

Construction de variables à l'aide de classifieurs comme aide à la régression : une évaluation empirique

Colin Troisemaine*, Vincent Lemaire*

*Orange Labs Lannion
colin.troisemenaine@orange.com

Résumé. Cet article propose une méthode de création automatique de variables (pour la régression) qui viennent compléter les informations contenues dans le vecteur initial des variables explicatives. Notre méthode fonctionne comme une étape de prétraitement dans laquelle les valeurs continues de la variable à régresser sont discrétisées en un ensemble d'intervalles ce qui permet de définir des seuils de valeurs. Ensuite, des classifieurs sont entraînés pour prédire si la valeur à régresser est inférieure ou égale à chacun de ces seuils. Les sorties des classifieurs sont ensuite concaténées sous la forme d'un vecteur additionnel qui vient enrichir le vecteur initial de variables explicatives natives du problème de régression. Le système implémenté peut donc être considéré comme un outil de prétraitement générique. Nous avons testé la méthode d'enrichissement proposée avec 5 types de régresseurs et l'avons évalué dans 33 jeux de données de régression. Nos résultats expérimentaux confirment l'intérêt de l'approche.

1 Introduction

Les techniques d'apprentissage peuvent se découper en deux grandes familles selon leur vocation principale : celles servant à décrire les données (méthodes descriptives) et celles permettant de prédire un phénomène (plus ou moins) observable (méthodes prédictives). Les méthodes prédictives permettent de prévoir et d'expliquer à partir d'un ensemble de données étiquetées un ou plusieurs phénomènes (plus ou moins) observables. Dans le cas de la régression il s'agira de prévoir la valeur d'une variable numérique (noté y), par exemple le montant d'une facture, à l'aide d'un ensemble de variables explicatives (un vecteur noté X).

Dans le cas de l'apprentissage automatique, on cherchera à apprendre une fonction f telle que $y = f(X)$ à l'aide d'un algorithme d'apprentissage automatique et d'un ensemble d'apprentissage, un ensemble de N couples entrée-sortie (X_i, y_i) , $i = 1, \dots, N$. Lors de cette étape de modélisation, il existe souvent le besoin de créer de nouvelles variables qui décrivent mieux le problème et permettent au modèle d'atteindre de meilleures performances. C'est ce qu'on appelle le "processus d'ingénierie de création de nouvelles variables explicatives" (Sondhi, 2009). Dans ce cas, on espère que les nouvelles variables (un vecteur qui sera ici noté X') apporteront une information additionnelle. L'automatisation de la génération de ces "nouvelles variables" permet d'extraire des informations plus utiles et significatives des données, dans un cadre qui peut être appliqué à n'importe quel problème. Ce qui permet à l'ingénieur en apprentissage automatique de consacrer plus de temps à des tâches plus utiles.

L'objectif de l'article est de proposer une méthode de création automatique de variables (dans le cas de la régression) qui viennent compléter les informations contenues dans le vecteur X pour prédire les valeurs de la variable dépendante y . La méthode proposée transforme tout d'abord le problème de régression en plusieurs sous-problèmes de classification, puis intègre les résultats sous forme de variables additives (X'). Le vecteur 'augmenté', $X'' = X \cup X'$, est ensuite mis en entrée de régresseurs usuels afin de mesurer l'apport des variables créées. L'intérêt de l'approche est présenté sous la forme d'une étude expérimentale détaillée.

2 Proposition

Travaux liés : Résoudre un problème de régression en s'appuyant sur des modèles de classification est une approche qui a déjà été explorée. Ce processus a été décrit dans de nombreux articles (Ahmad et al., 2012, 2018; Janssen et Fürnkranz, 2010, 2011; Memon et al., 2019; Torgo et Gama, 1997) et se compose généralement de deux étapes principales : (i) la discrétisation de la variable cible afin de permettre l'utilisation de classifieurs sur le jeu de données; (ii) la prédiction de la régression est alors généralement réalisée en calculant la moyenne ou la médiane des instances à l'intérieur du fragment de la sortie discrétisée que le classificateur a prédit. La méthode que nous proposons et présentons ci-après diffère de ces travaux car les classifieurs utilisés par la méthode ont uniquement pour objectif d'ajouter des variables explicatives complémentaires aux variables explicatives initiales (variables natives). Le vecteur augmenté est ensuite positionné en entrée d'un régresseur usuel. Ce régresseur prédit directement la variable cible sans nouvelle opération de transformation ou d'estimation. Comme le montrera la section suivante, la méthode proposée est liée à une estimation conditionnelle de la fonction de densité de y . Il serait alors intéressant de tester d'autres méthodes de création de variables dans ce même cadre mais moins gourmandes en calcul (Rothfuss et al., 2019; Holmes et al., 2007; Tutz, 2021) dans de futurs travaux. Le principe général demeurant le même.

Principe général : L'idée est de tirer profit de manière opportuniste des progrès réalisés ces dernières années par les classifieurs de la littérature. Le principe de la première étape de la méthode proposée est de transformer le problème de régression en un (ou plusieurs) problème(s) de classification en *discrétisant* l'espace de variation de la variable à régresser. Cette étape consiste à définir des seuils (S) sur l'espace de la variable à régresser. Ces seuils seront définis à l'aide des valeurs de la variable à régresser de l'ensemble d'entraînement. Ils permettront de définir des classes d'appartenance ($C = \{C_1, \dots, C_i, \dots, C_S\}$). On pourra citer comme exemple des classes définies sur des seuils d'infériorité de valeur ($C_i := \mathbb{K}_{y \leq y_i}$) ou encore des classes définies sur des appartenances à des intervalles de valeurs ($C_i := \mathbb{K}_{y \in]y_i, y_{i+1}]}$). Une fois les classes encodées et un (ou plusieurs) classifieurs entraînés (à l'aide de l'ensemble d'entraînement) il est alors possible de prédire l'appartenance des individus aux classes préalablement définies. Les prédictions du ou des classifieurs sur chacun des individus seront alors utilisées pour créer un nouvel ensemble de données "étendu", que ce soit pour l'ensemble d'entraînement ou pour l'ensemble de test. Ainsi, en définissant S seuils sur un ensemble X à d composantes, on obtiendra un ensemble X'' ayant $d + S$ composantes. La composition du vecteur $X' = \{X'_1, \dots, X'_i, \dots, X'_S\}$ provenant de la prédiction du ou des classifieurs sera décrite plus loin.

Une fois le vecteur X ayant été "étendu", il est possible de réaliser l'entraînement et la prédiction du modèle de régression sur ces nouvelles données. On pourra alors comparer la

performance du régresseur lorsqu'on l'entraîne sur l'ensemble de données original (muni uniquement de X) à sa performance lorsqu'on utilise l'ensemble étendu ($X'' = X \cup X'$). L'hypothèse étant que le modèle de régression aura une meilleure intuition de la position générale des individus dans l'espace de la variable à régresser et présentera de meilleurs résultats. Le processus suivi par la méthode proposée peut être résumé en trois étapes : (i) la première consiste à transformer le problème de régression en problème de classification. Pour ce faire, la variable cible y est d'abord discrétisée, puis les classes sont définies à l'aide des seuils ainsi répartis. (ii) Dans une deuxième étape, les classifieurs sont entraînés en utilisant les variables descriptives initiales de X et les nouvelles classes dérivées de y . Puis la prédiction des classifieurs utilisant le vecteur X initial est utilisée pour extraire de nouvelles caractéristiques, c'est-à-dire X' . (iii) Enfin, le modèle de régression peut être entraîné à l'aide du vecteur $X'' = X \cup X'$. La méthode proposée repose donc sur un mécanisme de discrétisation et d'encodage de classes. Ces deux processus peuvent être mis en place de différentes façons. Nous proposons un exemple d'implémentation ci-après.

Implémentation : L'un des aspects les plus importants de la méthode proposée est l'association de classes aux instances. Ces classes seront utilisées lors de l'apprentissage des classifieurs. Ce processus repose sur deux étapes : la définition de seuils et l'encodage des classes. Pour la définition du *placement des seuils*, ce qui revient à une discrétisation non-supervisée de la variable à régresser, il existe dans la littérature de nombreuses possibilités telles que "Equal-Width", "EqualFreq", etc. Pour l'*encodage des classes*, il est possible de poser le problème soit comme un problème de classification à S classes (où S désigne le nombre de seuils), soit comme S problèmes de classification binaire, soit comme un problème de classification multi-labels. Les choix de la méthode de discrétisation et du nombre de seuils sont liés et ce choix représente un compromis entre (i) l'efficacité en classification et (ii) l'apport d'information pour le problème initial de régression. Dans le cas d'un unique classifieur qui prédirait l'intervalle d'appartenance des individus, il semble évident que plus S sera grand, plus l'information apportée au régresseur sera précise, mais plus le problème deviendra difficile à apprendre. En revanche, si on pose le problème comme S problèmes de classification binaire, chaque classifieur aura un problème de même difficulté à résoudre, indépendamment de la valeur de S . Des tests préliminaires effectués sur l'ensemble des jeux de données décrits Section 5 ont permis de vérifier ce comportement.

Pour la **méthode de discrétisation** - La méthode "Equal Frequency" a été choisie car contrairement à "Equal Width", elle ne risque pas de créer d'intervalles qui ne contiennent aucun individu. Elle permet également de s'assurer de ne pas poser problème de classification où la classe minoritaire (seuil extrême à gauche) représente moins de $\frac{1}{S+1}$ pourcent des individus.

Pour la nature du **problème de classification** - Lors des tests préliminaires, le fait de poser le problème en S problèmes de classification binaire a donné de meilleures performances, tant en apprentissage qu'en déploiement. Les résultats ont aussi été plus robustes (meilleure généralisation), ce qui est un point important si l'on veut que les variables ajoutées soient bénéfiques au régresseur. Les classifieurs utilisés dans le reste de cet article sont les Forêts Aléatoires (Breiman, 2001) de Scikit-Learn avec 100 arbres (mais tout autre classifieur performant et robuste pourrait être utilisé) avec leurs paramètres par défaut.

Pour le **nombre de seuils** - La première intuition (qui a été confirmée lors de l'expéri-

mentation) est que plus le nombre de seuils défini est grand, plus le gain de performance est important. En effet, plus on définit de seuils, plus la discrétisation est fine et plus la prédiction des classifieurs s'approchera de la valeur réelle de régression. Lors la phase expérimentale de cet article, nous illustrerons la performance de notre méthode en fonction du nombre de seuils défini. Le nombre de seuils défini sur l'espace de la variable à régresser est donc un hyper-paramètre de notre méthode.

Pour la définition des **classes associées aux seuils** - Le choix retenu s'est porté sur des classes liées à des seuils d'infériorité de valeur ($C_i := \mathbb{1}_{y \leq y_i}$).

Pour les **variables extraites** des classifieurs - Chaque classifieur sera entraîné à prédire si les données que l'on lui fournit sont inférieures ou supérieures au seuil auquel une classe lui est associée. La méthode se voulant générique, il a été décidé d'extraire les probabilités conditionnelles prédites par chaque classifieur. En effet, cette information est accessible pour une large majorité des classifieurs de la littérature. Les probabilités conditionnelles¹ de la classe 1 (c'est à dire si $y \leq y_i$) prédites par chaque classifieur composeront donc le vecteur $X' = \{X'_1, \dots, X'_i, \dots, X'_S\} = \{P(C_1 = 1|X), \dots, P(C_i = 1|X), \dots, P(C_S = 1|X)\}$; X' qui sera donc ajouté au vecteur de données initial (X).

3 Protocole expérimental

• **Jeux de données** : Pour réaliser l'analyse de la méthode proposée, nous avons sélectionné une large collection de jeux de données de régression provenant du UCI Repository (Dua et Graff, 2017) et de Kaggle. 33 jeux de données ont été utilisés, parmi lesquels 23 sont constitués de plus de 10 000 individus. Les 10 jeux de données restants allant de 1 030 à 9 568 individus. Cette sélection a été influencée par (Fernández-Delgado et al., 2019). Les jeux de données choisis sont d'après la catégorisation de Fernandez-Delgado et al. "*grands et difficiles*".

• **Prétraitements** : A l'identique de (Fernández-Delgado et al., 2019), deux prétraitements ont été réalisés avant d'entrer dans le processus décrit Section 2 : (i) le recodage des variables catégorielles à l'aide d'un codage disjonctif complet; (ii) la suppression des variables de dates, des variables constantes, des identifiants d'individus, des variables colinéaires et des autres variables potentiellement à 'régresser'. Trois autres prétraitements ont été réalisés sur chaque "fold" d'apprentissage. Ces derniers sont dans l'ordre de réalisation : (i) normalisation des variables numériques (centrage - réduction); (ii) normalisation de la variable à régresser (centrage - réduction) puis transformation à l'aide de Box-Cox (Atkinson et al., 2021); (iii) création des seuils pour la définition des classes tel que décrit précédemment. Pour chacun de ces trois prétraitements, les statistiques qui leurs sont associées ont été calculées sur l'ensemble d'entraînement puis appliquées sur les ensembles d'entraînement et de test. Dans la présentation ci-après des résultats, les résultats en RMSE seront donnés sans effectuer la transformation inverse de la fonction Box-Cox. Enfin les exemples à valeurs manquantes ont été retirés du jeu de données initial.

• **Découpage Train-Test et optimisation des modèles** : Chacun des jeux de données a été découpé en un "10-fold cross validation" permettant d'avoir 10 jeux d'entraînement et de test. Pour les trois modèles nécessitant une optimisation de leurs paramètres (DT, FA et XGB) : 30% de l'ensemble d'entraînement a été réservé pour optimiser les paramètres du modèle dans

1. Note : les classifieurs retenus étant des forêt aléatoires, la probabilité conditionnelle correspondra à la proportion d'arbres ayant voté pour la classe concernée.

un processus de "grid-search", permettant ainsi souvent d'éviter un sur-apprentissage. Puis, muni des "bons" paramètres d'apprentissage, le modèle a été entraîné à l'aide des 70% restant de l'ensemble d'entraînement. Enfin, une fois le modèle appris pour ce fold, ses performances sont mesurées. Ce processus rigoureux a été réalisé pour tous les jeux de données, tous les folds et toutes les valeurs de S , résultant ainsi en l'apprentissage de milliers de modèles, mais permettant un test rigoureux de la méthode proposée.

- **Jeux de données :** 33 jeux de données provenant de UCI ou de Kaggle ont été sélectionnés. Leur nombre d'individus est compris entre 1,030 et 955,167 et leur nombre d'attributs va de 3 à 384.

- **Métrique utilisée pour les résultats :** Dans la suite des résultats, la RMSE a été choisie et est définie telle que : $RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}$, où n est le nombre d'individus, y_i la valeur désirée et \hat{y}_i la sortie d'un régresseur.

- **Régresseurs testés :** Lors des expérimentations, cinq régresseurs utilisant des cadres différents ont été utilisés. Étant largement connus par la communauté de l'apprentissage automatique, nous ne les décrivons pas. Notre choix s'est porté sur la régression linéaire (LR), l'arbre de régression (DT), la forêt aléatoire (RF), XGBoost (XGB) et enfin le Naïve Bayes Pondéré (SNB). On notera cependant que le Naïve Bayes Pondéré qui a été utilisé ici a été produit par le logiciel Khiops (www.khiops.com). Nous avons demandé et obtenu gratuitement une licence provisoire du logiciel, ainsi que sa version pyKhiops utilisable dans Scikit-Learn. Nous avons utilisé la version 1.4.1 de XGBoost et la version 0.24.2 de Scikit-Learn pour les trois méthodes de régression restantes.

4 Résultats

- **Résultats² illustratifs -** La Figure 1 illustre le comportement de la méthode proposée : A gauche pour la régression linéaire et le jeu de données "KEGG Metabolic Reaction", au milieu et à droite pour le jeu de données "SML 2010" respectivement pour le régresseur naïf de Bayes et la forêt aléatoire. Cette figure est représentative des résultats obtenus, avec une décroissance plus ou moins marquée de la RMSE versus la valeur de S et le régresseur considéré. On observe que le nombre de seuils S influe sur le processus d'apprentissage. Cependant il a été constaté que le gain de performance est proportionnel au nombre de seuils définis : une décroissance de la RMSE versus la valeur de S est apparente ; plus marquée en début de courbe et plafonne ensuite pour un gain moins marqué au-delà de 16 seuils.

- **Tables de résultats sur l'ensemble des jeux de données -** Les résultats obtenus sont présentés en détail dans la Table 1 pour un nombre de seuils égal à 32 ($S = 32$). Pour chaque jeu de données, cette table donne les résultats en test (résultats moyen sur les 10 "fold" de test (voir Section 5)) pour chacun des cinq régresseurs pour lesquels l'ajout du vecteur X' a été testé. Dans cette table, une valeur en gras indique une différence significative entre les résultats avec le vecteur X "Natif" et le vecteur X' "Aug" (Augmenté) selon test de Student apparié (p-value à 5%). La dernière ligne du tableau indique le nombre de défaites, égalités et victoires de "Aug" vis-à-vis de "Natif". On s'aperçoit que l'ajout du vecteur X' profite essentiellement à 3 des régresseurs : La régression linéaire, l'arbre de régression et le régresseur naïf de Bayes.

2. Le lecteur pourra trouver la description complète des jeux de données, le code permettant de reproduire l'ensemble des résultats et une version étendue de cet article sur <https://github.com/ColinTr/ClassificationForRegression>.

Construction de variables à l'aide de classifieurs comme aide à la régression

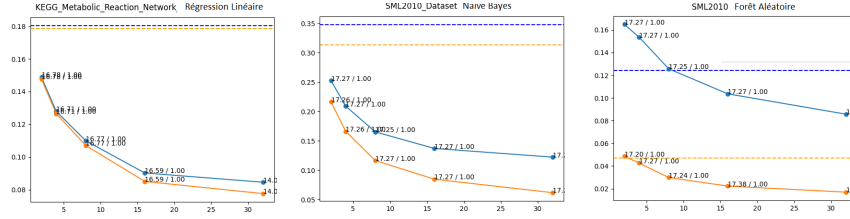


FIG. 1 – S (axe horizontal) versus $RMSE$ (axe vertical). Les lignes en pointillés représentent la performance initiale du régresseur en bleu pour l'ensemble de test et en orange pour l'ensemble d'entraînement. Les courbes en trait plein représentent la performance du régresseur avec la méthode proposée, en reprenant le même code couleur.

Dataset name	Linear Regr.		Decision Tree		Random Forest		XGBoost		SNB	
	Natif	Aug	Natif	Aug	Natif	Aug	Natif	Aug	Natif	Aug
3Droad	0,9867	0,0930	0,1213	0,0831	0,0908	0,0792	0,0935	0,0781	0,5580	0,0827
air-quality-CO	0,3269	0,2672	0,3255	0,2727	0,2667	0,2642	0,2682	0,2633	0,3428	0,2768
airfoil	0,7176	0,2351	0,4373	0,3194	0,2987	0,2865	0,2814	0,2752	0,7709	0,2963
appliances-energy	0,8260	0,4865	0,7431	0,5267	0,5456	0,5164	0,5790	0,5203	0,8354	0,5206
beijing-pm25	0,7833	0,4180	0,6013	0,3948	0,4168	0,3874	0,4149	0,3885	0,8082	0,3931
temp-forecast-bias	0,4749	0,2847	0,4668	0,2848	0,3237	0,2771	0,3085	0,2773	0,4782	0,2907
bike-hour	0,7163	0,2547	0,3294	0,2564	0,2499	0,2415	0,2208	0,2500	0,4858	0,2534
blog-feedback	0,8307	0,6434	0,6741	0,6694	0,6618	0,6481	0,6652	0,6652	0,7013	0,6601
buzz-twitter	0,7248	0,2183	0,2299	0,2265	0,2170	0,2200	0,2162	0,2205	0,2238	0,2191
combined-cycle	0,2702	0,1967	0,2647	0,2014	0,2079	0,1952	0,2041	0,1950	0,2570	0,1995
com-crime	0,6312	0,5485	0,6418	0,5552	0,5525	0,5505	0,5665	0,5503	0,5612	0,5523
com-crime-unnorm	0,6751	0,6031	0,7036	0,6251	0,6163	0,6157	0,6186	0,6124	0,6453	0,6340
compress-stren	0,6331	0,2732	0,4519	0,3173	0,3137	0,2896	0,2790	0,2955	0,5962	0,2959
cond-turbine	0,3002	0,1096	0,1764	0,1094	0,1117	0,1064	0,1062	0,1094	0,4481	0,1096
cuff-less	0,7996	0,5791	0,5165	0,6255	0,5025	0,6105	0,5012	0,6225	0,5450	0,5922
electrical-grid-stab	0,5961	0,3156	0,5545	0,3245	0,3352	0,3068	0,2634	0,3092	0,5951	0,3157
facebook-comment	0,6828	0,4242	0,4655	0,4429	0,4162	0,4384	0,4095	0,4397	0,5014	0,4347
geo-lat	0,8752	0,8066	0,9594	0,8538	0,8321	0,8287	0,8540	0,8353	0,8668	0,8408
greenhouse-net	0,6492	0,5418	0,5397	0,5686	0,5158	0,5638	0,5137	0,5618	0,6016	0,5599
KEGG-reaction	0,1803	0,0845	0,0919	0,0861	0,0837	0,0835	0,0835	0,0840	0,1172	0,0855
KEGG-relation	0,6342	0,1750	0,2454	0,1748	0,1782	0,1700	0,1809	0,1715	0,4314	0,1738
online-news	1,1822	1,0677	0,9516	0,9622	0,9177	0,9521	0,9124	0,9521	0,9228	0,9942
video-transcode	0,3975	0,0561	0,0846	0,0652	0,0604	0,0597	0,0590	0,0568	0,3704	0,0627
pm25-chengdu-us-post	0,8022	0,4283	0,5578	0,4164	0,4111	0,4084	0,4125	0,4079	0,7716	0,4131
park-total-UPDRS	0,9472	0,7816	0,9416	0,8057	0,8020	0,7893	0,8196	0,7860	0,9428	0,8117
physico-protein	0,8453	0,5179	0,7676	0,5338	0,5528	0,5218	0,5744	0,5249	0,8494	0,5330
production-quality	0,4872	0,2807	0,3886	0,2830	0,2836	0,2779	0,2794	0,2781	0,3790	0,2832
CT-slices	1,9533	0,0504	0,1332	0,0586	0,0544	0,0418	0,0693	0,0355	0,1104	0,0376
gpu-kernel-perf	0,6347	0,0696	0,0300	0,0557	0,0246	0,0501	0,0228	0,0500	0,5927	0,0620
SML2010	0,2536	0,1157	0,2179	0,1036	0,1241	0,0857	0,1058	0,0920	0,3473	0,1221
seoul-bike-sharing	0,6990	0,4839	0,5801	0,5217	0,5101	0,5149	0,5171	0,5139	0,5891	0,5169
uber-location-price	0,9998	0,4589	0,6153	0,4789	0,4635	0,4699	0,4705	0,4688	0,8419	0,4879
year-prediction	0,8569	0,8079	0,8783	0,8137	0,8059	0,8062	0,7929	0,8131	0,8822	0,8138
Moyenne	0,7083	0,3842	0,4754	0,3945	0,3856	0,3842	0,3831	0,3850	0,5749	0,3917
Déf / Egal / Vict	0 / 4 / 29		3 / 2 / 28		8 / 16 / 9		10 / 14 / 9		2 / 2 / 29	

TAB. 1 – Résultats pour chaque jeu de données en test (résultats moyen sur les 10 "fold" de test (voir Section 5)) pour $S = 32$.

Pour la forêt aléatoire et XGboost, les gains et/ou pertes sont assez limités. L'avant dernière ligne du tableau présente la $RMSE$ moyenne obtenue sur l'ensemble des jeux de données (purent à titre indicatif) confirmant l'intérêt de la méthode proposée pour trois des cinq régresseurs. Cette moyenne doit être regardée avec précaution. Comme chaque ensemble de données est un problème d'une difficulté unique, l'échelle des erreurs diffère entre chaque ensemble de données. Ainsi, si la nouvelle $RMSE$ moyenne en test est plus élevée, cela ne signifie pas nécessairement que les régresseurs ont de moins bonnes performances en moyenne.

C'est pourquoi nous présentons ci-après dans la section suivante une autre vue sur les résultats afin de poursuivre leur analyse.

• **Diagramme Critique** - Nous présentons Figure 2 des diagrammes critiques comparant entre eux les résultats obtenus par chaque régresseur par le biais du test post-hoc de Nemenyi, effectué après un test des rangs signés de Friedman des RMSE.

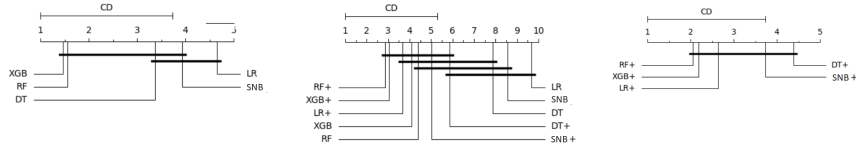


FIG. 2 – À gauche les régresseurs sans la méthode proposée, au centre les régresseurs avec et sans la méthode proposée et à droite les régresseurs uniquement avec la méthode proposée

On peut observer sur le diagramme de gauche de la figure 2 que le régresseur XGBoost présente les meilleures performances en obtenant le meilleur rang moyen de RMSE, suivi de près par la forêt aléatoire (RF). Ces deux régresseurs sont largement plus performants que les trois autres régresseurs, la régression linéaire est le modèle le moins performant. Elle est suivie de près par le régresseur naïf de Bayes et l'arbre de régression. Sur la figure 2 au centre : le premier point que l'on peut observer est que statistiquement, tous les régresseurs munis de X' ont un meilleur rang moyen que leur muni uniquement de X , ceci est un résultat encourageant : aucun régresseur n'a été négativement affecté par la méthode proposée, puisque tous les régresseurs qui ont utilisé cette méthode sont mieux classés que leurs versions de base. Différents groupes sont à nouveau présents et le lecteur pourra comparer le changement de classement des différents régresseurs en comparant la figure de gauche à celle du milieu. Enfin, le diagramme de droite de la figure 2 montre que, lorsque la méthode proposée est utilisée, les régresseurs ne sont plus différenciables (un seul groupe comparé à la figure de gauche) selon le test de Nemenyi, même s'ils ont des rangs moyens différents.

5 Conclusion

Cet article a proposé une méthode de création automatique de variables (dans le cas de la régression) qui viennent compléter les informations contenues dans le vecteur initial d'entrée, les variables explicatives. Les résultats sont encourageants, même s'ils sont surtout bénéfiques à trois des cinq régresseurs pour lesquels la méthode a été testée. Une première amélioration serait d'extraire des classifieurs un vecteur plus informatif, par exemple les identifiants des feuilles des arbres. Une deuxième amélioration pourrait être de concevoir une architecture neuronale regroupant l'ensemble des étapes de la méthode proposée. La méthode proposée ouvre aussi certaines perspectives. Le lecteur attentif aura remarqué que tel que défini dans l'implémentation proposée, le vecteur X' est en fait une estimation de la densité cumulée conditionnelle de y connaissant X . Il serait donc possible via un calcul d'espérance de se passer totalement des régresseurs (si S était suffisamment élevé) pour avoir une assez bonne estimation de cette densité cumulée. Ce dernier point fera probablement l'objet de travaux futurs.

Références

- Ahmad, A., S. M. Halawani, et I. Albidewi (2012). Novel ensemble methods for regression via classification problems. *Expert Syst. Appl.* 39, 6396–6401.
- Ahmad, A., S. S. Khan, et A. Kumar (2018). Learning regression problems by using classifiers. *Journal of Intelligent & Fuzzy Systems* 35(1), 945–955.
- Atkinson, A. C., M. Riani, et A. Corbellini (2021). The Box–Cox Transformation : Review and Extensions. *Statistical Science* 36(2), 239 – 255.
- Breiman, L. (2001). Random forests. *Machine Learning* 45, 5–32.
- Dua, D. et C. Graff (2017). UCI machine learning repository.
- Fernández-Delgado, M., M. Sirsat, E. Cernadas, S. Alawadi, S. Barro, et M. Febrero-Bande (2019). An extensive experimental survey of regression methods. *Neural Networks* 111.
- Holmes, M. P., A. G. Gray, et C. L. Isbell (2007). Fast nonparametric conditional density estimation. In *Uncertainty in Artificial Intelligence*.
- Janssen, F. et J. Fürnkranz (2010). Separate-and-conquer regression. Technical Report TUD-KE-2010-01, TU Darmstadt, Knowledge Engineering Group.
- Janssen, F. et J. Fürnkranz (2011). Heuristic rule-based regression via dynamic reduction to classification. In T. Walsh (Ed.), *Proceedings of IJCAI*, pp. 1330–1335.
- Memon, S. A., W. Zhao, B. Raj, et R. Singh (2019). Neural regression trees. In *2019 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*, pp. 1–8.
- Rothfuss, J., F. Ferreira, S. Walther, et M. Ulrich (2019). Conditional density estimation with neural networks : Best practices and benchmarks.
- Sondhi, P. (2009). Feature construction methods : a survey. *sifaka. cs. uiuc. edu* 69, 70–71.
- Torgo, L. et J. Gama (1997). Regression using classification algorithms. *Intelligent Data Analysis* 1(1), 275–292.
- Tutz, G. (2021). Ordinal trees and random forests : Score-free recursive partitioning and improved ensembles. *arXiv:2102.00415 [stat.ME]*.

Annexe

A-1 : Illustration de la définition des seuils

La figure 3 illustre l'étape qui consiste à définir des seuils (S) sur l'espace de la variable à régresser.

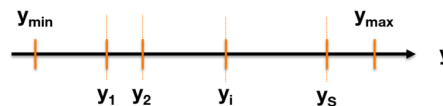


FIG. 3 – Exemple de seuils

A-2 : Illustration de l'extension du vecteur X

La figure 4 illustre l'extension du vecteur X (ayant d composantes) au vecteur X'' (ayant $d + S$ composantes).

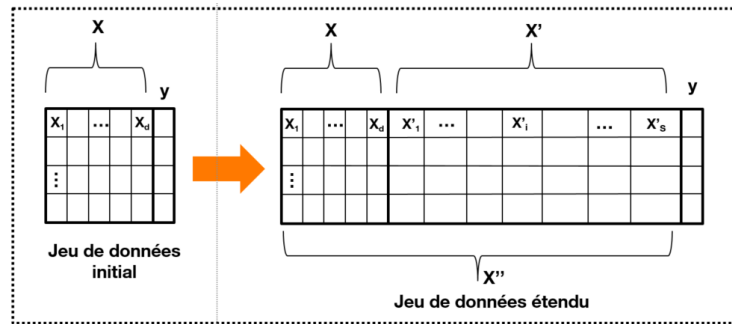


FIG. 4 – Extension de l'ensemble de données.

A-3 : Schématisation du principe général de la méthode

La figure 5 résume le processus suivi par la méthode proposée.

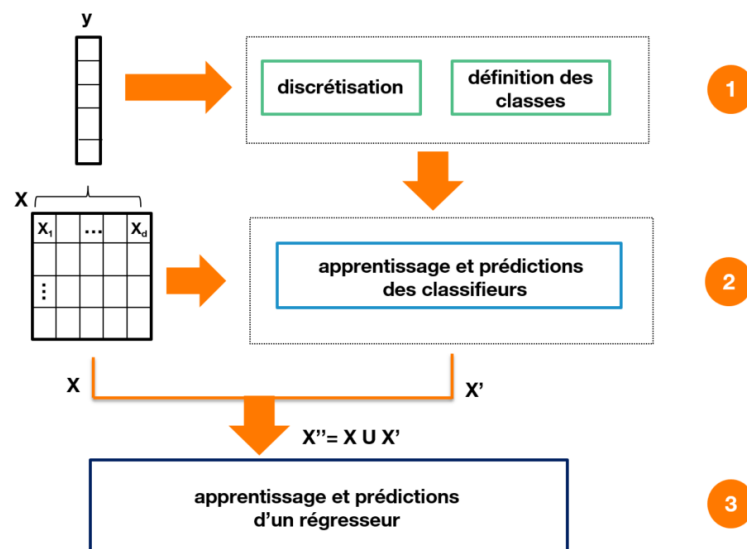


FIG. 5 – Schématisation du principe général de la méthode.

Construction de variables à l'aide de classifieurs comme aide à la régression

A-4 : Détails supplémentaires sur les variables extraites (X')

Pour la phase expérimentale qui a été mise en place, les variables extraites par la méthode proposée sont les probabilités conditionnelles prédites par chaque classifieur. Plus précisément, chaque classifieur a été entraîné à prédire si les données que l'on lui fournit sont inférieures ou supérieures au seuil auquel il est associé. Les probabilités conditionnelles de la classe 1 (c'est à dire si $y \geq y_i$) prédites par chaque classifieur composeront donc le vecteur $X' = \{X'_1, \dots, X'_i, \dots, X'_S\}$ (avec S le nombre de seuils) qui sera ajouté à l'ensemble de données initial.

Pour pouvoir extraire cette probabilité conditionnelle, il faut donc un classifieur capable de générer ce genre de résultats. Dans le cas des forêts aléatoires qui ont été utilisées comme modèle de classification au sein de notre méthode pour les résultats présentés dans cet article, la probabilité conditionnelle correspond à la proportion d'arbres ayant voté pour une certaine classe. Avec 100 arbres dans les forêts qui ont été définies, la précision de la prédiction sera donc à 0.01 près.

A-5 : Détails sur les jeux de données et prétraitements

Jeu de données	#individus	# variables	target	Jeu de données	#individus	# variables	target
3Droad	434,874	3	altitude	geo-lat	1,059	116	latitude
air-quality-CO	1,230	8	PT08.S1(CO)	greenhouse-net	955,167	15	synthetic var
airfoil	1,503	5	scaled sound	KEGG-reaction	65,554	27	edge count
appliances-energy	19,735	26	appliances	KEGG-relation	54,413	22	clustering coef
beijing-pm25	41,758	14	PM2.5	online-news	39,644	59	shares
temp-forecast-bias	7,752	22	Next_Tmax	video-transcode	68,784	26	utime
bike-hour	17,379	17	count	pm25-chengdu-us	27,368	20	PM_US Post
blog-feedback	60,021	18	target	park-total-UPDRS	5,875	16	total_UPDRS
buzz-twitter	583,250	70	discussions	physico-protein	45,730	9	RMSD
combined-cycle	9,568	4	PE	production-quality	29,184	17	quality
com-crime	1,994	122	Violent crimes	CT-slices	53,500	384	reference
com-crime-unnorm	2,215	134	Violent crimes	gpu-kernel-perf	241,600	14	Run1 (ms)
compress-stren	1,030	8	compressive strength	SML2010	4,137	26	indoor temp
cond-turbine	11,934	15	gt turbine	seoul-bike-sharing	8,760	9	Rented Bike Count
cuff-less	61,000	2	APB	uber-location-price	205,670	5	fare amount
electrical-grid-stab	10,000	12	stab	year-prediction	515,345	90	Year
facebook-comment	40,949	53	target				

TAB. 2 – Description des 33 jeux de données. La première colonne désigne le nom du jeu (ou du sous-jeu) de données provenant de l'UCI ou de Kaggle. La deuxième et la troisième colonne donnent respectivement le nombre d'individus et le nombre de variables (explicatives) initial du jeu de données (après les étapes de prétraitements). Enfin la quatrième colonne indique le nom de la variable cible à régresser.

Pour réaliser l'analyse de la méthode proposée, nous avons sélectionné une large collection de jeux de données de régression provenant du UCI Repository (Dua et Graff, 2017) ou de Kaggle. Au total, 33 jeux de données ont été utilisés, parmi lesquels 23 sont constitués de plus de 10 000 individus. Les 10 jeux de données restants allant de 1 030 à 9 568 individus (voir Table 2). Certains de ces jeux de données comprenaient plusieurs sous-ensembles de données avec différentes variables cibles à régresser, et donc différents problèmes de régression. Il a été

choisi de ne pas inclure plusieurs problèmes de régression provenant des mêmes ensembles de données, afin de pas donner plus de poids à certains ensembles de données et créer un biais dans la comparaison des méthodes qui pourrait favoriser une méthode par rapport à une autre. Le lecteur pourra se référer à la colonne "nom de l'ensemble de données" de la Table 2 qui désigne le problème de régression utilisé pour chaque jeu de données.

A-6 : Détails supplémentaires sur les régresseurs utilisés

Lors des expérimentations, cinq régresseurs utilisant des cadres différents ont été utilisés. Ils sont cités dans l'article. Il sont davantage décrits ci-dessous, tout en étant largement connus par la communauté de l'apprentissage automatique.

- Régression Linéaire (LR³) : La régression désigne le processus d'estimation d'une variable numérique continue à l'aide d'autres variables qui lui sont corrélées. Cela signifie que les modèles de régression prennent la forme de $y = f(X)$ où y peut prendre un ensemble infini de valeurs. Dans cet article, nous avons choisis une régression linéaire multivariée dont le modèle, f , est déterminé par la méthode des moindres carrés. Nous avons utilisé la version 0.24.2 de Scikit-Learn. Ce modèle ne nécessite pas d'optimisation de ses paramètres.

- Arbre de Régression (DT) : Les arbres de décision permettent de prédire une quantité réelle qui, dans le cas de régression, est une valeur numérique. Usuellement, les algorithmes pour construire les arbres de décision sont construits en divisant l'arbre du sommet vers les feuilles en choisissant à chaque étape une variable d'entrée qui réalise le meilleur partage de l'ensemble d'objets. Dans le cas des arbres de régression, on cherche à maximiser la variance inter-classes (avoir des sous-ensembles dont les valeurs de la variable-cible sont le plus dispersées possibles). Dans cet article, nous avons utilisé la version 0.24.2 de Scikit-Learn. Ce modèle nécessite une optimisation de ses paramètres.

- Forêt aléatoire (RF) : Les forêts d'arbres décisionnels (ou forêts aléatoires de l'anglais Random Forest (RF) régresseur) ont été proposées par Ho en 1995 [Ho, T. K. (1995). Random decision forests. In Proceedings of 3rd International Conference on Document Analysis and Recognition, Volume 1, pp. 278–282 vol.1.] puis étendu par Leo Breiman et Adele Cutler [Breiman, L. (2001). Random forests. Machine Learning 45, 5–32.] Cet algorithme combine les concepts de sous-espaces aléatoires et de bagging. L'algorithme des forêts d'arbres décisionnels effectue un apprentissage sur de multiples arbres de décision entraînés sur des sous-ensembles de données légèrement différents. Dans cet article, nous avons utilisé la version 0.24.2 de Scikit-Learn. Ce modèle nécessite une optimisation de ses paramètres.

- XGBoost (XGB) : XGBoost [Chen, T. et C. Guestrin (2016). Xgboost : A scalable tree boosting system. In the 22nd ACM SIGKDD International Conference, pp. 785–794.] est une méthode de boosting. Elle combine séquentiellement des apprenants faibles qui présenteraient individuellement de mauvaises performances pour améliorer la prédiction de l'algorithme complet. Un apprenant faible est un régresseur qui a une faible performance de régression. Dans cet algorithme de boosting, des poids élevés seront associés aux apprenants faibles ayant une bonne précision, et à l'inverse, des poids plus faibles aux apprenants faibles ayant une mauvaise précision. Dans la phase d'entraînement, des poids élevés sont associés aux données qui ont été mal "appries" afin que l'apprenant faible suivant dans la séquence se

3. Dans la suite les acronymes anglais seront utilisés.

Construction de variables à l'aide de classifieurs comme aide à la régression

concentre davantage sur ces données. Dans cet article, nous avons utilisé la version 1.4.1 de XGBoost. Ce modèle nécessite une optimisation de ses paramètres.

- Naïve Bayes Pondéré (SNB) : Dans le contexte de la régression, un régresseur naïf de Bayes (NB) dont les variables sont pondérées par des poids (NBP) peut être obtenu à l'aide de deux étapes. Dans un premier temps, pour chaque variable explicative, on crée une grille 2D pour estimer $P(X, y)$ (voir par exemple [Boullé, M. (2006). MODL : a Bayes optimal discretization method for continuous attributes. *Machine Learning* 65(1), 131–165.]) Ensuite, dans une deuxième étape, toutes les variables sont regroupées dans un algorithme Forward Backward pour estimer leur informativité dans le contexte d'un régresseur Naïf de Bayes. A la fin de la deuxième étape, le modèle final (à déployer) est un Naïve Bayes (qui utilise la discrétisation 2D trouvée dans la première étape) où les variables sont pondérées (les poids sont trouvés dans la deuxième étape). Dans cet article nous avons utilisé le Naïve Bayes Pondéré produit par le logiciel Khiops (www.khiops.com). Nous avons demandé et obtenu gratuitement une licence provisoire du logiciel ainsi que sa version pyKhiops utilisable dans Scikit-Learn. Ce modèle ne nécessite pas d'optimisation de ses paramètres.

Summary

This paper proposes a method for the automatic creation of variables (in the case of regression) that complement the information contained in the initial input vector. The method works as a pre-processing step in which the continuous values of the variable to be regressed are discretized into a set of intervals which are then used to define value thresholds. Then classifiers are trained to predict whether the value to be regressed is less than or equal to each of these thresholds. The different outputs of the classifiers are then concatenated in the form of an additional vector of variables that enriches the initial vector of the regression problem. The implemented system can thus be considered as a generic pre-processing tool. We tested the proposed enrichment method with 5 types of regressors and evaluated it in 33 regression datasets. Our experimental results confirm the interest of the approach.