

Projet 10 — PDP & ICE avancés

Interprétation globale et semi-locale d'un modèle non linéaire sur données tabulaires

Votre Nom

Affiliation / Master / Cours

4 décembre 2025

Résumé

Ce rapport présente une étude d'interprétabilité sur des données tabulaires à l'aide des *Partial Dependence Plots* (PDP) et des *Individual Conditional Expectation* (ICE). Sur le jeu de données *Adult Income* (classification binaire), nous entraînons un modèle non linéaire (Random Forest ou XGBoost), sélectionnons 2–3 variables clés, et traçons des PDP/ICE 1D ainsi qu'un PDP 2D pour révéler des effets d'interaction. Message central : le PDP, en tant que moyenne globale, peut lisser ou masquer une hétérogénéité substantielle que les courbes ICE rendent explicite au niveau individuel.

Table des matières

1	Introduction	2
2	Données et protocole expérimental	2
2.1	Jeu de données	2
2.2	Prétraitement et partition	2
2.3	Modèles et métriques	2
3	Méthodes d'explicabilité	2
3.1	Définitions formelles	2
3.2	PDP 2D et interactions	3
3.3	Limites et variantes	3
4	Sélection des variables et plan d'analyse	3
5	Résultats	3
5.1	Performance prédictive (exemple de gabarit)	3
5.2	Importance par permutation (top-10, exemple)	3
5.3	PDP & ICE 1D	3
5.4	PDP 2D et interactions	4
5.5	c-ICE par sous-groupes (optionnel)	4
6	Interprétation et discussion	4
7	Bonnes pratiques et limites	5
8	Conclusion	5
A	Checklist de livraison	5

1 Introduction

Les modèles non linéaires modernes (forêts aléatoires, gradient boosting) offrent d'excellentes performances prédictives, mais leur complexité rend l'interprétation difficile. Les représentations PDP [1, 2] fournissent une vue *globale* de l'effet marginal d'une variable sur la prédiction moyenne du modèle. Les courbes ICE [3] détaillent, pour chaque individu, la réponse du modèle lorsque l'on fait varier une variable d'intérêt tout en maintenant les autres constantes, fournissant ainsi une explication *semi-locale*.

Objectifs de ce projet :

- Entraîner un modèle non linéaire performant (RF / XGBoost) sur un dataset tabulaire.
- Tracer PDP et ICE 1D pour 2–3 variables clés et un PDP 2D pour une paire de variables.
- Mettre en évidence la différence **moyenne (PDP)** vs **individuelle (ICE)**, et illustrer des **interactions**.

Message clé Le PDP peut masquer des effets hétérogènes que l'ICE révèle : des sous-groupes peuvent présenter des effets opposés ou des seuils non apparents au niveau moyen.

2 Données et protocole expérimental

2.1 Jeu de données

Nous utilisons **Adult Income** (OpenML), tâche de classification binaire prédictant si le revenu individuel est $> 50K$ \$/an. Le jeu combine variables numériques (âge, heures/semaine, etc.) et catégorielles (profession, état matrimonial, etc.). Nous retirons la redondance **education** (texte) vs **education-num** (ordinaire) afin d'éviter une fuite d'information triviale.

2.2 Prétraitement et partition

- **Split** train/test : 75/25, stratifié.
- **Numérique** : imputation médiane, standardisation optionnelle.
- **Catégorielle** : imputation par la modalité la plus fréquente, encodage one-hot avec `handle_unknown=ignore`.

2.3 Modèles et métriques

Nous considérons :

- **Random Forest** (600 arbres, `n_jobs=-1`).
- **XGBoost** (`tree_method=hist`, régularisation standard).

Métriques de test : **ROC-AUC** (prioritaire), **F1**, **Accuracy**. L'interprétation ne vaut que si le modèle atteint une performance raisonnable.

3 Méthodes d'explicabilité

3.1 Définitions formelles

Soit $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ le score (probabilité de la classe positive pour la classification) et $x = (x_S, x_C)$ où S est l'ensemble de variables d'intérêt et C son complément. Le **PDP** en un point x_S est :

$$PD_S(x_S) = \mathbb{E}_{X_C} [f(x_S, X_C)]. \quad (1)$$

La **courbe ICE** d'un individu i ajuste x_S le long d'une grille tout en gardant $x_C^{(i)}$ fixé :

$$ICE_S^{(i)}(x_S) = f(x_S, x_C^{(i)}). \quad (2)$$

Le PDP est la moyenne des ICE : $PD_S(x_S) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n ICE_S^{(i)}(x_S)$.

3.2 PDP 2D et interactions

Pour une paire (j, k) , le PDP 2D $PD_{j,k}(x_j, x_k)$ met en évidence les effets conjoints. Des isolignes non parallèles ou des crêtes obliques suggèrent une interaction (non-additivité).

3.3 Limites et variantes

- **Corrélations** : PDP/ICE évaluent le modèle sur des combinaisons potentiellement rares si les variables sont corrélées.
- **ALE** (*Accumulated Local Effects*) [4] : alternative plus robuste à l'extrapolation.
- **c-ICE** : ICE centrées pour comparer les *pent*es plutôt que les niveaux.

4 Sélection des variables et plan d'analyse

Importance par permutation Nous utilisons l'*importance par permutation* sur l'échantillon de test (scikit-learn) pour classer les variables. Sur *Adult*, des candidates fréquentes sont : `age`, `hours-per-week`, `education-num`.

Tracés

- PDP+ICE 1D pour 2-3 variables clés.
- PDP 2D pour au moins une paire pertinente (p.ex. `age` \times `hours-per-week`).
- Option : c-ICE sur `hours-per-week` colorées par quantiles de `education-num`.

5 Résultats

5.1 Performance prédictive (exemple de gabarit)

Les valeurs ci-dessous sont des *emplacements réservés*. Remplacez-les après exécution.

TABLE 1 – Performance sur l'échantillon de test (à compléter).

Modèle	ROC-AUC	F1	Accuracy
Random Forest	0.88	0.66	0.85
XGBoost	0.90	0.68	0.86

5.2 Importance par permutation (top-10, exemple)

5.3 PDP & ICE 1D

Les figures 1-3 comparent PDP (moyenne globale) et ICE (trajectoires individuelles). Divergences marquées entre les ICE et la moyenne indiquent une forte hétérogénéité.

Espace réservé : fig_pdp_ice_age.png

FIGURE 1 – PDP + ICE pour `age`.

Espace réservé : fig_pdp_ice_hours.png

FIGURE 2 – PDP + ICE pour `hours-per-week`.

TABLE 2 – Top-10 variables par importance (à insérer depuis la sortie Python).

Variable	Importance (moy.)
education-num	0.017
hours-per-week	0.015
age	0.013
capital-gain	0.010
marital-status_...	0.008
occupation_...	0.006
sex_Male	0.004
relationship_...	0.004
workclass_...	0.003
capital-loss	0.003

Espace réservé : fig_pdp_ice_edu.png

FIGURE 3 – PDP + ICE pour `education-num`.

5.4 PDP 2D et interactions

La figure 4 illustre un PDP 2D (p. ex. `age` \times `hours-per-week`). Des isolignes non parallèles, crêtes ou vallées obliques révèlent des interactions.

Espace réservé : fig_pdp2d_age_hours.png

FIGURE 4 – PDP 2D mettant en évidence l'interaction `age` \times `hours-per-week`.

5.5 c-ICE par sous-groupes (optionnel)

Les c-ICE centrées (fig. 5) permettent de comparer les *pent*es conditionnelles. Colorer par quantiles d'`education-num` met en évidence des sous-groupes.

Espace réservé : fig_cice_hours_by_edu.png

FIGURE 5 – c-ICE pour `hours-per-week` (centrées) par quantiles d'`education-num`.

6 Interprétation et discussion

Exemples d'enseignements (à vérifier sur vos tracés)

- `education-num` : PDP généralement croissant ; ICE révèlent des paliers et des rendements décroissants selon le profil (p. ex. faible `capital-gain`).
- `hours-per-week` : PDP monotone jusqu'à 40.000 h, puis plateau ; ICE montrent des sous-groupes avec saturation plus précoce ou gains plus marqués.
- `age` : effet non linéaire ; ICE plus hétérogènes en début de carrière.

PDP vs ICE

- Le **PDP** synthétise une tendance moyenne, pratique pour communiquer, mais **lisse** les comportements minoritaires.

- Les **ICE** exposent l'hétérogénéité inter-individuelle (pentes différentes, courbes qui se croisent), souvent charnière pour détecter des **interactions latentes**.

Interactions Le PDP 2D confirme que l'effet des heures travaillées dépend de l'âge (ou du niveau d'éducation). Ces non-additivités justifient le choix d'un modèle non linéaire.

7 Bonnes pratiques et limites

- **Corrélations et extrapolation** : PDP/ICE peuvent évaluer des points de faible densité ; contraindre la grille aux quantiles observés et compléter par ALE.
- **Lisibilité ICE** : sous-échantillonner les individus affichés ; utiliser c-ICE et/ou des enveloppes de quantiles.
- **Cohérence** : rapporter d'abord la performance ; interpréter ensuite.
- **Causalité** : PDP/ICE décrivent le *modèle*, pas nécessairement des effets causaux.

8 Conclusion

Nous avons montré comment combiner PDP (global) et ICE (semi-local) pour expliquer un modèle non linéaire sur données tabulaires. Le message central est confirmé : **le PDP peut masquer une hétérogénéité substantielle que les ICE révèlent**, et les PDP 2D aident à expliciter les interactions sous-jacentes. Des extensions naturelles incluent l'utilisation d'ALE, la quantification des interactions (SHAP interaction values), et l'analyse par sous-groupes.

Reproductibilité

Le code Python complet est fourni en annexe ???. Les figures sont automatiquement sauvegardées au format PNG et incluses dans ce rapport si présentes dans le même répertoire.

Références

- [1] J. H. Friedman. Greedy Function Approximation : A Gradient Boosting Machine. *Annals of Statistics*, 29(5) :1189–1232, 2001.
- [2] J. H. Friedman. Predictive Learning via Rule Ensembles. *Annals of Applied Statistics*, 2(3) :916–954, 2008.
- [3] A. Goldstein, A. Kapelner, J. Bleich, E. Pitkin. Peeking Inside the Black Box : A Survey on Partial Dependence and ICE. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, 24(1) :44–65, 2015.
- [4] D. W. Apley and J. Zhu. Visualizing the Effects of Predictor Variables in Black Box Supervised Learning Models. *Journal of the Royal Statistical Society : Series B*, 82(4) :1059–1086, 2020.
- [5] T. Chen and C. Guestrin. XGBoost : A Scalable Tree Boosting System. In *KDD*, 2016.
- [6] F. Pedregosa et al. Scikit-learn : Machine Learning in Python. *JMLR*, 12 :2825–2830, 2011.

A Checklist de livraison

- Modèle non linéaire entraîné et évalué (ROC-AUC, F1, Accuracy).
- Top-10 importance par permutation et justification des 2–3 variables retenues.
- Figures PDP+ICE 1D annotées (moyenne vs individus).

- Au moins un PDP 2D d'interaction avec interprétation.
- Section limites & bonnes pratiques (corrélations, extrapolation, c-ICE, ALE).
- Message clé clairement illustré : *le PDP peut masquer des effets hétérogènes que l'ICE révèle.*