \mathcal{N} \setminus \mathcal{S}$
Koalitionsfunktion	Vorhersage für Merkmalswerte in der Koalition \mathcal{S} abzüglich der Vorhersage im Mittel	$v_{f, x^{(i)}}(\mathcal{S})$
Auszahlung	Vorhersage für eine Beobachtung $x^{(i)}$ abzüglich der Vorhersage im Mittel	$f(x^{(i)}) - \mathbb{E}(f(X))$
Shapley-Wert	Beitrag von Feature j zur Auszahlung des Modells für eine Beobachtung $x^{(i)}$	$\varphi_j^{(i)}(\mathcal{N}, f)$

Tabelle 3.: Terminologie der originären Shapley-Werte im Kontext des maschinellen Lernens [8, S. 26].

Die Koalitionsfunktion $v_{f, x^{(i)}}(\mathcal{S})$ für ein gegebenes Model f und eine Beobach-

tung $x^{(i)}$ ist definiert als:

$$v_{f,x^{(i)}}(\mathcal{S}) = \int_{\mathbb{R}} f(x_{\mathcal{S}}^{(i)} \cup X_C) d\mathbb{P}_{X_C} - \mathbb{E}(f(X)) \quad (4.1)$$

[7, 8, S. 221, S. 27].

Der marginale Beitrag eines Features j zu einer Koalition \mathcal{S} ist dann:

$$\begin{aligned} v_{f,x^{(i)}}(\mathcal{S} \cup \{j\}) - v_{f,x^{(i)}}(\mathcal{S}) &= \int_{\mathbb{R}} f(x_{\mathcal{S} \cup \{j\}}^{(i)} \cup X_{C \setminus \{j\}}) d\mathbb{P}_{X_{C \setminus \{j\}}} - \mathbb{E}(f(X)) \quad (4.2) \\ &\quad - \left(\int_{\mathbb{R}} f(x_{\mathcal{S}}^{(i)} \cup X_C) d\mathbb{P}_{X_C} - \mathbb{E}(f(X)) \right) \\ &= \int_{\mathbb{R}} f(x_{\mathcal{S} \cup \{j\}}^{(i)} \cup X_{C \setminus \{j\}}) d\mathbb{P}_{X_{C \setminus \{j\}}} \\ &\quad - \int_{\mathbb{R}} f(x_{\mathcal{S}}^{(i)} \cup X_C) d\mathbb{P}_{X_C} \end{aligned}$$

[8, S. 29].

Der Beitrag $\varphi_j^{(i)}(\mathcal{N}, f)$ eines Features j für eine Beobachtung $x^{(i)}$ für die Vorhersage $f(x^{(i)})$ ist gegeben als:

$$\begin{aligned} \varphi_j^{(i)}(\mathcal{N}, f) &= \sum_{\mathcal{S} \subseteq \mathcal{N} \setminus \{j\}} \frac{|\mathcal{S}|! \cdot (p - 1 - |\mathcal{S}|)!}{p!} \quad (4.3) \\ &\quad \cdot \left(\int_{\mathbb{R}} f(x_{\mathcal{S} \cup \{j\}}^{(i)} \cup X_{C \setminus \{j\}}) d\mathbb{P}_{X_{C \setminus \{j\}}} - \int_{\mathbb{R}} f(x_{\mathcal{S}}^{(i)} \cup X_C) d\mathbb{P}_{X_C} \right) \end{aligned}$$

[8, S. 29, 30].

5. Praktische Anwendung von SHAP auf lineare Modelle

In diesem Kapitel wird der Einsatz des SHAP-Frameworks zur Interpretation linearer Modelle im Kontext des maschinellen Lernens untersucht. Lineare Modelle, gekennzeichnet durch ihre Transparenz und einfache Struktur, bilden oft die Basis für das Verständnis komplexerer Algorithmen. Dennoch bleibt die Herausforderung bestehen, die Beiträge individueller Merkmale zur Modellvorhersage zu quantifizieren und zu interpretieren.

Die Anwendung von SHAP-Werten ermöglicht es, diesen Herausforderungen zu begegnen und Einblicke in die Modellvorhersagen zu gewähren, die über traditionelle Methoden hinausgehen. Dieses Kapitel führt in die Grundlagen des `shap`-Pakets ein, demonstriert dessen Anwendung auf einen spezifischen Datensatz und diskutiert die Berechnung sowie Interpretation der resultierenden SHAP-Werte. Die daraus gewonnenen Erkenntnisse leisten einen Beitrag zur Erklärbarkeit von Vorhersagemodellen und unterstützen somit die wissenschaftliche Diskussion um die Verantwortlichkeit und Nachvollziehbarkeit in der maschinellen Lernforschung.

5.1. Lineare Modelle als analytische Grundlage

In linearen Regressionsmodellen wird die Zielgröße als eine gewichtete Kombination der Eingangsmerkmale bestimmt. Die einfache lineare Struktur dieser Modelle erleichtert das Verständnis der Beziehungen zwischen den Eingangsdaten und den Vorhersagen.

Lineare Modelle sind ein grundlegendes Werkzeug in der statistischen Modellierung und dienen dazu, das Verhältnis zwischen einer abhängigen Variablen, die üblicherweise mit $y^{(i)}$ bezeichnet wird, und einem oder mehreren Prädiktoren, den unabhängigen Variablen x_i , zu erfassen. Diese Beziehungen werden mittels linearer Gleichungen dargestellt, die für jede einzelne Beobachtung i im Datensatz folgendermaßen formuliert werden können:

$$y^{(i)} = \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j x_j^{(i)} + \epsilon^{(i)}, \quad (5.1)$$

wobei das Ergebnis, das von einem linearen Modell für eine gegebene Beobachtung vorhergesagt wird, sich als Summe der mit Gewichten β_j versehenen Merkmale p ergibt.

Hierbei stellt $y^{(i)}$ den beobachteten Wert der abhängigen Variablen für die Beobachtungseinheit i dar. Der Term β_0 ist der Achsenabschnitt oder y-Achsenabschnitt des Modells, welcher den erwarteten Wert von y darstellt, wenn alle unabhängigen Variablen x null sind. Die Summe $\sum_{j=1}^p \beta_j x_j^{(i)}$ berechnet sich aus den Produkten der Koeffizienten β_j und den Werten der unabhängigen Variablen $x_j^{(i)}$ für jede Beobachtungseinheit i und jeden Prädiktor j , wobei die Koeffizienten β_j den geschätzten Einfluss der entsprechenden unabhängigen Variablen auf die abhängige Variable beschreiben.

Der Fehlerterm $\epsilon^{(i)}$ steht für die Residuen, also die Differenzen zwischen den beobachteten und durch das Modell geschätzten Werten von $y^{(i)}$. Es wird angenommen, dass diese Fehler normalverteilt sind, was bedeutet, dass Abweichungen in beiden Richtungen um den Mittelwert (hier Null) mit abnehmender Wahrscheinlichkeit für größere Fehler auftreten [7, S. 37].

In einem linearen Modell stellt der Achsenabschnitt die Basislinie dar, an der die Auswirkungen aller anderen Merkmale gemessen werden. Dieser Wert gibt an, was das Modell für die Zielvariable vorhersagen würde, wenn alle anderen Merkmale nicht vorhanden wären – der Ausgangspunkt der Vorhersage für einen Datensatz, in dem alle anderen Variablen auf null gesetzt sind. Es ist wichtig zu erwähnen, dass der Achsenabschnitt für sich genommen nicht immer eine praktische Bedeutung hat, da es selten vorkommt, dass alle Variablen tatsächlich den Wert null annehmen. Die wahre Aussagekraft des Achsenabschnitts tritt zutage, wenn die Daten so standardisiert wurden, dass ihre Mittelwerte bei null und die Standardabweichung bei eins liegen. Unter diesen Umständen repräsentiert der Achsenabschnitt die erwartete Zielvariable für einen hypothetischen Fall, in dem alle Merkmale ihren Durchschnittswert aufweisen.

Bei der Betrachtung einzelner Merkmale innerhalb des Modells sagt das Gewicht β_j eines Merkmals, um wie viel sich die Zielvariable $y^{(i)}$ ändert, wenn das Merkmal $x_j^{(i)}$ um eine Einheit erhöht wird – und zwar unter der Annahme, dass alle anderen Merkmale unverändert bleiben. Dies ermöglicht es, den isolierten

Effekt eines jeden Merkmals auf die Vorhersage zu verstehen [7, S. 39].

Die optimalen Gewichte, oder Koeffizienten, eines linearen Regressionsmodells werden üblicherweise durch ein Verfahren bestimmt, das als Methode der kleinsten Quadrate (engl. *Ordinary Least Squares*, OLS) bekannt ist. Diese Methode sucht die Koeffizienten β_0, \dots, β_p , welche die Summe der quadrierten Differenzen zwischen den beobachteten Werten der Zielvariablen $y^{(i)}$ und den von dem Modell vorhergesagten Werten minimieren:

$$\hat{\beta} = \arg \min_{\beta_0, \dots, \beta_p} \sum_{i=1}^n \left(y^{(i)} - \left(\beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j x_j^{(i)} \right) \right)^2. \quad (5.2)$$

Das Ergebnis der Minimierung, $\hat{\beta}$ stellt den Vektor der geschätzten Koeffizienten dar [7, S. 37]. In der vorliegenden Arbeit wird das Python-Paket `scikit-learn`¹ verwendet, um die lineare Regression durchzuführen und die Koeffizienten $\hat{\beta}$ zu bestimmen.

5.2. Einführung in das shap Python-Paket

Das Python-Paket `shap`² ist eine Open-Source-Bibliothek, die es Nutzern ermöglicht, die Auswirkungen von Merkmalen auf Vorhersagen von maschinellen Lernmodellen zu interpretieren und zu visualisieren. Entwickelt wurde die Bibliothek ursprünglich von Scott Lundberg und weiteren Mitwirkenden im Rahmen der Forschungsarbeit an der University of Washington [6]. Das Paket basiert auf dem Konzept der Shapley-Werte aus der kooperativen Spieltheorie und überträgt diese auf den Kontext des maschinellen Lernens, um als Tool für die Interpretierbarkeit und Erklärbarkeit von Modellvorhersagen zu dienen [5].

Die Kernfunktion des `shap`-Pakets ist die Berechnung von SHAP-Werten, welche die Auswirkung der Einzelmerkmale auf die Modellvorhersage quantifizieren. Jeder SHAP-Wert ist ein Maß dafür, wie viel jedes Merkmal zur Vorhersage beigetragen hat, im Vergleich zu einer durchschnittlichen Vorhersage über den gesamten Datensatz. Diese Werte sind besonders wertvoll, weil sie ein Maß für die Bedeutung jedes Merkmals liefern, das sowohl lokal (für einzelne Vorhersagen) als auch global (über das gesamte Modell) interpretiert werden kann.

¹<https://scikit-learn.org>

²<https://shap.readthedocs.io>

Mit `shap` können Benutzer die Vorhersagen einer Vielzahl von Modellen interpretieren, von linearen Modellen bis hin zu komplexen Konstrukten wie tiefe neuronale Netzwerke. Die Bibliothek bietet eine vielseitige Auswahl an Visualisierungsoptionen, darunter Beeswarm-Plots, Dependence-Plots und Summary-Plots, die es ermöglichen, die SHAP-Werte intuitiv zu verstehen. Diese Visualisierungen erleichtern es, Muster und Beiträge einzelner Merkmale zu erkennen, was nicht nur wertvolle Einblicke in die Leistung des Modells bietet, sondern auch zu faireren und transparenteren Modellentscheidungen führen kann.

5.3. Einführung in den Datensatz

TODO: Einleitung in den Datensatz

5.4. Modellierung der linearen Regression

TODO: Modell fitten

6. Ergebnisse

6.1. Berechnung von SHAP-Werten

TODO: Berechnung der SHAP-Werte.

6.2. Interpretation

TODO: Analyse der Ergebnisse, Interpretation von SHAP-Werten, Vergleich der Koeffizienten mit den **SHAP-Werten!**.

6.2.1. Lokale Interpretation

6.2.2. Globale Interpretation

7. Ausblick

8. Fazit

Literaturverzeichnis

- [1] Encarnación Algaba, Vito Fragnelli, and Joaquín Sánchez-Soriano. Handbook of the shapley value. 2019.
- [2] Daniel Fryer, Inga Strümke, and Hien Nguyen. Shapley values for feature selection: The good, the bad, and the axioms. *IEEE Access*, 9:144352–144360, 2021.
- [3] Scott Lundberg. Shap/SHAP: A game theoretic approach to explain the output of any machine learning model.
- [4] Scott Lundberg. Shap/SHAP: A game theoretic approach to explain the output of any machine learning model.
- [5] Scott Lundberg. Welcome to the shap documentation.
- [6] Scott M Lundberg and Su-In Lee. A unified approach to interpreting model predictions. In I. Guyon, U. Von Luxburg, S. Bengio, H. Wallach, R. Fergus, S. Vishwanathan, and R. Garnett, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 30. Curran Associates, Inc., 2017.
- [7] Christoph Molnar. *Interpretable machine learning: A guide for making Black Box models explainable*. Chistoph Molnar c/o Mucbook Clubhouse, Heidi Seibold, 2 edition, 2022.
- [8] Christoph Molnar. *Interpreting machine learning models with SAP A guide with python examples and theory on Shapley Values*. Chistoph Molnar c/o MUCBOOK, 1 edition, 2023.
- [9] Raquel Rodríguez-Pérez and Jürgen Bajorath. Interpretation of machine learning models using shapley values: Application to compound potency and multi-target activity predictions - journal of computer-aided molecular design, May 2020.
- [10] Benedek Rozemberczki, Lauren Watson, Péter Bayer, Hao-Tsung Yang, Olivér Kiss, Sebastian Nilsson, and Rik Sarkar. The shapley value in machine learning. In Lud De Raedt, editor, *Proceedings of the Thirty-*

First International Joint Conference on Artificial Intelligence, IJCAI-22, pages 5572–5579. International Joint Conferences on Artificial Intelligence Organization, 7 2022. Survey Track.

- [11] L. S. Shapley. *17. A Value for n -Person Games*, pages 307–318. Princeton University Press, Princeton, 1953.

Abbildungsverzeichnis

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Potenzielle Gewinne für verschiedene Teilnehmerkonstellationen im Designwettbewerb.	6
Tabelle 2: Marginalbeiträge der einzelnen Teilnehmer zu den möglichen Koalitionen.	6
Tabelle 3: Terminologie der originären Shapley-Werte im Kontext des maschinellen Lernens [8, S. 26].	13

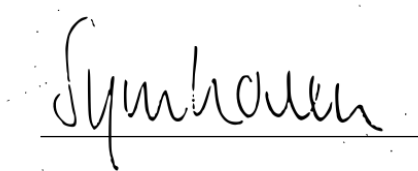
Quellcodeverzeichnis

Eidesstattliche Erklärung

Ich versichere an Eides statt, dass ich die vorstehende Arbeit selbständig und ohne fremde Hilfe angefertigt und mich anderer als der im beigefügten Verzeichnis angegebenen Hilfsmittel nicht bedient habe. Alle Stellen, die wörtlich oder sinngemäß aus Veröffentlichungen übernommen wurden, sind als solche kenntlich gemacht. Alle Internetquellen sind der Arbeit beigefügt.

Des Weiteren versichere ich, dass ich die Arbeit vorher nicht in einem anderen Prüfungsverfahren eingereicht habe und dass die eingereichte schriftliche Fassung der auf dem elektronischen Speichermedium entspricht.

München, 10. November 2023

A handwritten signature in black ink, reading 'Symhoven', written over a horizontal line.

SIMON SYMHOVEN

A. Quellcode

Quellcode