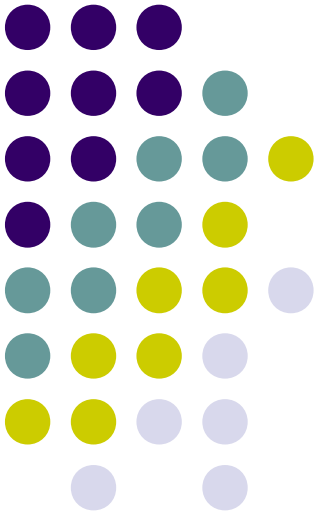
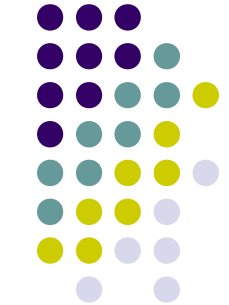
Selección de variables



Basado en parte en curso de I. Guyon

Selección de variables



- Por qué y para qué?
- Métodos
- Filtros
- Wrappers
- RFE
- Estabilidad. Selección en listas múltiples

Selección de variables: Por qué?

- Muchos problemas actuales tienen cientos o miles de variables medidas (sobre pocos ejemplos)
- Modelar esos problemas “directamente” suele ser sub-óptimo.
  - Tanto en calidad como en interpretabilidad.
- En algunos casos la “extracción de variables” (pca, ica, etc.) no es una opción válida.

Selección de variables: Para qué?

- Para mejorar la performance de los métodos de aprendizaje:
  - Algunos métodos trabajan mucho mejor con menos variables.
    - Aunque los métodos modernos de ML suelen ser muy resistentes al problema de la dimensionalidad.
  - En ciertos casos muchas variables no son informativas del problema (ruido o redundancias).
    - Al eliminarlas reducimos el riesgo de sobreajuste.

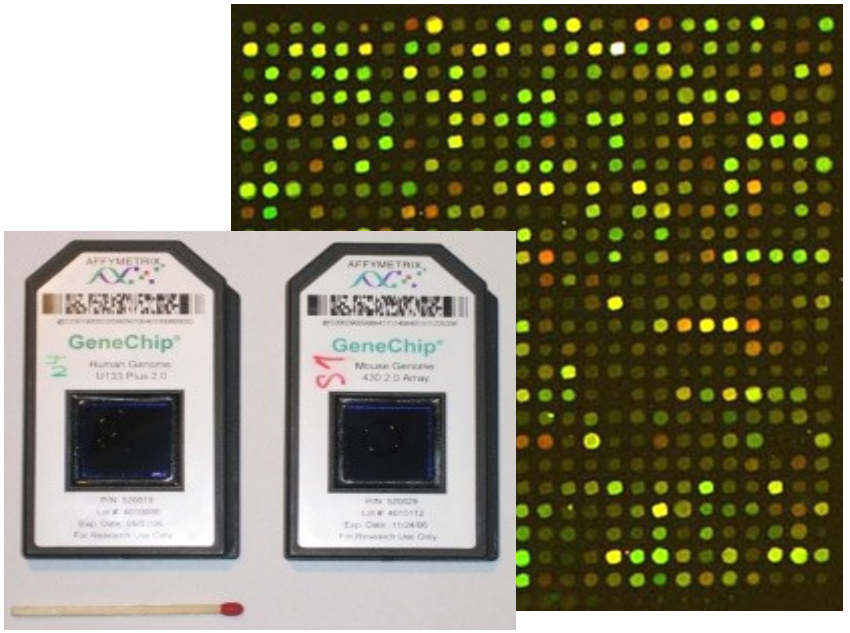
Selección de variables: Para qué?

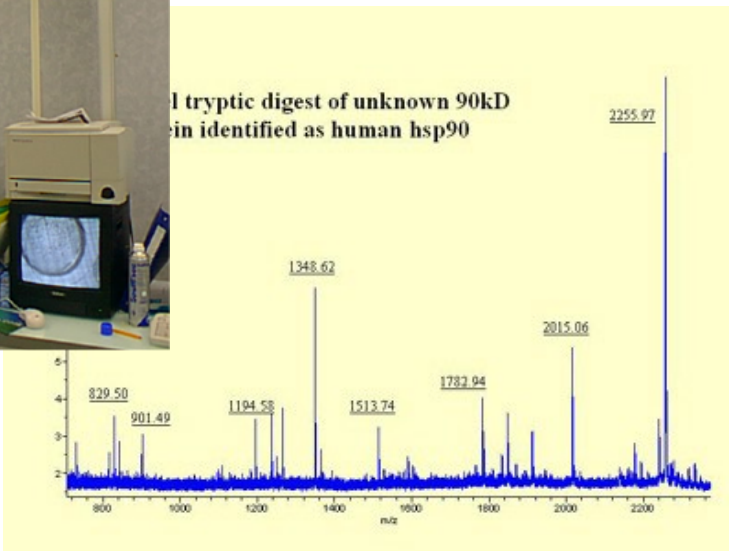
- Para descubrir:
  - Cuáles son las variables más importantes en un problema.
  - Cuáles variables están correlacionadas, co-reguladas, o son dependientes y cuáles no.

- La selección de variables no es más una técnica de pre-procesado, actualmente es una herramienta para descubrir información de un problema.

Ejemplos actuales

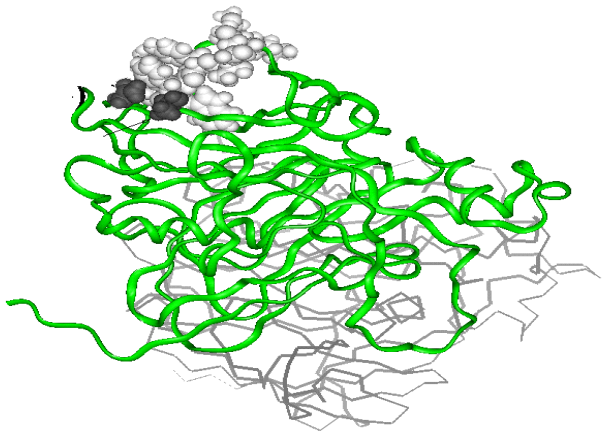
- Técnicas biológicas de “High throughput”
  - DNA Microchips (3000~12000 genes)
  - Mass Spectrometry (200~10000 picos)
  - Nunca más de ~100 muestras.

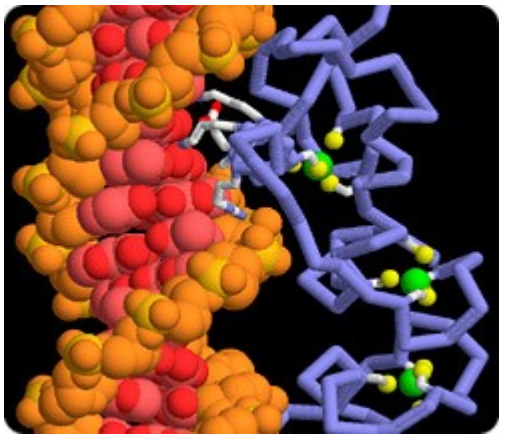




Ejemplos actuales

- QSAR
  - Relación cuantitativa entre estructura molecular y actividad del compuesto. Clave en la industria farmaceútica.
  - (100~2000) descriptores moleculares.





Métodos

- **Univariados** consideran una variable a la vez.
- **Multivariados:** consideran subconjuntos de variables al mismo tiempo.
- **Filtros:** Ordenan las variables con criterios de importancia independientes del predictor.
- **Wrappers:** Usan el predictor final para evaluar la utilidad de las variables.

Métodos

- **Problema Base:**

  Seleccionar un subconjunto óptimo de r variables de las p variables originales, dado un criterio.

- Por qué no evaluar todas las posibilidades?

  Explosión combinatoria: $$\sum_{r=1}^{p} C_r^p = \sum_{r=1}^{p} \frac{p!}{r!(p-r)!}$$

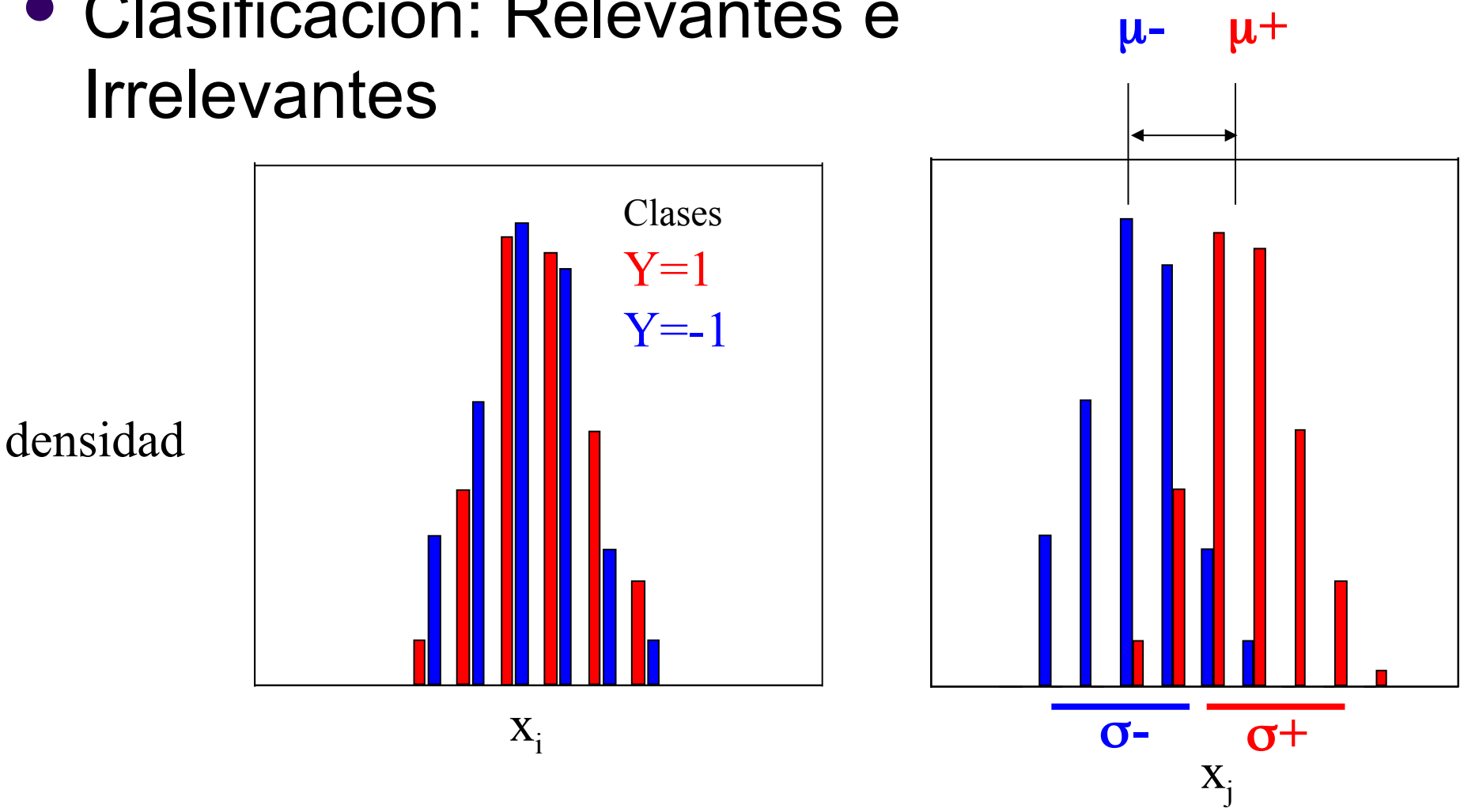
Se usan soluciones sub-óptimas sobre eurísticas.

Métodos de Filtro

- Elige las mejores variables usando criterios razonables de “importancia”.
- El criterio es generalmente independiente del problema real.
- Usualmente se usan criterios univariados.
- Se ordenan las variables en base al criterio y se retienen las más importantes (criterio de corte!)

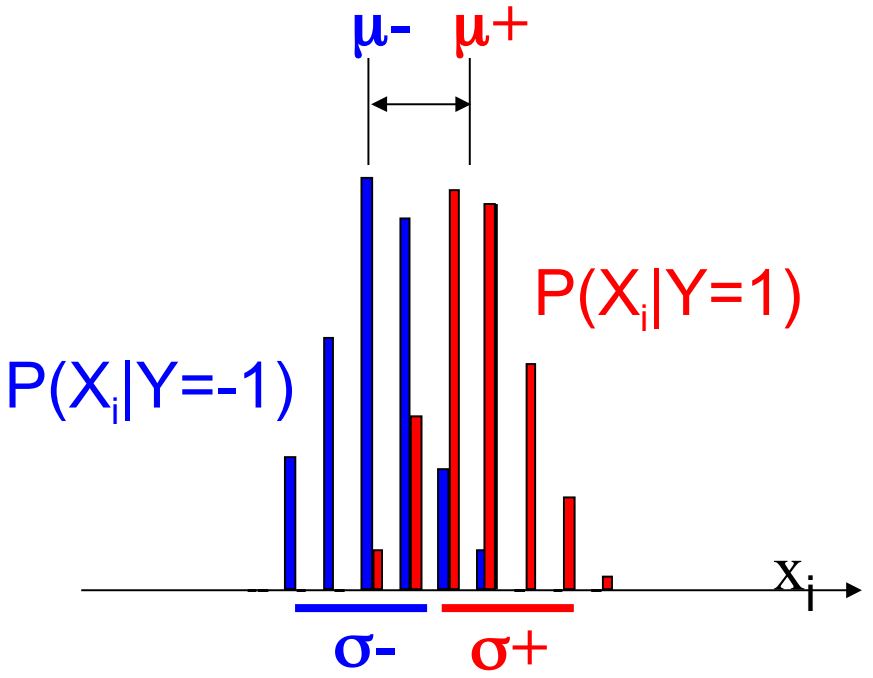
Métodos de Filtro: ejemplos

- Clasificación: Relevantes e Irrelevantes

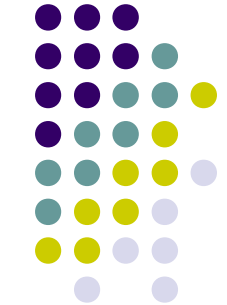


Métodos de Filtro: ejemplos de criterios

- Clasificación:
  - ANOVA: significancia de un t-test entre las clases dada la variable.
  - Ganancia de información sobre la clase dada la variable
  - Muchos otros (Relief!)



Métodos de Filtro: ejemplos

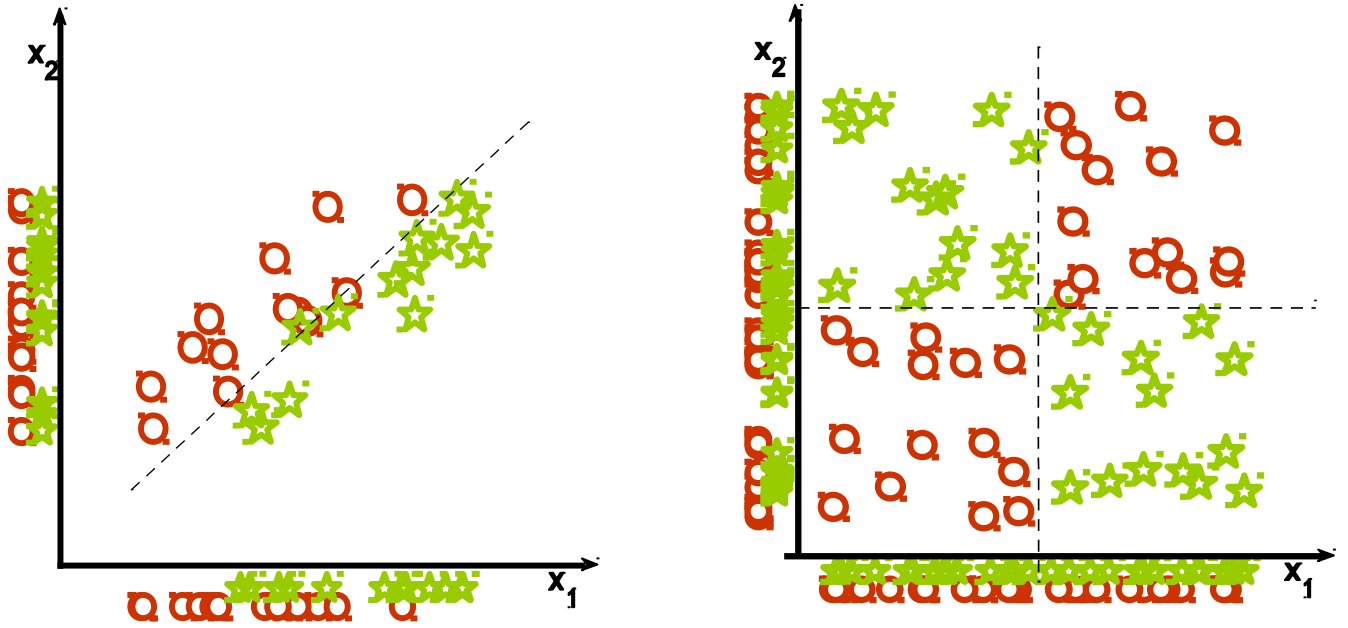


R:

```
data(iris)
y<-iris[,5]
#anova – F statistic
for (i in 1:4){x<-iris[,i];print(oneway.test(x~y)
   $statistic)}
#no paramétrico - Kruskal-Wallis
for (i in 1:4){x<-iris[,i];print(kruskal.test(x,y)
   $statistic)}
```

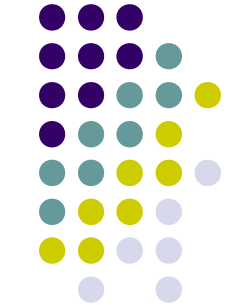
Multivariados

- Los métodos univariados no pueden resolver algunos problemas



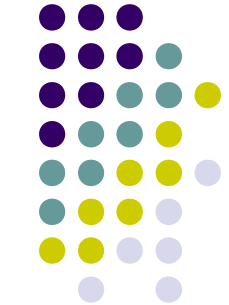
Guyon-Elisseeff, JMLR 2004; Springer 2006

Wrappers. Claves



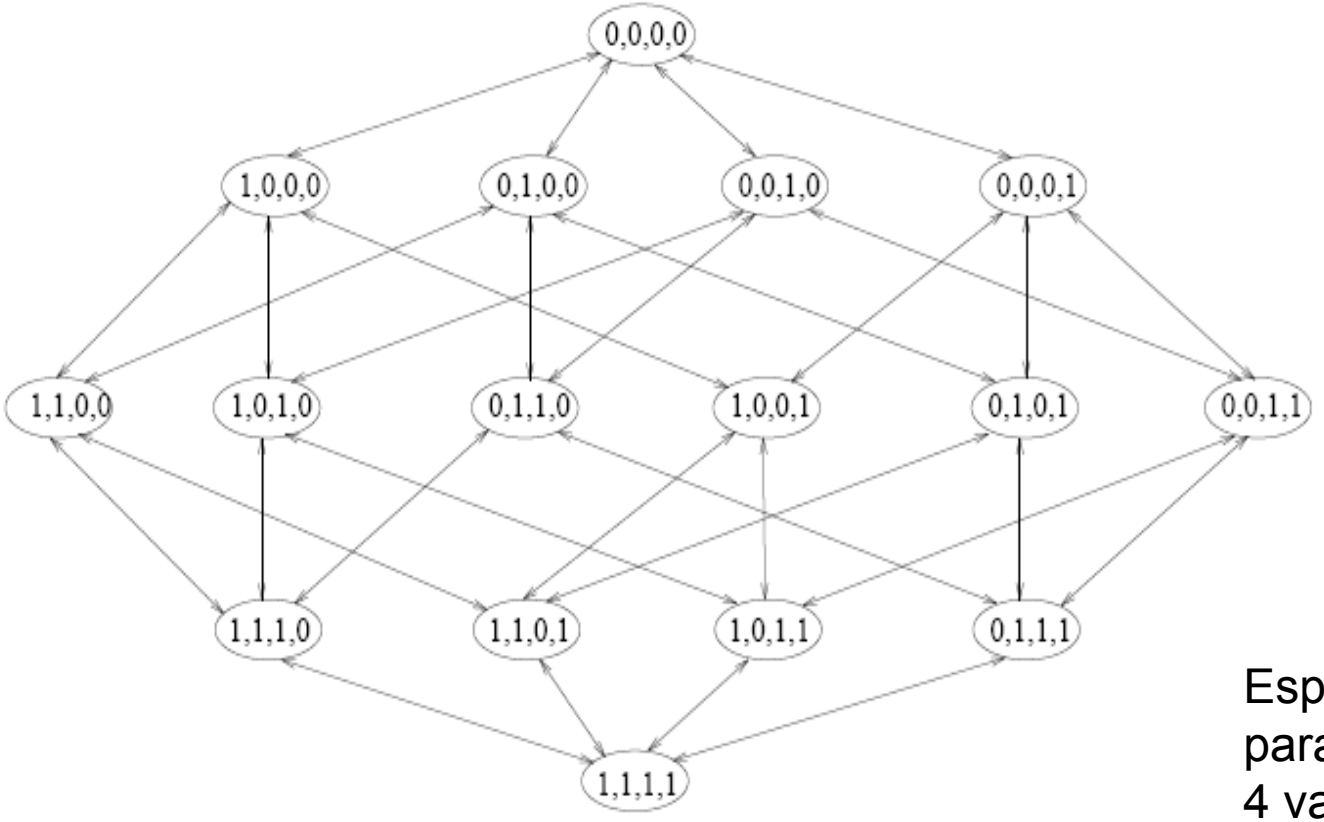
- Seleccionar las mejores variables para modelar (usando el criterio final)
- Para cada subconjunto de variables resolver el problema de modelado. Conservar la mejor solución.
- Como ya discutimos, la búsqueda completa es exponencialmente larga.

Wrappers. Alternativas



- Búsquedas Greedy:
  - forward selection
  - backward elimination
  - combinaciones de ambas
- Búsquedas pseudo-random:
  - Simulated annealing
  - genetic algorithm

Wrappers. Ejemplo

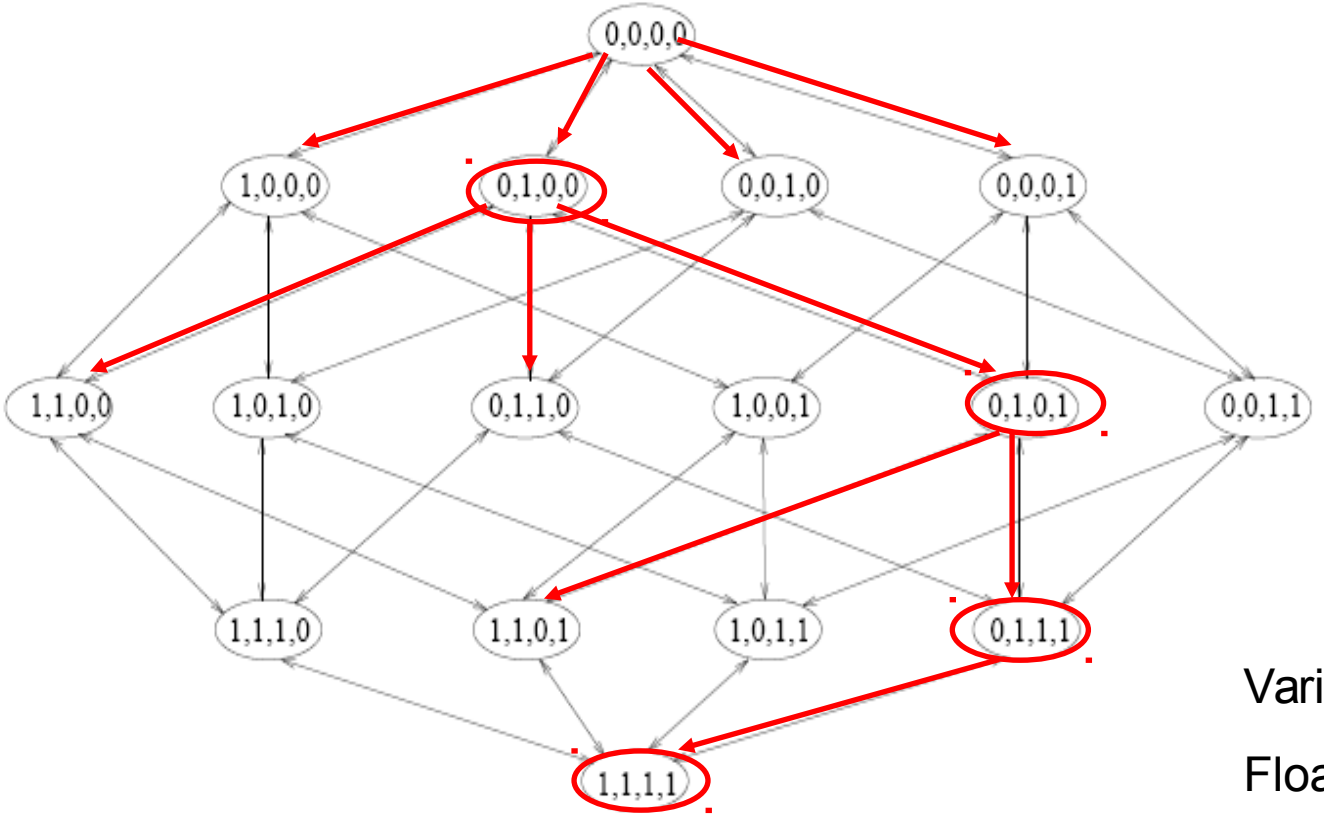


Kohavi-John, 1997

Espacio de búsqueda para un problema con 4 variables.

0 ausente - 1 presente

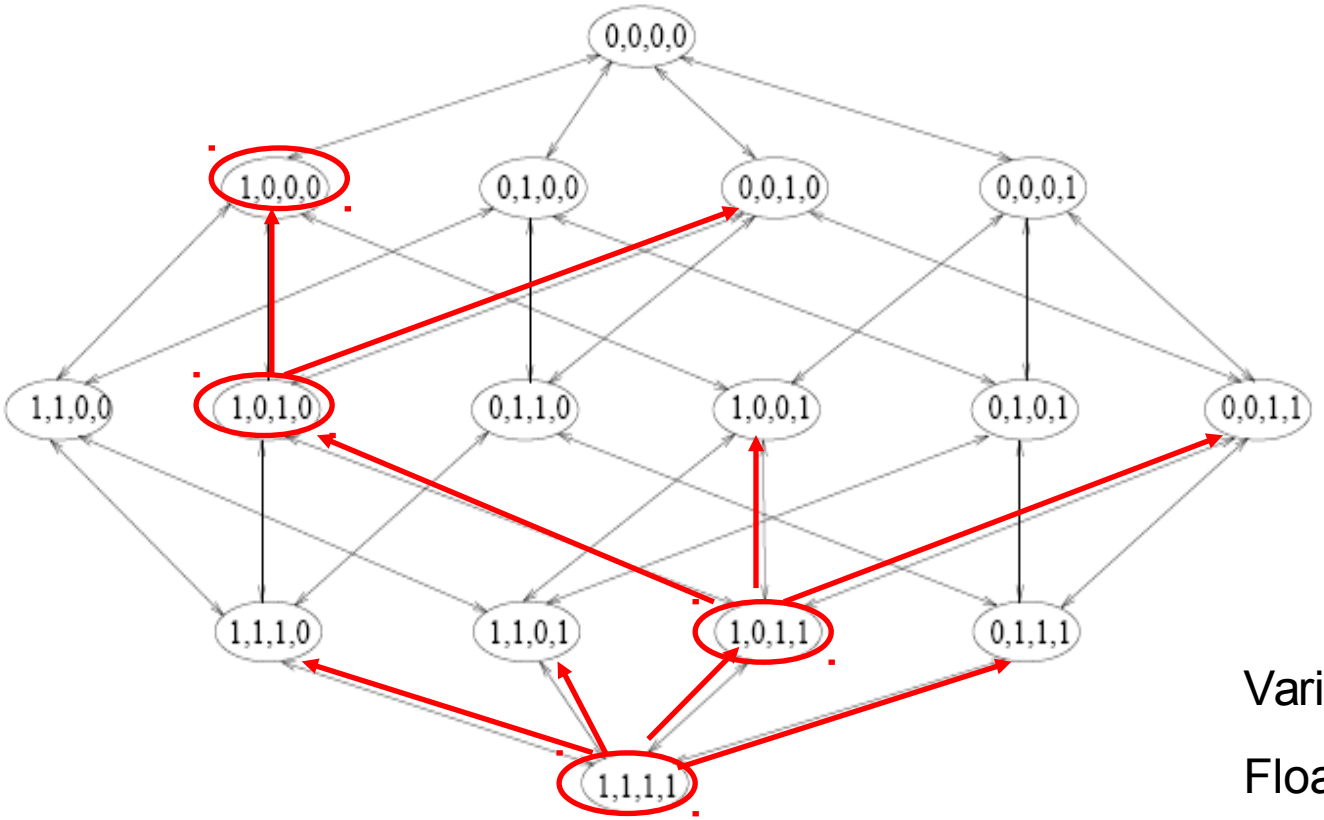
Wrappers. Forward search



Variantes:

Floating search. 1 paso adelante, 1 atrás

Wrappers. Backward search



Variantes:

Floating search

Filtros vs. wrappers

- Los dos son heurísticas
- Los filtros:
  - No resuelven el problema de modelado directamente.
  - Suelen tener problemas con variables “conjuntas”
  - Son muy rápidos
- Los wrappers
  - Dan mejores selecciones
  - Son muy pesados
  - Suelen hacer overfitting