

旅寝して みしやうき世のクリスマス <Shapley 値>

2020 年 12 月下旬 白田由香利

ロックダウンであっても、年の瀬はやってくる。あちこちでクリスマス商戦の宣伝がかまびすしい。ゼミの学生に、同じテーマを出して期末のデータ分析コンテストを行った。優秀賞受賞者にはクリスマスにちなんだ洋書をプレゼント。好きな業種を選び、その業種の TOP 5 の売上高営業利益率などの経営指標で回帰を行う。本はディケンズの「クリスマス・キャロル」等の定番物から、「The Year of the Perfect Christmas Tree」のような比較的新しい picture book 等々だ。クリスマスプレゼントに本をもらうのは、とても嬉しい思い出。今でも印象深いのは、小学生のとき買ってもらった手塚治虫の火の鳥、黎明編と未来篇 (COM 版) だ。私の母は自分の感性と知性で判断するような人ではなかったので、「何か大人が読むような内容だけれども、描いている人がお医者さまだから読ませても大丈夫でしょう」と許してくれた。今でもあの時の、クリスマスカラーの赤と緑のラッピングを覚えている。一緒に買ってもらった本は岩波の「オオカミに冬なし」。今のコロナ禍に読みたいような人道主義的人命救助の感動物語だが、私は動物のオオカミの話だと思って選んだのに、いつまでたってもオオカミが出てこない。そして、アラスカの極寒と飢えの描写が延々と続く、読んでいて凍えるような話だった。子供のときに読む本は心に響く。今の塞がれた状況も人の感性を鋭くしてくれると思う。

機械学習による回帰分析でよく使われている Shapley 値の真価について説明する。Shapley 値とは、Shapley が考案した、協調ゲーム理論で利益をいかに分配したらよいか、という理論である [1,2]。Shapley 値自体は経済学において古くから用いられている手法である。これを機械学習の回帰分析に応用したのが、Lundberg であり、現在機械学習の結果の解釈で広く使われている。Lundberg は機械学習において用いることができるように、本来の Shapley 値から少し修正を加えているので、それを SHAP 値と呼んでいる [3]。まずは、SHAP 値の威力をデモする。

題材は、出生率に関する日本の都道府県別回帰分析である。出生率を向上させる要因を分析することを目的とする。

被説明変数：出生率(100 人あたりの出生数) 2017 年データ

説明変数：

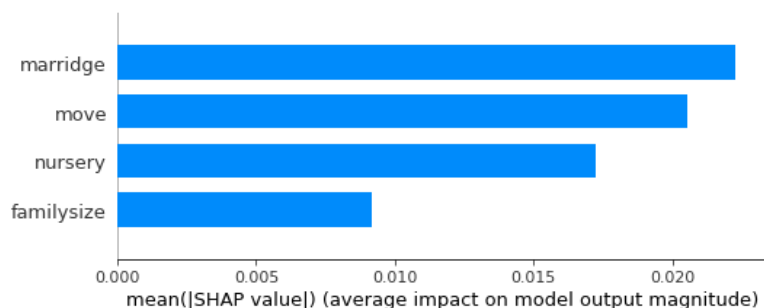
- ① 転入者数(100 人あたり) 2017 年データ
- ② 世帯サイズ(総人口÷世帯数) 2015 年データ
- ③ 婚姻件数(100 人あたり) 2017 年データ
- ④ 保育所等在所児数(100 人あたり) 2016 年データ (以下、保育園と略す)

データは[政府統計の総合窓口 \(e-stat.go.jp\)](http://e-stat.go.jp)から取得した。沖縄県は他に比較して出生率が大きく高かったのを除いて、46 都道府県で回帰を行った。

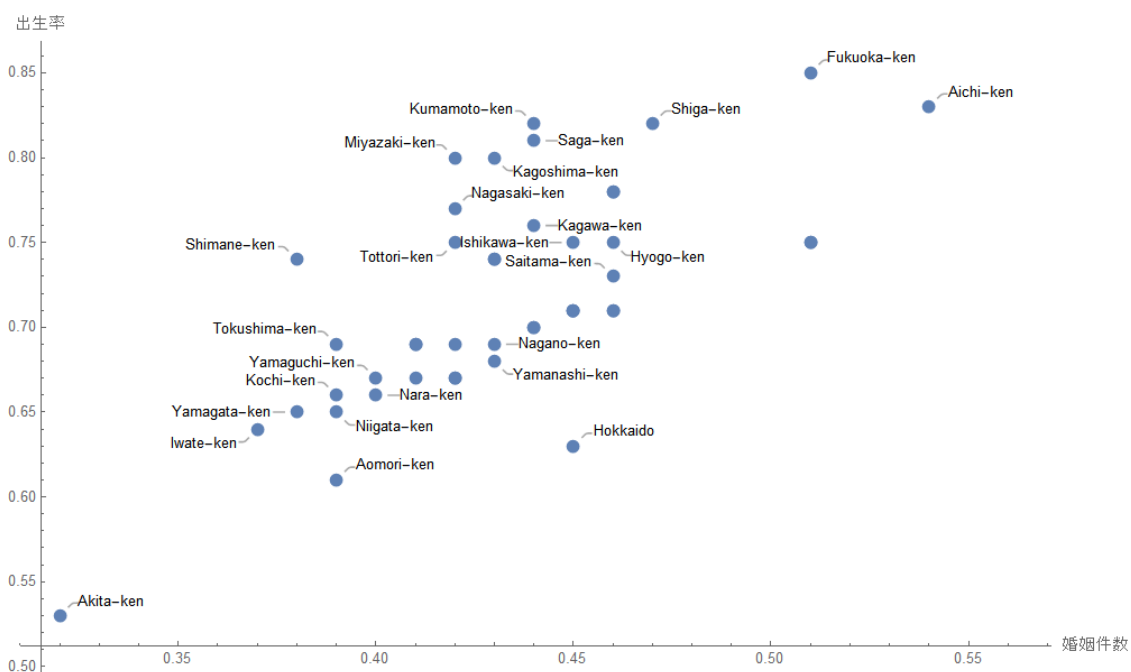
この分析結果を 2020 年の ICIM で発表したときには、まだ SHAP を使わず、重回帰分析に比較して機械学習回帰による改善点だけを述べたが [4]、今こうして SHAP を使って再度

回帰分析を行うと、新たな発見がある。SHAP 値は、個々の県の個々の説明変数に対して値が計算される（詳細は次回）。

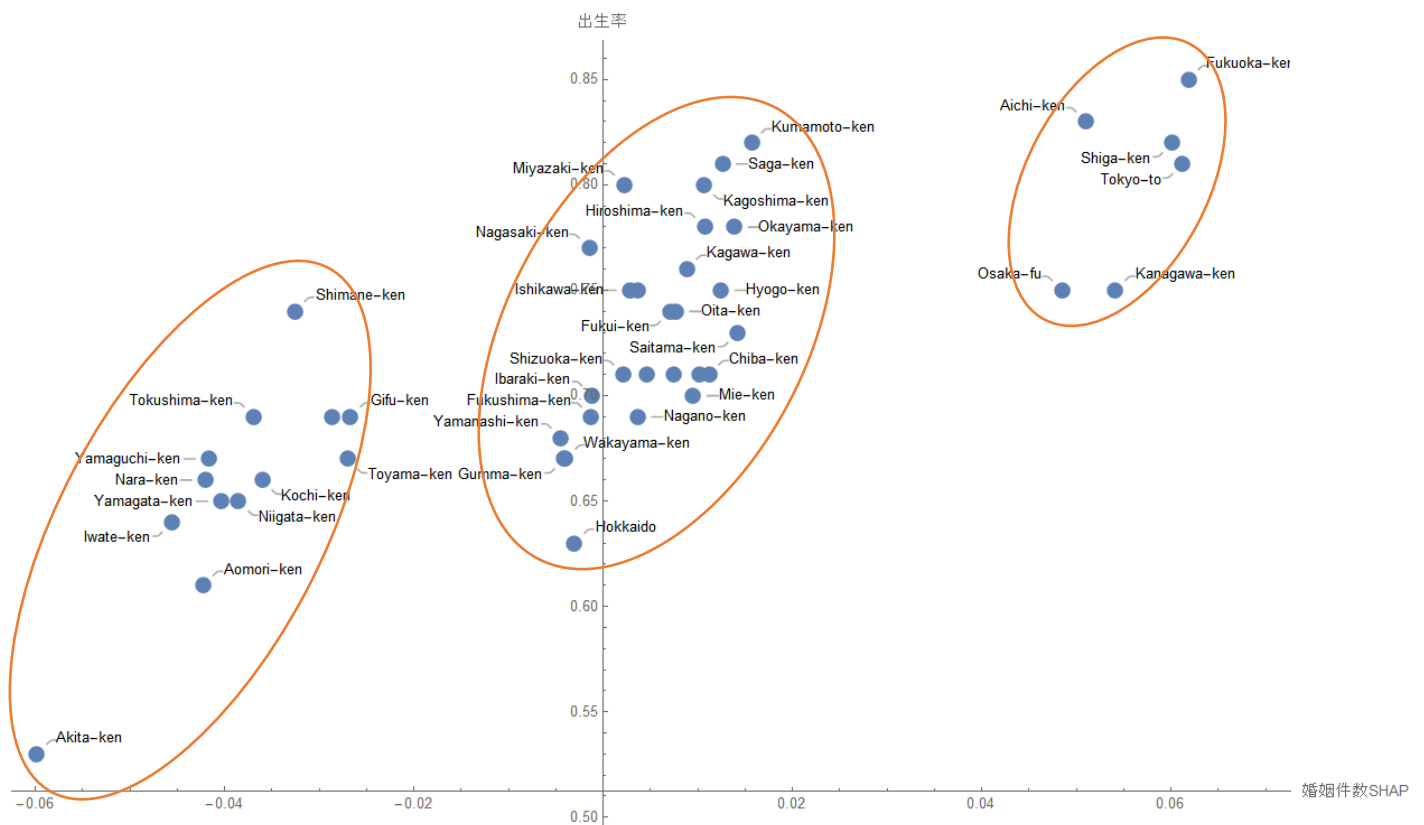
まず、どの要因が出生率に貢献したか、都道府県の SHAP 絶対値の 46 個の平均を計算して比較する（以下の図参照）。貢献度が高い順に、**婚姻件数⇒転入者数⇒保育園⇒世帯サイズ**であるという結果が得られた。この順は ICIM での論文と同じである（同じ結果が出てよかった、と安堵する）。婚姻件数が出生率をけん引してくれることは分かるが、問題はその先の、どうしたら婚姻件数を増やすことができるか、が社会的には課題である。ここで分かったことは、最重要要因は婚姻である、ということまでである。分析を続ける。



次に、説明変数と被説明変数（出生率）の間の散布図を描いてみる。以下に最も重要な要素であった婚姻件数と、出生率の間の散布図を描いた。ピアソンの相関係数は 0.67 であり、正の相関が見られる。福岡県、愛知県が最も出生率が高く、婚姻件数も高いことが読み取れる。



これを SHAP バージョンで描いてみよう。以下の図は、横軸に婚姻件数の SHAP 値、縦軸に出生率（SHAP 値ではない）を取った散布図である。相関係数は 0.79 と生データに比較



して、相関係数が高くなっている。これが SHAP の効用である。SHAP は、その県の中で、当該説明変数が加わることで出生率がどれだけ増加したか、その貢献を説明変数ごとに分けてくれる。SHAP を使うことで、その県の中での各説明変数の貢献度がより鮮明にあぶりだすことができる。よってピアソンの相関係数が高くなる(詳細は次回)。

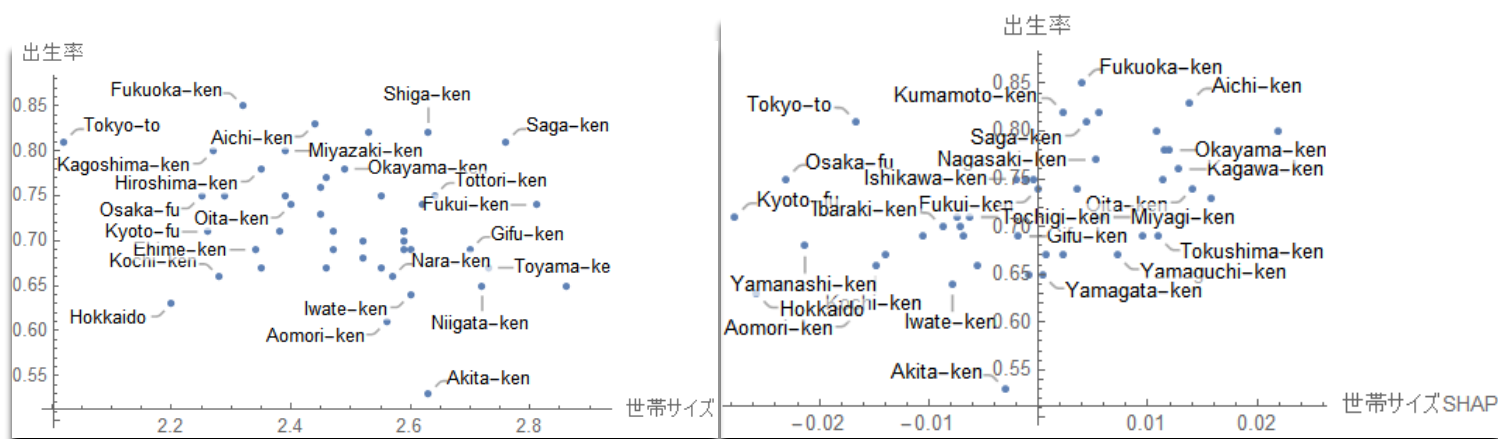
上記の SHAP 婚姻件数の散布図を見ると、都道府県が3つのクラスターに分かれることまで発見できた。右端は最も出生率の高い県のクラスターである。メンバーは福岡、愛知、滋賀、東京、神奈川、大阪である。左のクラスターは、秋田、青森、岩手、山形、新潟等がメンバーである。真ん中のクラスターがその中間的クラスターである。これは、婚姻件数が出生率増加にどれだけ貢献しているか(婚姻件数の SHAP 値)によって、3つのクラスターができていて、という事実を示している。

一般に、相関の無い「説明変数と被説明変数の関係性」のデータに対して、SHAP を用いることで高い相関係数を得ることができる。以下に、出生率との各説明変数の相関係数を、SHAP を取る前と後で比較した(以下の表参照)。

	BEFORE	AFTER (SHAP)
転入者数	0.501	0.849
世帯サイズ	-0.269	0.432
婚姻件数	0.674	0.793
保育園	0.118	0.520

説明変数「転入者数」に関しては相関係数が 0.5 から 0.8 に向上、婚姻件数も保育園も相関係数が向上している。世帯サイズは BEFORE では、-0.27 で負の相関がかすかにある(下左図参照)。しかし世帯サイズ

が大きいほうが子育ての際、祖父母の支援が受けられて有利なので、正の相関があるという説も立てられる。一人世帯だとしても東京の場合は働き世代が多く地方の場合は高齢者が多いかもしれない。これは単純に SHAP 値だけでは評価できない。いずれにせよ、SHAP を使うと右下図のように相関係数は 0.4 に向上した。SHAP 値はその説明変数が被説明変数をどれだけ向上させたかを表す指標なので、常に正の値を取る（散布図では、正の傾きとなる）。



回帰において、説明変数の SHAP 値を取ることで、被説明変数と相関性をもつようになることこそ SHAP の真価である。それでは、これは自明なことなのであろうか？ SHAP は機械学習による回帰分析で広く使われているが、上記のような BEFORE-AFTER で具体的にその相関性が高まることを示した事例は既存研究ではなかった。数学的に線形性をもつようになるという性質を示した論文はあったが[5]、具体的な事例において分野特有の意味的解釈を試みてはいなかった。ここから Operations Management(OM)の分野に話を限定する。我々の過去の機械学習による回帰分析においては、困ったことに、株価の上昇率と OM 的説明変数との間には関係性が発見できないという問題があった。例えば、「LEAN アジリティが高い、在庫回転率の高い企業のほうが、株価上昇率が高い」と OM 的視点から我々が仮説を立てても、その関連性の立証は困難であった[6]。この問題は山口が Shapley 値を用いることで解決した。例えば、在庫回転率と株価上昇率には関連性が発見できない場合においても、在庫回転率の SHAP 値を取ると、関連性が抽出できた。山口は各説明変数の SHAP 値と、被説明変数「株価上昇率」の間には関連性が出現することを自動車製造業と電機製品製造業という 2 業種で示した[7,8]。こうした具体的な事例で SHAP の使い方を示した山口の功績は大きい。

次回は SHAP 値の計算方法と、どうして SHAP 値はこうした威力があるのかについて説明する。

終わり

引用元：旅寝して みしやうき世の煤払い 芭蕉

参考文献

- [1]L. S. Shapley, "Notes on the n-Person Game—II: The Value of an n-Person Game," 1951.
- [2]A. E. Roth, "Introduction to the Shapley value," The Shapley value, pp. 1-27, 1988.
- [3]S. Lundberg and S.-I. Lee, "An unexpected unity among methods for interpreting model predictions," arXiv preprint arXiv:1611.07478, 2016.
- [4]Y. Shirota and K. Yamaguchi, "Finding Dominant Factor That Affects Crude Birth Rates in Japanese Prefectures," Proc. of 6th International Conference on Information Management (ICIM), IEEE, pp. 73-77, 2020.
- [5]A. Joseph, "Shapley regressions: A framework for statistical inference on machine learning models," arXiv preprint arXiv:1903.04209, 2019.
- [6]K. Yamaguchi, Y. Shirota, and M. Morita, "Effects of political risks on stock prices under global operations: A case study of US-China trade friction", Proc. of 27th EurOMA 2020, virtual conf., 29-30, June, 2020, pp. 582-591.
- [7]K. Yamaguchi, "Feature Importance Analysis in Global Manufacturing Industry," International Journal of Trade, Economics and Finance (IJTEF), pp. (in printing), 2021.
- [8]K. Yamaguchi, "'Intrinsic Meaning of Shapley Values in Regression," Proc. of 11th International Conference on Awareness Science and Technology (iCAST), Qingdao, China, 2020, pp. 1-6, 2020.

冬眠だ またよりそはん この柱 <Shapley 値、続き>

2020 年 12 月下旬 白田由香利

クリスマスイブの日に虎の門入院に手術のために入院したことがある。大学の講義が終わり病院の休みが始まる前という条件では、ここしかなかった。高層ビルに光の文字でツリーが描かれたりするのを静かに楽しんでいた。小さい子供の世話を任せ、やれやれと、入院中は自分の体のことに専念できる。出産したのも虎の門病院なので、寄り慣れた感はある。この手術時は今よりも若かったので、医者への指示に従わず、自分の体の声に従い、おかゆを出されている時期にもかかわらず地下の食堂でクリームあんみつを隠れて食べた。今、自分で自分の当時の心理分析をすると、病人病人している自分がいやだったのかもしれないと思う。

Shapley 値及び SHAP について説明する。Shapley 値とは、協調ゲームにおいて、複数のプレイヤーが共同作業によって単独よりも多額の利益を得る場合、どのように利益を分配すべきかを示す。機械学習に Shapley 値を機械学習の回帰に応用した手法を SHAP 値と呼ぶ。回帰分析においては、説明変数がプレイヤーとなる。例えば、プレイヤーが 4 人いて、{Mr 転入, Ms 世帯サイズ, Mr 結婚, Ms 保育園} 協調してアルバイトをすると、単独で働くよりも利益が高くなるとする(以下の利益額だったとする)。まず、第 1 の質問は、グループは何通り作れるか？

Mr転入	Ms世帯サイズ	Mr結婚	Ms保育園	利益額
0	0	0	0	0
0	0	0	1	1100
0	0	1	0	1700
0	0	1	1	1900
0	1	0	0	2100
0	1	0	1	2500
0	1	1	0	2700
0	1	1	1	3000
1	0	0	0	6400
1	0	0	1	6500
1	0	1	0	6600
1	0	1	1	7000
1	1	0	0	7600
1	1	0	1	8500
1	1	1	0	9000
1	1	1	1	10000

答えは2の4乗で16通りである。誰もいない場合もあり、そのときは、利益は無い(Shapley 値の前提条件)。一人参加すると必ず利益は増加するとする(Shapley 値の前提条件)。どういうグループのとき利益がいくらになるかを、全てのグループに対して上記のように与えてくれる関数を特性関数という。特性関数の出力値の利益を、出生率に変えれば、前回の日本の出生率に関する回帰の話になる。

特性関数を v (ギリシャ語でニュー) で表す。グループ S にプレイヤー i さんが参加したらいくら利益が増えるかは、 $v(S \cup \{i\}) - v(S)$ と表現できる。プレイヤーの数を N 、 $|S|$ を集合 S のメンバー数とする。プレイヤー i さんを含まない全ての集合 S ($S \subseteq N \setminus \{i\}$) に対して、プレイヤー i さんの Shapley 値は以下のように定義される。

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

重要な項は $v(S \cup \{i\}) - v(S)$ であり、その前の項は、順列から確率を計算しているだけである。その確率をかけた値を、可能性のあるすべての S について、足し合わせている。この結果、例えば、Mr 結婚は 4000 円もらい、Ms 保育園は 2000 円というように、全員の取り分が計算できる。この値は真面目に計算していないので正しい値ではないが、特性関数が与えられているので正しく計算しようとすれば計算可能である。

上記の Shapley 値は、クリスマスケーキをホテル A で作る場合のバイトの場合だとする。ホテル B でクリスマスを作る場合は、利益も UP(15000 円)し、特性関数も異なる場合、Shapley 値の分配金ももちろん異なってくる。10000 円の給料の分配よりも、15000 円の給料の分配のときのほうが、一般に一人の取り分は高くなる。

先の日本の県別出生率回帰で、東京都と奈良県の場合の SHAP 値の違いを考えたとき、出生率も違い(東京のほうが高い)、各説明変数の貢献も違ってくる。ホテル A と B の特性関数の違い、東京都と奈良県の特性関数の違いから、特性関数という概念を理解してほしい。

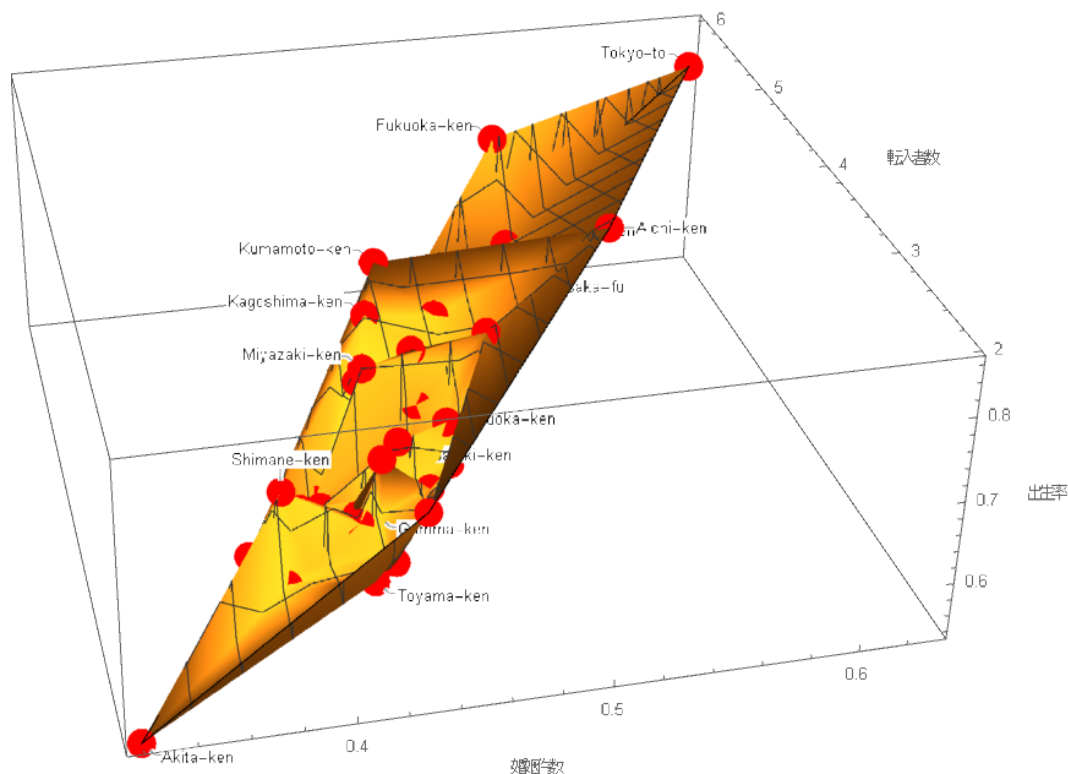
全都道府県の婚姻件数を並べて、「婚姻件数が 0.45 以上であれば、出生率が十分高くなる」、というような絶対的な値(この場合の 0.45)では出生率向上の議論はできない。それは、都道府県ごとに事情が異なり、その県の内部における他の説明変数とのバランスで、その説明変数の効果が計算されるからである。例えば、東京と福岡では同じ保育園数でも、出生率への効果が違う可能性がある。比喻で言うと、風邪をひいて同じ抗生剤を飲んでも人によって効能に違いがあるのと同じである。別の比喻で言うと、学年で上位の生徒は英語で偏差値 95 点という好成績を取っても、他の科目の偏差値が 100 点なので、その人の苦手科目は英語ということになる。

特性関数を作ること、あるいは知ることは困難と言える。2の N 乗通りのグループに対して、その利益額を決めることは困難である。では、機械学習の回帰では、特性関数もどきをどう作ればよいか考えてみよう。以下のようにすればよい。

- (1) 回帰によって回帰モデル(回帰の被説明変数の関数)を作成し
- (2) 回帰モデルから特性関数もどきを作成する。

(3) 特性関数から SHAP 値を計算する。

回帰によって得られた回帰モデルとは、 $f(x)$ の多変数関数である。一般に以下のような複雑な形状をしている。回帰を XGBOOST 手法で行う場合、回帰モデルは段ボールを積み上げたような形状になるので、以下のような形状よりもカクカク角張った感じとなる。い



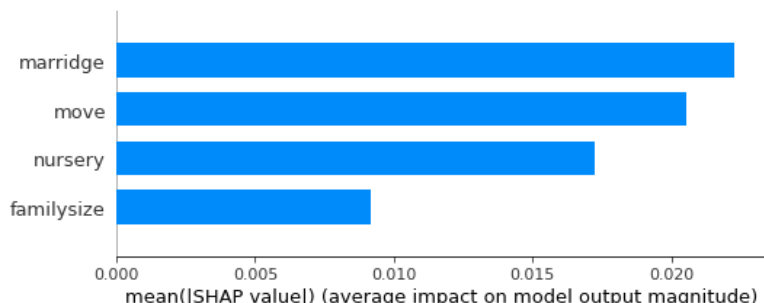
ずれにせよ、回帰モデルは複雑な形状となる。上図では、普通の人間は 3 次元空間までしか見えないので、 $f(x)$ を婚姻件数と転入者数の 2 変数関数として、関数値を出生率とした。

グラフ上の赤い点は、各都道府県の観測値である出生率である。垂直軸は出生率である。この関数を回帰モデルと言う。この回帰モデルを使って、{Mr 転入者数}だけが与えられた場合の出生率を計算したい場合、婚姻件数の値として、全国平均の 0.44 を代入するのである。全ての説明変数がないとき、すべて全国平均値が代入される。その値を 0 ポイントとし、各説明変数の SHAP 値を計算していく。SHAP 値はマイナスの値を取ることもある。

例えば、(2) の過程において、奈良県の {Mr 転入, Ms 世帯サイズ, Mr 結婚} の 3 変数の場合の出生率を計算するとき、Ms 保育園には、46 都道府県の保育園の平均値を代入して計算する。いない人(説明変数)の代わりに、全国平均値を代入するのである。これで、奈良県の特性関数もどきが完成した。同様に、46 都道府県ごとの特性関数を計算する。

特性関数が作れたならば、SHAP 値を計算する。東京都の婚姻件数の SHAP 値、東京都の保育園の SHAP 値というように次々計算していく。回帰においては、重要な説明変数を知りたい。そのために、SHAP 値の絶対値をとり、全都道府県でその平均をとれば、

婚姻件数の SHAP 値、保育園の SHAP 値など、説明変数に対する SHAP 値が定義できる。以下はそうして計算された説明変数 SHAP 値の比較である。

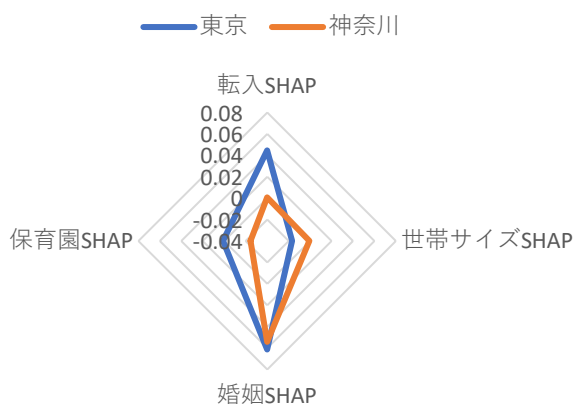


次に SHAP 値を使って2つの都道府県の比較を行ってみる。東京と神奈川はどちらも大都市を多く持つ都会である。出生率を向上させるためには、どの説明変数について改善すればよいか見てみよう。以下は、SHAP 値と生のデータである。

	転入SHAP	世帯サイズSHAP	婚姻SHAP	保育園SHAP	出生率
東京	0.044650316	-0.016629068	0.06118789	0.001049976	0.81
神奈川	0.000557554	-0.000497122	0.05410064	-0.024387617	0.75

	転入	世帯サイズ	婚姻	保育園	出生率
東京	6.00	2.02	0.63	1.60	0.81
神奈川	4.56	2.29	0.51	1.40	0.75

東京と神奈川のSHAP値の比較



SHAP 値についてレーダーチャートも描いてみた。値がマイナスの説明変数が改善の余地大いにあり、と解釈できる。神奈川の場合、SHAP がマイナス値を取るのは保育園である。神奈川の課題は保育園と言えそうである。東京との比較でも保育園と転入の2つの要素で差をあげられている。婚姻については両者は同レベルである。東京の課題は、SHAP 値がマイナスである世帯サイズ

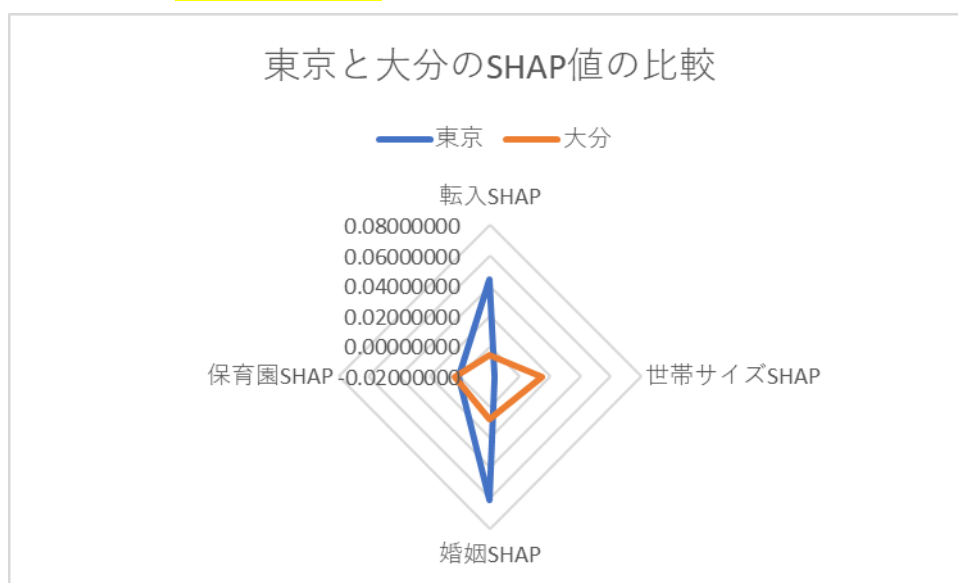
婚姻については両者は同レベルである。東京の課題は、SHAP 値がマイナスである世帯サイズ

にありそうであるが、どう改善策を立てるべきかこの分析結果だけからは不明である。

次に東京と大分を比較してみる。東京のほうが出生率が高いので、東京の SHAP 値のほうが全体的に高く、大分のほうが低いと言える。大分の出生率向上のための最大の課題は、SHAP 値が負である、転入者数が低いことと言えるだろう。

	転入SHAP	世帯サイズSHAP	婚姻SHAP	保育園SHAP	出生率
東京	0.04465032	-0.01662907	0.06118789	0.00104998	0.81
大分	-0.00571773	0.01409204	0.00765764	0.00359638	0.74

	転入	世帯サイズ	婚姻	保育園	出生率
東京	6.00	2.02	0.63	1.60	0.81
大分	2.79	2.40	0.43	2.00	0.74



以上、機械学習の回帰の分析の解釈の際、SHAP 値の利用が効果があることを示した。

終わり

引用元：冬籠り またよりそはん この柱 芭蕉