Машинное обучение: Объяснительный ИИ (Explainable AI (XAI) or ML)

Объяснительный ИИ (Explainable AI or ML)

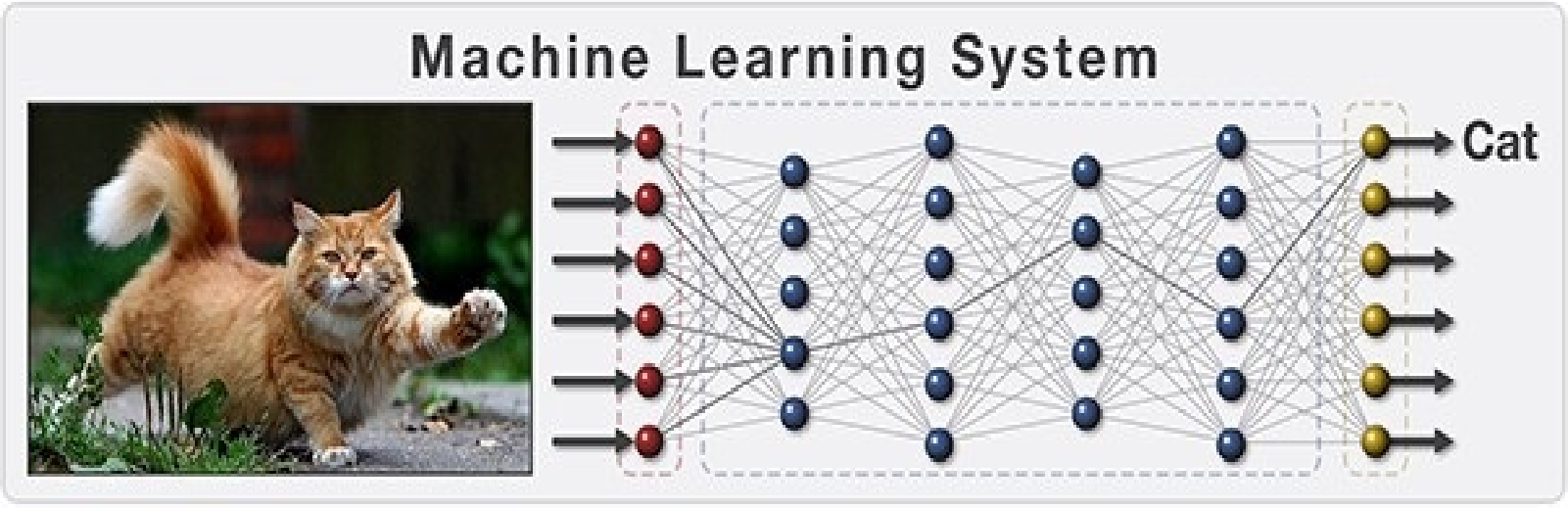
Уткин Л.В.

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

Для начала...

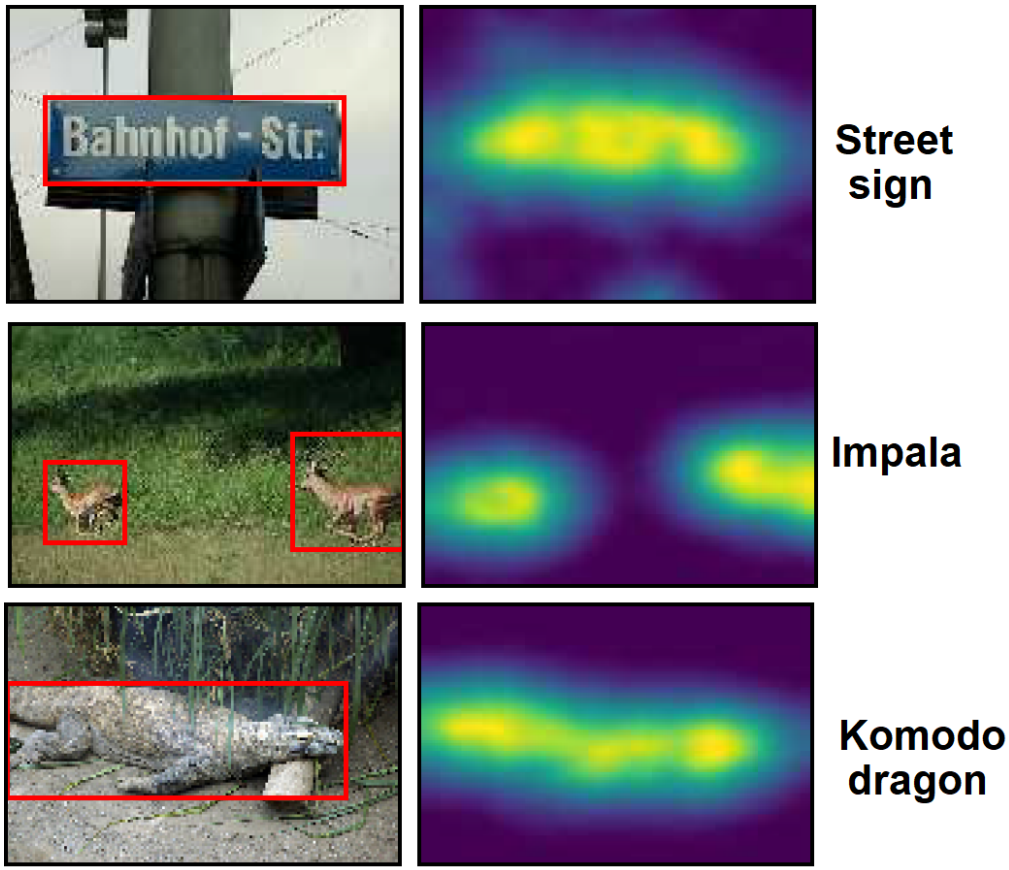
"Some things in life are too complicated to explain in any language."
Haruki Murakami

Что лучше?



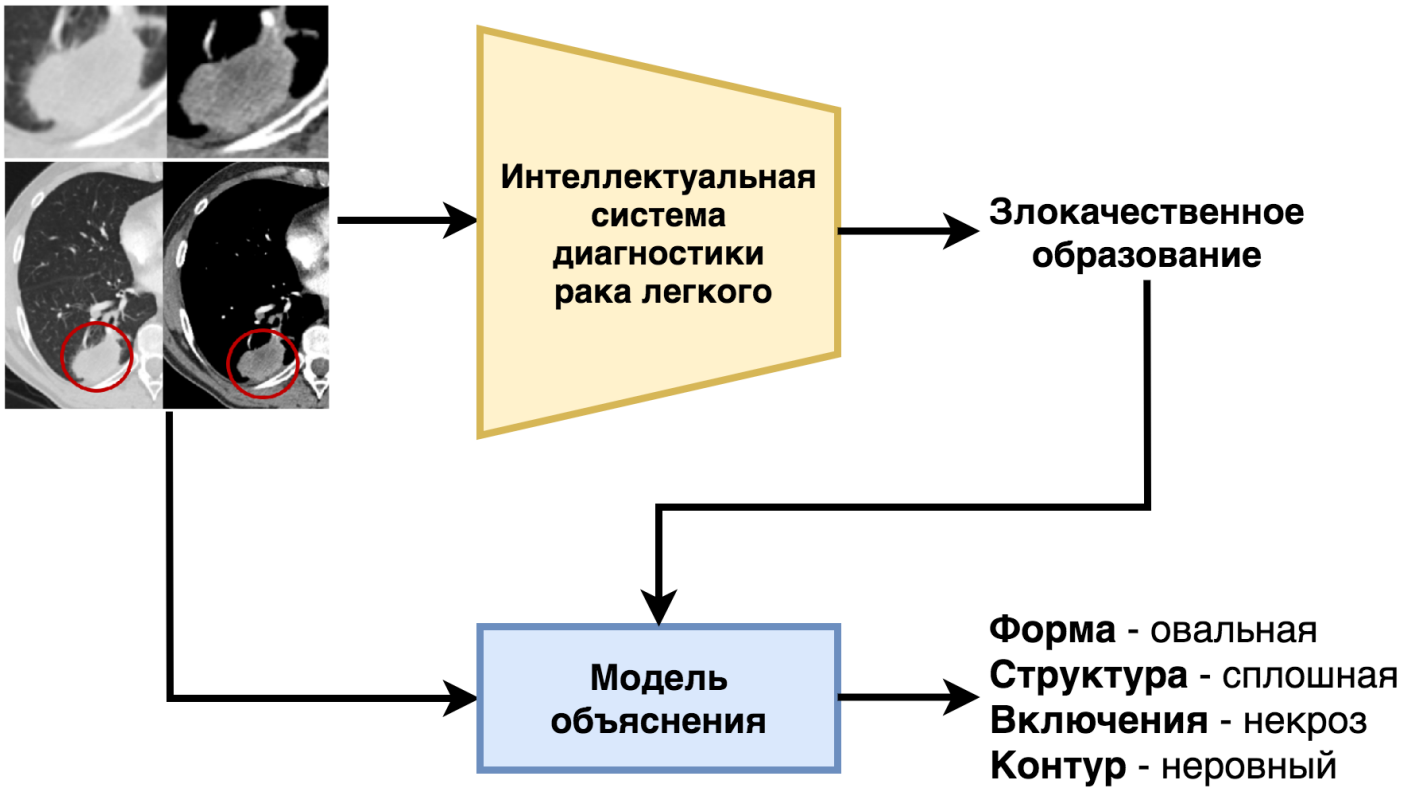
- “модель предсказывает, что это - кот с вероятностью 0.98”
- “модель предсказывает, что это - кот с вероятностью 0.98, так как у него есть шерсть, усы, когти, уши определенной формы”
- как это показать?

Что такое визуальное объяснение?

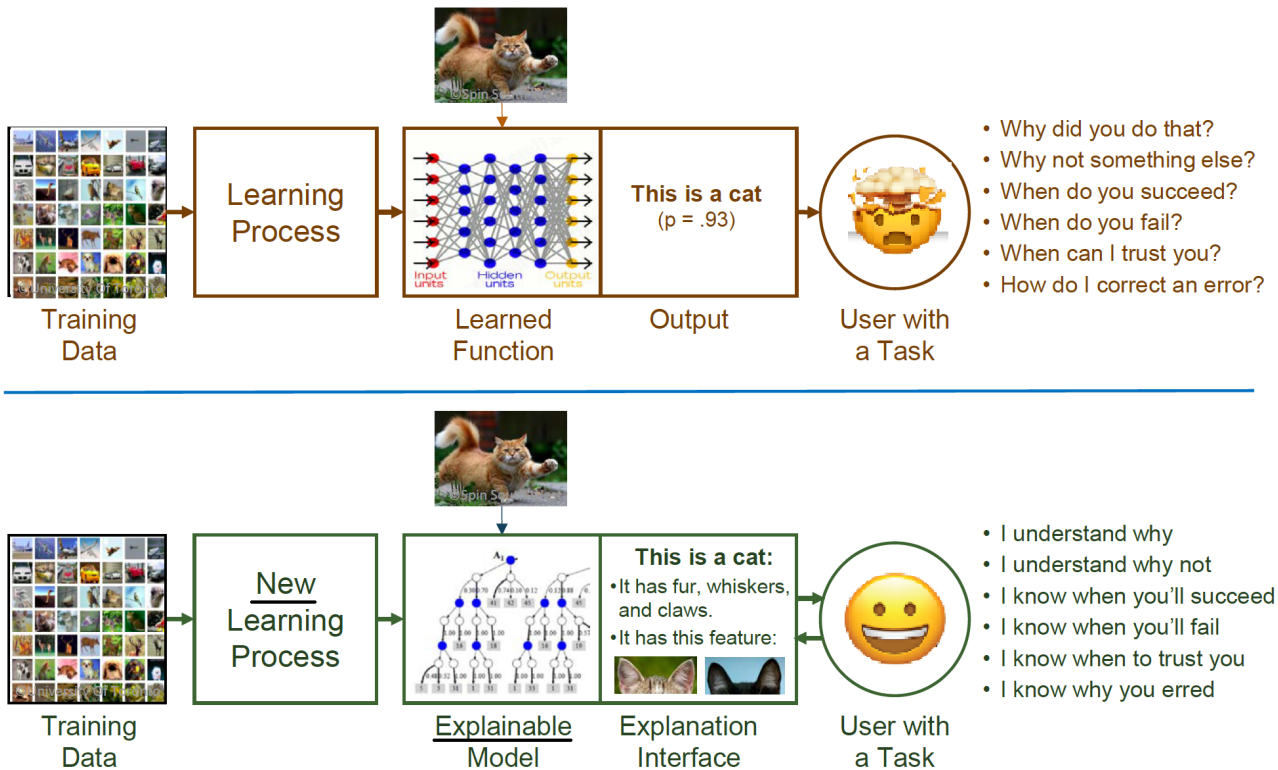


R.C. Fong, A. Vedaldi. Interpretable Explanations of Black Boxes by Meaningful Perturbation, IEEE International Conference on Computer Vision, 2017

Что лучше?


Интеллектуальная система диагностики рака легкого
Злокачественное образование
Модель объяснения
Форма - овальная
Структура - сплошная
Включения - некроз
Контур - неровный

Модели для объяснения (основные) и объяснительные



Прозрачность, интерпретация, объяснение

- **Прозрачность (transparency)**: основная модель
  - противоположность “черному ящику”; механизм работы модели известен
  - **данные не используются**
- **Интерпретация (interpretability)**: рассматривает основную модель вместе с данными
  - маски или heatmaps показывают *значимые признаки*
  - **данные всегда используются**
- **Объяснение (explainability)**: рассматривает основную модель, **данные и участие человека**
  - объяснения д.б. интерпретируемы, т.е., давать качественное понимание связи между вх. и вых. данными
  - **цель - объяснить, иструмент - интерпретация**

Критерии для методов интерпретации

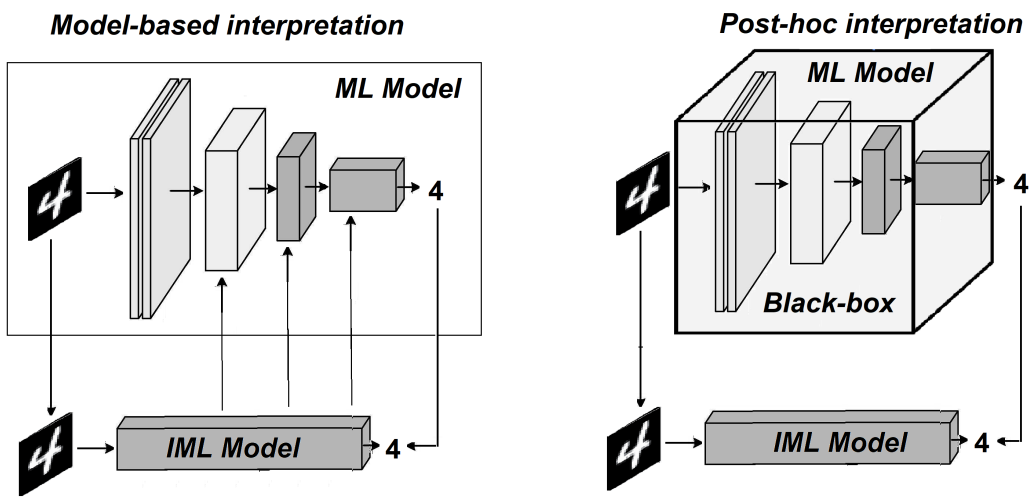
1. Intrinsic - внутренняя интерпретируемость - использование модели МО, которая интерпретируема (линейные модели, модели на основе деревьев)
2. Post hoc - объяснение после обучения основной модели
3. Model-specific or model-agnostic
4. Local or global

Критерии (model-specific or model-agnostic)

- Специфичные для модели методы интерпретации специфичны зависят исключительно от каждой модели. Это могут быть коэффициенты, p-values, оценки AIC, правила из дерева решений и так далее.
- Независимые от модели методы интерпретации (агностические) могут использоваться для любой модели МО. Работают путем анализа (и возмущений входов) признаков пар вход-выход.
- Эти методы не имеют доступа к каким-либо внутренним компонентам модели, таким как веса, ограничения или допущения.

Post-hoc и model-based интерпретация

- **Post-hoc интерпретация** - объяснение после обучения основной модели, пример - метод LIME
- **Model-agnostic - Агностические модели**
- **Model-based** интерпретация позволяет “вмешиваться” в процесс обучения



Post-hoc интерпретация: локальная и глобальная

1. **Локальная** - методы интерпретации сфокусированы на отдельном примере и результате его классификации
2. **Глобальная** - методы интерпретации сфокусированы на значимых признаках всего множества данных (похоже на отбор признаков)

Глобальная интерпретация

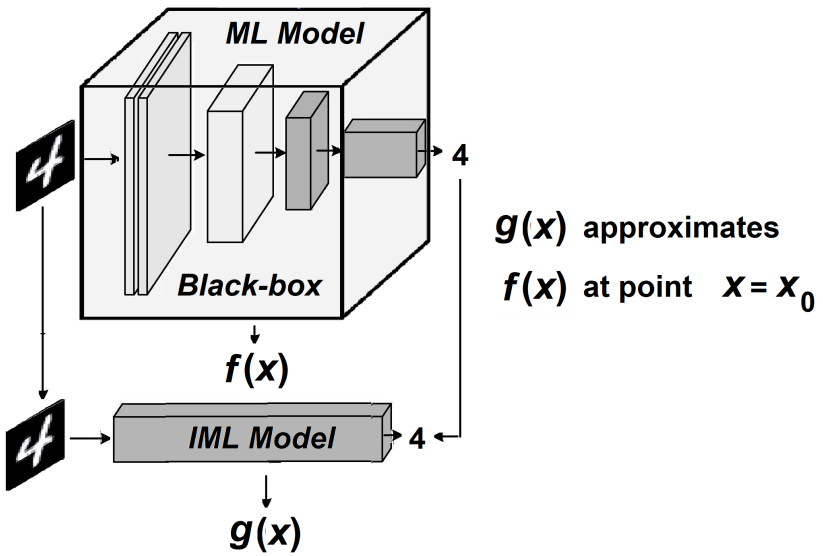
- Ответы на вопросы:
  - Как модель делает прогнозы?
  - Как подмножества признаков влияют на решения модели?
- Глобальная интерпретируемость - это способность объяснять и понимать решения модели на полном наборе данных.

Локальная интерпретация

- Ответы на вопросы:
  - Почему модель принимает конкретное решение для одного примера?
  - Почему модель принимает конкретные решения для группы примеров?
- Для локальной интерпретируемости рассматриваем модель как черный ящик.

Общая идея локальной интерпретации

Необходимо построить модель (метод) объяснения (объяснитель) для "основной" модели МО (глубокая нейронная сеть, случайный лес, SVM и т.д.), которая аппроксимирует основную модель в окрестности объяснимого примера и принадлежит множеству "простых" моделей, которые интерпретируемы (линейные модели, деревья решений)



Общая модель локальной интерпретации

- Основная модель реализует функцию $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^D$, например, в классификации $f(\mathbf{x})$ - вероятность того, что $\mathbf{x}$ принадлежит опред. классу
- Объяснение - это модель $g \in G$, G - класс интерпретируемых моделей (линейные модели, деревья решений)
- Задача оптимизации:

$$\min_{g \in G} \{L(f, g, \theta) + \Omega(g)\}$$

- $L(f, g, \theta)$ - мера того, как неточна g в аппр-ции f
- θ - вектор параметров; $\Omega(g)$ - регуляризатор

Интерпретируемые модели

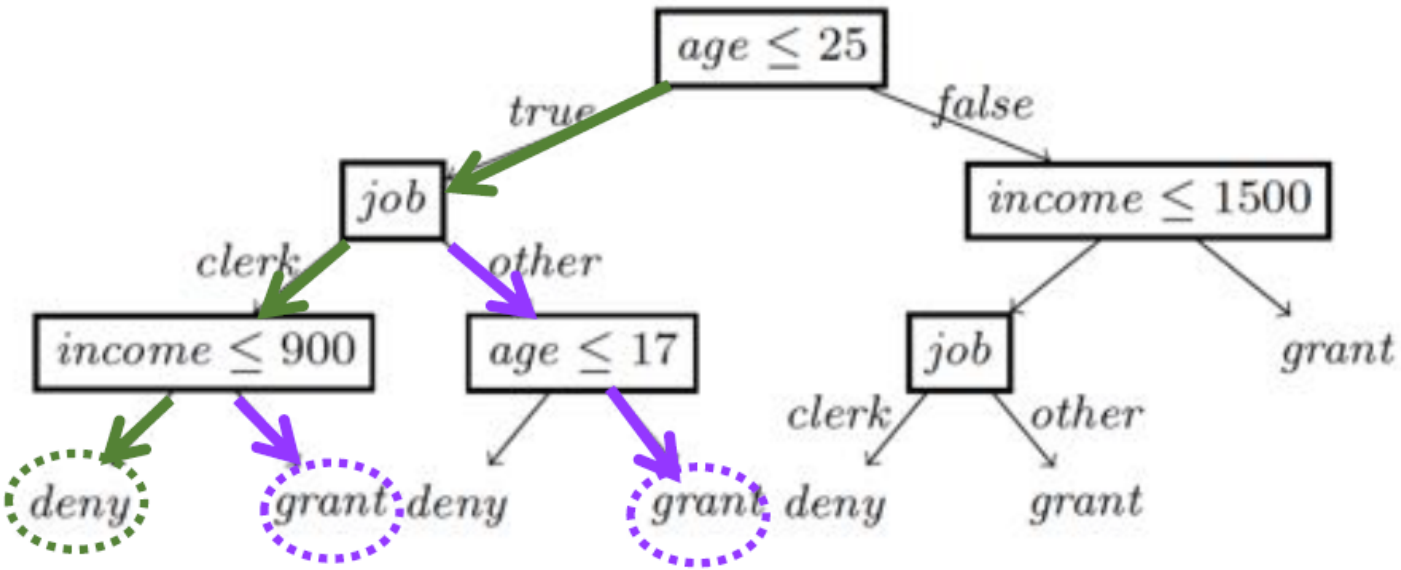
- **Линейная регрессия**
- Логистическая регрессия
- **Деревья решений**
- GLM (Лассо, гребневая регрессия, эластичная сеть)
- K ближайших соседей

Почему линейная регрессия и деревья решений?

- **Линейная регрессия**

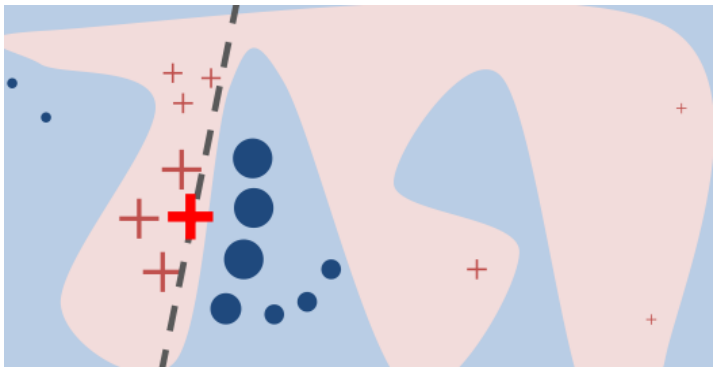
$$g(\mathbf{x}) = a_1 x_1 + a_2 x_2 + \ldots + a_m x_m$$

- **Деревья решений**



Метод LIME (Local Interpretable Model-agnostic Explanations)

1. Основная идея - предположение, что модель **линейная в окрестности анализируемой точки**
2. Вторая идея - возмущение признаков анализируемой точки для генерации новых данных
3. Используя основную модель, находится прогноз $(y = f(x))$ для каждой сгенерированной точки x и образуется **новый датасет**
4. Используя новый датасет, **метод ЛАССО** определяет **значимые признаки**



Метод LIME (3)

- LIME минимизирует функцию

$$\xi = \arg\min_{g \in G} L(f, g, \pi_X) + \Omega(g)$$

- g - объяснительная модель для оригинальной модели f; π_X - веса в виде ядер

$$g(z) = \phi_0 + \sum_{i=1}^{M} \phi_i z_i$$

LIME

- **Local Interpretable Model-agnostic Explanations** (Ribeiro, Singh, Guestrin, 2016)
- **Агностицизм**: LIME не делает никаких предположений относительно модели, прогноз которой объясняется, для него модель как «черный ящик»
- **Интерпретируемость**: LIME использует представление данных (называемое интерпретируемым представлением), которое отличается от исходного пространства признаков
- **Локальность**: LIME дает объяснение в окрестности примера, который хотим объяснить.

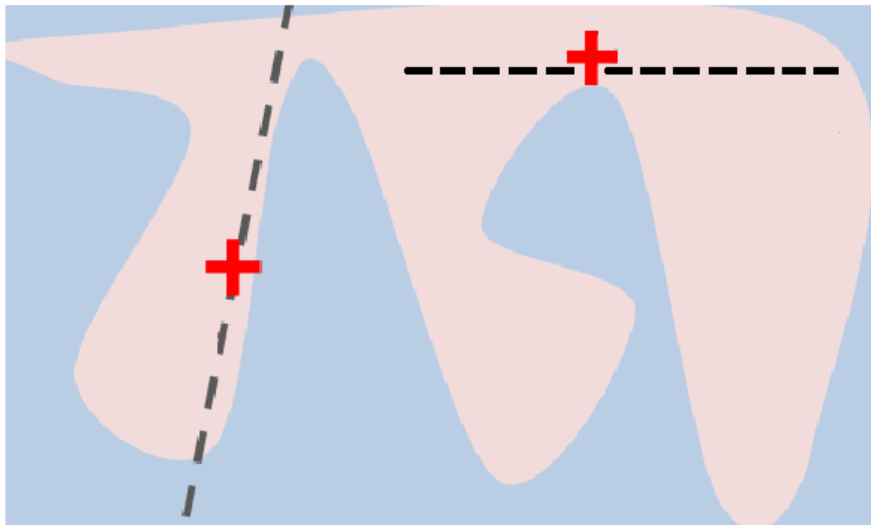
LIME (пример)

(a) Original Image (b) Explaining *Electric guitar* (c) Explaining *Acoustic guitar* (d) Explaining *Labrador*

Объяснение вариантов классификации. Три основных прогнозируемых класса: “Electric Guitar” (p = 0.32), “Acoustic guitar” (p = 0.24) и “Labrador” (p = 0.21)

LIME (проблемы)

1. Суперпиксели
2. Существенная нелинейность в локальной области



3. Возмущения изображений, текстовые данные

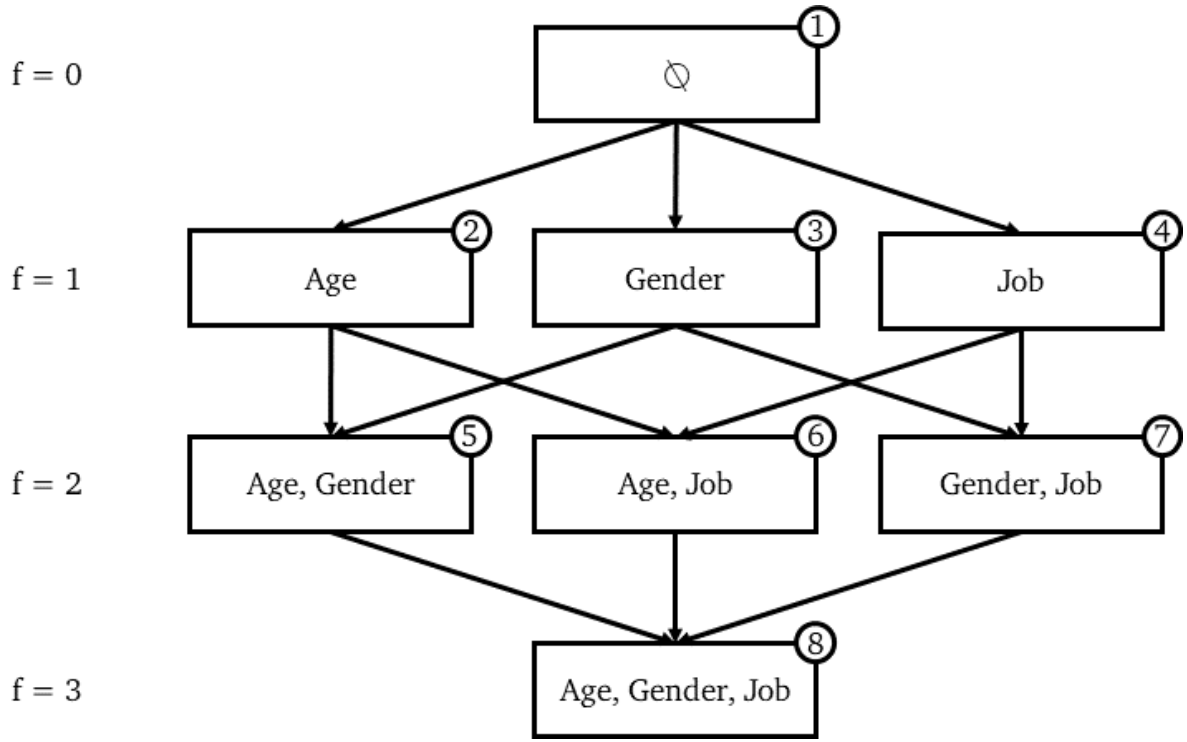
Метод SHAP

- Значимости SHAP основаны на числах Шепли, концепции из теории игр
- В теории игр нужны: игра и несколько игроков
- В машинном обучении:
  - «игра» воспроизводит выход модели
  - «игроки» - это признаки, включенные в модель
- Шепли количественно оценивает вклад каждого игрока в игру
- SHAP количественно оценивает вклад каждого признака в прогноз

SHAP - множество мощности признаков (1)

- Модель машинного обучения: предсказывает доход человека, зная его возраст, пол и работу.
- Числа Шепли основаны на идее, что результат каждой возможной комбинации (или коалиции) игроков должен учитываться для определения важности отдельного игрока.
- В примере это соответствует каждой возможной комбинации f признаков ($f \in \{0, 1, ..., F\}$, $F = 3$).

SHAP - множество мощности признаков (2)



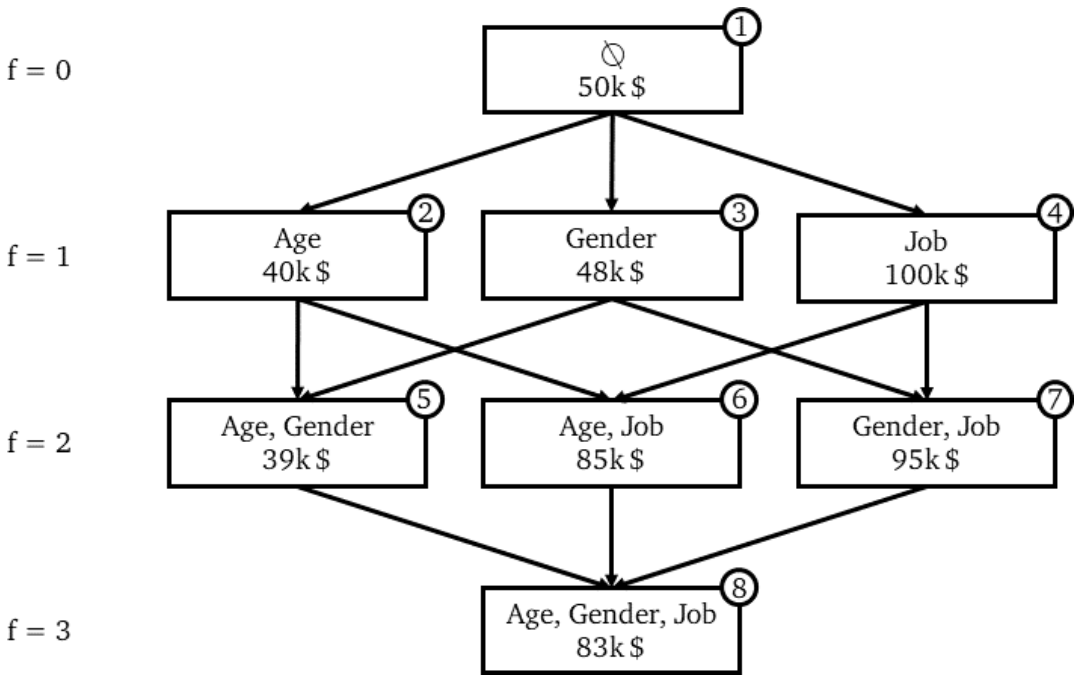
Каждый узел - коалиция признаков, каждое ребро - включение признака, отсутствующего в предыдущей коалиции, 8 коалиций

SHAP - множество мощности признаков (3)

- SHAP требует обучения отдельной модели прогнозирования для каждой отдельной коалиции, то есть 2^F моделей
- Модели полностью эквивалентны друг другу в том, что касается их гиперпараметров и их обучающих данных (которые представляют собой полный набор данных)
- Единственное, что меняется, это набор признаков, включенных в модель.

SHAP - множество мощности признаков (4)

Пусть 8 регрессионных моделей дали 8 прогнозов для x_0



SHAP - маргинальный эффект

- Два узла, соединенные ребром, различаются только одним элементом в том смысле, что нижний имеет точно такие же признаки, что и верхний, плюс дополнительный признак, которого не было у верхнего
- Разрыв между прогнозами двух связанных узлов может быть вменен эффекту этого дополнительного признака
- Это называется «маргинальным вкладом» признака
- И так, каждое ребро - маргинальный вклад, вносимый признаком

SHAP - снова пример

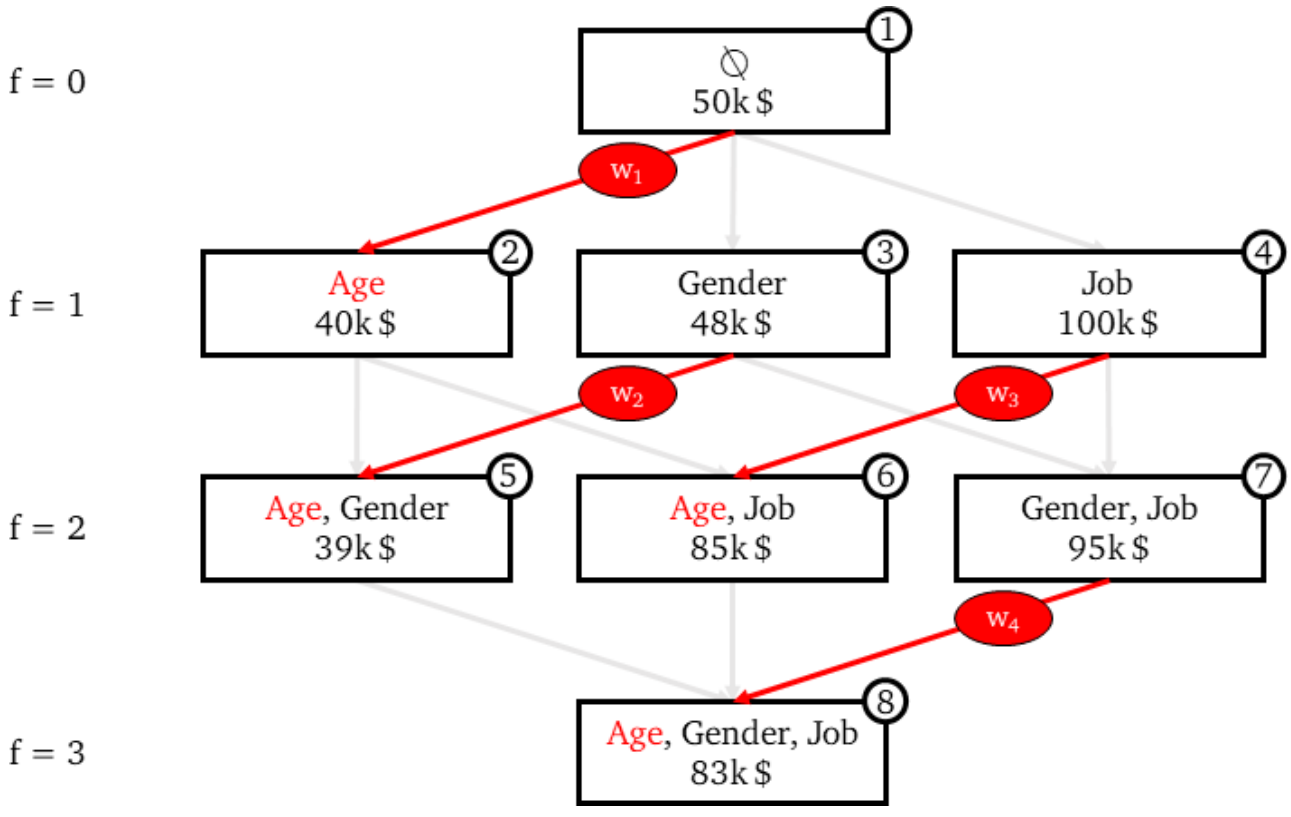
- Представим, что мы находимся в узле 1 (модель без признаков)
- Эта модель предсказывает средний доход от всех обучающих наблюдений: \$50 тыс.
- Если перейдем к узлу 2 (модель только с одним признаком - Age, прогноз для x_0: \$40 тыс.
- Это означает, что знание Age x_0 снизило наш прогноз на \$10 тыс.
- Т.о. маргинальный вклад Age в модель, содержащую только Age в качестве признака: -10k \$

$$\begin{aligned} \mathrm{MC}_{Age,\{Age\}}(x_0) &= \mathrm{Predict}_{\{Age\}}(x_0) - \mathrm{Predict}_{\varnothing}(x_0) \\ &= 40 - 50 = -10 \end{aligned}$$

SHAP - снова пример

- Чтобы получить общий вклад Age на конечную модель (то есть значение SHAP Age для x_0), необходимо учитывать маргинальный вклад Age во всех моделях, где присутствует Age, т.е. рассмотреть все ребра, соединяющие два узла, так что:
  - верхний не содержит Age
  - нижний содержит Age.

SHAP - снова пример



SHAP - снова пример

Все маргинальные вклады затем суммируются с весами:

$$\begin{aligned}\text{SHAP}_{Age}(x_0) = {} & w_1 \times \text{MC}_{Age,\{Age\}}(x_0) \\ & + w_2 \times \text{MC}_{Age,\{Age,Gender\}}(x_0) \\ & + w_3 \times \text{MC}_{Age,\{Age,Job\}}(x_0) \\ & + w_4 \times \text{MC}_{Age,\{Age,Gender,Job\}}(x_0)\end{aligned}$$

где $w_1 + w_2 + w_3 + w_4 = 1$

SHAP - веса ребер

- Сумма весов всех маргинальных вкладов в модели с 1 признаком должна равняться сумме весов всех маргинальных вкладов в модели с двумя признаками и так далее ...
- Т.е. сумма всех весов в том же «ряду» должно равняться сумме всех весов в любом другом «ряду»
- В примере это означает: $w_1 = w_2 + w_3 = w_4$
- Все веса маргинальных вкладов в f-признаковой модели должны быть равны друг другу для каждого f
- Т.е. все ребра одного «ряда» должны быть равны друг другу
- В примере это означает: $w_2 = w_3$
- $w_1 = 1/3, w_2 = 1/6, w_3 = 1/6, w_4 = 1/3$

SHAP - веса ребер

- Спойлер: вес ребра обратно пропорционален общему количеству ребер в одном «ряду».
- Или, что то же самое, вес маргинального вклада в модель f признаков является обратной величиной числа возможных маргинальных вкладов во все модели f признаков.

SHAP - веса ребер

- Каждая модель f признаков имеет f маргинальных вкладов (по одному на каждый признак)
- Достаточно подсчитать число возможных моделей f признаков и умножить его на f.
- Т.о. все сводится к подсчету количества возможных моделей f признаков при заданном f и знании того, что общее количество признаков равно F
- **Это - определение биномиального коэффициента!**

SHAP - веса ребер

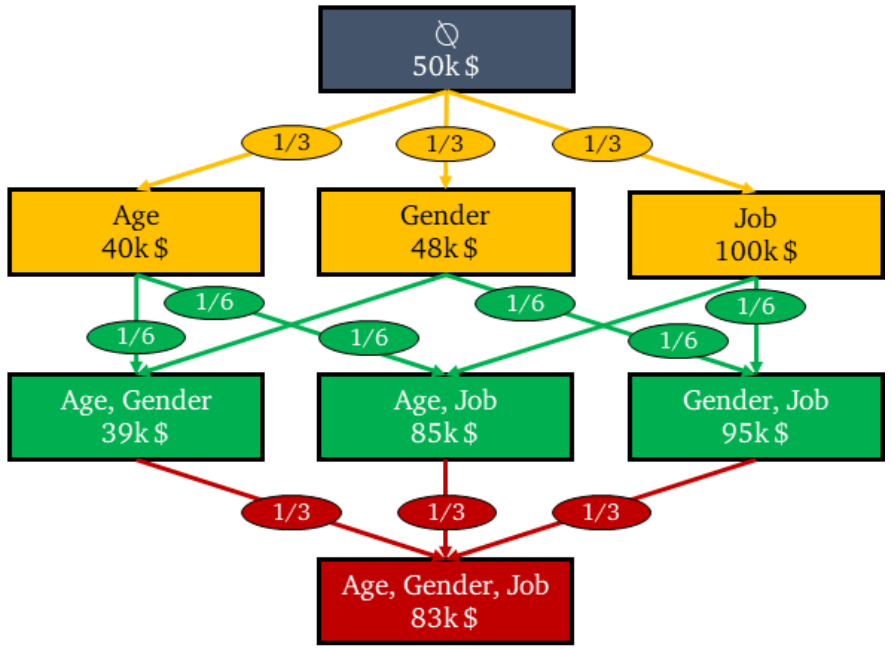
- Итог: количество всех маргинальных вкладов всех моделей f признаков (количество ребер в каждой «строке») - равно:

$$f \times C_F^f$$

- Обратная величина и есть вес маргинального вклада в модель f признаков

SHAP - веса ребер

	N. of Nodes $\binom{F}{f}$	N. of Edges $f \times \binom{F}{f}$
f = 0	1	
f = 1		3
	3	
f = 2		6
	3	
f = 3		3
	1	
Sum	$2^F=8$	$F\times2^{F-1}=12$



SHAP - снова пример

$$
\begin{aligned}
\text{SHAP}_{Age}(x_0) = &\left[1 \cdot C_3^1\right]^{-1} \times \text{MC}_{Age,\{Age\}}(x_0) \\
&+ \left[2 \cdot C_3^2\right]^{-1} \times \text{MC}_{Age,\{Age,Gender\}}(x_0) \\
&+ \left[2 \cdot C_3^2\right]^{-1} \times \text{MC}_{Age,\{Age,Job\}}(x_0) \\
&+ \left[3 \cdot C_3^3\right]^{-1} \times \text{MC}_{Age,\{Age,Gender,Job\}}(x_0) \\
&= \frac{1}{3}(-10) + \frac{1}{6}(-9) + \frac{1}{6}(-15) + \frac{1}{3}(-12) = -11.33\$
\end{aligned}
$$

Shapley Values (1)

$$\text{SHAP}_{feature}(x) = \sum_{set:feature \in set} \left[|set| \times C_F^{|set|} \right]^{-1} \times \left[\text{Predict}_{set}(x) - \text{Predict}_{set \setminus feature}(x) \right]$$

$$\phi_i = \sum_{S \subseteq F \setminus \{i\}} \frac{|S|!(|F| - |S| - 1)!}{|F|!} \left[f_{S \cup \{i\}} \left(x_{S \cup \{i\}} \right) - f_S \left(x_S \right) \right]$$

- $|F|$ - размер полной коалиции; S - подмножество коалиции, которое не включает игрока i, а $|S|$ - размер S, $S!$ - число перестановок множества S
- В квадратных скобках: «насколько больше выигрыш, когда мы добавляем игрока i к подмножеству S»

Shapley Values (2)

- А как теперь с признаками?
- Вклад i-го признака:

$$\phi_i = \sum_{z' \subseteq x'} \frac{|z'|!(M - |z'| - 1)!}{M!} \left[f_x\left(z'\right) - f_x\left(z' \backslash i\right) \right]$$

- M - общее число признаков; z' - подмножество признаков, которое является объяснением
- Оцениваем значение модели с и без i-го признака ($f_x\left(z'\right)$ и $f_x\left(z' \backslash i\right)$)

Shapley Values - снова пример

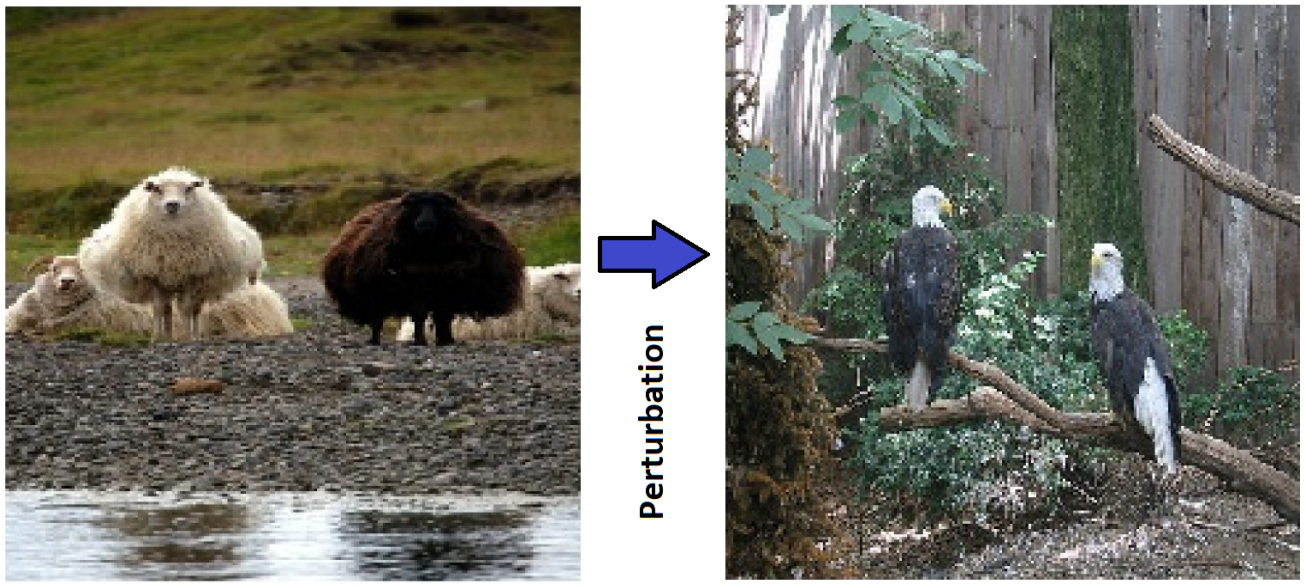
- $\text{SHAP}_{Age}(x_0) = -11.33$, $\text{SHAP}_{Gender}(x_0) = -2.33$, $\text{SHAP}_{Job}(x_0) = 46.66$
- Сумма = + \$33 тыс. В точности равно разнице между выходом всей модели (\$83 тыс.) и выходом пустой модели без признаков (\$50 тыс.)
- **Фундаментальная характеристика чисел SHAP**: сумма чисел SHAP каждого признака наблюдения дает разность между прогнозом модели и нулевой моделью (**SHapley Additive exPlanations**)

Объяснения примером (example-based) (1)

- Методы выбирают пример (не признаки) из датасета для объяснения поведения основной модели
- Имеют смысл, если можно представить пример данных в виде понятном человеку
- Используют **прототипы классов**
- **k-ближайших соседей**: X классифицируется как y, так как A, B и C из y аналогичны X

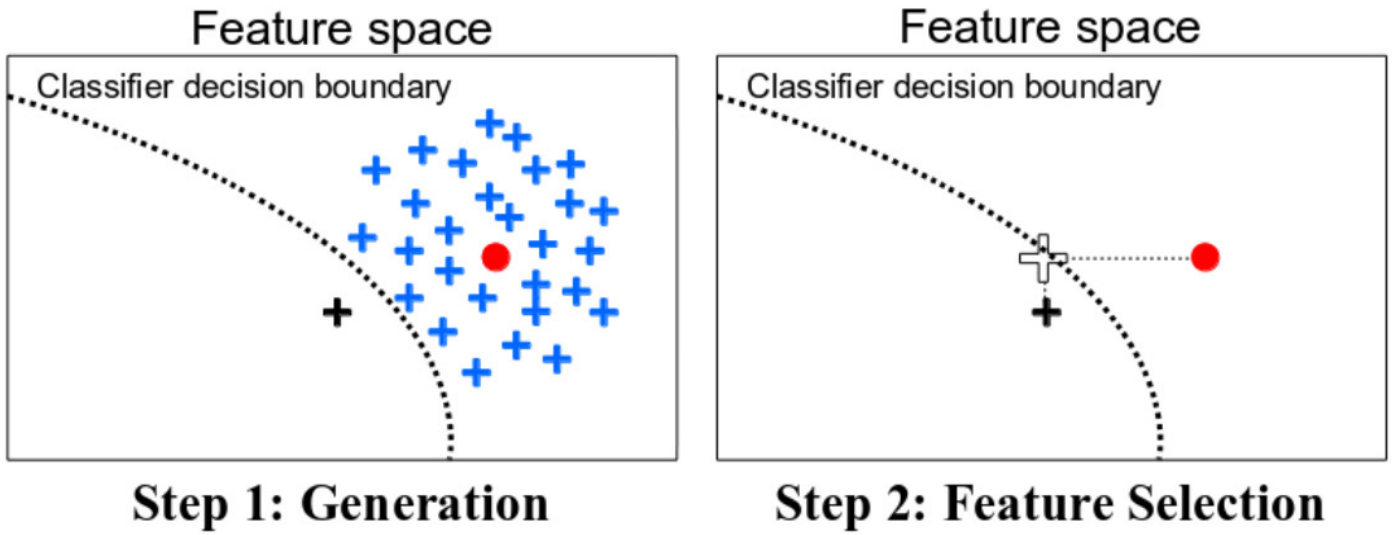
Метод возмущений

$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x} + \delta$, δ - вектор возмущений (случайных или вычисляемых)



Counterfactual объяснения (гипотетические, противопоставления)

- Counterfactual - наименьшие изменения значений признаков, которые изменяют класс примера
- “Ваш запрос на кредит отклонен, так как ваш доход $30,000 и ваш баланс $200. Если бы ваш доход был $35,000 и ваш текущий баланс был $400, то ваш запрос был бы одобрен”



Counterfactuals (1)

- Обычно спрашивают, не почему был сделан определенный прогноз, а почему этот прогноз был сделан вместо другого прогноза.
- Для прогноза стоимости дома человека может интересовать, почему прогнозируемая цена была выше по сравнению с более низкой ценой, которую он ожидал.
- Когда заявка на кредит отклонена, меня не интересует, почему отказ. Меня интересуют факторы моей заявки, которые должны измениться, чтобы она была принята.
- Противоречивые объяснения легче понять, чем полные объяснения.

Counterfactuals (2)

- Врач задается вопросом: «Почему лечение не сработало на пациенте?»
- Полное объяснение, почему лечение не работает, включает: пациент болеет с 10 лет, 11 генов сверхэкспрессированы, что делает болезнь более тяжелой, организм пациента разрушается, лекарство неэффективно
- Сравнительное объяснение - отвечает на вопрос по сравнению с другим пациентом, для которого препарат работал, может быть проще: у пациента есть комбинация генов, которые делают лекарство неэффективным, по сравнению с другим пациентом
- Лучшее объяснение - это то, что подчеркивает наибольшую разницу между объектом интереса и “эталонным” объектом

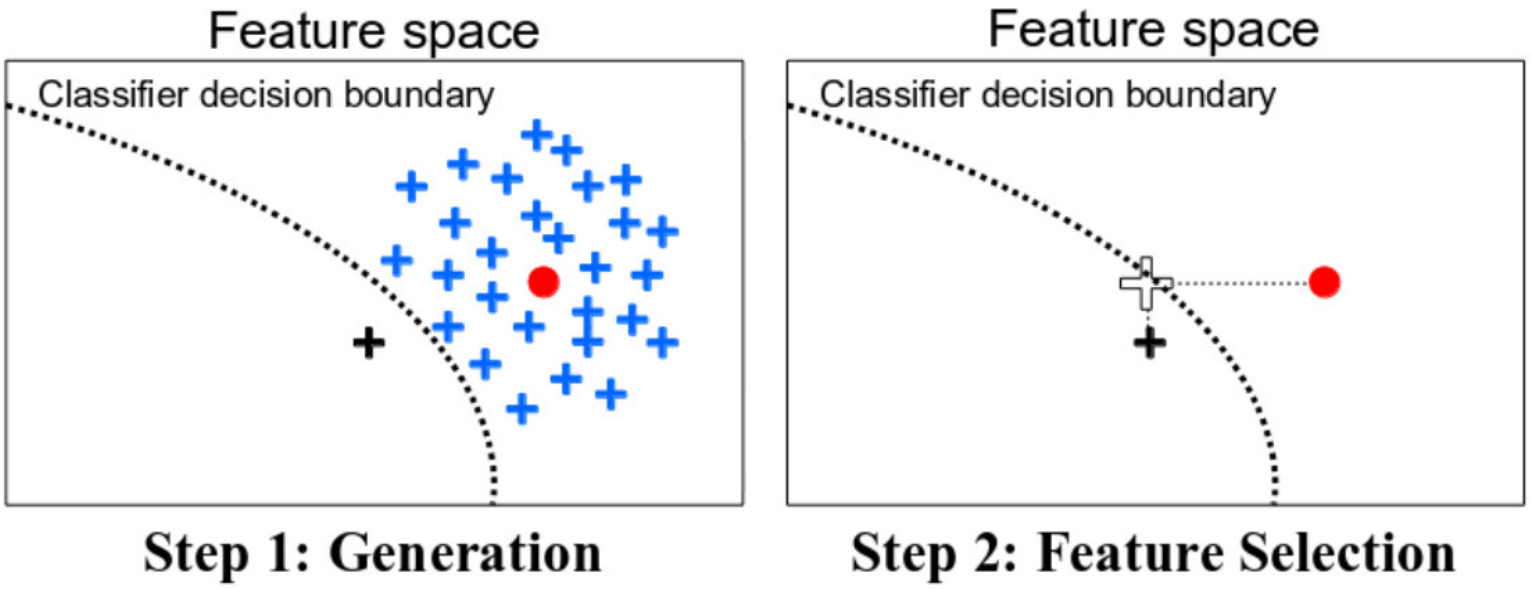
Counterfactuals (3)

- Counterfactuals - наименьшие изменения значений признаков, которые изменяют класс примера
- Counterfactual $\mathbf{z}$ для примера $\mathbf{x}$ определяется решением задачи оптимизации:

$$\min_{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^m} L(f(\mathbf{z}), f(\mathbf{x})) + C\theta(\mathbf{z}, \mathbf{x})$$

  - $L(\cdot, \cdot)$ - функция потерь, устанавливающая связь между выходами основной модели;
  - $\theta(\cdot, \cdot)$ - штрафное слагаемое "против"больших отклонений $\mathbf{z}$ от $\mathbf{x}$, например, расстояние между $\mathbf{z}$ и $\mathbf{x}$;
  - $C > 0$ - параметр

Counterfactuals (4)



Глобальная интерпретация - feature importance

- Значимость признаков - какие признаки оказывают наибольшее влияние на прогнозируемые значения?
- Алгоритм: значимость перестановок (permutation importance)
  1. Получить обученную модель и записать признаки в виде таблицы (столбец - признак)
  2. Перемешать значения в одном столбце, сделать прогнозы, используя полученный набор данных. Снижение точности - значимость признака, который перемешали.
  3. Вернуться к исходной таблице (отмена перемешивания из шага 2). Повторить шаг 2 со следующим столбцом в таблице, пока не будут найдены значимости каждого столбца.

Глобальная интерпретация - Partial Dependence Plot

- **Значимость признаков** показывает, **какие** признаки больше всего влияют на прогнозы, **график частичной зависимости** показывает, **как** признак влияет на прогнозы
- График частичной зависимости показывает, какая зависимость между признаком и выходом: линейнеая, монотонная или более сложная

График частичной зависимости (пример 1)

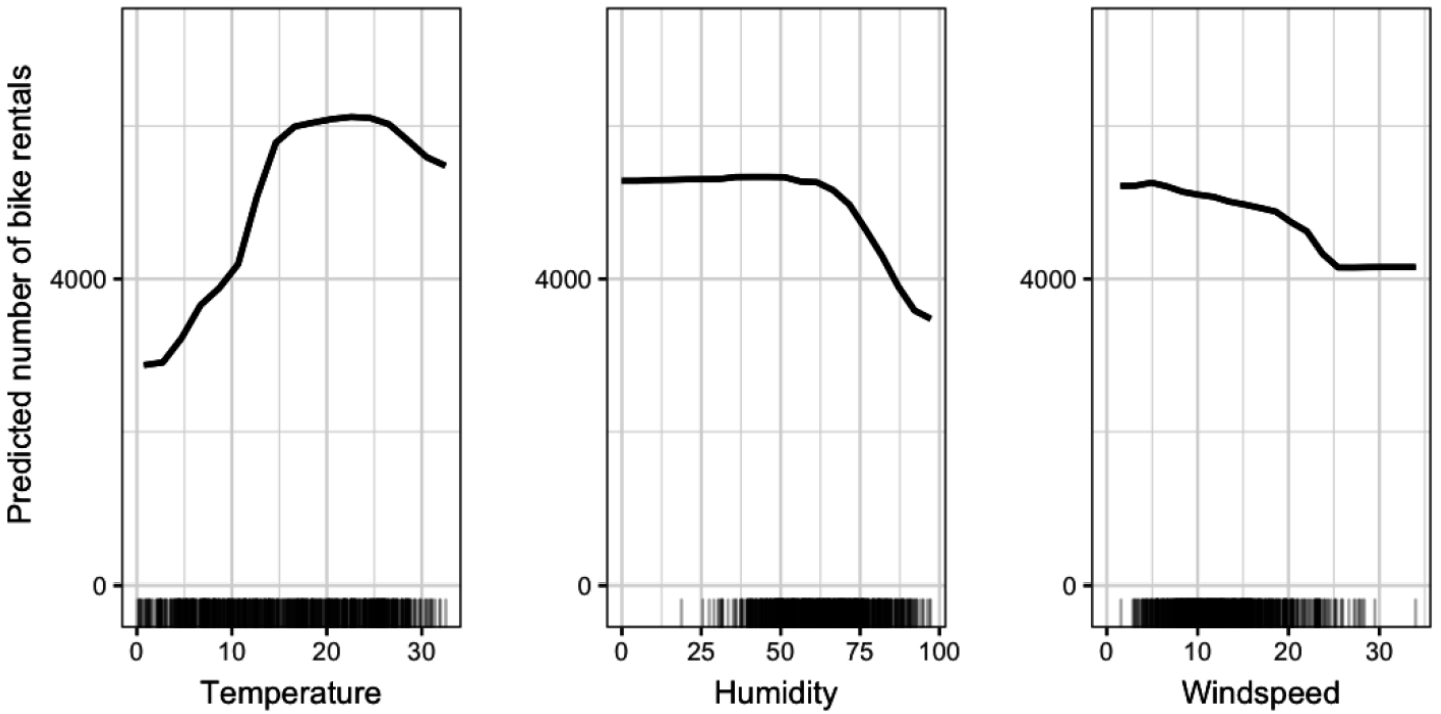


График частичной зависимости (пример 2 - взаимодействие признаков)

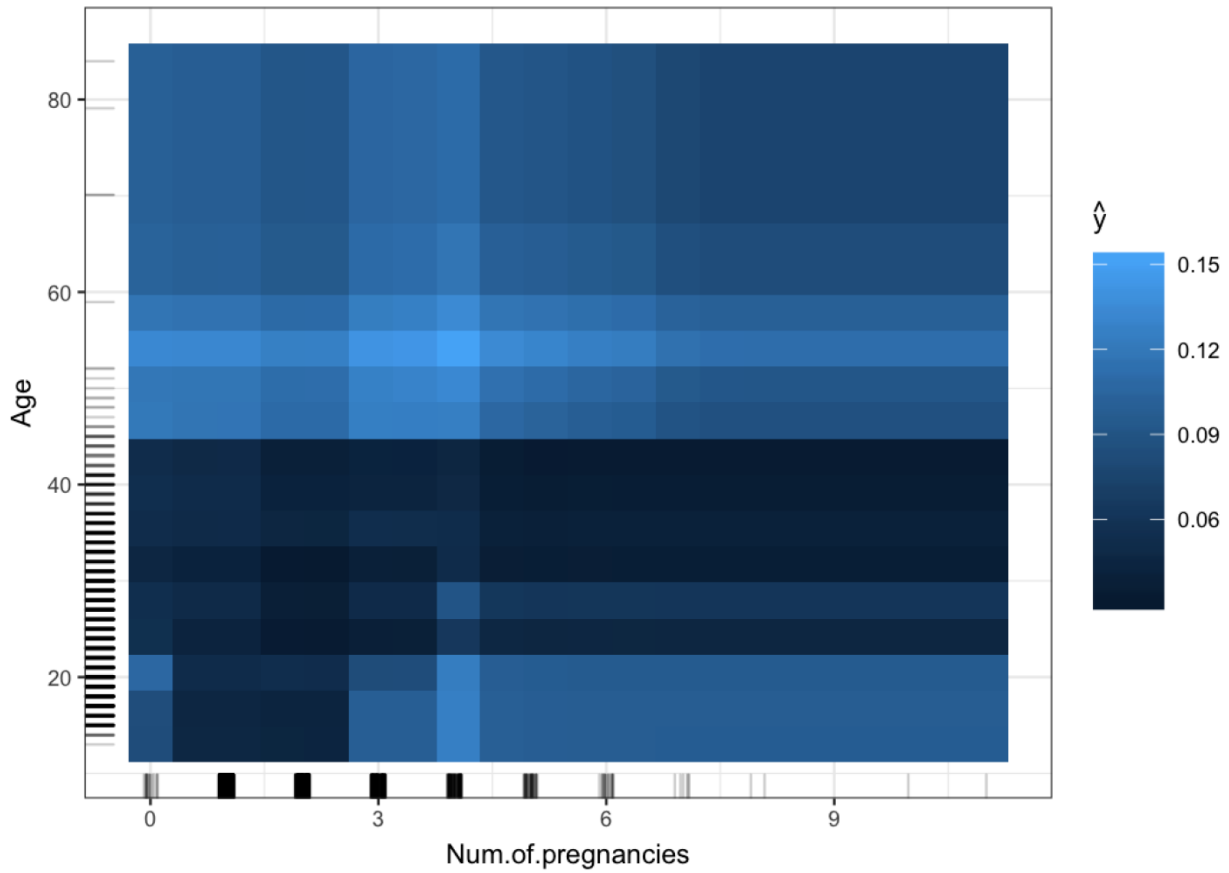


График частичной зависимости

- Частичная зависимость:

$$f_{x_S}(x_S) = \mathbb{E}_{x_C}\left[f(x_S, x_C)\right] = \int f(x_S, x_C) d\mathbb{P}(x_C)$$

- x_S - множество признаков, для которых график частичной зависимости определяется
- x_C - все другие признаки, используемые в модели f; $x = x_S || x_C$ (конкатенация)
- Частичная зависимость работает путем маргинализации выходных данных модели f по распределению признаков x_C, так что оставшаяся функция показывает связь между x_S и прогнозом

График частичной зависимости

- Частичная зависимость по данным из датасета:

$$f_{x_S}(x_S) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(x_S, x_{C_i})$$

- x_{C_i} - фактические значения признаков из датасета, в которых мы не заинтересованы
- Используемое предположение: признаки x_S не коррелируют с признаками x_C

Чтобы закончить...

"Look deep into nature, and then you will understand everything better."
Albert Einstein

Вопросы

Вопросы —– ?