

# 不確実な事象を対象とした解釈性のある確率的予測モデルに関する研究

1X20C053-2 更家峻介  
指導教員 後藤正幸

## 1. 研究背景と目的

不確実性の高い事象（投資・天気・競馬など）に対して回帰予測に基づく意思決定を行う際、予測が実際の結果と大きく異なることで不利益を被るリスクは高い。特に、対象変数を一点の値のみで予測する点推定では、予測結果に対する不確実性の大小を表現出来ないため、リスクを適切に考慮した意思決定のための判断材料としては不十分である。

これに対し、予測結果の確率分布を推定（分布推定）可能な確率的予測モデルの学習アルゴリズムとして、NGBoost[1]が提案されている。NGBoostを用いることで、予測結果の不確実性を分散の大きさなどで表現することができ、不確実性が大きい場合はリスクを避けるなどの方法で意思決定に反映させることが可能である。一方で、NGBoostは、モデルがなぜそのような予測結果を出力したのかに関する解釈を、直接モデルから得ることが困難である。このようなブラックボックスなモデルから出力された予測結果をそのまま重要な意思決定に利用することは、実ビジネスではリスクが大きい。

一方、近年表形式データに対して高精度な予測が可能な深層学習モデルに関する研究が盛んである。特に、Attention機構を有するモデルでは予測結果に対する解釈をモデルから直接得ることが可能である。中でも、Self-Attention and Intersample-Attention Transformer (SAINT) [2]は2種類のAttention機構を用いて、表形式データに対して高精度な予測を実現している。しかし、SAINTは点推定を前提としており、不確実性の高い事象に対する意思決定に活用するには不十分である。

そこで本研究では、SAINTを拡張し、表形式データに対する分布推定と予測結果に対する多角的な解釈をモデルから直接得ることが可能なGaussian-SAINTを提案する。また、提案手法を用いて実データを用いた評価実験・分析を実施し、解釈性や意思決定への貢献に関する考察を行うことで、提案手法の有用性を示す。

## 2. 準備：SAINT

Transformerは、Self-Attention機構によって特徴量間の複雑な関連度を考慮した上での予測を可能にしたモデルで、自然言語・画像・音声などの様々な領域で高い精度を示している。SAINTは、Transformerを応用した、表形式データに特化したモデルとして位置付けされる。Self-Attention機構に加えてIntersample-Attention機構を用いることにより、特徴量間の関連度だけでなく、データ間の関連度を考慮することが可能である。SAINTの概略図を図1に示す。

### 2.1. Self-Attention 機構

Self-Attention機構は、同一データ内の特徴量間の関連度を基に、各特徴量に重みを割り当てるAttention機構である。得られたAttentionの計算過程を可視化することで、最終的な予測結果に対して、各特徴量がどれだけ影響してい

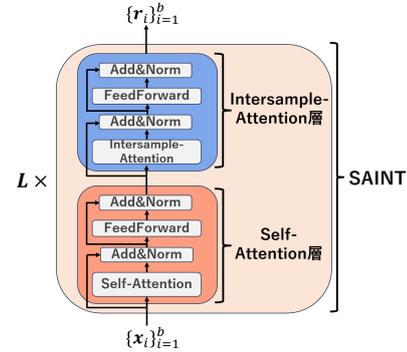


図 1: SAINT の概略図

るかを直接解釈することができる。

### 2.2. Intersample-Attention 機構

Intersample-Attention機構は、同一バッチ内の異なるデータ同士の関連度を考慮しながら各データに重みを割り当てるAttention機構である。これにより、同一バッチ内の他のデータの情報も考慮しながら、各データに対する予測が可能になる。SAINTにおいては、Self-Attention層から得られた（バッチ単位の）出力を、Intersample-Attention機構の入力とする。そして、Intersample-Attention層からの出力が、MLP層の入力とされ、回帰や分類のタスクに用いられる。

### 3. 提案手法

本研究では、予測対象の変数の背後に正規分布を仮定し、SAINTを確率的予測モデルの形式に拡張したGaussian-SAINTを提案する。Gaussian-SAINTを用いることで、表形式データに対して分布推定を実現するだけでなく、2種類のAttention機構の計算過程を可視化することによる多角的な解釈を実現する。Gaussian-SAINTでは、SAINTの出力層を2次元に変更し、(i番目のデータに対する)各次元からの出力をそれぞれ予測対象の変数に関する平均と分散( $\hat{\mu}_i, \hat{\sigma}_i^2$ )と定義する。また損失関数は、予測対象の変数に関する確率分布に正規分布を仮定した場合の負の対数尤度(GNLL)と、推定した分散の和の形式で表現され、以下の式(1)のように定義する。後者は、分散の予測値が発散してしまうことを防ぐ機能を有する。

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^N -\log P(y_i | \hat{\mu}_i, \hat{\sigma}_i^2) + \lambda \hat{\sigma}_i^2 \quad (1)$$

$$P(y_i | \hat{\mu}_i, \hat{\sigma}_i^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hat{\sigma}_i^2}} \exp\left(-\frac{(\hat{\mu}_i - y_i)^2}{2\hat{\sigma}_i^2}\right) \quad (2)$$

ただし、 $N$ はデータ数、 $y_i$ は*i*番目のデータの観測値、 $\lambda$ は正則化の強さを調整するハイパーパラメータを表す。なお、SAINTでは損失関数として平均二乗誤差を用いるが、Gaussian-SAINTではGNLLを用いることで、正規分布の当てはまりを基準にモデルを学習する。

## 4. 評価実験・分析

### 4.1. 実験概要

本研究では、日本中央競馬会（JRA）が提供する競馬のレースデータを対象に評価実験を行う。対象データセットには、2021年6月から2023年2月までのレースに出走した馬の、レースを走破したタイム（以下、走破タイム）に関する情報（データ数 85,570 件、特徴量数 12 個）が含まれる。ここで、条件が異なるレース間で予測値の大小比較を可能にするため、レースの平均タイムと走破タイムの差によって計算される補正タイムを目的変数とする。ただし、補正タイムは、走破タイムがレースの平均タイムと比較してどの程度優れているかを表す指標であり、走破タイムがレースの平均タイムより早いほど高い値をとる。比較手法には、NGBoost と従来の SAINT を採用し、予測精度と尤度の観点から提案モデルの有用性を確認する。ハイパーパラメータは事前実験により  $\lambda = 1.0$  と設定した。

### 4.2. 評価実験とシミュレーションの結果

表 1 に精度の比較結果を示す。予測値（平均）については RMSE（二乗平均平方根誤差）、予測した分布（平均と分散）については GNLL（尤度）を用いて評価を行う。

モデル	RMSE	GNLL
NGBoost	<b>16.11</b>	<b>4.15</b>
SAINTE	17.99	-
Gaussian-SAINTE	18.19	10.58

表 1 より、Gaussian-SAINTE は、確率的予測を行いながらも、SAINTE とほぼ同程度の RMSE を示した。しかし、NGBoost よりも両指標において低い精度を示した。これは説明変数の数が少量であるために、深層学習モデルの強みが活かしきれなかったことなどが原因であると考えられる。しかし、Gaussian-SAINTE は不確実性を表現できるうえに、後述の解釈性を有するため、人間と協働して意思決定をする場合に有用であると考えられる。また、ある 1 レースに出走した全 10 頭の馬について、予測したパラメータの正規分布を描画した結果を図 2 に示す。

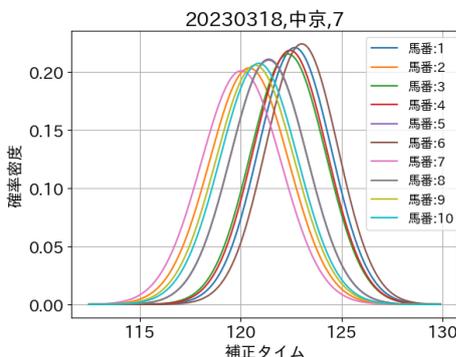


図 2: ある 1 レースにおける予測結果の例

補正タイムが高く分散が小さい群と、補正タイムが低く分散が大きい群に層別でき、前者の方が不確実性が低く、上位に入る可能性が高いと予想できる。このように、Gaussian-SAINTE により、点推定の結果だけでは把握できなかった不

確実性を表現でき、意思決定に活用することができる。

### 4.3. Self-Attention 機構から得られる解釈

図 3 はある 1 頭の馬がレース A~F に出走するときの補正タイムの予測結果と、予測の際に Self-Attention 機構から得られた Attention 値のヒートマップである。

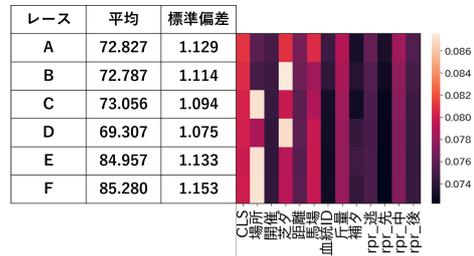


図 3: 得られた Attention の解釈例 (1)

図 3 より、レース C は“場所”の Attention 値が大きく、補正タイムはレース E・F と比べて低いことが読み取れる。したがって、この馬は対象のレースが開催されている“場所”には適していないと考えられる。この結果は、馬券購入者の立場では“この馬の馬券を購入しない”、馬主の立場では“別の場所で開催されるレースにこの馬を出走させる”といった意思決定に活用することができる。

### 4.4. Intersample-attention 機構から得られる解釈

図 4 にある 1 レースにおける Intersample-Attention 機構から得られた馬間の Attention 値のヒートマップを示す。

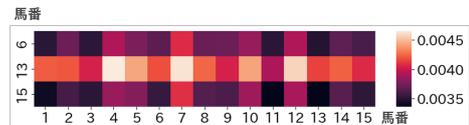


図 4: 得られた Attention の解釈例 (2)

図 4 より、同じバッチ内でも馬番 13 のように馬番 4・7・12 など特定の馬との Attention 値が大きい馬がいる反面、馬番 6・15 のように Attention 値が満遍なくばらついている馬もいることがわかる。この結果から、前者は“周囲の馬の影響を強く受ける馬”であり、後者は“影響を受けづらい馬”であるといった解釈ができる。

このように、2 種類の Attention 機構から得られた結果をそれぞれ可視化することで、様々な意思決定者にとって有用な解釈が得られることを確認した。

## 5. まとめと今後の課題

本研究では、表形式データに対して、確率的予測と各特徴量が予測結果に与えた影響に関する多角的な解釈が可能な Gaussian-SAINTE を提案した。また、実データを用いた評価実験・分析を実施することで、提案手法の有用性を示した。今後の課題としては、精度の向上のため、ミニバッチのサンプリング方法の検討などが考えられる。

### 参考文献

- [1] T.Duan et al. NGBoost: natural gradient boosting for probabilistic prediction. In *Proceedings of ICML*, pp. 2690-2700, 2020.
- [2] G.Somepalli et al. SAINT: improved neural networks for tabular data via row attention and contrastive pre-training. In *Proceedings of NeurIPS Workshop*, 2021.