



Deep learning based Feature Selection Study

Sanghyuck Lee

2021. 07 06.

Outline

- Deep Learning based Feature Selection study
- 중견 연구 과제
- 갑상선 연구 과제
- 산학 협력 과제

Outline of DeepPINK

Problem: Little Interpretability of DNN structure

Existing Works: Important Feature identification

Limitations of Existing Works: Noise Sensitivity

Main Idea: Reproducible Feature Selection by controlling False Discovery Rate

with Knockoff Framework

Knockoff Framework

- 1) Generate Knockoffs
- 2) Calculate Feature Statistics
- 3) Control FDR with Threshold T

Referenced by Candès et al. (2015)

Knockoff Framework: Generate Knockoffs

Knockoffs: Negative Control Role

Def 1. Model-X knockoff features for the family of random features $X = (X_1, \dots, X_p)^T$ are a new family of random features $\tilde{X} = (\tilde{X}_1, \dots, \tilde{X}_p)^T$ that satisfies two properties: (1) *pairwise exchangeability*: $(X, \tilde{X})_{\text{swap}(\mathcal{S})} \stackrel{d}{=} (X, \tilde{X})$ for any subset $\mathcal{S} \subset \{1, \dots, p\}$, where $\text{swap}(\mathcal{S})$ means swapping X_j and $\tilde{X}_j$ for each $j \in \mathcal{S}$ and $\stackrel{d}{=}$ denotes equal in distribution, and (2) $\tilde{X} \perp\!\!\!\perp Y | X$

More specifically, if $X \sim N(0, \Sigma)$ where Σ is the covariance matrix

$$\tilde{X} | X \sim N(X - \text{diag}\{s\} \Sigma^{-1} X, 2\text{diag}\{S\} - \text{diag}\{s\} \Sigma^{-1} \text{diag}\{s\})$$

Def 2. A variable X_j is said to be "*null*" if and only if Y is independent of X_j conditionally on the other variables $X_{-j} = \{X_1, \dots, X_p\} \setminus \{X_j\}$. The subset of null variables is denoted by $\mathcal{H}_0 \subset \{1, \dots, p\}$ and we call a variable X_j "*non null*" or relevant if $j \notin \mathcal{H}_0$.

Knockoff Framework: Calculate Feature Statistics

Feature statistics $W_j = w_j((X, \tilde{X}), y)$

Flip – sign property:

$$w_j((X, \tilde{X})_{\text{swap}(\mathcal{S})}, y) = \begin{cases} w_j((X, \tilde{X}), y), & j \notin \mathcal{S} \\ -w_j((X, \tilde{X}), y), & j \in \mathcal{S} \end{cases}$$

Knockoff Framework: Control FDR with Threshold T

By *Flip – sign* property, null statistic W_j are symmetric and that for any fixed threshold $t > 0$. False discovery proportion (FDP) can be estimated as follow:

$$\#\{j: W_j \leq -t\} \geq \#\{\text{null } j: W_j \leq -t\} \stackrel{d}{=} \#\{\text{null } j: W_j \geq t\}$$

$$FDP(t) = \frac{\#\{\text{null } j: W_j \leq -t\}}{\#\{j: W_j \geq t\}}$$

$$\widehat{FDP}(t) = \frac{\#\{j: W_j \leq -t\}}{\#\{j: W_j \geq t\}}$$

Knockoff Framework: Control FDR with Threshold T

$$\text{Threshold } T = \min \left\{ t \in W, \frac{\#\{j: W_j \leq -t\}}{\#\{j: W_j \geq t\}} \leq q \right\}$$

$$\text{Selected Features } \hat{S} = \{j: W_j \geq T\}$$

$$\text{Estimated } FDR = \mathbb{E} \left[\frac{\#\{j \in \hat{S} \cap \mathcal{H}_0\}}{\#\hat{S}^{1/q}} \right] \leq q$$

DeepPINK

- 1) Generate Knockoffs
- 2) Calculate Feature Statistics by **DeepPINK**
- 3) Control FDR with Threshold T

DeepPINK

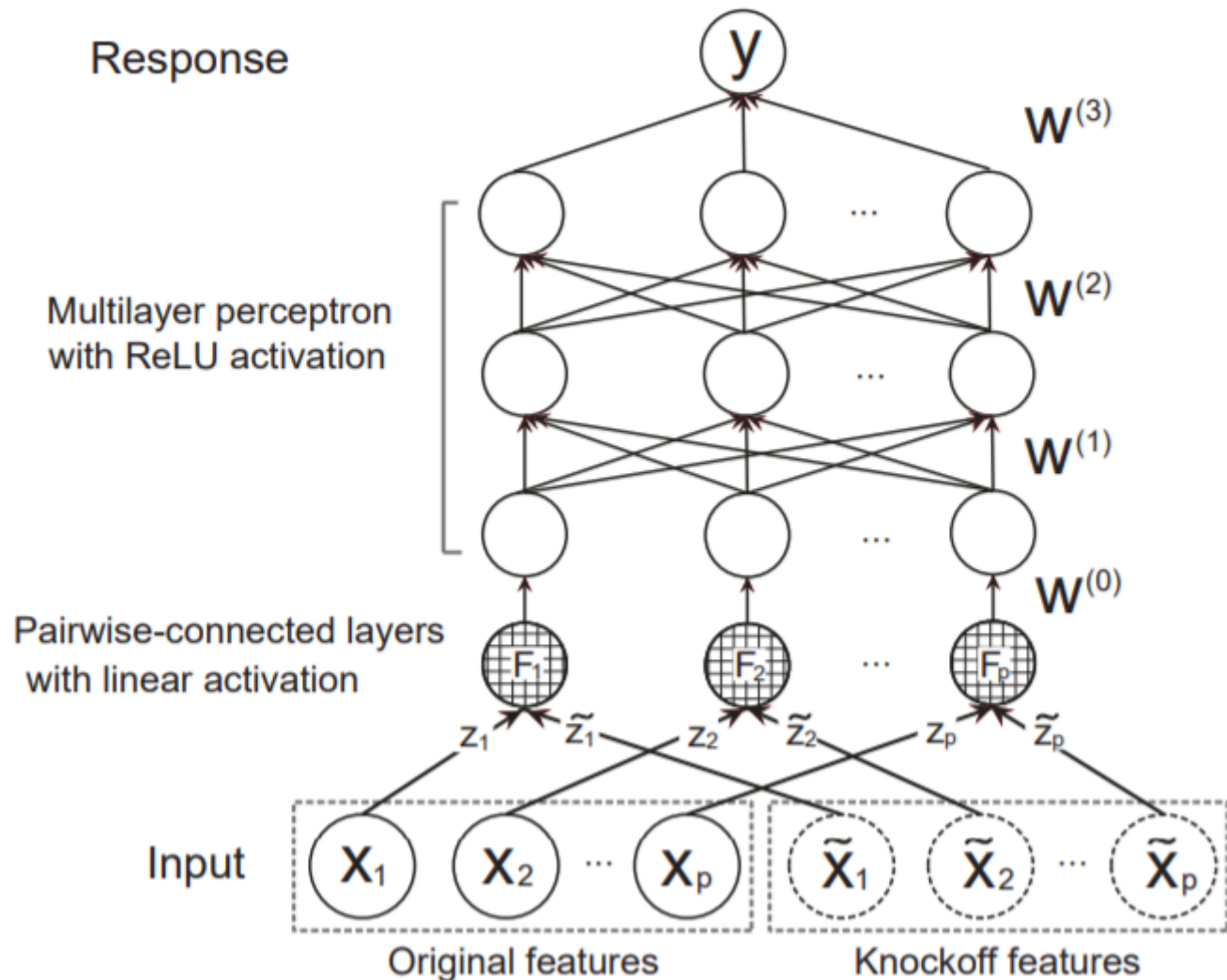
$$w = W^{(0)} \odot (W^{(1)}W^{(2)}W^{(3)})$$

where $\odot$ denotes the entry-wise matrix multiplication, and

$W^{(0)} \in \mathbb{R}^{p \times 1}$, $W^{(1)} \in \mathbb{R}^{p \times p}$, $W^{(2)} \in \mathbb{R}^{p \times p}$ and $W^{(3)} \in \mathbb{R}^{p \times 1}$

$$Z_j = z_j \times w_j \text{ and } \tilde{Z}_j = \tilde{z}_j \times w_j$$

$$W_j = Z_j^2 - \tilde{Z}_j^2$$



Other reviewers comments

<https://proceedings.neurips.cc/paper/2018/file/29daf9442f3c0b60642b14c081b4a556-Reviews.html>

- 기존 작업인 녹오프 필터를 신경망에 적용하는 것과 비슷한 것으로 보여, 독창성이 없음
- 신경망 내에서 특징 선택이란 최초 동기와, 중요도 측정을 위해 신경망을 사용하는 것 간에서 아직 차이가 있음
- 예측에 대한 결과를 보는 것이 좋을듯, 예를 들어, 에러가 제어된 특징셋을 사용해 신경망을 재훈련 해볼 수 있음
- 실세계 데이터에서의 성능 확인이 부족함
- 일반적인 적용이 가능할지
- 히든 레이어의 뉴런 수를 p 로 고정한 이유가 있을지
- 재현 가능성이 논문 후반부에서 강조되지 않음

Discussion

- 1) 단순히 특징 통계량을 딥러닝으로 사용한 것으로 보여, Novelty 관점에서 부족함
 - 2) 딥러닝 내에서의 특징 선택이라고 보기 힘들 수 있음
 - 3) 실세계 데이터 적용이나 예측 문제 등, 일반적인 응용에 대한 내용이 필요할 수 있음
- ⇒ How can it be applied in other deep learning models such as CNNs?

Paper Survey for Further Research

Lu et al. (2020) identify features within the deep learning structure, such as pixels that are important for prediction. You said decoy creation is related to the knockoff framework.

Tang et al. (2020) discover duplicate filters by mimicking feature maps for network pruning.

Xing et al. (2020) define mirrored features, compute statistics, and measure importance. This method shows good performance in terms of FDR and power.

Huang et al. (2020) use a pairwise connection structure between the FC layer and the decision layer to perform feature selection.

Song et al. (2019) performed feature selection on image datasets, but this is limited to when the positions of the objects are similar.

Paper Survey for Further Research

Lu et al. (2020) ICML 2021

Tang et al. (2020): NIPS 2020

Categories > Engineering & Computer Science > Artificial Intelligence ▾			
	Publication	<u>h5-index</u>	<u>h5-median</u>
1.	International Conference on Learning Representations	<u>203</u>	359
2.	Neural Information Processing Systems	<u>198</u>	377
3.	International Conference on Machine Learning (ICML)	<u>171</u>	309

중견 연구 제안서 작성

- 가제:

한글: 의료 분야내 주요 관심 구조물 세그멘테이션을 위한 사전훈련 최신 딥러닝 모델 개발

영문: Development of Pre-trained Deep Learning Model for Segmentation of Structures of Major Interest in the Medical Field

- 연구 목표:

본 과제에서는 몇몇 주요한 해부학적 구조에 대해서 세계 최고 수준의 성능을 갖는 사전학습된 세그멘테이션 모델을 배포함으로써, 다양한 의료분야 응용에 성공적으로 기여하는 것을 최종 목표로 하며, 이를 위해 다음과 같은 연차별 연구 목표를 설정하여 추진한다.

중견 연구 제안서 작성

1. 연구의 목표 (2페이지)

- 최종 연구 목표
- 연차별 목표 및 개요도
- 연차별 연구 개발 내용, 창의성 및 도전성, 추진 전략, 주요 결과물

2. 연구의 필요성 (2페이지)

- 4~5개로 나누어 총 2페이지

3. 연구자의 연구 수행역량 (1페이지)

- 연구실 스펙 및 노하우 등 자랑거리

중견 연구 제안서 작성

4. 연구의 추진 전략 및 방법 (연차별 1.5페이지)

- 연차별 상세 내용 및 주요 기술 설명 (그림 포함하여, 연차당 3가지 정도)

5. 연구결과의 중요성 (0.5페이지)

- 학문적/기술적 파급 효과
- 경제적/사회적 파급 효과

6. 연구기간 및 연구비 적정성 (0.5페이지)

- 추진일정 등
- 연구비 적정성

중견 연구 제안서 작성

- 진행 중인 내용:

53개 오픈 의료 데이터셋, 조사 진행 중(~7/16, 다음 주 금)

국내 의료 데이터셋 현황도 같이 진행

(실제 확보보다는, 연구의 실현 가능성 관련 내용 확보)

=> 연차별 내용을 작성하는 데, 기반이 될 수 있음

갑상선 연구

- 완료 현황

총 94,012 슬라이스 중 1,526 슬라이스 남음 (98.4% 완료)

산학 협력 프로젝트

- 제출 실적

- SW 제작 (산학 1), 국제학술대회 논문 1편 이상 게재 (산학 2), 국내 특허출원 1건 이상 (산학 2)

- 현재 진행 사항

- SW 등록: 진행중
- 특허 출원: 문서 아직 제출전
- 국제 컨퍼런스 논문 작업: 아성이 PlatCon 컨퍼런스 논문 작업

References

Candes, Emmanuel, et al. "Panning for gold: Model-X knockoffs for high-dimensional controlled variable selection." *arXiv preprint arXiv:1610.02351* (2016).

Huang, Yingkun, et al. "Supervised feature selection through Deep Neural Networks with pairwise connected structure." *Knowledge-Based Systems* 204 (2020): 106202.

Lu, Yang Young, et al. "DeepPINK: reproducible feature selection in deep neural networks." *arXiv preprint arXiv:1809.01185* (2018).

Lu, Yang, et al. "Robust Decoy-enhanced Saliency Maps." *arXiv preprint arXiv:2002.00526* (2020).

Song, Zixuan, and Jun Li. "Variable selection with false discovery rate control in deep neural networks." *arXiv preprint arXiv:1909.07561* (2019).

Tang, Yehui, et al. "Scop: Scientific control for reliable neural network pruning." *arXiv preprint arXiv:2010.10732* (2020).

Xing, Xin, et al. "NGM: Neural Gaussian Mirror for Controlled Feature Selection in Neural Networks." *2020 19th IEEE International Conference on Machine Learning and Applications (ICMLA)*. IEEE, 2020.