

ml_ccc_machine_learning_interpretabilite

April 14, 2021

1 2A.ml - Interprétabilité et corrélations des variables

Plus un modèle de machine learning contient de coefficients, moins sa décision peut être interprétée. Comment contourner cet obstacle et comprendre ce que le modèle a appris ? Notion de [feature importance](#).

```
[1]: from jupyterhelper import add_notebook_menu
      add_notebook_menu()
```

```
[1]: <IPython.core.display.HTML object>
```

```
[2]: # Répare une incompatibilité entre scipy 1.0 et statsmodels 0.8.
      from pypyinstall.fix import fix_scipy10_for_statsmodels08
      fix_scipy10_for_statsmodels08()
```

1.1 Modèles linéaires

Les modèles linéaires sont les modèles les plus simples à interpréter. A performance équivalente, il faut toujours choisir le modèle le plus simple. Le module [scikit-learn](#) ne propose pas les outils standards d'analyse des modèles linéaires (test de nullité, valeur propre). Il faut choisir [statsmodels](#) pour obtenir ces informations.

```
[3]: import numpy
      import statsmodels.api as smapi
      nsample = 100
      x = numpy.linspace(0, 10, 100)
      X = numpy.column_stack((x, x**2 - x))
      beta = numpy.array([1, 0.1, 10])
      e = numpy.random.normal(size=nsample)
      X = smapi.add_constant(X)
      y = X @ beta + e
```

```
[4]: model = smapi.OLS(y, X)
      results = model.fit()
      results.summary()
```

```
[4]: <class 'statsmodels.iolib.summary.Summary'>
      """
```

```

                          OLS Regression Results
=====
Dep. Variable:              y      R-squared:                1.000
Model:                    OLS      Adj. R-squared:           1.000
Method:                 Least Squares   F-statistic:             4.002e+06
Date:                   Sat, 25 Aug 2018   Prob (F-statistic):      3.54e-239
```

```

Time:                17:18:49   Log-Likelihood:        -137.02
No. Observations:    100       AIC:                  280.0
Df Residuals:        97        BIC:                  287.9
Df Model:            2
Covariance Type:     nonrobust

```

```

=====

```

	coef	std err	t	P> t	[0.025	0.975]
const	0.8264	0.284	2.906	0.005	0.262	1.391
x1	0.1508	0.119	1.265	0.209	-0.086	0.387
x2	9.9982	0.013	786.054	0.000	9.973	10.023

```

=====
Omnibus:                0.492   Durbin-Watson:        1.968
Prob(Omnibus):          0.782   Jarque-Bera (JB):    0.630
Skew:                   0.046   Prob(JB):             0.730
Kurtosis:               2.622   Cond. No.            125.
=====

```

```

Warnings:
[1] Standard Errors assume that the covariance matrix of the errors is correctly
specified.
"""

```

1.2 Arbres (tree)

1.2.1 Lectures

- [treeinterpreter](#)
- [Making Tree Ensembles Interpretable](#) : l'article propose de simplifier une random forest en approximant sa sortie par une somme pondérée d'arbre plus simples.
- [Understanding variable importances in forests of randomized trees](#) : cet article explique plus formellement le calcul des termes `feature_importances_` calculés par scikit-learn pour chaque arbre et forêts d'arbres (voir aussi [Random Forests, Leo Breiman and Adele Cutler](#))

1.2.2 Module `treeinterpreter`

```
[5]: from sklearn.datasets import load_iris
iris = load_iris()
X = iris.data
Y = iris.target
```

```
[6]: from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
clf2 = DecisionTreeClassifier(max_depth=3)
clf2.fit(X, Y)
Yp2 = clf2.predict(X)
```

```
[7]: from sklearn.tree import export_graphviz
export_graphviz(clf2, out_file="arbre.dot")
```

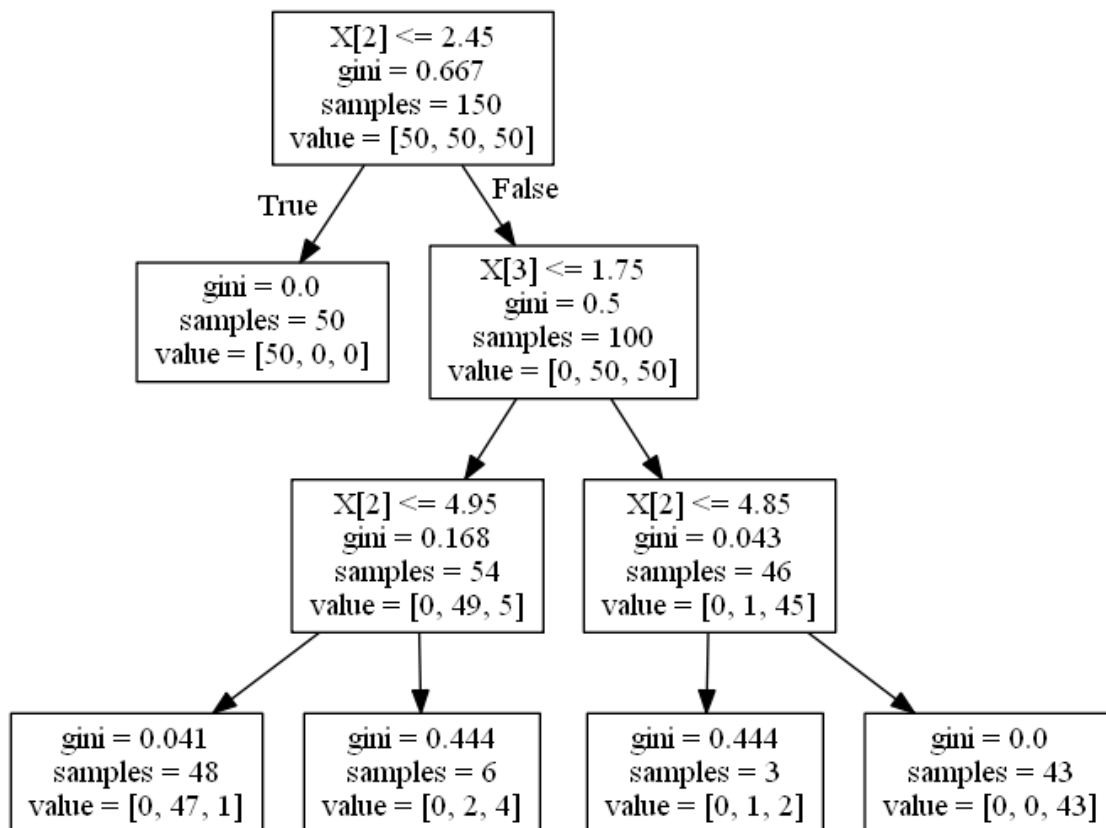
```
[8]: import os
cwd = os.getcwd()
from pyquickhelper.helpgen import find_graphviz_dot
dot = find_graphviz_dot()
```

```
os.system ("\"{1}\" -Tpng {0}\\arbre.dot -o {0}\\arbre.png".format(cwd, dot))
```

[8]: 0

```
[9]: from IPython.display import Image  
Image("arbre.png")
```

[9]:



```
[10]: from treeinterpreter import treeinterpreter  
pred, bias, contrib = treeinterpreter.predict(clf2, X[106:107,:])
```

```
c:\python370_x64\lib\site-packages\sklearn\ensemble\weight_boosting.py:29:  
DeprecationWarning: numpy.core.umath_tests is an internal NumPy module and  
should not be imported. It will be removed in a future NumPy release.  
from numpy.core.umath_tests import inner1d
```

```
[11]: X[106:107,:]
```

```
[11]: array([[4.9, 2.5, 4.5, 1.7]])
```

```
[12]: pred
```

```
[12]: array([[0.          , 0.97916667, 0.02083333]])
```

```
[13]: bias
```

```
[13]: array([[0.33333333, 0.33333333, 0.33333333]])
```

```
[14]: contrib
```

```
[14]: array([[ 0.          ,  0.          ,  0.          ],
          [ 0.          ,  0.          ,  0.          ],
          [-0.33333333,  0.23842593,  0.09490741],
          [ 0.          ,  0.40740741, -0.40740741]])
```

`pred` est identique à ce que retourne la méthode `predict` de scikit-learn. `bias` est la proportion de chaque classe. `contrib` est la somme des contributions de chaque variable à chaque classe. On note $X = (x_1, \dots, x_n)$ une observation.

$$P(X \in \text{classe}(i)) = \sum_i \text{contrib}(x_k, i)$$

Le [code](#) est assez facile à lire et permet de comprendre ce que vaut la fonction `contrib`.

1.2.3 Exercice 1 : décrire la fonction `contrib`

La lecture de [Understanding variable importances in forests of randomized trees](#) devrait vous y aider.

```
[15]: clf2.feature_importances_
```

```
[15]: array([0.          , 0.          , 0.58561555, 0.41438445])
```

1.2.4 Exercice 2 : implémenter l'algorithme

Décrit dans [Making Tree Ensembles Interpretable](#)

```
[16]:
```

1.3 Interprétation et corrélation

1.3.1 Modèles linéaires

Les modèles linéaires n'aiment pas les variables corrélées. Dans l'exemple qui suit, les variables X_2, X_3 sont identiques. La régression ne peut retrouver les coefficients du modèle initial (2 et 8).

```
[17]: import numpy
import statsmodels.api as smapi
nsample = 100
x = numpy.linspace(0, 10, 100)
X = numpy.column_stack((x, (x-5)**2, (x-5)**2)) # ajout de la même variable
beta = numpy.array([1, 0.1, 2, 8])
e = numpy.random.normal(size=nsample)
X = smapi.add_constant(X)
y = X @ beta + e
```

```
[18]: import pandas
pandas.DataFrame(numpy.corrcoef(X.T))
```

```
c:\python370_x64\lib\site-packages\numpy\lib\function_base.py:2400:
RuntimeWarning: invalid value encountered in true_divide
  c /= stddev[:, None]
c:\python370_x64\lib\site-packages\numpy\lib\function_base.py:2401:
RuntimeWarning: invalid value encountered in true_divide
  c /= stddev[None, :]
```

```
[18]:      0          1          2          3
0 NaN          NaN          NaN          NaN
1 NaN  1.000000e+00 -4.166739e-17 -4.166739e-17
2 NaN -4.166739e-17  1.000000e+00  1.000000e+00
3 NaN -4.166739e-17  1.000000e+00  1.000000e+00
```

```
[19]: model = smapi.OLS(y, X)
      results = model.fit()
      results.summary()
```

```
[19]: <class 'statsmodels.iolib.summary.Summary'>
      """
```

```

                                OLS Regression Results
=====
Dep. Variable:                  y      R-squared:                1.000
Model:                            OLS      Adj. R-squared:            1.000
Method:                 Least Squares      F-statistic:                2.786e+05
Date:                 Sat, 25 Aug 2018      Prob (F-statistic):          4.67e-183
Time:                 17:18:51      Log-Likelihood:             -142.22
No. Observations:          100      AIC:                        290.4
Df Residuals:              97      BIC:                        298.3
Df Model:                   2
Covariance Type:            nonrobust
=====
                    coef    std err          t      P>|t|      [0.025    0.975]
-----
const                0.9061    0.232         3.904    0.000     0.446     1.367
x1                   0.1148    0.035         3.285    0.001     0.045     0.184
x2                   5.0009    0.007       746.515    0.000     4.988     5.014
x3                   5.0009    0.007       746.515    0.000     4.988     5.014
=====
Omnibus:                 0.790    Durbin-Watson:            2.259
Prob(Omnibus):           0.674    Jarque-Bera (JB):         0.756
Skew:                    -0.206    Prob(JB):                  0.685
Kurtosis:                2.890    Cond. No.                  4.06e+16
=====
```

```

Warnings:
[1] Standard Errors assume that the covariance matrix of the errors is correctly
specified.
[2] The smallest eigenvalue is 1.67e-29. This might indicate that there are
strong multicollinearity problems or that the design matrix is singular.
"""
```

1.3.2 Arbre / tree

Les arbres de décision n'aiment pas plus les variables corrélées.

```
[20]: from sklearn.datasets import load_iris
iris = load_iris()
X = iris.data[:, :2]
Y = iris.target
```

```
[21]: from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
clf1 = DecisionTreeClassifier(max_depth=3)
clf1.fit(X, Y)
```

```
[21]: DecisionTreeClassifier(class_weight=None, criterion='gini', max_depth=3,
max_features=None, max_leaf_nodes=None,
min_impurity_decrease=0.0, min_impurity_split=None,
min_samples_leaf=1, min_samples_split=2,
min_weight_fraction_leaf=0.0, presort=False, random_state=None,
splitter='best')
```

```
[22]: clf1.feature_importances_
```

```
[22]: array([0.76759205, 0.23240795])
```

On recopie la variables X_1 .

```
[23]: import numpy
X2 = numpy.hstack([X, numpy.ones((X.shape[0], 1))])
X2[:, 2] = X2[:, 0]
```

```
[24]: clf2 = DecisionTreeClassifier(max_depth=3)
clf2.fit(X2, Y)
```

```
[24]: DecisionTreeClassifier(class_weight=None, criterion='gini', max_depth=3,
max_features=None, max_leaf_nodes=None,
min_impurity_decrease=0.0, min_impurity_split=None,
min_samples_leaf=1, min_samples_split=2,
min_weight_fraction_leaf=0.0, presort=False, random_state=None,
splitter='best')
```

```
[25]: clf2.feature_importances_
```

```
[25]: array([0.21510471, 0.23240795, 0.55248735])
```

On voit que l'importance de la variable 1 est diluée sur deux variables.

1.3.3 Exercice 3 : variables corrélées pour un arbre de décision

Un arbre de décision est composé d'un ensemble de fonctions de seuil. Si $X_i > s_i$ alors il faut suivre cette branche, sinon, telle autre. Les arbres de décision ne sont pas sensibles aux problèmes d'échelle de variables. Si deux variables sont corrélées $cor(X_1, X_2) = 1$, l'arbre subit les mêmes problèmes qu'un modèle linéaire. Dans le cas linéaire, il suffit de changer l'échelle ($X_1, \ln X_2$) pour éviter ce problème.

- Pourquoi cette transformation ne change rien pour un arbre de décision ?
- Quelle corrélation il faudrait calculer pour repérer les variables identiques selon le point de vue d'un arbre de décision ?

```
[26]:
```