

Expliquer ou prédire? Les nouveaux défis

Gilbert Saporta
CEDRIC- CNAM,
292 rue Saint Martin, F-75003 Paris

<http://cedric.cnam.fr/~saporta>

Plan

1. Les deux cultures
2. Parcimonie et complexité
3. Validation empirique
4. Paradigmes et paradoxes
5. Interpréter les modèles
6. Big Data: faux espoirs et défis
7. Comprendre pour mieux prédire

1. Les deux cultures

Statistical Science
2001, Vol. 16, No. 3, 199–231

Statistical Modeling: The Two Cultures

Leo Breiman



Abstract. There are two cultures in the use of statistical modeling to reach conclusions from data. One assumes that the data are generated by a given stochastic data model. The other uses algorithmic models and treats the data mechanism as unknown. The statistical community has been committed to the almost exclusive use of data models. This commitment has led to irrelevant theory, questionable conclusions, and has kept statisticians from working on a large range of interesting current problems. Algorithmic modeling, both in theory and practice, has developed rapidly in fields outside statistics. It can be used both on large complex data sets and as a more accurate and informative alternative to data modeling on smaller data sets. If our goal as a field is to use data to solve problems, then we need to move away from exclusive dependence on data models and adopt a more diverse set of tools.

- The **generative modelling** culture
 - seeks to develop stochastic models which **fits** the data, and then make inferences about the data-generating mechanism based on the structure of those models. Implicit (...) is the notion that there is a **true model** generating the data, and often a truly 'best' way to analyze the data.
- The **predictive modelling** culture
 - is silent about the underlying mechanism generating the data, and allows for many different predictive algorithms, preferring to discuss only accuracy of prediction made by different algorithm on various datasets. **Machine Learning** is identified by Breiman as the epicenter of the Predictive Modeling culture.

- Conception standard (modèles pour comprendre)
 - Fournir une certaine **compréhension** des données et de leur mécanisme générateur à travers une **représentation parcimonieuse** .
 - Un modèle doit être simple et ses paramètres interprétables pour le spécialiste : élasticité, odds-ratio, etc.
- En « Big Data Analytics » (modèles pour prédire)
 - Pour de nouvelles observations: **généralisation**
 - **Les modèles** ne sont que des **algorithmes**

Cf GS, compstat 2008

Même formule: $y = f(x; \theta) + \varepsilon$

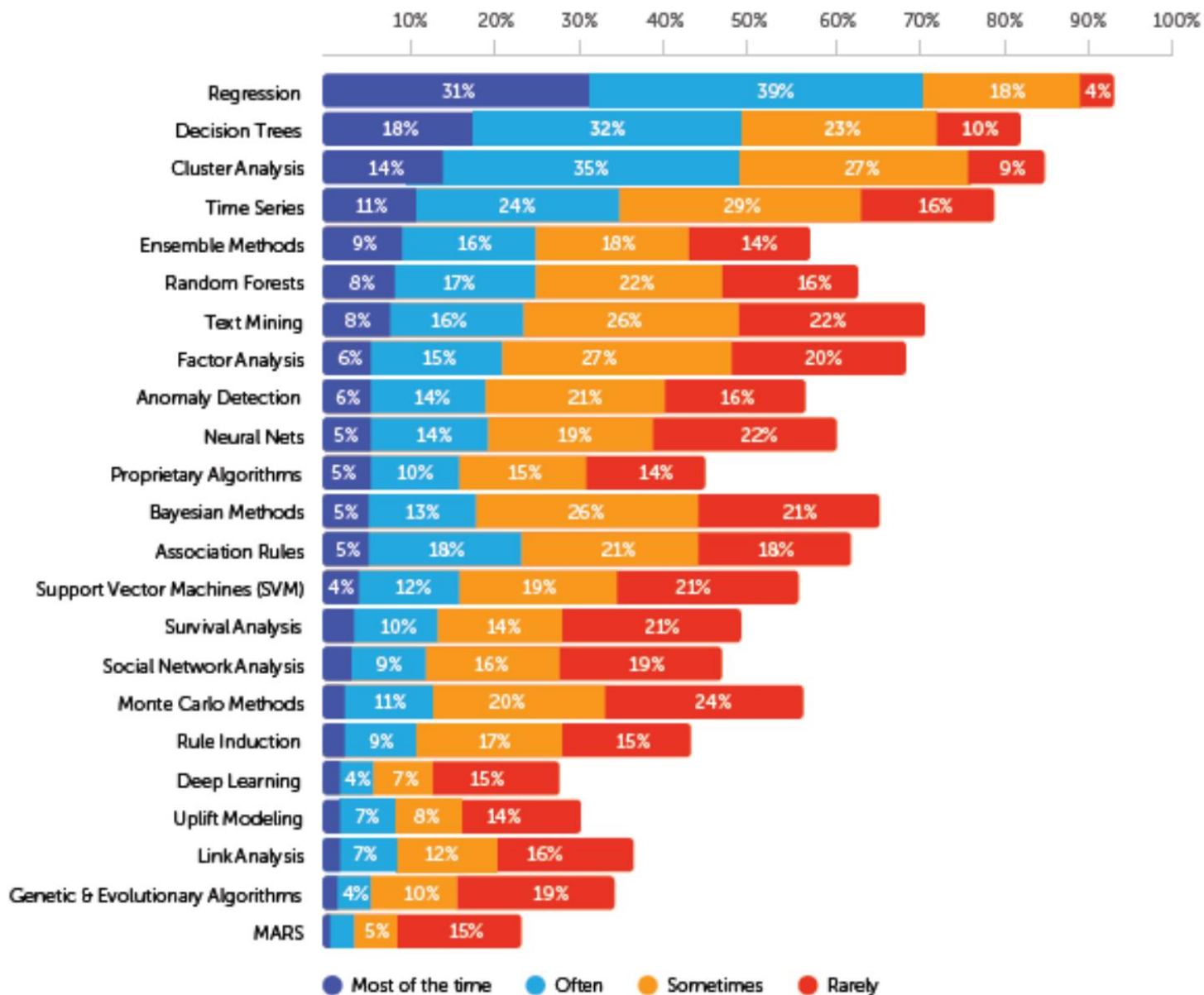
- **Modélisation explicative**
 - Théorie sous-jacente
 - Ensemble restreint de modèles
 - Qualité d'ajustement: **prédire le passé**
 - Erreur: bruit blanc
- **Modélisation prédictive**
 - Modèles issus des données
 - Modèles algorithmiques
 - Prédire de nouvelles données: **prédire l'avenir**
 - Erreur: à minimiser

- Remarques:
 - Malgré leur simplicité, les arbres n'ont pas la faveur des théoriciens car ce ne sont pas des modèles génératifs.
 - Les modèles linéaires et logistiques fournissent des formules simples avec des paramètres interprétables* mais quelle est la garantie qu'ils représentent le mécanisme générateur?

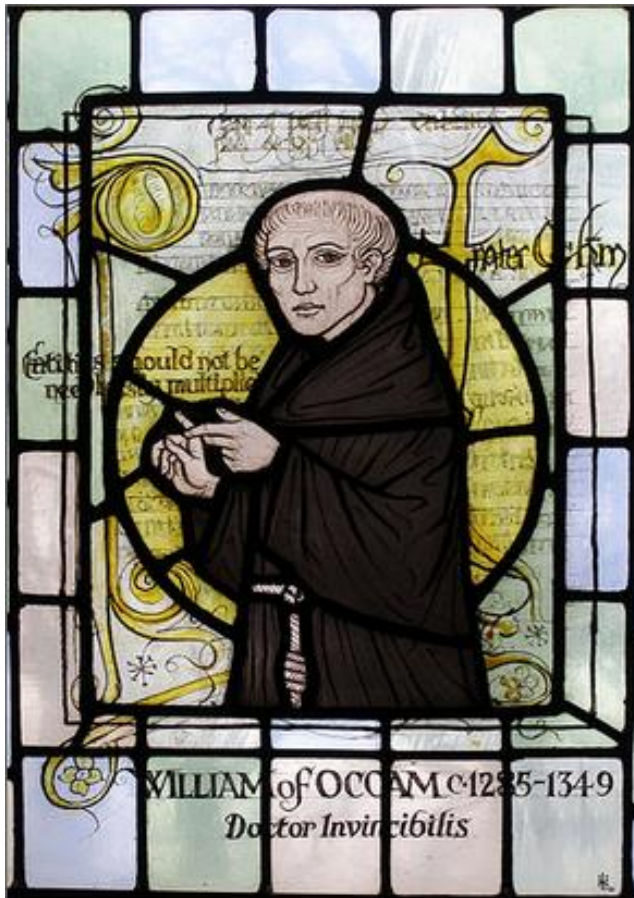
* discutable... voir plus loin

Pragmatisme des utilisateurs

2015 ALGORITHM USAGE



2. Parcimonie et complexité

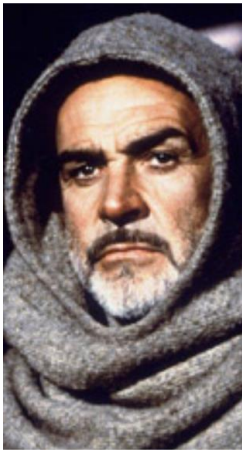


- Le rasoir d'Ockham
 - *pluralitas non est ponenda sine necessitate*
 - Un principe scientifique : éviter des hypothèses inutiles

Guillaume d'Ockham (1285 – 1349), dit le « docteur invincible » philosophe, théologien et logicien franciscain.

Etudes à Oxford, puis Paris.

Accusé d'hérésie, convoqué pour s'expliquer à Avignon, excommunié pour avoir fui à Munich à la cour de Louis IV de Bavière. Meurt vraisemblablement de l'épidémie de peste noire. Réhabilité par Innocent VI en 1359



A inspiré le personnage du moine franciscain Guillaume de Baskerville dans le « Nom de la rose » d'Umberto Eco.

Premier jour, vêpres : « il ne faut pas multiplier les explications et les causes sans qu'on en ait une stricte nécessité. »

- AIC, BIC et autres vraisemblances pénalisées sont souvent considérées comme des versions modernes du rasoir d'Ockham

$$AIC = -2 \ln(L) + 2K$$

$$BIC = -2 \ln(L) + K \ln(n)$$

- Une similarité trompeuse : **AIC et BIC issus de théories différentes**
 - AIC : approximation de la divergence de Kullback-Leibler entre la vraie distribution f et le meilleur choix dans une famille paramétrée
 - BIC : choix bayésien parmi des modèles paramétriques a priori équiprobables
 - **Illogique de les utiliser simultanément**

Comparaison AIC BIC

- L'AIC est un critère prédictif tandis que le BIC est un critère explicatif.
- Si n tend vers l'infini la probabilité que le BIC choisisse le **vrai** modèle tend vers 1, ce qui est faux pour l'AIC.
- Pour n fini: résultats contradictoires. BIC ne choisit pas toujours le vrai modèle: il a tendance à choisir des modèles trop simples en raison de sa plus forte pénalisation

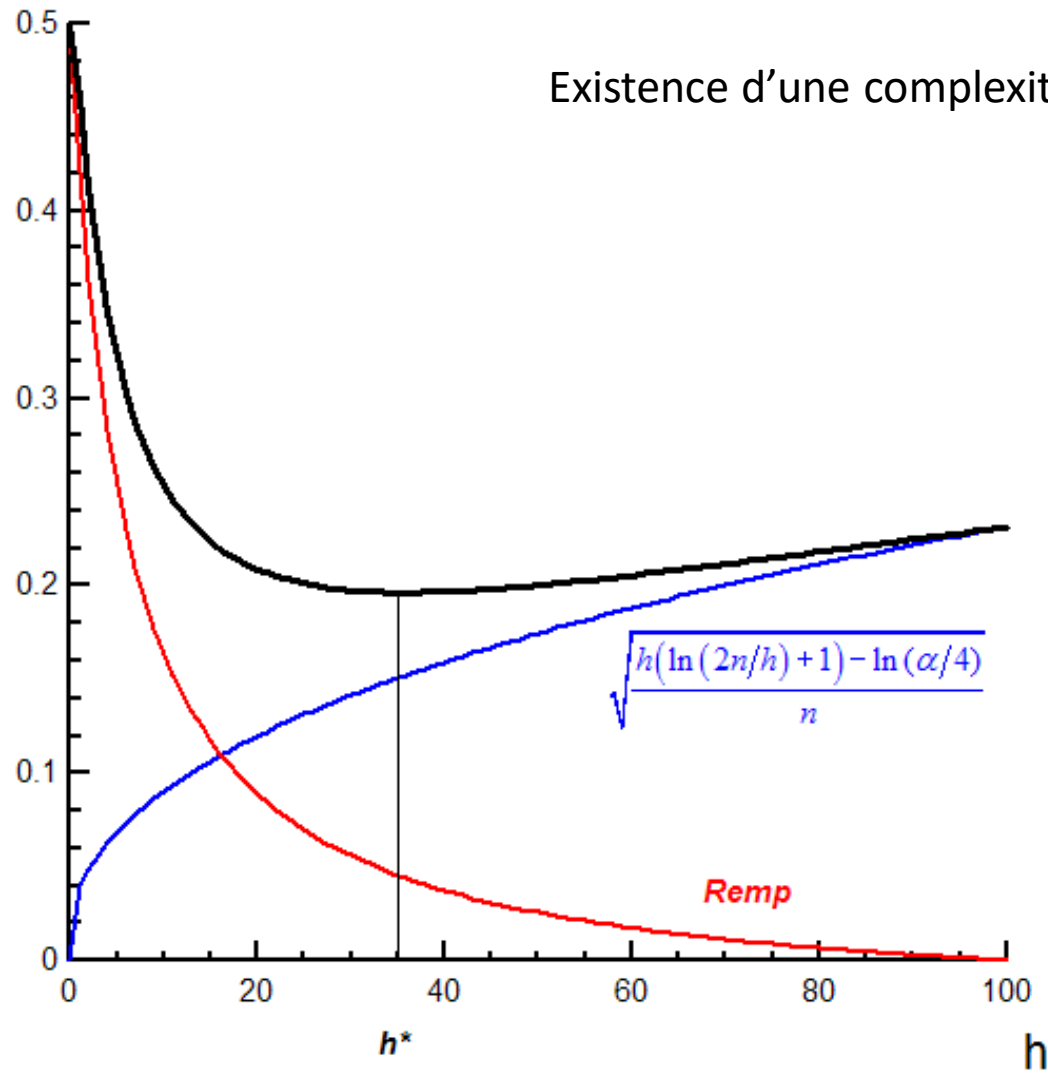
- Pénalisation en contradiction avec la théorie de l'apprentissage
- L'inégalité de Vapnik

$$R < R_{\text{emp}} + \sqrt{\frac{h(\ln(2n/h) + 1) - \ln(\alpha/4)}{n}}$$

dépend de n/h d'où ces conséquences :

- On améliore la capacité prédictive si h croît moins vite que n
- On peut augmenter la complexité du modèle avec n

Existence d'une complexité optimale



AIC BIC réalistes?

- Vraisemblance pas toujours calculable.
- Nombre de paramètres non plus: ridge, PLS, arbres, etc.
- « **Vrai** » modèle?

“Essentially, all models are wrong, but some are useful ”
(G.Box,1987)

* Box, G.E.P. and Draper, N.R.: Empirical Model-Building and Response Surfaces, p. 424, Wiley, 1987

- « Occam's Razor, long admired, is usually interpreted to mean that simpler is better. Unfortunately in prediction, accuracy and simplicity (interpretability) are in conflict »
Breiman, 2011

- Les meta-modèles ou méthodes d'ensemble
 - Bagging, boosting, **random forests** améliorent les algorithmes élémentaires
 - Idem pour le **stacking** (Wolpert, Breiman) qui combine linéairement les prévisions de modèles de toutes sortes: linéaires, arbres, ppv, réseaux de neurones etc.
 - Première idée : régression linéaire (avec ou sans constante)

$$\hat{f}_1(\mathbf{x}), \hat{f}_2(\mathbf{x}), \dots, \hat{f}_m(\mathbf{x})$$
$$\min \sum_{i=1}^n \left(y_i - \sum_{j=1}^m w_j \hat{f}_j(\mathbf{x}) \right)^2$$

- Favorise les modèles les plus complexes: surapprentissage

- Solution: utiliser les valeurs prédites en otant à chaque fois l'unité i

$$\min \sum_{i=1}^n \left(y_i - \sum_{j=1}^m w_j \hat{f}_j^{-i}(\mathbf{x}) \right)^2$$

- Améliorations : (Noçairi et al., 2016)
 - Combinaisons linéaires à coefficients positifs (et de somme 1)
 - Régression PLS ou autre méthode régularisée car les m prévisions sont très corrélées

Netflix Prize

COMPLETED

Home Rules **Leaderboard** Update

Congratulations!

The Netflix Prize sought to substantially improve the accuracy of predictions about how much someone is going to enjoy a movie based on their movie preferences.

On September 21, 2009 we awarded the \$1M Grand Prize to team "BellKor's Pragmatic Chaos". Read about [their algorithm](#), checkout team scores on the [Leaderboard](#), and join the discussions on the [Forum](#).

We applaud all the contributors to this quest, which improves our ability to connect people to the movies they love.

- The Netflix dataset contains more than 100 million datestamped movie ratings performed by anonymous Netflix customers between Dec 31, 1999 and Dec 31, 2005. This dataset gives ratings about $m = 480\ 189$ users and $n = 17\ 770$ movies
- The contest was designed in a training-test set format. A hold-out set of about 4.2 million ratings was created consisting of the last nine movies rated by each user (or fewer if a user had not rated at least 18 movies over the entire period). The remaining data made up the training set.

- *BellKor's Pragmatic Chaos team*. A **blend** of hundreds of different models
- *The Ensemble Team* . **Blend** of 24 predictions
- Same Test RMSE : 0.8567 (10.06%)

- Bellkor's Pragmatic Chaos defeated The Ensemble by submitting just 20 minutes earlier!

Mais Netflix n'a pas implémenté la méthode victorieuse:

We evaluated some of the new methods offline but the additional accuracy gains that we measured did not seem to justify the engineering effort needed to bring them into a production environment.

<http://techblog.netflix.com/2012/04/netflix-recommendations-beyond-5-stars.html>

3. Validation

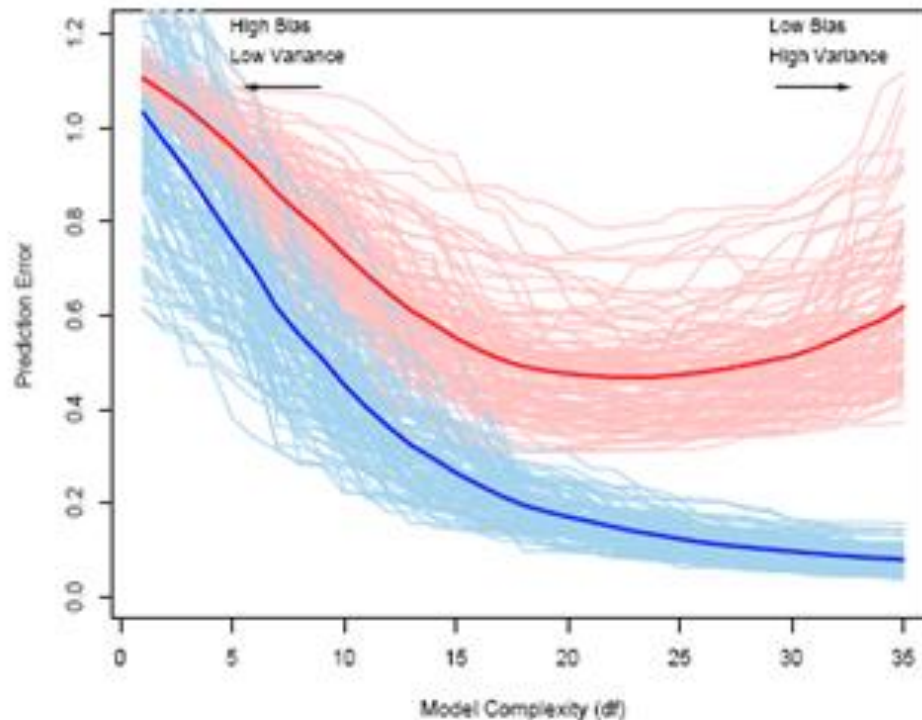
- Nécessité de marier Machine Learning et statistique
 - Un bon modèle est celui qui prédit bien
 - Différence entre ajustement et prévision
 - Ensembles d'apprentissage et de validation

Une démarche avec 3 échantillons pour choisir entre plusieurs familles de modèles:

- Apprentissage: pour estimer les paramètres des modèles
- Test : pour choisir le meilleur modèle
- Validation : pour estimer la performance sur des données futures
 - **Estimer les paramètres \neq estimer la performance**
 - Réestimation du modèle final: **avec toutes les données disponibles**

- Séparer (une fois) les données en apprentissage, test et validation ne suffit pas

Elements of Statistical Learning (2nd Ed.) ©Hastie, Tibshirani & Friedman 2009 Cha



- Précurseurs:

- Leave one out : Lachenbruch et Mickey, 1968

- Validation croisée: Stone, 1974

- Horst, 1941:

« the usefulness of a prediction procedure is not established when it is found to predict adequately on the original sample; the necessary next step must be its application to at least a second group. Only if it predicts adequately on subsequent samples can the value of the procedure be regarded as established»

- **Elémentaire?**

- Pas si sur...

- Voir publications en économétrie, épidémiologie, .. prédictions rarement validées sur des données « hold-out » (sauf en prévision de séries temporelles)

4. Paradigmes et paradoxes

- Comprendre sans prédire
 - Un « bon » modèle qui s'ajuste bien peut fournir des prévisions médiocres au niveau individuel (eg épidémiologie)
- Prédire sans comprendre
 - Des modèles ininterprétables peuvent donner de bonnes prévisions (ciblage marketing, scores de risque ..). Succès du *deep learning* en apprentissage supervisé

Le paradigme de la boîte noire



- modèle génératif $y=f(x)+ \varepsilon$. On cherche une fonction qui approxime en un certain sens le comportement de la boîte noire.
- Deux conceptions très différentes :
 - soit on cherche à approximer la vraie fonction f ,
 - soit on cherche à obtenir des prévisions de y aussi précises que possible.

- Modern statistical thinking makes a clear distinction between the statistical model and the world. The actual mechanisms underlying the data are considered unknown. The statistical models do not need to reproduce these mechanisms to emulate the observable data (Breiman, 2001).
- Better models are sometimes obtained by deliberately avoiding to reproduce the true mechanisms (Vapnik, 2006).

- Garder (ou pas) des variables significatives ou non?
 - A researcher might choose to retain a causal covariate which has a strong theoretical justification *even if is statistically insignificant*.
 - statistical significance plays a minor or no role in assessing predictive performance. In fact, it is sometimes the case that removing inputs with small coefficients, *even if they are statistically significant*, results in improved prediction accuracy

(Shmueli, 2010)

- Le modèle « vrai » ne prédit pas toujours mieux
 - the underspecified linear regression model that leaves out q predictors has a lower EPE when the following inequality holds:

$$q\sigma^2 > \beta_2' X_2' (I - H_1) X_2 \beta_2.$$

- when the data are very noisy (large σ);
- when the true absolute values of the left-out parameters (in our example β_2) are small;
- when the predictors are highly correlated; and
- when the sample size is small or the range of left-out variables is small. (Shmueli, 2010)

5. Interpréter les modèles

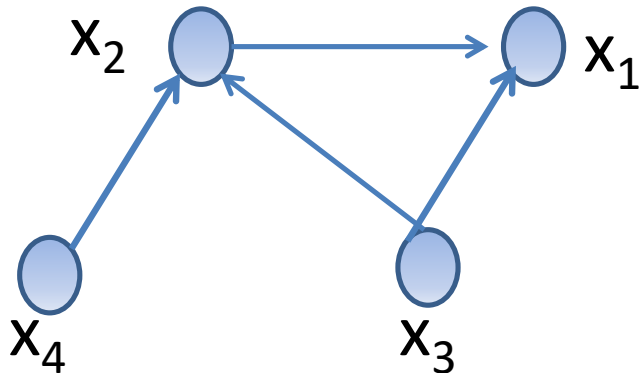
- On croit souvent que les modèles simples (régression linéaire, logistique) s'interprètent aisément
- C'est loin d'être le cas!
- Sauf dans des dispositifs orthogonaux, la valeur des paramètres ne reflète que rarement l'importance des variables

- Plus de 11 méthodes pour quantifier l'importance des variables en régression linéaire! (Grömping, 2015, Wallard, 2015)
 - Eg Shapley value: un sous-ensemble de prédicteurs vue comme une coalition en théorie des jeux
- Egaleme^{nt}: analyse de sensibilité (dérivées partielles, indices de Sobol) (Saltelli & al, 2000)
- Encore une idée de Breiman:
 - « A variable might be considered important if deleting it seriously affects prediction accuracy. »
 - Applicable pour tout modèle

- Mais :
 - « toutes choses égales par ailleurs » souvent impossible
 - Faire varier un prédicteur (**intervention**) peut impliquer des variations des autres d'où un effet complexe (Bühlmann, 2013)
 - Nécessité de schémas causaux

- Un modèle hybride: un schéma de régression (linéaire ou non) complété par un diagramme de causalité

$$\hat{y} = f(\mathbf{x})$$



DAG: Directed Acyclic Graph

6. Big Data: faux espoirs et défis



WIRED SUBSCRIBE » SECTIONS » BLOGS » REVIEWS » VIDEO » HOW-TO'S » MAGAZINE » WIRED ON THE IPAD »

Sign in | RSS Feeds | All Wired

WIRED MAGAZINE: 16.07

SCIENCE : DISCOVERIES

The End of Theory: The Data Deluge Makes the Scientific Method Obsolete

By Chris Anderson 06.23.08

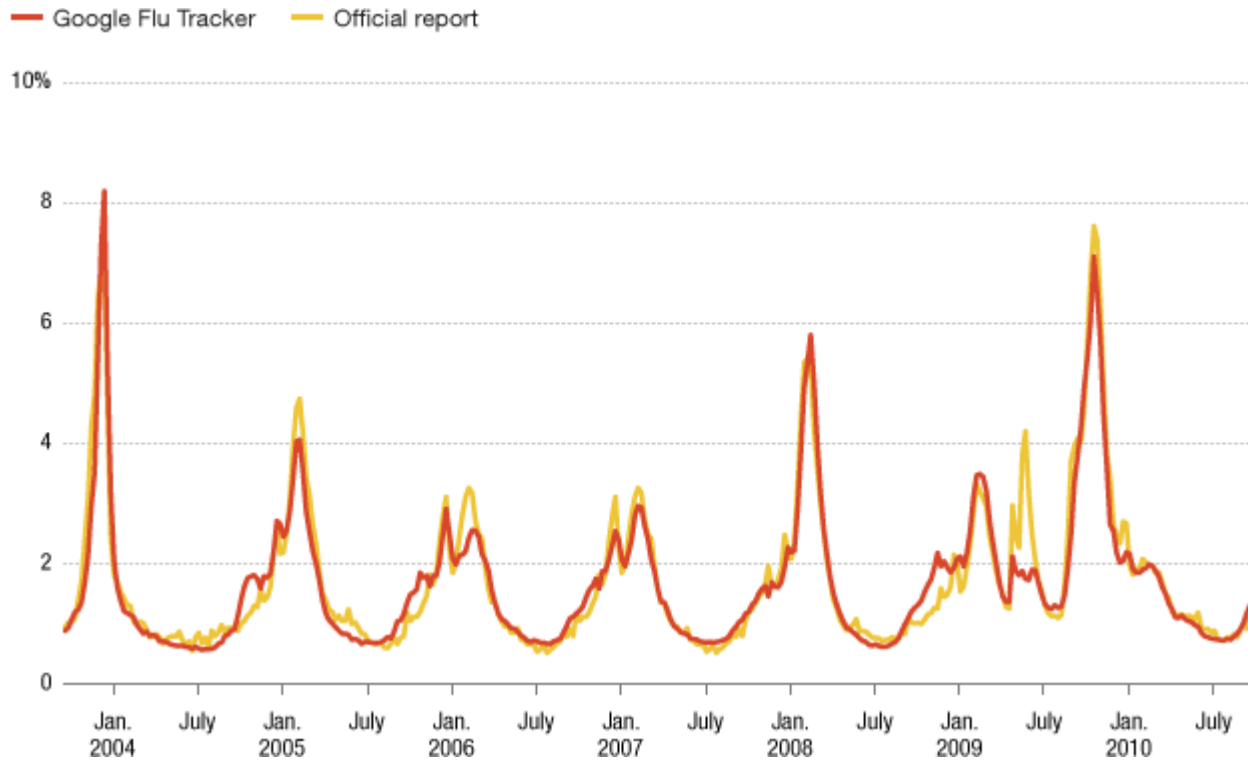
Illustration: Mgrise Barjes

subscribe to **WIRED** IPAD* ACCESS INCLUDED!

- Subscribe to WIRED
- Renew
- Give a gift
- International Orders

Petabytes allow us to say: "Correlation is enough." We can stop looking for models. We can analyze the data without hypotheses about what it might show. We can throw the numbers into the biggest computing clusters the world has ever seen and let statistical algorithms find patterns where science cannot.

- Google FluTrends



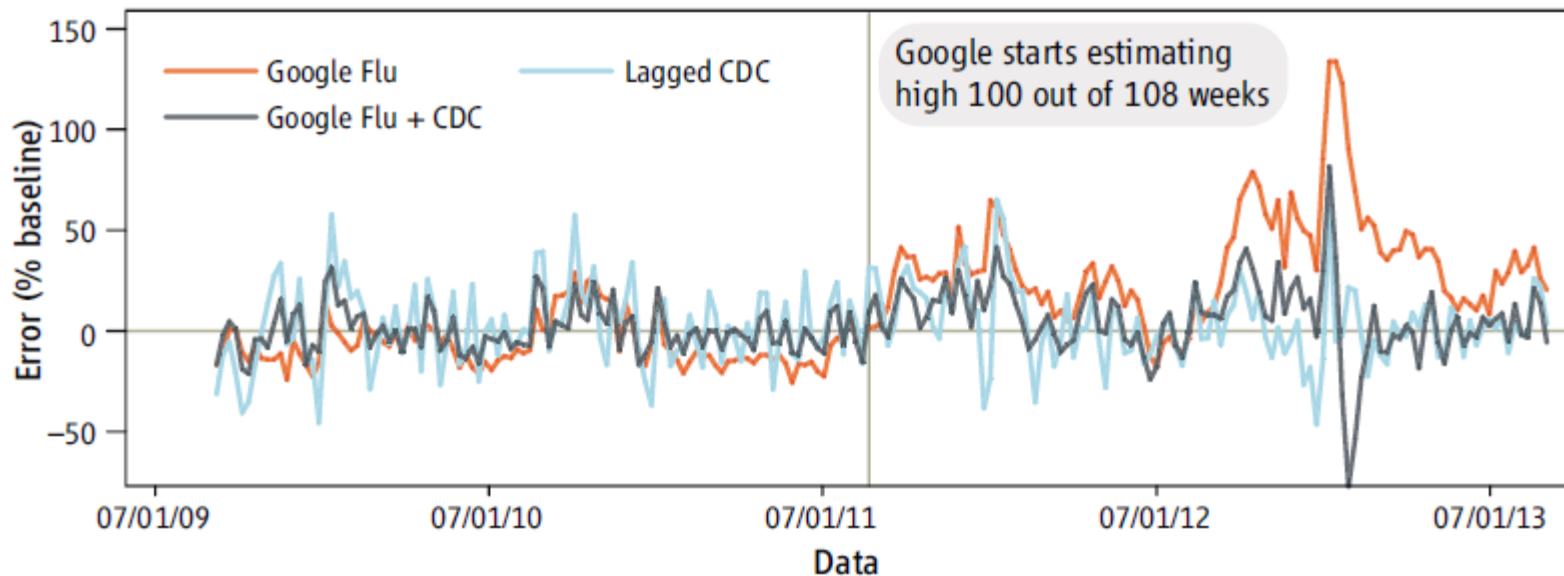
BIG DATA

The Parable of Google Flu: Traps in Big Data Analysis

David Lazer,^{1,2*} Ryan Kennedy,^{1,3,4} Gary King,³ Alessandro Vespignani^{3,5,6}

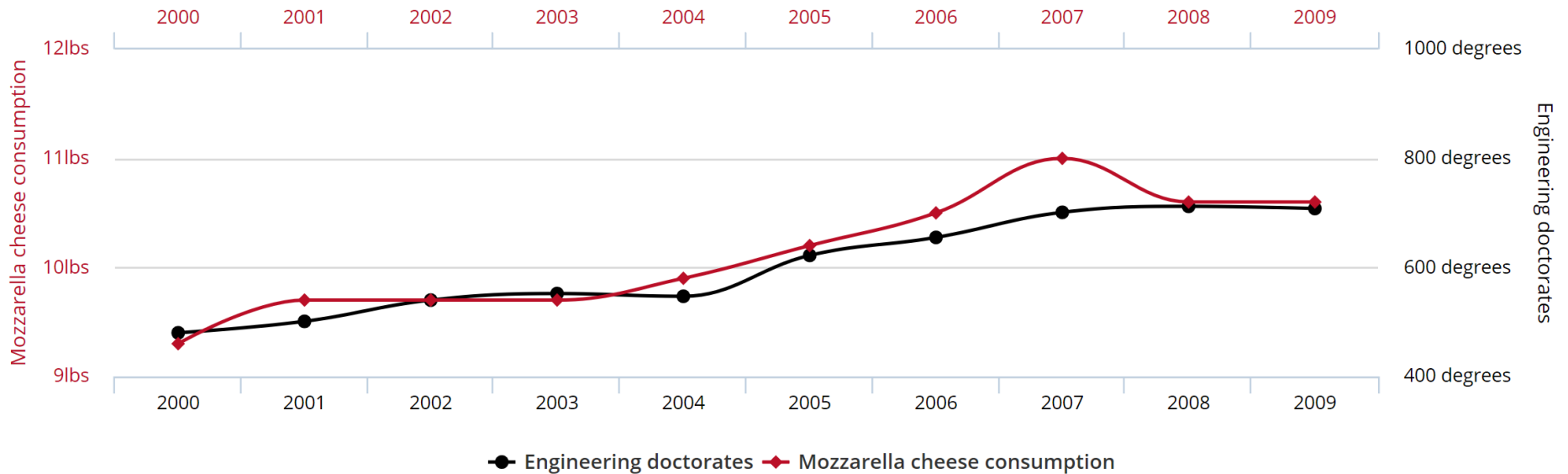
www.sciencemag.org SCIENCE VOL 343 14 MARCH 2014

Overestimation by 50% in 2012-2013



Per capita consumption of mozzarella cheese correlates with Civil engineering doctorates awarded

Correlation: 95.86% (r=0.958648)



tylervigen.com

Data sources: U.S. Department of Agriculture and National Science Foundation

7. Comprendre pour mieux prédire

- Confusion entre corrélation et causalité
- Difficile d'inférer la causalité à partir de données d'observations.
 - Effet d'un traitement: certains individus ont eu $X=1$, d'autres non

Inférence causale et raisonnement contrefactuel

- Décomposition du résultat d'un traitement

$$\begin{aligned} & \text{Outcome for treated} - \text{Outcome for untreated} \\ &= [\text{Outcome for treated} - \text{Outcome for treated if not treated}] \\ & \quad + [\text{Outcome for treated if not treated} \\ & \quad \quad - \text{Outcome for untreated}] \\ &= \text{Impact of treatment on treated} + \text{selection bias.} \end{aligned}$$

« L'identité de base »

- Partie **contrefactuelle** : « Outcome for treated if not treated »

- Problème: on ne peut pas savoir ce qui serait arrivé aux individus traités s'ils ne l'avaient pas été!
- Estimer la partie contrefactuelle
 - Inférence causale de Rubin 1974
 - Propensity score matching de Rosenbaum et Rubin 1983
 - Pearl 2000

Le retour de l'expérimentation

- As Box et al. put it, “To find out what happens when you change something, it is necessary to change it.” ... the best way to answer causal questions is usually to run an experiment. (Varian, 2016)
- L'identité de base montre l'intérêt des essais randomisés: le biais de sélection est alors d'espérance nulle, d'où la possibilité d'estimer l'impact causal .
 - Marketing, publicité sur le web (Bottou,2013)

Drawing Causal Inference from Big Data



This meeting was held March 26-27, 2015 at the National Academy of Sciences 2101 Constitution Ave. NW in Washington, D.C.

Organized by Richard M. Shiffrin (Indiana University), Susan Dumais (Microsoft Corporation), Mike Hawrylycz (Allen Institute), Jennifer Hill (New York University), Michael Jordan (University of California, Berkeley), Bernhard Schölkopf (Max Planck Institute) and Jasjeet Sekhon (University of California, Berkeley)

Graduate Student / Postdoctoral Researcher travel awards sponsored by the National Science Foundation and the Ford Foundation.



July 5, 2016
vol. 113 no. 27

Symposium: Big Data, Causal Inference, and Formal Theory: Contradictory Trends in Political Science?

Big Data, Causal Inference, and Formal Theory: Contradictory Trends in Political Science? - Introduction

William Roberts Clark and Matt Golder

PS: Political Science & Politics / Volume 48 / Issue 01 / janvier 2015, pp 65 - 70

Can Big Data Solve the Fundamental Problem of Causal Inference?

Rocío Titiunik

PS: Political Science & Politics / Volume 48 / Issue 01 / janvier 2015, pp 75 - 79

En guise de conclusion

- Ambiguïté du mot modèle
- Modèles pour comprendre (génératifs): la statistique comme auxiliaire de la science. Modèles pour prédire: l'autre face de la statistique, combinée avec les méthodes du Machine Learning: l'aide à la décision.
 - Un bon modèle prédictif améliore la connaissance
- Les modèles simples ne le sont pas tant que cela!
- Convergence entre inférence empirique et inférence causale

Merci pour votre attention!

References

- C.Anderson (2008) The End of Theory: The Data Deluge Makes the Scientific Method Obsolete, <http://www.wired.com/2008/06/pb-theory/>
- L.Bottou et al. (2013) Counterfactual Reasoning and Learning Systems: The Example of Computational Advertising, *Journal of Machine Learning Research*, 14, 3207–3260,
- L.Breiman (2001) Statistical Modeling: The Two Cultures, *Statistical Science*, 16, 3, 199–231
- P.Bühlmann (2013) Causal statistical inference in high dimensions. *Mathematical Methods of Operations Research*, 77, 357-370
- D.Donoho (2015) 50 years of Data Science, *Tukey Centennial workshop*, <https://dl.dropboxusercontent.com/u/23421017/50YearsDataScience.pdf>
- U.Grömping, (2015). Variable importance in regression models. *WIREs Comput Stat* **7**, 137-152.

- H. Nocairi , C. Gomes , M. Thomas , G. Saporta (2016) Improving Stacking Methodology for Combining Classifiers; Applications to Cosmetic Industry, *Electronic Journal of Applied Statistical Analysis*, vol. 9(2), pp. 340-361
- A.Saltelli, A Saltelli, K Chan, EM Scott (2000) *Sensitivity analysis*, Wiley
- G.Saporta (2008) Models for Understanding versus Models for Prediction, In P.Brito, ed., *Compstat Proceedings*, Physica Verlag, 315-322
- G. Shmueli (2010) To explain or to predict? *Statistical Science*, **25**, 289–310
- V.Vapnik (2006) *Estimation of Dependences Based on Empirical Data*, 2nd edition, Springer
- H.Varian (2016) Causal inference in economics and marketing, *PNAS* , **113**, 7310-7315
- H.Wallard (2015) Using Explained Variance Allocation to analyse Importance of Predictors, *16th ASMDA conference proceedings*, 1043-1054

Chimiométrie 2018

Paris 30-31 janvier 2018



<https://chemom2018.sciencesconf.org/>

JES 2018

Causalité et statistique

Fréjus 14-18 octobre 2018

Léon Bottou

Antoine Chambaz

Daniel Commenges

Isabelle Drouet

Ron Kenett

Vivian Viallon