

Simulation et Monte Carlo

Sélection de variables

Pierre Le Pelletier de Woillemont – Jingmei Jiang – Julien Sauvan

Méthodologie

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline \text{xt_1} & \dots & \text{xt_p1} \\ \hline \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \hline \end{array} \times \begin{array}{|c|} \hline \beta \\ \hline \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|} \hline \varepsilon \\ \hline \cdot \\ \sim \text{Gauss} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline Y \\ \hline \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \hline \end{array}$$

} n

xt_1	...	xt_p1	xf_1	...	xf_p2
·	·	·	·	·	·
·	·	·	·	·	·
·	·	·	·	·	·
·	·	·	·	·	·
·	·	·	·	·	·

} n

p

On cherche à minimiser la fonction:
 $S \rightarrow \text{BIC}(\text{modele_S})$

Où S est un vecteur binaire de dimension p et modele_S est la régression linéaire de Y sur les X correspondants à $S=1$

Recuit simulé basé sur un noyau de type Metropolis

- Inspiré de la physique thermodynamique: notion d'énergie et de température
- Principe général: en modifiant un état donné du système, on obtient un autre état. S'il améliore le critère que l'on cherche à optimiser, l'énergie diminue. L'objectif est de minimiser l'énergie du système.

Recuit simulé basé sur un noyau de type Metropolis

- Etat initial: énergie initiale $E=E_0$
température initiale $T=T_0$
- Itérations:
 - Modification de l'état du système
 - Entraîne variation ΔE de l'énergie
 - Si $\Delta E < 0$, on l'applique à l'état courant
 - Sinon, on l'accepte avec une probabilité $e^{(-\Delta E/T)}$ (*règle de Metropolis*)
 - On itère en diminuant la température de façon logarithmique
 - Lorsque le système atteint un équilibre après un nombre suffisant d'itérations, l'algorithme s'arrête.

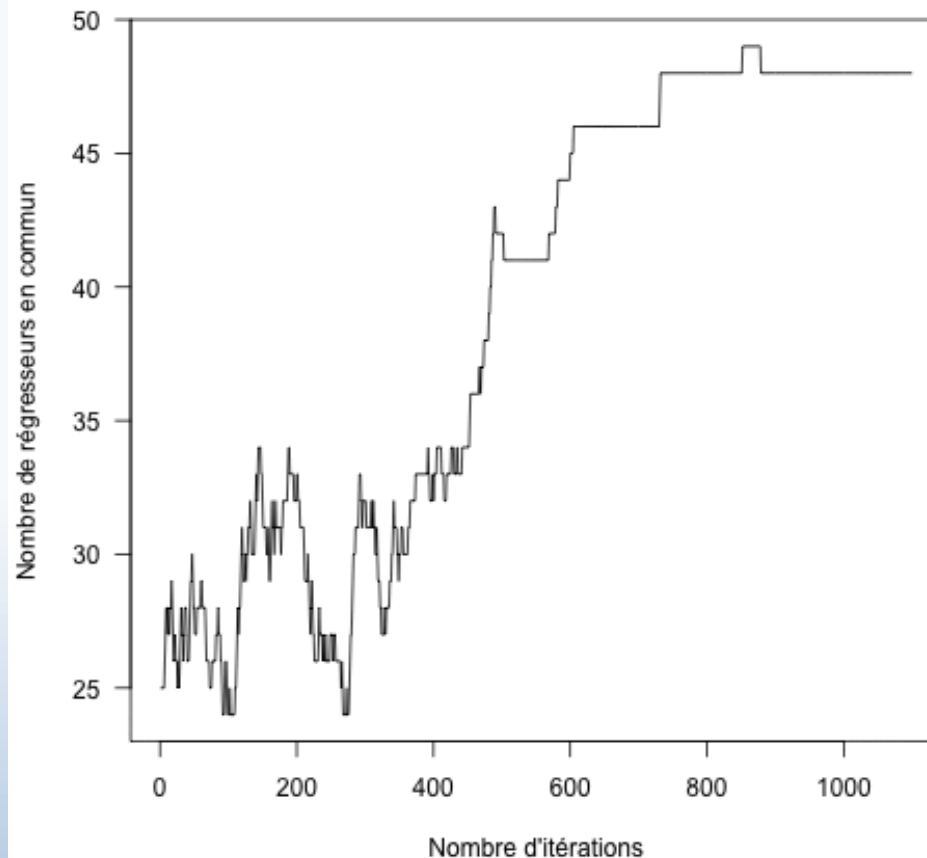
Recuit simulé basé sur un noyau de type Metropolis

- Noyau de type Metropolis: la modification se fait sur les « voisins »
- Pseudo-code:

```
s := s0
e := E(s)
k := 0
tant que k < kmax et e > emax
    sn := voisin(s)
    en := E(sn)
    si en < e ou aléatoire() < P(en - e, temp(k/kmax)) alors
        s := sn; e := en
    k := k + 1
retourne s
```

Recuit simulé basé sur un noyau de type Metropolis

Convergence de l'algorithme



Recuit simulé basé sur un noyau de Gibbs

$$s_i^0 = \begin{cases} 1, & \text{si on choisit le } i\text{-ème variable, } i = 1, 2, \dots, p \\ 0, & \text{sinon} \end{cases}$$

Distribution de probabilité (Gibbs):

$$s_1^1 \sim B(p(s_1^{(1)}, T_p))$$

Échantillonneur de Gibbs:

Décroissance de température:

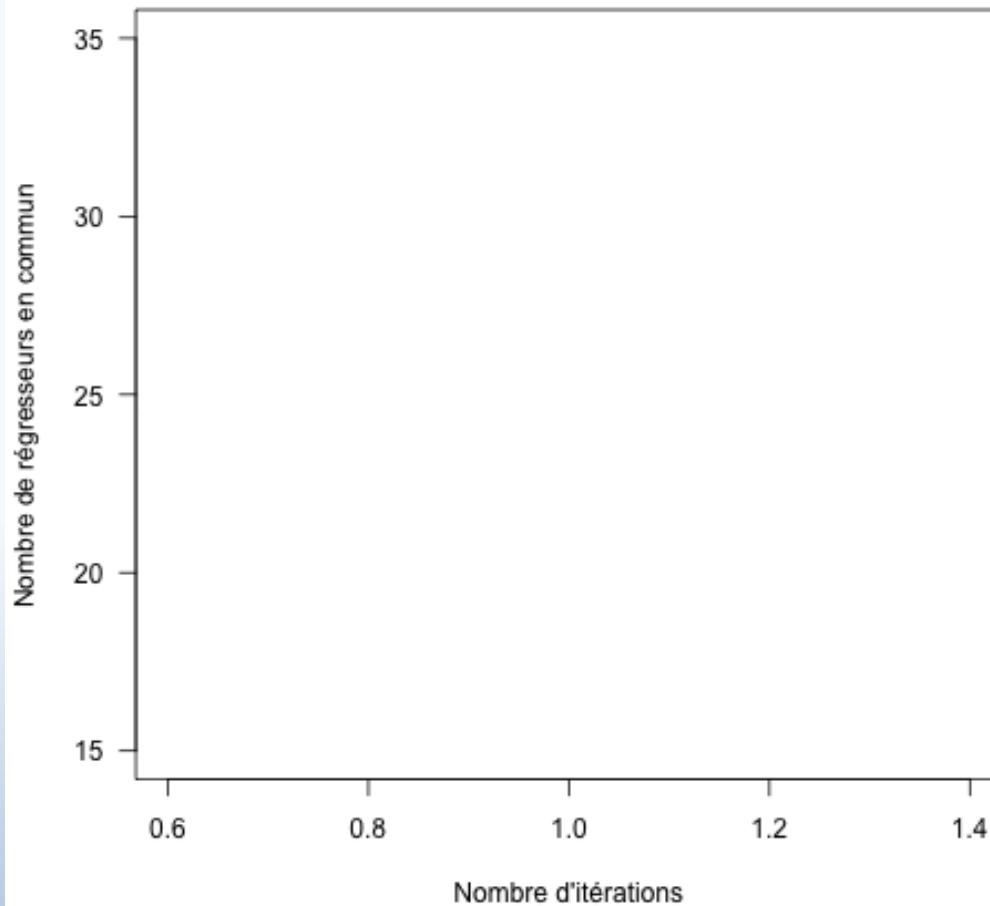
$$T_{p+1} = T_p / \log(1 + t)$$

$$p(s_1^{(1)}, T_p) = \frac{\exp(-\frac{BIC(s_1^{(0)} = 1)}{T_p})}{\exp(-\frac{BIC(s_1^{(0)} = 1)}{T_p}) + \exp(-\frac{BIC(s_1^{(0)} = 0)}{T_p})}$$

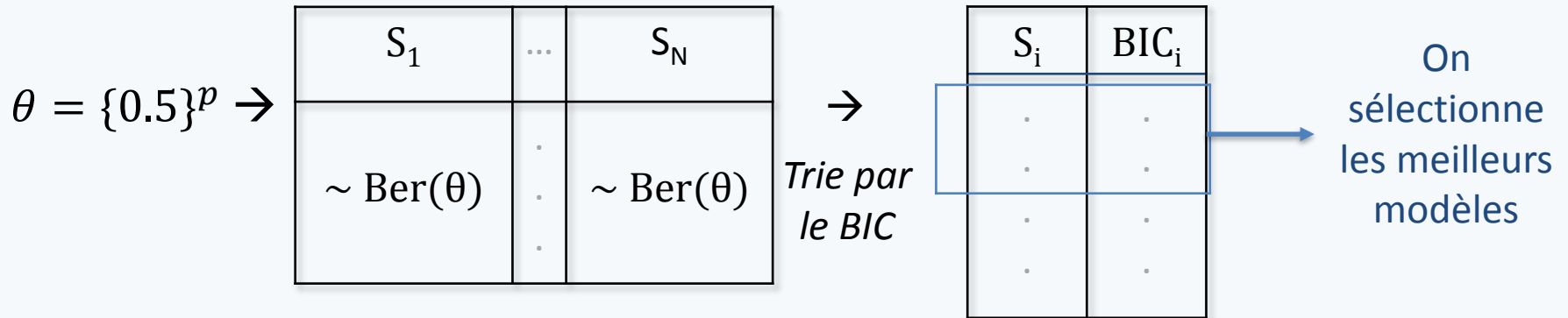
$$\begin{cases} s_1^{(t+1)} \sim B(p(s_1 | s_2^{(t)}, s_3^{(t)}, \dots, s_p^{(t)})) \\ s_2^{(t+1)} \sim B(p(s_2 | s_1^{(t+1)}, s_3^{(t)}, \dots, s_p^{(t)})) \\ \vdots \\ s_p^{(t+1)} \sim B(p(s_p | s_1^{(t+1)}, s_2^{(t+1)}, \dots, s_{p-1}^{(t+1)})) \end{cases}$$

Recuit simulé basé sur un noyau de Gibbs

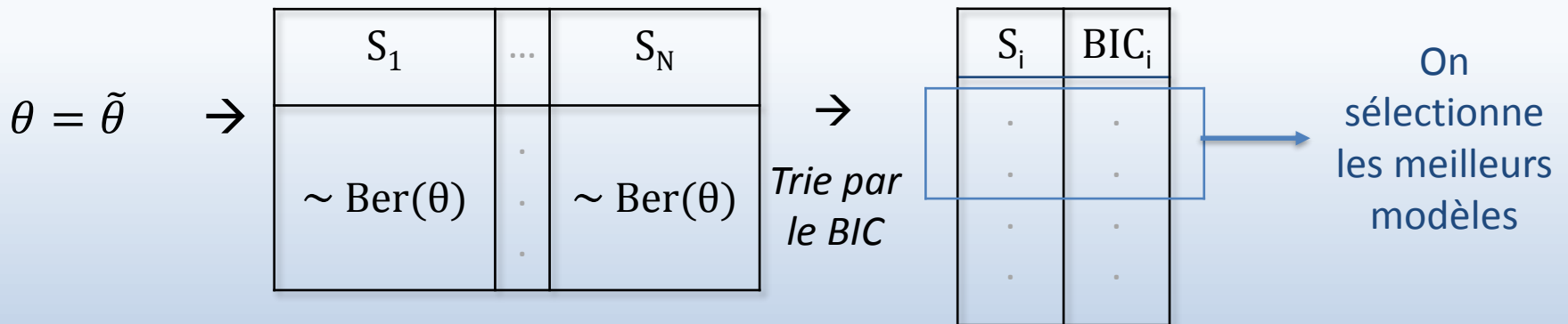
Convergence de l'algorithme



Algorithme Cross-Entropy

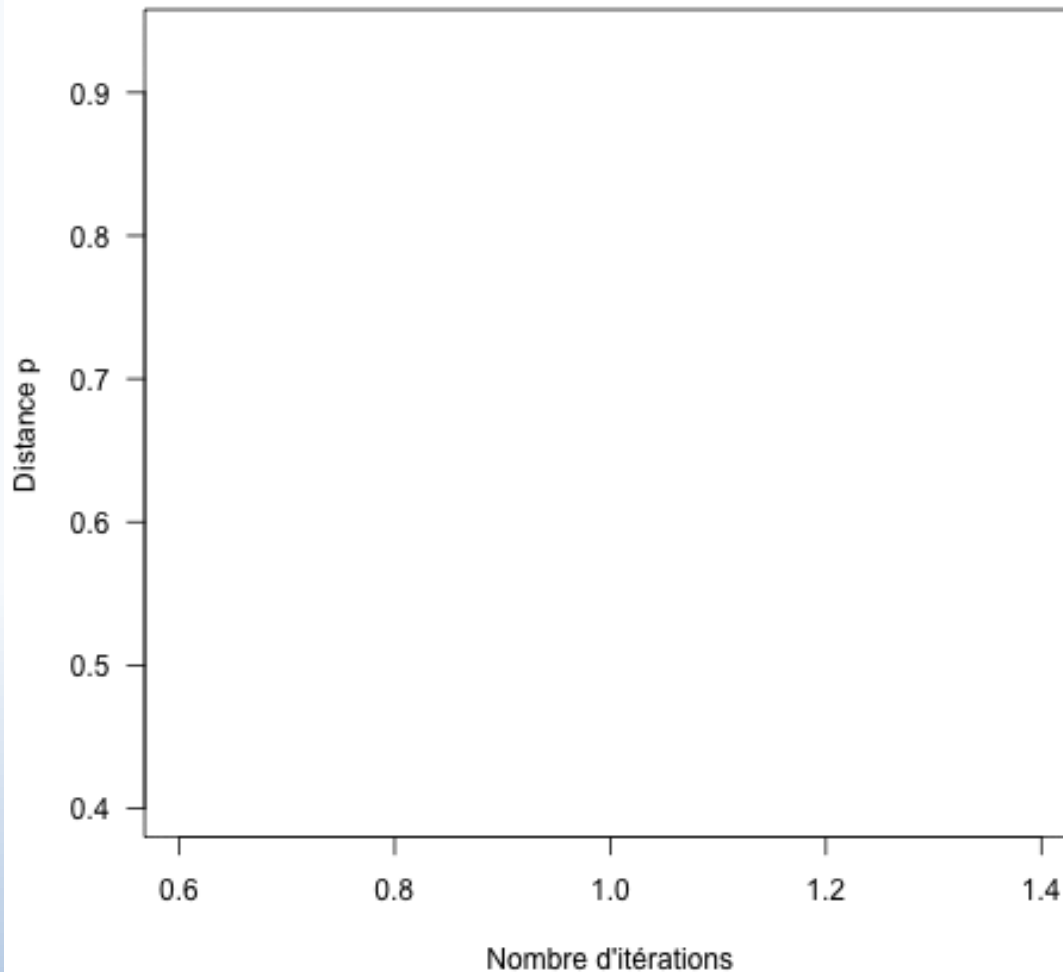


On redéfinit θ comme l'estimateur $\tilde{\theta}$ d'une Bernoulli de dimension p ; uniquement à partir de l'échantillon « *préférentiel* »



Algorithme Cross-Entropy

Convergence de l'algorithme

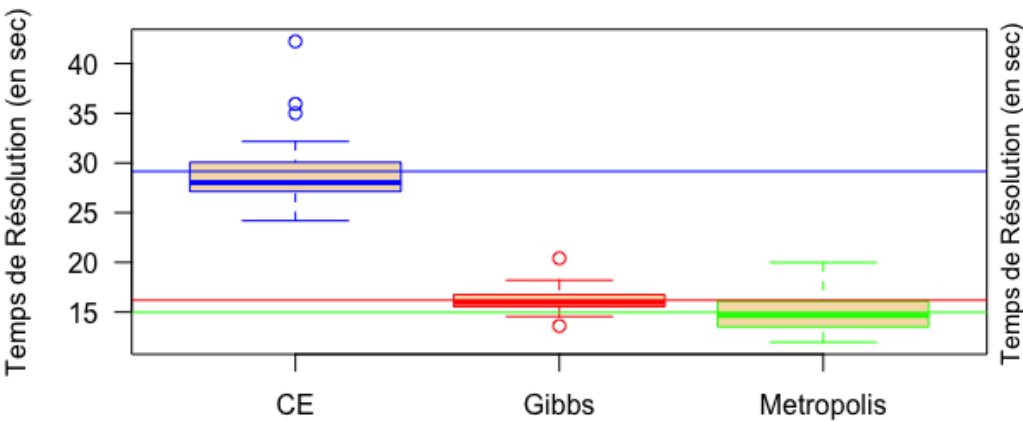


Comparaison

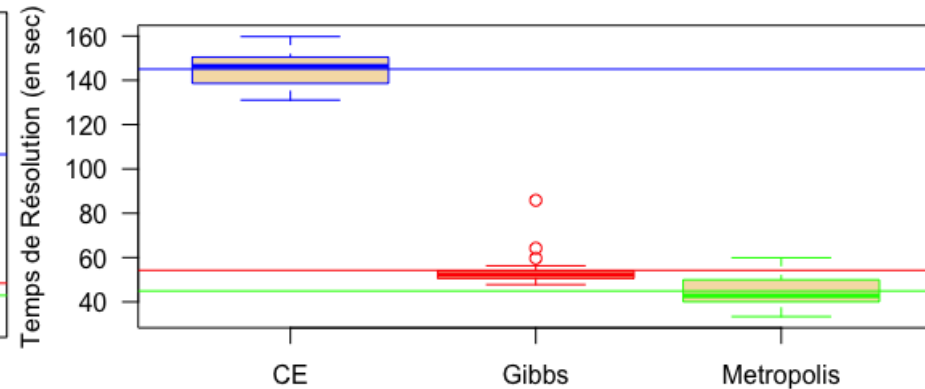
- 2 critères de comparaison: vitesse des algorithmes et qualité de la sélection de variables
- Mesure de la qualité de la sélection de variables: comparaison entre le « vrai » vecteur binaire et les vecteurs de résultats donnés par chaque algorithme.

Vitesse des algorithmes

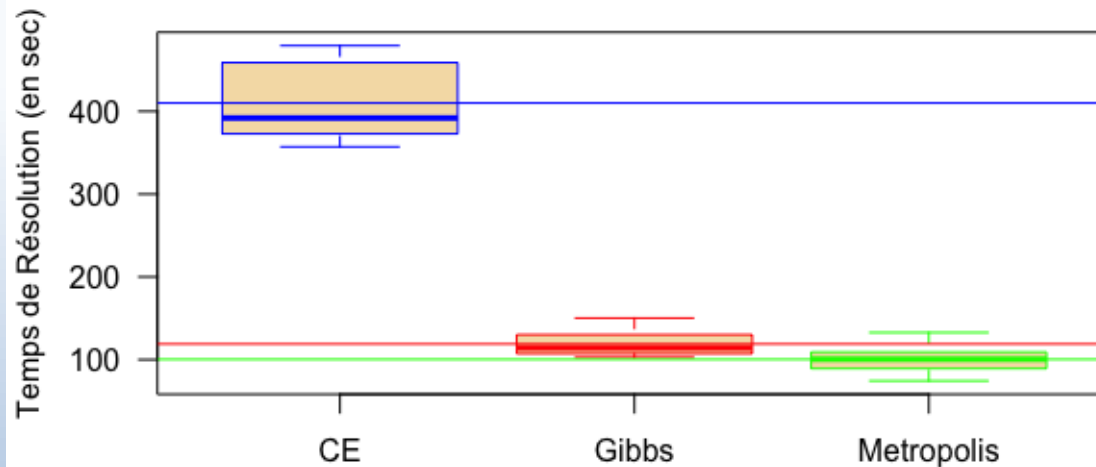
p=50 | p1=5



p=100 | p1=10



p=150 | p1=15



Précision des algorithmes

Performance des algorithmes pour $p=50$

p1	Metropolis	Gibbs	Cross Entropy
5 ($p1 \ll p2$)	49,37 (0,89)	49,7 (0,60)	49,83 (0,38)
15 ($p1 < p2$)	49,53 (0,73)	49,47 (0,78)	49,53 (0,73)
25 ($p1 = p2$)	49,83 (0,53)	49,83 (0,53)	49,77 (0,57)
40 ($p1 > p2$)	49,87 (0,43)	49,90 (0,40)	49,83 (0,46)

Performance des algorithmes

Comparaison des performances pour $p=50$

