

弱学習器間の関係に着目したアンサンブルモデルの可視化

理学専攻 情報科学コース 2340656 柏山 美結 (指導教員：伊藤 貴之)

1 はじめに

現在では、産業など幅広い分野において機械学習技術を用いて開発された予測モデルが頻繁に運用されている。しかし、周辺環境の変化などにより予測精度が劣化することがあるため、運用中も監視することが必要不可欠である。しかし近年、開発されたモデルが巨大・複雑になり、開発者でも全貌を把握するのが困難になりつつある。そこで、機械学習モデルの構造の分析や評価を支援する手法として情報可視化技術が注目されている。Lin hao[1] および Zijie[2] らは学習データの性質やモデルの性能等から複数のモデルが比較できるような可視化システムを提案した。また、Nagasaka[3] は、没入型環境における深層学習モデルの可視化システムの提案をしており、3次元空間での可視化の有効性を示している。

そこで本研究では運用段階において広く利用されているアンサンブル学習の勾配ブースティング決定木(GBDT[4])を対象とし、モデルの構造理解を支援するような3次元空間での可視化の一手法を提案する。GBDTは、最初の決定木を基に、弱学習器が持つ誤差を順に学習していくことで全体の予測精度を高める手法であり、様々な問題に適用できることから幅広く用いられている。しかしながら、従来の決定木の可視化手法では個々の弱学習器の構造やデータフローの分析は容易であるが、GBDTのように弱学習器間に直列的な関係性がある場合、その関係性の可視化は想定していない。そこで本研究では、予測に使用されるデータの特徴量やモデルの性能結果だけでなく、弱学習器間の相互関係を明らかにし、データセット構成の変化がモデルの学習軌跡にどのような影響を与えるのかに着目する。また、予測モデルの精度劣化原因を探索するためのインタラクション手法についても議論する。

2 提案手法

本論文では勾配ブースティング決定木において、1) 個々の弱学習器の構造・性能に関する情報、2) 弱学習器間の関係に関する情報、および3) 異なるデータセット間でのデータフローの差異に関する情報を可視化することを試みる。1) は弱学習器である決定木の葉の数、葉ごとのサンプル数と残差、および葉同士の特徴量類似度とし、また2) は隣接する決定木の葉に含まれるサンプルの重複度、3) は異なるデータセット間での2)の差分とした。

2.1 モデルの視覚表現

以下に、提案するアンサンブルモデル可視化手法の概要を示す。図1に示すように、GBDTのモデル構造をz軸に沿ったレイヤードグラフ構造の3次元プロットとして可視化した。xy平面上の各レイヤーはGBDT

の各決定木を表し、各ノードは決定木の葉ノードを表す。ノードのサイズと色は、それぞれその葉ノードに割り当てられたデータセットのサンプル数と平均予測誤差を表す。また、x-y平面上における球体の座標は、1) 同じ弱学習器の葉同士の特徴量類似度、および2) 隣接する弱学習器間でのサンプルの重複度にもとづく最適化を行い、類似度の高い葉ノードどうしが近くなるよう配置した。

図1中の葉ノード同士を結ぶ実線のリンクは、学習データ間の共通性を視覚化し、破線のリンクは、学習時には現れなかったが推論時にはのみ現れた共通性を表す。隣接する層に属する二つの葉に対し、それぞれに含まれるサンプルの重複度に応じてリンクが太くなるように設定した。下位のレイヤーからリンクでノードを接続することで、z軸に沿って下から上に向かって段階的に進行する学習過程を表現する。

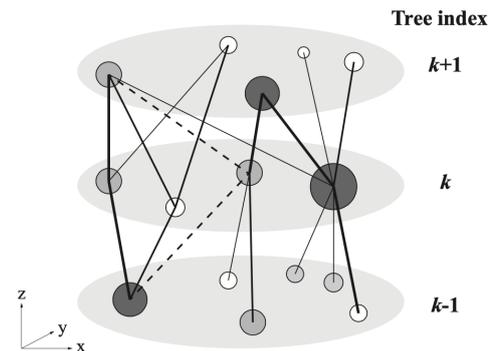


図1: アンサンブル決定木可視化の概念図

2.2 インタラクション手法

Unityを用いて実装された提案手法のインターフェースを図2に示す。ユーザは対話的に見る角度やスケールを変えながら、可視化されたモデルの構造を見るこ

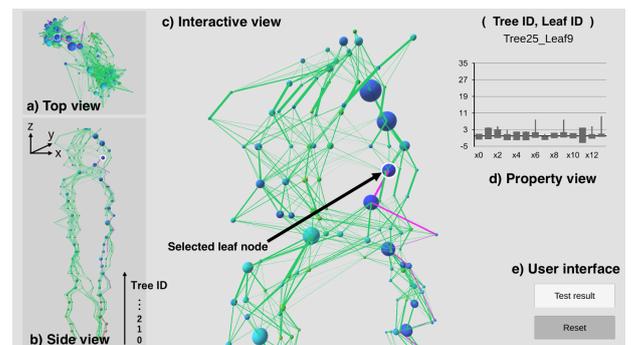


図2: 本手法のユーザインターフェース

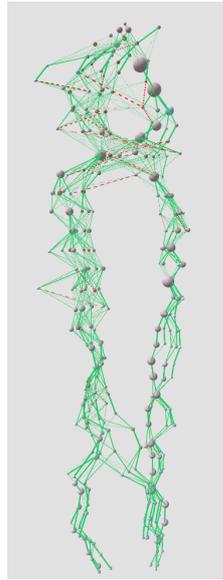
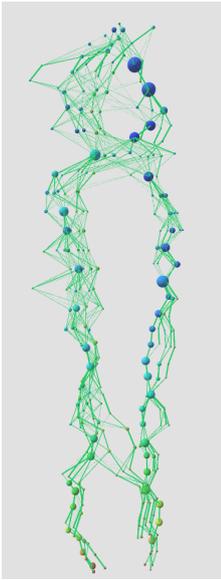


図 3: 学習データによる可視化
図 4: データセット間の差分表示

とができる。また、着目する葉をクリックすることで、葉内に含まれるサンプルの学習経路をハイライトする。リンクの色をピンク色に変化させることで学習経路を示す。同時に、葉内のデータサンプルの詳細をグラフ表示する。

Test Result ボタンにより、図 3 から図 4 のように表示を切り替えることで学習データとテストデータの差を視覚的に表示する。これらのデータセット間の誤差の大きさの変化は、ノードの色の変化で示される。赤いノードは学習データに対する誤差の増加を示し、青いノードは誤差の減少を示す。モデル学習中には存在せず、テストデータにのみ現れるサンプル経路は、赤い破線で表現する。この機能によりモデルの学習結果の全体的な概観を提供すると共に、異常値を含むような葉ノードの識別を容易にし、データセットの違いや変化を理解することを容易にする。さらに、モデルの改良と予測誤差の原因分析を支援するために、個々の木と関連するデータサンプルの詳細な洞察を可能にする。

3 結果・今後の課題

本論文では、アンサンブルモデルの一手法である勾配ブースティングにおける弱学習器間の関係に着目し、モデル構造および学習過程の理解を深めるための新たな可視化手法を提案した。本手法を人工データセットと実データセットに適用した評価実験から、データセットの分布変化を視覚的にわかりやすい形式で提示することで、機械学習モデルの実用的な運用において重要な問題である、過学習や過小学習の特定を支援することができた。さらに、モデル構造内でルート分岐が発生した場合に、問題を部分問題に分解する可能性を判断するのに役立つことを示した。またユーザ実験では、3D かつノード座標の最適化を適用した本可視化手法の有用性を示した。

今後の課題として、経験豊富な運用者と初心者ユーザの両方にとって視認性を高めるシステム設計の必要性があると考えられる。ユーザ実験において機械学習

操作タスクにおける 3D および類似度を用いた表示形式の有効性は確認されたが、参加者のフィードバックによると初心者にとっては理解に課題があることが示された。この問題に対処することは、より多くのユーザにとっての使いやすさを向上させるために必要である。また実験では 3 つの異なるデータセットを使用した。視認性はこれらのデータセットによっても異なることが明らかになった。したがって今後の研究では、さらにデータセットを追加して、視認性とシステムのユーザビリティを調査することが不可欠である。

また、予測モデルの精度監視技術など、MLOps[5] と呼ばれる運用中の課題を解決するための技術開発が進められている。今後、複雑で大規模な機械学習システムを開発・管理するための強固な分析ツールとして本手法を発展させ、MLOps 領域の技術的進歩にさらに貢献することを目指したい。

謝辞：本研究にあたり共同研究として研究方針や最適化計算について多くのアドバイスをいただいた日本電気株式会社の廣川暢一様、松野竜太様、佐久間啓太様に感謝の意を表す。

参考文献

- [1] Meng, Linhao, Stef van den Elzen, Vilanova, Anna, ModelWise: Interactive Model Comparison for Model Diagnosis, Improvement and Selection, Computer Graphics Forum, Vol. 41, No. 3, pp. 97–108, 2022.
- [2] Wang, Zijie J., Zhong, Chudi, Xin, Rui, Takagi, Takuya, Chen, Zhi, Chau, Duen Horng, Rudin, Cynthia, Seltzer, Margo, TimberTrek: Exploring and Curating Sparse Decision Trees with Interactive Visualization, IEEE Visualization and Visual Analytics (VIS), pp. 60–64, 2022.
- [3] Nagasaka, Hikaru, Izuhara, Motoya, Interactive Visualization of Deep Learning Models in an Immersive Environment, Proceedings of the 27th ACM Symposium on Virtual Reality Software and Technology, pp. 3, 2021.
- [4] Friedman, Jerome H., Greedy function approximation: A gradient boosting machine, The Annals of Statistics, Vol. 29, No. 5, pp. 1189–1232, 2001.
- [5] Kreuzberger, Dominik, Köhl, Niklas, Hirschl, Sebastian, Machine Learning Operations (MLOps): Overview, Definition, and Architecture, IEEE Access, Vol. 11, pp. 31866–31879, 2022.