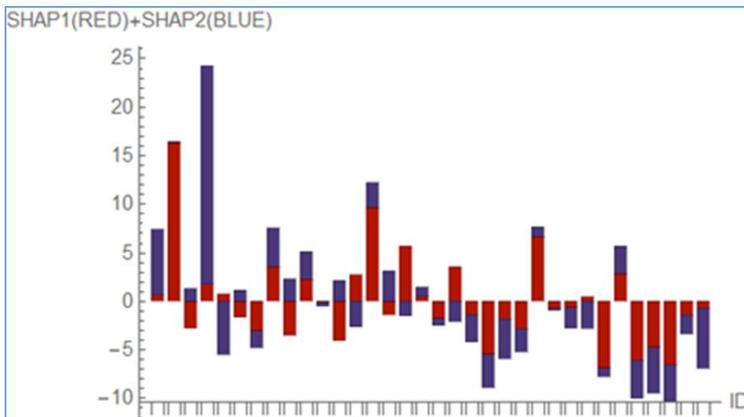
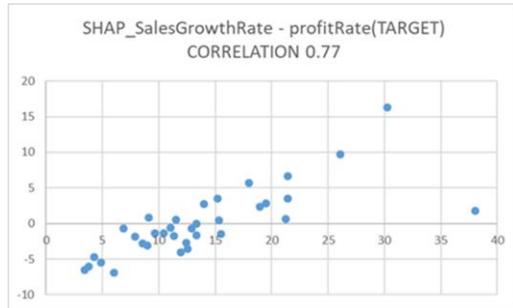


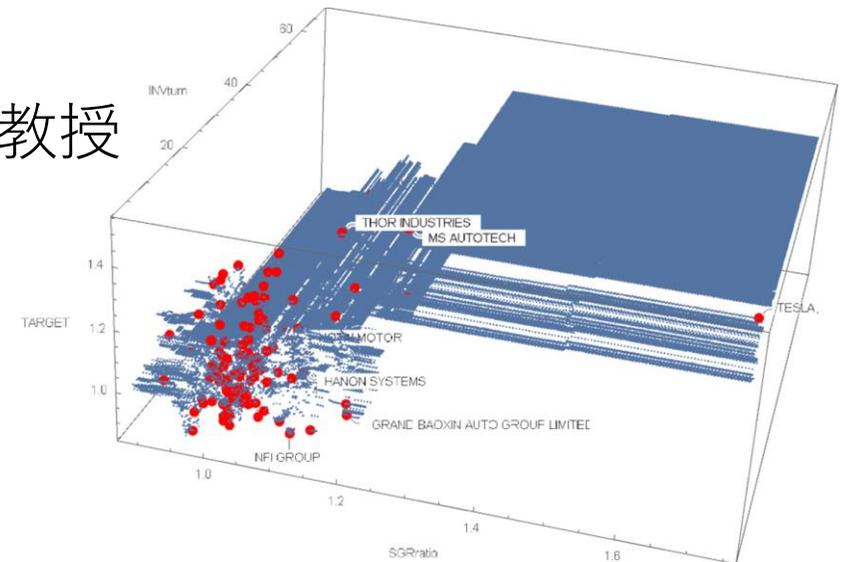
機械学習の回帰分析に使える SHAP値を理解する



2022年12月3日

学習院大学経済学部経営学科教授

白田 由香利



目次

→ 目的：研究でSHAP値を使うために

1. SHAPは回帰分析で用いる
2. 説明変数による協調
3. 特性関数 characteristic function
4. Shapley値の計算過程
 1. Shapley値の公式
 2. 説明変数が1個の事例
 3. 説明変数が2個の事例
5. データの内部構造の解釈
6. まとめ

目的：研究でSHAP値を使うために

- 必要なこと

1. パイソンプログラムを動かせる環境を構築する
2. SHAPの理論を理解する

これができないと、結果を正しく読み解くことができない。

回帰とSHAP分析のプログラム 1/3

```
In [1]: # 必要なパッケージの読み込み
import shap
import numpy as np
import pandas as pd
from xgboost import XGBRegressor
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
```

```
In [2]: # パラメータ
# 入力ファイルパス
input_filename = "kusuri2019.csv"

# 出力ファイルパス
regre = "regression1out.csv"
shapv = "shaplout.csv"
# regre = "regression2out.csv"
# shapv = "shap2out.csv"

# 説明変数
src_name = ['SalesGrowthRate']
# src_name = ['SalesGrowthRate', 'InventoryTurnover']

# ターゲット変数
tgt_name = 'ProfitRate'

# 入力ファイル、出力ファイルの文字コード
# 'utf8', 'sjis', 'euc' が一般的であるが、
# kusuri2019.csvは'cp932'でエンコードされている
enc = 'sjis'
```

回帰とSHAP分析のプログラム 2/3

```
In [3]: # データ読み込み
df = pd.read_csv(input_filename, encoding=enc)
# 説明変数の取り出し
X = pd.DataFrame(df[src_name])
# ターゲット変数の取り出し
Y = pd.DataFrame(df[tgt_name])
```

read_csv ize. それをdfに入れる
df[src_name] で変数を指定し
それを DataFrame としと出し Xへ。
全データを使って訓練している。

```
In [4]: params = [
    # ここで設定するそれぞれのパラメータは
    # 以下のように要素数がすべて同じになるように設定する必要がある。
    'n_estimators': [100, 200, 300],
    'max_depth': [3, 5, 7],
    'learning_rate': [0.01, 0.05, 0.1]
]
xgb = XGBRegressor(objective='reg:squarederror', seed=0)
xgb_grid = GridSearchCV(
    estimator=xgb,
    param_grid=params,
    cv=5,
    return_train_score=True,
    scoring='r2',
    n_jobs=-1,
    verbose=0
)
xgb_result = xgb_grid.fit(X, Y)
```

3x3x3 = 27通り

XGBoostで回帰する。XGBRegressor

R²

```
In [5]: # 27通りのパラメータ
params = np.array(xgb_grid.cv_results_['params'])
# 平均学習スコア
scores = np.array(xgb_grid.cv_results_['mean_train_score'])
# 最もスコアが高かったパラメータを取り出す
index = np.argmax(scores)
best_param = params[index]

# print(scores)

# best_paramを使ったXGBoostを生成
best_estimator = XGBRegressor(
    objective='reg:squarederror', seed=0, **best_param)

# print(best_estimator)

# すべてのデータを使って学習
best_result = best_estimator.fit(X, Y)
```

3x3x3

argmax

その時のパラメータ

求めた27通りの中で一番良いパラメータ
例 300, 7, 0.05
でXGBRegressorする

全データを使って回帰モデルを作る

回帰とSHAP分析のプログラム 3/3

```
# すべてのデータを使って学習  
best_result = best_estimator.fit(X, Y)
```

全データを使って回帰モデルを作る
SHAPはフィッティングのよい回帰モデルが必要なのでこうする。

file:///C:/Users/yukar/Downloads/XGB_SHAP_kusuri2019A.html

1/2

2022/08/03 22:36

XGB_SHAP_kusuri2019A

```
In [6]: # shapのバージョンによってmodel_outputを変更  
if shap.__version__ > "0.33.0":  
    explainer = shap.TreeExplainer(model=best_result, feature_perturbation='tree_path_dependent', model_output='raw')  
else:  
    explainer = shap.TreeExplainer(model=best_result, feature_perturbation='tree_path_dependent', model_output='margin')  
# SHAP値  
shap_values = explainer.shap_values(X)  
  
#print(shap_values)
```

その回帰モデルを使ってSHAP値を求める。

SHAP値

nntree_limit is deprecated, use `iteration_range` or model slicing instead.

warningは無視してよ。

```
In [7]: # 企業名と説明変数のSHAP値の保存  
out = pd.DataFrame(shap_values, columns=src_name)  
out.to_csv(shapv, index=False, encoding=enc)
```

SHAP値 shapv に書き出す。

自分の研究でSHAPを使えるようにする

SHAPプログラムを動かすことは簡単にできる。

難しいことは、SHAP理論を理解すること。

理解していないで結果を分析しても、読み切れない。

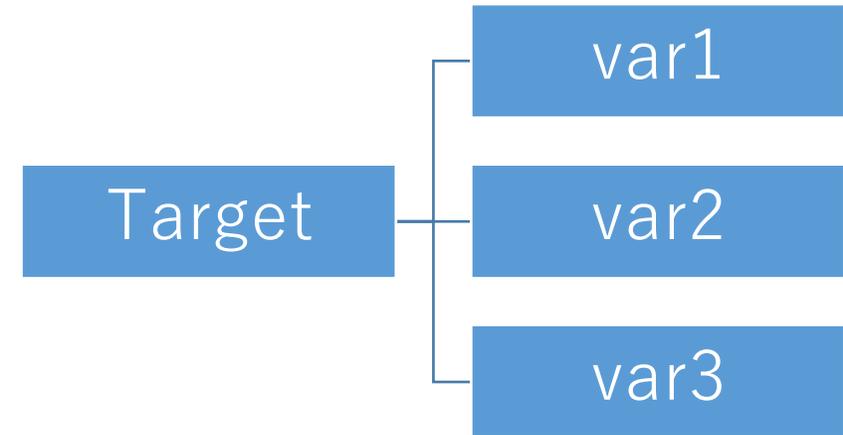
目次

目的：研究でSHAP値を使うために

- 
1. SHAPは回帰分析で用いる
 2. 説明変数による協調
 3. 特性関数 characteristic function
 4. Shapley値の計算過程
 1. Shapley値の公式
 2. 説明変数が1個の事例
 3. 説明変数が2個の事例
 5. データの内部構造の解釈
 6. まとめ

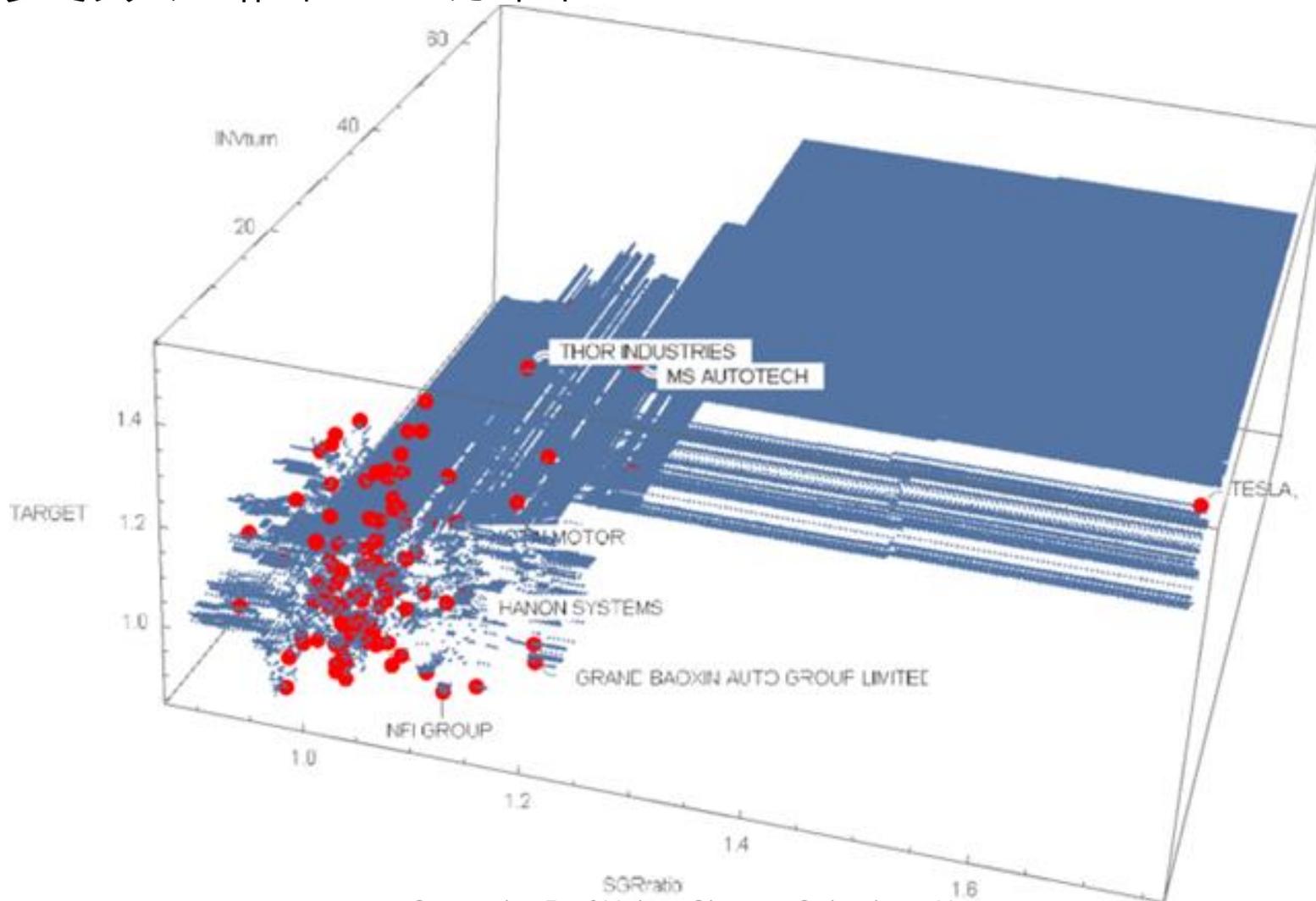
SHAPは回帰分析で用いる

- ターゲット変数（被説明変数）
- 説明変数
- Shapley値とSHAP値の区別は後述



機械学習の回帰モデルは複雑形状 説明変数2個の場合

-

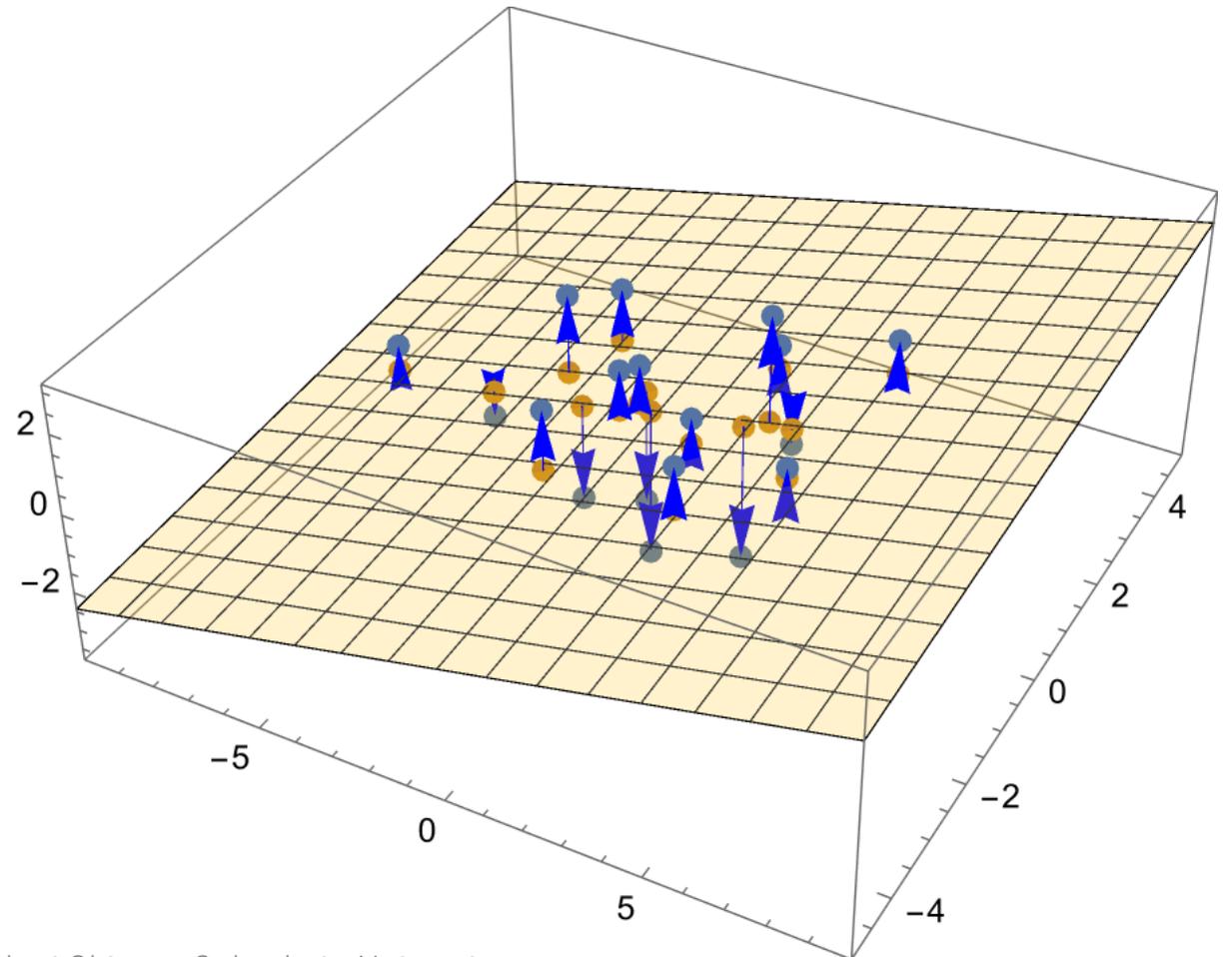


伝統的 線形モデルを使った 2つの説明変数の線形重回帰分析

- 回帰モデル（予測関数）は
平面となる

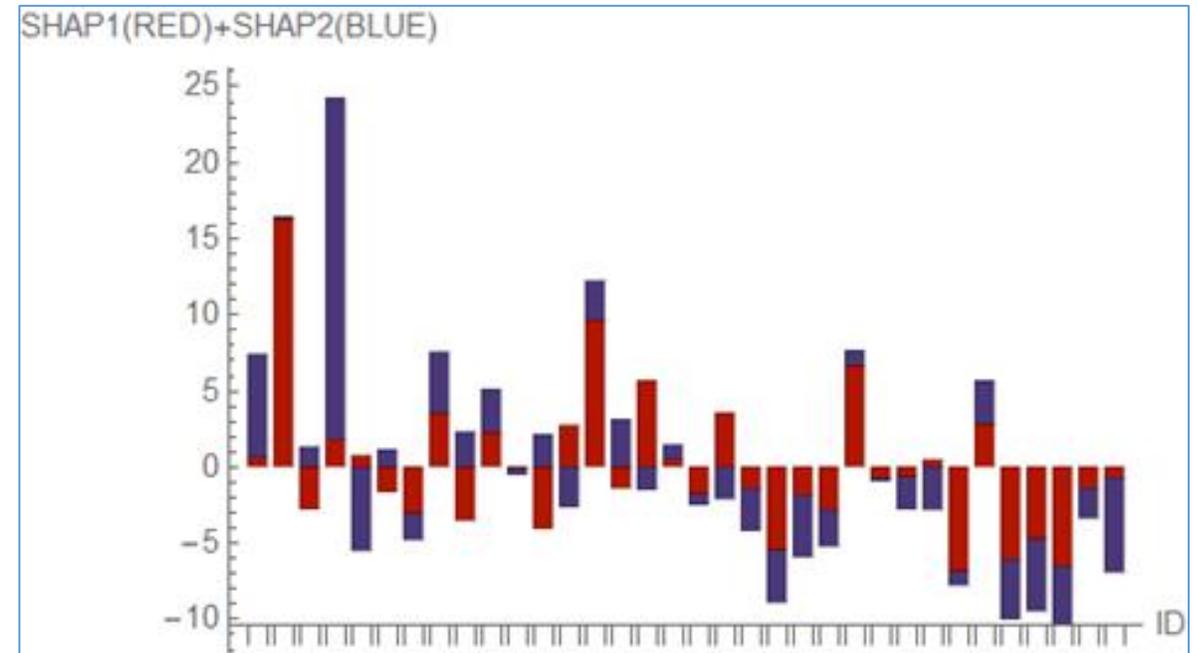
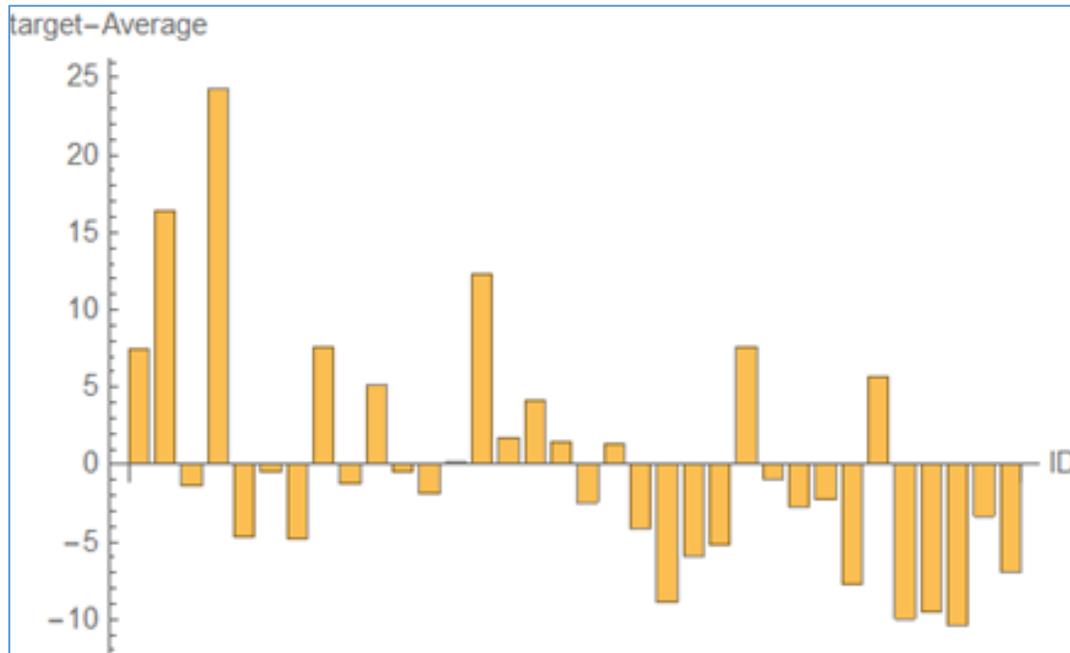
$$f(x, y) = a + b \times x + c \times y$$

- 観測値と予測値のずれは
残差 という



Shapley値を回帰の解釈で用いる ターゲット値を説明変数の貢献に分配する

- Q:どの説明変数がターゲット値に貢献していますか？
- ターゲット値の偏差を説明変数SHAP値に分配したようす



偏差 = そのデータのターゲット値 - 平均値

目次

1. SHAPは回帰分析で用いる
-  2. 説明変数による協調
3. 特性関数 characteristic function
4. Shapley値の計算過程
 1. Shapley値の公式
 2. 説明変数が1個の事例
 3. 説明変数が2個の事例
5. データの内部構造の解釈
6. まとめ

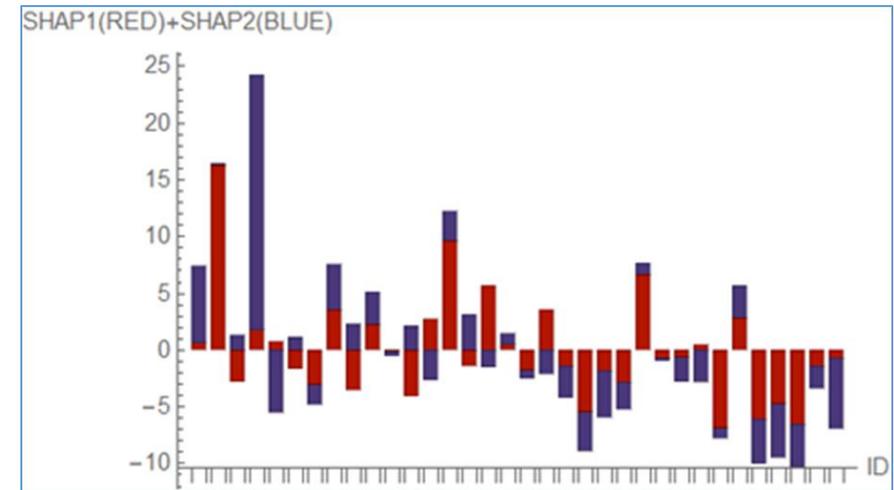
オリジナルのShapley値から Lundberg氏のSHAP値へ

• n人のプレイヤーの協調ゲーム

- 白石さんと白田さんでアルバイトすると2万円
- しかし白石さんと白田さんと**白山さん**でアルバイトすると10万円
- 3人にどのように10万円を分配すべきかという、協調ゲーム問題を解いたユニーク解がShapleyの公式

• n個の説明変数の回帰

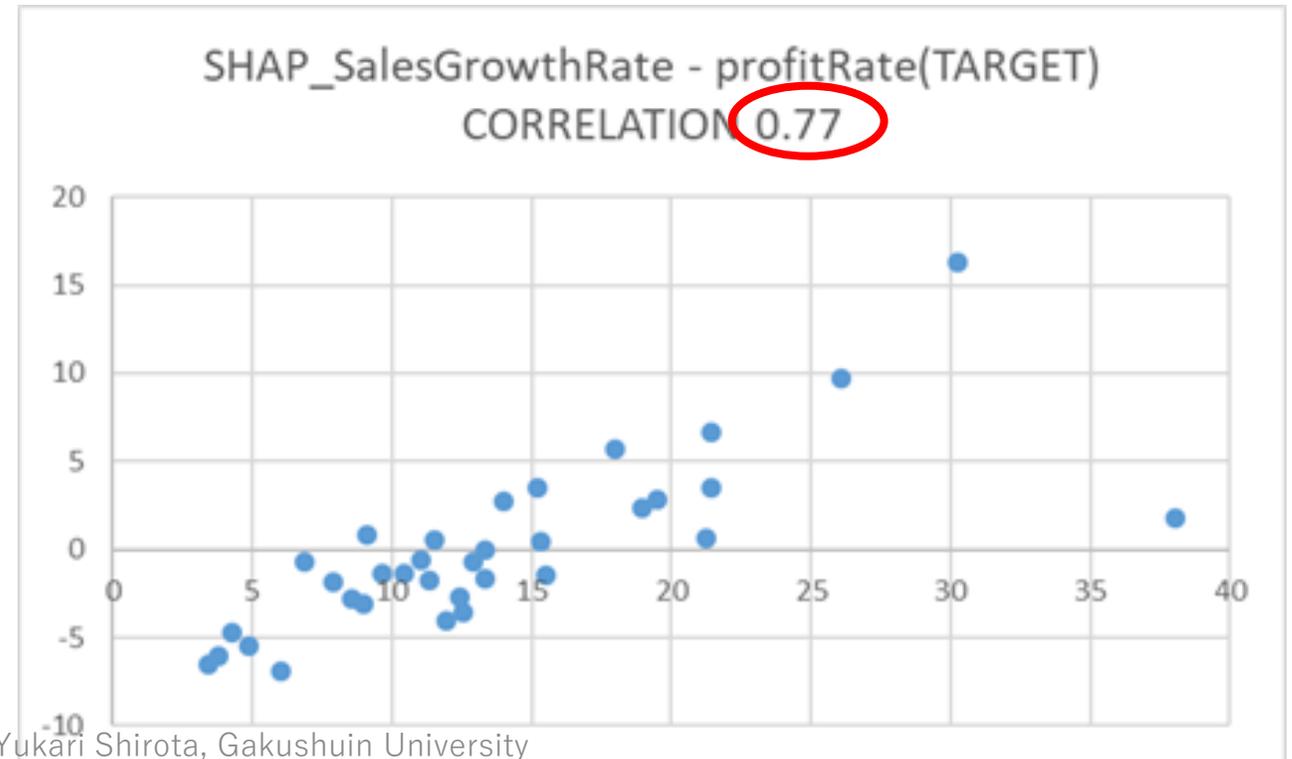
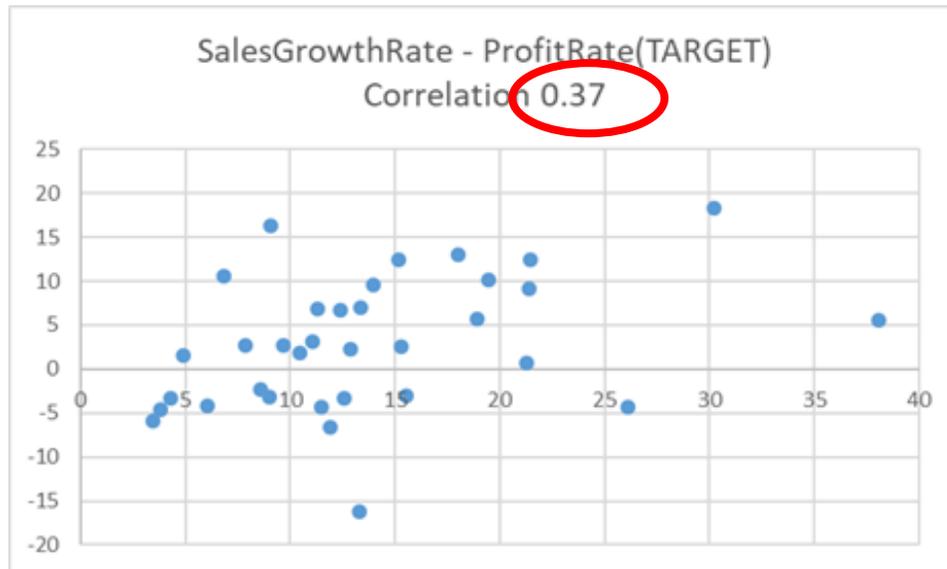
- 各データのターゲット値が儲けた金額
 - 各説明変数が各プレイヤー
 - データは複数個あるが、データ毎にターゲット値は異なる。よって、データ毎に説明変数のSHAP値が計算される。
 - 例：5番目のデータの、説明変数1のSHAP値
- Shapley値は必ず正であるが、SHAP値は負もある。



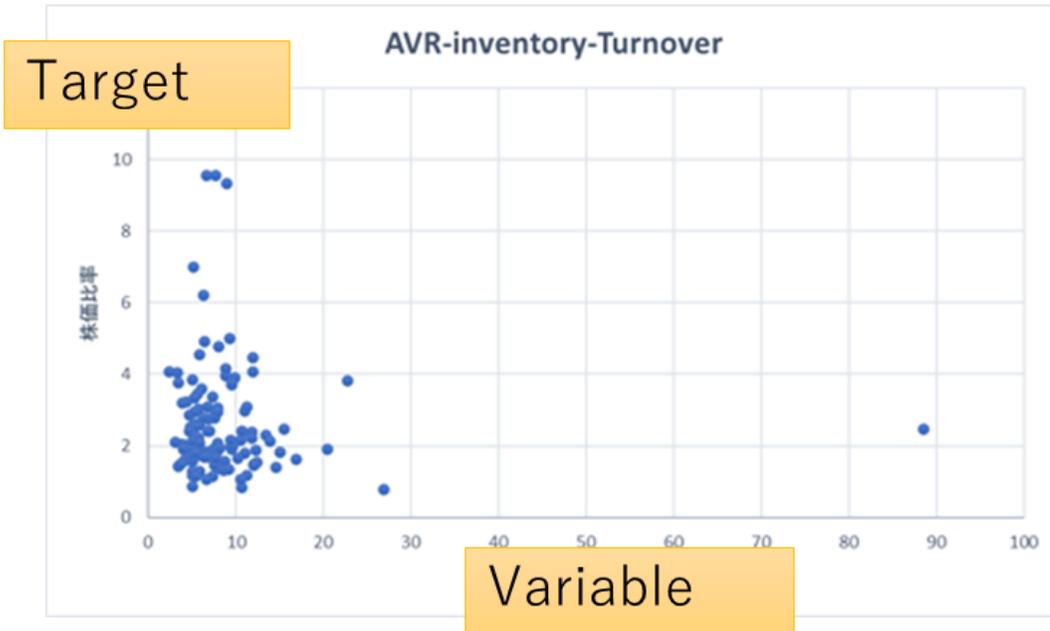
説明変数がターゲット値にどの程度貢献しているかが分かる。
重要なファクターは何かが分かる。
データによって、重要なファクターが異なる様子が見られる。

説明変数とターゲット変数の関係

- 通説で「売上高成長率やサプライチェーンのスキルが高い製造業の方が、営業利益率が高くなるであろう」があったが散布図で示せなかった。SHAPを使うと相関係数が高くなり、その相関関係を示すことができた。

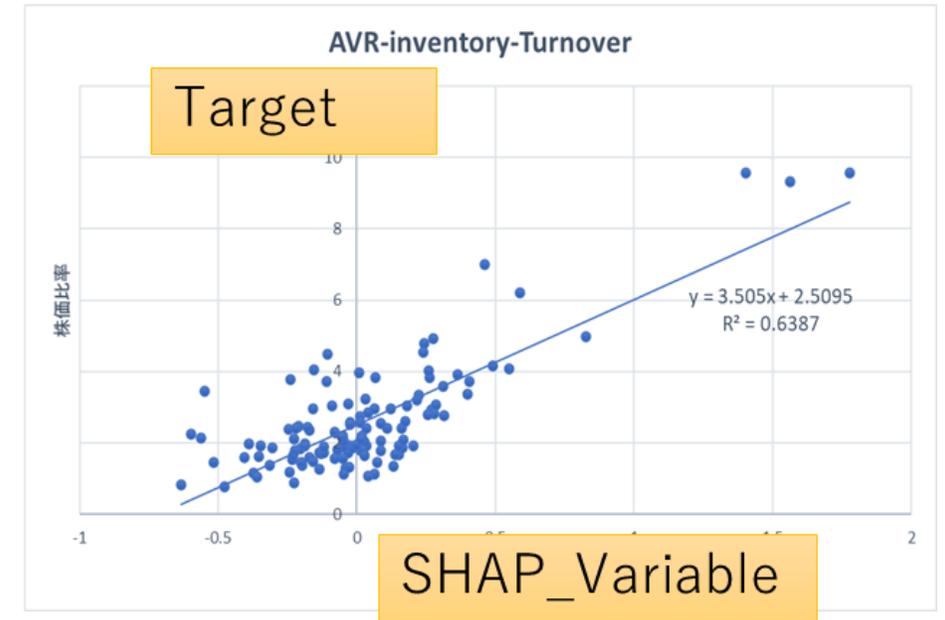


SHAPにすると相関係数が高くなる



No relationship

Using SHAP of
VARIABLE



High correlation
coefficient

説明変数とターゲット変数の関係

- 説明変数の生データ値とターゲット値で散布図を描いても高い相関係数は出ない場合でも
- SHAP値とターゲット値で散布図を描くと、高い相関係数が出る。
- **理由：各データの特性を考慮しているから。**

目次

1. SHAPは回帰分析で用いる
2. 説明変数による協調
-  3. 特性関数 characteristic function
4. Shapley値の計算過程
 1. Shapley値の公式
 2. 説明変数が1個の事例
 3. 説明変数が2個の事例
5. データの内部構造の解釈
6. まとめ

特性関数 v (ギリシャ文字のニュー)

Characteristic Function

- n 個の説明変数の任意の部分集合に対して、その部分集合によって得られる報酬(ターゲット値)がいくらになるかを与える関数である。

$$v: 2^n \rightarrow R$$

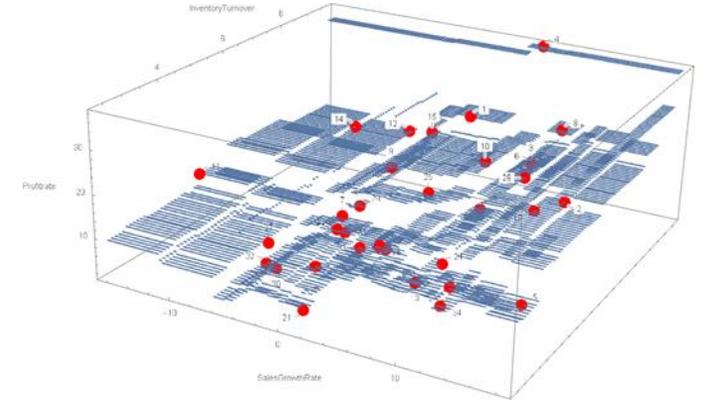
- 例えば、説明変数が2個の場合、以下の4つの部分集合が存在する。

$\{\}, \{\text{説明変数1}\}, \{\text{説明変数2}\}, \{\text{説明変数1}, \text{説明変数2}\}$

Shapley値を求めるには、特性関数が必要。

**しかし、任意の部分集合に対する報酬など測定不能
どうするか、悩む...**

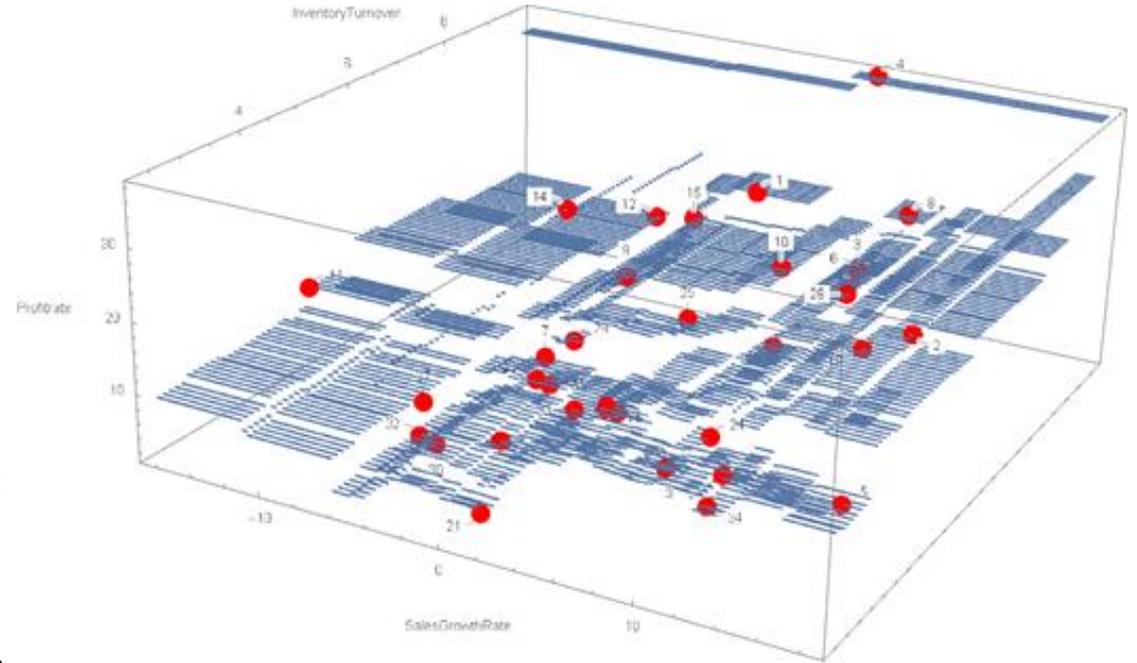
特性関数 Lundbergによる問題解決



- 機械学習による**回帰モデル** $f(X)$ を使えばよい。
- しかし、 X の値すべてが与えられないと $f(X)$ は計算できない. . . .
- **参加していない説明変数**に関しては、その説明変数の**平均値**を用い、 $f(X)$ を計算し、その値で v を近似的に求める。
- 経営学の企業評価においても、**業界平均**という概念は重要。それに対応する概念を用いている。

説明変数2個の 回帰モデル $f(X)$

- 例えば, $v(\{\text{説明変数1}\})$
を計算したい場合,
 $f(\text{説明変数1}, \text{説明変数2の平均値})$
- 例えば, 空集合に対して, $v(\{\})$
を計算したい場合は,
 $f(\text{説明変数1の平均値}, \text{説明変数2の平均値})$



目次

1. SHAPは回帰分析で用いる
2. 説明変数による協調
3. 特性関数 characteristic function
4. Shapley値の計算過程
 - 1. Shapley値の公式
 - 2. 説明変数が1個の事例
 - 3. 説明変数が2個の事例
5. データの内部構造の解釈
6. まとめ

Shapley値の計算過程

(1)Shapley値の公式

- Shapleyの説明変数 i の貢献度の期待値の解の式を与える

$$\phi_i = \sum_{S \subseteq N \setminus \{i\}} \frac{|S|! (|N| - |S| - 1)!}{|N|!} [v(S \cup \{i\}) - v(S)]$$

説明変数部分集合Sに対する説明変数iの貢献

説明変数が1個ずつ参加して全体で協調作業をする $|N|!$ 通りの順列が等確率で起こると仮定

$$|S|! \times 1 \times (|N| - |S| - 1)!$$

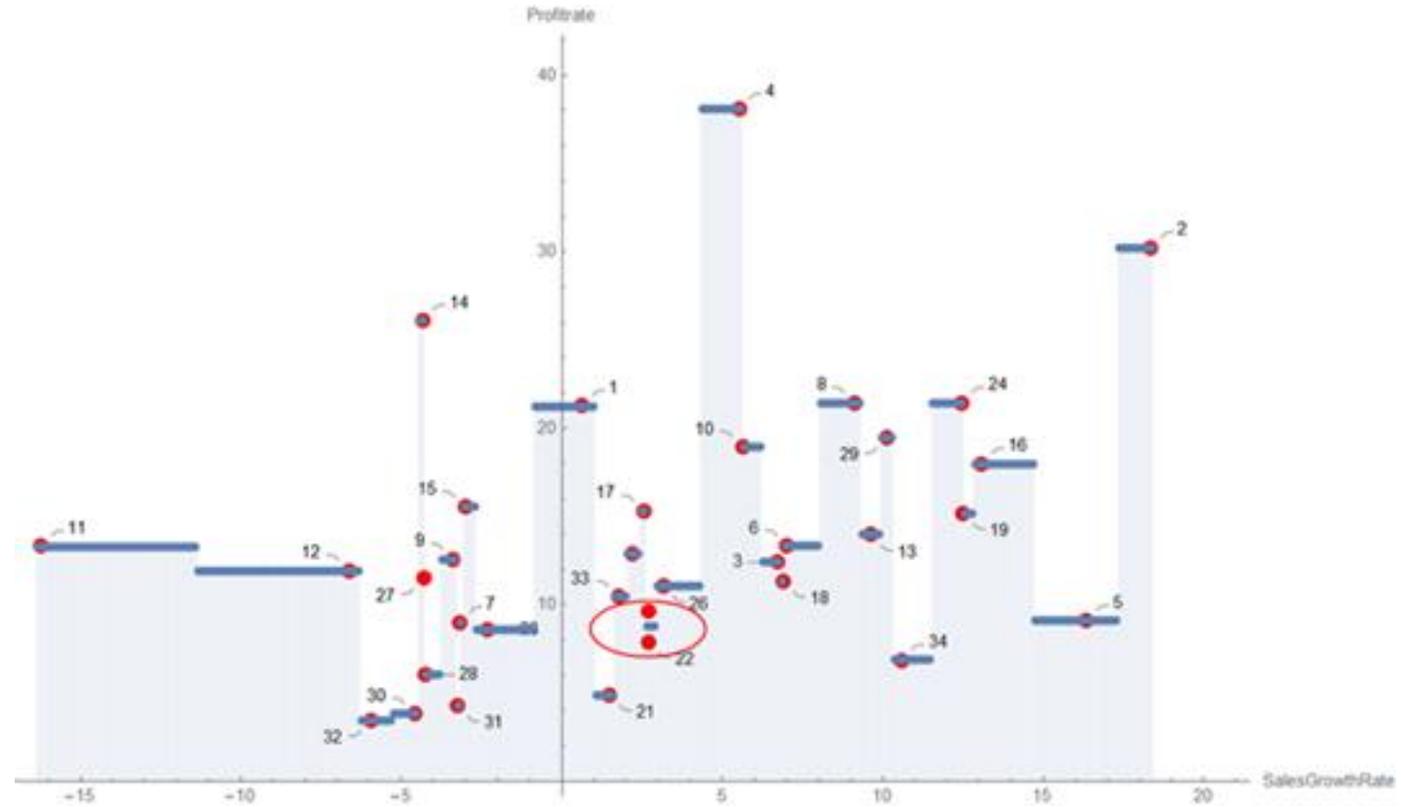
$\phi_{k,i}$ k番目のデータの, i番目の説明変数のShapley値
各データ毎に特性関数が異なることに注意!

説明変数が1個の事例

- ターゲット：利益率
- 説明変数：売上高成長率SGR (Sales Growth Rate)
- Sの取り方は $S=\{\}$ 空集合の1個のみ.
- SGRの平均値 AVR_{SGR} 2.9

$$\begin{aligned}v(S) &= f(AVR_{SGR}) \\ &= f(2.9) = 13.8\end{aligned}$$

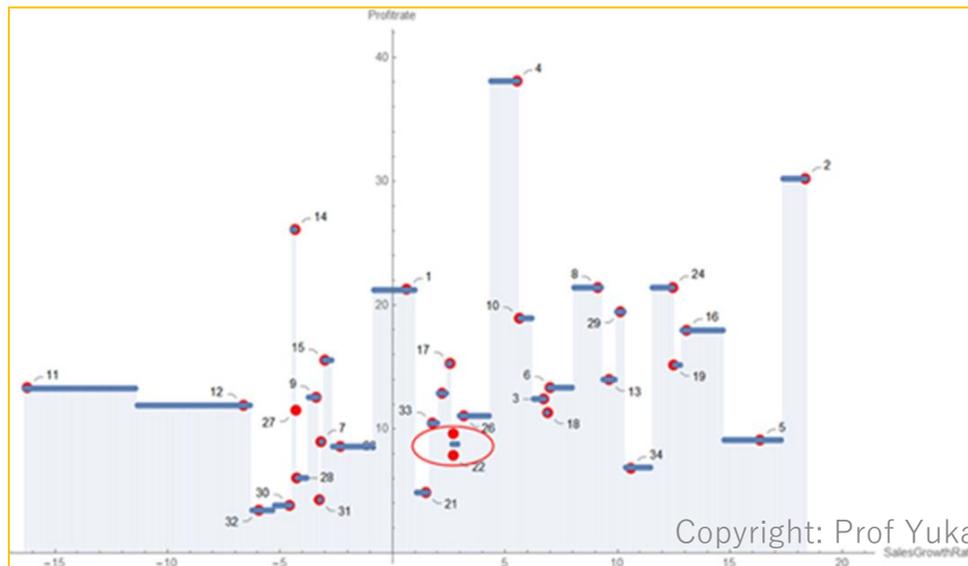
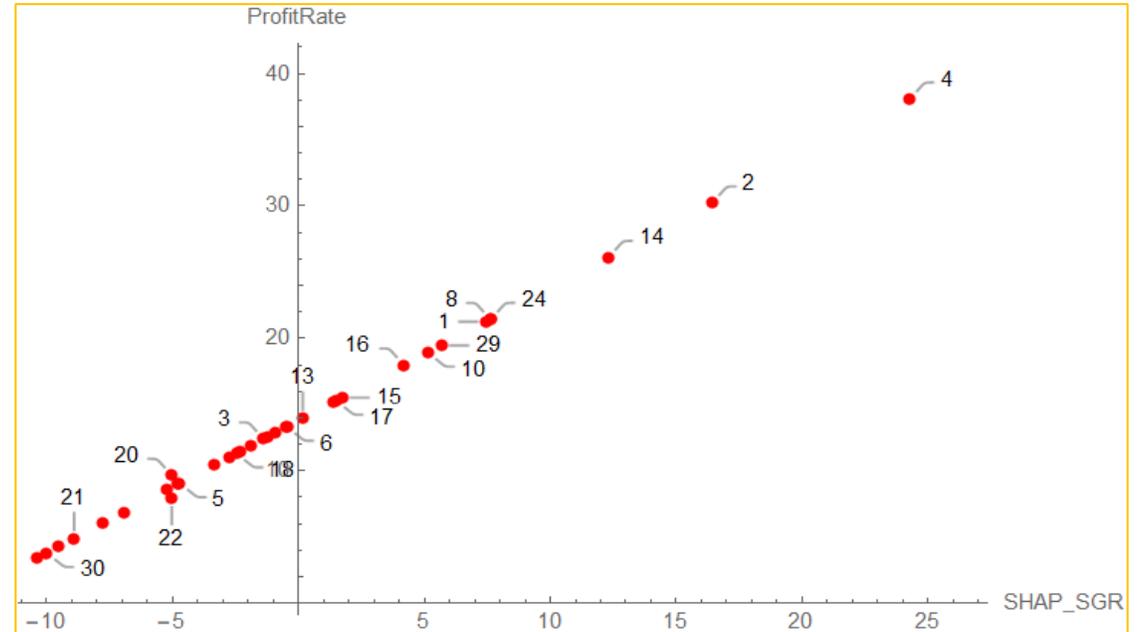
$$\begin{aligned}\phi_{SGR} &= f(SGR) - f(AVR_{SGR}) \\ &= f(SGR) - 13.8\end{aligned}$$



説明変数1個の場合の回帰モデル $f(X)$

説明変数が1個の事例

- SHAP_SGRとターゲット値は線形になるはず
- そうならない理由は、ID22のデータは初めの回帰モデルにおいて観測値と予測値がずれていた

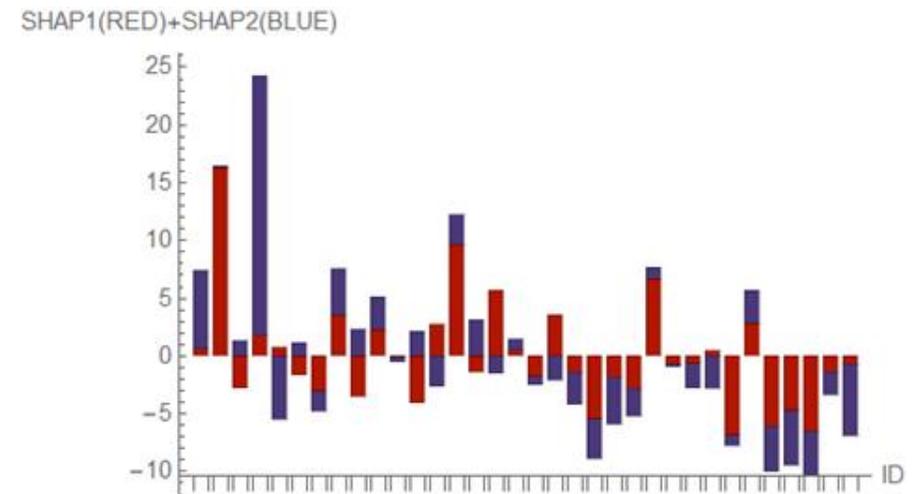


説明変数が2個の事例

- ターゲット：利益率
- 説明変数2個：SGRとINV(Inventory Turnover Ratio)
- Sは空集合の場合と，{INV}の場合の2通り

$$\phi_{SGR} = \frac{1}{2} [f(SGR, 5.5) - f(2.9, 5.5)] \\ + \frac{1}{2} [f(SGR, INV) - f(2.9, INV)]$$

$$\phi_{INV} = \frac{1}{2} [f(2.9, INV) - f(2.9, 5.5)] \\ + \frac{1}{2} [f(SGR, INV) - f(SGR, 5.5)]$$

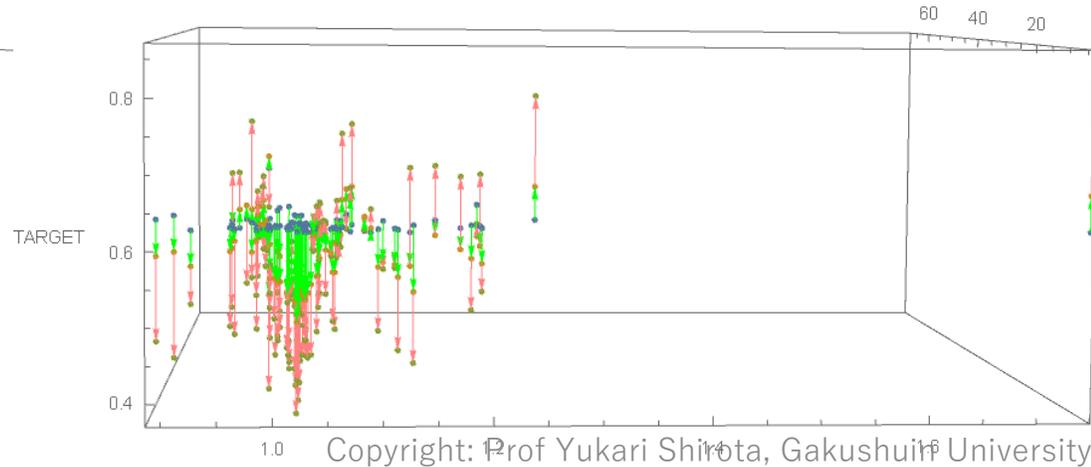
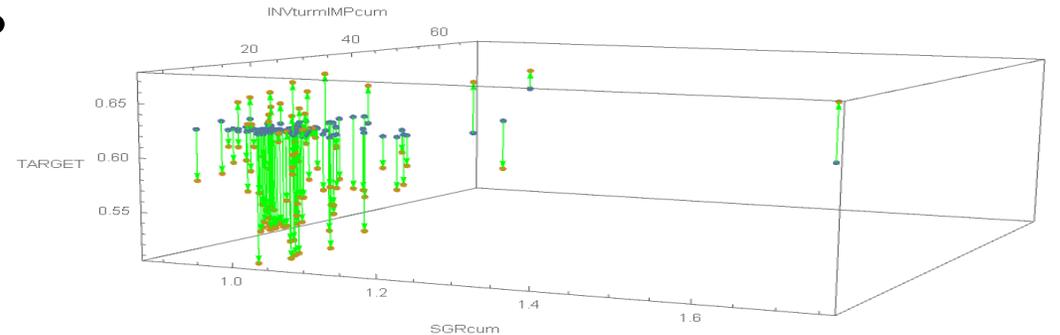
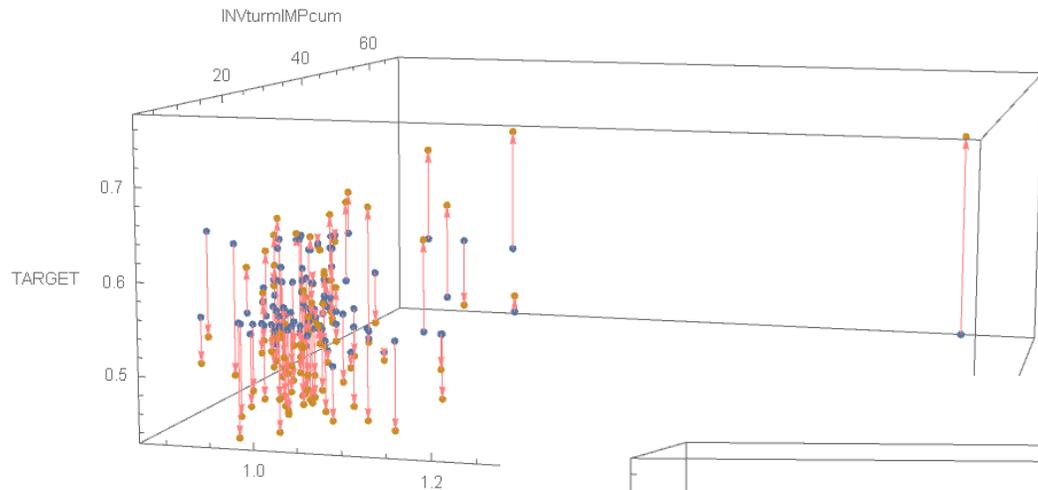


別の事例でSGRratioのSHAPを図示

SHAP値はターゲット値の偏差に近い値を取る

$$\frac{1}{2} (f(\text{SGRratio}, \text{INVturnover}) - f(1.08, \text{INVturnover}))$$

$$\frac{1}{2} (f(\text{SGRratio}, 9.07) - f(1.08, 9.07))$$



The total length is the SHAP value of SGRratio.

目次

1. SHAPは回帰分析で用いる
2. 説明変数による協調
3. 特性関数 characteristic function
4. Shapley値の計算過程
 1. Shapley値の公式
 2. 説明変数が1個の事例
 3. 説明変数が2個の事例
5. データの内部構造の解釈
6. まとめ



5. データの内部構造の解釈

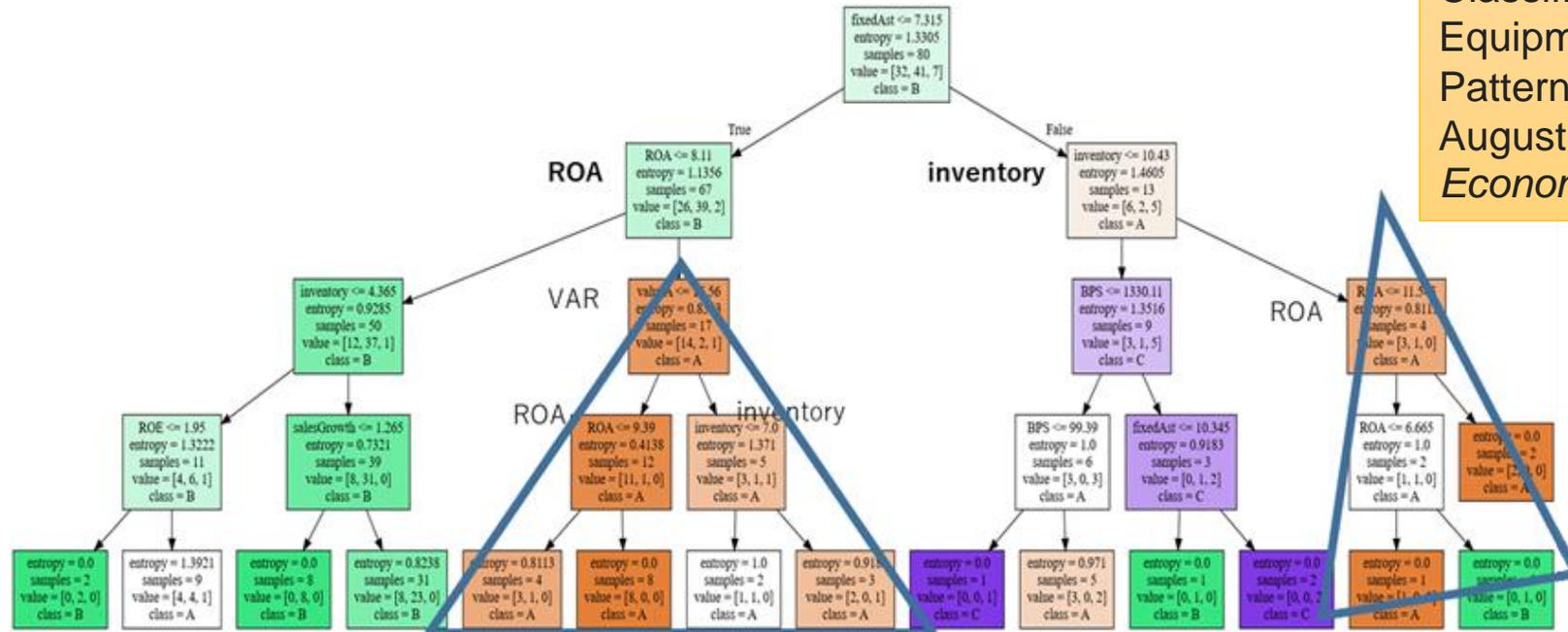
- SHAPは各データの**特性関数**に基づき、**各説明変数のターゲット変数への貢献**を導出する。
- 特性関数による評価を行う点が利点となる
- 絶対的な値による判定ではいけない

例：

- 「自己資本利益率ROE」について、2014年に経済産業省がまとめた報告書（通称「伊藤レポート」）では**日本企業のROEで8%**を目指すことが盛り込まれた[10]
- 医学の例で説明すると、同じ睡眠時間と食生活環境でも、人により病気の発症率が異なるということは多いにある。

高いターゲット値に到達するアプローチ はひとつではない。

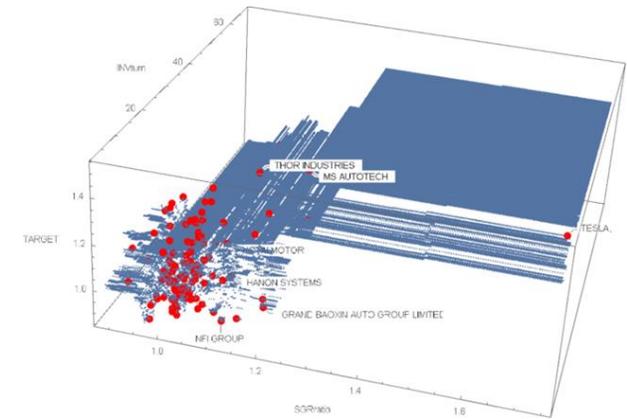
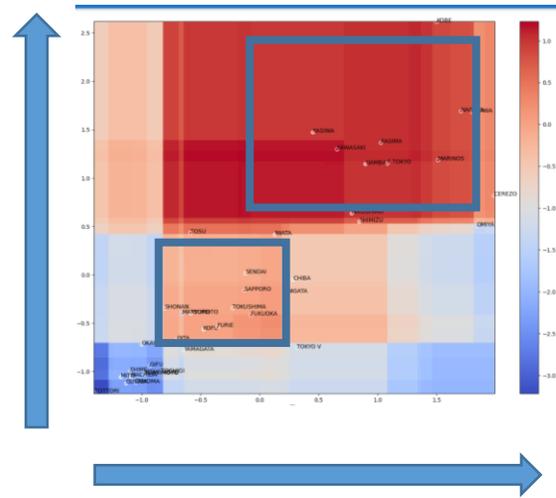
YAMAGUCHI, Kenji; SHIROTA, Yukari.
Classification of Japanese Electrical
Equipment Manufacturing Industry Recovery
Patterns after Disasters: Case Study of
August 2019. *International Journal of Trade,
Economics and Finance*, 2020, 11.6.



- 有形固定資産回転率が7.3より大きく、かつ、棚卸資産回転率が10.4よりも大きい企業がクラスAに確率が高い。ただし、有形固定資産回転率が7.3を下回る場合でも、ROAが8.1以上あれば、クラスAになる確率が高い。
- これは、相対的重要度だけからは発見できない意味づけである。

高いターゲット値に到達するアプローチはひとつではない

- 以下の**ヒートマップ**では色で回帰モデルの高さを表している。
- 2説明変数の回帰分析の回帰モデル
 - コストをかければかけるほど品質向上は当然。
 - お金をかけずに努力と工夫で高い対費用効果を達成している企業を発見したい。



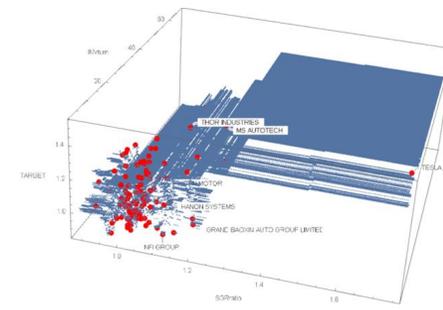
SHAP値が高いということは、その企業におけるその説明変数の貢献度（対費用効果など）が高いことを意味する

SHAPアプローチにいたる 2つの学問的発展

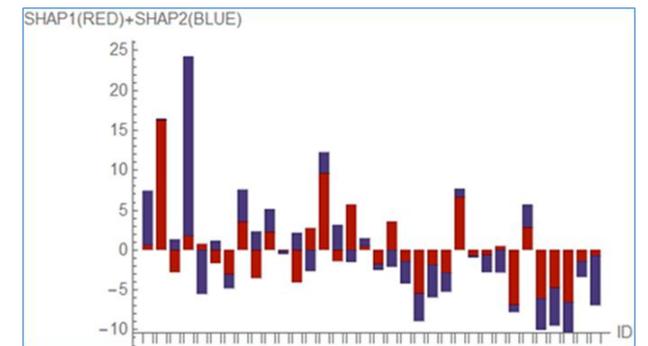
1. Shapleyによる、**Shapley値の公式**の導出
2. Lundbergによる、機械学習回帰による特性関数の近似方法、及び、Shapley値の機械学習回帰への適応

2匹目のドジョウはいないか考えてください
適用できそうな数学理論はないものか. . .

まとめ



- 機械学習による企業**回帰分析**の際， SHAPアプローチは有効。
- どうして説明変数と被説明変数の相関が高くなるのか？
企業ごとの特性関数を作って各企業の内部構造を表現するから。
- 回帰モデルを用いることで**特性関数を近似**できる。
- Lundbergによる， 機械学習回帰による特性関数の近似方法，
及び， Shapley値の機械学習回帰への適応
- ターゲットとの相関が高くなるのは**各データの内部特性**を反映した値であるから。 **特性**を考慮しているから。
- SHAPの概念は平均値からのずれに対応する。
平均値の考えが業界平均に対応している。



ご清聴ありがとうございました。

- こちらも参照してください。
- チュートリアル（最強データベース講義 DEIM Version）
- **T2：機械学習回帰におけるShapley値の理論説明と事例紹介**
- **検索：DEIM 白田 Shapley**

DEIM2022

Shapley値に関するトランプカード教材を多数WEB上で公開しております。皆様ご自身の研究や業務に活用していただきたい。レクチャ当日はXGBOOSTによる結果として求めらるる回帰モデルの3次元グラフィクスも用いて、SHAP値を分かり易く説明する。

聴衆レベル 大学院1年レベル

動画(YouTube)

D 機械学習回帰におけるShapley値の理論説明と事例...
T1: 白田由香利, 学習院 20220201-20220331日
20220201-20220331日
H34-11 二島洋吉, 京大
T. Komamitsu

共有

DEIM 2022 開催関係者の皆様へ感謝します

機械学習回帰におけるShapley値の理論説明と事例紹介

2022年2月27日
学習院大学経済学部経営学科教授
白田 由香利

見る YouTube

T3：近代的トランザクション処理技法

発表資料 スライド資料 (pdf)

Copyright: Prof Yukari Shirota, Gakushuin University

SHAPを使った他の論文

科研B報告：機械学習による企業行動構造の分析の研究 (2020-2023:20H01537)

1. 研究の概要

近年のAI手法は目覚ましい進歩を遂げ、多くは既に実用化されている。膨大なデータを予測や判定に用いるわけであるが、背後にはコンピュータの計算能力の飛躍的進歩がある。本研究は、このような計算手法の有力な一つである**機械学習手法の経営における企業分析への適用**を推進するために既存の分析手法、特に決定樹木系アルゴリズムの改良とその可視化を行う。

そして回帰等の伝統的な手法の限界の克服のための一助となることを目指す。

経営学では物理の法則のような再現可能な理論はまだ確立されていない。経営学では実地調査などの仮説形成のための帰納法的アプローチと、仮説検証型統計手法が主流である。

それが政策立案、事前的経営努力などの領域で曖昧さを残したままの状況での意思決定や実践を強いることになっている。本研究は、**企業行動構造の分析における、データに裏付けられたより意味のある仮説の形成とその立証を支援する機械学習手法の援用を高めること**を目的とする。

代表者：白田由香利（学習院大学経済学部経営学科教授）

研究分担者：永島正康（立命館大学）、バサビ・チャクラボルティ（岩手県立大学）、山口健二（日本大学経済学部）、吉浦裕（京都橘大学）

研究協力者：森田道也（学習院大学経済学部名誉教授）、村上朱音（'20-'21白田研院生）、松橋誠治（'22-白田研院生）