

Apprentissage statistique : modélisation
descriptive et introduction aux réseaux de
neurones (RCP208)
Sélection de variables

Michel Crucianu
(prenom.nom@cnam.fr)
<http://cedric.cnam.fr/vertigo/Cours/ml/>

EPN05 Informatique
Conservatoire National des Arts & Métiers, Paris, France

12 décembre 2024

Plan du cours

2 Réduction de dimension : approches

3 Sélection de variables : approches

4 Critères de sélection

Réduction du nombre de variables d'entrée : objectifs

n données dans $\mathbb{R}^m \rightarrow n$ données dans \mathbb{R}^k , $k \ll m$

- 1 Réduire le volume de données à traiter, tout en conservant au mieux l'information « utile » ← définir ce qu'est information **utile**
- 2 Améliorer le rapport signal / bruit en supprimant des variables non pertinentes ← définir ce qu'est une variable **non pertinente**
- 3 Réduire la complexité d'un modèle décisionnel (pour améliorer sa généralisation) : le nombre de variables en est une composante
- 4 Simplifier la maintenabilité de la solution en réduisant le nombre de variables à recueillir pour les nouvelles observations
- 5 Améliorer la « lisibilité » des données
 - Mettre en évidence des relations entre variables ou groupes de variables
 - Permettre la visualisation ← définir ce qu'il faut mettre en évidence
- 6 Répondre à la « malédiction de la dimension » (*curse of dimensionality*)

Objectifs différents, critères différents → méthodes différentes

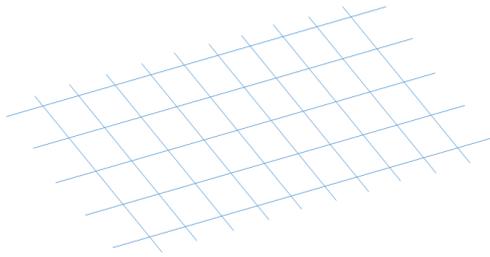
Réduction du nombre de variables : approches

- 1 Réduction de dimension
 - Modélisation à partir d'un nombre plus faible de variables obtenues par **construction de nouvelles variables** à partir des variables initiales (par ex. combinaisons linéaires)
 - Plus de flexibilité par rapport à la sélection
 - Mais les nouvelles variables sont **rarement interprétables**
- 2 **Sélection de variables** (*feature selection*)
 - **Sélection d'un sous-ensemble** de k variables parmi les m variables initiales
 - Les variables sélectionnées gardent leur signification initiale
 - Mais **solution potentiellement sous-optimale** car cas particulier de la construction de nouvelles variables

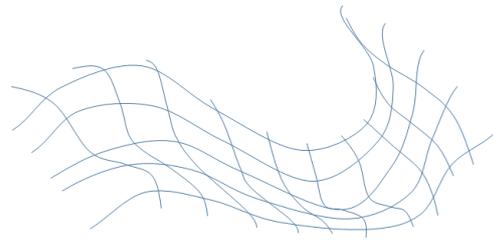
Réduction de dimension : rappel

La dépendance entre les nouvelles variables et les variables initiales peut être

- Linéaire : trouver un sous-espace linéaire de dimension k dans l'espace initial \mathbb{R}^m
 - Chapitre 2 : ACP, AFD, ACM
- Non linéaire : trouver un sous-espace non linéaire de dimension faible
 - Chapitre 5 : LLE, t-SNE, UMAP



sous-espace linéaire



sous-espace non linéaire

Plan du cours

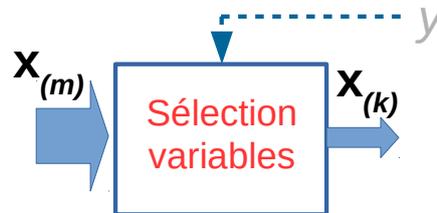
2 Réduction de dimension : approches

3 Sélection de variables : approches

4 Critères de sélection

Sélection de variables : approches (voir [2], [4])

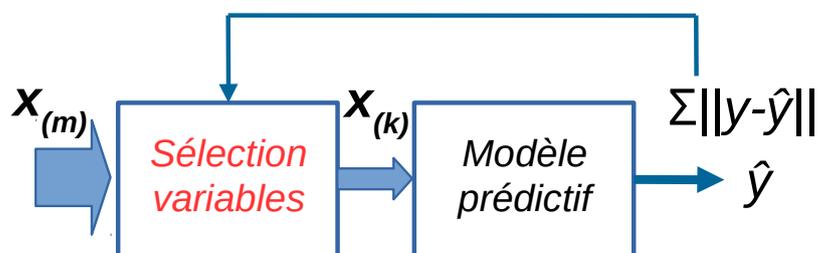
1. Filtrage : appliquées sans faire appel à un modèle prédictif (ou décisionnel) ultérieur
 - Critères de sélection : maximisation de l'information mutuelle entre une variable d'entrée et la variable à prédire, minimisation de la redondance entre variables d'entrée



- Coopération **sous-optimale** avec le modèle prédictif ultérieur car celui-ci n'intervient pas dans le processus de sélection

Sélection de variables : approches (2)

2. *Wrapper* : coopération directe avec le modèle prédictif qui emploie les variables
 - Critère de sélection typique : choix du groupe de variables qui maximise les performances du modèle prédictif ultérieur (modèle prédictif et groupe de variables « emballés » ensemble)



- **Coût élevé** : pour évaluer chaque groupe de variables il faut construire un modèle prédictif...

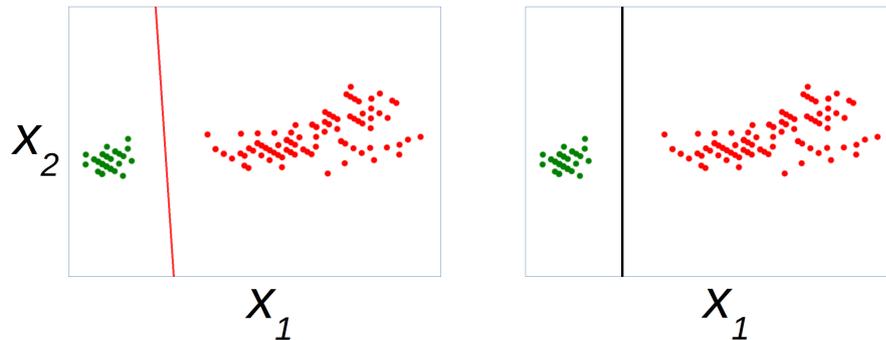
Sélection de variables : approches (3)

3. Intégration (*embedding*) : l'opération de sélection de variables est intégrée à la méthode de construction de modèle prédictif

- Exemple simple : régularisation L_1 dans la fonction de coût du modèle prédictif

Sans régularisation L_1 :
dépendance des 2 variables

Avec régularisation L_1 :
dépendance d'une seule variable



- Pas de surcoût par rapport à la construction du modèle prédictif mais ne peut pas être utilisée avec tout type de modèle

Sélection de variables : exploration de l'espace de recherche

Choisir k variables parmi $m \rightarrow$ espace de recherche $O(C_m^k) \left(= \frac{m!}{k!(m-k)!} \right) !$

\Rightarrow des solutions **approximatives** (sous-optimales) sont préférées (parfois indispensables) :

- 1 Critère de « pertinence » exprimable par variable initiale **individuelle** (indépendamment des autres), puis sélection des k variables de pertinence optimale \Rightarrow complexité $O(m)$
- 2 Critère de « pertinence » exprimable par **ensemble** de variables initiales (par ex. la redondance pour approche filtrage ou performance globale pour approche *wrapper*)
 - 1 Méthodes incrémentales (par cooptation) :
 - On démarre avec une seule variable (par ex. choisie avec la méthode précédente)
 - A chaque itération on ajoute une variable, celle qui forme le meilleur ensemble avec les variables déjà sélectionnées aux itérations précédentes
 - \Rightarrow complexité $O(m^2)$ (dans le détail dépend du nombre de variables à **ajouter**)
 - 2 Méthodes décrementales (par élimination) :
 - On démarre avec la totalité des variables
 - A chaque itération on teste toutes les combinaisons avec une variable en moins par rapport à l'itération précédente et on choisit celle qui est optimale (on élimine donc une variable)
 - \Rightarrow complexité $O(m^2)$ (dans le détail dépend du nombre de variables à **éliminer**)

Plan du cours

2 Réduction de dimension : approches

3 Sélection de variables : approches

4 Critères de sélection

Critères de sélection de variables explicatives

1 Propriétés **intrinsèques** d'**une** variable (d'entrée)

- Variance de la variable : si très faible, la variable explique une faible part de la variance des observations et est éliminée

2 Caractérisation d'**une** variable d'entrée **par rapport à la variable de sortie**

- Qualité de prédiction : sont choisies individuellement les variables d'entrée qui « expliquent le mieux » la variable de sortie

3 Caractérisation d'un **groupe** de variables d'entrée **par rapport à la variable de sortie**

- Qualité de prédiction : est choisi le groupe qui « explique le mieux » la variable de sortie

4 Caractérisation d'un groupe de variables d'entrée **entre elles et par rapport à la variable de sortie**

- Qualité de prédiction **et** réduction de la redondance : est choisi le groupe qui présente le meilleur compromis entre ces deux aspects

Critère de variance

- **Ne s'intéresse pas à la relation** entre une variable d'entrée et la variable de sortie
- n observations variable $X \Rightarrow$ moyenne et variance de l'échantillon :

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i, \quad \text{Var}(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$$

- **Idée** : les variables de variance trop faible expliquent trop peu de la variance des observations et sont éliminées \leftarrow comme en ACP les axes associés aux valeurs propres les plus faibles de la matrice des covariances empiriques
- La variance dépend de l'unité de mesure : à partir d'un même échantillon de longueurs on obtient une variance bien plus grande si les valeurs sont exprimées en mm plutôt qu'en mètres \rightarrow pour comparer la « dispersion » de variables différentes mieux vaut utiliser le **coefficient de variation** $= \frac{\text{écart-type}}{\text{moyenne}}$
- **Risque** : une variable (très) discriminante peut être de faible variance (ou de faible coefficient de variation), comme nous l'avons déjà vu pour l'analyse discriminante

Critères de qualité prédictive individuelle

- **Idée** : dans quelle mesure la variable d'entrée X « explique » la variable de sortie Y ?
- Différents critères de qualité prédictive **individuelle** ou « pertinence », par exemple :
 - 1 **Corrélation linéaire** : $r = \frac{\text{Cov}(X, Y)}{\sigma(X)\sigma(Y)} \in [-1, 1]$, Cov étant la covariance, σ l'écart-type
 - 2 **Test du χ^2 d'indépendance** (\rightarrow revoir l'analyse des correspondances binaires)
 - X et Y variables discrètes, prenant chacune un nombre fini de valeurs
 - N observations au total : pour n_{ij} observations X prend sa i -ème valeur et Y sa j -ème valeur, on note $n_{i-} = \sum_j n_{ij}$, $n_{-j} = \sum_i n_{ij}$, $e_{ij} = \frac{n_{i-}n_{-j}}{N}$
 - Pour chaque variable X on calcule $t_X = \sum_{i,j} \frac{(n_{ij} - e_{ij})^2}{e_{ij}}$ (écart entre la distribution conjointe de X, Y et la distribution correspondant à l'indépendance)
 - On n'applique pas le test d'indépendance mais on trie les variables X en ordre décroissant de leurs valeurs t_X , puis on élimine les variables X pour lesquelles ces valeurs sont trop faibles

Critères de qualité prédictive individuelle (2)

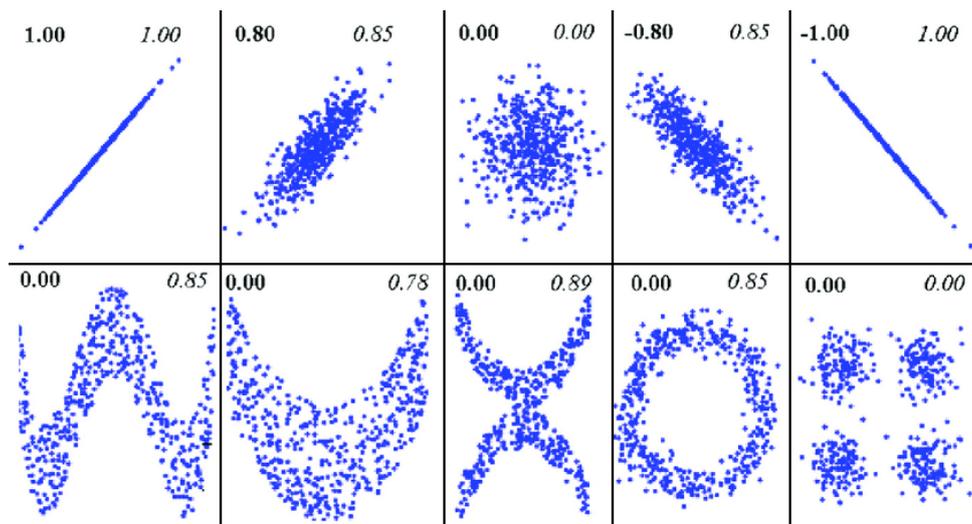


FIG. – Relations entre deux variables : bien représentées (en haut) ou mal représentées (en bas) par la corrélation linéaire (illustration issue de [5]). La valeur de la corrélation linéaire est à chaque fois en haut à gauche, la valeur de l'information mutuelle en haut à droite (en italiques).

Critères de qualité prédictive individuelle (3)

3 Information mutuelle (qu'apporte la connaissance de X à la connaissance de Y ?) :

- X et Y discrètes : $I(X; Y) = \sum_{x,y} P(x,y) \log \frac{P(x,y)}{P(x)P(y)}$
- X et Y continues : $I(X; Y) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} p(x,y) \log \frac{p(x,y)}{p(x)p(y)} dx dy$
- $I(X; Y) = 0 \Leftrightarrow X$ et Y sont indépendantes

→ On garde les k variables d'entrée qui sont individuellement les plus pertinentes, ou celles dont la pertinence est supérieure à un seuil, ou à la moyenne, ou on garde les k premiers déciles, etc.

■ Insuffisance de cette approche de sélection de $k \ll m$ variables parmi m :

- Les k variables sont **individuellement** les plus « explicatives »
 - mais souvent **redondantes** : certaines apportent \sim la même information que d'autres...
- des variables individuellement moins « explicatives » mais plus **complémentaires** aux autres ne sont pas sélectionnées \Rightarrow il y a un potentiel d'amélioration !

Qualité prédictive de groupe *et* réduction de la redondance : mRMR

- Une solution est apportée par *minimum Redundancy and Maximum Relevance* (mRMR, [3])
- Objectifs de mRMR :
 - 1 Augmenter la **qualité prédictive** mesurée par l'information mutuelle entre les variables explicatives sélectionnées et la variable de sortie : $D = \frac{1}{m} \sum_i I(X_i; Y)$
 - 2 Tout **en réduisant la redondance** des variables sélectionnées, mesurée par l'information mutuelle moyenne entre ces variables : $R = \frac{1}{m^2} \sum_{i,j} I(X_i; X_j)$
- mRMR = sélection incrémentale avec comme critère
 - *Mutual information difference* (MID) : $\max_i (D - R)$, ou
 - *Mutual information quotient* (MIQ) : $\max_i \frac{D}{R}$
- [3] montre que mRMR est équivalent à l'utilisation de l'information mutuelle (1) sans l'inconvénient du calcul peu fiable sur un petit échantillon multidimensionnel
- Principe similaire : MIMR (*Maximum Information and Minimum Redundancy* [1]), MRMR (*Maximum Relevance and Minimum Redundancy* [6])...

Conclusion

- La sélection de variables peut présenter des intérêts multiples
- L'approche filtrage est moins coûteuse mais potentiellement moins performante que l'approche *wrapper*
- Une sélection de variables est intégrée à certaines méthodes de modélisation prédictive (à découvrir dans RCP209)
- Combiner optimisation de la qualité prédictive **et** réduction de la redondance dans une approche de filtrage peut constituer un bon compromis entre coût et performance

Références I

- [1] C. Li, V. P. Singh, and A. K. Mishra.
Entropy theory-based criterion for hydrometric network evaluation and design : Maximum information minimum redundancy.
Water Resources Research, 48(5), 2012.
- [2] L. Molina, L. Belanche, and A. Nebot.
Feature selection algorithms : a survey and experimental evaluation.
In *2002 IEEE International Conference on Data Mining, 2002. Proceedings.*, pages 306–313, 2002.
- [3] H. Peng, F. Long, and C. Ding.
Feature selection based on mutual information : Criteria of max-dependency, max-relevance, and min-redundancy.
IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell., 27(8) :1226–1238, Aug. 2005.
- [4] J. Tang, S. Alelyani, and H. Liu.
Feature selection for classification : A review.
In *Data Classification : Algorithms and Applications*, pages 37–64. 2014.

Références II

- [5] T. Vu, A. Mishra, and G. Kumar.
Information entropy suggests stronger nonlinear associations between hydro-meteorological variables and enso.
Entropy, 20 :38, 01 2018.
- [6] Z. Zhao, R. Anand, and M. Wang.
Maximum relevance and minimum redundancy feature selection methods for a marketing machine learning platform, 2019.