Module 3 - Analyse statistique avec R - Séance 6

DUBii 2019

Leslie REGAD

2019-02-27

Présentation générale des méthodes de classification

Arbres de décision

Random forest (Forêts aléatoires)

Présentation générale des méthodes de classification

Méthodes multivariées

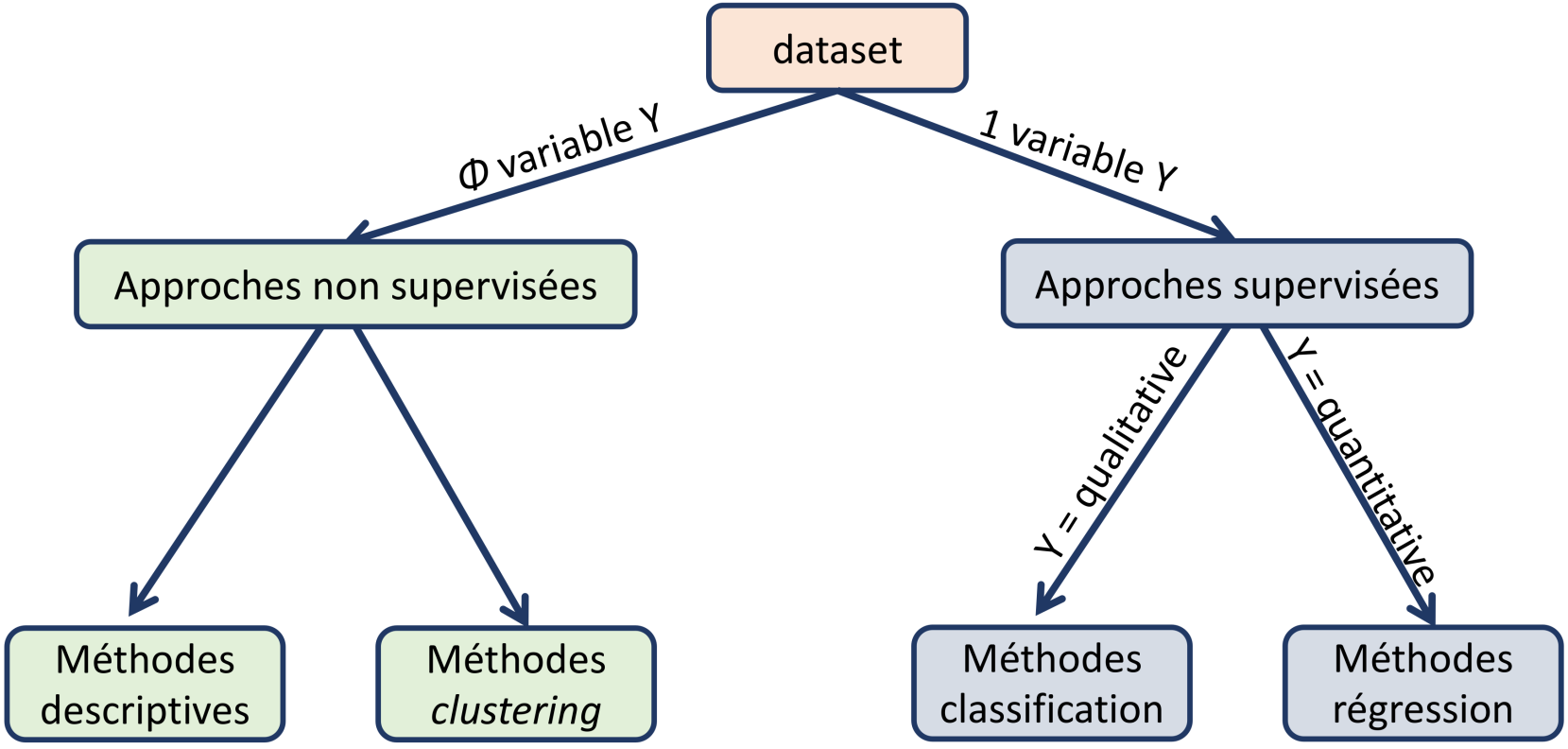


Figure 1:

Prédire la variété des iris en fonction de leur description

- Travaille avec les données d'iris

```
str(iris)
```

```
'data.frame':   150 obs. of  5 variables:
 $ Sepal.Length: num  5.1 4.9 4.7 4.6 5 5.4 4.6 5 4.4 4.9 
 $ Sepal.Width : num  3.5 3 3.2 3.1 3.6 3.9 3.4 3.4 2.9 3.1
 $ Petal.Length: num  1.4 1.4 1.3 1.5 1.4 1.7 1.4 1.5 1.4 1
 $ Petal.Width : num  0.2 0.2 0.2 0.2 0.2 0.4 0.3 0.2 0.2 0
 $ Species     : Factor w/ 3 levels "setosa","versicolor",
```

- Variable à prédire (Y) : `Species`
- Variables descriptives (X_i) : `Sepal.Length`, `Sepal.Width`, `Petal.Length` et 'Petal.Width

Construction du modèle de prédiction

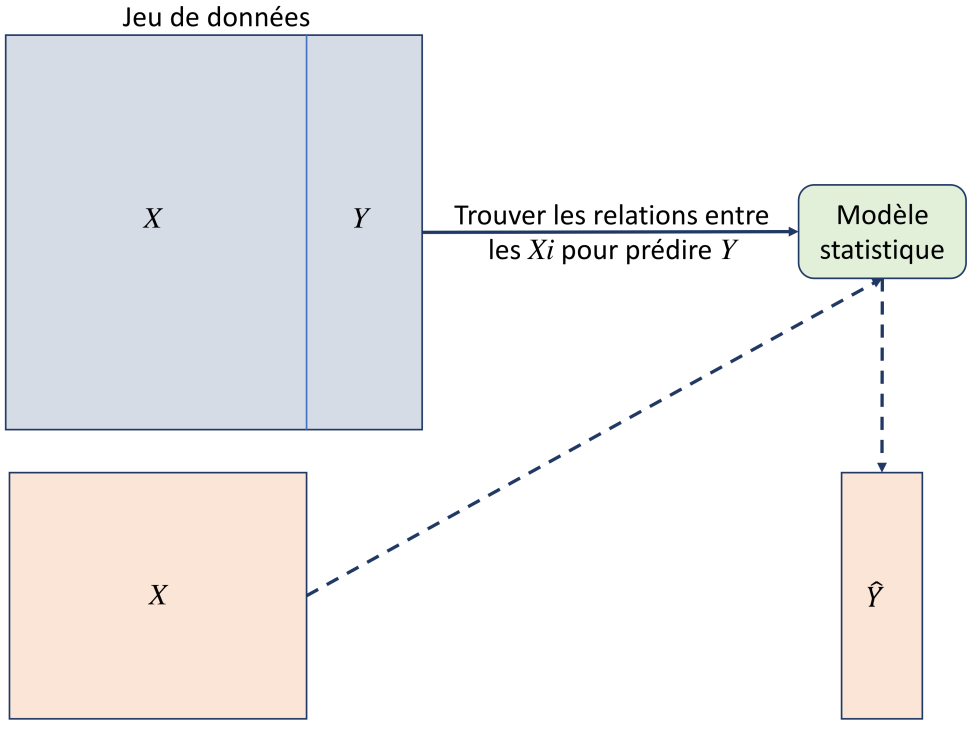


Figure 2:

Propriétés d'un bon modèle de prédiction

- Bonnes performances
- Reproductible sur de nouvelles données
- Simple
- Facile à interpréter

Protocole général

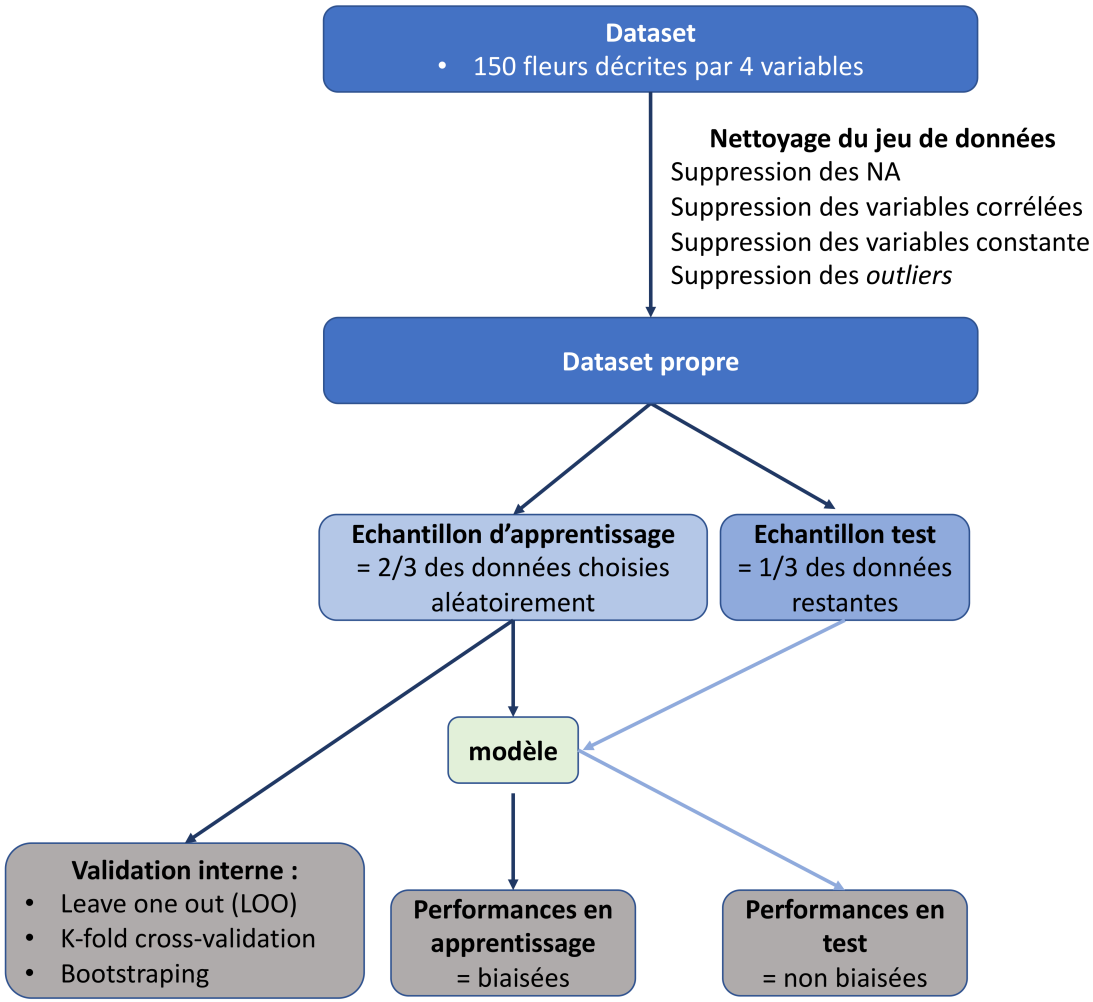


Figure 3:

Calcul des performances d'un modèle

- prédiction de deux classes :
  - [performances d'un modèle] (https://en.wikipedia.org/wiki/Sensitivity_and_specificity)
- prédiction de plus de deux classes :
  - accuracy

Méthodes

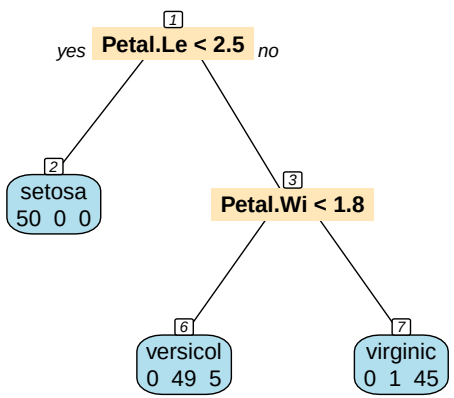
- Arbres de décision : CART (Classification and Regression Trees)
- Forêts aléatoires
- *Support Vector Machines* (SVM)
- Réseaux de neurones

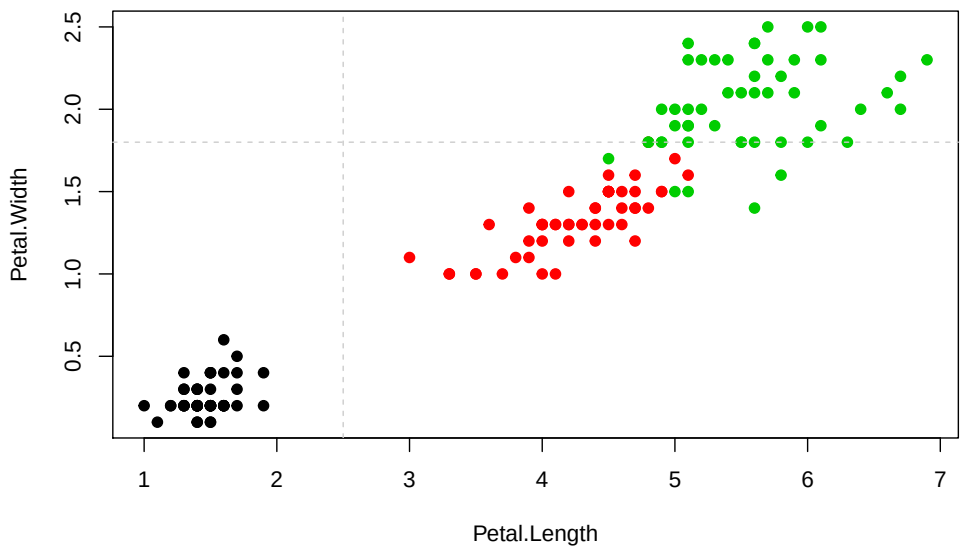
Arbres de décision

Qu'est qu'un arbre de décision

Classification par une série de tests

- Diviser récursivement les individus à l'aide de tests définis à partir des variables jusqu'à ce qu'on obtienne des sous-ensembles d'individus n'appartenant qu'à une seule classe
- partitionnement de l'espace des données en sous-régions homogènes en termes de classes





Création des échantillons d'apprentissage et de test

- Echantillon d'apprentissage : 2/3 des individus choisis aléatoirement

```
ind.app <- sample(1:nrow(iris), size = nrow(iris)*2/3)
mat.app <- iris[ind.app,]
summary(mat.app)
```

```
  Sepal.Length    Sepal.Width     Petal.Length    Petal.Widt
 Min.   :4.300   Min.   :2.00   Min.   :1.000   Min.   :0.1
 1st Qu.:5.100   1st Qu.:2.80   1st Qu.:1.500   1st Qu.:0.3
 Median :5.700   Median :3.00   Median :4.200   Median :1.3
 Mean   :5.846   Mean   :3.08   Mean   :3.686   Mean   :1.1
 3rd Qu.:6.400   3rd Qu.:3.40   3rd Qu.:5.025   3rd Qu.:1.8
 Max.   :7.900   Max.   :4.40   Max.   :6.900   Max.   :2.5
```

Création des échantillons d'apprentissage et de test

- Echantillon test : le 1/3 des individus restant

```
mat.test <- iris[-ind.app,]
summary(mat.test)
```

```
  Sepal.Length    Sepal.Width     Petal.Length    Petal.Wi
 Min.   :4.600   Min.   :2.200   Min.   :1.200   Min.   :0
 1st Qu.:5.100   1st Qu.:2.700   1st Qu.:1.700   1st Qu.:0
 Median :5.850   Median :3.000   Median :4.500   Median :1
 Mean   :5.838   Mean   :3.012   Mean   :3.902   Mean   :1
 3rd Qu.:6.375   3rd Qu.:3.275   3rd Qu.:5.175   3rd Qu.:1
 Max.   :7.700   Max.   :4.100   Max.   :6.100   Max.   :2
```

Validation des échantillons d'apprentissage et test

- Création d'un vecteur couleur :
  - en rouge les individus appartenant au jeu d'apprentissage
  - en vert les individus appartenant au jeu test

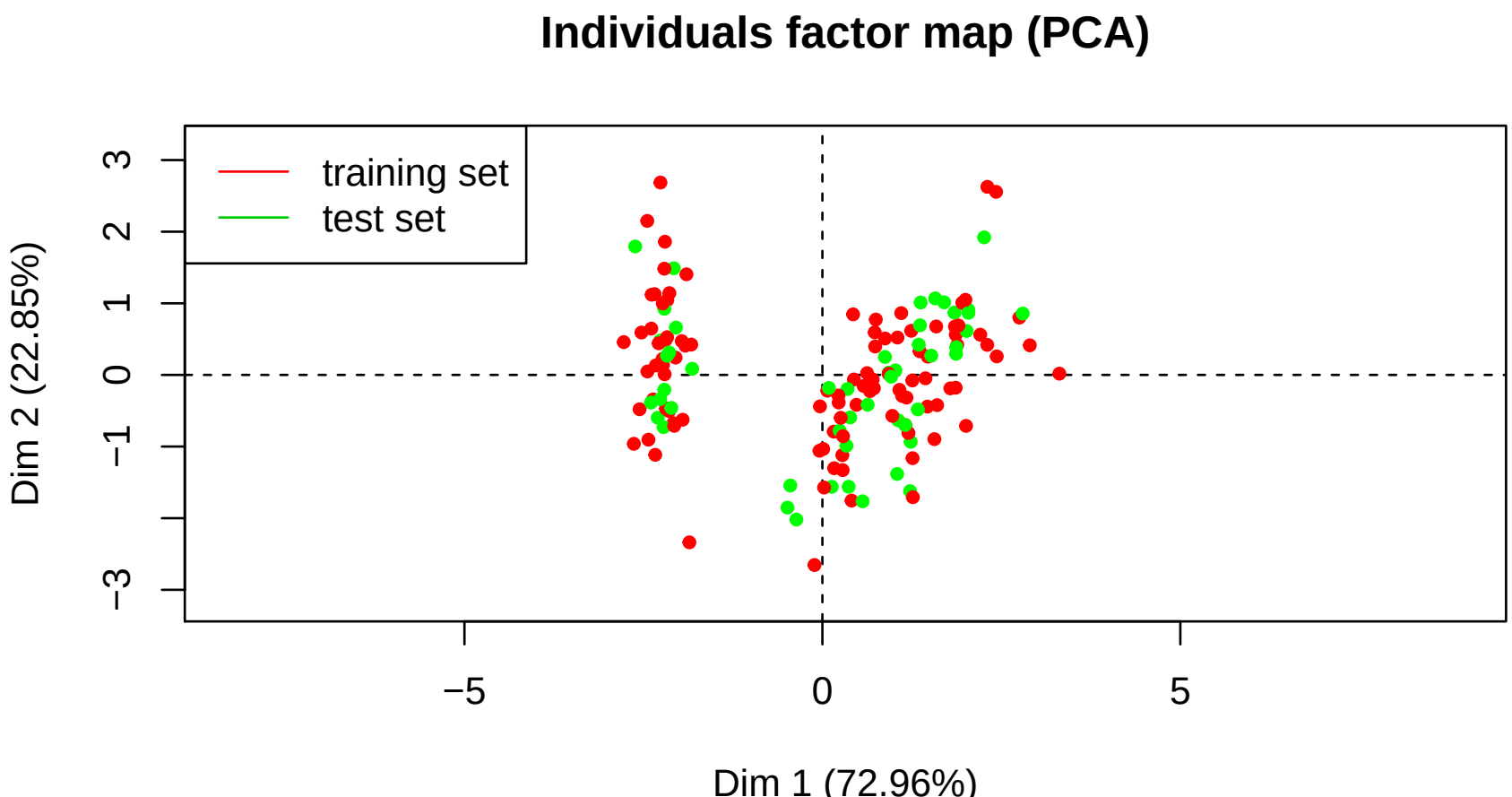
```
vcol.set <- rep("green", length <- nrow(iris))
vcol.set[ind.app] <- "red"
```

- calcul de l'ACP en utilisant les 4 descripteurs

```
pca.res <- PCA(iris[,-5], graph = FALSE)
```

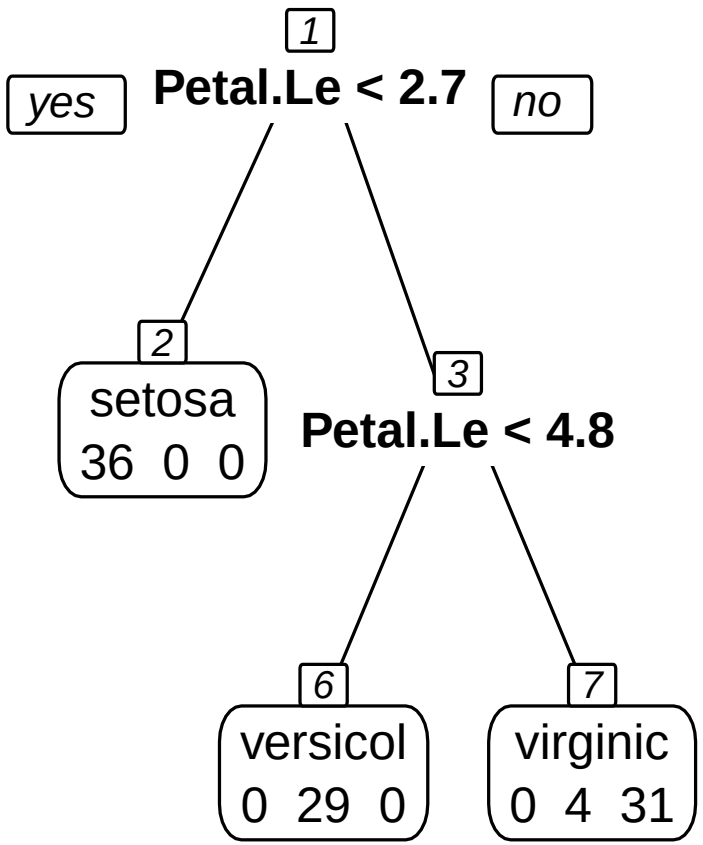
Validation des échantillons d'apprentissage et test

```
plot(pca.res,choix="ind",col.ind=vcol.set,label="none")
legend("topleft",c("training set","test set"),col=c(2,3),lt
```



Apprentissage du modèle sur l'échantillon d'apprentissage

```
rpart.fit<-rpart(Species ~ . , data = mat.app)
prp(rpart.fit, type=0, extra=1, nn=TRUE)
```



Evaluation du modèle sur le jeu d'apprentissage

- Table de confusion

```
pred.app<-predict(rpart.fit,newdata=mat.app,type="class")
(tc <- table(mat.app[,"Species"],pred.app))
```

```
            pred.app
             setosa versicolor virginica
  setosa         36          0         0
  versicolor      0         29         4
  virginica       0          0        31
```

- *Accuracy* (taux de bien prédit) $= \frac{VN+VP}{VN+VP+FN+FP}$

```
(acc <- sum(diag(tc))/sum(tc))
```

```
[1] 0.96
```

Evaluation du modèle sur le jeu test

- Table de confusion

```
pred.test<-predict(rpart.fit,newdata=mat.test,type="class")
(tc<-table(mat.test[,"Species"], pred.test))
```

```
            pred.test
             setosa versicolor virginica
  setosa         14          0         0
  versicolor      0         15         2
  virginica       0          1        18
```

- *Accuracy*

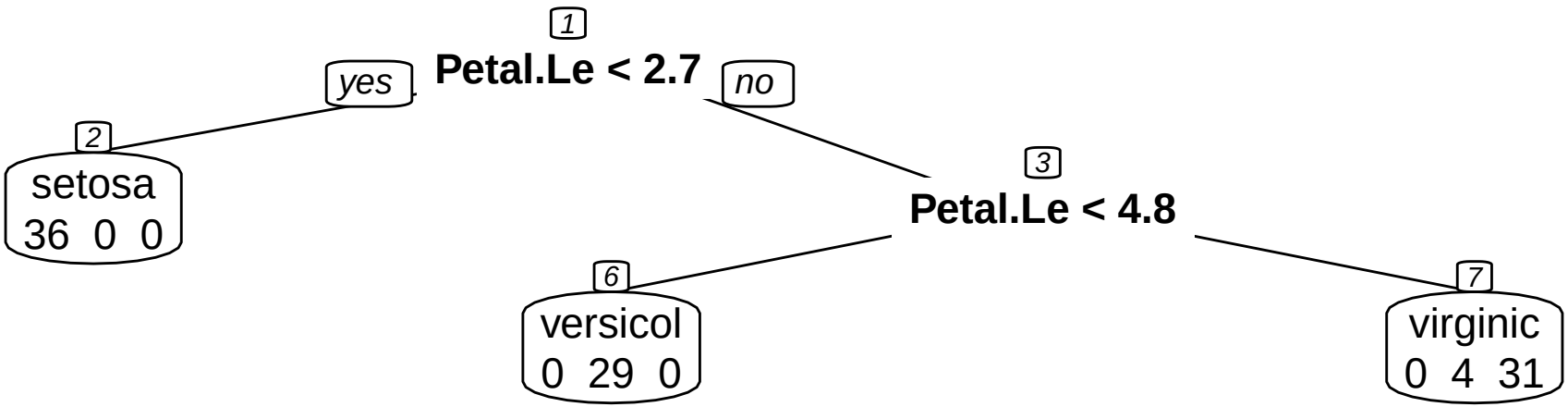
```
(acc <- sum(diag(tc))/sum(tc))
```

```
[1] 0.94
```

Etude de l'importance des descripteurs

- Deux descripteurs `Petal.Length` et `Petal.Width` sont nécéssaires pour prédire l'espèce.

```
prp(rpart.fit,type=0,extra=1,nn=TRUE)
```



→ Sélection de variables souvent drastique

Différents algorithmes d'arbres de décision

- ID3 (Inductive Decision Tree, Quinlan 1979)
  - arbres « de discrimination » (variables uniquement qualitatives)
  - critère d'hétérogénéité = entropie
- C4.5 (Quinlan 1993)
  - amélioration des ID3
  - gestion des valeurs manquantes
- CART (Classification And Regression Tree, Breiman et al. 1984)
  - critère d'hétérogénéité = Gini

Avantages et inconvénients des arbres de décision

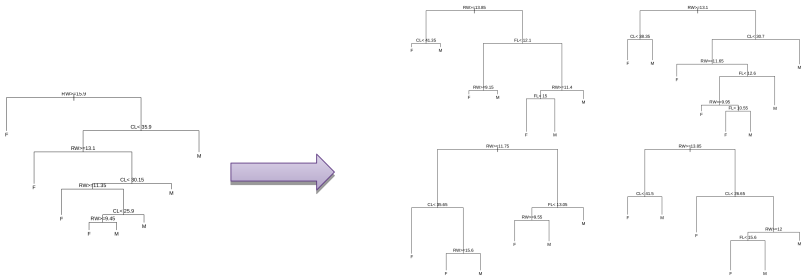
- Avantages :
  - Pas besoin de normaliser les données
  - La variable à prédire peut être muti-classes
  - Facilité d'interprétation
  - Sélection de variables
- Inconvénients :
  - Sensibles au bruit et points abérrants
  - Sélection des variables drastique
  - Sur-apprentissage

Random forest (Forêts aléatoires)

Random forest : Principe

1 arbre

1 forêt = un grand nombre d'arbres



- Apprendre un grand nombre d'arbres permettant de voter pour la classe la plus populaire
- Double randomisation sur les variables et sur les individus

Construction d'une forêt aléatoire

- But : prédire l'espèce des iris
- Les données : échantillon d'apprentissage :
  - p = nombre de variables ($p = 4$)
  - n = nombre de fleurs ($n = 100$)

Construction du $k^{ème}$ arbre - randomisation sur les individus

Double randomisation sur les individus et sur les variables

- Création d'un **échantillon bootstrap** contenant n individus = **tirage aléatoire avec remise** de n individus dans le jeu d'apprentissage

```
ech.B1<-sample(1:nrow(mat.app),size=nrow(mat.app),
               replace=T)
length(ech.B1) ; sort(ech.B1)[1:15]
```

```
[1] 100
```

```
 [1]  2  3  5  5  6  6  7  8  8  9 10 10 10 11 11
```

Construction du $k^{ème}$ arbre - randomisation sur les individus

- Génération de deux échantillons différents à partir de la matrice d'apprentissage :
  - échantillon de bootstrap → Construction d'un arbre
  - échantillon OOB (Out-Of-Bag) : contient les individus qui ne sont pas présents dans l'échantillon bootstrap → Calcul de l'erreur du modèle

```
ech.OOB1 <- setdiff(1:nrow(mat.app), ech.B1)
head(ech.OOB1)
```

```
[1]  1  4 13 14 19 20
```

- Chaque arbre de la forêt va être construit sur un jeu bootstrap différent

Construction du $k^{ème}$ arbre - randomisation sur les variables

Double randomisation sur les individus et sur les variables

- Pour la construction d'un noeud de l'arbre : Sélectionne aléatoirement q variables parmi les p

```
nbr.var <- 2
list.var <- colnames(iris)[-5]
var.sel <- sample(list.var, size = nbr.var)
var.sel
```

```
[1] "Petal.Width" "Sepal.Width"
```

Construction du $k^{ème}$ arbre - randomisation sur les variables

- Le 1er noeud du $k^{ème}$ arbre se construit avec le jeu suivant :

```
random.data1 <- mat.app[ech.B1, var.sel]
head(random.data1)
```

```
      Petal.Width Sepal.Width
116           2.3         3.2
18            0.3         3.5
106           2.1         3.0
119           2.3         2.6
116.1         2.3         3.2
62            1.5         3.0
```

- pour les noeud suivant : sélectionne à chaque fois q variables
- nouvel arbre : création d'un nouvel échantillon bootstrap

Deux paramètres à définir

- **Nombre d'arbres** dans la forêt (*ntree*)
  - **assez grand** pour que chaque observation soit prédite suffisamment de fois
- **Nombre de variables tirées aléatoirement** (*mtry*) :
  - permet de gérer la corrélation et la force de la forêt :
    - **Corrélation** : ressemblance entre les arbres
    - **Force** : capacité de chaque arbre à ne pas faire d'erreur
  - idéal : Faible corrélation et une grande force
  - quand *mtry* augmente : la corrélation et la force augmente $\rightarrow$ Trouver un juste milieu.

Performance du modèle

- Calcul de la performance non biaisée du modèle
  $\rightarrow$: utilisation des données des échantillons OOB
- Calcul des performances sur l'échantillon d'apprentissage
- Calcul des performances sur l'échantillon test

Prédiction de l'espèce d'iris - Construction du modèle

```
library(randomForest)
rf.fit<-randomForest(Species~.,data=mat.app,mtree=500,
                     mtry=2,importance=TRUE)
rf.fit$ntree
```

```
[1] 500
```

```
rf.fit$mtry
```

```
[1] 2
```

Prédiction de l'espèce d'iris - Estimation des performances du modèle

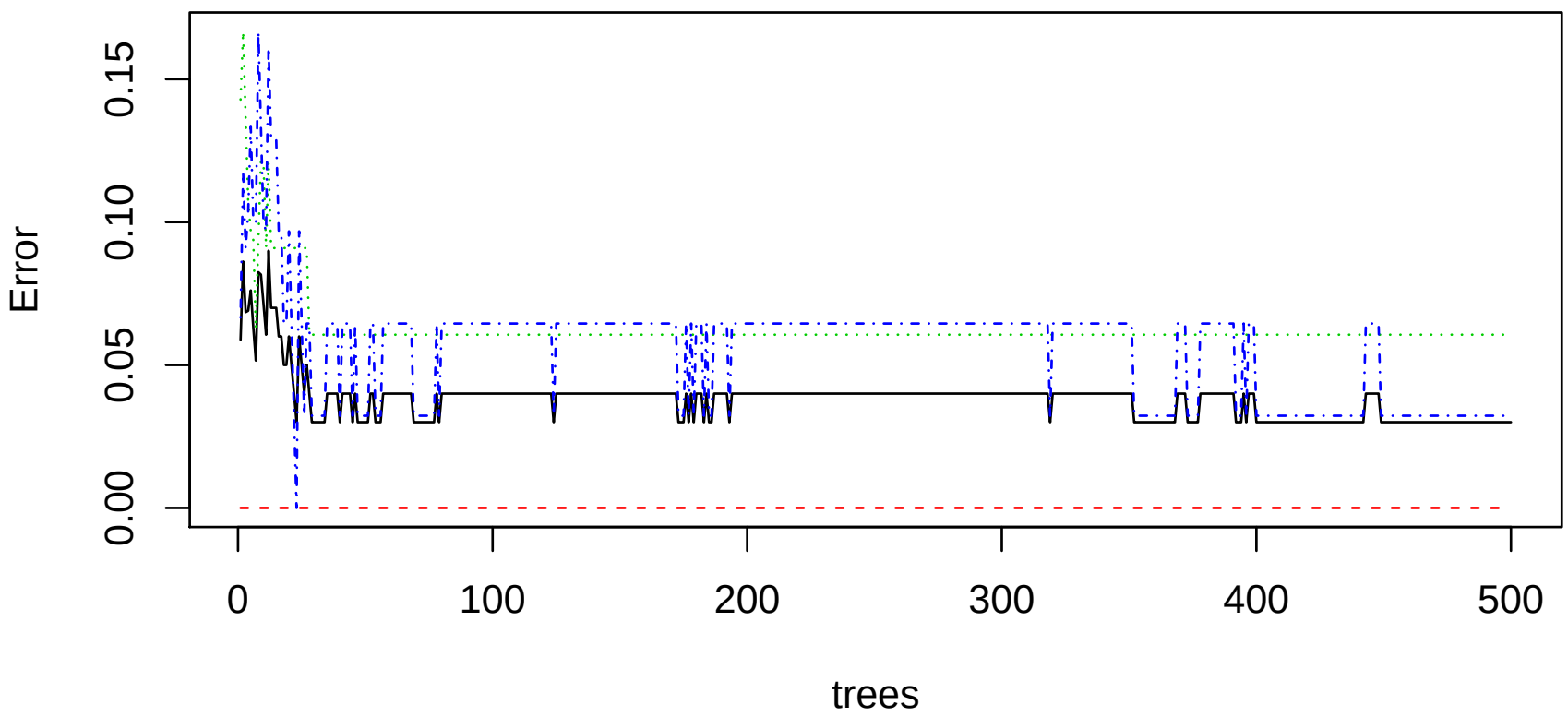
- sur les jeux OOB

```
rf.fit$confusion
```

	setosa	versicolor	virginica	class.error
setosa	36	0	0	0.00000000
versicolor	0	31	2	0.06060606
virginica	0	1	30	0.03225806

Prédiction de l'espèce d'iris - Estimation des performances du modèle

```
plot(rf.fit, main="")
```



Etude de l'importance des variables

- Random forest : aucune visualisation du modèle
- calcul de l'importance de chaque variable dans le modèle par permutations

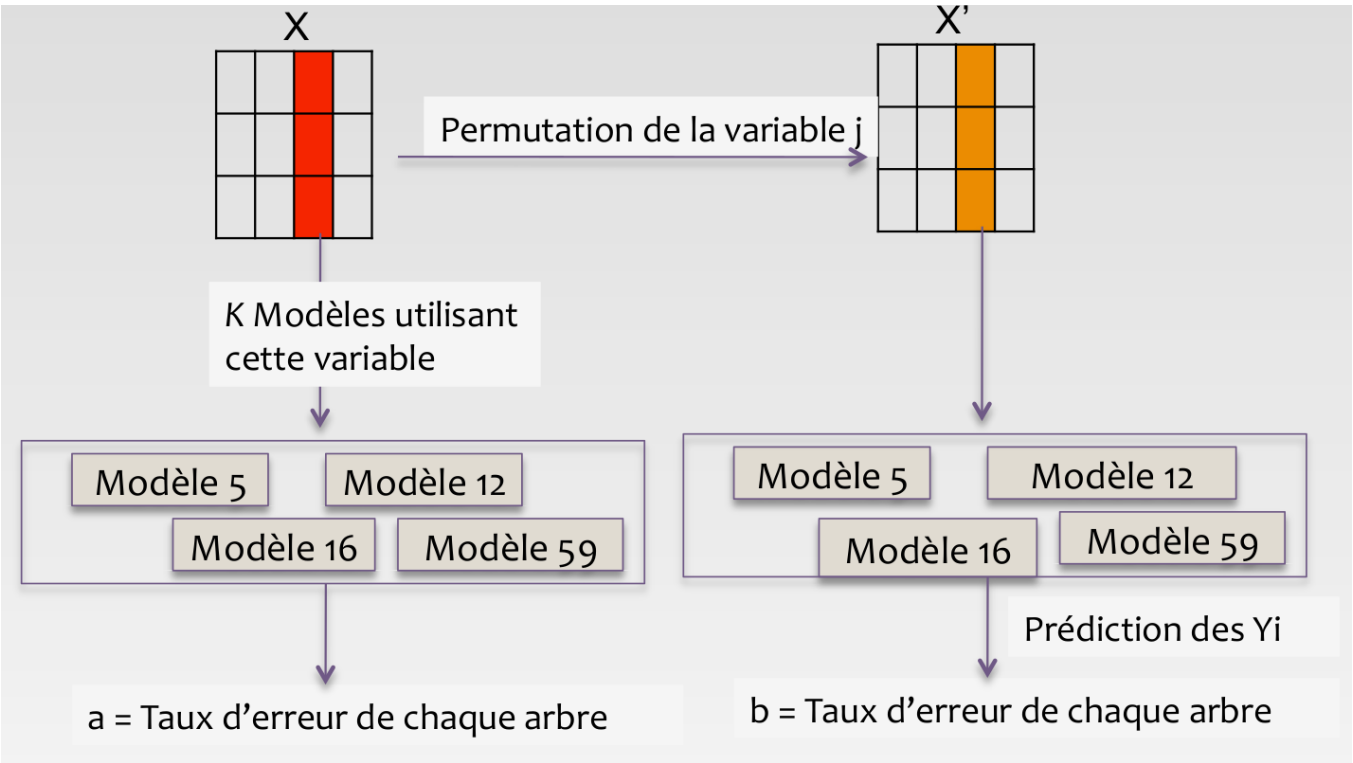


Figure 4:

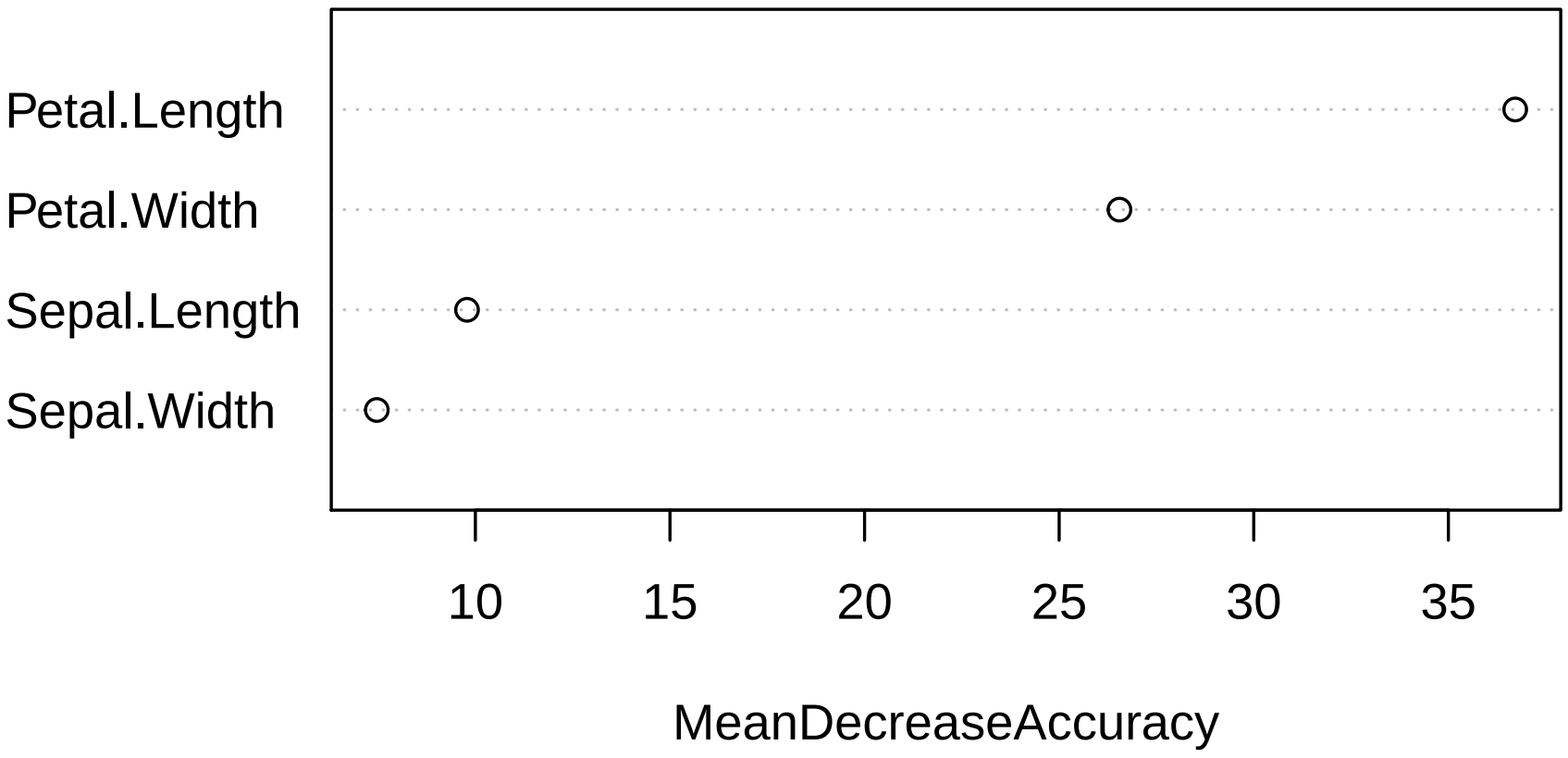
Etude de l'importance des variables

- Importance de la variable j dans l'arbre i : $Imp(j,i) = b - a$
- Importance globale de la variable j = moyenne des importances sur les k arbres impliquant la variable j

$$Imp(j) = \sum_{i=1}^{k} Imp(j,i)$$

Etude de l'importance des variables

```
varImpPlot(rf.fit, main="", type=1)
```



Avantage et inconvénients des random forests

- Avantages :
  - méthodes très puissantes
  - permet de gérer des gros jeux de données
  - quantification de l'importance des descripteurs
- Inconvénients :
  - Risque de sur-ajustement
  - Mauvaises performances si beaucoup de variables bruits
  - Modèle plus complexe et moins interprétable que les arbres classiques
  - Paramètres à optimiser

Merci de votre attention !!!

- Prédiction du type de tumeurs sur les données
  - apprentissage d'un modèle de CART
  - apprentissage d'une forêt aléatoire