09 - Feature engineering

PRO1036 - Analyse de données scientifiques en R

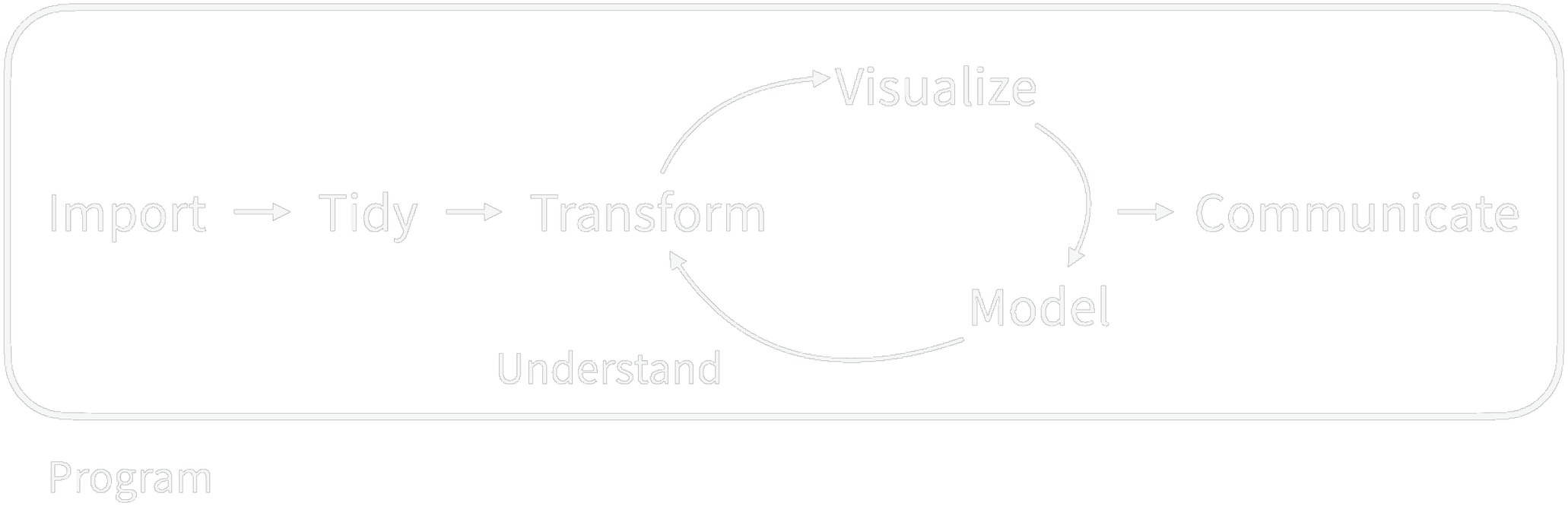
Tim Bollé

November 24, 2025

Modélisation

Modélisation

Intervient dans le processus d'analyse de données

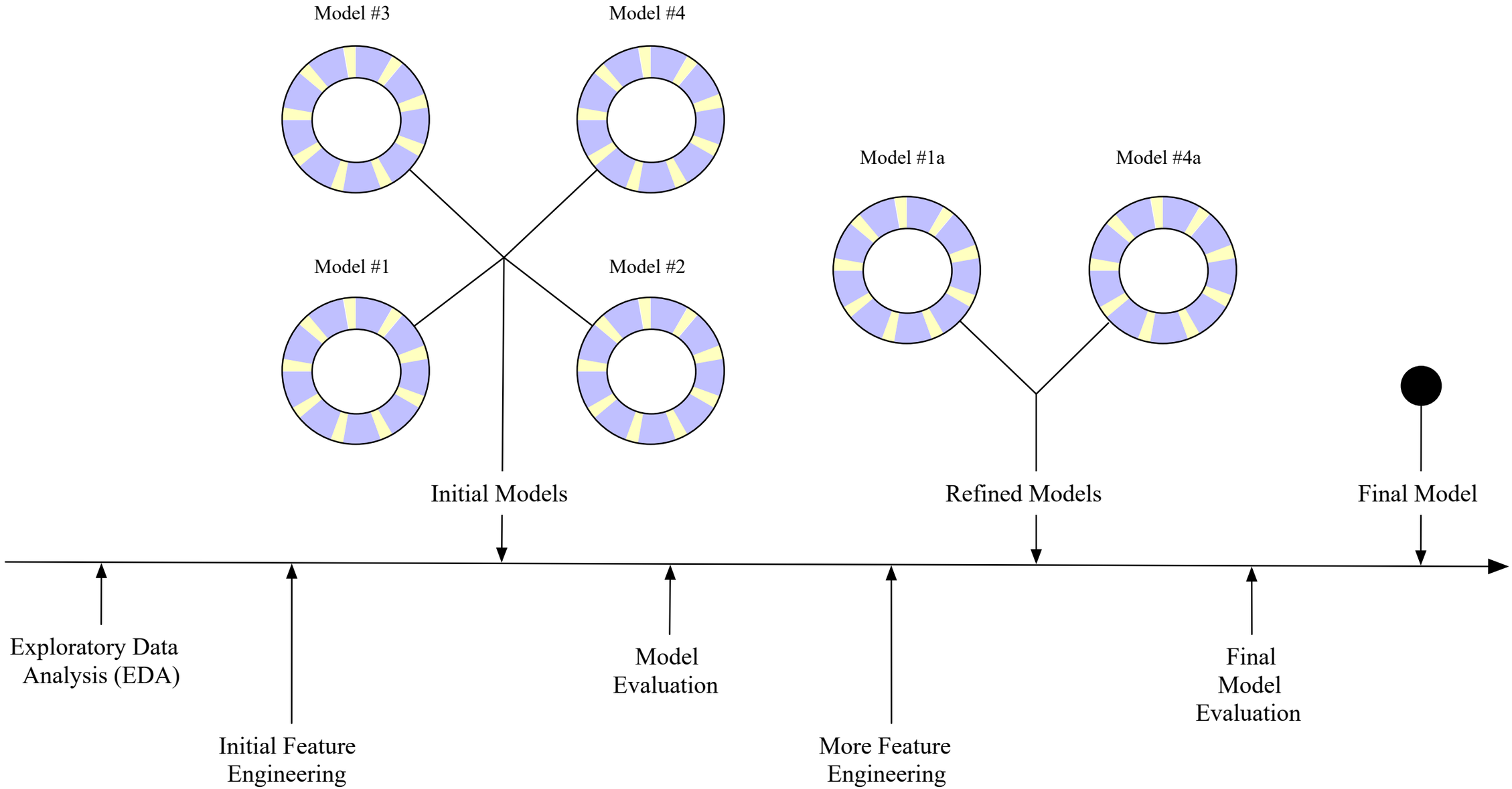


Le machine learning permet notamment de prédire des valeurs et prendre des décisions.

Processus de modélisation

- **Exploratory data analysis (EDA)**: Comprendre les données, se poser des questions
- **Feature engineering**: Créer de nouvelles variables à partir des données ou sélectionner les variables les plus pertinentes
- **Sélection de modèle et tuning**: Choisir le modèle le plus adapté et ajuster les hyperparamètres
- **Évaluation du modèle**: Mesurer la performance du modèle

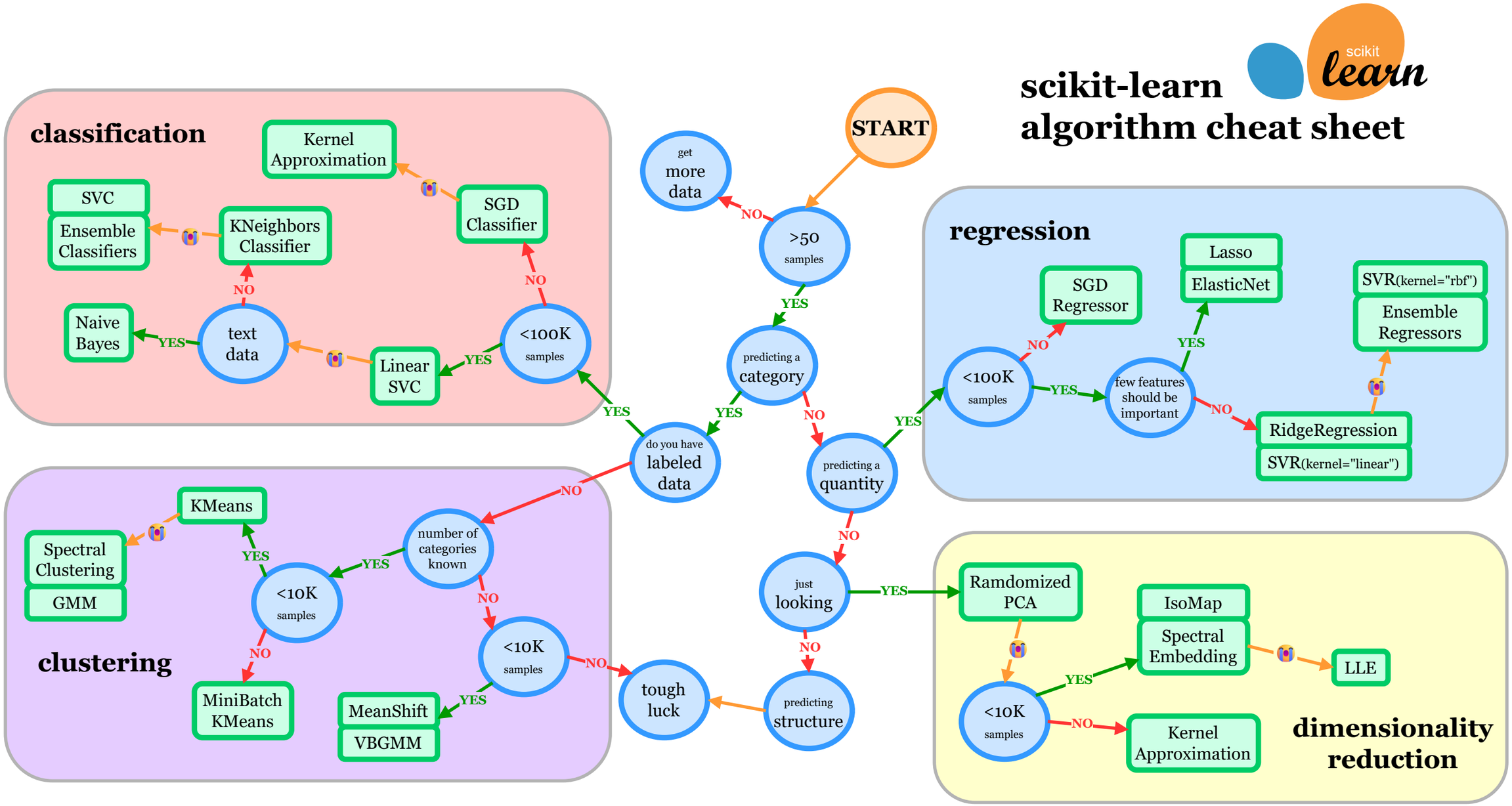
Processus de modélisation



Choix du modèle

- **Supervised learning**: On a des données étiquetées
  - Classification
  - Régression
- **Unsupervised learning**: On a des données non étiquetées
  - Clustering
  - Réduction de dimension
- ...

Choix du modèle



Modàlisation et tidyverse

Tidymodel est un ensemble de packages qui permettent de faire du machine learning avec le tidyverse.

On retrouve les packages:

- `parsnip`: Interface pour les modèles
- `dials`: Sélection d'hyperparamètres
- `tune`: Tuning des hyperparamètres
- `workflow`: Workflows pour les modèles
- `yardstick`: Métriques de performance
- `recipes`: Préparation des données

Données du jour

nycflights13

Le package `nycflights13` contient des données sur les vols au départ de New York en 2013.

```
set.seed(123)
library(nycflights13)

flight_data <-
  flights %>%
  mutate(
    # On change le retard en facteur
    arr_delay = ifelse(arr_delay >= 30, "late", "on_time"),
    arr_delay = factor(arr_delay)
  ) %>%
  # On ajoute les données de météo
  inner_join(weather, by = c("origin", "time_hour")) %>%
  # On ne garde que les colonnes utiles
  select(dep_time, flight, origin, dest, air_time, distance,
         carrier, arr_delay, time_hour, temp, wind_speed, precip) %>%
  # On enlève les lignes avec des données manquantes
  na.omit() %>%
  # Pour faire des modèles, on préfère avoir des facteurs que du texte
```

Données

```
1  flight_data %>% sample_n(size = 5)
```

```
# A tibble: 5 × 12
  dep_time flight origin dest  air_time distance carrier arr_delay
     <int>  <int> <fct>  <fct>    <dbl>    <dbl> <fct>   <fct>
1     1220   1191 JFK    ACK         45      199 B6      on_time
2      703   1665 EWR    LAX        353     2454 UA      on_time
3     1321   1054 EWR    LAX        338     2454 UA      on_time
4      651    315 JFK    SJU        195     1598 DL      on_time
5     2200   3832 EWR    PVD         30      160 EV      on_time
# ℹ 4 more variables: time_hour <dttm>, temp <dbl>, wind_speed <dbl>,
#   precip <dbl>
```

Feature engineering

Késako ?

Le feature engineering (ou ingénierie des caractéristiques) est le processus de création, de transformation et de sélection des variables (features) utilisées pour entraîner un modèle de machine learning.

L’idée est de préparer les données de manière à améliorer la performance du modèle.

Une première approche : `mutate()`

```r
flight_data %>%
  mutate(
    # Nous aurons besoin de la date
    date = lubridate::as_date(time_hour),
    dow  = wday(date),
    month = month(date)
  ) %>%
  select(-time_hour) %>%
  sample_n(size = 5) %>%
  select(date, dow, month)
```

```
# A tibble: 5 × 3
  date         dow month
  <date>     <dbl> <dbl>
1 2013-04-30     3     4
2 2013-06-21     6     6
3 2013-10-18     6    10
4 2013-02-21     5     2
5 2013-08-27     3     8
```

Feitures engineering avec `recipes`

`tidymodels` et son package `recipes` permettent de créer des recettes pour préparer les données. Cela permet de transformer certaines variables, de créer de nouvelles variables, etc.

Nous allons chercher à prédire le retard en fonction de différentes variables

Séparation des données

```
1  data_split <- initial_split(flight_data, prop = 3/4)
2
3  train_data <- training(data_split)
4  test_data  <- testing(data_split)
```

Recettes

Une recette de base prend une **formule** et des **données**

```
flights_rec <- recipe(
  arr_delay ~ .,
  data = train_data)
```

Par défaut, toutes les variables sont des `predictors`.

```
summary(flights_rec)
```

```
# A tibble: 12 × 4
   variable   type      role      source
   <chr>      <list>    <chr>     <chr>
 1 dep_time   <chr [2]> predictor original
 2 flight     <chr [2]> predictor original
 3 origin     <chr [3]> predictor original
 4 dest       <chr [3]> predictor original
 5 air_time   <chr [2]> predictor original
 6 distance   <chr [2]> predictor original
 7 carrier    <chr [3]> predictor original
 8 time_hour  <chr [1]> predictor original
 9 temp       <chr [2]> predictor original
10 wind_speed <chr [2]> predictor original
11 precip     <chr [2]> predictor original
12 arr_delay  <chr [3]> outcome   original
```

Recettes

Nous pouvons maintenant appliquer des transformations sur les colonnes pour créer des variables adaptées à notre modèle.

Il existe de nombreuses recettes dans le package `recipes`. Elles ont toute la forme `step_X()` où `X` sera le nom d'une recette. La liste des recettes est disponible ici

Par exemple, la recette `step_date` permet de transformer une date en une autre variable (jour de la semaine, mois, années, …)

```
flights_rec <- flights_rec %>%
  step_date(time_hour, features = c("dow", "month")) %>%
  step_rm(time_hour) # On enlève la colonne originale
```

Résultat

```
1 prep(flights_rec) %>%
2   juice() %>%
3   sample_n(size = 5) %>%
4   select(starts_with("time_hour")) # Pour voir le résultat
```

```
# A tibble: 5 × 2
  time_hour_dow time_hour_month
  <fct>         <fct>
1 Sun           Mar
2 Tue           Jul
3 Tue           Sep
4 Sun           Feb
5 Mon           Feb
```

Recettes

Nous allons transformer les variables de différentes manières:

- `update_role`: Pour indiquer les variables que l'on veut garder comme identifiant (`ID`)
- `step_multate`: Pour créer de nouvelles variables comme un mutate normal
- `step_date`: Pour transformer la date en variables plus utiles
- `step_holiday`: Pour indiquer si une date tombe un jour férié
- `step_dummy`: Pour transformer les variables catégorielles en variables binaires
- `step_rm`: Pour supprimer des colonnes
- `step_zv`: Pour supprimer les variables avec une variance nulle

Recettes

```
flights_rec <- recipe(arr_delay ~ ., data = train_data) %>%
  update_role(flight, time_hour, new_role = "ID") %>%
  step_mutate(date = lubridate::as_date(time_hour)) %>%
  step_rm(time_hour) %>%
  step_date(date, features = c("dow", "month")) %>%
  step_holiday(date,
               holidays = timeDate::listHolidays("US"),
               keep_original_cols = FALSE) %>%
  step_cut(temp,
           breaks = 32) %>% # On crée des catégories de température
  step_dummy(all_nominal_predictors()) %>%
  step_zv(all_predictors()) # On enlève les variables avec une variance nulle
```

Workflow

Faire un `workflow`

Un `workflow` est une combinaison d'une recette et d'un modèle. Il permet d'enchainer différentes opérations.

Commençons par définir un modèle:

```
lr_mod <-
  logistic_reg() %>%
  set_engine("glm")
```

workflow

Nous pouvons maintenant combiner notre recette et notre modèle pour créer un `workflow`.

```
flights_wf <-
  workflow() %>%
  add_recipe(flights_rec) %>%
  add_model(lr_mod)
```

```
══ Workflow ════════════════════════════════════════════════════════════════════
Preprocessor: Recipe
Model: logistic_reg()

── Preprocessor ────────────────────────────────────────────────────────────────
7 Recipe Steps

• step_mutate()
• step_rm()
• step_date()
• step_holiday()
• step_cut()
• step_dummy()
• step_zv()

── Model ───────────────────────────────────────────────────────────────────────
Logistic Regression Model Specification (classification)

Computational engine: glm
```

Entrainer un `workflow`

Nous pouvons ensuite entraîner notre modèle. Pour cela, nous pouvons directement utiliser la fonction `fit` du `workflow`.

```
flights_fit <-
  flights_wf %>%
  fit(data = train_data)
```

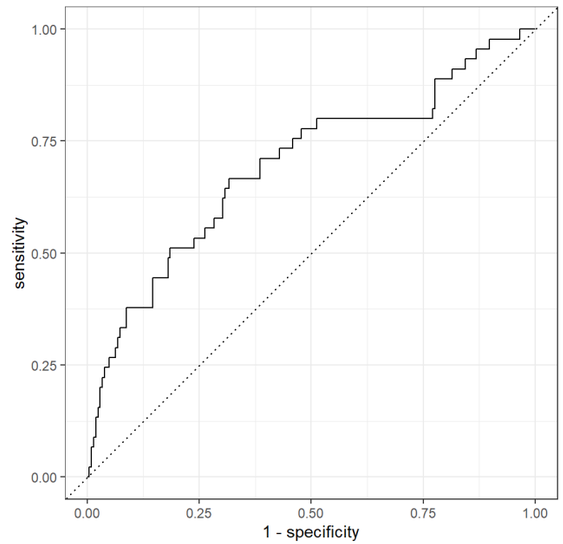
Faire les prédictions

```
1  flight_pred <- predict(flights_fit, test_data) %>%
2    bind_cols(test_data %>% select(arr_delay))
```

```
# A tibble: 5 × 2
  .pred_class arr_delay
  <fct>       <fct>
1 on_time     on_time
2 late        late
3 on_time     on_time
4 on_time     on_time
5 on_time     on_time
```

Évaluation du modèle

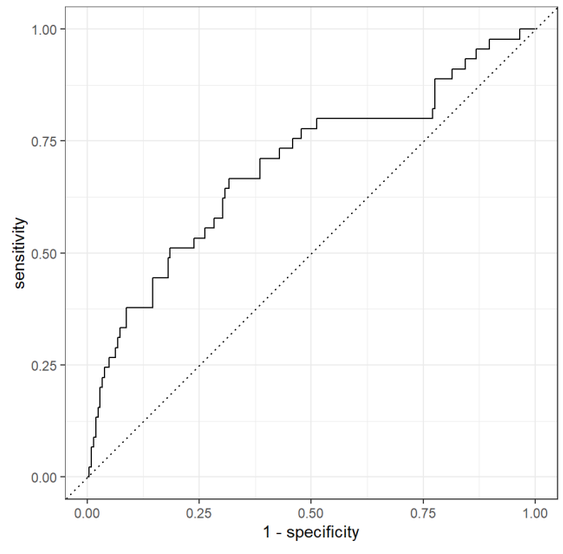
```
predict(flights_fit, test_data, type = "prob")
  bind_cols(test_data %>% select(arr_delay)) %
  roc_curve(truth = arr_delay, `.pred_late`) %
  autoplot()
```



Évaluation du modèle

```
1 predict(flights_fit, test_data, type = "prob")
2   bind_cols(test_data %>% select(arr_delay)) %
3   roc_auc(truth = arr_delay, `.pred_late`)
```

```
# A tibble: 1 × 3
  .metric .estimator .estimate
  <chr>   <chr>          <dbl>
1 roc_auc binary         0.693
```



Rééchantillonnage et Cross-validation

Problème…

Comment peut-on paramétrer notre modèle pour qu'il soit le plus performant possible, sachant que nous ne voulons pas toucher aux données de test ?

Évaluer la performance sur les données d'entraînement

Sur les données d'entraînement:

```
1 predict(flights_fit, train_data, type = "prob"
2   bind_cols(train_data %>% select(arr_delay))
3   roc_auc(truth = arr_delay, `.pred_late`)
```

```
# A tibble: 1 × 3
  .metric .estimator .estimate
  <chr>   <chr>          <dbl>
1 roc_auc binary         0.910
```

Sur les données de test:

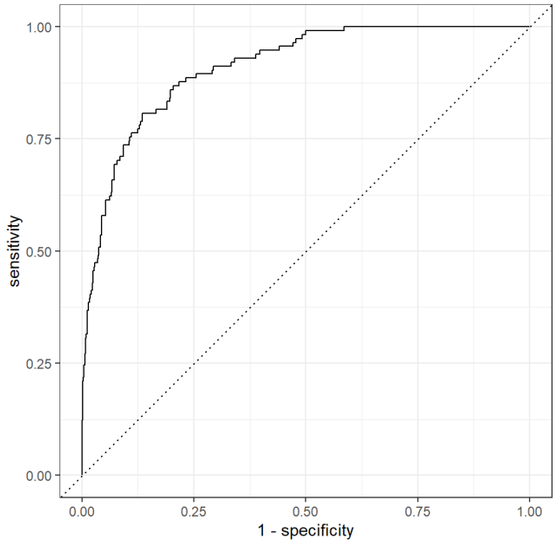
```
1 predict(flights_fit, test_data, type = "prob")
2   bind_cols(test_data %>% select(arr_delay)) %
3   roc_auc(truth = arr_delay, `.pred_late`)
```

```
# A tibble: 1 × 3
  .metric .estimator .estimate
  <chr>   <chr>          <dbl>
1 roc_auc binary         0.693
```

Évaluer la performance sur les données d'entraînement

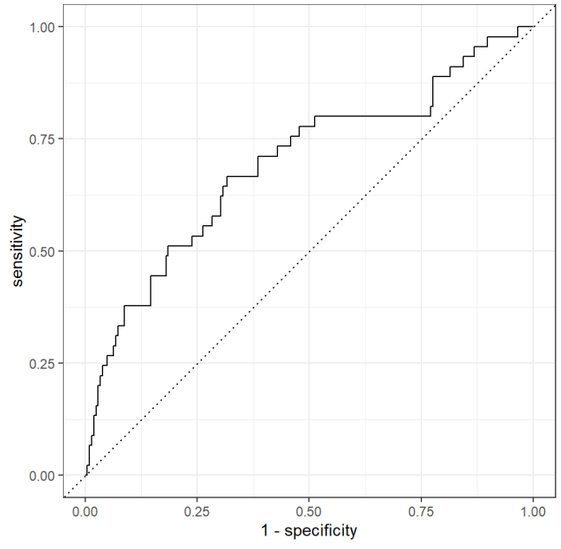
Sur les données d'entraînement:

```
predict(flights_fit, train_data, type = "prob") %>%
  bind_cols(train_data %>% select(arr_delay)) %>%
  roc_curve(truth = arr_delay, `.pred_late`) %>%
  autoplot()
```



Sur les données de test:

```
predict(flights_fit, test_data, type = "prob") %>%
  bind_cols(test_data %>% select(arr_delay)) %>%
  roc_curve(truth = arr_delay, `.pred_late`) %>%
  autoplot()
```

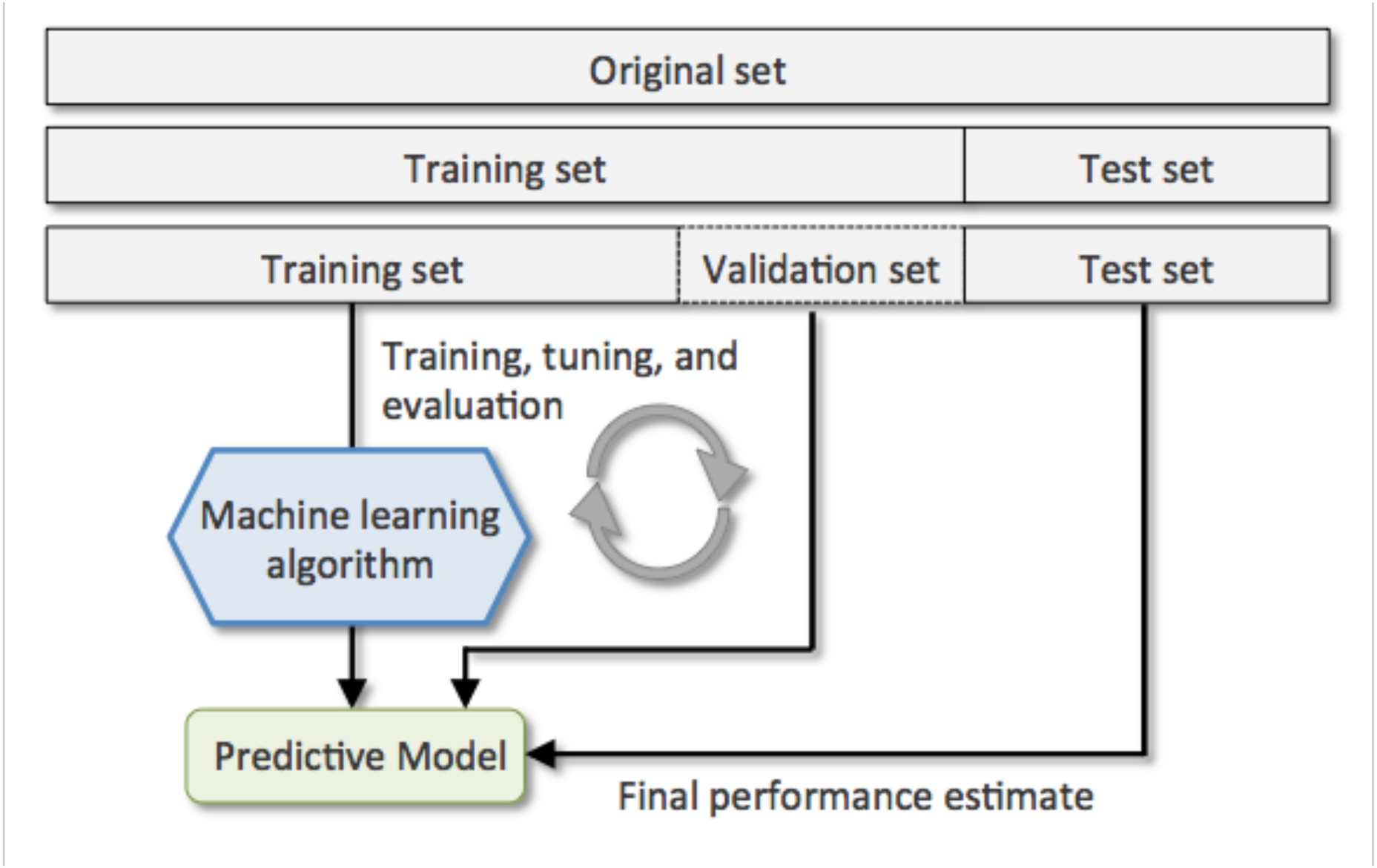


Conclusion

Le modèle d’entrainement n’est pas représentatif de la performance réelle du modèle.

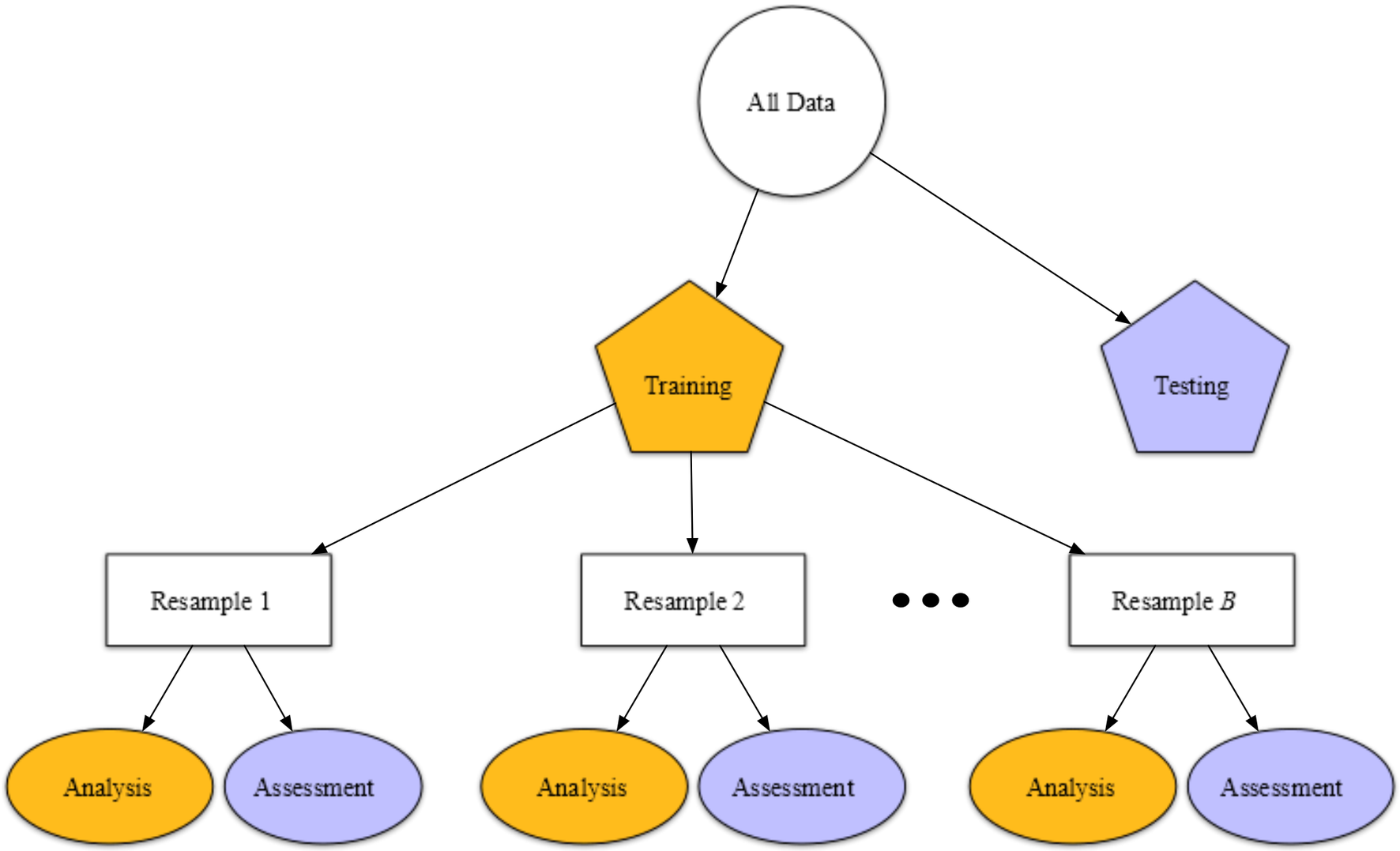
Faire des prédictions sur les données d’entraînement reflète seulement ce que le modèle connait déjà.

Première idée : Jeu de validation



Rééchantillonnage

Pour obtenir une meilleure estimation de la performance du modèle, on peut utiliser le rééchantillonnage.



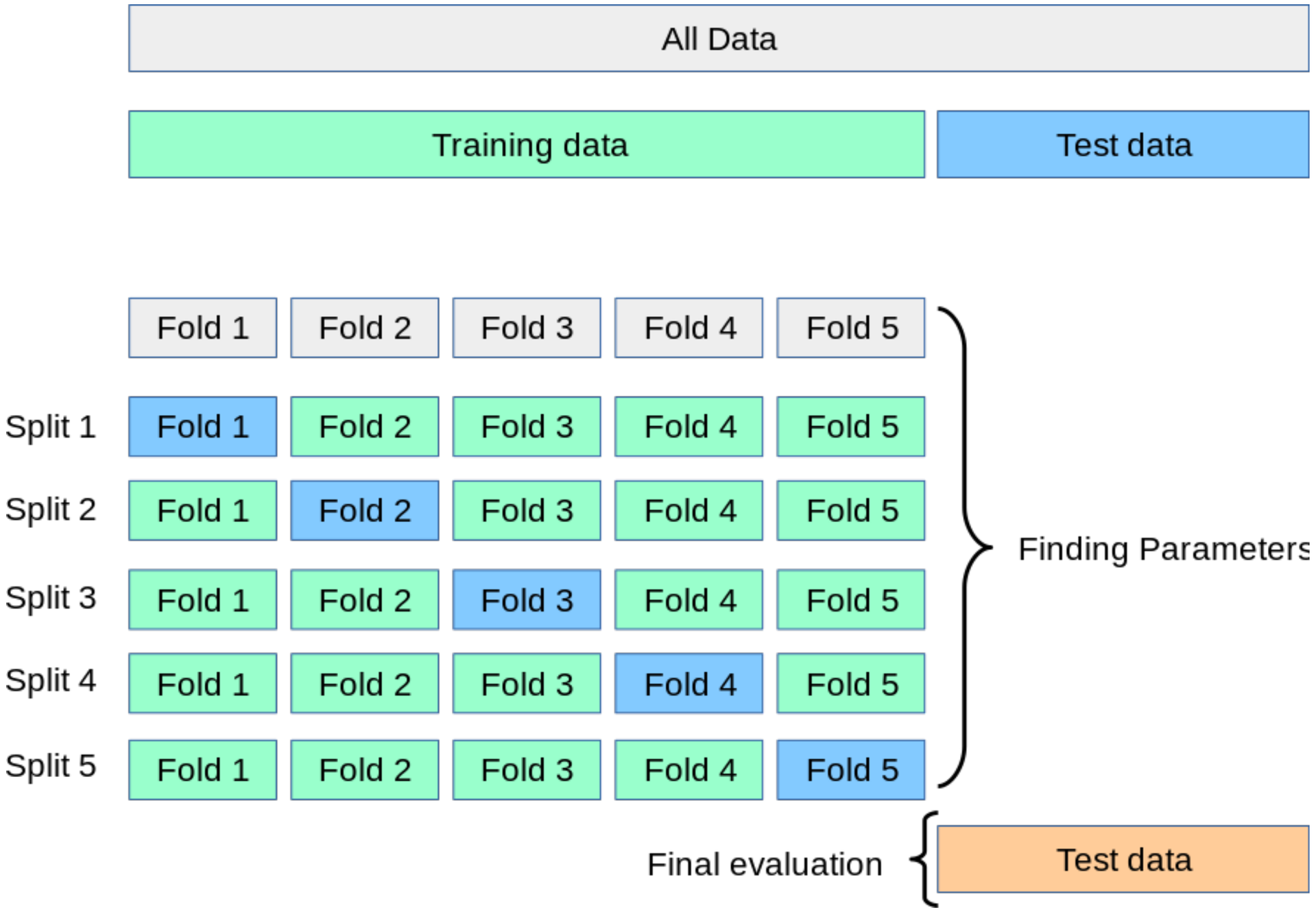
Rééchantillonnage

Il existe plusieurs méthodes de rééchantillonnage:

- Validation croisée
- Bootstrap
- Leave-one-out
- …

Nous allons utiliser la validation croisée.

Validation croisée



Validation croisée

```
1  folds <- vfold_cv(train_data, v = 5)
2  folds
```

```
#  5-fold cross-validation
# A tibble: 5 × 2
  splits            id
  <list>            <chr>
1 <split [600/150]> Fold1
2 <split [600/150]> Fold2
3 <split [600/150]> Fold3
4 <split [600/150]> Fold4
5 <split [600/150]> Fold5
```

Rééchantillonnage

Nous pouvons alors entraîner notre modèle sur les différents *folds*.

```
1  cv_fit <- lr_mod %>%
2    fit_resamples(arr_delay ~ .,
3                  resamples = folds)
4
5  collect_metrics(cv_fit)
```

```
# A tibble: 3 × 6
  .metric     .estimator  mean     n std_err .config
  <chr>       <chr>      <dbl> <int>   <dbl> <chr>
1 accuracy    binary     0.816     5  0.0185 pre0_mod0_post0
2 brier_class binary     0.156     5  0.0237 pre0_mod0_post0
3 roc_auc     binary     0.637     5  0.0338 pre0_mod0_post0
```

Nous voyons que les performances sont assez similaires à celles obtenues avec les données de test !

Détails dans les métriques

```
1 collect_metrics(cv_fit, summarize = FALSE)
```

```
# A tibble: 15 × 5
   id    .metric     .estimator .estimate .config
   <chr> <chr>       <chr>          <dbl> <chr>
 1 Fold1 accuracy    binary         0.813 pre0_mod0_post0
 2 Fold1 roc_auc     binary         0.753 pre0_mod0_post0
 3 Fold1 brier_class binary         0.131 pre0_mod0_post0
 4 Fold2 accuracy    binary         0.753 pre0_mod0_post0
 5 Fold2 roc_auc     binary         0.546 pre0_mod0_post0
 6 Fold2 brier_class binary         0.247 pre0_mod0_post0
 7 Fold3 accuracy    binary         0.807 pre0_mod0_post0
 8 Fold3 roc_auc     binary         0.645 pre0_mod0_post0
 9 Fold3 brier_class binary         0.160 pre0_mod0_post0
10 Fold4 accuracy    binary         0.853 pre0_mod0_post0
11 Fold4 roc_auc     binary         0.633 pre0_mod0_post0
12 Fold4 brier_class binary         0.120 pre0_mod0_post0
13 Fold5 accuracy    binary         0.853 pre0_mod0_post0
14 Fold5 roc_auc     binary         0.606 pre0_mod0_post0
15 Fold5 brier_class binary         0.124 pre0_mod0_post0
```

Détails dans les métriques

Fold	Accuracy	ROC AUC	Brier Class
Fold1	0.813	0.753	0.131
Fold2	0.753	0.546	0.247
Fold3	0.807	0.645	0.160
Fold4	0.853	0.633	0.120
Fold5	0.853	0.606	0.124

Références