

Classification supervisée

L. Rouvière

laurent.rouviere@univ-rennes2.fr

6 janvier 2021

Présentation

- **Objectifs** : comprendre les aspects **théoriques** et **pratiques** des algorithmes de référence en apprentissage supervisé.
- **Pré-requis** : théorie des probabilités, modèle linéaire, analyses factorielles (ACP/ACM). R, niveau avancé.
- **Enseignant** : Laurent Rouvière laurent.rouviere@univ-rennes2.fr
 - **Recherche** : statistique non paramétrique, apprentissage statistique
 - **Enseignements** : statistique et probabilités (Université, école d'ingénieur et de commerce, formation continue).
 - **Consulting** : énergie, finance, marketing, sport.

- 14h CM + 6h ou 8h TP + 3 ou 4h évaluation.
- Matériel :
 - slides
 - tutoriel R : exercices et compléments de cours à travailler seul
 - disponible à l'url https://lrouviere.github.io/classif_sup/
- 4 parties :
 1. Cadre mathématique de la classification supervisée : 3h.
 2. Analyse discriminante linéaire : 4h.
 3. Arbres : 3h.
 4. Introduction aux forêts aléatoires : 2h.

Première partie I

Le problème de la classification supervisée

Quelques exemples

Cadre mathématique

L'erreur de classification

La courbe ROC

Un exemple : l'algorithme des plus proches voisins

Estimation de l'erreur

Le sur-apprentissage

Bibliographie

Quelques exemples

Cadre mathématique

L'erreur de classification

La courbe ROC

Un exemple : l'algorithme des plus proches voisins

Estimation de l'erreur

Le sur-apprentissage

Bibliographie

Prévision de pics d'ozone

- On a mesuré pendant 366 jours la **concentration maximale** en ozone (V4) ;
- On dispose également d'autres **variables météorologiques** (température, nébulosité, vent...).

```
> Ozone[1:5,]  
V1 V2 V3 V4 V5 V6 V7 V8 V9 V10 V11 V12 V13  
1 1 1 4 3 5480 8 20 NA NA 5000 -15 30.56 200  
2 1 2 5 3 5660 6 NA 38 NA NA -14 NA 300  
3 1 3 6 3 5710 4 28 40 NA 2693 -25 47.66 250  
4 1 4 7 5 5700 3 37 45 NA 590 -24 55.04 100  
5 1 5 1 5 5760 3 51 54 45.32 1450 25 57.02 60
```

Prévision de pics d'ozone

- On a mesuré pendant 366 jours la **concentration maximale** en ozone (V4) ;
- On dispose également d'autres **variables météorologiques** (température, nébulosité, vent...).

```
> Ozone[1:5,]  
V1 V2 V3 V4 V5 V6 V7 V8 V9 V10 V11 V12 V13  
1 1 1 4 3 5480 8 20 NA NA 5000 -15 30.56 200  
2 1 2 5 3 5660 6 NA 38 NA NA -14 NA 300  
3 1 3 6 3 5710 4 28 40 NA 2693 -25 47.66 250  
4 1 4 7 5 5700 3 37 45 NA 590 -24 55.04 100  
5 1 5 1 5 5760 3 51 54 45.32 1450 25 57.02 60
```

Question

Peut-on **prédire** la concentration maximale en ozone du **lendemain** à partir des prévisions météorologiques ?

Détection de clients à risque

- Une chaîne de magasins a mis en place une carte de crédit.
- Elle dispose d'un **historique de 145 clients** dont 40 ont connu des défauts de paiement.
- Elle connaît également d'**autres caractéristiques** sur ses clients (sexe, taux d'endettement, revenus mensuels, dépenses effectuées sur certaines gammes de produit...)

Détection de clients à risque

- Une chaîne de magasins a mis en place une carte de crédit.
- Elle dispose d'un **historique de 145 clients** dont 40 ont connu des défauts de paiement.
- Elle connaît également d'**autres caractéristiques** sur ses clients (sexe, taux d'endettement, revenus mensuels, dépenses effectuées sur certaines gammes de produit...)

Question

Comment **prédire** si un nouveau client connaîtra des défauts de paiement ?

Iris de Fisher

On a mesuré sur 150 iris de 3 espèces différentes (Setosa, Versicolor, Virginica) les quantités suivantes :

- Longueur et largeur des pétales ;
- Longueur et largeur des sépales.

```
> summary(iris)
  Sepal.Length   Sepal.Width   Petal.Length   Petal.Width   Species
Min.      :4.300   Min.      :2.000   Min.      :1.000   Min.      :0.100   setosa      :50
1st Qu.  :5.100   1st Qu.  :2.800   1st Qu.  :1.600   1st Qu.  :0.300   versicolor:50
Median   :5.800   Median   :3.000   Median   :4.350   Median   :1.300   virginica  :50
Mean     :5.843   Mean     :3.057   Mean     :3.758   Mean     :1.199
3rd Qu. :6.400   3rd Qu. :3.300   3rd Qu. :5.100   3rd Qu. :1.800
Max.     :7.900   Max.     :4.400   Max.     :6.900   Max.     :2.500
```

Iris de Fisher

On a mesuré sur 150 iris de 3 espèces différentes (Setosa, Versicolor, Virginica) les quantités suivantes :

- Longueur et largeur des pétales ;
- Longueur et largeur des sépales.

```
> summary(iris)
  Sepal.Length   Sepal.Width   Petal.Length   Petal.Width   Species
Min.    :4.300   Min.    :2.000   Min.    :1.000   Min.    :0.100   setosa    :50
1st Qu.:5.100   1st Qu.:2.800   1st Qu.:1.600   1st Qu.:0.300   versicolor:50
Median :5.800   Median :3.000   Median :4.350   Median :1.300   virginica :50
Mean   :5.843   Mean   :3.057   Mean   :3.758   Mean   :1.199
3rd Qu.:6.400   3rd Qu.:3.300   3rd Qu.:5.100   3rd Qu.:1.800
Max.   :7.900   Max.   :4.400   Max.   :6.900   Max.   :2.500
```

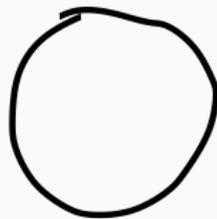
Question

Comment identifier l'espèce d'un iris à partir de ces 4 caractéristiques ?

Reconnaissance de l'écriture

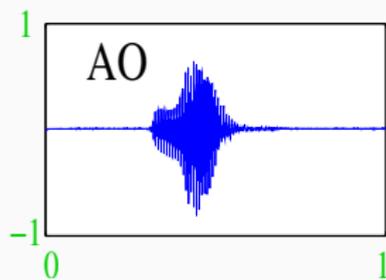
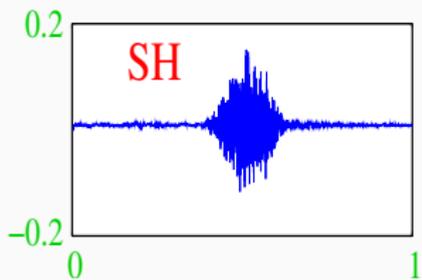
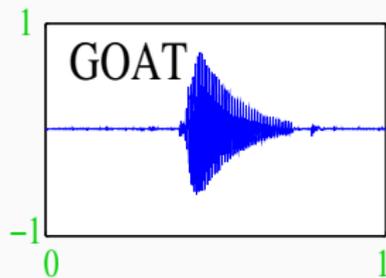
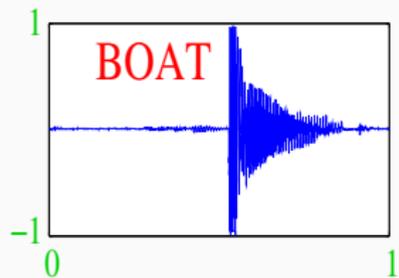
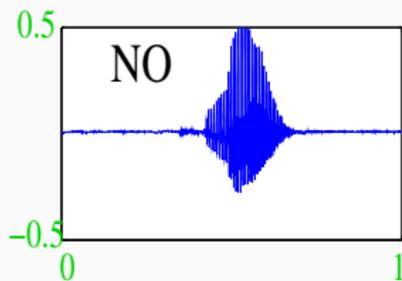
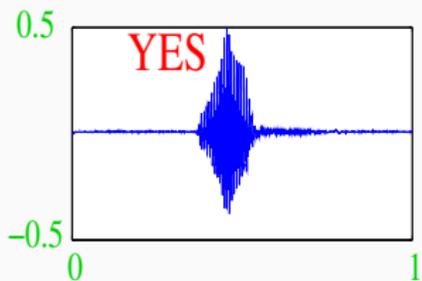
0	0	0	0	0
1	1	1	1	1
2	2	2	2	2
3	3	3	3	3
4	4	4	4	4
5	5	5	5	5
6	6	6	6	6
7	7	7	7	7
8	8	8	8	8
9	9	9	9	9

0	0	0	0	0
1	1	1	1	1
2	2	2	2	2
3	3	3	3	3
4	4	4	4	4
5	5	5	5	5
6	6	6	6	6
7	7	7	7	7
8	8	8	8	8
9	9	9	9	9



Qu'est-ce qui est écrit ? 0, 1, 2... ?

Reconnaissance de la parole



Détection de spam

- Sur 4 601 mails, on a pu identifier 1813 spams.
- On a également mesuré sur chacun de ces mails la présence ou absence de 57 mots.

```
> spam[1:5,c(1:8,58)]
  make address  all num3d  our over remove internet type
1 0.00    0.64 0.64      0 0.32 0.00   0.00      0.00 spam
2 0.21    0.28 0.50      0 0.14 0.28   0.21      0.07 spam
3 0.06    0.00 0.71      0 1.23 0.19   0.19      0.12 spam
4 0.00    0.00 0.00      0 0.63 0.00   0.31      0.63 spam
5 0.00    0.00 0.00      0 0.63 0.00   0.31      0.63 spam
```

Détection de spam

- Sur 4 601 mails, on a pu identifier 1813 spams.
- On a également mesuré sur chacun de ces mails la présence ou absence de 57 mots.

```
> spam[1:5,c(1:8,58)]
  make address  all num3d  our over remove internet type
1 0.00    0.64 0.64      0 0.32 0.00   0.00    0.00 spam
2 0.21    0.28 0.50      0 0.14 0.28   0.21    0.07 spam
3 0.06    0.00 0.71      0 1.23 0.19   0.19    0.12 spam
4 0.00    0.00 0.00      0 0.63 0.00   0.31    0.63 spam
5 0.00    0.00 0.00      0 0.63 0.00   0.31    0.63 spam
```

Question

Peut-on construire à partir de ces données une méthode de **détection automatique** de spam ?

Variable à expliquer et variables explicatives

- Les exemples précédents appartiennent à une **même famille de problèmes**.
- Il s'agit d'**expliquer une variable** (notée Y) par p variables (notées X_1, \dots, X_p).

Variable à expliquer et variables explicatives

- Les exemples précédents appartiennent à une **même famille de problèmes**.
- Il s'agit d'**expliquer une variable** (notée Y) par p variables (notées X_1, \dots, X_p).

Y	X
maxO3	vent, pluie, maxO3v...
bon/mauvais payeur	sexe, revenus...
espèces de l'iris	longueur et largeur des pétales et sépales
spam ou pas spam	présence/absence de certains mots
Chiffre	Images
Mot	Courbes

Des problématiques diverses

- **Apprentissage supervisé** : expliquer/prédire une sortie $y \in \mathcal{Y}$ à partir d'entrées $x \in \mathcal{X}$;
- **Apprentissage non supervisé** : établir une typologie des observations ;
- **Règles d'association** : mesurer le lien entre différents produits ;
- **Systèmes de recommandation** : identifier les produits susceptibles d'intéresser des consommateurs.

Des problématiques diverses

- **Apprentissage supervisé** : expliquer/prédire une sortie $y \in \mathcal{Y}$ à partir d'entrées $x \in \mathcal{X}$;
- **Apprentissage non supervisé** : établir une typologie des observations ;
- **Règles d'association** : mesurer le lien entre différents produits ;
- **Systèmes de recommandation** : identifier les produits susceptibles d'intéresser des consommateurs.

Nombreuses applications

finance, économie, marketing, biologie, médecine...

Des problématiques diverses

- **Apprentissage supervisé** : expliquer/prédire une sortie $y \in \mathcal{Y}$ à partir d'entrées $x \in \mathcal{X}$;
- **Apprentissage non supervisé** : établir une typologie des observations ;
- **Règles d'association** : mesurer le lien entre différents produits ;
- **Systèmes de recommandation** : identifier les produits susceptibles d'intéresser des consommateurs.

Nombreuses applications

finance, économie, marketing, biologie, médecine...

Dans ce cours

On va se focaliser sur le problème d'apprentissage supervisé avec une sortie qualitative.

Quelques exemples

Cadre mathématique

L'erreur de classification

La courbe ROC

Un exemple : l'algorithme des plus proches voisins

Estimation de l'erreur

Le sur-apprentissage

Bibliographie

- Les **données** : $(x_1, y_1) \dots, (x_n, y_n)$ où $x_i \in \mathbb{R}^p$ et $y_i \in \mathcal{Y} = \{1, \dots, K\}$.

- Les **données** : $(x_1, y_1) \dots, (x_n, y_n)$ où $x_i \in \mathbb{R}^p$ et $y_i \in \mathcal{Y} = \{1, \dots, K\}$.
- **Modélisation** : ces données sont vues comme des **réalisations de variables aléatoires i.i.d** $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ de **loi inconnue**.

- Les **données** : $(x_1, y_1) \dots, (x_n, y_n)$ où $x_i \in \mathbb{R}^p$ et $y_i \in \mathcal{Y} = \{1, \dots, K\}$.
- **Modélisation** : ces données sont vues comme des **réalisations de variables aléatoires i.i.d** $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ de **loi inconnue**.
- **Objectif** : **prédire** et/ou **expliquer** les sorties y_i par les entrées x_i .

- Les **données** : $(x_1, y_1) \dots, (x_n, y_n)$ où $x_i \in \mathbb{R}^p$ et $y_i \in \mathcal{Y} = \{1, \dots, K\}$.
- **Modélisation** : ces données sont vues comme des **réalisations de variables aléatoires i.i.d** $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ de **loi inconnue**.
- **Objectif** : **prédire** et/ou **expliquer** les sorties y_i par les entrées x_i .
 \implies trouver une fonction $g : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathcal{Y}$ telle que

$$g(x_i) \approx y_i, \quad \forall i = 1, \dots, n.$$

- Les **données** : $(x_1, y_1) \dots, (x_n, y_n)$ où $x_i \in \mathbb{R}^p$ et $y_i \in \mathcal{Y} = \{1, \dots, K\}$.
- **Modélisation** : ces données sont vues comme des **réalisations de variables aléatoires i.i.d** $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ de **loi inconnue**.
- **Objectif** : **prédire** et/ou **expliquer** les sorties y_i par les entrées x_i .
 \implies trouver une fonction $g : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathcal{Y}$ telle que

$$g(x_i) \approx y_i, \quad \forall i = 1, \dots, n.$$

Définition

On appelle **règle de classification** toute fonction $g : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathcal{Y}$ qui, à une entrée $x \in \mathbb{R}^p$, renvoie une prévision $g(x) \in \mathcal{Y}$.

Quelques exemples

Cadre mathématique

L'erreur de classification

La courbe ROC

Un exemple : l'algorithme des plus proches voisins

Estimation de l'erreur

Le sur-apprentissage

Bibliographie

Règle optimale

- Il existe un grand nombre de façons de construire des règles g .
- Nécessité de se donner des critères de performance.

Règle optimale

- Il existe un grand nombre de façons de construire des règles g .
- Nécessité de se donner des **critères de performance**.

Définition

Etant donnée une règle de classification $g : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathcal{Y}$, on appelle **probabilité d'erreur** ou **erreur de classification** de g le réel

$$L(g) = \mathbf{E}[\mathbf{1}_{g(X) \neq Y}] = \mathbf{P}(g(X) \neq Y).$$

Règle optimale

- Il existe un grand nombre de façons de construire des règles g .
- Nécessité de se donner des **critères de performance**.

Définition

Etant donnée une règle de classification $g : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathcal{Y}$, on appelle **probabilité d'erreur** ou **erreur de classification** de g le réel

$$L(g) = \mathbf{E}[\mathbf{1}_{g(X) \neq Y}] = \mathbf{P}(g(X) \neq Y).$$

Objectif

Pour ce critère de performance, le problème sera donc de construire une règle telle que sa **probabilité d'erreur** soit **la plus petite possible**.

- Problème facile d'un point de vue théorique...

- Problème facile d'un point de vue **théorique**...

Théorème

La **règle de Bayes** $g^* : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathcal{Y}$ définie par

$$g^*(x) = \operatorname{argmax}_{k \in \mathcal{Y}} \mathbf{P}(Y = k | X = x)$$

est **optimale** au sens où $L(g^*) \leq L(g)$ pour toute règle g .

Règle de Bayes

- Problème facile d'un point de vue **théorique**...

Théorème

La **règle de Bayes** $g^* : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathcal{Y}$ définie par

$$g^*(x) = \operatorname{argmax}_{k \in \mathcal{Y}} \mathbf{P}(Y = k | X = x)$$

est **optimale** au sens où $L(g^*) \leq L(g)$ pour toute règle g .

Remarque

Cette règle est **naturelle** : elle consiste à affecter un nouvel individu dans le groupe k qui maximise $\mathbf{P}(Y = k | X = x)$.

Quelques exemples

Cadre mathématique

L'erreur de classification

La courbe ROC

Un exemple : l'algorithme des plus proches voisins

Estimation de l'erreur

Le sur-apprentissage

Bibliographie

Fonction de score

- On se place ici dans un cadre de **classification binaire** ($\mathcal{Y} = \{-1, 1\}$).
- On a vu que la construction d'une règle de classification est basée sur l'**estimation du score** $S(x) = \mathbf{P}(Y = 1|X = x)$.



Fonction de score

- On se place ici dans un cadre de **classification binaire** ($\mathcal{Y} = \{-1, 1\}$).
- On a vu que la construction d'une règle de classification est basée sur l'**estimation du score** $S(x) = \mathbf{P}(Y = 1|X = x)$.



- Une fois le score obtenu, on peut classer en **fixant un seuil s** :

$$g_s(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } S(x) \geq s \\ -1 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Fonction de score

- On se place ici dans un cadre de **classification binaire** ($\mathcal{Y} = \{-1, 1\}$).
- On a vu que la construction d'une règle de classification est basée sur l'**estimation du score** $S(x) = \mathbf{P}(Y = 1|X = x)$.



- Une fois le score obtenu, on peut classer en **fixant un seuil s** :

$$g_s(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } S(x) \geq s \\ -1 & \text{sinon.} \end{cases}$$

- La **courbe ROC** permet de visualiser la performance de l'estimateur de $S(x)$ **sans fixer de seuil**.

Pour s fixé a deux types d'erreur :

$$\alpha(s) = \mathbf{P}(S(X) \geq s | Y = -1) \quad \text{et} \quad \beta(s) = \mathbf{P}(S(X) < s | Y = 1).$$

Courbe ROC

C'est la courbe paramétrée définie par

$$\begin{cases} x(s) = \alpha(s) = \mathbf{P}(S(X) > s | Y = -1) \\ y(s) = 1 - \beta(s) = \mathbf{P}(S(X) \geq s | Y = 1) \end{cases}$$

Pour s fixé a deux types d'erreur :

$$\alpha(s) = \mathbf{P}(S(X) \geq s | Y = -1) \quad \text{et} \quad \beta(s) = \mathbf{P}(S(X) < s | Y = 1).$$

Courbe ROC

C'est la courbe paramétrée définie par

$$\begin{cases} x(s) = \alpha(s) = \mathbf{P}(S(X) > s | Y = -1) \\ y(s) = 1 - \beta(s) = \mathbf{P}(S(X) \geq s | Y = 1) \end{cases}$$

Propriétés

- $\forall S$ on a $x(-\infty) = y(-\infty) = 1$ et $x(+\infty) = y(+\infty) = 0$.
 \implies la courbe ROC vit dans le carré $[0, 1]^2$.

Pour s fixé a deux types d'erreur :

$$\alpha(s) = \mathbf{P}(S(X) \geq s | Y = -1) \quad \text{et} \quad \beta(s) = \mathbf{P}(S(X) < s | Y = 1).$$

Courbe ROC

C'est la courbe paramétrée définie par

$$\begin{cases} x(s) = \alpha(s) = \mathbf{P}(S(X) > s | Y = -1) \\ y(s) = 1 - \beta(s) = \mathbf{P}(S(X) \geq s | Y = 1) \end{cases}$$

Propriétés

- $\forall S$ on a $x(-\infty) = y(-\infty) = 1$ et $x(+\infty) = y(+\infty) = 0$.
 \implies la courbe ROC vit dans le carré $[0, 1]^2$.
- **Score parfait** : $\exists s^*$ tel que $\alpha(s^*) = \beta(s^*) = 0 \implies$ passe par le point $(0, 1)$.

Pour s fixé a deux types d'erreur :

$$\alpha(s) = \mathbf{P}(S(X) \geq s | Y = -1) \quad \text{et} \quad \beta(s) = \mathbf{P}(S(X) < s | Y = 1).$$

Courbe ROC

C'est la courbe paramétrée définie par

$$\begin{cases} x(s) = \alpha(s) = \mathbf{P}(S(X) > s | Y = -1) \\ y(s) = 1 - \beta(s) = \mathbf{P}(S(X) \geq s | Y = 1) \end{cases}$$

Propriétés

- $\forall S$ on a $x(-\infty) = y(-\infty) = 1$ et $x(+\infty) = y(+\infty) = 0$.
 \implies la courbe ROC vit dans le carré $[0, 1]^2$.
- **Score parfait** : $\exists s^*$ tel que $\alpha(s^*) = \beta(s^*) = 0 \implies$ passe par le point $(0, 1)$.
- **Score aléatoire** : $S(X) \perp\!\!\!\perp Y \implies x(s) = y(s) \forall s$ (première bissectrice). 21

Aire sous la courbe ROC (AUC)

- L'**AUC** est un critère numérique naturel pour mesurer la **performance** de S .
- $0.5 \leq AUC(S) \leq 1$ (plus il est proche de 1, mieux c'est).

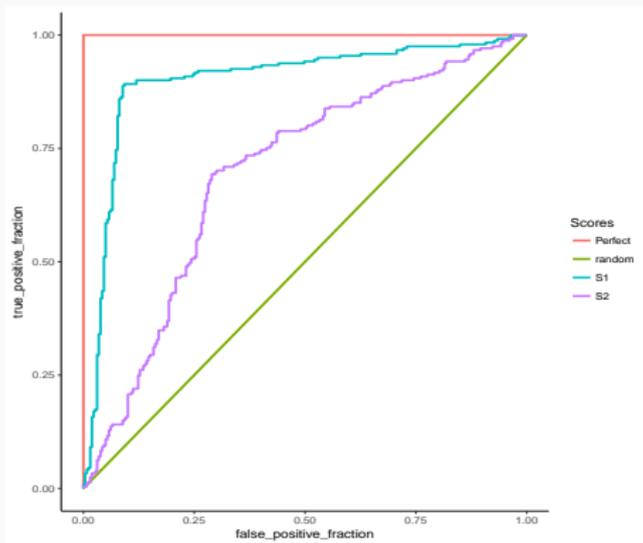
Aire sous la courbe ROC (AUC)

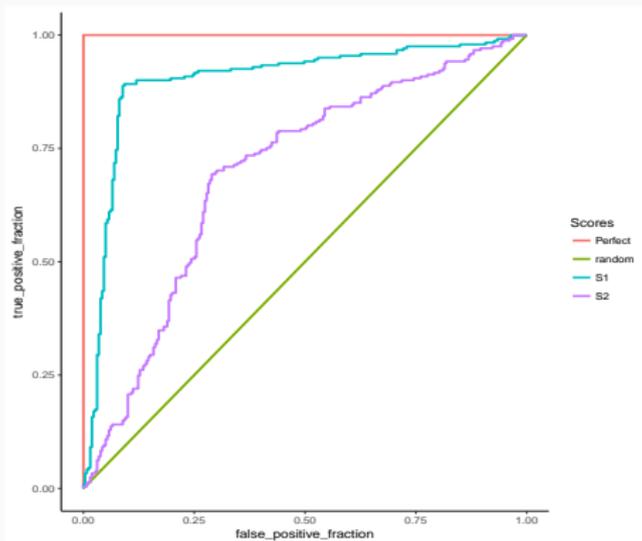
- L'**AUC** est un critère numérique naturel pour mesurer la **performance** de S .
- $0.5 \leq AUC(S) \leq 1$ (plus il est proche de 1, mieux c'est).

Propriété voir [[Cléménçon et al., 2008](#)]

- Etant données deux observations (X_1, Y_1) et (X_2, Y_2) indépendantes et de même loi que (X, Y) , on a

$$AUC(S) = \mathbf{P}(S(X_1) \geq S(X_2) | (Y_1, Y_2) = (1, -1)).$$





```

> library(pROC)
> df1 %>% group_by(Scores) %>% summarize(auc(D,M))
## # A tibble: 4 x 2
##   Scores 'auc(D, M)'
##   <chr>    <dbl>
## 1 Perfect      1
## 2 random      0.5
## 3 S1          0.896
## 4 S2          0.699

```

- D'un point de vue **théorique**, la règle de Bayes et le score optimal se déduisent des probabilités $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$.

- D'un point de vue **théorique**, la règle de Bayes et le score optimal se déduisent des probabilités $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$.
- Problème plus **difficile** d'un point de vue **pratique**...

- D'un point de vue **théorique**, la règle de Bayes et le score optimal se déduisent des probabilités $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$.
- Problème plus **difficile** d'un point de vue **pratique**...

Travail statistique

- Les probabilités $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$ sont **inconnues**.
- Le job du statisticien sera de
 1. **Estimer** les probabilités $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$ à l'aide de l'**échantillon**
 $\mathcal{D}_n = (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$.

- D'un point de vue **théorique**, la règle de Bayes et le score optimal se déduisent des probabilités $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$.
- Problème plus **difficile** d'un point de vue **pratique**...

Travail statistique

- Les probabilités $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$ sont **inconnues**.
- Le job du statisticien sera de
 1. **Estimer** les probabilités $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$ à l'aide de l'**échantillon** $\mathcal{D}_n = (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$.
 2. En déduire une **règle de classification** $\hat{g}_n(\cdot) = \hat{g}_n(\cdot, \mathcal{D}_n)$ telle que $L(\hat{g}_n) \approx L(g^*)$.

- D'un point de vue **théorique**, la règle de Bayes et le score optimal se déduisent des probabilités $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$.
- Problème plus **difficile** d'un point de vue **pratique**...

Travail statistique

- Les probabilités $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$ sont **inconnues**.
- Le job du statisticien sera de
 1. **Estimer** les probabilités $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$ à l'aide de l'**échantillon** $\mathcal{D}_n = (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$.
 2. En déduire une **règle de classification** $\hat{g}_n(\cdot) = \hat{g}_n(\cdot, \mathcal{D}_n)$ telle que $L(\hat{g}_n) \approx L(g^*)$.

Exemple

Si pour une **nouvelle valeur** x , on a

$$\hat{\mathbf{P}}(Y = 1|X = x) = 0.2, \quad \hat{\mathbf{P}}(Y = 2|X = x) = 0.35, \quad \hat{\mathbf{P}}(Y = 3|X = x) = 0.45$$

- D'un point de vue **théorique**, la règle de Bayes et le score optimal se déduisent des probabilités $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$.
- Problème plus **difficile** d'un point de vue **pratique**...

Travail statistique

- Les probabilités $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$ sont **inconnues**.
- Le job du statisticien sera de
 1. **Estimer** les probabilités $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$ à l'aide de l'**échantillon** $\mathcal{D}_n = (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$.
 2. En déduire une **règle de classification** $\hat{g}_n(\cdot) = \hat{g}_n(\cdot, \mathcal{D}_n)$ telle que $L(\hat{g}_n) \approx L(g^*)$.

Exemple

Si pour une **nouvelle valeur** x , on a

$$\hat{\mathbf{P}}(Y = 1|X = x) = 0.2, \quad \hat{\mathbf{P}}(Y = 2|X = x) = 0.35, \quad \hat{\mathbf{P}}(Y = 3|X = x) = 0.45$$

alors on **prédira** $\hat{Y} = \hat{g}(x) = 3$.

Quelques exemples

Cadre mathématique

L'erreur de classification

La courbe ROC

Un exemple : l'algorithme des plus proches voisins

Estimation de l'erreur

Le sur-apprentissage

Bibliographie

Un exemple : la règle des plus proches voisins

- Etant donné un entier $k \leq n$, elle consiste à affecter un nouvel individu x dans le **groupe majoritaire de ses plus proches voisins** :

$$\hat{g}_n(x) = \operatorname{argmax}_{k \in \mathcal{Y}} \sum_{i \in \text{kppv}(x)} \mathbf{1}_{Y_i=k}$$

où $\text{kppv}(x) = \{i : X_i \text{ fait partie des kppv de } x \text{ parmi } \{X_1, \dots, X_n\}\}$.

Un exemple : la règle des plus proches voisins

- Etant donné un entier $k \leq n$, elle consiste à affecter un nouvel individu x dans le **groupe majoritaire de ses plus proches voisins** :

$$\hat{g}_n(x) = \operatorname{argmax}_{k \in \mathcal{Y}} \sum_{i \in \text{kppv}(x)} \mathbf{1}_{Y_i=k}$$

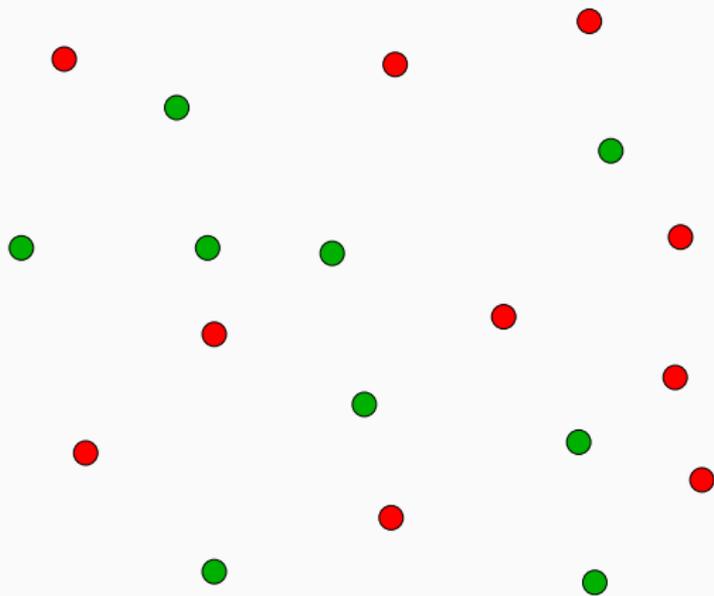
où $\text{kppv}(x) = \{i : X_i \text{ fait partie des kppv de } x \text{ parmi } \{X_1, \dots, X_n\}\}$.

Remarque importante

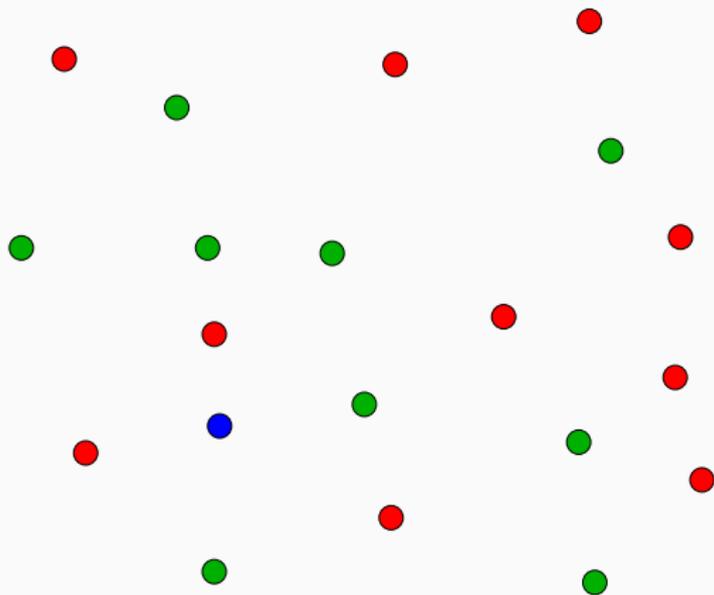
Le paramètre k est **crucial** pour la qualité de l'estimation :

1. **k grand** : estimateur « constant », variance faible, biais fort ;
2. **k petit** : « sur-ajustement », variance forte, biais faible.

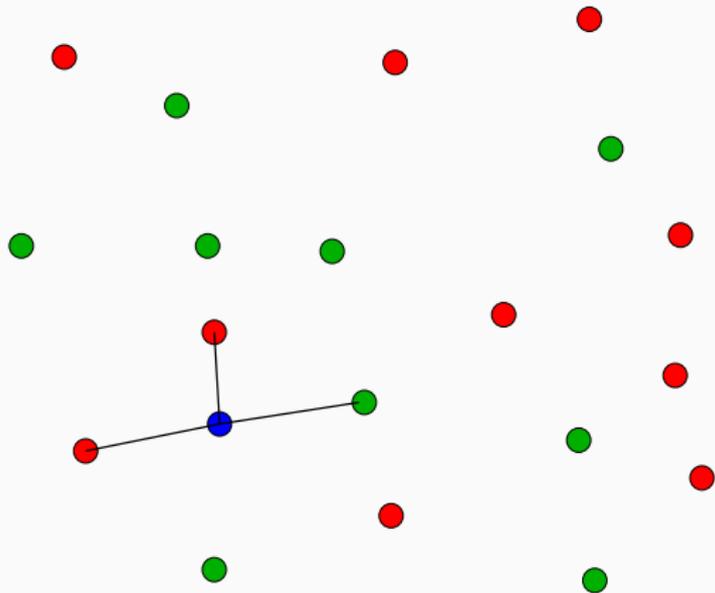
Exemple : règle des 3-ppv



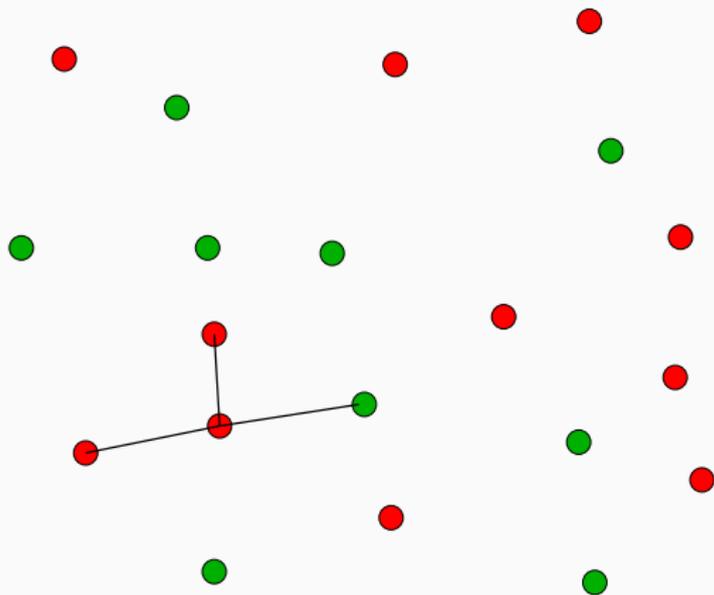
Exemple : règle des 3-ppv



Exemple : règle des 3-ppv

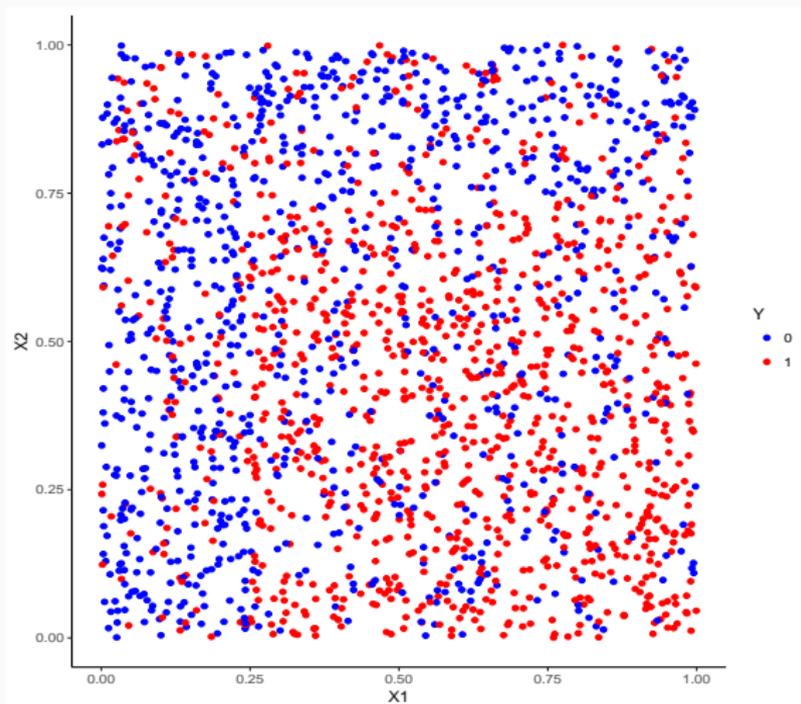


Exemple : règle des 3-ppv

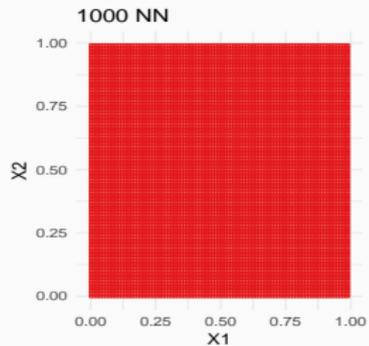
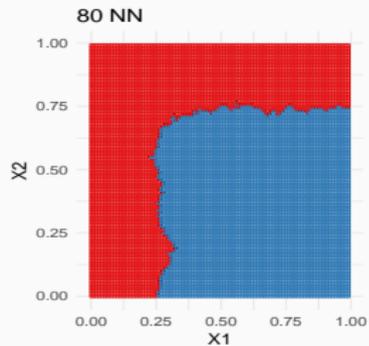
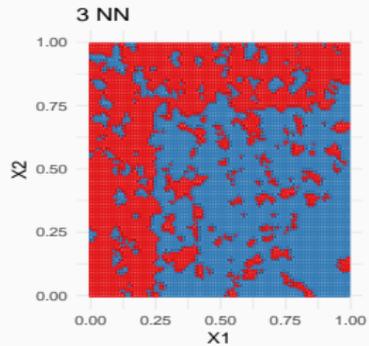
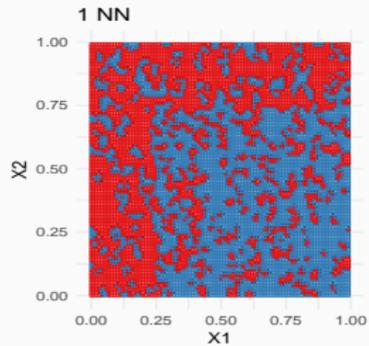


Un exemple

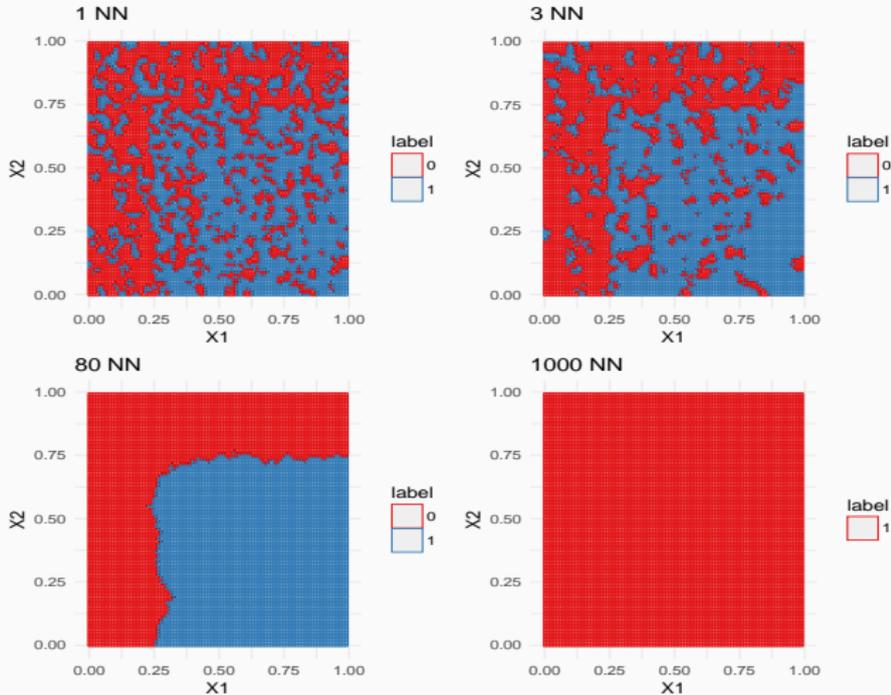
- On cherche à expliquer une variable Y **binaire** par 2 variables X_1 et X_2 quantitatives. On dispose de $n = 2000$ observations.



Représentation des règles des *k*ppv



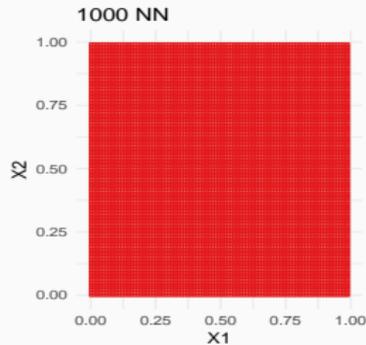
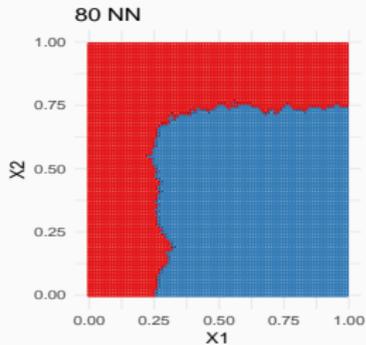
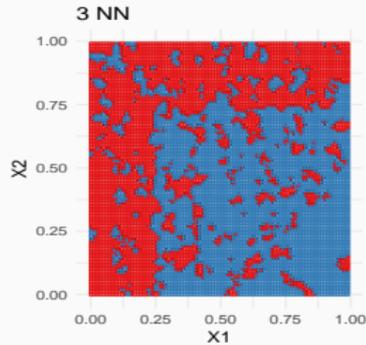
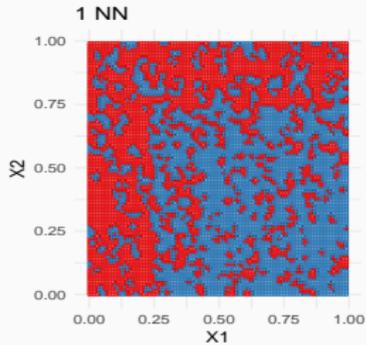
Représentation des règles des k ppv



Conclusion

On visualise bien l'importance du choix de k

Représentation des règles des k ppv



Conclusion

On visualise bien l'importance du choix de k (parce qu'on est en 2d...)

Quelques exemples

Cadre mathématique

L'erreur de classification

La courbe ROC

Un exemple : l'algorithme des plus proches voisins

Estimation de l'erreur

Le sur-apprentissage

Bibliographie

Rappels

- n observations $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ i.i.d à valeurs dans $\mathbb{R}^p \times \mathcal{Y}$.

Objectif

On cherche une **règle de prévision** $g_n(x) = g_n(x, \mathcal{D}_n)$ qui soit "proche" de l'oracle g^* défini par

$$g^* \in \underset{g}{\operatorname{argmin}} L(g)$$

où $L(g) = \mathbf{P}(g(X) \neq Y)$.

Rappels

- n observations $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ i.i.d à valeurs dans $\mathbb{R}^p \times \mathcal{Y}$.

Objectif

On cherche une **règle de prévision** $g_n(x) = g_n(x, \mathcal{D}_n)$ qui soit "proche" de l'oracle g^* défini par

$$g^* \in \underset{g}{\operatorname{argmin}} L(g)$$

où $L(g) = \mathbf{P}(g(X) \neq Y)$.

Question

Etant donné un algorithme g_n , **que vaut son erreur**

$$L(g_n) = \mathbf{P}(g_n(X) \neq Y) ?$$

- La loi de (X, Y) étant **inconnue** en pratique, il est **impossible de calculer** $L(g_n) = \mathbf{P}(g_n(X) \neq Y) = \mathbf{E}[\mathbf{1}_{g_n(X) \neq Y}]$.

Risque empirique

- La loi de (X, Y) étant **inconnue** en pratique, il est **impossible de calculer** $L(g_n) = \mathbf{P}(g_n(X) \neq Y) = \mathbf{E}[\mathbf{1}_{g_n(X) \neq Y}]$.
- **Première approche** : $L(g_n)$ étant une espérance, on peut l'estimer (LGN) par sa **version empirique**

$$L_n(g_n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{g_n(X_i) \neq Y_i}.$$

Risque empirique

- La loi de (X, Y) étant **inconnue** en pratique, il est **impossible de calculer** $L(g_n) = \mathbf{P}(g_n(X) \neq Y) = \mathbf{E}[\mathbf{1}_{g_n(X) \neq Y}]$.
- **Première approche** : $L(g_n)$ étant une espérance, on peut l'estimer (LGN) par sa **version empirique**

$$L_n(g_n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{g_n(X_i) \neq Y_i}.$$

Problème

- L'échantillon \mathcal{D}_n a **déjà été utilisé** pour construire l'algorithme de prévision $g_n \implies$ La LGN ne peut donc s'appliquer !
- **Conséquence** : $L_n(g_n)$ conduit souvent à une **sous-estimation** de $L(g_n)$.

Risque empirique

- La loi de (X, Y) étant **inconnue** en pratique, il est **impossible de calculer** $L(g_n) = \mathbf{P}(g_n(X) \neq Y) = \mathbf{E}[\mathbf{1}_{g_n(X) \neq Y}]$.
- **Première approche** : $L(g_n)$ étant une espérance, on peut l'estimer (LGN) par sa **version empirique**

$$L_n(g_n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{g_n(X_i) \neq Y_i}.$$

Problème

- L'échantillon \mathcal{D}_n a **déjà été utilisé** pour construire l'algorithme de prévision $g_n \implies$ La LGN ne peut donc s'appliquer !
- **Conséquence** : $L_n(g_n)$ conduit souvent à une **sous-estimation** de $L(g_n)$.

Une solution

Utiliser des méthodes de type **validation croisée** ou **bootstrap**.

Apprentissage - Validation ou validation hold out

- L'approche consiste à séparer l'échantillon \mathcal{D}_n en :
 1. un **échantillon d'apprentissage** $\mathcal{D}_{n,app}$ pour construire la règle g_n ;
 2. un **échantillon de validation** ou **test** $\mathcal{D}_{n,test}$ pour estimer le risque de g_n .

Apprentissage - Validation ou validation hold out

- L'approche consiste à séparer l'échantillon \mathcal{D}_n en :
 1. un **échantillon d'apprentissage** $\mathcal{D}_{n,app}$ pour construire la règle g_n ;
 2. un **échantillon de validation** ou **test** $\mathcal{D}_{n,test}$ pour estimer le risque de g_n .

Algorithme

Entrées. \mathcal{D}_n : données, $\{\mathcal{A}, \mathcal{V}\}$: partition de $\{1, \dots, n\}$.

1. Construire l'algorithme de prédiction sur $\mathcal{D}_{n,app} = \{(X_i, Y_i) : i \in \mathcal{A}\}$, on le note $g_{n,app}$;
2. Calculer $\hat{L}_n(g_{n,app}) = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \sum_{i \in \mathcal{V}} \mathbf{1}_{g_{n,app}(X_i) \neq Y_i}$.

Apprentissage - Validation ou validation hold out

- L'approche consiste à séparer l'échantillon \mathcal{D}_n en :
 1. un **échantillon d'apprentissage** $\mathcal{D}_{n,app}$ pour construire la règle g_n ;
 2. un **échantillon de validation** ou **test** $\mathcal{D}_{n,test}$ pour estimer le risque de g_n .

Algorithme

Entrées. \mathcal{D}_n : données, $\{\mathcal{A}, \mathcal{V}\}$: partition de $\{1, \dots, n\}$.

1. Construire l'algorithme de prédiction sur $\mathcal{D}_{n,app} = \{(X_i, Y_i) : i \in \mathcal{A}\}$, on le note $g_{n,app}$;
2. Calculer $\hat{L}_n(g_{n,app}) = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \sum_{i \in \mathcal{V}} \mathbf{1}_{g_{n,app}(X_i) \neq Y_i}$.

Commentaires

Nécessite d'avoir un **nombre suffisant d'observations** dans

1. $\mathcal{D}_{n,app}$ pour bien **ajuster l'algorithme de prévision** ;
2. $\mathcal{D}_{n,test}$ pour bien **estimer l'erreur de l'algorithme**.

Validation croisée K -blocs

- **Principe** : répéter l'algorithme apprentissage/validation sur **différentes partitions**.

Validation croisée K -blocs

- **Principe** : répéter l'algorithme apprentissage/validation sur **différentes partitions**.

Algorithme - CV

Entrées. \mathcal{D}_n : données, K un entier qui divise n ;

1. Construire une partition $\{\mathcal{I}_1, \dots, \mathcal{I}_K\}$ de $\{1, \dots, n\}$;
2. Pour $k = 1, \dots, K$
 - 2.1 $\mathcal{I}_{app} = \{1, \dots, n\} \setminus \mathcal{I}_k$ et $\mathcal{I}_{test} = \mathcal{I}_k$;
 - 2.2 Construire l'algorithme de prédiction sur $\mathcal{D}_{n,app} = \{(X_i, Y_i) : i \in \mathcal{I}_{app}\}$, on le note $g_{n,k}$;
 - 2.3 En déduire $\hat{g}_n(X_i) = g_{n,k}(X_i)$ pour $i \in \mathcal{I}_{test}$;

Retourner

$$\hat{L}_n(g_n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{g_n(X_i) \neq Y_i}.$$

Commentaires

- Plus adapté que la technique apprentissage/validation lorsqu'on a **peu d'observations**.
- Le **choix de K** doit être fait par l'utilisateur (souvent $K = 10$).

Leave one out

- Lorsque $K = n$, on parle de validation croisée **leave one out** ;
- Le risque est alors estimé par

$$\widehat{L}_n(g_n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{g_n^i(X_i) \neq Y_i}$$

où g_n^i désigne l'algorithme de prévision construit sur \mathcal{D}_n **amputé de la i -ème observation**.

Exemple i

- On estime les probabilités d'erreur pour les règles de 1, 10, 20 et 95 ppv.

```
> dim(donnees)
[1] 500  3
> head(donnees)
      X1      X2 Y
1 0.1328209 0.3843303 0
2 0.5311487 0.4381712 0
3 0.9785594 0.4039880 1
4 0.5988594 0.3720228 1
5 0.3109124 0.4178881 0
6 0.5964184 0.1043874 1
```

Exemple ii

1. On sépare les données en 2

```
> set.seed(1234)
> ind.app <- sample(500,300)
> dapp <- donnees[ind.app,]
> dtest <- donnees[-ind.app,]
```

2. On ajuste les 4 modèles sur les données d'apprentissage uniquement et on calcule les prévisions pour les données test.

```
> library(class)
> m1 <- knn(train=dapp[,1:2],test=dtest[,1:2],cl=dapp$Y,k=1)
> m10 <- knn(train=dapp[,1:2],test=dtest[,1:2],cl=dapp$Y,k=10)
> m20 <- knn(train=dapp[,1:2],test=dtest[,1:2],cl=dapp$Y,k=20)
> m95 <- knn(train=dapp[,1:2],test=dtest[,1:2],cl=dapp$Y,k=95)
```

3. On compare les prévisions aux valeurs observées pour en déduire les estimations de la probabilité d'erreur :

```
> mean(m1!=dtest$Y)
[1] 0.155
> mean(m10!=dtest$Y)
[1] 0.12
> mean(m20!=dtest$Y)
[1] 0.135
> mean(m95!=dtest$Y)
[1] 0.16
```

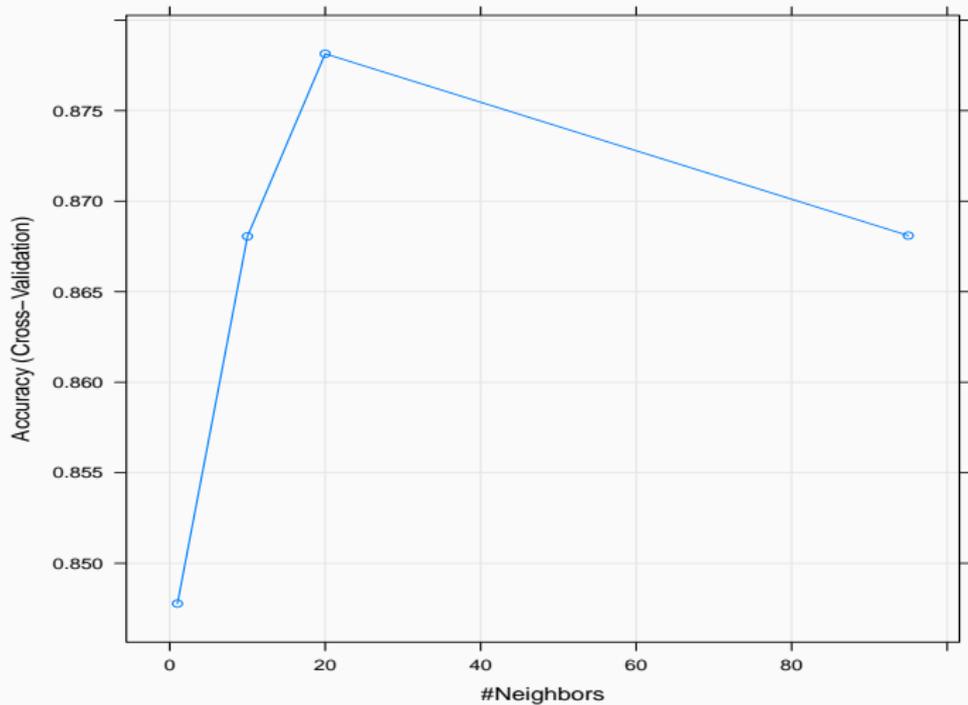
Package Caret

- Il existe des packages (tels que **caret**) dédiés à l'estimation de critères d'erreur (et/ou au calibrage de paramètres) :

```
> library(caret)
> ctrl <- trainControl(method="cv")
> gr <- data.frame(k=c(1,10,20,95))
> a <- train(Y~.,data=donnees,method="knn",tuneGrid=gr,trControl=ctrl)
> a
k-Nearest Neighbors
500 samples
  2 predictor
  2 classes: '0', '1'
No pre-processing
Resampling: Cross-Validated (10 fold)
Summary of sample sizes: 450, 449, 451, 449, 451, 450, ...
Resampling results across tuning parameters:
  k  Accuracy  Kappa
  1  0.8477719  0.6901196
 10  0.8680576  0.7329527
 20  0.8781425  0.7542075
 95  0.8681000  0.7300775
```

Package Caret

```
> plot(a)
```



Quelques exemples

Cadre mathématique

L'erreur de classification

La courbe ROC

Un exemple : l'algorithme des plus proches voisins

Estimation de l'erreur

Le sur-apprentissage

Bibliographie

- La plupart des algorithmes de prévision dépendent d'un paramètre λ .
- Ce paramètre représente souvent une mesure de la complexité du modèle.

- La plupart des algorithmes de prévision **dépendent d'un paramètre λ** .
- Ce paramètre représente souvent une mesure de la **complexité du modèle**.

Complexité

- λ petit \implies modèle restrictif \implies mauvais ajustement \implies biais \nearrow ,
variance \searrow

- La plupart des algorithmes de prévision **dépendent d'un paramètre λ** .
- Ce paramètre représente souvent une mesure de la **complexité du modèle**.

Complexité

- λ petit \implies modèle restrictif \implies mauvais ajustement \implies biais \nearrow , variance \searrow
- λ grand \implies modèle flexible (complexe) \implies **sur-apprentissage (ou overfitting)** \implies biais \searrow , variance \nearrow

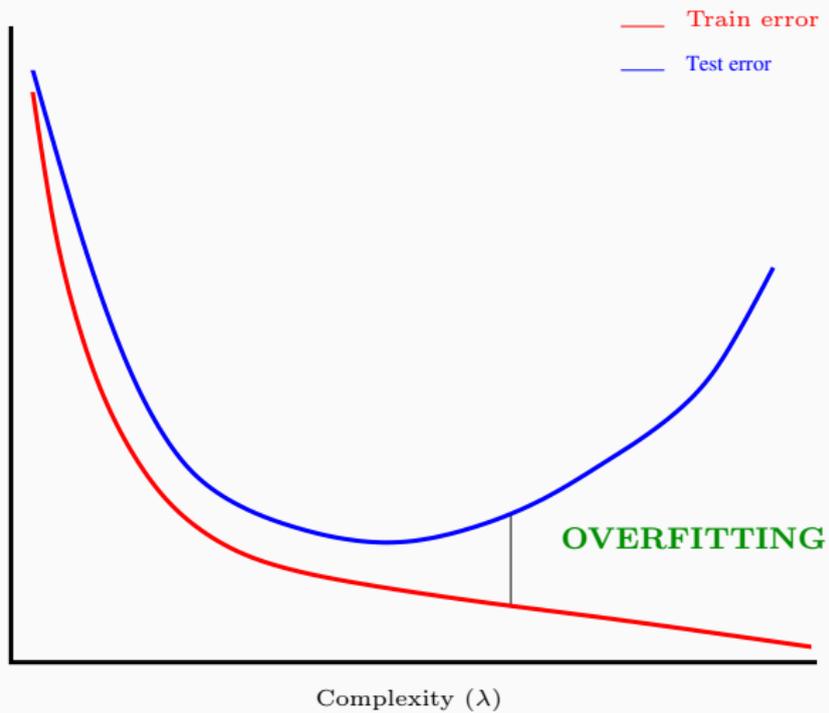
- La plupart des algorithmes de prévision **dépendent d'un paramètre λ** .
- Ce paramètre représente souvent une mesure de la **complexité du modèle**.

Complexité

- λ petit \implies modèle restrictif \implies mauvais ajustement \implies biais \nearrow , variance \searrow
- λ grand \implies modèle flexible (complexe) \implies **sur-apprentissage (ou overfitting)** \implies biais \searrow , variance \nearrow

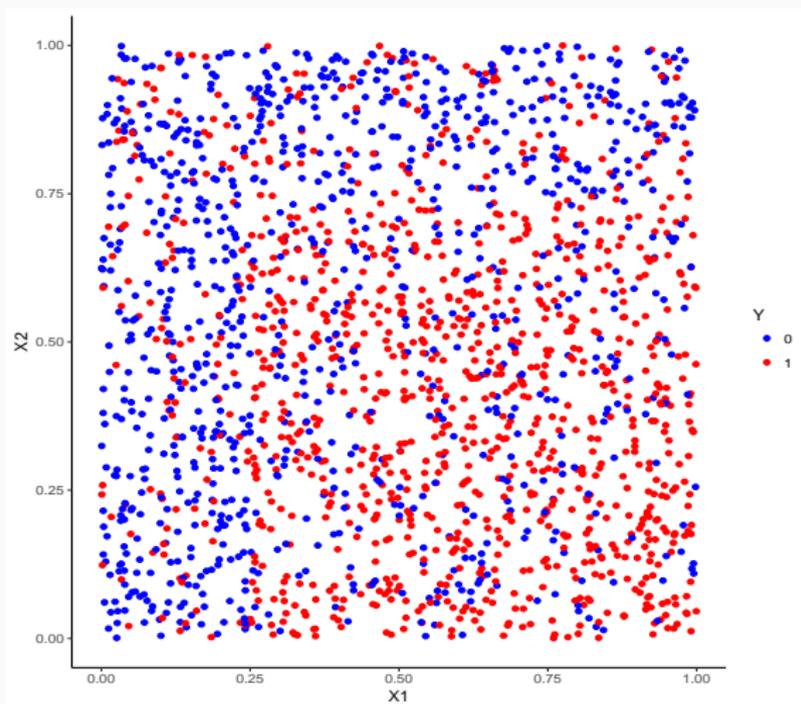
Overfitting

Très bon ajustement sur les données d'apprentissage (i.e. $g(X_i) = Y_i$)
mais **faible performance prédictive** sur des **nouveaux individus**.

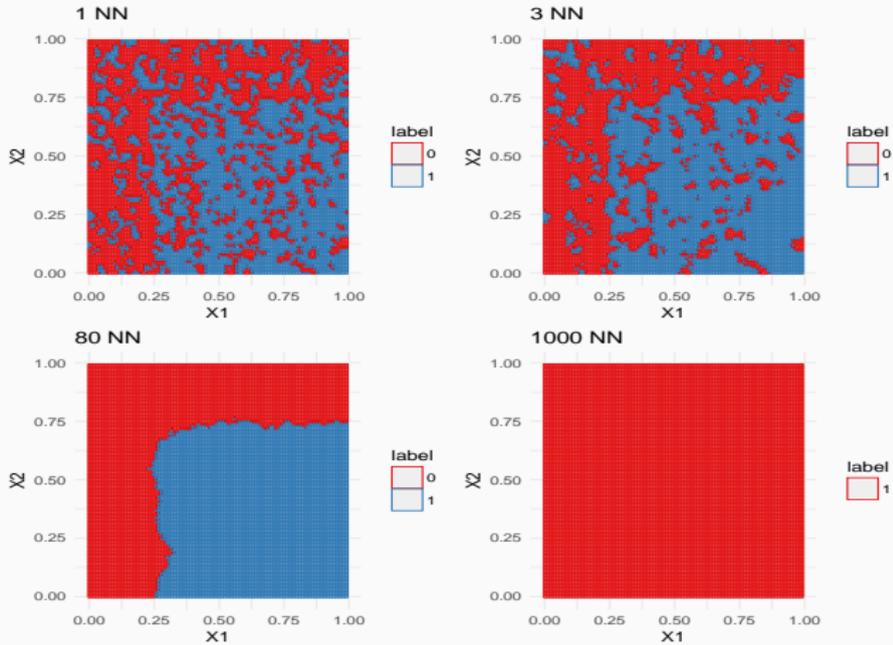


Un exemple

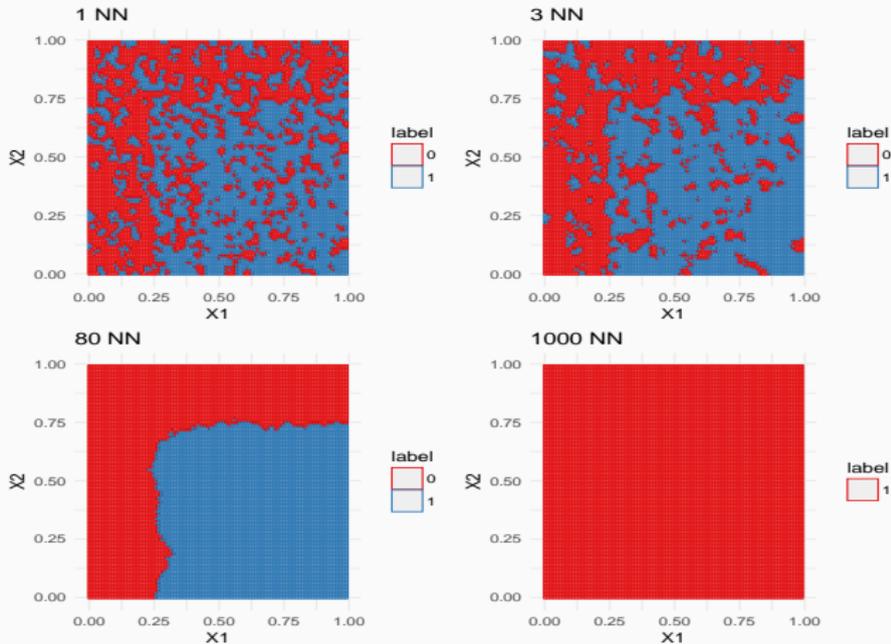
- On cherche à expliquer une variable Y binaire par 2 variables X_1 et X_2 quantitatives. On dispose de $n = 2000$ observations.



Overfitting pour les k -ppv



Overfitting pour les k -ppv



Conclusion

Surapprentissage pour les petites valeurs de k , voir aussi

https://lrouviere.shinyapps.io/overfitting_app/

Deuxième partie II

L'analyse discriminante

Le modèle d'analyse discriminante linéaire

Une seule variable explicative

LDA : cas général

Réduction de dimension

Recherche d'axes discriminants

Classification

Analyse discriminante quadratique et régularisation

Analyse discriminante quadratique

Régularisation

Bibliographie

- **Modèle de référence** permettant d'expliquer une variable qualitative Y par plusieurs variables X_1, \dots, X_p .

- **Modèle de référence** permettant d'expliquer une variable qualitative Y par plusieurs variables X_1, \dots, X_p .
- Approche **modèle** mais aussi **géométrique** pour caractériser cette méthode.

- **Modèle de référence** permettant d'expliquer une variable qualitative Y par plusieurs variables X_1, \dots, X_p .
- Approche **modèle** mais aussi **géométrique** pour caractériser cette méthode.
- Références : [[Saporta, 2011](#)] et [[Hastie et al., 2009](#)].

Notations

- n -échantillon i.i.d $\mathcal{D}_n = (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ avec X_i à valeurs dans \mathbb{R}^p et Y_i dans $\mathcal{Y} = \{1, \dots, K\}$.
- On veut **estimer** $\mathbf{P}(Y = k|X = x), k = 1, \dots, K$.

Notations

- n -échantillon i.i.d $\mathcal{D}_n = (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ avec X_i à valeurs dans \mathbb{R}^P et Y_i dans $\mathcal{Y} = \{1, \dots, K\}$.
- On veut **estimer** $\mathbf{P}(Y = k|X = x), k = 1, \dots, K$.

Notations

On note :

- $f_k(x), k = 1, \dots, K$ les densités des lois de $X|Y = k$;
- $f(x)$ la densité de X .
- $\pi_k = \mathbf{P}(Y = k)$ les probabilités **a priori** d'appartenance aux groupes.

Théorème de Bayes

Les probabilités **a posteriori** d'appartenance aux groupes $1, \dots, K$ sont données par

$$P(Y = k|X = x) = \frac{\pi_k f_k(x)}{\sum_{\ell=1}^K \pi_\ell f_\ell(x)}.$$

Théorème de Bayes

Les probabilités **a posteriori** d'appartenance aux groupes $1, \dots, K$ sont données par

$$\mathbf{P}(Y = k|X = x) = \frac{\pi_k f_k(x)}{\sum_{\ell=1}^K \pi_\ell f_\ell(x)}.$$

Conséquence

Une bonne estimation des densités de $X|Y = k$ nous donnera une **bonne estimation des probabilités $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$** .

Le modèle d'analyse discriminante linéaire

Une seule variable explicative

LDA : cas général

Réduction de dimension

Recherche d'axes discriminants

Classification

Analyse discriminante quadratique et régularisation

Analyse discriminante quadratique

Régularisation

Bibliographie

Le modèle d'analyse discriminante linéaire

Une seule variable explicative

LDA : cas général

Réduction de dimension

Recherche d'axes discriminants

Classification

Analyse discriminante quadratique et régularisation

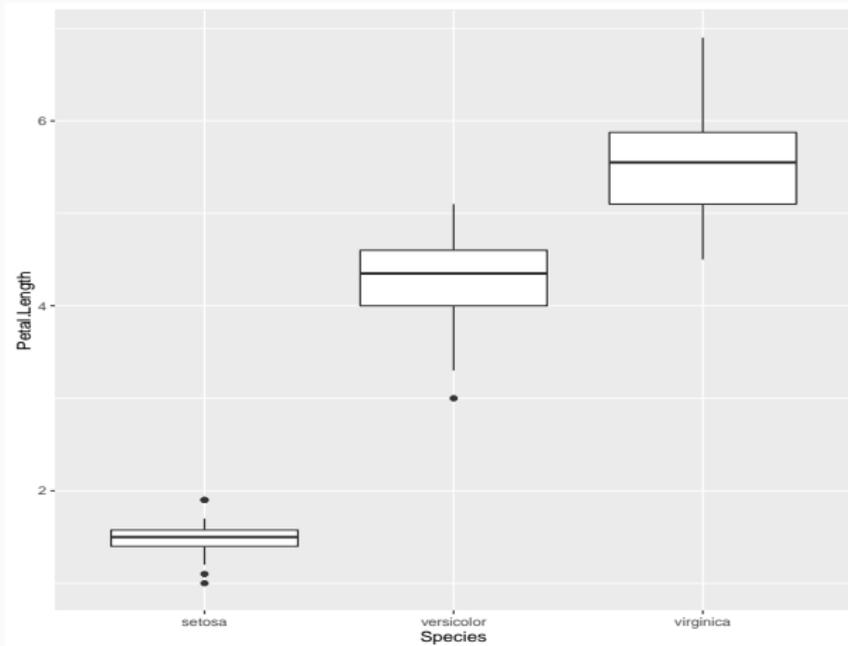
Analyse discriminante quadratique

Régularisation

Bibliographie

- On commence d'abord par expliquer l'espèce des iris par la longueur des pétales **uniquement**.
- On peut visualiser ce problème à l'aide d'un **boxplot**.

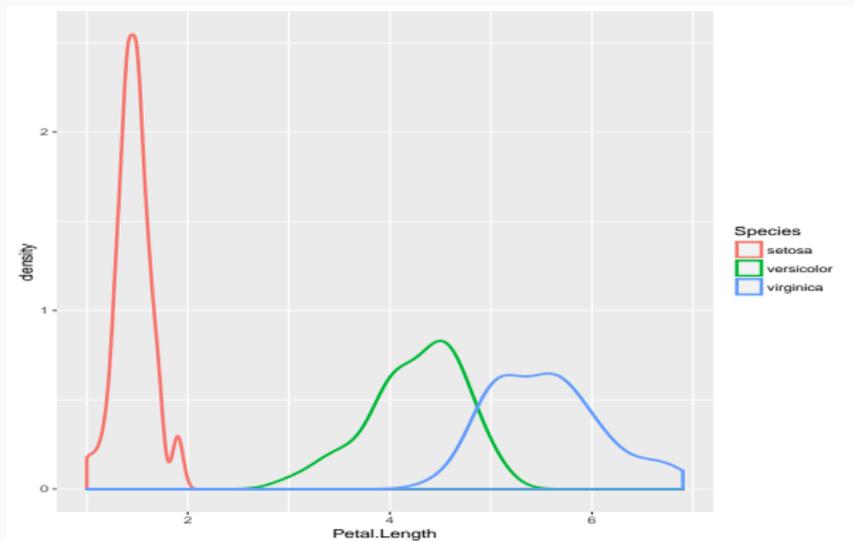
```
> ggplot(iris)+aes(x=Species,y=Petal.Length)+geom_boxplot()+theme_bw()
```



Représentation sous forme de densités

- La fonction `geom_density` permet de représenter des estimateurs des densités conditionnelles des lois conditionnelles de $X|Y = j, j = 1, 2, 3$.

```
> ggplot(iris)+aes(x=Petal.Length,color=Species)+geom_density(size=1)
```



- Les trois densités conditionnelles du graphe précédent ressemblent à des densités **gaussiennes**.

Un modèle

- Les trois densités conditionnelles du graphe précédent ressemblent à des densités **gaussiennes**.
- Si on désigne par X la variable (quantitative) **Petal.Length** et par Y la variable (qualitative) **Species**, on peut être tenté de **supposer** que les lois de X sachant $Y = k$ sont des lois gaussiennes $\mathcal{N}(\mu_k, \sigma^2)$, $k = 1, 2, 3$.

- Les trois densités conditionnelles du graphe précédent ressemblent à des densités **gaussiennes**.
- Si on désigne par X la variable (quantitative) **Petal.Length** et par Y la variable (qualitative) **Species**, on peut être tenté de **supposer** que les lois de X sachant $Y = k$ sont des lois gaussiennes $\mathcal{N}(\mu_k, \sigma^2)$, $k = 1, 2, 3$.
- La densité de X sachant $Y = k$ s'écrit alors

$$f_{X|Y=k}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(x - \mu_k)^2}{2\sigma^2}\right).$$

Estimation des paramètres inconnus

- Pour calculer les probabilités a posteriori $P(Y = k|X = x)$ il faut estimer les paramètres inconnus du modèle :

Estimation des paramètres inconnus

- Pour calculer les probabilités a posteriori $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$ il faut estimer les paramètres inconnus du modèle :
 - les paramètres $\mu_k \in \mathbb{R}$ et $\sigma^2 \in \mathbb{R}^+$ des lois gaussiennes ;
 - les probabilités a priori $\pi_k = \mathbf{P}(Y = k) \in [0, 1]$.

Estimation des paramètres inconnus

- Pour calculer les probabilités a posteriori $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$ il faut estimer les paramètres inconnus du modèle :
 - les paramètres $\mu_k \in \mathbb{R}$ et $\sigma^2 \in \mathbb{R}^+$ des lois gaussiennes ;
 - les probabilités a priori $\pi_k = \mathbf{P}(Y = k) \in [0, 1]$.

Les estimateurs

Ces quantités sont naturellement estimées à partir des données $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ selon

$$\hat{\mu}_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i: Y_i=k} X_i, \quad \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{k=1}^K \sum_{i: Y_i=k} (X_i - \hat{\mu}_k)^2$$

Estimation des paramètres inconnus

- Pour calculer les **probabilités a posteriori** $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$ il faut estimer les **paramètres inconnus** du modèle :
 - les paramètres $\mu_k \in \mathbb{R}$ et $\sigma^2 \in \mathbb{R}^+$ des lois gaussiennes ;
 - les probabilités a priori $\pi_k = \mathbf{P}(Y = k) \in [0, 1]$.

Les estimateurs

Ces quantités sont naturellement **estimées à partir des données** $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ selon

$$\hat{\mu}_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i: Y_i=k} X_i, \quad \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{k=1}^K \sum_{i: Y_i=k} (X_i - \hat{\mu}_k)^2$$

$$\hat{\pi}_k = \frac{n_k}{n} \quad \text{avec} \quad n_k = \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{\{Y_i=k\}}$$

Exemple sur R

```
> model <- lda(Species~Petal.Length,data=iris)
```

```
> model
```

```
Call:
```

```
lda(Species ~ Petal.Length, data = iris)
```

```
Prior probabilities of groups:  $\Rightarrow \hat{\pi}_k$ 
```

```
setosa versicolor virginica
```

```
0.3333333 0.3333333 0.3333333
```

```
Group means:  $\Rightarrow \hat{\mu}_k$ 
```

```
Petal.Length
```

```
setosa 1.462
```

```
versicolor 4.260
```

```
virginica 5.552
```

```
Coefficients of linear discriminants:
```

```
LD1
```

```
Petal.Length 2.323774
```

Prévisions

- **predict** permet de **prédire** l'espèce de nouveaux iris uniquement à partir de leur longueur de pétales

```
> don_pred
  Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
           5.0           3.6           1.4           0.2
           5.5           2.4           3.7           1.0
           7.1           3.0           5.9           2.1
           6.7           3.3           5.7           2.5
```

Prévisions

- **predict** permet de **prédire** l'espèce de nouveaux iris uniquement à partir de leur longueur de pétales

```
> don_pred
  Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
1          5.0          3.6          1.4          0.2
2          5.5          2.4          3.7          1.0
3          7.1          3.0          5.9          2.1
4          6.7          3.3          5.7          2.5
```

```
> predict(model,newdata=don_pred)
$class
[1] setosa    versicolor virginica  virginica
Levels: setosa versicolor virginica
$posterior
      setosa  versicolor  virginica
1.000000e+00 2.589892e-10 6.170197e-21
3.123152e-06 9.997752e-01 2.217125e-04
1.113402e-23 9.723296e-04 9.990277e-01
9.198362e-22 3.913109e-03 9.960869e-01
```

Le modèle d'analyse discriminante linéaire

Une seule variable explicative

LDA : cas général

Réduction de dimension

Recherche d'axes discriminants

Classification

Analyse discriminante quadratique et régularisation

Analyse discriminante quadratique

Régularisation

Bibliographie

- On souhaite maintenant **expliquer** l'espèce des iris par les **4 variables explicatives** Sepal.Length, Sepal.Width, Petal.Length, Petal.Width.
- On notera X_1, X_2, X_3, X_4 ces 4 variables et $X = (X_1, X_2, X_3, X_4)$.

- On souhaite maintenant **expliquer** l'espèce des iris par les **4 variables explicatives** Sepal.Length, Sepal.Width, Petal.Length, Petal.Width.
- On notera X_1, X_2, X_3, X_4 ces 4 variables et $X = (X_1, X_2, X_3, X_4)$.
- La méthodologie est **identique** au cas précédent :

- On souhaite maintenant **expliquer** l'espèce des iris par les **4 variables explicatives** Sepal.Length, Sepal.Width, Petal.Length, Petal.Width.
- On notera X_1, X_2, X_3, X_4 ces 4 variables et $X = (X_1, X_2, X_3, X_4)$.
- La méthodologie est **identique** au cas précédent :
 1. On modélise les lois conditionnelles de $X|Y = k$ par des lois gaussiennes **multivariées** (**vecteurs gaussien**).
 2. On utilise la **formule de Bayes** pour en déduire la loi de $Y|X = x$.

LDA : cas général

- La loi de $X|Y = k$ est modélisée par une loi normale multivariée $\mathcal{N}(\mu_k, \Sigma)$ où $\mu_k \in \mathbb{R}^p$ et Σ est une matrice $p \times p$ définie positive. La densité de $X|Y = k$ est alors donnée par :

$$f_{X|Y=k}(x) = \frac{1}{(2\pi \det(\Sigma))^{p/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x - \mu_k)^t \Sigma^{-1}(x - \mu_k)\right).$$

LDA : cas général

- La loi de $X|Y = k$ est modélisée par une loi normale multivariée $\mathcal{N}(\mu_k, \Sigma)$ où $\mu_k \in \mathbb{R}^p$ et Σ est une matrice $p \times p$ définie positive. La densité de $X|Y = k$ est alors donnée par :

$$f_{X|Y=k}(x) = \frac{1}{(2\pi \det(\Sigma))^{p/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x - \mu_k)^t \Sigma^{-1}(x - \mu_k)\right).$$

- La loi conditionnelle de $Y|X = x$ se déduit de la formule de Bayes

$$\mathbf{P}(Y = k|X = x) = \frac{\pi_k f_{X|Y=k}(x)}{f(x)}$$

où $f(x)$, la densité de X , se déduit des densités conditionnelles $f_{X|Y=k}(x)$ et des probabilités a priori $\pi_k = \mathbf{P}(Y = k)$.

Estimations

- Ici encore il faut **estimer les paramètres inconnus** du modèle :

- Ici encore il faut **estimer les paramètres inconnus** du modèle :
 - les vecteurs $\mu_k \in \mathbb{R}^p, k = 1, \dots, K$ et la matrice de variance-covariance $p \times p \Sigma$ des lois gaussiennes ;
 - les probabilités a priori $\pi_k = \mathbf{P}(Y = k)$.

Estimations

- Ici encore il faut **estimer les paramètres inconnus** du modèle :
 - les vecteurs $\mu_k \in \mathbb{R}^p, k = 1, \dots, K$ et la matrice de variance-covariance $p \times p \Sigma$ des lois gaussiennes ;
 - les probabilités a priori $\pi_k = \mathbf{P}(Y = k)$.

Les estimateurs

Ces quantités sont naturellement estimées à partir des données $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ selon

$$\hat{\mu}_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i: Y_i=k} X_i, \quad \hat{\Sigma} = \frac{1}{n - K} \sum_{k=1}^K \sum_{i: Y_i=k} (X_i - \hat{\mu}_k)(X_i - \hat{\mu}_k)^t$$

Estimations

- Ici encore il faut **estimer les paramètres inconnus** du modèle :
 - les vecteurs $\mu_k \in \mathbb{R}^p, k = 1, \dots, K$ et la matrice de variance-covariance $p \times p \Sigma$ des lois gaussiennes ;
 - les probabilités a priori $\pi_k = \mathbf{P}(Y = k)$.

Les estimateurs

Ces quantités sont naturellement estimées à partir des données $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ selon

$$\hat{\mu}_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i: Y_i=k} X_i, \quad \hat{\Sigma} = \frac{1}{n - K} \sum_{k=1}^K \sum_{i: Y_i=k} (X_i - \hat{\mu}_k)(X_i - \hat{\mu}_k)^t$$

$$\hat{\pi}_k = \frac{n_k}{n} \quad \text{avec} \quad n_k = \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{\{Y_i=k\}}.$$

Exemple sur R

```
> model_complet<- lda(Species~.,data=iris)
> model_complet
Call:
lda(Species ~ ., data = iris)
```

Prior probabilities of groups: $\Rightarrow \hat{\pi}_k$

	setosa	versicolor	virginica
	0.3333333	0.3333333	0.3333333

Group means: $\Rightarrow \hat{\mu}_k$

	Sepal.Length	Sepal.Width	Petal.Length	Petal.Width
setosa	5.006	3.428	1.462	0.246
versicolor	5.936	2.770	4.260	1.326
virginica	6.588	2.974	5.552	2.026

Prévisions

- La fonction `predict` permet de **prédire** le groupe de nouveaux individus :

```
> don_pred
  Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
1          5.0          3.6           1.4           0.2
2          5.5          2.4           3.7           1.0
3          7.1          3.0           5.9           2.1
4          6.7          3.3           5.7           2.5
```

Prévisions

- La fonction `predict` permet de **prédire** le groupe de nouveaux individus :

```
> don_pred
  Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
            5.0            3.6            1.4            0.2
            5.5            2.4            3.7            1.0
            7.1            3.0            5.9            2.1
            6.7            3.3            5.7            2.5
```

```
> predict(model_complet,newdata=don_pred)
$class
[1] setosa      versicolor  virginica   virginica
Levels: setosa versicolor virginica
```

```
$posterior
      setosa  versicolor  virginica
5  1.000000e+00 1.637387e-22 1.082605e-42
82 9.648075e-16 9.999997e-01 3.266704e-07
103 1.231264e-42 2.592826e-05 9.999741e-01
145 4.048249e-46 2.524984e-07 9.999997e-01
```

Règle de classification

- La manière la plus naturelle de classer une nouvelle observation $x \in \mathbb{R}^p$ est de **choisir le groupe qui maximise**

$$\mathbf{P}(Y = k|X = x).$$

- Comparons les valeurs de ces probabilités pour les groupes k et ℓ :

$$\begin{aligned} \log \frac{\mathbf{P}(Y = k|X = x)}{\mathbf{P}(Y = \ell|X = x)} &= \log \frac{f_k(x)}{f_\ell(x)} + \log \frac{\pi_k}{\pi_\ell} \\ &= \log \frac{\pi_k}{\pi_\ell} - \frac{1}{2}(\mu_k + \mu_\ell)^t \Sigma^{-1}(\mu_k - \mu_\ell) \\ &\quad + x^t \Sigma^{-1}(\mu_k - \mu_\ell) \end{aligned} \tag{1}$$

Règle de classification

- La manière la plus naturelle de classer une nouvelle observation $x \in \mathbb{R}^p$ est de **choisir le groupe qui maximise**

$$\mathbf{P}(Y = k|X = x).$$

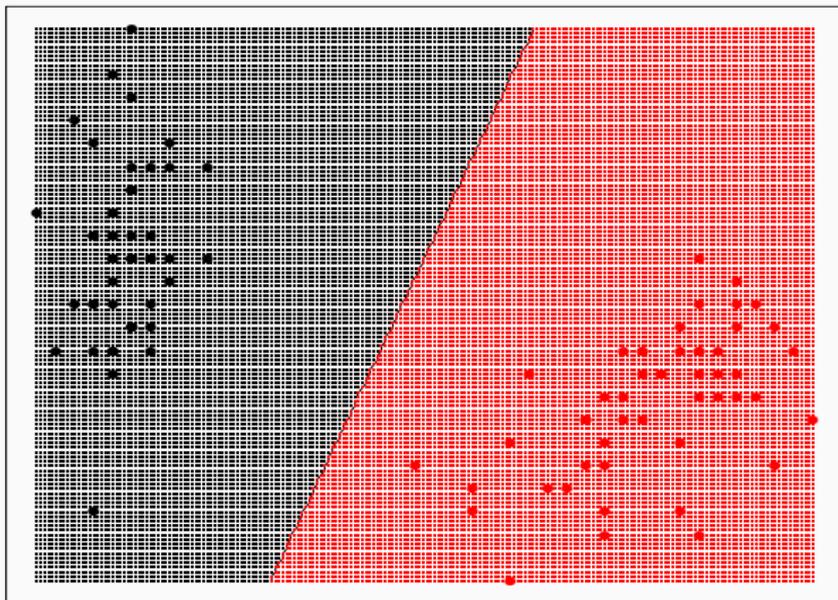
- Comparons les valeurs de ces probabilités pour les groupes k et ℓ :

$$\begin{aligned}\log \frac{\mathbf{P}(Y = k|X = x)}{\mathbf{P}(Y = \ell|X = x)} &= \log \frac{f_k(x)}{f_\ell(x)} + \log \frac{\pi_k}{\pi_\ell} \\ &= \log \frac{\pi_k}{\pi_\ell} - \frac{1}{2}(\mu_k + \mu_\ell)^t \Sigma^{-1}(\mu_k - \mu_\ell) \\ &\quad + x^t \Sigma^{-1}(\mu_k - \mu_\ell)\end{aligned}\tag{1}$$

Conclusion

La **frontière** entre les classes k et ℓ est **linéaire** en x !

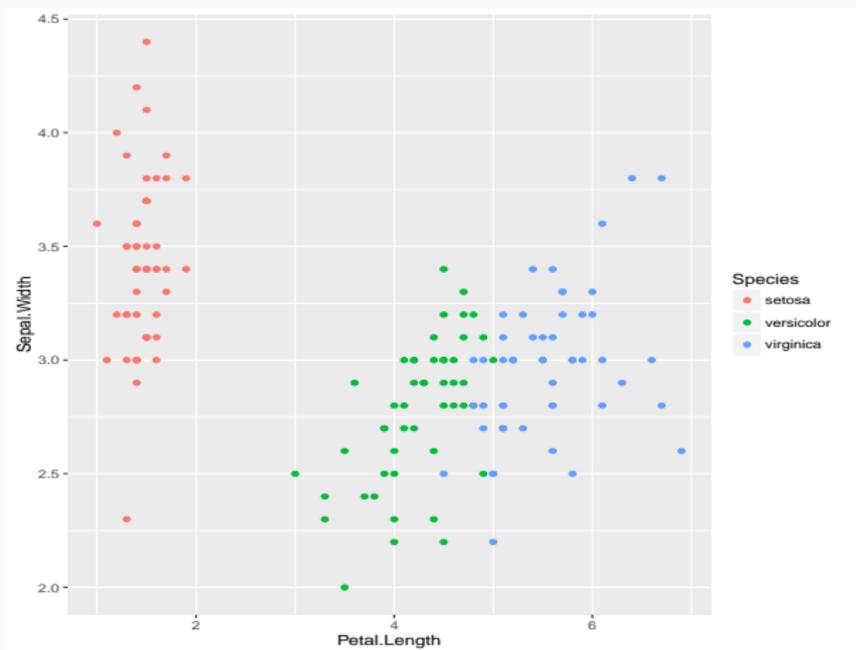
Frontière deux classes



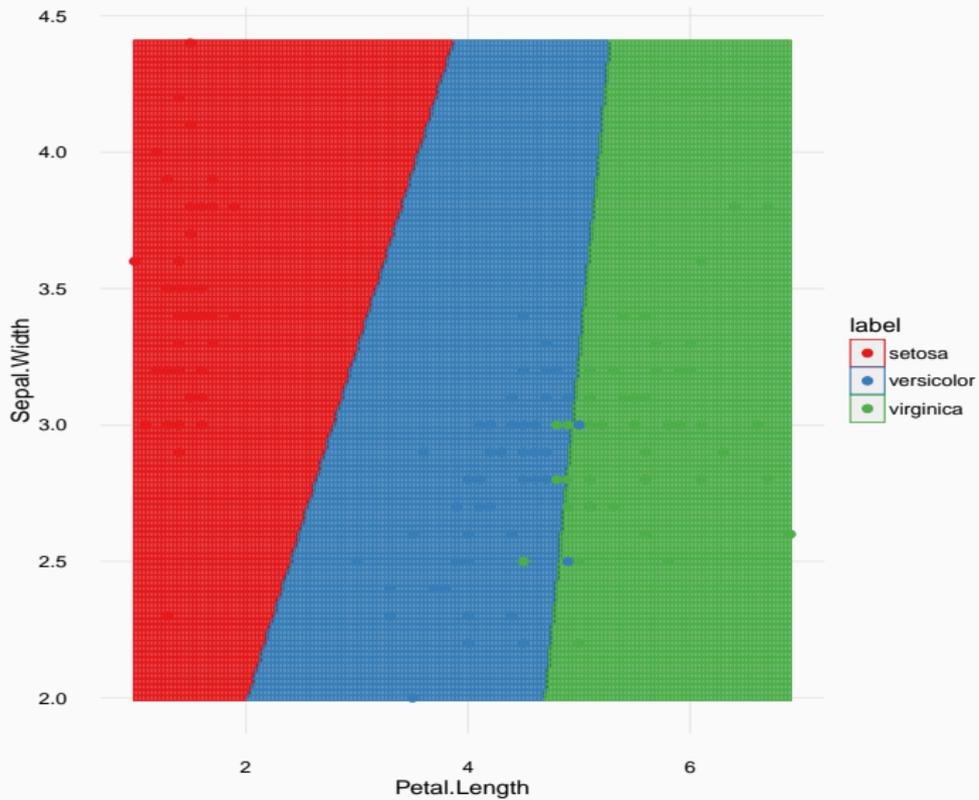
Exemple - 3 classes

- On fait de même pour les 3 espèces (3 classes).

```
> ggplot(iris)+aes(x=Petal.Length,y=Sepal.Width,color=Species)+geom_point()
```



Frontière trois classes



Fonctions linéaires discriminantes

Définition

On appelle **fonctions linéaires discriminantes** les fonctions

$$\delta_k(x) = x^t \Sigma^{-1} \mu_k - \frac{1}{2} \mu_k^t \Sigma^{-1} \mu_k + \log \pi_k, \quad k = 1, \dots, K.$$

Fonctions linéaires discriminantes

Définition

On appelle **fonctions linéaires discriminantes** les fonctions

$$\delta_k(x) = x^t \Sigma^{-1} \mu_k - \frac{1}{2} \mu_k^t \Sigma^{-1} \mu_k + \log \pi_k, \quad k = 1, \dots, K.$$

Propriété

D'après (1),

$$\operatorname{argmax}_k \mathbf{P}(Y = k | X = x) = \operatorname{argmax}_k \delta_k(x).$$

Fonctions linéaires discriminantes

Définition

On appelle **fonctions linéaires discriminantes** les fonctions

$$\delta_k(x) = x^t \Sigma^{-1} \mu_k - \frac{1}{2} \mu_k^t \Sigma^{-1} \mu_k + \log \pi_k, \quad k = 1, \dots, K.$$

Propriété

D'après (1),

$$\operatorname{argmax}_k \mathbf{P}(Y = k | X = x) = \operatorname{argmax}_k \delta_k(x).$$

Conclusion

Choisir le groupe qui **maximise les probabilités a posteriori** revient à choisir le groupe qui **maximise les fonctions linéaires discriminantes**.

Le modèle d'analyse discriminante linéaire

Une seule variable explicative

LDA : cas général

Réduction de dimension

Recherche d'axes discriminants

Classification

Analyse discriminante quadratique et régularisation

Analyse discriminante quadratique

Régularisation

Bibliographie

- LDA a été présentée comme une méthode de classification **restreinte à un modèle gaussien**.

- LDA a été présentée comme une méthode de classification **restreinte à un modèle gaussien**.
- La popularité de cette approche est également (surtout ?) due à une **vision géométrique** de cette méthode.

- LDA a été présentée comme une méthode de classification **restreinte à un modèle gaussien**.
- La popularité de cette approche est également (surtout ?) due à une **vision géométrique** de cette méthode.
- L'analyse discriminante linéaire s'interprète également comme une méthode de **réduction de dimension** (démarche similaire à l'ACP).

- LDA a été présentée comme une méthode de classification **restreinte à un modèle gaussien**.
- La popularité de cette approche est également (surtout ?) due à une **vision géométrique** de cette méthode.
- L'analyse discriminante linéaire s'interprète également comme une méthode de **réduction de dimension** (démarche similaire à l'ACP).
- C'est également un outil de **visualisation de données**.

- **Données** : $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ où $x_i \in \mathbb{R}^p$ et $y_i \in \{1, \dots, K\}$.
- **Problème** : expliquer les sorties y_i par les entrées x_i .

- **Données** : $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ où $x_i \in \mathbb{R}^p$ et $y_i \in \{1, \dots, K\}$.
- **Problème** : expliquer les sorties y_i par les entrées x_i .
- Traditionnellement l'**analyse discriminante** se présente selon deux aspects :
 1. **objectif prédictif** (partie précédente) : il s'agit de prédire le groupe d'un nouvel individu $x \in \mathbb{R}^p$;
 2. **objectif descriptif** (cette partie) : il s'agit de trouver des sous-espaces de faibles dimensions tels que les observations projetées sur ces sous-espaces soient **au mieux** séparées.

Le modèle d'analyse discriminante linéaire

Une seule variable explicative

LDA : cas général

Réduction de dimension

Recherche d'axes discriminants

Classification

Analyse discriminante quadratique et régularisation

Analyse discriminante quadratique

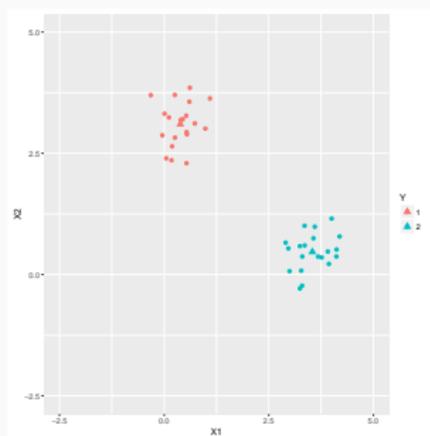
Régularisation

Bibliographie

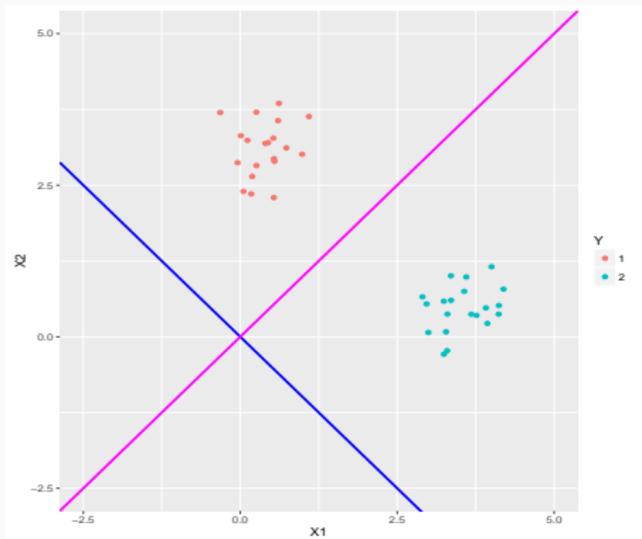
Notations

- **Données** : $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ où $x_i \in \mathbb{R}^p$ et $y_i \in \{1, \dots, K\}$.
- g le centre de gravité des données $g = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$.
- g_k le centre de gravité du groupe k :

$$g_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i:y_i=k} x_i.$$



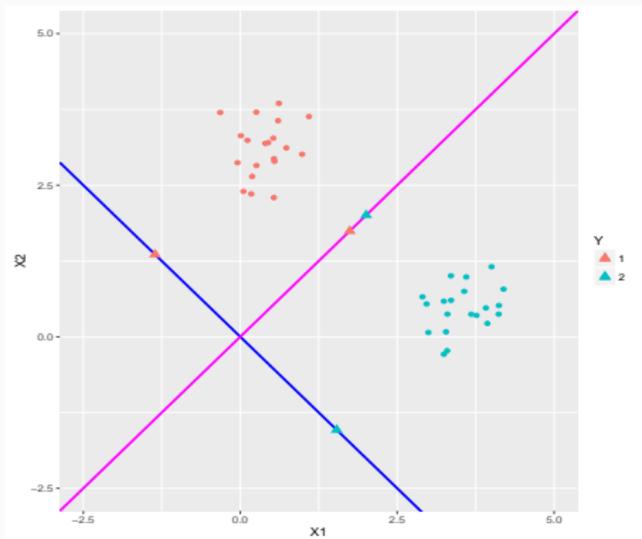
Le problème



Le problème

Trouver un sous espace de dimension 1 tel que les observations projetées sur ce sous espace soient **au mieux** séparées.

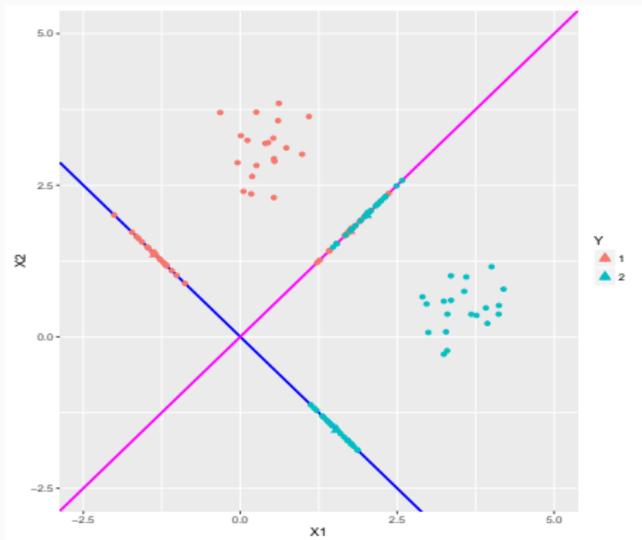
Le problème



Le problème

Trouver un sous espace de dimension 1 tel que les observations projetées sur ce sous espace soient **au mieux** séparées.

Le problème



Le problème

Trouver un sous espace de dimension 1 tel que les observations projetées sur ce sous espace soient **au mieux** séparées.

Axe discriminant

Chercher une combinaison linéaire $a_1X_1 + \dots + a_pX_p$ telle que

1. les centres de gravité de chaque groupe projetés sur cet axe soient **au mieux séparés** ;
2. la distance entre les observations projetées et leur centre de gravité projeté soit **minimale**.

L'approche de Fisher

Axe discriminant

Chercher une combinaison linéaire $a_1X_1 + \dots + a_pX_p$ telle que

1. les centres de gravité de chaque groupe projetés sur cet axe soient **au mieux séparés** ;
2. la distance entre les observations projetées et leur centre de gravité projeté soit **minimale**.

Cette approche revient à

- **maximiser** la distance (ou variance) **inter-classes** ;
- **minimiser** la distance (ou variance) **intra-classes**.

Décomposition de la variance

- Variance totale

$$V = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - g)(X_i - g)^t.$$

- Variance inter-classes (between)

$$B = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^K n_k (g_k - g)(g_k - g)^t.$$

- Variance intra-classes (within)

$$W = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^K n_k V_k \quad \text{avec} \quad V_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i: Y_i=k} (X_i - g_k)(X_i - g_k)^t.$$

Décomposition de la variance

- Variance totale

$$V = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - g)(X_i - g)^t.$$

- Variance inter-classes (between)

$$B = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^K n_k (g_k - g)(g_k - g)^t.$$

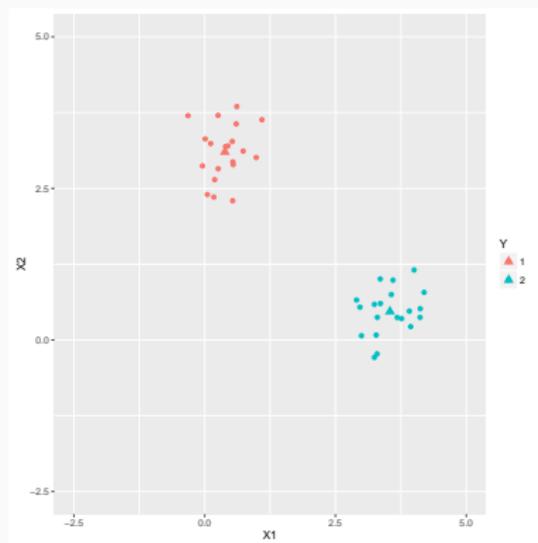
- Variance intra-classes (within)

$$W = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^K n_k V_k \quad \text{avec} \quad V_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i: Y_i=k} (X_i - g_k)(X_i - g_k)^t.$$

Propriété

$$V = B + W$$

Exemple



$$\begin{pmatrix} 2.63 & -2.04 \\ -2.04 & 1.90 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.49 & -2.08 \\ -2.08 & 1.73 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0.14 & 0.04 \\ 0.03 & 0.17 \end{pmatrix}$$

- Le **projeté** d'un vecteur u sur la **droite** engendrée par un vecteur v est

$$\pi_v(u) = \frac{\langle u, v \rangle}{\|v\|^2} v.$$

- Si v est de norme **1**, alors

$$\|\pi_v(u)\|^2 = v^t u u^t v.$$

Variances projetées

Soit $a \in \mathbb{R}^p$ de norme 1 :

- Variance totale sur $\text{vect}(a)$:

$$V(a) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|\pi_a(X_i) - \pi_a(g)\|^2 = a^t Va.$$

- Variance inter sur $\text{vect}(a)$:

$$B(a) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^K n_k \|\pi_a(g_k) - \pi_a(g)\|^2 = a^t Ba.$$

- Variance intra sur $\text{vect}(a)$:

$$W(a) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^K \sum_{i: Y_i=K} \|\pi_a(X_i) - \pi_a(g_k)\|^2 = a^t Wa.$$

Variances projetées

Soit $a \in \mathbb{R}^p$ de norme 1 :

- Variance totale sur $\text{vect}(a)$:

$$V(a) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|\pi_a(X_i) - \pi_a(g)\|^2 = a^t Va.$$

- Variance inter sur $\text{vect}(a)$:

$$B(a) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^K n_k \|\pi_a(g_k) - \pi_a(g)\|^2 = a^t Ba.$$

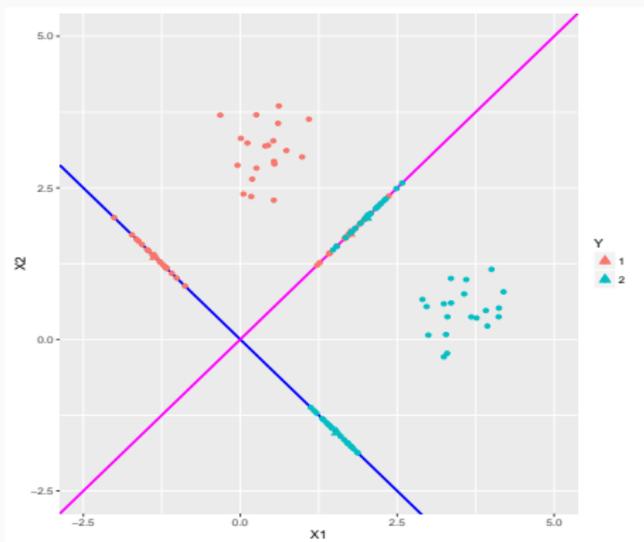
- Variance intra sur $\text{vect}(a)$:

$$W(a) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^K \sum_{i: Y_i=K} \|\pi_a(X_i) - \pi_a(g_k)\|^2 = a^t Wa.$$

Propriété

$$V(a) = B(a) + W(a).$$

Exemple



$V(a)$	$B(a)$	$W(a)$
0.218	0.034	0.184
4.308	4.187	0.121

Axe discriminant

Un axe a est **discriminant** si

- Variance **inter** projetée **grande** $\implies B(a)$ grande
- Variance **intra** projetée **petite** $\implies W(a)$ petite.

Axe discriminant

Un axe a est **discriminant** si

- Variance **inter** projetée **grande** $\implies B(a)$ grande
- Variance **intra** projetée **petite** $\implies W(a)$ petite.

Coefficient de Rayleigh

Fisher propose d'utiliser comme mesure de la qualité d'un axe de discrimination le **coefficient de Rayleigh**

$$J(a) = \frac{B(a)}{W(a)} = \frac{a^t B a}{a^t W a}.$$

Première variable discriminante

Le problème d'optimisation

Le problème consiste à trouver $a \in \mathbb{R}^p$ qui maximise le coefficient de Rayleigh

$$\frac{a^t B a}{a^t W a},$$

ou de façon équivalente

$$\max_a a^t B a \quad \text{sous la contrainte} \quad a^t W a = 1.$$

Première variable discriminante

Le problème d'optimisation

Le problème consiste à trouver $a \in \mathbb{R}^p$ qui maximise le coefficient de Rayleigh

$$\frac{a^t B a}{a^t W a},$$

ou de façon équivalente

$$\max_a a^t B a \quad \text{sous la contrainte} \quad a^t W a = 1.$$

Solution

Elle est donnée par un vecteur propre associé à la plus grande valeur propre de $W^{-1}B$.

Exemple

```
> mod
Call:
lda(Y ~ ., data = D)

Prior probabilities of groups:
  1  2
0.5 0.5

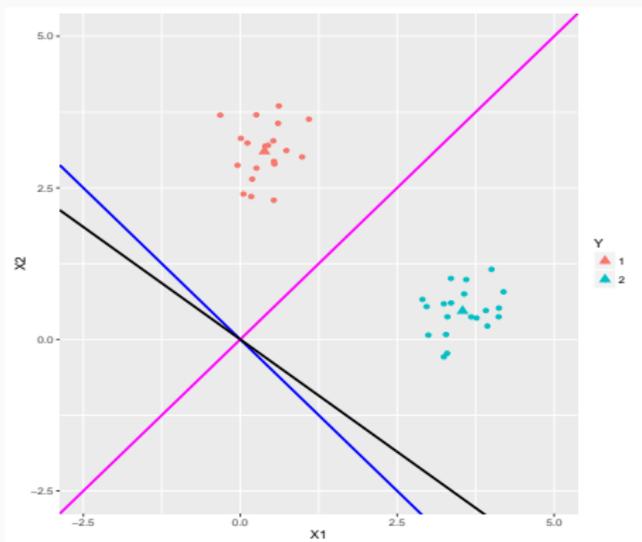
Group means:
      X1      X2
1 0.3850758 3.1009709
2 3.5410917 0.4692031

Coefficients of linear discriminants:  $\Rightarrow$  axe a
      LD1
X1  2.284995
X2 -1.694860
```

Sorties R

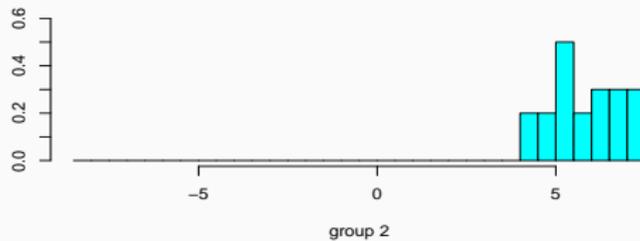
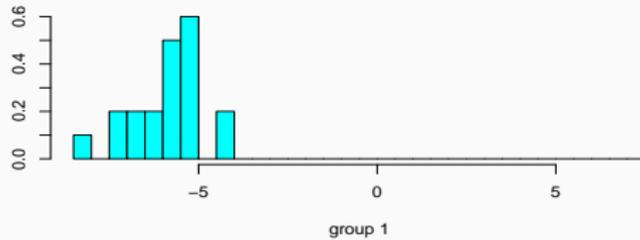
On a $a_1 = 2.284995$ et $a_2 = -1.694860$.

Exemple



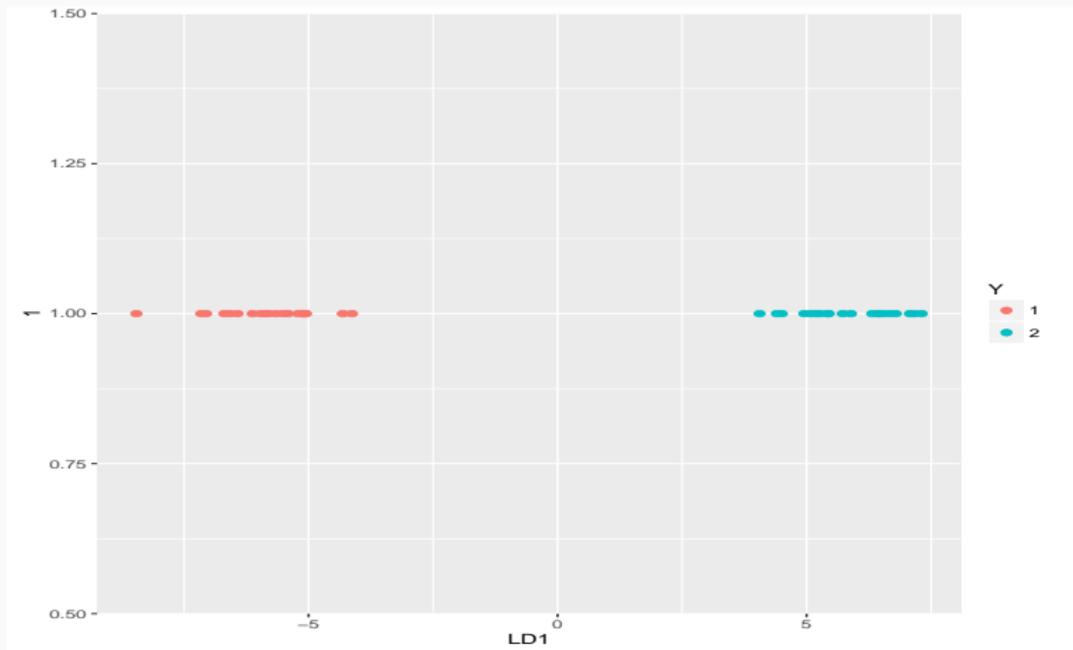
$V(a)$	$B(a)$	$W(a)$	Rayleigh
0.218	0.034	0.184	0.185
4.308	4.187	0.121	34.603
4.325	4.208	0.117	35.966

```
> plot(mod)
```



- On peut également représenter les **projections** des individus sur le **premier axe discriminant**

```
> score1 <- predict(mod)$x  
> donnees1 <- data.frame(score1, Y=D$Y)  
> ggplot(donnees1)+aes(x=LD1, y=1, col=Y)+geom_point(size=2)
```



Autres axes

- Les a_1, \dots, a_p s'appellent **coordonnées discriminantes**.
- La variable $a_1X_1 + \dots + a_pX_p$ s'appelle **première variable discriminante** (ou première variable **canonique**).

Autres axes

- Les a_1, \dots, a_p s'appellent **coordonnées discriminantes**.
- La variable $a_1X_1 + \dots + a_pX_p$ s'appelle **première variable discriminante** (ou première variable **canonique**).
- Les centres g_1, \dots, g_K appartiennent à un espace de **dimension $K - 1$** .
Si $K \geq 3$, on peut poursuivre les projections (comme pour l'ACP).

Calcul des autres variables discriminantes

- On cherche a_2 orthogonal à a_1 (par rapport à W) qui **maximise** $\frac{a_2^t B a_2}{a_2^t W a_2}$.

Autres axes

- Les a_1, \dots, a_p s'appellent **coordonnées discriminantes**.
- La variable $a_1X_1 + \dots + a_pX_p$ s'appelle **première variable discriminante** (ou première variable **canonique**).
- Les centres g_1, \dots, g_K appartiennent à un espace de **dimension $K - 1$** . Si $K \geq 3$, on peut poursuivre les projections (comme pour l'ACP).

Calcul des autres variables discriminantes

- On cherche a_2 orthogonal à a_1 (par rapport à W) qui **maximise** $\frac{a_2^t B a_2}{a_2^t W a_2}$.
- La solution est donnée par le vecteur propre associé à la **deuxième plus grande valeur propre** de $W^{-1}B$.

Autres axes

- Les a_1, \dots, a_p s'appellent **coordonnées discriminantes**.
- La variable $a_1X_1 + \dots + a_pX_p$ s'appelle **première variable discriminante** (ou première variable **canonique**).
- Les centres g_1, \dots, g_K appartiennent à un espace de **dimension $K - 1$** . Si $K \geq 3$, on peut poursuivre les projections (comme pour l'ACP).

Calcul des autres variables discriminantes

- On cherche a_2 orthogonal à a_1 (par rapport à W) qui **maximise** $\frac{a_2^t B a_2}{a_2^t W a_2}$.
- La solution est donnée par le vecteur propre associé à la **deuxième plus grande valeur propre** de $W^{-1}B$.

Remarque

La matrice $W^{-1}B$ possède au plus **$K - 1$ valeurs propres non nulles**, on peut donc avoir au maximum $K - 1$ variables discriminantes.

Les iris de Fisher

```
> mod1 <- lda(Species~.,data=iris)
```

```
> mod1
```

Prior probabilities of groups:

```
setosa versicolor virginica
```

```
0.3333333 0.3333333 0.3333333
```

Group means:

	Sepal.Length	Sepal.Width	Petal.Length	Petal.Width
setosa	5.006	3.428	1.462	0.246
versicolor	5.936	2.770	4.260	1.326
virginica	6.588	2.974	5.552	2.026

Coefficients of linear discriminants:

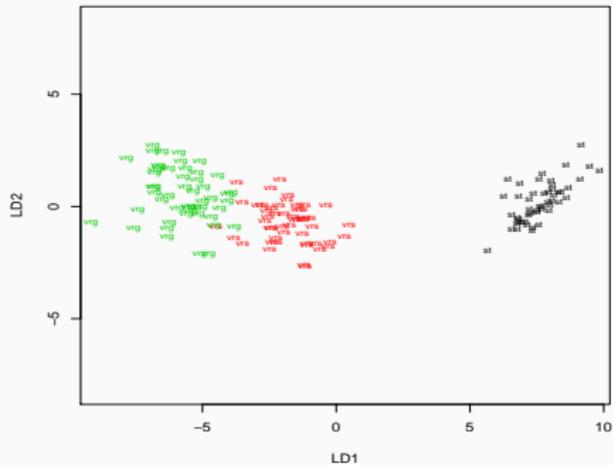
	LD1	LD2
Sepal.Length	0.8293776	0.02410215
Sepal.Width	1.5344731	2.16452123
Petal.Length	-2.2012117	-0.93192121
Petal.Width	-2.8104603	2.83918785

Proportion of trace:

LD1	LD2
0.9912	0.0088

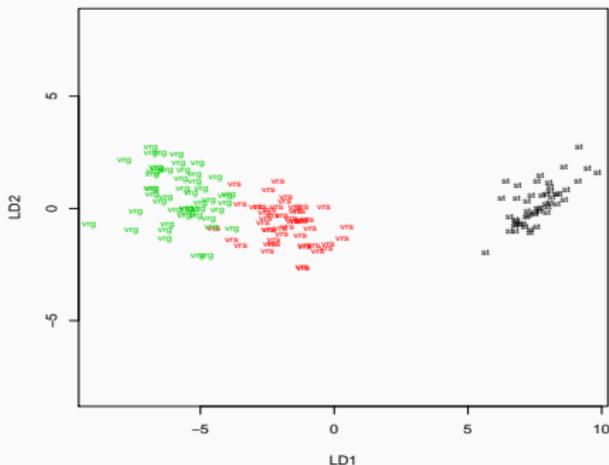
Représentation des individus sur les deux premiers axes

```
> plot(mod1)
```



Représentation des individus sur les deux premiers axes

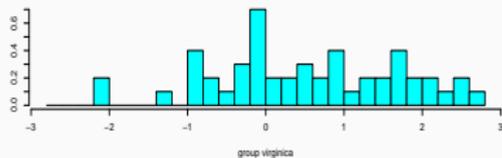
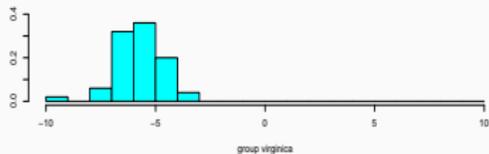
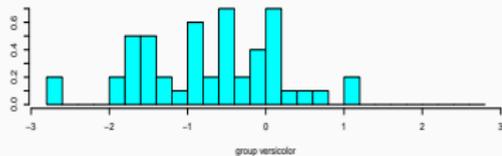
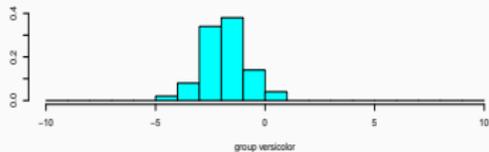
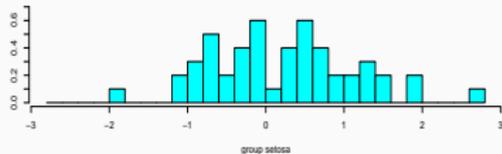
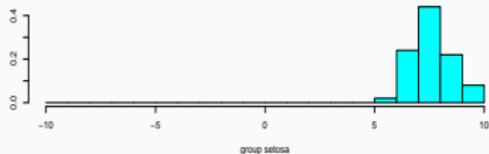
```
> plot(mod1)
```



Comparaison des axes discriminants

Le premier axe est (clairement) **plus discriminant** que le second.

Représentation des groupes par axes



Interprétation

On visualise à nouveau que le premier axe est beaucoup **plus discriminant** que le second.

Performances des variables canoniques

- On a

$$J(a_k) = \frac{a_k^t B a_k}{a_k^t W a_k} = \lambda_k$$

où λ_k est la k -ème valeur propre de $W^{-1}B$

Performances des variables canoniques

- On a

$$J(a_k) = \frac{a_k^t B a_k}{a_k^t W a_k} = \lambda_k$$

où λ_k est la k -ème valeur propre de $W^{-1}B$

Une mesure de performance

On peut donc mesurer la performance de la k -ème variable canonique par

$$\frac{\lambda_k}{\sum_{j=1}^{K-1} \lambda_j}.$$

Performances des variables canoniques

- On a

$$J(a_k) = \frac{a_k^t B a_k}{a_k^t W a_k} = \lambda_k$$

où λ_k est la k -ème valeur propre de $W^{-1}B$

Une mesure de performance

On peut donc mesurer la performance de la k -ème variable canonique par

$$\frac{\lambda_k}{\sum_{j=1}^{K-1} \lambda_j}$$

Proportion of trace:

LD1 LD2

0.9912 0.0088

Le modèle d'analyse discriminante linéaire

Une seule variable explicative

LDA : cas général

Réduction de dimension

Recherche d'axes discriminants

Classification

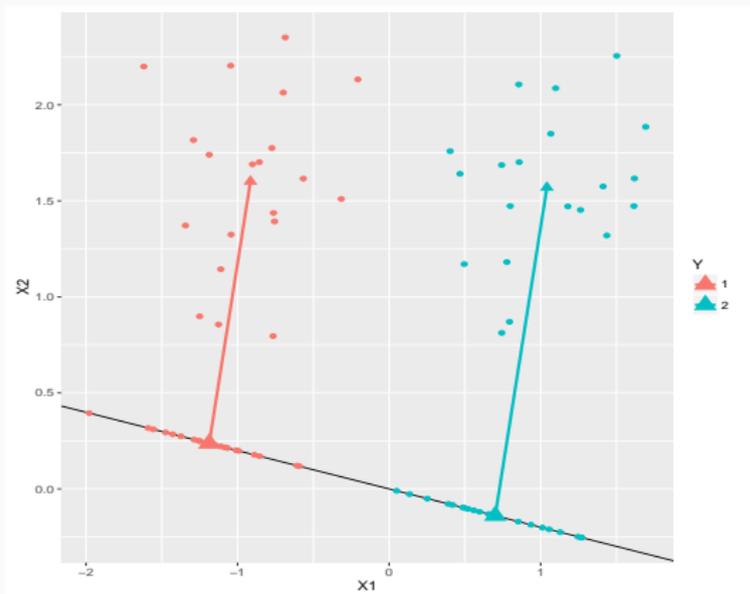
Analyse discriminante quadratique et régularisation

Analyse discriminante quadratique

Régularisation

Bibliographie

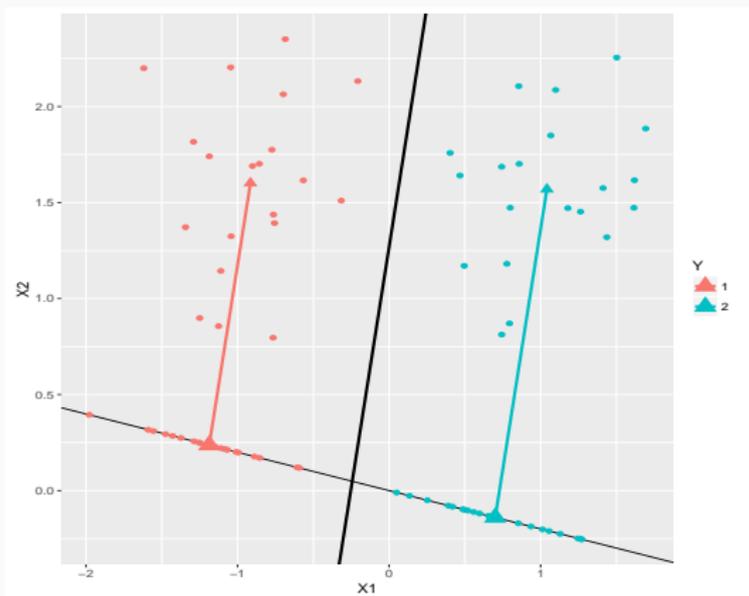
Le problème de la classification



Question

Comment classer un **nouveau point** $x = (x_1, x_2)$?

Une idée naturelle



Réponse

Utiliser l'axe **orthogonal à l'axe discriminant** passant par le point **équidistant** des projetés des centres de gravité.

Règle de Mahalanobis

Règle géométrique

On classe x dans le groupe 1 si

$$\|\pi_a(x) - \pi_a(g_1)\| \leq \|\pi_a(x) - \pi_a(g_2)\|.$$

Règle de Mahalanobis

Règle géométrique

On classe x dans le groupe 1 si

$$\|\pi_a(x) - \pi_a(g_1)\| \leq \|\pi_a(x) - \pi_a(g_2)\|.$$

Propriété

La règle géométrique est équivalente à classer x dans le groupe qui minimise la **distance de Mahalanobis**

$$d(x, g_k) = (x - g_k)^t W^{-1} (x - g_k).$$

Règle de Mahalanobis

Règle géométrique

On classe x dans le groupe 1 si

$$\|\pi_a(x) - \pi_a(g_1)\| \leq \|\pi_a(x) - \pi_a(g_2)\|.$$

Propriété

La règle géométrique est équivalente à classer x dans le groupe qui minimise la **distance de Mahalanobis**

$$d(x, g_k) = (x - g_k)^t W^{-1} (x - g_k).$$

- La propriété se **généralise** à un nombre de groupes K quelconque.

LDA prédictive

On affecte un nouvel individu x au groupe k qui maximise

- la probabilité **a posteriori** : $\mathbf{P}(Y = k|x = x)$
- la **fonction linéaire discriminante**

$$\delta_k(x) = x^t \Sigma^{-1} \mu_k - \frac{1}{2} \mu_k^t \Sigma^{-1} \mu_k + \log \pi_k$$

- la distance de Mahalanobis "corrigée"

$$-\frac{1}{2} (x - \mu_k)^t \Sigma^{-1} (x - \mu_k) + \log \pi_k$$

Lien LDA descriptive/Prédictive

LDA prédictive

On affecte un nouvel individu x au groupe k qui maximise

- la probabilité **a posteriori** : $\mathbf{P}(Y = k|x = x)$
- la **fonction linéaire discriminante**

$$\delta_k(x) = x^t \Sigma^{-1} \mu_k - \frac{1}{2} \mu_k^t \Sigma^{-1} \mu_k + \log \pi_k$$

- la distance de Mahalanobis "corrigée"

$$-\frac{1}{2} (x - \mu_k)^t \Sigma^{-1} (x - \mu_k) + \log \pi_k$$

LDA géométrique

On affecte un nouvel individu x au groupe k qui minimise la **distance de Mahalanobis**

$$d(x, g_k) = (x - g_k)^t W^{-1} (x - g_k).$$

Remarque (importante)

Dans le cas où on estime

- μ_k par g_k
- Σ par W ,

et que $\pi_k = 1/K, k = 1, \dots, K$ les règles **prédictives et géométriques** coïncident.

Remarque (importante)

Dans le cas où on estime

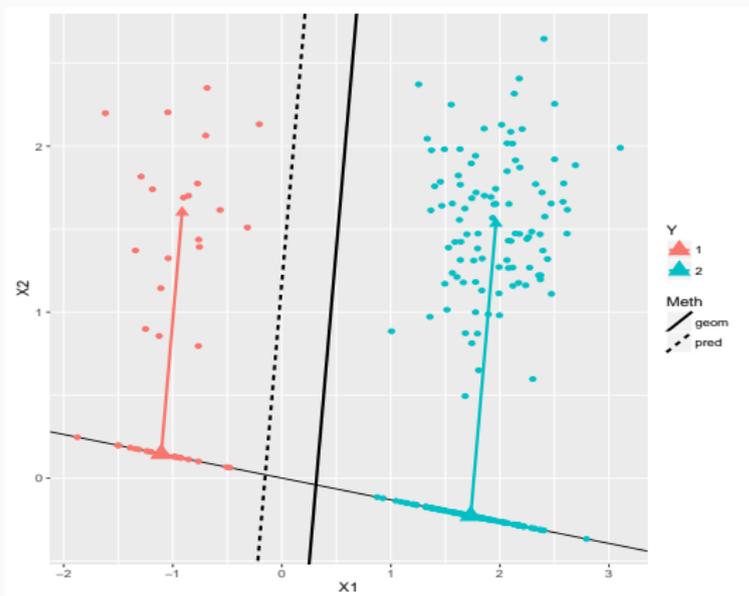
- μ_k par g_k
- Σ par W ,

et que $\pi_k = 1/K, k = 1, \dots, K$ les règles **prédictives et géométriques** coïncident.

Conséquence

La règle géométrique correspond à la règle probabiliste lorsque les **probabilités a priori** de chaque groupe sont **identiques**.

Exemple



Remarque

La règle géométrique "favorise" les groupes à faibles effectifs.

Quelques tests

- LDA peut-être accompagnée de quelques tests statistiques.
- Par exemple : $H_0 : \mu_1 = \dots = \mu_K = 0$.

- LDA peut-être accompagnée de quelques **tests statistiques**.
- Par exemple : $H_0 : \mu_1 = \dots = \mu_K = 0$.

- **Λ de Wilks** :

$$\Lambda = \frac{|W|}{|V|} = \frac{|W|}{|W + B|}$$

suit la **loi de Wilks** de paramètres $(p, n - K, K - 1)$ sous H_0 .

- **Lawley-Hotelling** : $\text{tr}(W^{-1}B)$ suit la loi de T_0^2 généralisé de **Hotelling** sous H_0 (approximable par un $\chi_{p(K-1)}^2$).

Exemple

- Sous R, la fonction `manova` permet de mettre en œuvre ces tests.

```
> D <- as.matrix(iris[,1:4])
> mod <- manova(D~iris$Species)
> summary(mod,test="Wilks")
              Df      Wilks approx F num Df den Df      Pr(>F)
iris$Species  2 0.023439   199.15      8   288 < 2.2e-16 ***
Residuals    147
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
> summary(mod,test="Hotelling-Lawley")
              Df Hotelling-Lawley approx F num Df den Df      Pr(>F)
iris$Species  2          32.477   580.53      8   286 < 2.2e-16 ***
Residuals    147
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

- LDA : règle **linéaire** qui va classer
 - au **centre de gravité le plus proche** ;
 - en prenant en compte la structure de **covariance** des données.

- LDA : règle **linéaire** qui va classer
 - au **centre de gravité le plus proche** ;
 - en prenant en compte la structure de **covariance** des données.
- En effet pour 2 groupes, on classera groupe 2 si

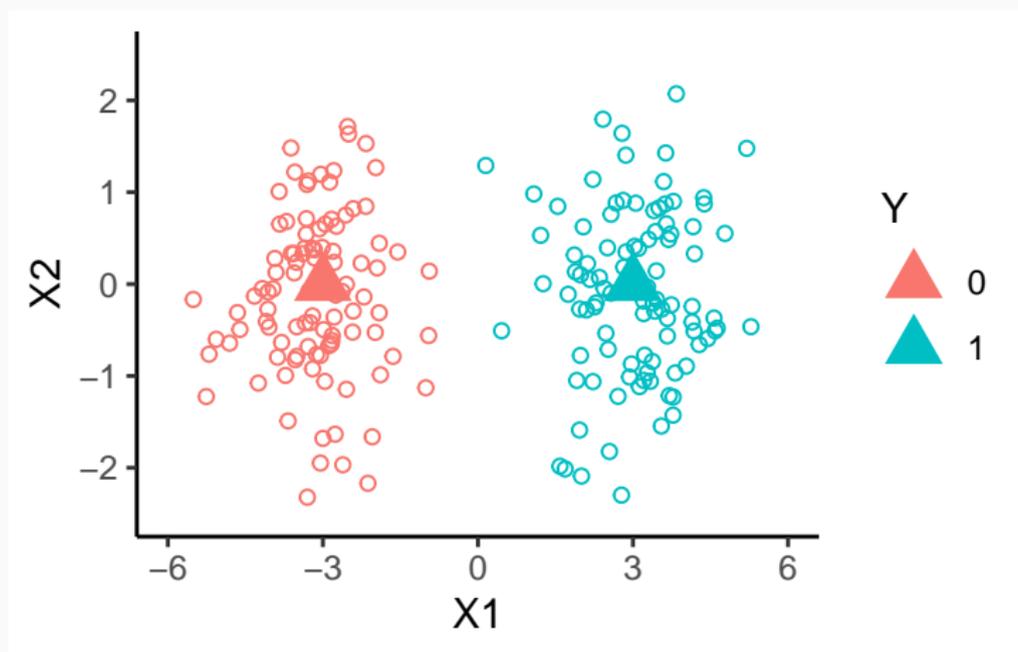
$$x^t \Sigma^{-1} (\mu_2 - \mu_1) > \frac{1}{2} (\mu_2 + \mu_1)^t \Sigma^{-1} (\mu_2 - \mu_1) - \log \left(\frac{\pi_2}{\pi_1} \right).$$

- LDA : règle **linéaire** qui va classer
 - au **centre de gravité le plus proche** ;
 - en prenant en compte la structure de **covariance** des données.
- En effet pour 2 groupes, on classera groupe 2 si

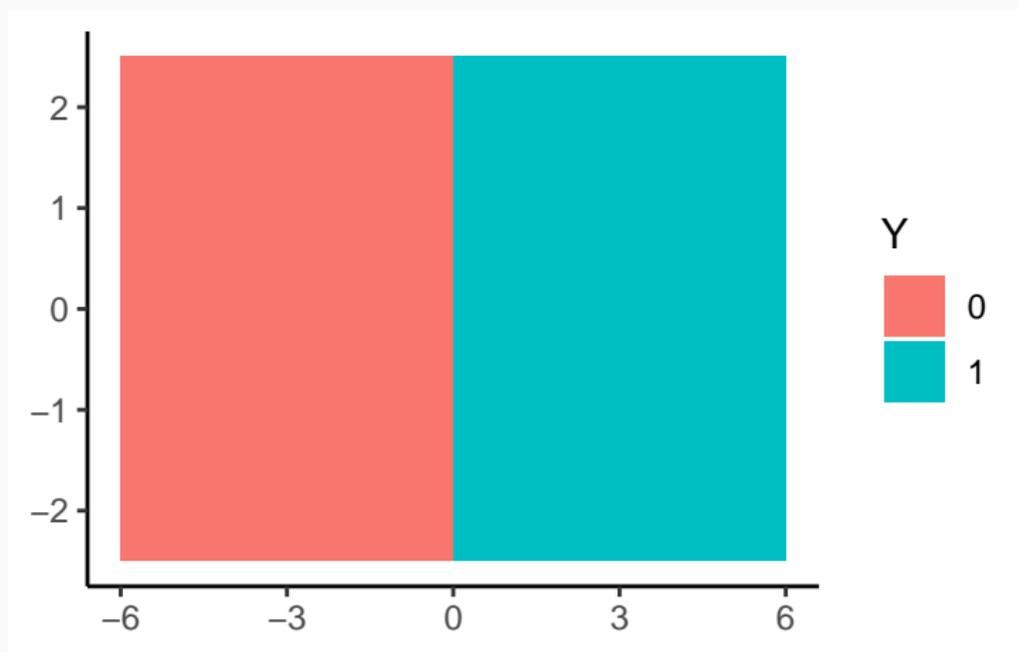
$$x^t \Sigma^{-1} (\mu_2 - \mu_1) > \frac{1}{2} (\mu_2 + \mu_1)^t \Sigma^{-1} (\mu_2 - \mu_1) - \log \left(\frac{\pi_2}{\pi_1} \right).$$

- **Remarque** : si $\Sigma = \text{Id}$ alors il suffit de regarder la distance euclidienne aux centre de gravités.

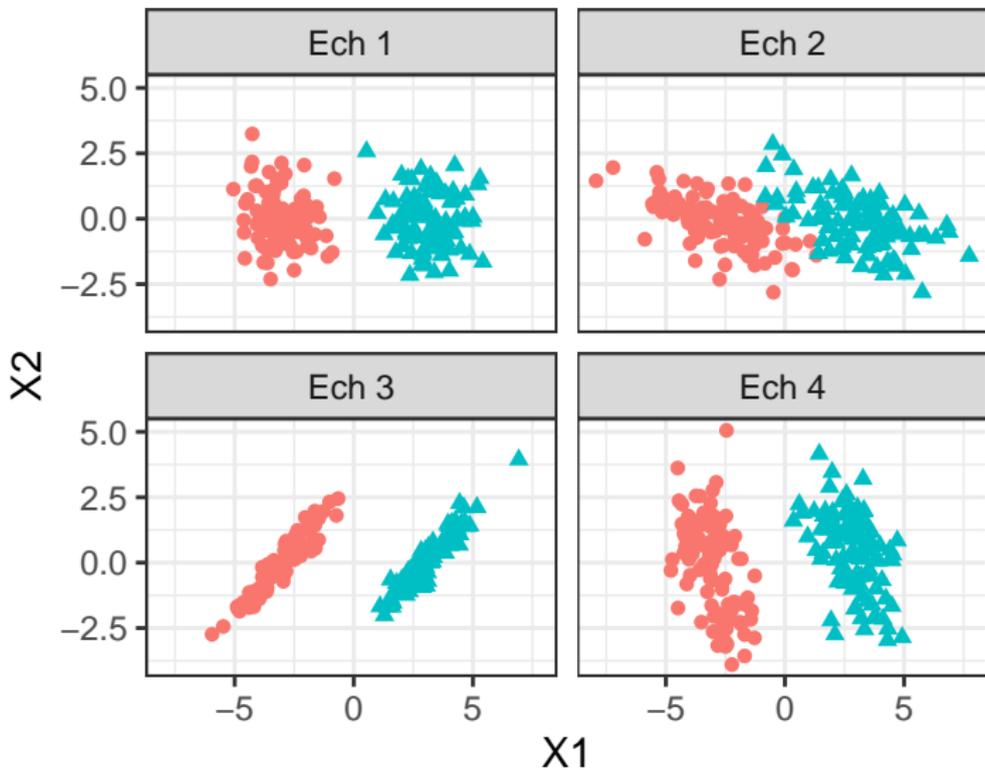
Exemple : $\Sigma = Id$



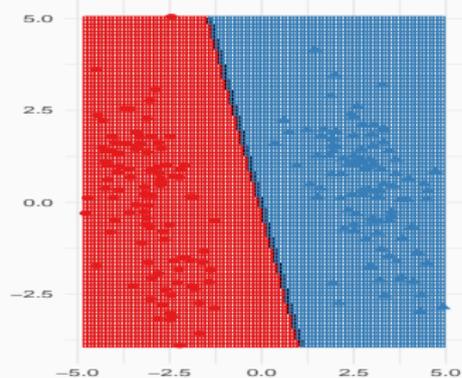
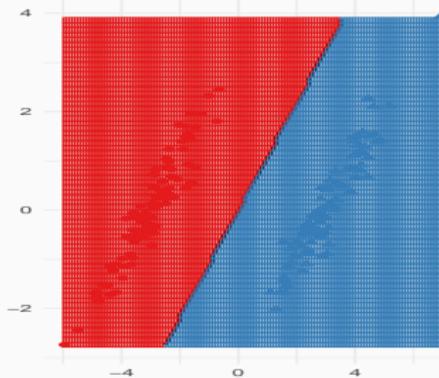
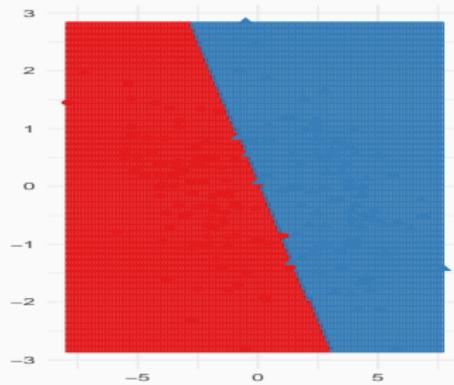
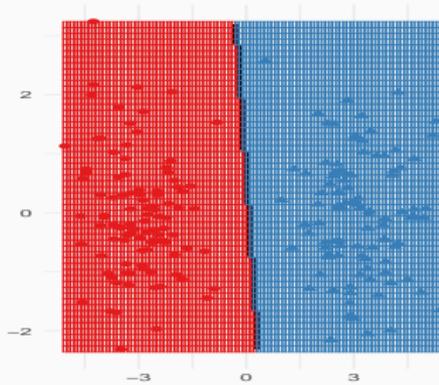
Exemple : $\Sigma = \text{Id}$



Exemple : $\Sigma \neq \text{Id}$



Exemple : $\Sigma \neq \text{Id}$



Le modèle d'analyse discriminante linéaire

- Une seule variable explicative

- LDA : cas général

Réduction de dimension

- Recherche d'axes discriminants

- Classification

Analyse discriminante quadratique et régularisation

- Analyse discriminante quadratique

- Régularisation

Bibliographie

Le modèle d'analyse discriminante linéaire

Une seule variable explicative

LDA : cas général

Réduction de dimension

Recherche d'axes discriminants

Classification

Analyse discriminante quadratique et régularisation

Analyse discriminante quadratique

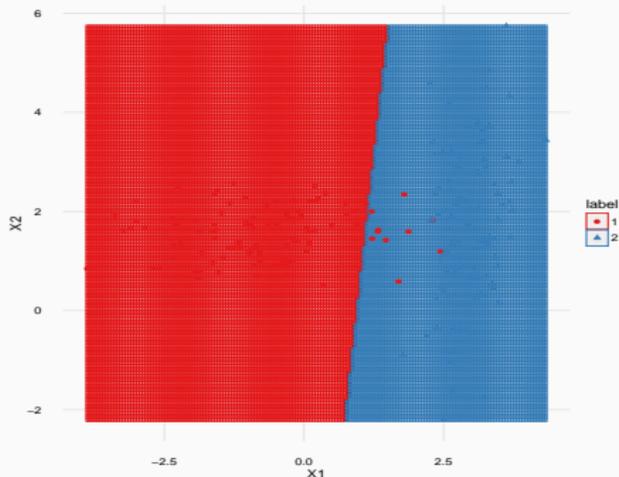
Régularisation

Bibliographie

1. Suppose $X|Y = k \sim \mathcal{N}(\mu_k, \Sigma)$;
2. Estime μ_k et Σ par **maximum de vraisemblance**;
3. Bayes pour obtenir les **probabilités a posteriori**

$$\mathbf{P}(Y = k|X = x) = \frac{\pi_k f_k(x)}{\sum_{\ell=1}^K \pi_\ell f_\ell(x)}.$$

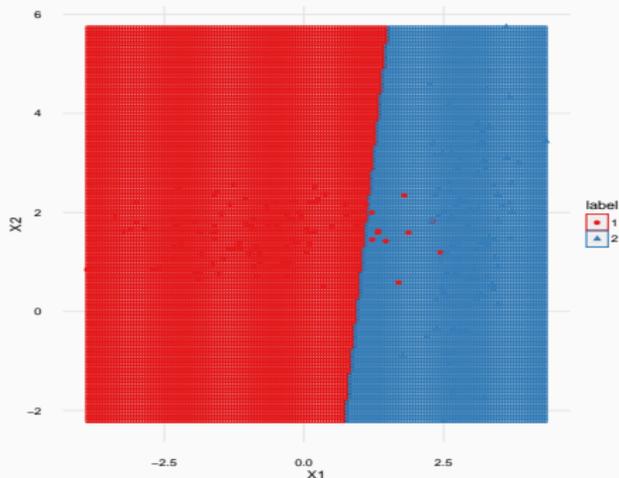
Exemple



Remarques

- LDA peut être mise en défaut lorsque les matrices de variance-covariance sont différentes.

Exemple



Remarques

- LDA peut être mise en défaut lorsque les matrices de variance-covariance sont différentes.
- L'analyse discriminante quadratique propose d'utiliser des matrices de variance-covariance différentes pour chaque groupe.

Modèle QDA

$$X|Y = k \sim \mathcal{N}(\mu_k, \Sigma_k).$$

Modèle QDA

$$X|Y = k \sim \mathcal{N}(\mu_k, \Sigma_k).$$

Estimation

- Les paramètres μ_k et $\pi_k = \mathbf{P}(Y = k)$ sont estimés de la même façon que pour l'analyse discriminante linéaire.

Modèle QDA

$$X|Y = k \sim \mathcal{N}(\mu_k, \Sigma_k).$$

Estimation

- Les paramètres μ_k et $\pi_k = \mathbf{P}(Y = k)$ sont estimés de la même façon que pour l'analyse discriminante linéaire.
- Les matrices de variance-covariance Σ_k sont « naturellement » estimées selon

$$\hat{\Sigma}_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i: Y_i=k} (X_i - \hat{\mu}_k)(X_i - \hat{\mu}_k)^t.$$

Modèle QDA

$$X|Y = k \sim \mathcal{N}(\mu_k, \Sigma_k).$$

Estimation

- Les paramètres μ_k et $\pi_k = \mathbf{P}(Y = k)$ sont estimés de la même façon que pour l'analyse discriminante linéaire.
- Les matrices de variance-covariance Σ_k sont « naturellement » estimées selon

$$\hat{\Sigma}_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i: Y_i=k} (X_i - \hat{\mu}_k)(X_i - \hat{\mu}_k)^t.$$

Formule de Bayes

$$\mathbf{P}(Y = k|X = x) = \frac{\pi_k f_k(x)}{\sum_{\ell=1}^K \pi_\ell f_\ell(x)}.$$

Fonctions linéaires discriminantes

- Même principe que pour LDA mais **FLD différentes**.

Définition

On appelle **fonctions linéaires discriminantes** (pour QDA) les fonctions

$$\delta_k(x) = -\frac{1}{2} \log |\Sigma_k| - \frac{1}{2} (x - \mu_k)^t \Sigma_k^{-1} (x - \mu_k) + \log \pi_k, \quad k = 1, \dots, K.$$

Fonctions linéaires discriminantes

- Même principe que pour LDA mais **FLD différentes**.

Définition

On appelle **fonctions linéaires discriminantes** (pour QDA) les fonctions

$$\delta_k(x) = -\frac{1}{2} \log |\Sigma_k| - \frac{1}{2} (x - \mu_k)^t \Sigma_k^{-1} (x - \mu_k) + \log \pi_k, \quad k = 1, \dots, K.$$

Propriété

$$\operatorname{argmax}_k \mathbf{P}(Y = k | X = x) = \operatorname{argmax}_k \delta_k(x).$$

Fonctions linéaires discriminantes

- Même principe que pour LDA mais **FLD différentes**.

Définition

On appelle **fonctions linéaires discriminantes** (pour QDA) les fonctions

$$\delta_k(x) = -\frac{1}{2} \log |\Sigma_k| - \frac{1}{2} (x - \mu_k)^t \Sigma_k^{-1} (x - \mu_k) + \log \pi_k, \quad k = 1, \dots, K.$$

Propriété

$$\operatorname{argmax}_k \mathbf{P}(Y = k | X = x) = \operatorname{argmax}_k \delta_k(x).$$

Conclusion

Choisir le groupe qui **maximise les probabilités a posteriori** revient à choisir le groupe qui **maximise les fonctions linéaires discriminantes**.

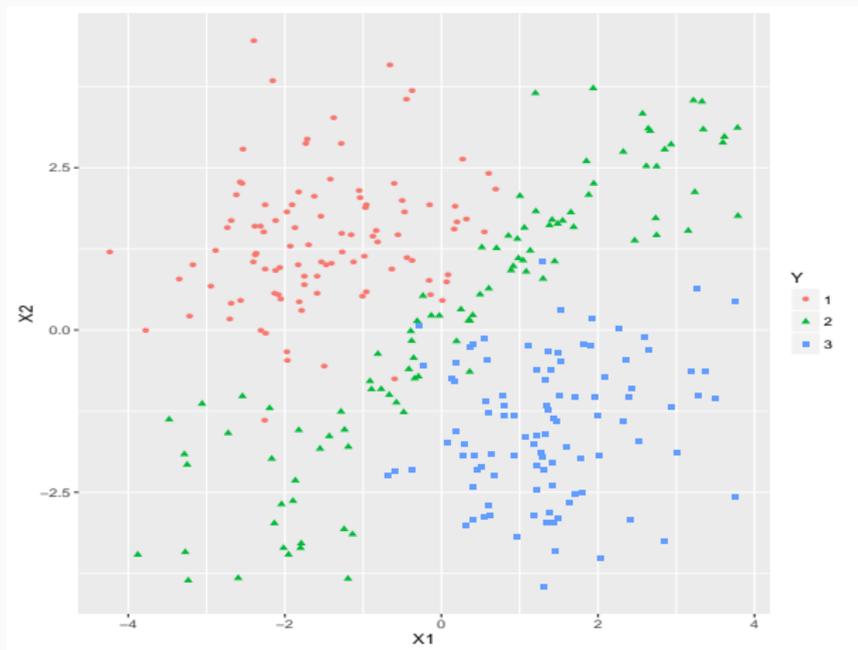
- Les frontières entre les groupes k et ℓ

$$\{x \text{ tq } \delta_k(x) = \delta_\ell(x)\}$$

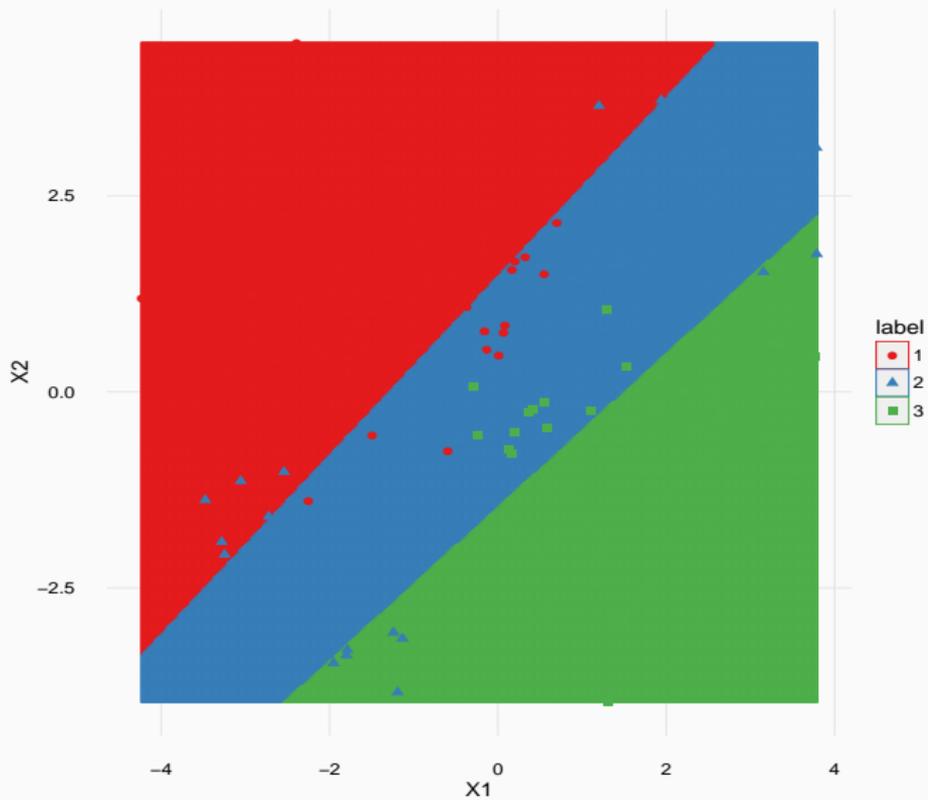
sont ici quadratiques en x (linéaires pour LDA).

Exemple

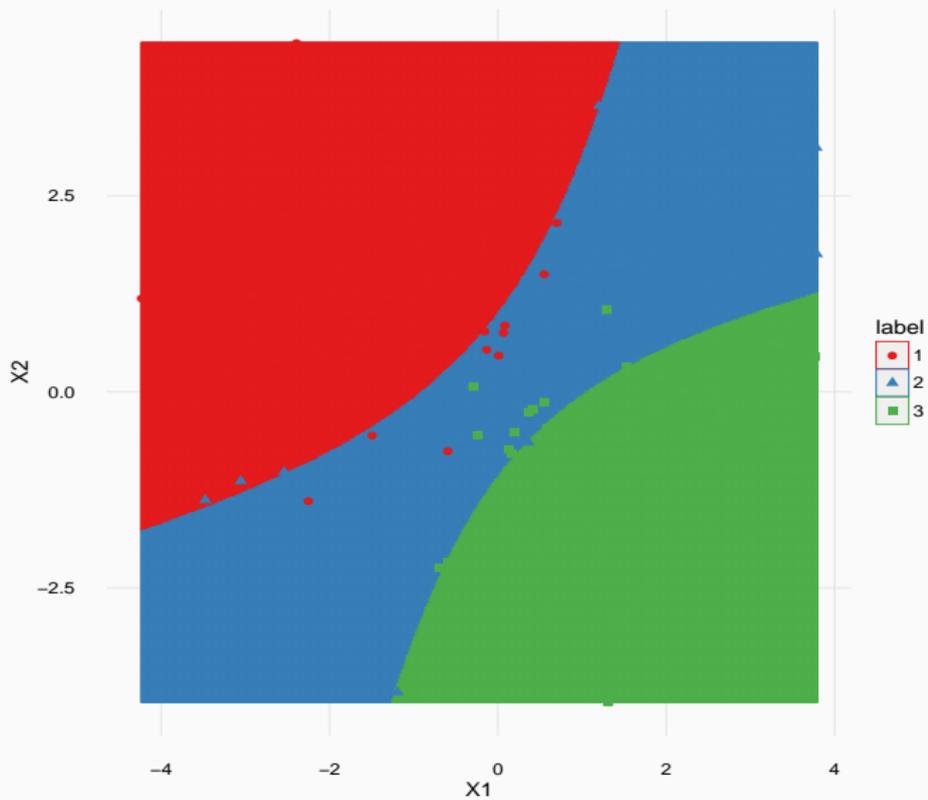
- On compare LDA et QDA sur les données du graphe ci-dessous



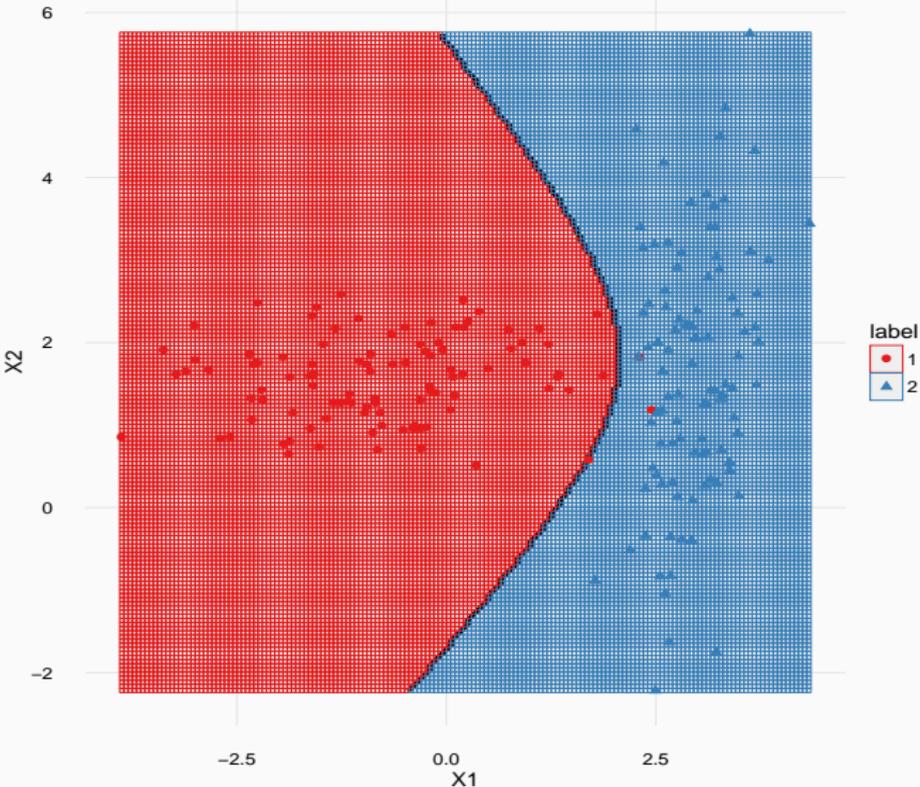
Frontières LDA



Frontières QDA



Autre exemple



- QDA est **plus flexible** que LDA : LDA est en quelques sortes « emboîtée » dans QDA.

- QDA est **plus flexible** que LDA : LDA est en quelques sortes « emboîtée » dans QDA.
- QDA permet donc a priori de modéliser une **gamme plus large** de phénomènes.

- QDA est **plus flexible** que LDA : LDA est en quelques sortes « emboîtée » dans QDA.
- QDA permet donc a priori de modéliser une **gamme plus large** de phénomènes.
- Mais... Le **prix à payer** se situe au niveau de l'estimation :
 - $(K - 1) \times (p + 1)$ paramètres pour LDA ;
 - $(K - 1) \times (p(p + 3)/2 + 1)$ pour QDA.

- QDA est **plus flexible** que LDA : LDA est en quelques sortes « emboîtée » dans QDA.
- QDA permet donc a priori de modéliser une **gamme plus large** de phénomènes.
- Mais... Le **prix à payer** se situe au niveau de l'estimation :
 - $(K - 1) \times (p + 1)$ paramètres pour LDA ;
 - $(K - 1) \times (p(p + 3)/2 + 1)$ pour QDA.

Conclusion

QDA est **plus complexe** \implies plus de paramètres à estimer \implies estimateurs **moins précis**.

Le modèle d'analyse discriminante linéaire

Une seule variable explicative

LDA : cas général

Réduction de dimension

Recherche d'axes discriminants

Classification

Analyse discriminante quadratique et régularisation

Analyse discriminante quadratique

Régularisation

Bibliographie

Régularisation 1

- [Friedman, 1989] propose de combiner LDA et QDA.
- On reste dans le modèle gaussien mais

Régularisation 1

- [Friedman, 1989] propose de combiner LDA et QDA.
- On reste dans le modèle gaussien mais
- les matrices de variance-covariance des lois $X|Y = k$ sont estimées par

$$(1 - \lambda)\hat{\Sigma}_k + \lambda\hat{\Sigma}.$$

Régularisation 1

- [Friedman, 1989] propose de combiner LDA et QDA.
- On reste dans le modèle gaussien mais
- les matrices de variance-covariance des lois $X|Y = k$ sont estimées par

$$(1 - \lambda)\hat{\Sigma}_k + \lambda\hat{\Sigma}.$$

Role de λ

- $\lambda = 0 \implies$ QDA ;
- $\lambda = 1 \implies$ LDA.

Régularisation 1

- [Friedman, 1989] propose de combiner LDA et QDA.
- On reste dans le modèle gaussien mais
- les matrices de variance-covariance des lois $X|Y = k$ sont estimées par

$$(1 - \lambda)\hat{\Sigma}_k + \lambda\hat{\Sigma}.$$

Role de λ

- $\lambda = 0 \implies$ QDA ;
- $\lambda = 1 \implies$ LDA.
- $\lambda \in [0, 1]$ est un paramètre à calibrer.

- [Friedman, 1989] (toujours...) propose de régulariser la matrice de variance-covariance pour LDA :

$$(1 - \gamma)\hat{\Sigma} + \gamma\hat{\sigma}^2 I_p.$$

- [Friedman, 1989] (toujours...) propose de régulariser la matrice de variance-covariance pour LDA :

$$(1 - \gamma)\hat{\Sigma} + \gamma\hat{\sigma}^2 I_p.$$

Role de γ

- $\gamma = 0 \implies$ LDA ;

- [Friedman, 1989] (toujours...) propose de régulariser la matrice de variance-covariance pour LDA :

$$(1 - \gamma)\hat{\Sigma} + \gamma\hat{\sigma}^2 I_p.$$

Role de γ

- $\gamma = 0 \implies$ LDA ;
- $\gamma \in [0, 1]$ est un paramètre à calibrer.

- La fonction `rda` du package `klaR` permet de combiner les deux pénalités en estimant les matrices de variance-covariance selon

$$(1 - \gamma)\widehat{\Sigma}_k(\lambda) + \gamma \frac{\text{trace}(\widehat{\Sigma}_k(\lambda))}{p} I_p.$$

avec

$$\widehat{\Sigma}_k(\lambda) = (1 - \lambda)\widehat{\Sigma}_k + \lambda\widehat{\Sigma}.$$

- La fonction `rda` du package `klaR` permet de combiner les deux pénalités en estimant les matrices de variance-covariance selon

$$(1 - \gamma)\hat{\Sigma}_k(\lambda) + \gamma \frac{\text{trace}(\hat{\Sigma}_k(\lambda))}{p} I_p.$$

avec

$$\hat{\Sigma}_k(\lambda) = (1 - \lambda)\hat{\Sigma}_k + \lambda\hat{\Sigma}.$$

Roles de γ et λ

- $\gamma = 0, \lambda = 0 \implies$ QDA ;
- $\gamma = 0, \lambda = 1 \implies$ LDA ;

- La fonction `rda` du package `klaR` permet de combiner les deux pénalités en estimant les matrices de variance-covariance selon

$$(1 - \gamma)\hat{\Sigma}_k(\lambda) + \gamma \frac{\text{trace}(\hat{\Sigma}_k(\lambda))}{p} I_p.$$

avec

$$\hat{\Sigma}_k(\lambda) = (1 - \lambda)\hat{\Sigma}_k + \lambda\hat{\Sigma}.$$

Roles de γ et λ

- $\gamma = 0, \lambda = 0 \implies$ QDA ;
- $\gamma = 0, \lambda = 1 \implies$ LDA ;
- Le problème est de bien choisir λ et γ .

Exemple

- La fonction `rda` propose de sélectionner automatiquement ces paramètres

```
> set.seed(1234)
> rda(Species~.,data=iris)
Call:
rda(formula = Species ~ ., data = iris)
```

```
Regularization parameters:
```

```
      gamma      lambda
0.09303661 0.85993116
```

```
Prior probabilities of groups:
```

```
      setosa versicolor virginica
0.3333333  0.3333333  0.3333333
```

```
Misclassification rate:
```

```
      apparent: 2 %
cross-validated: 2 %
```

Sélection avec caret i

On peut bien entendu également utiliser la fonction `train` du package `caret`.

```
> ctrl <- trainControl(method="cv")
> gr <- expand.grid(data.frame(gamma=seq(0,1,by=0.1),lambda=seq(0,1,by=0.1)))
> set.seed(12345)
> train(Species~.,data=iris,method="rda",tuneGrid=gr,trControl=ctrl)
```

Regularized Discriminant Analysis

150 samples

4 predictor

3 classes: 'setosa', 'versicolor', 'virginica'

No pre-processing

Resampling: Cross-Validated (10 fold)

Summary of sample sizes: 135, 135, 135, 135, 135, 135, ...

Resampling results across tuning parameters:

gamma	lambda	Accuracy	Kappa
-------	--------	----------	-------

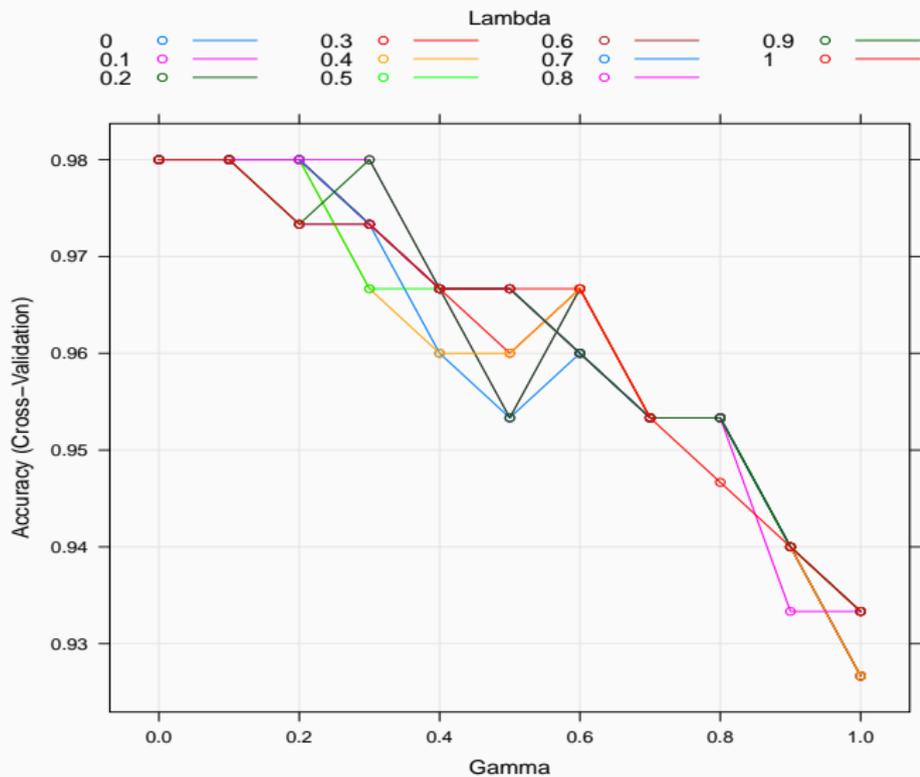
Sélection avec caret ii

0.0	0.0	0.9800000	0.97
0.0	0.1	0.9800000	0.97
0.0	0.2	0.9800000	0.97
0.0	0.3	0.9800000	0.97
0.0	0.4	0.9800000	0.97
0.0	0.5	0.9800000	0.97
0.0	0.6	0.9800000	0.97
0.0	0.7	0.9800000	0.97
0.0	0.8	0.9800000	0.97
0.0	0.9	0.9800000	0.97
0.0	1.0	0.9800000	0.97
0.1	0.0	0.9800000	0.97
0.1	0.1	0.9800000	0.97
0.1	0.2	0.9800000	0.97
0.1	0.3	0.9800000	0.97
0.1	0.4	0.9800000	0.97
0.1	0.5	0.9800000	0.97
0.1	0.6	0.9800000	0.97

Sélection avec caret iii

0.1	0.7	0.9800000	0.97
0.1	0.8	0.9800000	0.97
0.1	0.9	0.9800000	0.97
0.1	1.0	0.9800000	0.97
0.2	0.0	0.9733333	0.96
0.2	0.1	0.9800000	0.97
0.2	0.2	0.9800000	0.97

Accuracy was used to select the optimal model using the largest value.
The final values used for the model were $\gamma = 0$ and $\lambda = 1$.



- Tout comme pour les modèles linéaire et logistique, on peut chercher à sélectionner des variables pour un modèle d'analyse discriminante linéaire (les objectifs sont identiques).

Sélection de variables

- Tout comme pour les modèles linéaire et logistique, on peut chercher à sélectionner des variables pour un modèle d'analyse discriminante linéaire (les objectifs sont identiques).
- L'approche est similaire, on se donne un critère de choix de modèle (par exemple estimation de la probabilité d'erreur) et on utilise des techniques pas à pas.

Sélection de variables

- Tout comme pour les modèles linéaire et logistique, on peut chercher à sélectionner des variables pour un modèle d'analyse discriminante linéaire (les objectifs sont identiques).
- L'approche est similaire, on se donne un critère de choix de modèle (par exemple estimation de la probabilité d'erreur) et on utilise des techniques pas à pas.
- Sur R, les fonctions stepClass et train des packages klaR et caret permettent de faire de la sélection de variables.

Sélection avec stepClass

```
> stepclass(Species~.,data=iris,method="lda",direction="both")
'stepwise classification', using 10-fold cross-validated
correctness rate of method lda'.
150 observations of 4 variables in 3 classes; direction: both
stop criterion: improvement less than 5%.
correctness rate: 0.96; in: "Petal.Width"; variables (1): Petal.Width

hr.elapsed min.elapsed sec.elapsed
      0.000      0.000      0.194
method      : lda
final model : Species ~ Petal.Width
<environment: 0x12d5b5e38>
correctness rate = 0.96
```

Sélection avec train

```
> slda <- train(Species ~ ., data = iris,  
               method = "stepLDA",  
               trControl = trainControl(method = "cv"))  
> slda$finalModel  
method      : lda  
final model : y ~ Petal.Width  
<environment: 0x12c509298>  
correctness rate = 0.96
```

- L'analyse discriminante est une méthode **simple** permettant de répondre au problème de classification supervisée.
- Elle est implémentée dans tous les **logiciels statistiques**.
- Elle peut se révéler performante même lorsque les "hypothèses modèles" ne sont **pas vérifiées** (justifié par l'approche géométrique).
- Plutôt utilisée pour des variables explicatives quantitatives à la base mais **peut s'adapter à des variables qualitatives** :

- L'analyse discriminante est une méthode **simple** permettant de répondre au problème de classification supervisée.
- Elle est implémentée dans tous les **logiciels statistiques**.
- Elle peut se révéler performante même lorsque les "hypothèses modèles" ne sont **pas vérifiées** (justifié par l'approche géométrique).
- Plutôt utilisée pour des variables explicatives quantitatives à la base mais **peut s'adapter à des variables qualitatives** :
 1. **codage disjonctif** des variables qualitatives ;

- L'analyse discriminante est une méthode **simple** permettant de répondre au problème de classification supervisée.
- Elle est implémentée dans tous les **logiciels statistiques**.
- Elle peut se révéler performante même lorsque les "hypothèses modèles" ne sont **pas vérifiées** (justifié par l'approche géométrique).
- Plutôt utilisée pour des variables explicatives quantitatives à la base mais **peut s'adapter à des variables qualitatives** :
 1. **codage disjonctif** des variables qualitatives ;
 2. faire une analyse discriminante sur les axes d'une **analyse des correspondances multiples** (ACM) \implies **méthode DISQUAL** (voir [Saporta, 2011]).

Troisième partie III

Arbres

Arbres binaires

Choix des découpes

- Cas de la régression

- Cas de la classification supervisée

Elagage

Importance des variables

Annexe : arbres Chaid

- Regroupement des modalités

- Division d'un nœud

- Choix des paramètres

Bibliographie

- Les arbres sont des algorithmes de prédiction qui fonctionnent en régression et en discrimination.
- Il existe différentes variantes permettant de construire des prédicteurs par arbres.
- Nous nous focalisons dans cette partie sur la méthode CART [Breiman et al., 1984] qui est la plus utilisée. La méthode CHAID est proposée en annexe.

Arbres binaires

Choix des découpes

- Cas de la régression

- Cas de la classification supervisée

Elagage

Importance des variables

Annexe : arbres Chaid

- Regroupement des modalités

- Division d'un nœud

- Choix des paramètres

Bibliographie

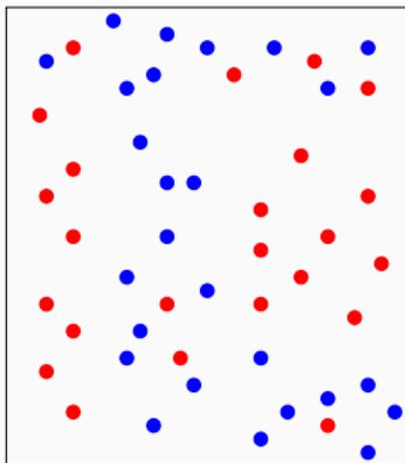
- On cherche à expliquer une variable Y par p variables explicatives X_1, \dots, X_p .

- On cherche à expliquer une variable Y par p variables explicatives X_1, \dots, X_p .
- Y peut admettre un nombre quelconque de modalités et les variables X_1, \dots, X_p peuvent être qualitatives et/ou quantitatives.

- On cherche à expliquer une variable Y par p variables explicatives X_1, \dots, X_p .
- Y peut admettre un nombre quelconque de modalités et les variables X_1, \dots, X_p peuvent être qualitatives et/ou quantitatives.
- Néanmoins, pour simplifier on se place dans un premier temps en discrimination binaire : Y admet 2 modalités (-1 ou 1). On suppose de plus que l'on a simplement 2 variables explicatives quantitatives.

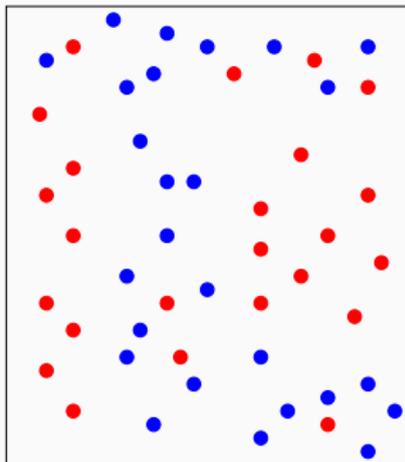
Représentation des données

- On dispose de n observations $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ où $X_i \in \mathbb{R}^2$ et $Y_i \in \{-1, 1\}$.



Représentation des données

- On dispose de n observations $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ où $X_i \in \mathbb{R}^2$ et $Y_i \in \{-1, 1\}$.



Approche par arbres

Trouver une **partition** des observations qui **sépare** "au mieux" les points rouges des points bleus.

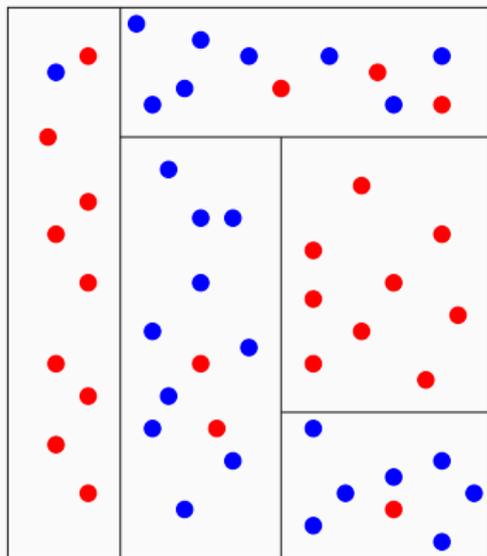
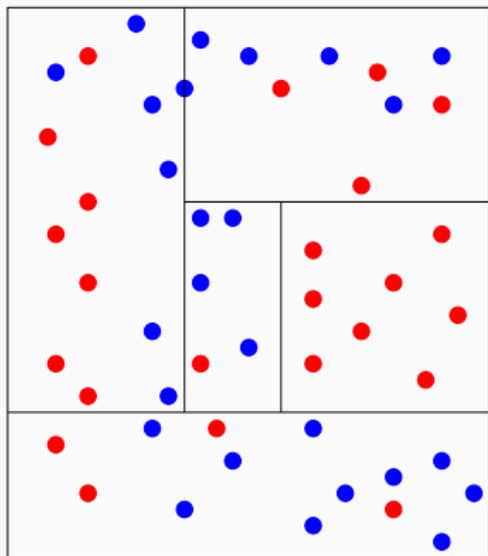
Arbre binaire

Un **arbre binaire de décision** CART est

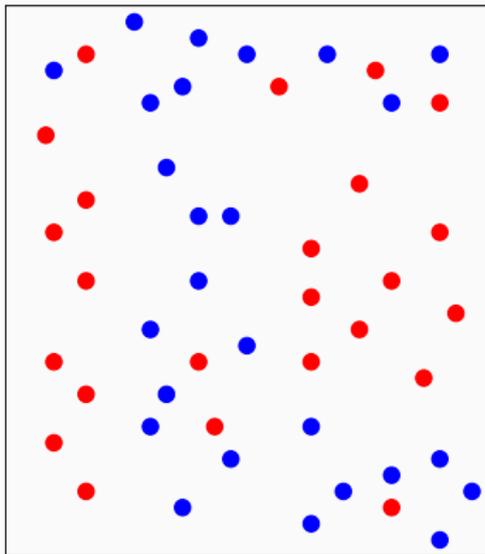
- un algorithme de **moyennage local** par partition (moyenne ou vote à la majorité sur les éléments de la partition),
- dont la partition est construite par **divisions successives** au moyen d'**hyperplans orthogonaux aux axes** de \mathbb{R}^P , dépendant des données (X_i, Y_i) .

Arbres binaires

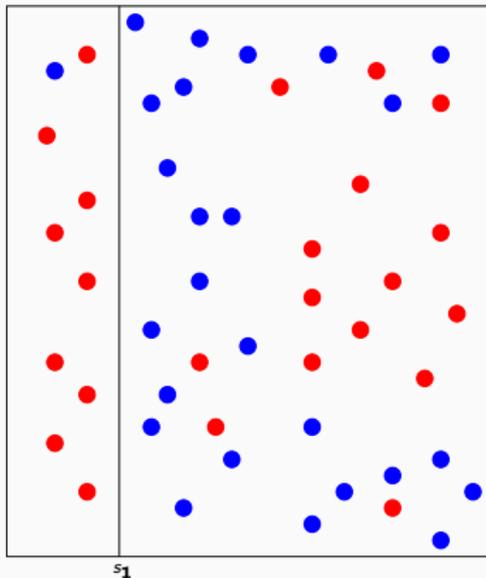
- La **méthode CART** propose de construire une partition basée sur des divisions **successives parallèles aux axes**.
- 2 exemples de partition :



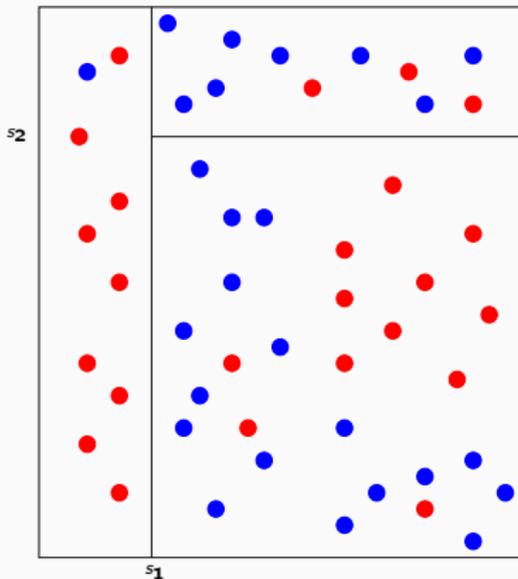
- A chaque étape, la méthode cherche une **nouvelle division** : une **variable** et un **seuil** de coupure.



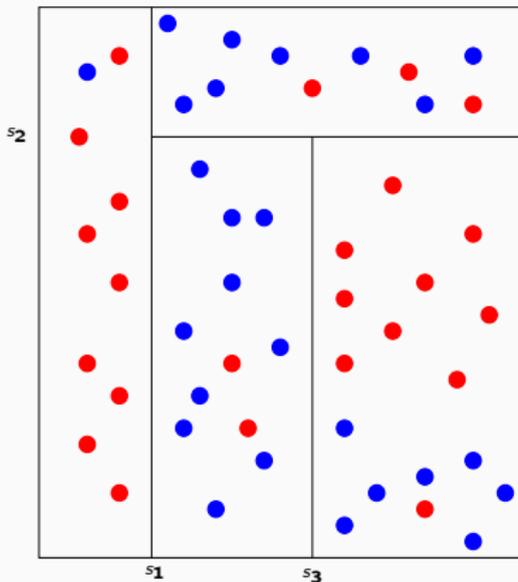
- A chaque étape, la méthode cherche une **nouvelle division** : une **variable** et un **seuil** de coupure.



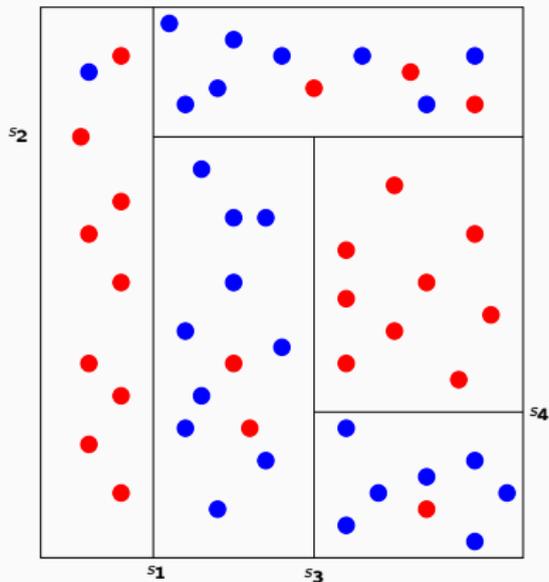
- A chaque étape, la méthode cherche une **nouvelle division** : une **variable** et un **seuil** de coupure.



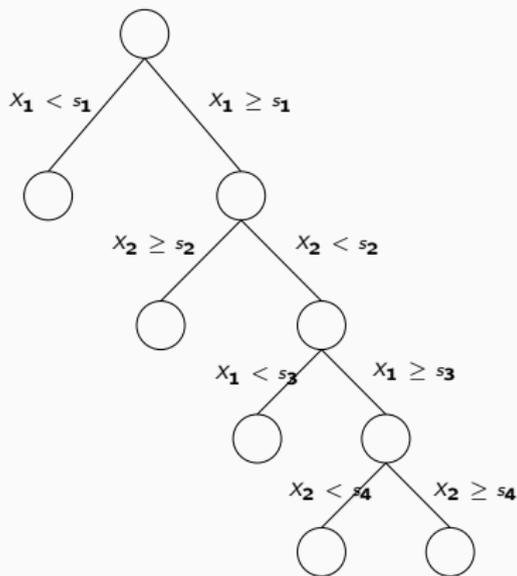
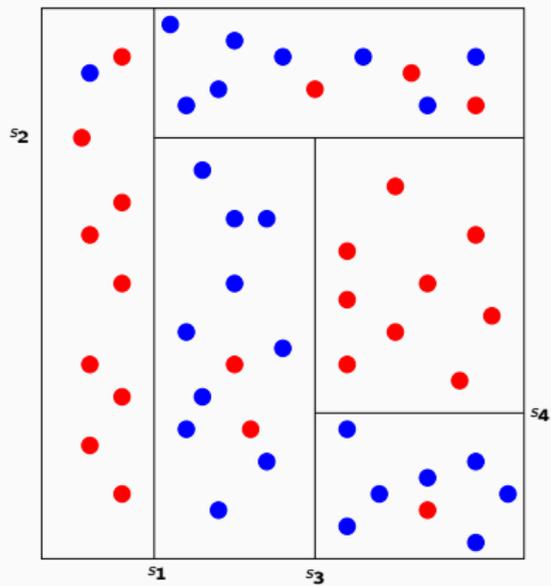
- A chaque étape, la méthode cherche une **nouvelle division** : une **variable** et un **seuil** de coupure.



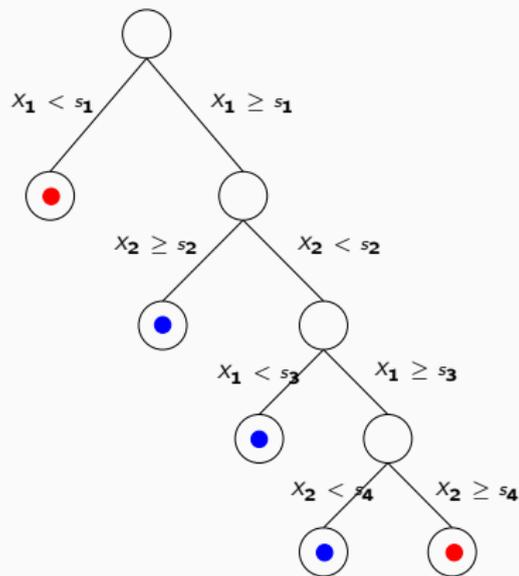
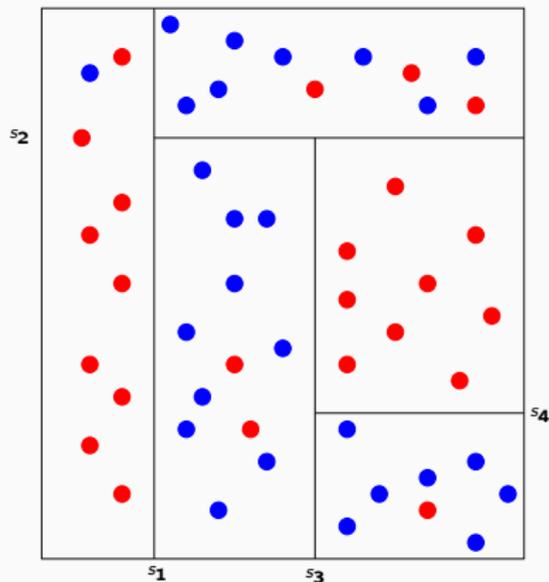
- A chaque étape, la méthode cherche une **nouvelle division** : une **variable** et un **seuil** de coupure.



Représentation de l'arbre



Représentation de l'arbre



Règle de classification

On effectue un **vote à la majorité** dans les nœuds terminaux de l'arbre.

Définition

- Les éléments de la partition d'un arbre sont appelés les **nœuds terminaux** ou les **feuilles** de l'arbre.
- L'ensemble \mathbb{R}^p constitue le **nœud racine**.
- Chaque division définit deux nœuds, les **nœuds fils à gauche et à droite**.

Arbres binaires

Choix des découpes

- Cas de la régression

- Cas de la classification supervisée

Elagage

Importance des variables

Annexe : arbres Chaid

- Regroupement des modalités

- Division d'un nœud

- Choix des paramètres

Bibliographie

Questions

1. Comment choisir les découpes ?
2. Faut-il stopper les découpes ? Si oui, quand ?

Questions

1. Comment choisir les découpes ?
2. Faut-il stopper les découpes ? Si oui, quand ?
 - A chaque étape, on cherche un couple (j, s) qui split un noeud \mathcal{N} en deux nœuds fils :
$$\mathcal{N}_1(j, s) = \{X \in \mathcal{N} | X_j \leq s\} \quad \text{et} \quad \mathcal{N}_2(j, s) = \{X \in \mathcal{N} | X_j > s\}.$$
- La sélection du couple (j, s) s'effectue en optimisant un critère qui mesure l'(im)pureté ou l'hétérogénéité des deux nœuds fils.

- L'impureté \mathcal{I} d'un nœud doit être :
 1. faible lorsque un nœud est homogène : les valeurs de Y dans le nœud sont proches.
 2. élevée lorsque un nœud est hétérogène : les valeurs de Y dans le nœud sont dispersés.

Critère de découpe

- L'**impureté** \mathcal{I} d'un nœud doit être :
 1. **faible** lorsque un nœud est homogène : les valeurs de Y dans le nœud sont **proches**.
 2. **élevée** lorsque un nœud est hétérogène : les valeurs de Y dans le nœud sont **dispersés**.

L'idée

Une fois \mathcal{I} défini, on choisira le couple (j, s) qui **maximise le gain d'impureté** :

$$\Delta(\mathcal{I}) = \mathbf{P}(\mathcal{N})\mathcal{I}(\mathcal{N}) - (\mathbf{P}(\mathcal{N}_1)\mathcal{I}(\mathcal{N}_1(j, s)) + \mathbf{P}(\mathcal{N}_2)\mathcal{I}(\mathcal{N}_2(j, s))).$$

Arbres binaires

Choix des découpes

- Cas de la régression

- Cas de la classification supervisée

Elagage

Importance des variables

Annexe : arbres Chaid

- Regroupement des modalités

- Division d'un nœud

- Choix des paramètres

Bibliographie

- Une mesure naturelle de l'impureté d'un nœud \mathcal{N} en régression est la variance du nœud :

$$\mathcal{I}(\mathcal{N}) = \frac{1}{|\mathcal{N}|} \sum_{i: X_i \in \mathcal{N}} (Y_i - \bar{Y}_{\mathcal{N}})^2,$$

où $\bar{Y}_{\mathcal{N}}$ désigne la moyenne des Y_i dans \mathcal{N} .

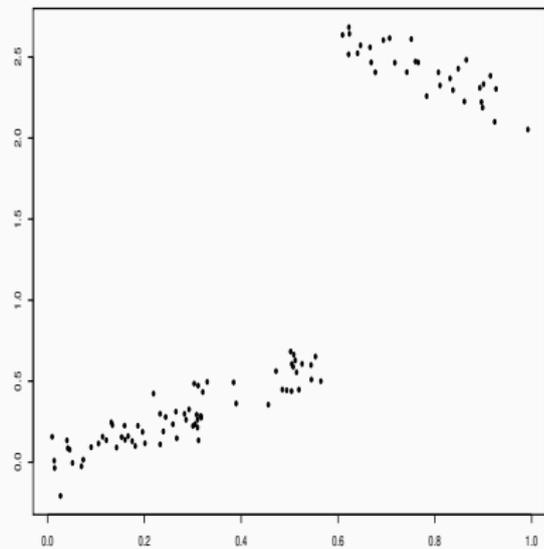
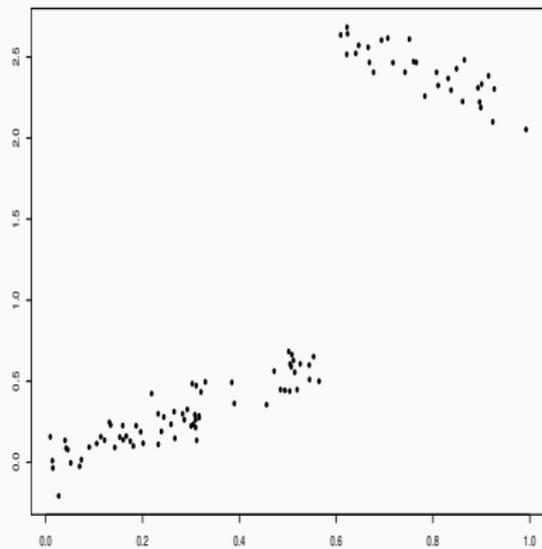
Découpe en régression

A chaque étape, on choisit le couple (j, s) qui minimise

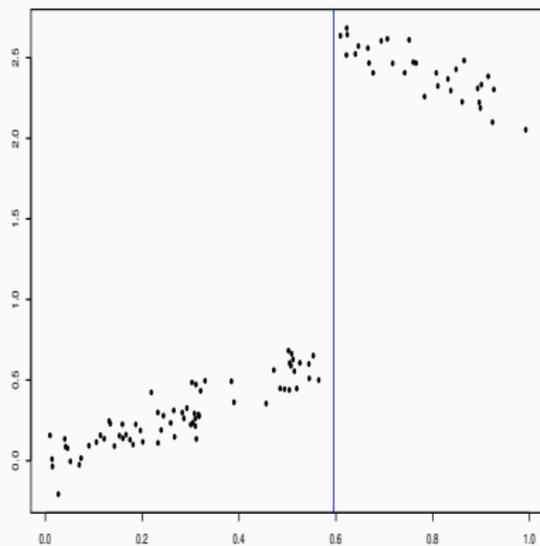
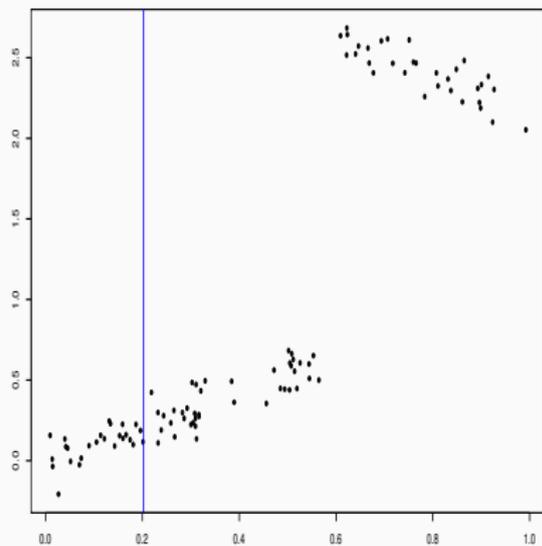
$$\sum_{X_i \in \mathcal{N}_1(j,s)} (Y_i - \bar{Y}_1)^2 + \sum_{X_i \in \mathcal{N}_2(j,s)} (Y_i - \bar{Y}_2)^2$$

où $\bar{Y}_k = \frac{1}{|\mathcal{N}_k(j,s)|} \sum_{X_i \in \mathcal{N}_k(j,s)} Y_i, k = 1, 2.$

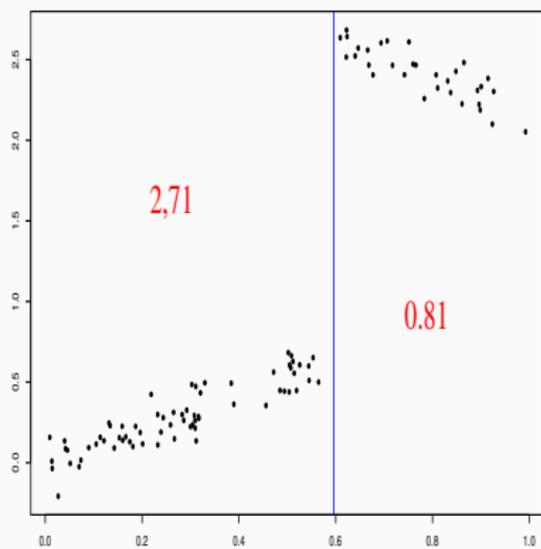
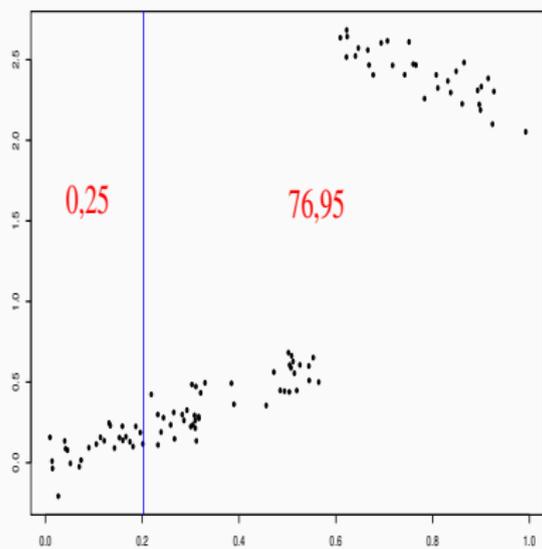
Exemple



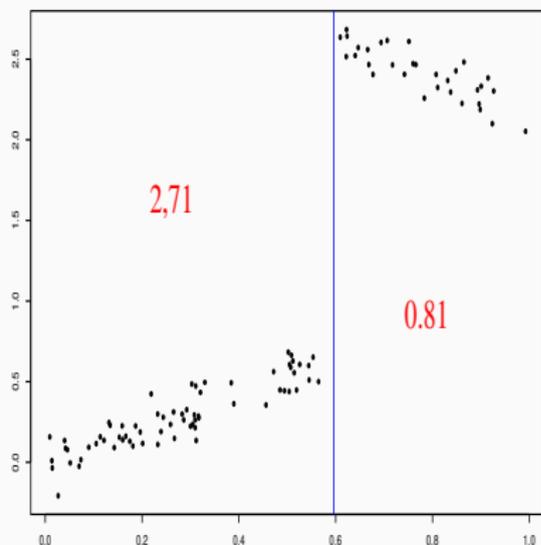
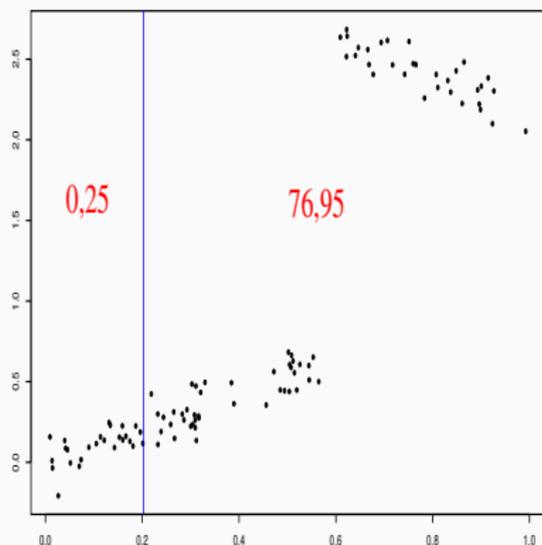
Exemple



Exemple



Exemple



Sélection

On choisira le seuil de droite.

Arbres binaires

Choix des découpes

Cas de la régression

Cas de la classification supervisée

Elagage

Importance des variables

Annexe : arbres Chaid

Regroupement des modalités

Division d'un nœud

Choix des paramètres

Bibliographie

- Les $Y_i, i = 1, \dots, n$ sont à valeurs dans $\{1, \dots, K\}$.

- Les $Y_i, i = 1, \dots, n$ sont à valeurs dans $\{1, \dots, K\}$.
- On cherche une fonction \mathcal{I} telle que $\mathcal{I}(\mathcal{N})$ soit
 - **petite** si un **label majoritaire** se distingue clairement dans \mathcal{N} ;
 - **grande** sinon.

- Les $Y_i, i = 1, \dots, n$ sont à valeurs dans $\{1, \dots, K\}$.
- On cherche une fonction \mathcal{I} telle que $\mathcal{I}(\mathcal{N})$ soit
 - **petite** si un **label majoritaire** se distingue clairement dans \mathcal{N} ;
 - **grande** sinon.

Impureté

L'**impureté** d'un nœud \mathcal{N} en classification se mesure selon

$$\mathcal{I}(\mathcal{N}) = \sum_{j=1}^K f(p_j(\mathcal{N}))$$

où

- $p_j(\mathcal{N})$ représente la proportion d'observations de la classe j dans le nœud \mathcal{N} .
- f est une fonction (concave) $[0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^+$ telle que $f(0) = f(1) = 0$.

Exemples de fonctions f

- Si \mathcal{N} est pur, on veut $\mathcal{I}(\mathcal{N}) = 0$

Exemples de fonctions f

- Si \mathcal{N} est pur, on veut $\mathcal{I}(\mathcal{N}) = 0 \implies$ c'est pourquoi f doit vérifier $f(0) = f(1) = 0$.

Exemples de fonctions f

- Si \mathcal{N} est pur, on veut $\mathcal{I}(\mathcal{N}) = 0 \implies$ c'est pourquoi f doit vérifier $f(0) = f(1) = 0$.
- Les 2 mesures d'impureté les plus classiques sont :
 1. **Gini** : $f(p) = p(1 - p)$;
 2. **Information** : $f(p) = -p \log(p)$.

Exemples de fonctions f

- Si \mathcal{N} est pur, on veut $\mathcal{I}(\mathcal{N}) = 0 \implies$ c'est pourquoi f doit vérifier $f(0) = f(1) = 0$.
- Les 2 mesures d'impureté les plus classiques sont :
 1. **Gini** : $f(p) = p(1 - p)$;
 2. **Information** : $f(p) = -p \log(p)$.

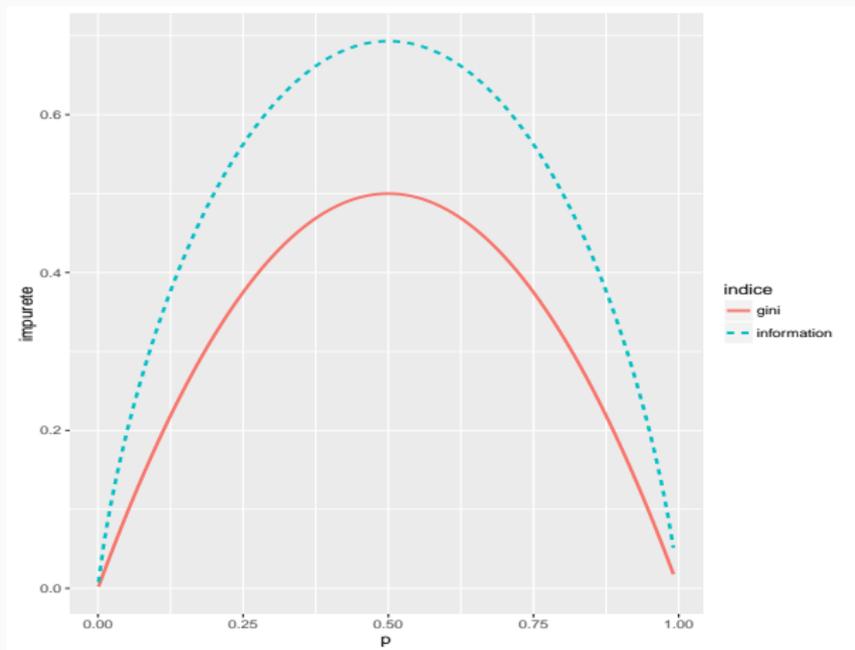
Cas binaire

Dans ce cas on a

1. $\mathcal{I}(\mathcal{N}) = 2p(1 - p)$ pour **Gini**
2. $\mathcal{I}(\mathcal{N}) = -p \log p - (1 - p) \log(1 - p)$ pour **Information**

où p désigne la proportion de 1 (ou -1) dans \mathcal{N} .

Impureté dans le cas binaire



- On rappelle que pour un nœud \mathcal{N} donné et un couple (j, s) , on note

$$\mathcal{N}_1(j, s) = \{X \in \mathcal{N} | X_j \leq s\} \quad \text{et} \quad \mathcal{N}_2(j, s) = \{X \in \mathcal{N} | X_j > s\}.$$

- On rappelle que pour un nœud \mathcal{N} donné et un couple (j, s) , on note

$$\mathcal{N}_1(j, s) = \{X \in \mathcal{N} | X_j \leq s\} \quad \text{et} \quad \mathcal{N}_2(j, s) = \{X \in \mathcal{N} | X_j > s\}.$$

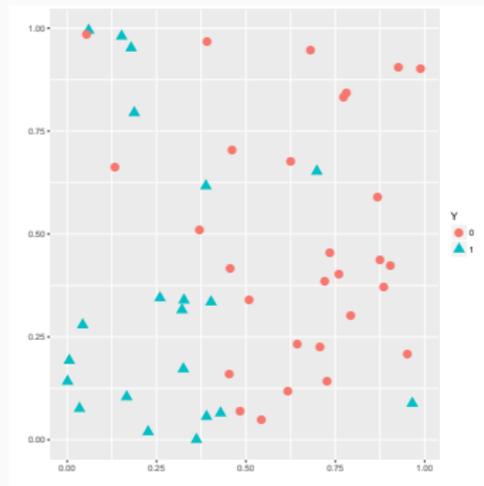
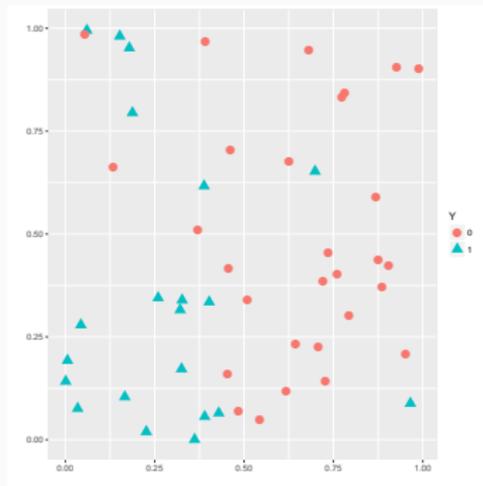
Choix de (j, s)

Pour une mesure d'impureté \mathcal{I} donnée, on choisira le couple (j, s) qui maximise le gain d'impureté :

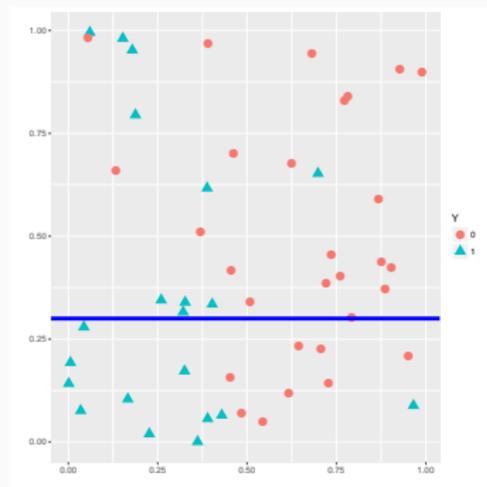
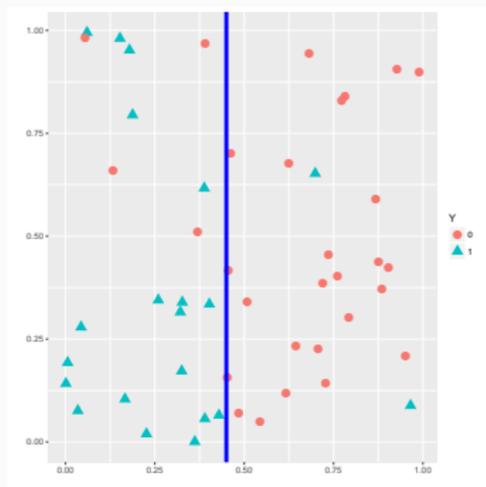
$$\Delta(\mathcal{I}) = \mathbf{P}(\mathcal{N})\mathcal{I}(\mathcal{N}) - (\mathbf{P}(\mathcal{N}_1)\mathcal{I}(\mathcal{N}_1(j, s)) + \mathbf{P}(\mathcal{N}_2)\mathcal{I}(\mathcal{N}_2(j, s))).$$

Exemple

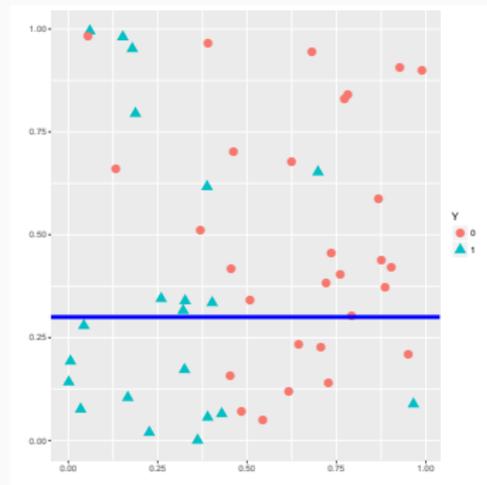
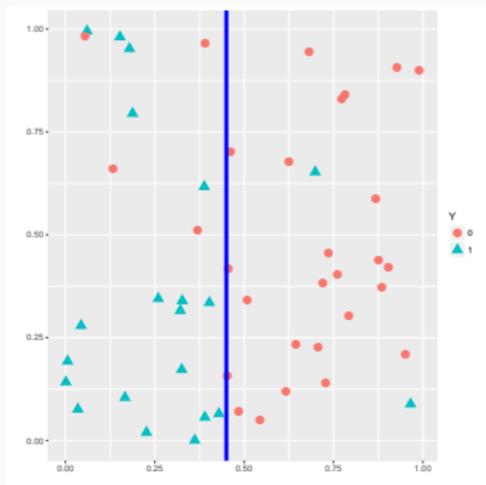
$$\mathcal{I}(\mathcal{N}) = 0.4872$$



Exemple

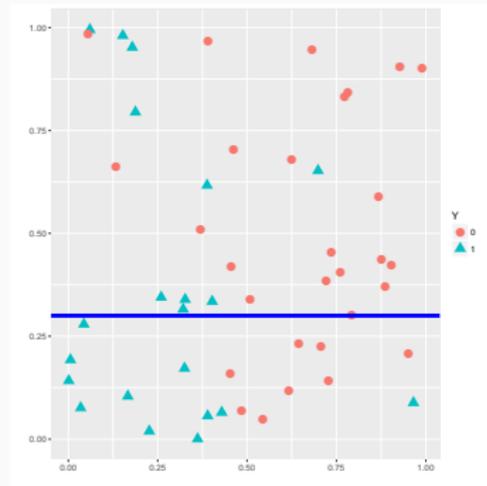
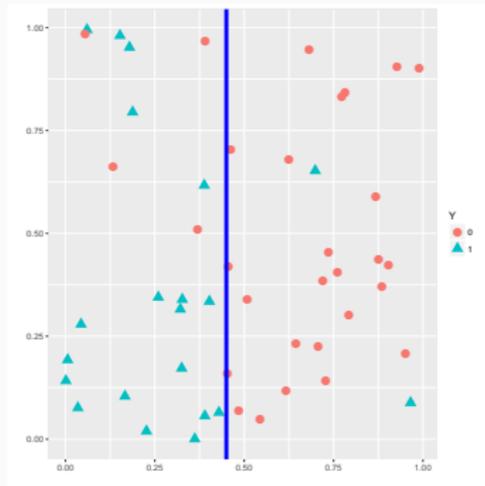


Exemple



	$\mathcal{I}(\mathcal{N}_1)$	$\mathcal{I}(\mathcal{N}_2)$	$\Delta(\mathcal{I})$
Gauche	0.287	0.137	0.281
Droite	0.488	0.437	0.031

Exemple



	$\mathcal{I}(\mathcal{N}_1)$	$\mathcal{I}(\mathcal{N}_2)$	$\Delta(\mathcal{I})$
Gauche	0.287	0.137	0.281
Droite	0.488	0.437	0.031

Conclusion

On choisira la découpe de **gauche**.

Arbres binaires

Choix des découpes

- Cas de la régression

- Cas de la classification supervisée

Elagage

Importance des variables

Annexe : arbres Chaid

- Regroupement des modalités

- Division d'un nœud

- Choix des paramètres

Bibliographie

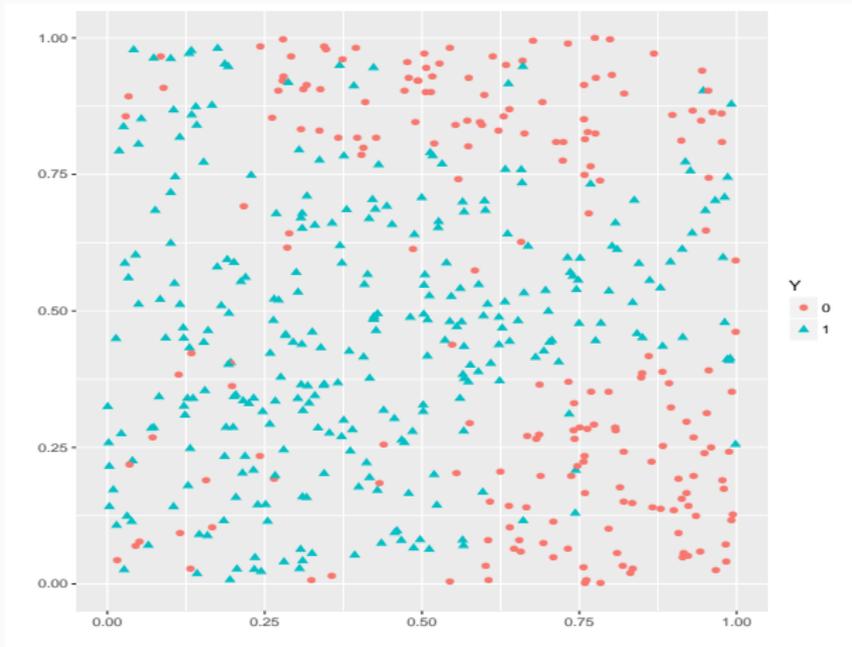
- Comment construire un "bon" arbre ?

- Comment construire un "bon" arbre ?
- Construire l'arbre maximal ? (on découpe les nœuds jusqu'à ce qu'on ne puisse plus).

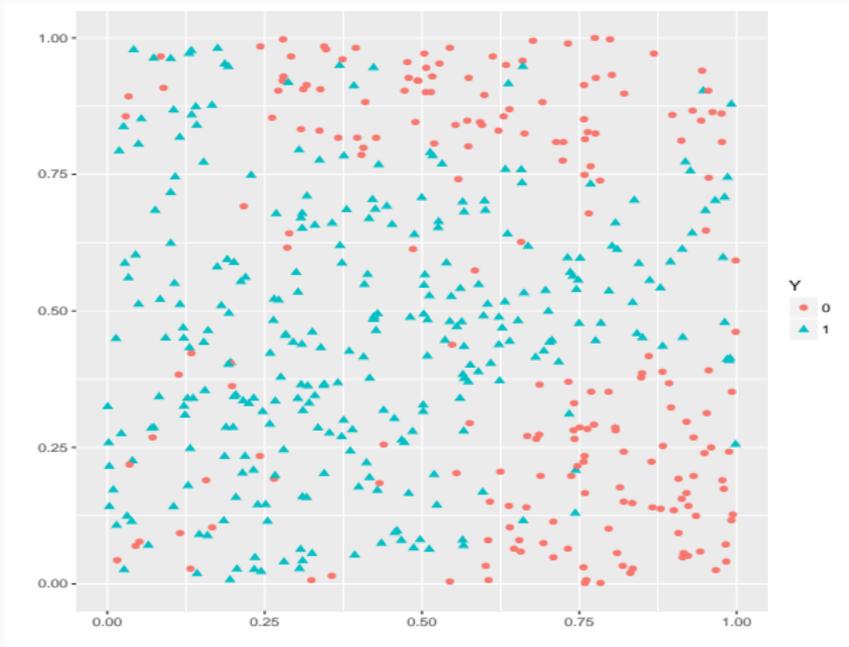
- Comment construire un "bon" arbre ?
- Construire l'arbre maximal ? (on découpe les nœuds jusqu'à ce qu'on ne puisse plus).
- Faut-il se donner un critère d'arrêt ?

- Comment construire un "bon" arbre ?
- Construire l'arbre maximal ? (on découpe les nœuds jusqu'à ce qu'on ne puisse plus).
- Faut-il se donner un critère d'arrêt ?
- Faut-il construire un arbre grand et choisir un sous-arbre de ce dernier ?

Un exemple en discrimination



Un exemple en discrimination

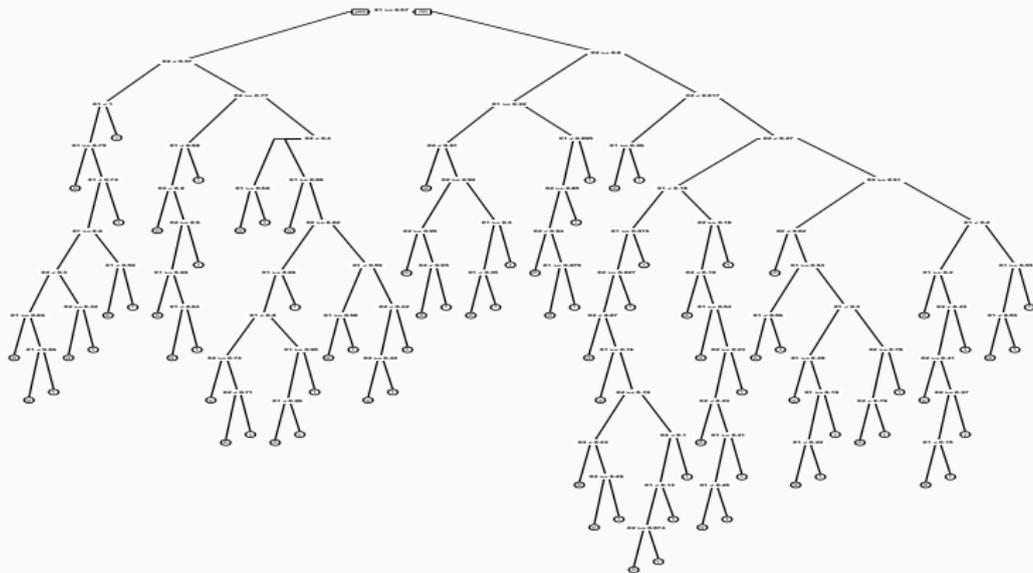


Arbre optimal ?

Intuitivement, on a envie de faire à peu près 5 classes.

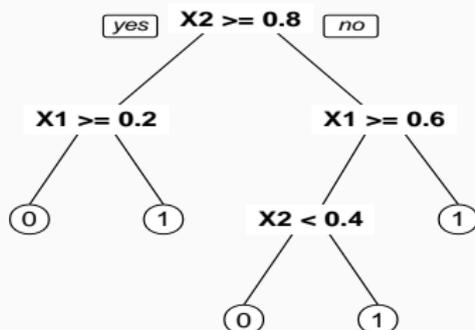
Arbre « maximal »

```
> library(rpart)
> library(rpart.plot)
> arbre1 <- rpart(Y~.,data=donnees,cp=0.0001,minsplitlevel=2)
> prp(arbre1)
```



Un arbre plus petit

```
> arbre2 <- rpart(Y~.,data=donnees)
> prp(arbre2)
```



Comparaison des deux arbres

- On compare les performances des deux arbres en estimant leur **probabilité de mauvais classement** sur un échantillon test :

```
> prev1 <- predict(arbre1,newdata=dtest,type="class")
> prev2 <- predict(arbre2,newdata=dtest,type="class")
> round(mean(prev1!=dtest$Y),3)
[1] 0.157
> round(mean(prev2!=dtest$Y),3)
[1] 0.115
```

Comparaison des deux arbres

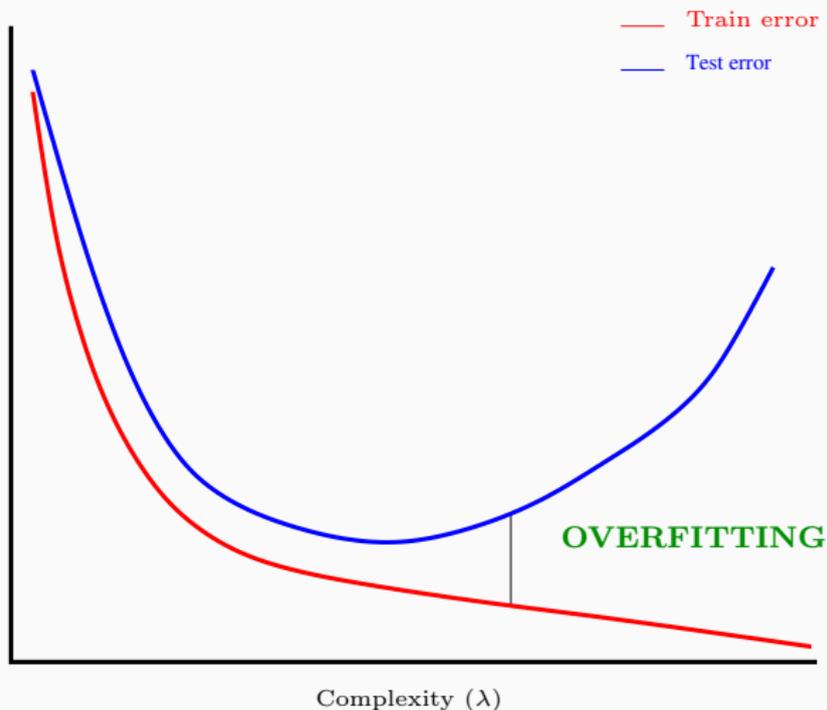
- On compare les performances des deux arbres en estimant leur **probabilité de mauvais classement** sur un échantillon test :

```
> prev1 <- predict(arbre1,newdata=dtest,type="class")
> prev2 <- predict(arbre2,newdata=dtest,type="class")
> round(mean(prev1!=dtest$Y),3)
[1] 0.157
> round(mean(prev2!=dtest$Y),3)
[1] 0.115
```

Conclusion

La performance **n'augmente pas forcément** avec la profondeur.

Sur-ajustement pour les arbres



Remarque

La complexité d'un arbre est mesurée par sa taille ou profondeur.

Biais et variance

La **profondeur** régule le compromis biais/variance :

1. **Peu de découpes** (arbres peu profonds) \implies arbres stables \implies **peu de variance**... mais... **beaucoup de biais**.
2. **Beaucoup de découpes** (arbres profonds) \implies arbres instables \implies **peu de biais**... mais... **beaucoup de variance (surapprentissage)**.

Biais et variance

La **profondeur** régule le compromis biais/variance :

1. **Peu de découpes** (arbres peu profonds) \implies arbres stables \implies **peu de variance**... mais... **beaucoup de biais**.
2. **Beaucoup de découpes** (arbres profonds) \implies arbres instables \implies **peu de biais**... mais... **beaucoup de variance** (surapprentissage).

Principe d'élagage [Breiman et al., 1984]

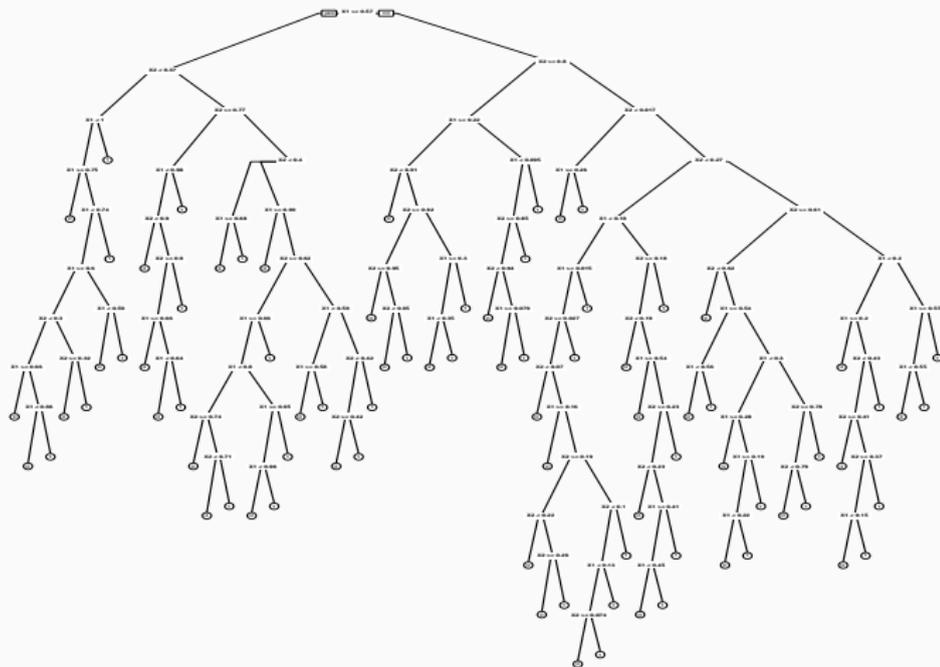
Plutôt que de choisir « quand couper » on raisonne en 3 temps :

1. On construit un **arbre maximal** (très profond) \mathcal{T}_{max} ;
2. On sélectionne une **suite d'arbres emboîtés** :

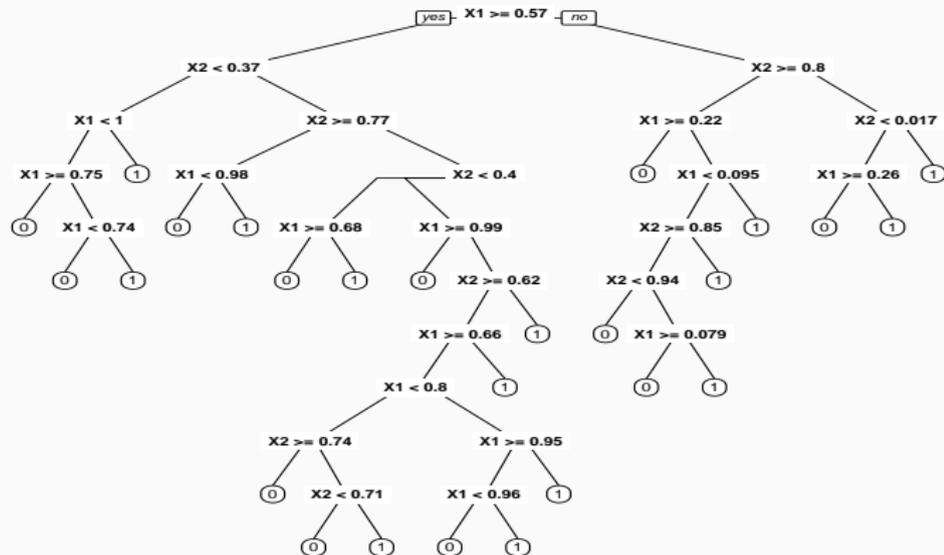
$$\mathcal{T}_{max} = \mathcal{T}_0 \supset \mathcal{T}_1 \supset \dots \supset \mathcal{T}_K.$$

3. On **sélectionne un arbre** dans cette sous-suite.

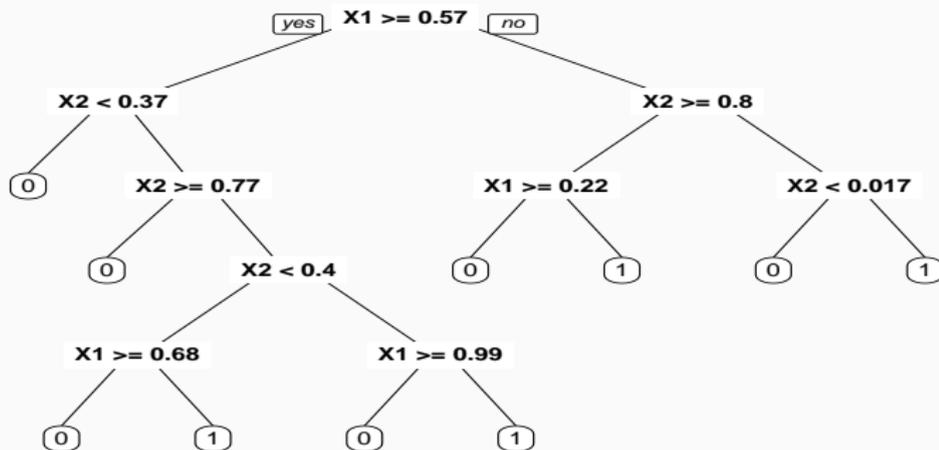
Arbres emboîtés



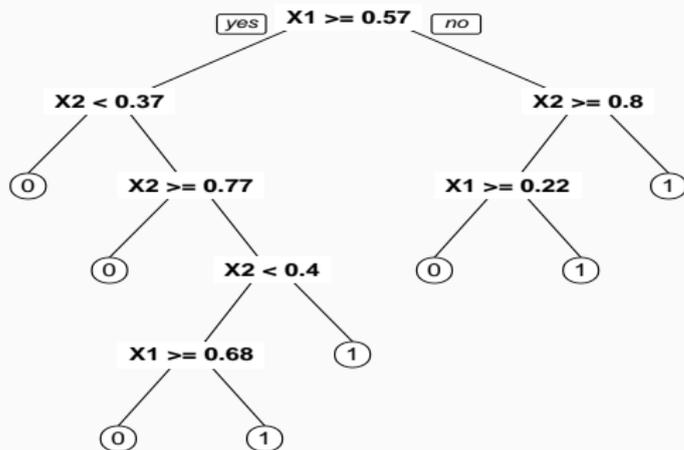
Arbres emboîtés

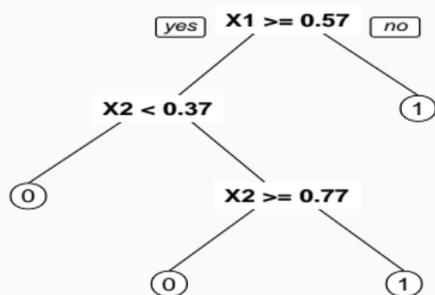


Arbres emboîtés



Arbres emboîtés





①

Construction de la suite de sous arbres

- Soit T un arbre à $|T|$ nœuds terminaux $\mathcal{N}_1, \dots, \mathcal{N}_{|T|}$.
- Soit $R(\mathcal{N})$ le risque (l'erreur) dans le nœud \mathcal{N} :

- **Régression** :

$$R(\mathcal{N}) = \frac{1}{|\mathcal{N}|} \sum_{i: X_i \in \mathcal{N}} (Y_i - \bar{Y}_{\mathcal{N}})^2.$$

- **Classification binaire** :

$$R(\mathcal{N}) = \frac{1}{|\mathcal{N}|} \sum_{i: X_i \in \mathcal{N}} \mathbf{1}_{Y_i \neq Y_{\mathcal{N}}}.$$

Construction de la suite de sous arbres

- Soit T un arbre à $|T|$ nœuds terminaux $\mathcal{N}_1, \dots, \mathcal{N}_{|T|}$.
- Soit $R(\mathcal{N})$ le risque (l'erreur) dans le nœud \mathcal{N} :
 - **Régression** :

$$R(\mathcal{N}) = \frac{1}{|\mathcal{N}|} \sum_{i: X_i \in \mathcal{N}} (Y_i - \bar{Y}_{\mathcal{N}})^2.$$

- **Classification binaire** :

$$R(\mathcal{N}) = \frac{1}{|\mathcal{N}|} \sum_{i: X_i \in \mathcal{N}} \mathbf{1}_{Y_i \neq Y_{\mathcal{N}}}.$$

Définition

Soit $\alpha > 0$, on pose

$$C_{\alpha}(T) = \sum_{m=1}^{|T|} N_m R(\mathcal{N}_m) + \alpha |T|.$$

Idée

- $C_\alpha(T)$ est un critère qui prend en compte l'adéquation d'un arbre et sa complexité.
- L'idée est de chercher un arbre T_α qui minimise $C_\alpha(T)$ pour une valeur de α bien choisie.

Idée

- $C_\alpha(T)$ est un critère qui prend en compte l'adéquation d'un arbre et sa complexité.
- L'idée est de chercher un arbre T_α qui minimise $C_\alpha(T)$ pour une valeur de α bien choisie.

Remarque

- $\alpha = 0 \implies T_\alpha = T_0 = T_{max}$.
- $\alpha = +\infty \implies T_\alpha = T_{+\infty} = \text{arbre sans coupure}$.

Idée

- $C_\alpha(T)$ est un critère qui prend en compte l'adéquation d'un arbre et sa complexité.
- L'idée est de chercher un arbre T_α qui minimise $C_\alpha(T)$ pour une valeur de α bien choisie.

Remarque

- $\alpha = 0 \implies T_\alpha = T_0 = T_{max}$.
- $\alpha = +\infty \implies T_\alpha = T_{+\infty} = \text{arbre sans coupure}$.
- α est appelé paramètre de complexité et $C_\alpha(T)$ le cout de l'arbre T .

Théorème [Breiman et al., 1984]

Il existe une sous-suite finie $\alpha_0 = 0 < \alpha_1 < \dots < \alpha_M$ avec $M < |T_{max}|$ et une suite associée d'**arbres emboîtés**

$$T_{max} = T_0 \supset T_1 \supset \dots \supset T_M$$

telles que $\forall \alpha \in [\alpha_m, \alpha_{m+1}[$

$$T_m = \underset{T}{\operatorname{argmin}} C_\alpha(T).$$

Théorème [Breiman et al., 1984]

Il existe une sous-suite finie $\alpha_0 = 0 < \alpha_1 < \dots < \alpha_M$ avec $M < |T_{max}|$ et une suite associée d'**arbres emboîtés**

$$T_{max} = T_0 \supset T_1 \supset \dots \supset T_M$$

telles que $\forall \alpha \in [\alpha_m, \alpha_{m+1}[$

$$T_m = \underset{T}{\operatorname{argmin}} C_\alpha(T).$$



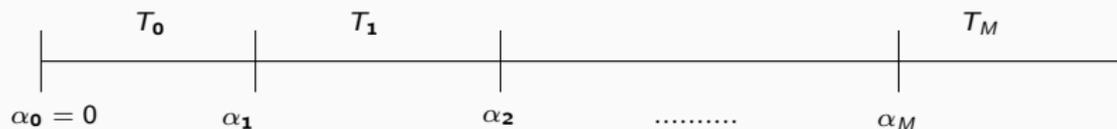
Théorème [Breiman et al., 1984]

Il existe une sous-suite finie $\alpha_0 = 0 < \alpha_1 < \dots < \alpha_M$ avec $M < |T_{max}|$ et une suite associée d'arbres emboîtés

$$T_{max} = T_0 \supset T_1 \supset \dots \supset T_M$$

telles que $\forall \alpha \in [\alpha_m, \alpha_{m+1}[$

$$T_m = \underset{T}{\operatorname{argmin}} C_\alpha(T).$$



Conséquences

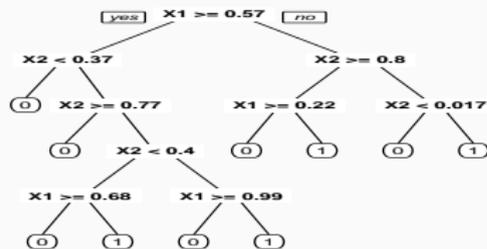
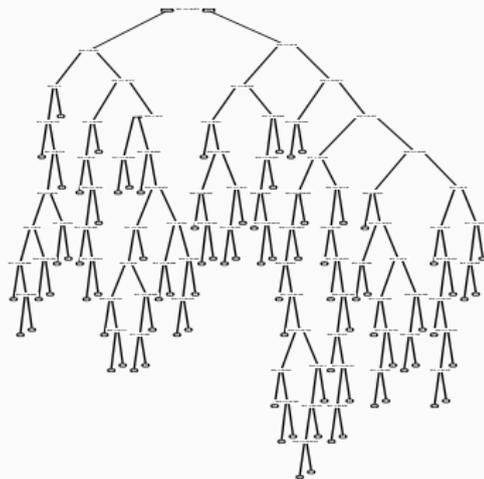
- On se ramène à une sous-suite finie d'arbres (emboîtés).
- Il reste à choisir un arbre (ou une valeur de α).

Exemple

```
> printcp(arbre)
Classification tree:
rpart(formula = Y ~ ., data = donnees, cp = 1e-04, minsplit = 2)
Variables actually used in tree construction:
[1] X1 X2
Root node error: 204/500 = 0.408
n= 500
```

	CP	nsplit	rel error	xerror	xstd
1	0.2941176	0	1.000000	1.00000	0.053870
2	0.1225490	1	0.705882	0.71569	0.049838
3	0.0931373	3	0.460784	0.49020	0.043844
4	0.0637255	4	0.367647	0.43627	0.041928
5	0.0122549	5	0.303922	0.34314	0.038034
6	0.0098039	7	0.279412	0.34314	0.038034
7	0.0049020	9	0.259804	0.36275	0.038923
8	0.0040107	25	0.181373	0.34804	0.038260
9	0.0036765	41	0.112745	0.39216	0.040184
10	0.0032680	49	0.083333	0.40196	0.040586
11	0.0024510	52	0.073529	0.41176	0.040980
12	0.0001000	82	0.000000	0.43137	0.041742

```
> arbre1 <- prune(arbre, cp=0.005)
> prp(arbre)
> prp(arbre1)
```



Choix d'un arbre

Il reste à sélectionner un arbre dans la suite

$$T_{max} = T_0 \supset T_1 \supset \dots \supset T_M$$

Sélection d'un arbre

Choix d'un risque

La sélection de l'**arbre final** s'effectue en choisissant l'élément de la suite qui minimise le risque moyen $\mathbf{E}[R(Y, T_m(X))]$. Par exemple,

1. l'**erreur quadratique** $\mathbf{E}[(Y - T_m(X))^2]$ en **régression** ;
2. la **probabilité d'erreur** $\mathbf{P}(Y \neq T_m(X))$ en **discrimination binaire**.

Ce risque (inconnu) est estimé par **validation croisée**.

Sélection d'un arbre

Choix d'un risque

La sélection de l'**arbre final** s'effectue en choisissant l'élément de la suite qui minimise le risque moyen $\mathbf{E}[R(Y, T_m(X))]$. Par exemple,

1. l'**erreur quadratique** $\mathbf{E}[(Y - T_m(X))^2]$ en **régression** ;
2. la **probabilité d'erreur** $\mathbf{P}(Y \neq T_m(X))$ en **discrimination binaire**.

Ce risque (inconnu) est estimé par **validation croisée**.

Choix de l'arbre final

L'approche consiste à

1. **estimer le risque** pour chaque α_m .
2. choisir le α_m qui **minimise le risque estimé** $\implies T_{\alpha_m}$.

Algorithme

1. Calculer la suite $\alpha_0 = 0 < \alpha_1 < \dots < \alpha_M$ et poser

$$\beta_1 = 0, \quad \beta_2 = \sqrt{\alpha_1 \alpha_2}, \quad \beta_3 = \sqrt{\alpha_2 \alpha_3}, \quad \dots, \quad \beta_{M+1} = \infty.$$

2. **Séparer les données** en K blocs G_1, \dots, G_k de taille k/n . Pour $i = 1, \dots, k$:

- 2.1 Construire les arbres $T_{\beta_1}, \dots, T_{\beta_{M+1}}$ sur l'ensemble des observations **privé du i ème bloc**.

- 2.2 En déduire pour tout $j \in G_i$ et tout $m \leq M + 1$, $\hat{Y}_j(\beta_m) = T_{\beta_m}(X_j)$.

3. Calculer $\mathcal{R}(m) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n R(Y_i, \hat{Y}_i(\beta_m))$ pour $m = 1, \dots, M + 1$.

4. **Choisir α_{m^*}** tel que $\beta_{m^*+1} = \operatorname{argmin}_{m \leq M+1} \mathcal{R}(m)$.

- Estimations $\mathcal{R}(m) \implies$ colonne **xerror** de la fonction **printcp** :

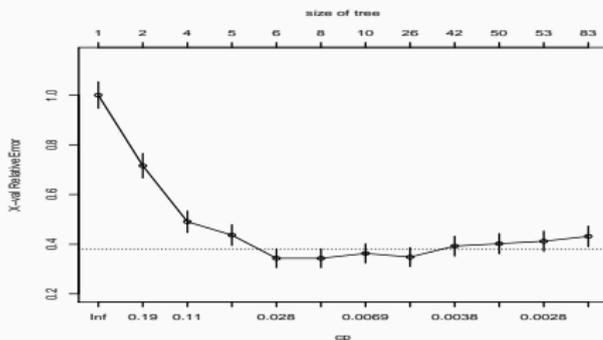
	CP	nsplit	rel error	xerror	xstd
1	0.2941176	0	1.000000	1.00000	0.053870
2	0.1225490	1	0.705882	0.71569	0.049838
3	0.0931373	3	0.460784	0.49020	0.043844
4	0.0637255	4	0.367647	0.43627	0.041928
5	0.0122549	5	0.303922	0.34314	0.038034
6	0.0098039	7	0.279412	0.34314	0.038034
7	0.0049020	9	0.259804	0.36275	0.038923

- Estimations $\mathcal{R}(m) \implies$ colonne **xerror** de la fonction **printcp** :

	CP	nsplit	rel error	xerror	xstd
1	0.2941176	0	1.000000	1.00000	0.053870
2	0.1225490	1	0.705882	0.71569	0.049838
3	0.0931373	3	0.460784	0.49020	0.043844
4	0.0637255	4	0.367647	0.43627	0.041928
5	0.0122549	5	0.303922	0.34314	0.038034
6	0.0098039	7	0.279412	0.34314	0.038034
7	0.0049020	9	0.259804	0.36275	0.038923

- On peut représenter les erreurs en fonction des α_m à l'aide de **plotcp**

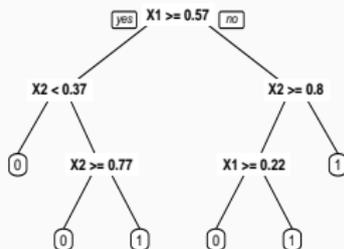
```
> plotcp(arbre3)
```



\implies On choisira l'arbre à **5 coupures**.

Tracé de l'arbre final

```
> alpha_opt <- arbre$cptable[which.min(arbre$cptable[, "xerror"]), "CP"]  
> arbre_final <- prune(arbre, cp=alpha_opt)  
> prp(arbre_final)
```



Arbres binaires

Choix des découpes

- Cas de la régression

- Cas de la classification supervisée

Elagage

Importance des variables

Annexe : arbres Chaid

- Regroupement des modalités

- Division d'un nœud

- Choix des paramètres

Bibliographie

- La **visualisation de l'arbre** peut donner une idée sur l'**importance des variables** dans l'algorithme.
- **Pas suffisant !** Il se peut en effet que des variables possèdent une grande importance sans pour autant apparaître explicitement dans l'arbre !

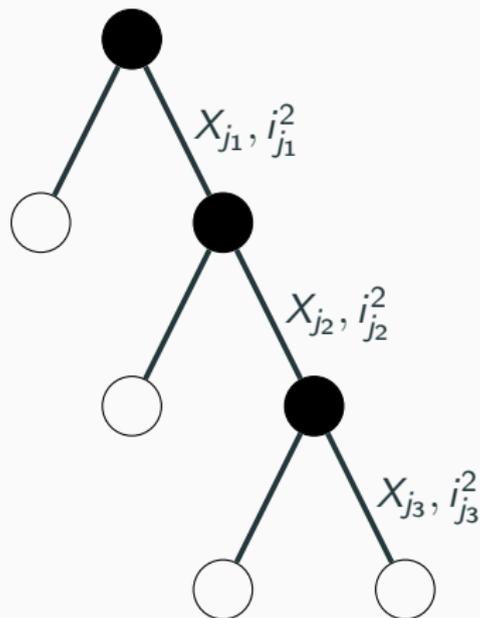
- La **visualisation de l'arbre** peut donner une idée sur l'**importance des variables** dans l'algorithme.
- **Pas suffisant !** Il se peut en effet que des variables possèdent une grande importance sans pour autant apparaître explicitement dans l'arbre !
 - Difficile de **quantifier l'importance** juste en regardant l'arbre !
 - Il se peut en effet que des variables possèdent une grande importance **sans pour autant apparaître explicitement** dans l'arbre !

- La **visualisation de l'arbre** peut donner une idée sur l'**importance des variables** dans l'algorithme.
- **Pas suffisant !** Il se peut en effet que des variables possèdent une grande importance sans pour autant apparaître explicitement dans l'arbre !
 - Difficile de **quantifier l'importance** juste en regardant l'arbre !
 - Il se peut en effet que des variables possèdent une grande importance **sans pour autant apparaître explicitement** dans l'arbre !

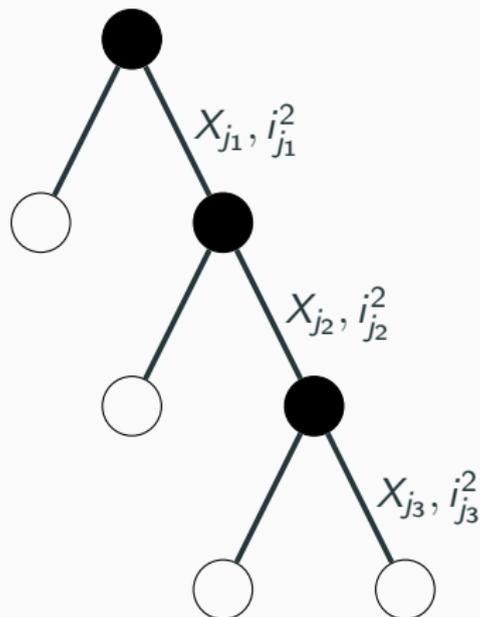
Mesure d'importance d'un arbre

Basée sur le **gain d'impureté** des nœuds internes.

- Nœuds internes $\implies N_t, t = 1, \dots, J - 1;$
- Variables de coupure $\implies X_{j_t};$
- Gain d'impureté $\implies i_{j_t}^2.$



- Nœuds internes $\implies N_t, t = 1, \dots, J - 1;$
- Variables de coupure $\implies X_{j_t};$
- Gain d'impureté $\implies i_{j_t}^2.$



Mesure d'impureté de la variable ℓ

$$\mathcal{I}_{\ell}^2(T) = \sum_{t=1}^{J-1} i_t^2 \mathbf{1}_{j_t=\ell}.$$

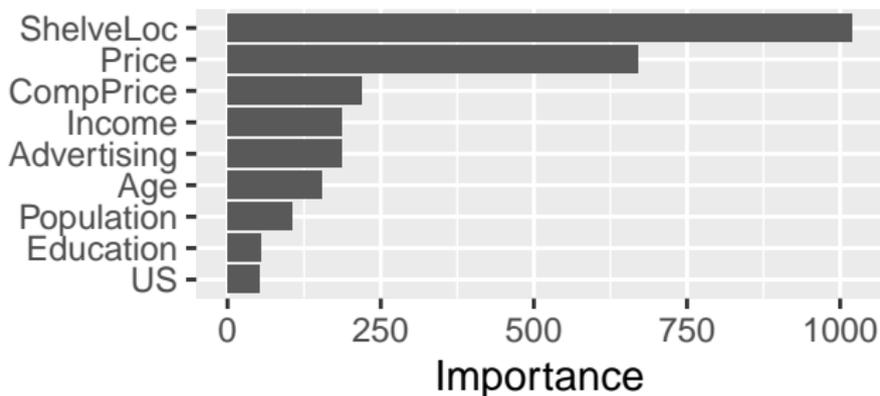
Le coin R

- On peut récupérer les **importances** dans la sortie de **rpart**

```
> round(tree$variable.importance)
ShelveLoc      Price  CompPrice      Income Advertising      Age  Population      Education      US
    1019         669         218         186         186         153         105         55         52
```

- Et les visualiser avec la fonction **vip** du package **vip** :

```
> vip(tree)
```



- L'arbre final \mathcal{T} renvoie une **partition** de \mathbb{R}^p en $|\mathcal{T}|$ nœuds terminaux $\mathcal{N}_1, \dots, \mathcal{N}_{|\mathcal{T}|}$.

Règle de classification et score par arbre

- L'arbre final \mathcal{T} renvoie une **partition** de \mathbb{R}^p en $|\mathcal{T}|$ nœuds terminaux $\mathcal{N}_1, \dots, \mathcal{N}_{|\mathcal{T}|}$.
- **Règle de classification** :

$$\hat{g}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } \sum_{i: X_i \in \mathcal{N}(x)} \mathbf{1}_{Y_i=1} \geq \sum_{i: X_i \in \mathcal{N}(x)} \mathbf{1}_{Y_i=0} \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

où $\mathcal{N}(x)$ désigne le nœud terminal qui contient x .

Règle de classification et score par arbre

- L'arbre final \mathcal{T} renvoie une **partition** de \mathbb{R}^p en $|\mathcal{T}|$ nœuds terminaux $\mathcal{N}_1, \dots, \mathcal{N}_{|\mathcal{T}|}$.
- **Règle de classification** :

$$\hat{g}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } \sum_{i: X_i \in \mathcal{N}(x)} \mathbf{1}_{Y_i=1} \geq \sum_{i: X_i \in \mathcal{N}(x)} \mathbf{1}_{Y_i=0} \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

où $\mathcal{N}(x)$ désigne le nœud terminal qui contient x .

- **Score** :

$$\hat{S}(x) = \hat{\mathbf{P}}(Y = 1 | X = x) = \frac{1}{n} \sum_{i: X_i \in \mathcal{N}(x)} \mathbf{1}_{Y_i=1}.$$

- La fonction predict (predict.rpart) permet d'estimer la classe ou le score :

```
> x_new <- data.frame(X1=0.5,X2=0.85)
> predict(arbre_final,newdata=x_new)
  0  1
1 0.9 0.1
> predict(arbre_final,newdata=x_new,type="class")
1
0
Levels: 0 1
```

- Méthode « simple » relativement facile à mettre en œuvre.
- Fonctionne en **régression** et en **discrimination**.
- Résultats **interprétables** (à condition que l'arbre ne soit pas trop profond).

- Méthode « simple » relativement facile à mettre en œuvre.
- Fonctionne en régression et en discrimination.
- Résultats interprétables (à condition que l'arbre ne soit pas trop profond).
- Un inconvénient : méthode connue pour être instable, sensible à de légères perturbations de l'échantillon.

- Méthode « simple » relativement facile à mettre en œuvre.
- Fonctionne en régression et en discrimination.
- Résultats interprétables (à condition que l'arbre ne soit pas trop profond).
- Un inconvénient : méthode connue pour être instable, sensible à de légères perturbations de l'échantillon.
- Cet inconvénient sera un avantage pour des agrégations bootstrap \implies forêts aléatoires.

Arbres binaires

Choix des découpes

- Cas de la régression

- Cas de la classification supervisée

Elagage

Importance des variables

Annexe : arbres Chaid

- Regroupement des modalités

- Division d'un nœud

- Choix des paramètres

Bibliographie

- CHAID : Chi2 Automatic Interaction Detection [[Kass, 1980](#)].

- CHAID : Chi2 Automatic Interaction Detection [Kass, 1980].
- 2 étapes χ^2 dans le procédé de division d'un nœud :
 - regrouper les modalités peu discriminantes de chaque variable explicative X_j ;
 - choisir la variable à utiliser pour scinder le nœud.

χ^2 d'indépendance : rappel

- Soient X et Y deux variables aléatoires à valeurs dans E et F . On souhaite tester au niveau α les hypothèses H_0 : " X et Y sont indépendantes" contre H_1 : " X et Y ne sont pas indépendantes".

χ^2 d'indépendance : rappel

- Soient X et Y deux variables aléatoires à valeurs dans E et F . On souhaite tester au niveau α les hypothèses H_0 : " X et Y sont indépendantes" contre H_1 : " X et Y ne sont pas indépendantes".
- On se donne (E_1, \dots, E_I) et (F_1, \dots, F_J) deux partitions de E et F .

χ^2 d'indépendance : rappel

- Soient X et Y deux variables aléatoires à valeurs dans E et F . On souhaite tester au niveau α les hypothèses H_0 : " X et Y sont indépendantes" contre H_1 : " X et Y ne sont pas indépendantes".
- On se donne (E_1, \dots, E_I) et (F_1, \dots, F_J) deux partitions de E et F .
- On dispose de n mesures du couple (X, Y) et on désigne par N_{ij} l'effectif observé dans la classe $E_i \times F_j$.

χ^2 d'indépendance : rappel

- Soient X et Y deux variables aléatoires à valeurs dans E et F . On souhaite tester au niveau α les hypothèses H_0 : " X et Y sont indépendantes" contre H_1 : " X et Y ne sont pas indépendantes".
- On se donne (E_1, \dots, E_I) et (F_1, \dots, F_J) deux partitions de E et F .
- On dispose de n mesures du couple (X, Y) et on désigne par N_{ij} l'effectif observé dans la classe $E_i \times F_j$.

	F_1	...	F_j	...	F_J	Total
E_1	N_{11}	...	N_{1j}	...	N_{1J}	$N_{1\bullet}$
\vdots						\vdots
E_i	N_{i1}	...	N_{ij}	...	N_{iJ}	$N_{i\bullet}$
\vdots						\vdots
E_I	N_{I1}	...	N_{Ij}	...	N_{IJ}	$N_{I\bullet}$
Total	$N_{\bullet 1}$...	$N_{\bullet j}$...	$N_{\bullet J}$	n

Propriété

Sous H_0 la statistique

$$X_n = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \frac{\left(\frac{N_{i\cdot} N_{\cdot j}}{n} - N_{ij} \right)^2}{\frac{N_{i\cdot} N_{\cdot j}}{n}}$$

converge en loi vers la loi $\chi_{(I-1)(J-1)}^2$.

Propriété

Sous H_0 la statistique

$$X_n = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \frac{\left(\frac{N_{i\cdot} N_{\cdot j}}{n} - N_{ij} \right)^2}{\frac{N_{i\cdot} N_{\cdot j}}{n}}$$

converge en loi vers la loi $\chi_{(I-1)(J-1)}^2$.

Conséquence

- Au niveau α , on **rejetera l'hypothèse H_0** si X_{obs} est supérieure au quantile d'ordre $1 - \alpha$ de la loi du $\chi_{(I-1)(J-1)}^2$.

Propriété

Sous H_0 la statistique

$$X_n = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \frac{\left(\frac{N_{i\bullet} N_{\bullet j}}{n} - N_{ij} \right)^2}{\frac{N_{i\bullet} N_{\bullet j}}{n}}$$

converge en loi vers la loi $\chi_{(I-1)(J-1)}^2$.

Conséquence

- Au niveau α , on **rejetera l'hypothèse H_0** si X_{obs} est supérieure au quantile d'ordre $1 - \alpha$ de la loi du $\chi_{(I-1)(J-1)}^2$.
- Une **forte valeur de X_{obs}** (ou une **faible valeur de la probabilité critique**) signifiera un **lien fort** entre les deux variables.

- On suppose dans un premier temps que toutes les variables explicatives $X_j, j = 1, \dots, p$ sont qualitatives à M_j modalités.

Division d'un nœud

1. **Regroupement** des modalités peu discriminantes de chaque variable X_j ;
2. **Choix** de la variable X_j la plus **discriminante**
3. Le nœud est alors **divisé** en un nombre de nœuds fils égal au nombre de modalités créées à l'étape 1.

Arbres binaires

Choix des découpes

- Cas de la régression

- Cas de la classification supervisée

Elagage

Importance des variables

Annexe : arbres Chaid

- Regroupement des modalités**

- Division d'un nœud

- Choix des paramètres

Bibliographie

1. On se place dans un nœud \mathcal{N} et on considère une variable X_j à M_j modalités ;
2. Les observations dans le nœud définissent la table de contingence suivante

	M_1	\dots	M_j
1			
\vdots			
K			

3. $\forall (M_i, M_\ell) \in \{M_1, \dots, M_j\}^2$, on calcule la statistique du χ^2 croisant Y et les modalités $(M_i, M_\ell) \implies \chi^2(M_i, M_\ell)$ et $p(M_i, M_\ell)$ la probabilité critique associée.

1. On se place dans un nœud \mathcal{N} et on considère une variable X_j à M_j modalités ;
2. Les observations dans le nœud définissent la **table de contingence** suivante

	M_1	\dots	M_j
1			
\vdots			
K			

3. $\forall (M_i, M_\ell) \in \{M_1, \dots, M_j\}^2$, on calcule la **statistique du χ^2** croisant Y et les modalités $(M_i, M_\ell) \implies \chi^2(M_i, M_\ell)$ et $p(M_i, M_\ell)$ la probabilité critique associée.

Remarque

- 2 modalités **discriminantes** \implies dépendance **forte** dans le test avec $Y \implies$ "Fort rejet" de $H_0 \implies \chi^2$ **élevé** ou p **faible** ;

1. On se place dans un nœud \mathcal{N} et on considère une variable X_j à M_j modalités ;
2. Les observations dans le nœud définissent la **table de contingence** suivante

	M_1	\dots	M_j
1			
\vdots			
K			

3. $\forall (M_i, M_\ell) \in \{M_1, \dots, M_j\}^2$, on calcule la **statistique du χ^2** croisant Y et les modalités $(M_i, M_\ell) \implies \chi^2(M_i, M_\ell)$ et $p(M_i, M_\ell)$ la probabilité critique associée.

Remarque

- 2 modalités **discriminantes** \implies dépendance **forte** dans le test avec $Y \implies$ "Fort rejet" de $H_0 \implies \chi^2$ **élevé** ou pc **faible** ;
- Regrouper les **modalités peu discriminantes** revient donc à regrouper celles qui ont un χ^2 **faible** ou une pc **grande**.

4. On choisit la **paire de modalités** qui minimise le χ^2 :

$$(\tilde{M}_i, \tilde{M}_\ell) = \underset{(M_i, M_\ell) \in \{M_1, \dots, M_j\}^2}{\operatorname{argmin}} \chi^2(M_i, M_\ell) = \underset{(M_i, M_\ell) \in \{M_1, \dots, M_j\}^2}{\operatorname{argmax}} p(M_i, M_\ell).$$

4. On choisit la **paire de modalités** qui minimise le χ^2 :

$$(\tilde{M}_i, \tilde{M}_\ell) = \underset{(M_i, M_\ell) \in \{M_1, \dots, M_j\}^2}{\operatorname{argmin}} \chi^2(M_i, M_\ell) = \underset{(M_i, M_\ell) \in \{M_1, \dots, M_j\}^2}{\operatorname{argmax}} p(M_i, M_\ell).$$

5. Si $p(\tilde{M}_i, \tilde{M}_\ell) > \alpha_2$ ($\alpha_2 \in]0, 1[$ **fixé par l'utilisateur**) alors on **regroupe les modalités \tilde{M}_i et \tilde{M}_ℓ** et on retourne à l'étape 2 avec le tableau à $M_j - 1$ modalités

	M_1	\dots	$M_j - 1$
1			
\vdots			
K			

Sinon, on stoppe les regroupements.

Exemple i

- On considère la variable **marstat** :

```
> aa <- table(USvoteS$vote3,USvoteS$marstat)
```

```
> aa
```

	married	widowed	divorced	never married
Gore	246	57	82	111
Bush	315	44	48	60

- On calcule les **probabilités critiques** pour les **6 croisements** :

Exemple ii

```
> res <- matrix(0,nrow=4,ncol=4)
> rownames(res) <- levels(USvoteS$marstat)
> colnames(res) <- levels(USvoteS$marstat)
> for (i in 1:3)
+   for (j in (i+1):4)
+     res[i,j] <- chisq.test(aa[,c(i,j)])$p.value
+
+
> res
```

	married	widowed	divorced	never married
married	0	0.0194	7.64e-05	1.41e-06
widowed	0	0.0000	3.06e-01	1.65e-01
divorced	0	0.0000	0.00e+00	7.42e-01
never married	0	0.0000	0.00e+00	0.00e+00

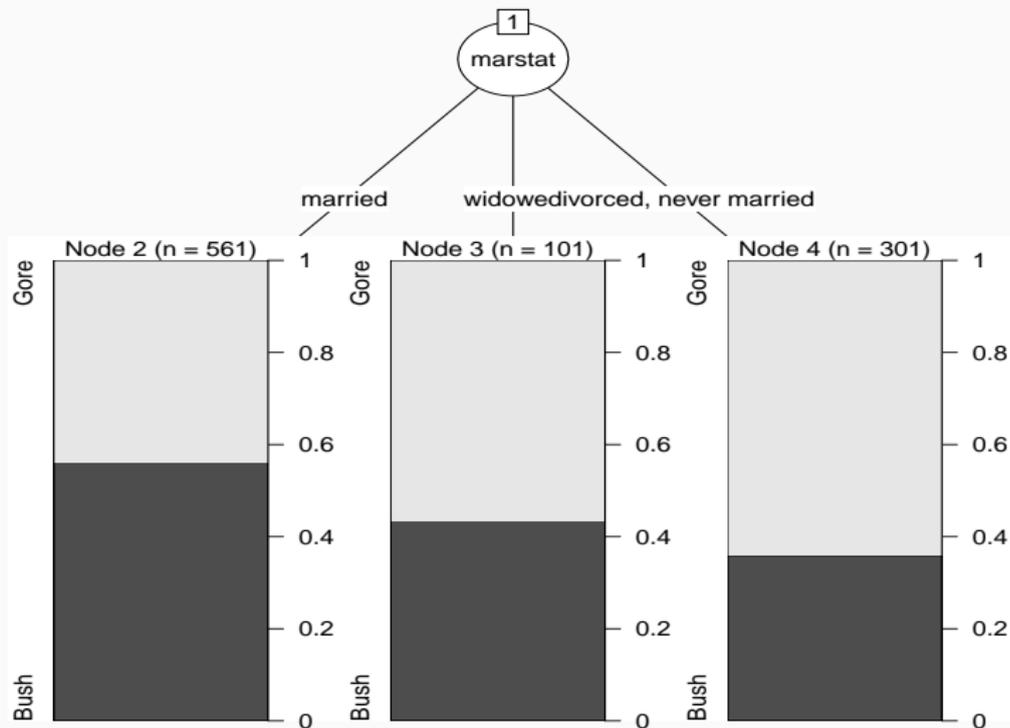
Exemple de regroupement

Les modalités **divorced** et **never married** sont regroupées (si $\alpha_2 < 0.742$).

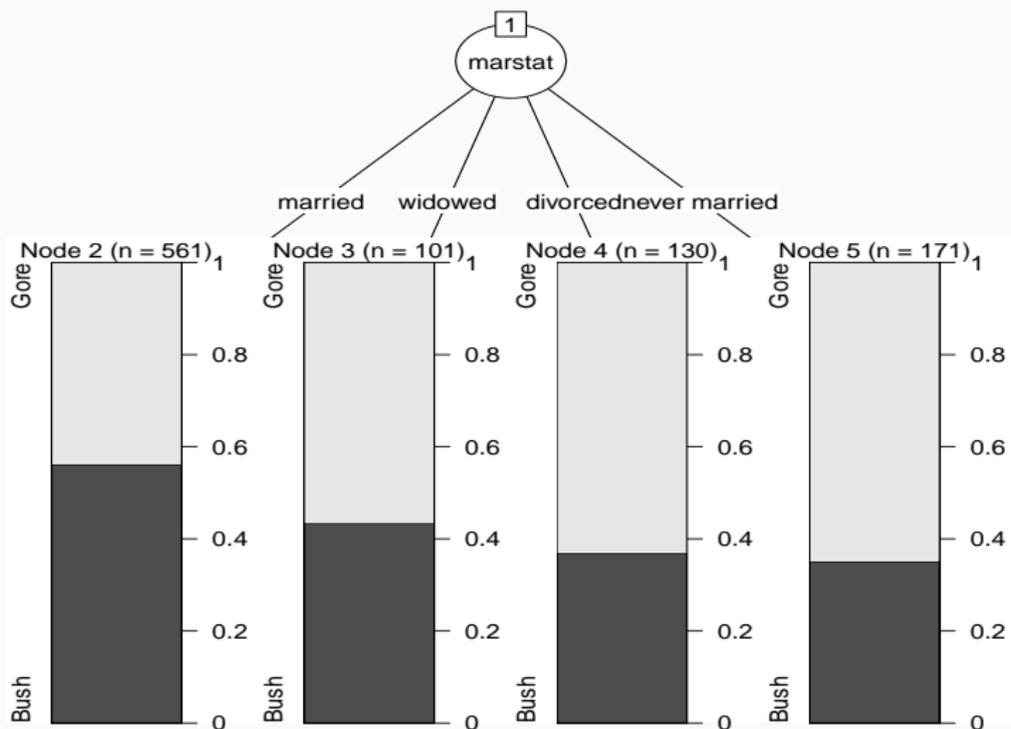
- En effet

```
> ctrl <- chaid_control(minsplit = 20,alpha2=0.74)
> a1 <- chaid(vote3~marstat,data=USvoteS,control = ctrl)
> plot(a1)
```

Exemple iv



```
> ctrl1 <- chaid_control(minsplit = 20,alpha2=0.75)
> a2 <- chaid(vote3~marstat,data=USvoteS,control = ctrl1)
> plot(a2)
```



- Variables **ordinales** : le traitement est **identique**. Seules les **modalités contiguës** peuvent être regroupées.

- Variables **ordinales** : le traitement est **identique**. Seules les **modalités contiguës** peuvent être regroupées.
- Variables **continues** : traitées comme des variables ordinales. Penser à utiliser **as.ordered** sur **R**.

Arbres binaires

Choix des découpes

- Cas de la régression

- Cas de la classification supervisée

Elagage

Importance des variables

Annexe : arbres Chaid

- Regroupement des modalités

- Division d'un nœud**

- Choix des paramètres

Bibliographie

Un autre χ^2 pour choisir la variable

- La phase **regroupement** effectuée, il faut choisir une variable parmi les p variables regroupées pour **diviser** le nœud.

Un autre χ^2 pour choisir la variable

- La phase **regroupement** effectuée, il faut choisir une variable parmi les p variables regroupées pour **diviser** le nœud.
- **Idée** : faire un χ^2 pour chaque variable :

	(X_1, M_1)	...	(X_1, M_{1j})	(X_2, M_1)	...	(X_2, M_{2j})	...
1							
\vdots							
K							

$\implies p$ probabilités critiques $p(X_1), \dots, p(X_p)$ et

Un autre χ^2 pour choisir la variable

- La phase **regroupement** effectuée, il faut choisir une variable parmi les p variables regroupées pour **diviser** le nœud.
- Idée** : faire un χ^2 pour chaque variable :

	(X_1, M_1)	...	(X_1, M_{1j})	(X_2, M_1)	...	(X_2, M_{2j})	...
1							
\vdots							
K							

$\implies p$ probabilités critiques $p(X_1), \dots, p(X_p)$ et

- X_j discriminante \implies rejet de $H_0 \implies p(X_j)$ petite.

Un autre χ^2 pour choisir la variable

- La phase **regroupement** effectuée, il faut choisir une variable parmi les p variables regroupées pour **diviser** le nœud.
- Idée** : faire un χ^2 pour chaque variable :

	(X_1, M_1)	...	(X_1, M_{1j})	(X_2, M_1)	...	(X_2, M_{2j})	...
1							
\vdots							
K							

$\implies p$ probabilités critiques $p(X_1), \dots, p(X_p)$ et

- X_j discriminante \implies rejet de $H_0 \implies p(X_j)$ petite.
- On **choisit la variable j** qui possède la plus **petite probabilité critique**.

Correction de Bonferroni

- Tendance à **favoriser** les variables ayant subi le **plus de regroupements** (erreur de type 1).

Correction de Bonferroni

- Tendance à **favoriser** les variables ayant subi le **plus de regroupements** (erreur de type 1).
- Pour rééquilibrer, les probabilités critiques sont multipliées par le **coefficient de Bonferroni** :

$$p'(X_j) = b_j p(X_j)$$

où b_j correspond au nombre de manières les regrouper les M_j modalités initiales de X_j en \tilde{M}_j modalités finales.

Correction de Bonferroni

- Tendance à **favoriser** les variables ayant subi le **plus de regroupements** (erreur de type 1).
- Pour rééquilibrer, les probabilités critiques sont multipliées par le **coefficient de Bonferroni** :

$$p'(X_j) = b_j p(X_j)$$

où b_j correspond au nombre de manières les regrouper les M_j modalités initiales de X_j en \tilde{M}_j modalités finales.

- Variable **qualitative** et **ordinaire** :

$$b_j = \sum_{i=0}^{\tilde{M}_j-1} (-1)^i \frac{(\tilde{M}_j - i)^{M_j}}{i!(\tilde{M}_j - i)!} \quad b_j = \binom{M_j - 1}{\tilde{M}_j - 1}.$$

- On choisira la variable j^* qui minimise $p'(X_j)$...

- On choisira la variable j^* qui minimise $p'(X_j)$...
- à condition que $p'(X_j)$ soit plus petit qu'un certain seuil α_4 fixé par l'utilisateur.

- On choisira la variable j^* qui minimise $p'(X_j)$...
- à condition que $p'(X_j)$ soit plus petit qu'un certain seuil α_4 fixé par l'utilisateur.
- Le nœud sera scindé en autant de groupes que X_j possède de modalités (après la phase de regroupement).

Critère d'arrêt

Un nœud ne sera pas divisé si :

- $p'(X_j) > \alpha_4$ pour tout $j = 1, \dots, p$.
- le nœud est pur ou quasiment pur.
- le nœud contient trop peu d'observations...

Critère d'arrêt

Un nœud ne sera pas divisé si :

- $p'(X_j) > \alpha_4$ pour **tout** $j = 1, \dots, p$.
- le nœud est **pur** ou quasiment pur.
- le nœud contient **trop peu d'observations...**

Remarque

Sur **R**, on pourra regarder la fonction **chaid.control** :

```
chaid_control(alpha2 = 0.05, alpha3 = -1, alpha4 = 0.05,  
             minsplit = 20, minbucket = 7, minprob = 0.01,  
             stump = FALSE, maxheight = -1)
```

Arbres binaires

Choix des découpes

- Cas de la régression

- Cas de la classification supervisée

Elagage

Importance des variables

Annexe : arbres Chaid

- Regroupement des modalités

- Division d'un nœud

- Choix des paramètres**

Bibliographie

- En plus des paramètres associés au critère d'arrêt, deux paramètres sont à calibrer pour construire l'arbre : les niveaux α_2 et α_4 .

- En plus des paramètres associés au critère d'arrêt, deux paramètres sont à calibrer pour construire l'arbre : les niveaux α_2 et α_4 .
- Il en existe un troisième (α_3) qui concerne le remise en cause des regroupements des modalités.

- En plus des paramètres associés au critère d'arrêt, deux paramètres sont à calibrer pour construire l'arbre : les niveaux α_2 et α_4 .
- Il en existe un troisième (α_3) qui concerne la remise en cause des regroupements des modalités.

Choix de α_4

Degrés d'exigence pour couper un nœud :

- petit : très exigeant \implies arbres peu profonds (beaucoup de biais et peu de variance) ;
- grand : peu exigeant \implies arbres profonds (beaucoup de variance et peu de biais).

Choix de α_2

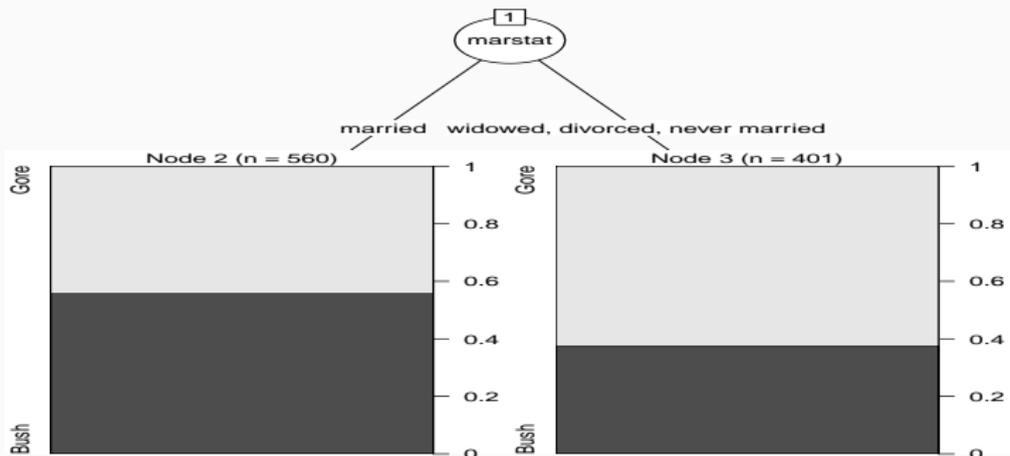
Degrés d'exigence pour regrouper des modalités :

- **petit** : peu exigeant \implies beaucoup de regroupements (on se rapproche des arbres binaires) ;
- **grand** : très exigeant \implies peu de regroupements.

Illustration α_4 i

```
> ctrl <- chaid_control(minsplit = 20,alpha4=0.0005)
> a1 <- chaid(vote3~.,data=USvoteS,control=ctrl)
> plot(a1)
```

Illustration α_4 ii

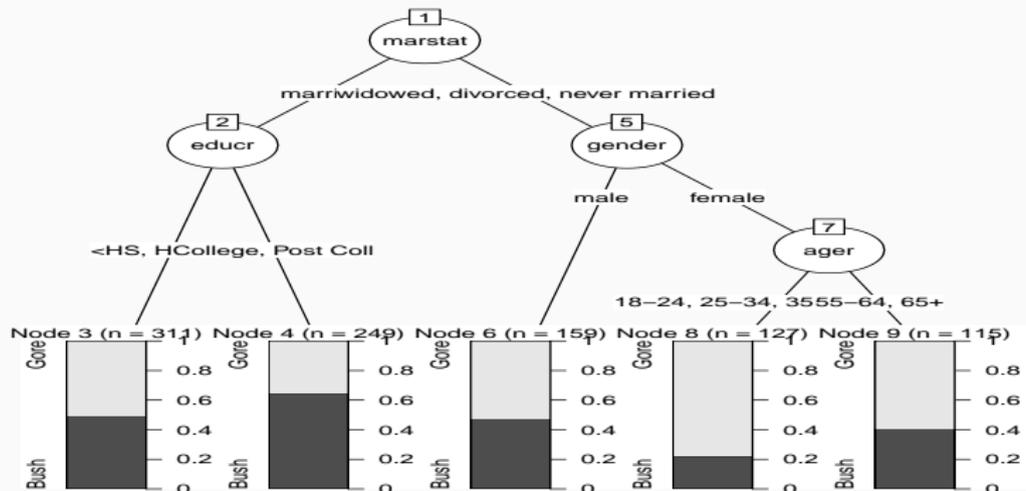


```
> ctrl <- chaid_control(minsplit = 20,alpha4=0.25)
> a2 <- chaid(vote3~.,data=USvoteS,control=ctrl)
> plot(a2)
```


Illustration α_2 i

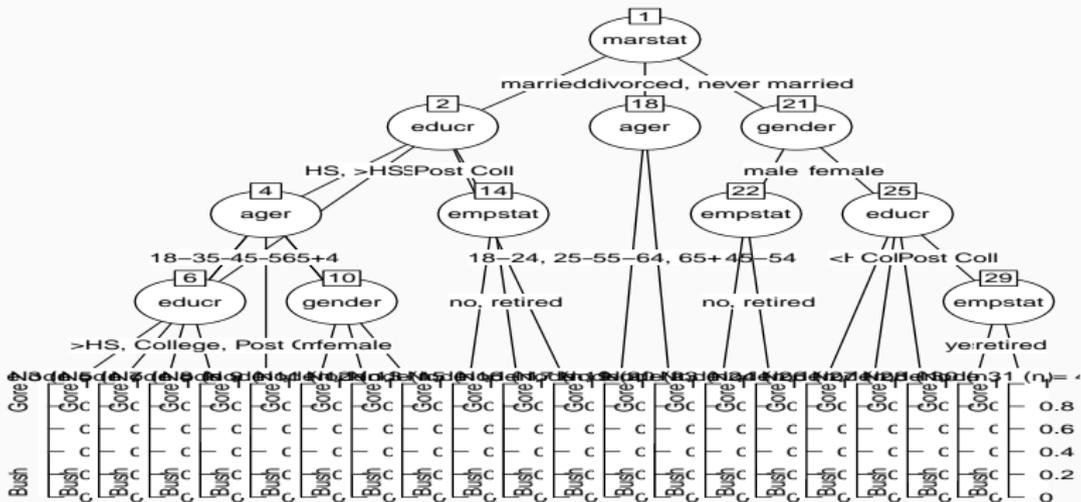
```
> ctrl <- chaid_control(minsplit = 20,alpha2=0.005)
> a3 <- chaid(vote3~.,data=USvoteS,control=ctrl)
> plot(a3)
```

Illustration α_2 ii



```
> ctrl <- chaid_control(minsplit = 20,alpha2=0.5)
> a4 <- chaid(vote3~.,data=USvoteS,control=ctrl)
> plot(a4)
```

Illustration α_2 iii



- L'**influence** de ces deux paramètres est bien entendu **conjointe**.

- L'**influence** de ces deux paramètres est bien entendu **conjointe**.
- Il n'est pas facile de les calibrer simultanément.

- L'**influence** de ces deux paramètres est bien entendu **conjointe**.
- Il n'est pas facile de les calibrer simultanément.
- **Approche classique** : évaluer les **performances** (erreur de classification AUC...) pour plusieurs valeurs de (α_2, α_4) sur un **échantillon test** ou par **validation croisée**.

Exemple i

- On veut expliquer avec un **arbre CHAID** la variable **chd** par les autres variables du jeu de données **SAheart**.

```
> donnees <- SAheart  
> donnees$chd <- as.factor(donnees$chd)  
> for (i in c(1:4,6:9)){donnees[,i] <- as.ordered(donnees[,i])}
```

- On va séparer l'échantillon en 2 et **estimer l'erreur de classification** sur une grille de valeur de α_2 et α_4 :

Exemple ii

```
> alpha2 <- seq(0.01,0.35,by=0.05)
> alpha4 <- seq(0.01,0.35,by=0.05)
> gr.alpha <- expand.grid(alpha2,alpha4)
> names(gr.alpha) <- c("alpha2","alpha4")
> gr.alpha$perf <- 0
> set.seed(1234)
> perm <- sample(nrow(SAheart))
> dapp <- donnees[perm[1:300],]
> dtest <- donnees[-perm[1:300],]
```

- On estime l'erreur de classification sur les données test :

Exemple iii

```
> for (i in 1:nrow(gr.alpha)){  
>   ctrl <- chaid_control(alpha2=gr.alpha[i,1],alpha4=gr.alpha[i,2])  
>   a <- chaid(chd~.,data=dapp,control=ctrl)  
>   prev <- predict(a,newdata = dtest)  
>   gr.alpha$perf[i] <- mean(prev!=dtest$chd)  
> }
```

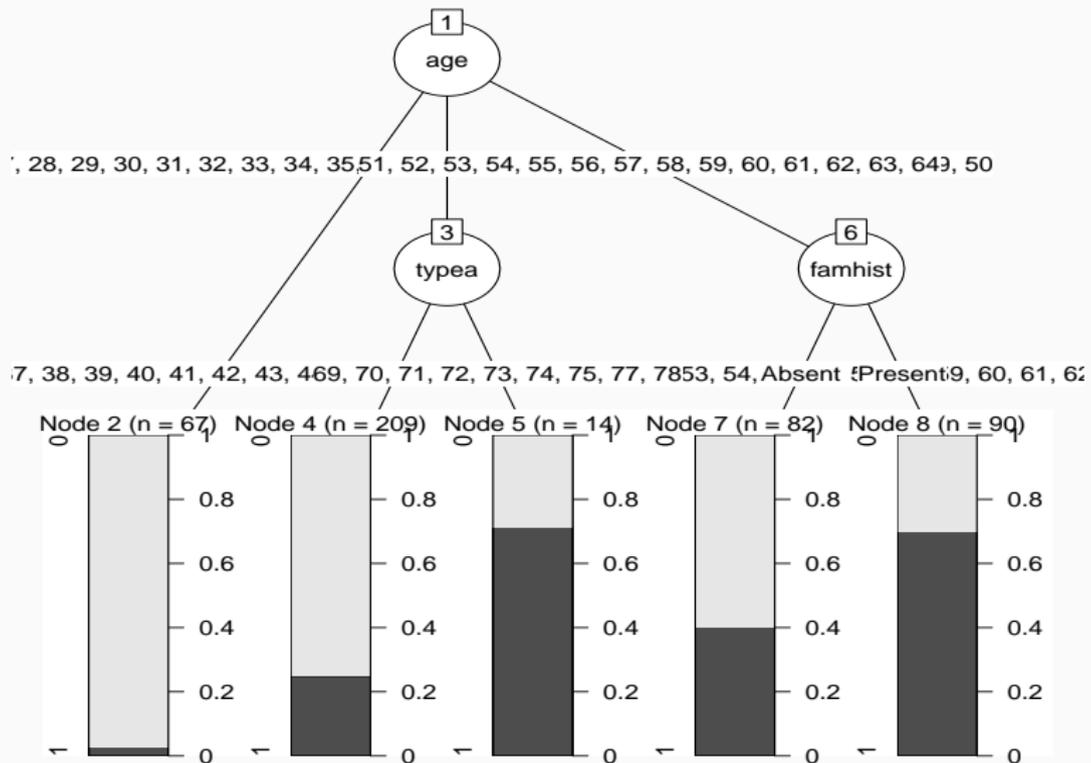
- On récupère les valeurs de α_2 et α_4 qui minimisent l'erreur estimée :

```
> alpha_opt <- gr.alpha[which.min(gr.alpha$perf),]  
> alpha_opt  
  alpha2 alpha4      perf  
1   0.01   0.01 0.2716049
```

- On peut tracer l'arbre sélectionné :

```
> ctrl <- chaid_control(alpha2=alpha_opt[1],alpha4=alpha_opt[2])  
> arbre_final <- chaid(chd~.,data=donnees,control=ctrl)  
> plot(arbre_final)
```

Exemple iv



- On peut faire la même chose avec **caret** (en plus efficace) :

```
> grille <- gr.alpha[,1:2]
> grille$alpha3 <- -1
> library(doMC)
> registerDoMC(cores = 3)
> bb <- train(donnees[,-10],donnees$chd,method="chaid",
             tuneGrid=grille,trControl=ctrl1,metric="Accuracy")
> bb
```

CHi-squared Automated Interaction Detection

462 samples

9 predictor

2 classes: '0', '1'

No pre-processing

Resampling: Repeated Train/Test Splits Estimated (1 reps, 75%)

Summary of sample sizes: 300

Resampling results across tuning parameters:

alpha2	alpha4	Accuracy	Kappa
0.01	0.01	0.7283951	0.3847747
0.01	0.06	0.7283951	0.3847747
0.01	0.11	0.7283951	0.3847747
0.01	0.16	0.7283951	0.3847747
0.01	0.21	0.7283951	0.3847747
0.01	0.26	0.6851852	0.2528486
0.01	0.31	0.6851852	0.2528486
0.06	0.01	0.6851852	0.2528486
0.06	0.06	0.6851852	0.2528486
0.06	0.11	0.6851852	0.2528486
0.06	0.16	0.6851852	0.2528486
0.06	0.21	0.6851852	0.2528486
0.06	0.26	0.6728395	0.3284843
0.06	0.31	0.6728395	0.2302313
0.11	0.01	0.6419753	0.2394366

0.11	0.06	0.6419753	0.2839506
0.11	0.11	0.6419753	0.2839506
0.11	0.16	0.6419753	0.2839506
0.11	0.21	0.6419753	0.2839506
0.11	0.26	0.6296296	0.2646391
0.11	0.31	0.6419753	0.2839506
0.16	0.01	0.6419753	0.2394366
0.16	0.06	0.6419753	0.2839506
0.16	0.11	0.6419753	0.2839506
0.16	0.16	0.6419753	0.2839506
0.16	0.21	0.6419753	0.2839506
0.16	0.26	0.6296296	0.2646391
0.16	0.31	0.6419753	0.2839506
0.21	0.01	0.6419753	0.2394366
0.21	0.06	0.6419753	0.2394366
0.21	0.11	0.6419753	0.2394366
0.21	0.16	0.6419753	0.2394366
0.21	0.21	0.6419753	0.2394366

0.21	0.26	0.6419753	0.2394366
0.21	0.31	0.6419753	0.2394366
0.26	0.01	0.6419753	0.2394366
0.26	0.06	0.6419753	0.2394366
0.26	0.11	0.6419753	0.2394366
0.26	0.16	0.6419753	0.2394366
0.26	0.21	0.6419753	0.2394366
0.26	0.26	0.6419753	0.2394366
0.26	0.31	0.6419753	0.2394366
0.31	0.01	0.6419753	0.2394366
0.31	0.06	0.6419753	0.2394366
0.31	0.11	0.6419753	0.2394366
0.31	0.16	0.6419753	0.2394366
0.31	0.21	0.6419753	0.2394366
0.31	0.26	0.6419753	0.2394366
0.31	0.31	0.6419753	0.2394366

Tuning parameter 'alpha3' was held constant at a value of -1

Accuracy was used to select the optimal model using the largest value. The final values used for the model were $\alpha_2 = 0.01$, $\alpha_3 = -1$ and $\alpha_4 = 0.21$.

Quatrième partie IV

Bagging et forêts aléatoires

Bagging

Forêts aléatoires

Bibliographie

- Idem que précédemment, on cherche à **expliquer** une variable Y par d variables explicatives X_1, \dots, X_d .

- Idem que précédemment, on cherche à **expliquer** une variable Y par d variables explicatives X_1, \dots, X_d .
- Pour simplifier on se place en **régression** : Y est à valeurs dans \mathbb{R} mais tout ce qui va être fait s'étant directement à la **classification binaire ou multiclassés**.

- Idem que précédemment, on cherche à **expliquer** une variable Y par d variables explicatives X_1, \dots, X_d .
- Pour simplifier on se place en **régression** : Y est à valeurs dans \mathbb{R} mais tout ce qui va être fait s'étant directement à la **classification binaire ou multiclassés**.
- **Notations** :
 - (X, Y) un couple aléatoire à valeurs dans $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$.
 - $\mathcal{D}_n = (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ un n -échantillon i.i.d. de même loi que (X, Y) .

Bagging

Forêts aléatoires

Bibliographie

- Le **bagging** désigne un ensemble de méthodes introduit par Léo Breiman [[Breiman, 1996](#)].
- **Bagging** : vient de la contraction de **Bootstrap Aggregating**.
- **Idée** : plutôt que de construire un seul estimateur, en construire un grand nombre (sur des échantillons **bootstrap**) et les **agréger**.

Pourquoi agréger ?

- On se place dans le **modèle de régression**

$$Y = m(X) + \varepsilon.$$

- On note

$$\hat{m}_B(x) = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B m_k(x)$$

un estimateur de m obtenu en **agrégeant B estimateurs** m_1, \dots, m_B .

Pourquoi agréger ?

- On se place dans le **modèle de régression**

$$Y = m(X) + \varepsilon.$$

- On note

$$\hat{m}_B(x) = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B m_k(x)$$

un estimateur de m obtenu en **agrégeant B estimateurs** m_1, \dots, m_B .

- **Rappels** : $\hat{m}_B(x) = \hat{m}_B(x; (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n))$ et $m_k(x) = m_k(x; (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n))$ sont des **variables aléatoires**.

Pourquoi agréger ?

- On se place dans le **modèle de régression**

$$Y = m(X) + \varepsilon.$$

- On note

$$\hat{m}_B(x) = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B m_k(x)$$

un estimateur de m obtenu en **agrégeant B estimateurs** m_1, \dots, m_B .

- **Rappels** : $\hat{m}_B(x) = \hat{m}_B(x; (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n))$ et $m_k(x) = m_k(x; (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n))$ sont des **variables aléatoires**.
- On peut **mesurer l'intérêt d'agréger** en comparant les performances de $\hat{m}_B(x)$ à celles des $m_k(x)$, $k = 1, \dots, B$ (en comparant, par exemple, le **biais** et la **variance** de ces estimateurs).

- **Hypothèse** : les variables aléatoires m_1, \dots, m_B sont i.i.d.

- **Hypothèse** : les variables aléatoires m_1, \dots, m_B sont i.i.d.
 - **Biais** :

$$\mathbf{E}[\hat{m}_B(x)] = \mathbf{E}[m_k(x)].$$

Conclusion

Agréger ne modifie **pas** le biais.

Biais et variance

- **Hypothèse** : les variables aléatoires m_1, \dots, m_B sont i.i.d.
 - **Biais** :

$$\mathbf{E}[\hat{m}_B(x)] = \mathbf{E}[m_k(x)].$$

Conclusion

Agréger ne modifie **pas** le biais.

- **Variance** :

$$\mathbf{V}[\hat{m}_B(x)] = \frac{1}{B} \mathbf{V}[m_k(x)].$$

Conclusion

Agréger **tu** la variance.

- Les conclusions précédentes sont vraies sous l'hypothèse que les variables aléatoires m_1, \dots, m_B sont i.i.d.

- Les conclusions précédentes sont vraies sous l'hypothèse que les variables aléatoires m_1, \dots, m_B sont i.i.d.
- Les estimateurs m_1, \dots, m_B étant construits sur le même échantillon, l'hypothèse d'indépendance n'est clairement pas raisonnable !

- Les conclusions précédentes sont vraies sous l'hypothèse que les variables aléatoires m_1, \dots, m_B sont i.i.d.
- Les estimateurs m_1, \dots, m_B étant construits sur le même échantillon, l'hypothèse d'indépendance n'est clairement pas raisonnable !

Idée

"Atténuer" la dépendance entre les estimateurs $m_k, k = 1, \dots, B$ en introduisant de nouvelles sources d'aléa.

Idée : échantillons bootstrap

- Echantillon **initial** :

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
---	---	---	---	---	---	---	---	---	----

Idée : échantillons bootstrap

- Echantillon **initial** :

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
---	---	---	---	---	---	---	---	---	----

- Echantillons **bootstrap** :

3	4	6	10	3	9	10	7	7	1	m_1
2	8	6	2	10	10	2	9	5	6	m_2
2	9	4	4	7	7	2	3	6	7	m_3
6	1	3	3	9	3	8	10	10	1	m_4
3	7	10	3	2	8	6	9	10	2	m_5
	⋮								⋮	
7	10	3	4	9	10	10	8	6	1	m_B

Idée : échantillons bootstrap

- Echantillon **initial** :

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
---	---	---	---	---	---	---	---	---	----

- Echantillons **bootstrap** :

3	4	6	10	3	9	10	7	7	1	m_1
2	8	6	2	10	10	2	9	5	6	m_2
2	9	4	4	7	7	2	3	6	7	m_3
6	1	3	3	9	3	8	10	10	1	m_4
3	7	10	3	2	8	6	9	10	2	m_5
	⋮								⋮	
7	10	3	4	9	10	10	8	6	1	m_B

- A la fin, on **agrège** :

$$\hat{m}_B(x) = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B m_k(x).$$

Bagging

- Les estimateurs m_k ne vont pas être construits sur l'échantillon $\mathcal{D}_n = (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$, mais sur des **échantillons bootstrap** de \mathcal{D}_n .

Bagging

- Les estimateurs m_k ne vont pas être construits sur l'échantillon $\mathcal{D}_n = (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$, mais sur des **échantillons bootstrap** de \mathcal{D}_n .

Bagging

Entrées :

- $x \in \mathbb{R}^d$ l'observation à prévoir ; \mathcal{D}_n l'échantillon
- un régresseur (arbre CART, 1 plus proche voisin...)
- B le nombre d'estimateurs que l'on agrège.

Bagging

- Les estimateurs m_k ne vont pas être construits sur l'échantillon $\mathcal{D}_n = (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$, mais sur des **échantillons bootstrap** de \mathcal{D}_n .

Bagging

Entrées :

- $x \in \mathbb{R}^d$ l'observation à prévoir ; \mathcal{D}_n l'échantillon
- un régresseur (arbre CART, 1 plus proche voisin...)
- B le nombre d'estimateurs que l'on agrège.

Pour $k = 1, \dots, B$:

1. Tirer un échantillon **bootstrap** dans \mathcal{D}_n ;
2. **Ajuster le régresseur** sur cet échantillon bootstrap : $m_k(x)$.

Sortie : l'estimateur $\hat{m}_B(x) = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B m_k(x)$.

Tirage de l'échantillon bootstrap

- Les tirages bootstrap sont représentés par B variables aléatoires $\theta_k, k = 1, \dots, B$.

Tirage de l'échantillon bootstrap

- Les tirages bootstrap sont représentés par B variables aléatoires $\theta_k, k = 1, \dots, B$.
- Les tirages bootstrap sont généralement effectués selon la même loi et de façon indépendante : $\theta_1, \dots, \theta_B$ sont i.i.d. de même loi que θ .

Tirage de l'échantillon bootstrap

- Les tirages bootstrap sont représentés par B variables aléatoires $\theta_k, k = 1, \dots, B$.
- Les tirages bootstrap sont généralement effectués selon la même loi et de façon indépendante : $\theta_1, \dots, \theta_B$ sont i.i.d. de même loi que θ .
- 2 techniques sont généralement utilisées :
 1. tirage de n observations avec remise ;
 2. tirage de $\ell < n$ observation sans remise.

Tirage de l'échantillon bootstrap

- Les tirages bootstrap sont représentés par B variables aléatoires $\theta_k, k = 1, \dots, B$.
- Les tirages bootstrap sont généralement effectués selon la même loi et de façon indépendante : $\theta_1, \dots, \theta_B$ sont i.i.d. de même loi que θ .
- 2 techniques sont généralement utilisées :
 1. tirage de n observations avec remise ;
 2. tirage de $\ell < n$ observation sans remise.

Conséquence

Les estimateurs agrégés contiennent 2 sources d'aléa (échantillon et tirage bootstrap) :

$$m_k(x) = m(x, \theta_k, \mathcal{D}_n).$$

Choix du nombre d'itérations

- Deux paramètres sont à choisir : le nombre d'itérations B et le régresseur.

Choix du nombre d'itérations

- Deux paramètres sont à choisir : le nombre d'itérations B et le régresseur.
- On a d'après la loi des grands nombres

$$\begin{aligned}\lim_{B \rightarrow \infty} \hat{m}_B(x) &= \lim_{B \rightarrow \infty} \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B m_k(x) = \lim_{B \rightarrow \infty} \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B m(x, \theta_k, \mathcal{D}_n) \\ &= \mathbf{E}_{\theta}[m(x, \theta, \mathcal{D}_n)] = \bar{m}(x, \mathcal{D}_n) \quad p.s. | \mathcal{D}_n.\end{aligned}$$

Choix du nombre d'itérations

- Deux paramètres sont à choisir : le nombre d'itérations B et le régresseur.
- On a d'après la loi des grands nombres

$$\begin{aligned}\lim_{B \rightarrow \infty} \hat{m}_B(x) &= \lim_{B \rightarrow \infty} \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B m_k(x) = \lim_{B \rightarrow \infty} \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B m(x, \theta_k, \mathcal{D}_n) \\ &= \mathbf{E}_{\theta}[m(x, \theta, \mathcal{D}_n)] = \bar{m}(x, \mathcal{D}_n) \quad p.s. | \mathcal{D}_n.\end{aligned}$$

- Lorsque B est grand, \hat{m}_B se "stabilise" vers l'estimateur bagging $\bar{m}(x, \mathcal{D}_n)$.

Choix du nombre d'itérations

- Deux paramètres sont à choisir : le nombre d'itérations B et le régresseur.
- On a d'après la loi des grands nombres

$$\begin{aligned}\lim_{B \rightarrow \infty} \hat{m}_B(x) &= \lim_{B \rightarrow \infty} \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B m_k(x) = \lim_{B \rightarrow \infty} \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B m(x, \theta_k, \mathcal{D}_n) \\ &= \mathbf{E}_{\theta}[m(x, \theta, \mathcal{D}_n)] = \bar{m}(x, \mathcal{D}_n) \quad p.s. | \mathcal{D}_n.\end{aligned}$$

- Lorsque B est grand, \hat{m}_B se "stabilise" vers l'estimateur bagging $\bar{m}(x, \mathcal{D}_n)$.

Conséquence importante

Le nombre d'itérations B n'est pas un paramètre à calibrer, il est conseillé de le prendre le plus grand possible en fonction du temps de calcul.

Propriété : biais et variance

On a

$$\mathbf{E}[\hat{m}_B(x)] = \mathbf{E}[m_k(x, \theta_k, \mathcal{D}_n)]$$

et

$$\mathbf{V}[\hat{m}_B(x)] = \rho(x)\mathbf{V}[m(x, \theta_k, \mathcal{D}_n)] + \frac{1 - \rho(x)}{B}\mathbf{V}[m(x, \theta_{k'}, \mathcal{D}_n)]$$

où $\rho(x) = \text{corr}(m(x, \theta_k, \mathcal{D}_n), m(x, \theta_{k'}, \mathcal{D}_n))$ pour $k \neq k'$.

Conséquence

- Bagger ne modifie pas le biais.

Conséquence

- Bagging ne modifie pas le biais.
- Pour B grand, $\mathbf{V}[\hat{m}_B(x)] \approx \rho(x)\mathbf{V}[\hat{m}_k(x, \theta_k(\mathcal{D}_n))]$

Conséquence

- Bagging ne modifie pas le biais.
- Pour B grand, $\mathbf{V}[\hat{m}_B(x)] \approx \rho(x)\mathbf{V}[\hat{m}_k(x, \theta_k(\mathcal{D}_n))] \implies$ la variance diminue d'autant plus que la corrélation entre les prédicteurs diminue.

Conséquence

- Bagging ne modifie pas le biais.
- Pour B grand, $\mathbf{V}[\hat{m}_B(x)] \approx \rho(x)\mathbf{V}[\hat{m}_k(x, \theta_k(\mathcal{D}_n))] \implies$ la variance diminue d'autant plus que la corrélation entre les prédicteurs diminue.
- Il est donc nécessaire d'agréger des estimateurs sensibles à de légères perturbations de l'échantillon.

Conséquence

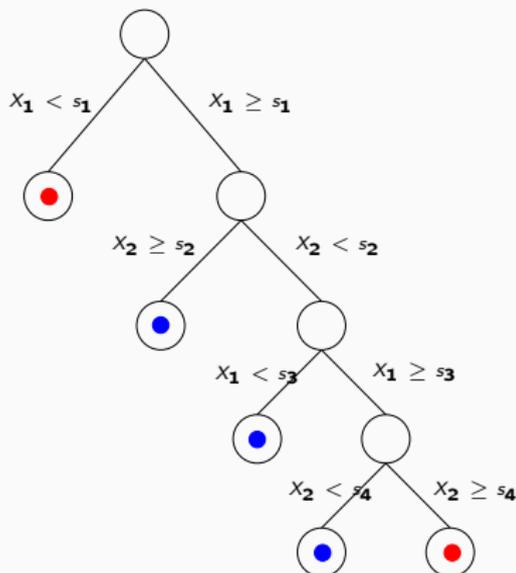
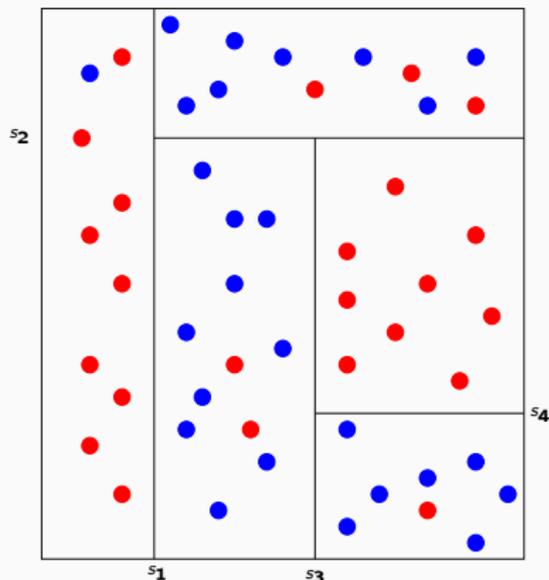
- Bagging ne modifie pas le biais.
- Pour B grand, $\mathbf{V}[\hat{m}_B(x)] \approx \rho(x)\mathbf{V}[\hat{m}_k(x, \theta_k(\mathcal{D}_n))] \implies$ la variance diminue d'autant plus que la corrélation entre les prédicteurs diminue.
- Il est donc nécessaire d'agréger des estimateurs sensibles à de légères perturbations de l'échantillon.
- Les arbres sont connus pour posséder de telles propriétés.

Bagging

Forêts aléatoires

Bibliographie

Rappels sur les arbres



Paramètre à calibrer

Profondeur de l'arbre :

- petite : biais ↗, variance ↘
- grande : biais ↘, variance ↗

- Comme son nom l'indique, une forêt aléatoire est définie à partir d'un ensemble d'arbres.

Définition

- Comme son nom l'indique, une **forêt aléatoire** est définie à partir d'un ensemble d'arbres.

Définition

Soit $T_k(x)$, $k = 1, \dots, B$ des prédicteurs par arbre ($T_k : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$). Le prédicteur des **forêts aléatoires** est obtenu par agrégation de cette collection d'arbres :

$$\hat{T}_B(x) = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B T_k(x).$$

Forêts aléatoires

- Forêts aléatoires = collection d'arbres.

Forêts aléatoires

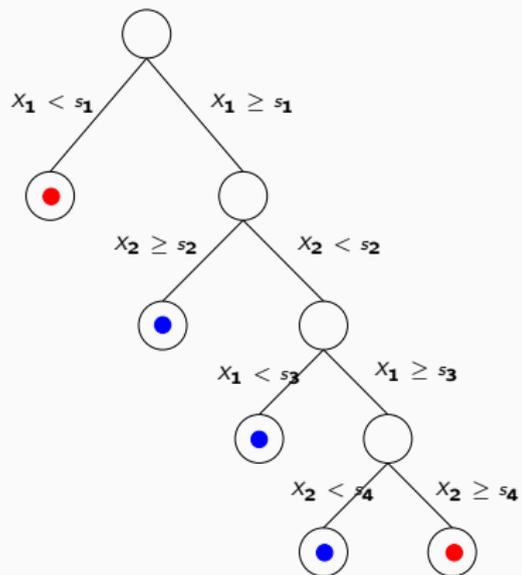
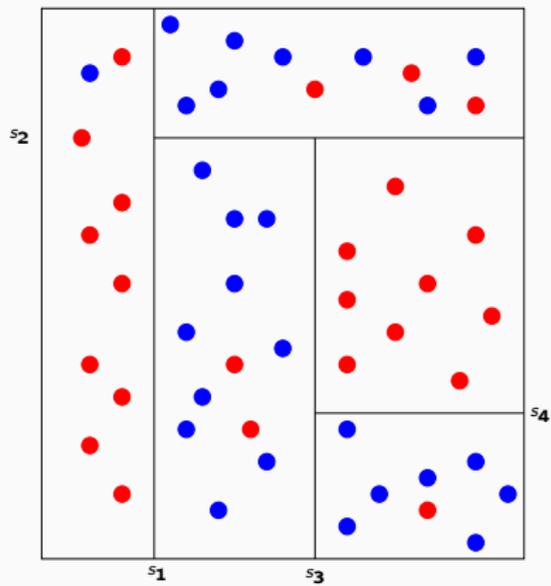
- Forêts aléatoires = collection d'arbres.
- Les forêts aléatoires les plus utilisées sont (de loin) celles proposées par Léo Breiman (au début des années 2000).

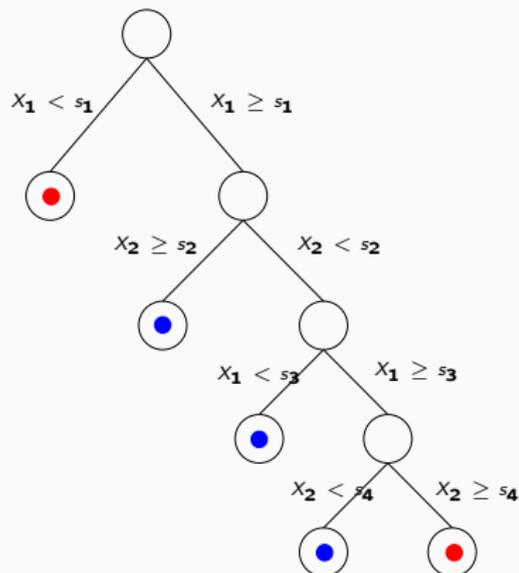
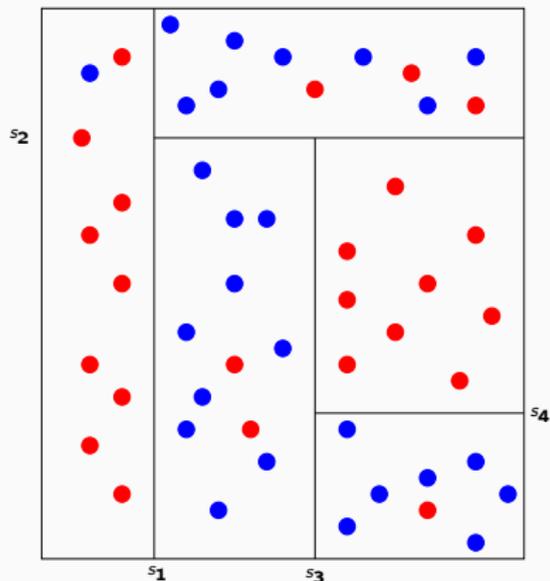
Forêts aléatoires

- Forêts aléatoires = collection d'arbres.
- Les forêts aléatoires les plus utilisées sont (de loin) celles proposées par Léo Breiman (au début des années 2000).
- Elles consistent à agréger des arbres construits sur des échantillons bootstrap.

Forêts aléatoires

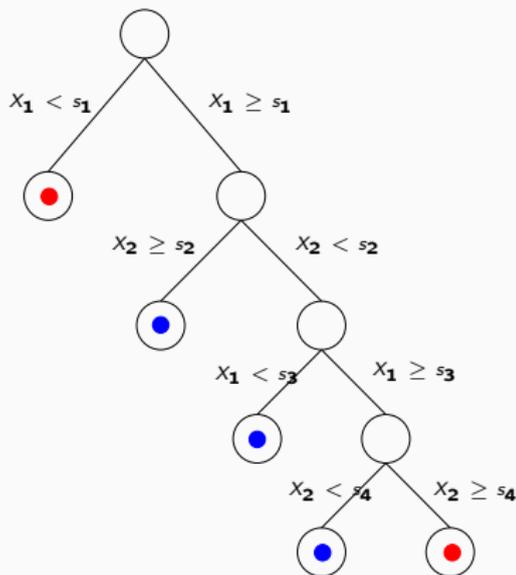
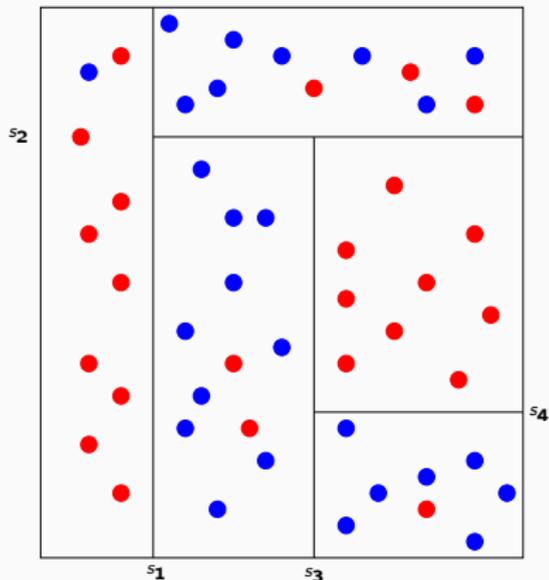
- Forêts aléatoires = collection d'arbres.
- Les forêts aléatoires les plus utilisées sont (de loin) celles proposées par Léo Breiman (au début des années 2000).
- Elles consistent à agréger des arbres construits sur des échantillons bootstrap.
- On pourra trouver de la doc à l'url
<http://www.stat.berkeley.edu/~breiman/RandomForests/>
et consulter la thèse de Robin Genuer [Genuer, 2010].





Arbres pour forêt

- Breiman propose de sélectionner la "meilleure" variable dans un ensemble composé **uniquement de m variables choisies aléatoirement parmi les d variables initiales.**



Arbres pour forêt

- Breiman propose de sélectionner la "meilleure" variable dans un ensemble composé **uniquement de m variables choisies aléatoirement parmi les d variables initiales.**
- Objectif : **diminuer la corrélation** entre les arbres que l'on agrège.

Algorithme : randomforest

Entrées :

- $x \in \mathbb{R}^d$ l'observation à prévoir ;
- \mathcal{D}_n l'échantillon ;
- B nombre d'arbres ; n_{max} nombre max d'observations par nœud
- $m \in \{1, \dots, d\}$ le nombre de variables candidates pour découper un nœud.

Algorithme : randomforest

Entrées :

- $x \in \mathbb{R}^d$ l'observation à prévoir ;
- \mathcal{D}_n l'échantillon ;
- B nombre d'arbres ; n_{max} nombre max d'observations par nœud
- $m \in \{1, \dots, d\}$ le nombre de variables candidates pour découper un nœud.

Pour $k = 1, \dots, B$:

1. Tirer un échantillon **bootstrap** dans \mathcal{D}_n
2. Construire un **arbre CART sur cet échantillon bootstrap**, chaque coupure est sélectionnée en minimisant la fonction de coût de CART sur un ensemble de **m variables choisies au hasard** parmi les d . On note $T(\cdot, \theta_k, \mathcal{D}_n)$ l'arbre construit.

Sortie : l'estimateur $T_B(x) = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B T(x, \theta_k, \mathcal{D}_n)$.

- Si on est en discrimination (Y qualitative), l'étape d'agrégation consiste à faire voter les arbres à la majorité.

- Si on est en discrimination (Y qualitative), l'étape d'agrégation consiste à faire voter les arbres à la majorité.
- Il y a deux sources d'aléa présentes dans θ_k : le tirage bootstrap et les m variables sélectionnées à chaque étape de la construction de l'arbre.

- Si on est en discrimination (Y qualitative), l'étape d'agrégation consiste à faire voter les arbres à la majorité.
- Il y a deux sources d'aléa présentes dans θ_k : le tirage bootstrap et les m variables sélectionnées à chaque étape de la construction de l'arbre.
- Méthode simple à mettre en oeuvre et déjà implémentée sur la plupart des logiciels statistiques (sur R, il suffit de lancer la fonction `randomForest` du package `randomForest`).

- Si on est en discrimination (Y qualitative), l'étape d'agrégation consiste à faire voter les arbres à la majorité.
- Il y a deux sources d'aléa présentes dans θ_k : le tirage bootstrap et les m variables sélectionnées à chaque étape de la construction de l'arbre.
- Méthode simple à mettre en oeuvre et déjà implémentée sur la plupart des logiciels statistiques (sur R, il suffit de lancer la fonction `randomForest` du package `randomForest`).
- Estimateur connu pour fournir des estimations précises sur des données complexes (beaucoup de variables, données manquantes...).

- Si on est en discrimination (Y qualitative), l'étape d'agrégation consiste à faire voter les arbres à la majorité.
- Il y a deux sources d'aléa présentes dans θ_k : le tirage bootstrap et les m variables sélectionnées à chaque étape de la construction de l'arbre.
- Méthode simple à mettre en oeuvre et déjà implémentée sur la plupart des logiciels statistiques (sur R, il suffit de lancer la fonction `randomForest` du package `randomForest`).
- Estimateur connu pour fournir des estimations précises sur des données complexes (beaucoup de variables, données manquantes...).
- Estimateur peu sensible au choix de ses paramètres ($B, n_{max}, m...$)

Choix des paramètres

- B : réglé... le plus grand possible.

Choix des paramètres

- B : réglé... le plus grand possible.

Intérêt du bagging (rappel)

Diminuer la variance des estimateurs qu'on agrège :

$$\mathbf{V}[\hat{T}_B(x)] = \rho(x)\mathbf{V}[T(x, \theta_k, \mathcal{D}_n)] + \frac{1 - \rho(x)}{B}\mathbf{V}[T(x, \theta_k, \mathcal{D}_n)]$$

Choix des paramètres

- B : réglé... le plus grand possible.

Intérêt du bagging (rappel)

Diminuer la variance des estimateurs qu'on agrège :

$$\mathbf{V}[\hat{T}_B(x)] = \rho(x)\mathbf{V}[T(x, \theta_k, \mathcal{D}_n)] + \frac{1 - \rho(x)}{B}\mathbf{V}[T(x, \theta_k, \mathcal{D}_n)]$$

Conséquence

- Le biais n'étant pas amélioré par "l'agrégation bagging", il est recommandé d'agréger des estimateurs qui possèdent un biais faible (contrairement au boosting).

Choix des paramètres

- B : réglé... le plus grand possible.

Intérêt du bagging (rappel)

Diminuer la variance des estimateurs qu'on agrège :

$$\mathbf{V}[\widehat{T}_B(x)] = \rho(x)\mathbf{V}[T(x, \theta_k, \mathcal{D}_n)] + \frac{1 - \rho(x)}{B}\mathbf{V}[T(x, \theta_k, \mathcal{D}_n)]$$

Conséquence

- Le biais n'étant pas amélioré par "l'agrégation bagging", il est recommandé d'agréger des estimateurs qui possèdent un biais faible (contrairement au boosting).
- On choisira donc des arbres "profonds", c'est-à-dire avec peu d'observations dans les nœuds terminaux.

Choix des paramètres

- B : réglé... le plus grand possible.

Intérêt du bagging (rappel)

Diminuer la variance des estimateurs qu'on agrège :

$$\mathbf{V}[\hat{T}_B(x)] = \rho(x)\mathbf{V}[T(x, \theta_k, \mathcal{D}_n)] + \frac{1 - \rho(x)}{B}\mathbf{V}[T(x, \theta_k, \mathcal{D}_n)]$$

Conséquence

- Le biais n'étant pas amélioré par "l'agrégation bagging", il est recommandé d'agréger des estimateurs qui possèdent un biais faible (contrairement au boosting).
- On choisira donc des arbres "profonds", c'est-à-dire avec peu d'observations dans les nœuds terminaux.
- Par défaut dans `randomForest`, $n_{max} = 5$ en régression et 1 en classification.

- Il est en relation avec la corrélation entre les arbres $\rho(x)$.

Choix de m

- Il est en **relation avec la corrélation** entre les arbres $\rho(x)$.
- Ce paramètre a une (légère) influence sur le compromis biais/variance de la forêt.

Choix de m

- Il est en **relation avec la corrélation** entre les arbres $\rho(x)$.
- Ce paramètre a une (légère) influence sur le compromis biais/variance de la forêt.
- $m \searrow$

Choix de m

- Il est en **relation avec la corrélation** entre les arbres $\rho(x)$.
- Ce paramètre a une (légère) influence sur le compromis biais/variance de la forêt.
- $m \searrow$
 1. tendance à se rapprocher d'un **choix "aléatoire"** des variables de découpe des arbres

Choix de m

- Il est en **relation avec la corrélation** entre les arbres $\rho(x)$.
- Ce paramètre a une (légère) influence sur le compromis biais/variance de la forêt.
- $m \searrow$
 1. tendance à se rapprocher d'un **choix "aléatoire"** des variables de découpe des arbres \implies les arbres sont de plus en plus différents

Choix de m

- Il est en **relation avec la corrélation** entre les arbres $\rho(x)$.
- Ce paramètre a une (légère) influence sur le compromis biais/variance de la forêt.
- $m \searrow$
 1. tendance à se rapprocher d'un **choix "aléatoire"** des variables de découpe des arbres \implies les arbres sont de plus en plus différents $\implies \rho(x) \searrow \implies$ **la variance de la forêt diminue.**

Choix de m

- Il est en **relation avec la corrélation** entre les arbres $\rho(x)$.
- Ce paramètre a une (légère) influence sur le compromis biais/variance de la forêt.
- $m \searrow$
 1. tendance à se rapprocher d'un **choix "aléatoire"** des variables de découpe des arbres \implies les arbres sont de plus en plus différents $\implies \rho(x) \searrow \implies$ **la variance de la forêt diminue**.
 2. mais... le biais des arbres \nearrow

Choix de m

- Il est en **relation avec la corrélation** entre les arbres $\rho(x)$.
- Ce paramètre a une (légère) influence sur le compromis biais/variance de la forêt.
- $m \searrow$
 1. tendance à se rapprocher d'un **choix "aléatoire"** des variables de découpe des arbres \implies les arbres sont de plus en plus différents $\implies \rho(x) \searrow \implies$ **la variance de la forêt diminue**.
 2. mais... le biais des arbres $\nearrow \implies$ les **biais de la forêt** \nearrow .

Choix de m

- Il est en **relation avec la corrélation** entre les arbres $\rho(x)$.
- Ce paramètre a une (légère) influence sur le compromis biais/variance de la forêt.
- $m \searrow$
 1. tendance à se rapprocher d'un **choix "aléatoire"** des variables de découpe des arbres \implies les arbres sont de plus en plus différents $\implies \rho(x) \searrow \implies$ **la variance de la forêt diminue**.
 2. mais... le biais des arbres $\nearrow \implies$ les **biais de la forêt** \nearrow .
- Inversement lorsque $m \nearrow$.

Choix de m

- Il est en **relation avec la corrélation** entre les arbres $\rho(x)$.
- Ce paramètre a une (légère) influence sur le compromis biais/variance de la forêt.
- $m \searrow$
 1. tendance à se rapprocher d'un **choix "aléatoire"** des variables de découpe des arbres \implies les arbres sont de plus en plus différents $\implies \rho(x) \searrow \implies$ **la variance de la forêt diminue**.
 2. mais... le biais des arbres $\nearrow \implies$ les **biais de la forêt** \nearrow .
- Inversement lorsque $m \nearrow$.

Conclusion

- Il est recommandé de comparer les performances de la forêt pour **plusieurs valeurs de m** .
- Par défaut $m = d/3$ en régression et \sqrt{d} en classification.

Application sur les données spam

```
> library(randomForest)
> foret1 <- randomForest(type~.,data=spam)
> foret1
```

Call:

```
randomForest(formula = type ~ ., data = spam)
              Type of random forest: classification
              Number of trees: 500
No. of variables tried at each split: 7
```

```
              OOB estimate of  error rate: 5.26%
```

Confusion matrix:

```
      0   1 class.error
0 1352  42 0.03012912
1   79 827 0.08719647
```

- Comme pour les autres classifieurs et régresseurs il convient de définir des critères qui permettent de mesurer la performance des forêts aléatoires.

- Comme pour les autres classifieurs et régresseurs il convient de définir des critères qui permettent de **mesurer la performance des forêts aléatoires**.
- **Exemples :**
 - Erreur de prédiction : $\mathbf{E}[(Y - \hat{T}_B(X))^2]$ en régression ;
 - Probabilité d'erreur : $\mathbf{P}(Y \neq \hat{T}_B(X))$ en classification.

- Comme pour les autres classifieurs et régresseurs il convient de définir des critères qui permettent de **mesurer la performance des forêts aléatoires**.
- **Exemples :**
 - Erreur de prédiction : $\mathbf{E}[(Y - \hat{T}_B(X))^2]$ en régression ;
 - Probabilité d'erreur : $\mathbf{P}(Y \neq \hat{T}_B(X))$ en classification.
- Comme pour les autres méthodes, ces critères peuvent être évalués par **apprentissage/validation** ou **validation croisée**.

- Comme pour les autres classifieurs et régresseurs il convient de définir des critères qui permettent de **mesurer la performance des forêts aléatoires**.
- **Exemples :**
 - Erreur de prédiction : $\mathbf{E}[(Y - \hat{T}_B(X))^2]$ en régression ;
 - Probabilité d'erreur : $\mathbf{P}(Y \neq \hat{T}_B(X))$ en classification.
- Comme pour les autres méthodes, ces critères peuvent être évalués par **apprentissage/validation** ou **validation croisée**.
- La phase **bootstrap** des algorithmes bagging permet de définir une nouvelle méthode d'estimation de ces critères : méthode **OOB (Out Of Bag)**.

- Pour chaque observation (X_i, Y_i) de \mathcal{D}_n , on désigne par \mathcal{I}_B l'ensemble des arbres de la forêt qui **ne contiennent pas cette observation** dans leur échantillon bootstrap.
- La prévision de Y au point X_i se fait selon

$$\hat{Y}_i = \frac{1}{|\mathcal{I}_B|} \sum_{k \in \mathcal{I}_B} T(X_i, \theta_k, \mathcal{D}_n).$$

Erreur Ouf Of Bag

- Pour chaque observation (X_i, Y_i) de \mathcal{D}_n , on désigne par \mathcal{I}_B l'ensemble des arbres de la forêt qui **ne contiennent pas cette observation** dans leur échantillon bootstrap.
- La prévision de Y au point X_i se fait selon

$$\hat{Y}_i = \frac{1}{|\mathcal{I}_B|} \sum_{k \in \mathcal{I}_B} T(X_i, \theta_k, \mathcal{D}_n).$$

Estimateurs Our Of Bag

- L'**erreur de prédiction** est estimée par $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - Y_i)^2$.
- La **probabilité d'erreur** est estimée par $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{\hat{Y}_i \neq Y_i}$.

Exemple

3	4	6	10	3	9	10	7	7	1	m_1
2	8	6	2	10	10	2	9	5	6	m_2
2	9	4	4	7	7	2	3	6	7	m_3
6	1	3	3	9	3	8	10	10	1	m_4
3	7	10	3	2	8	6	9	10	2	m_5
7	10	3	4	9	10	10	8	6	1	m_6

Exemple

3	4	6	10	3	9	10	7	7	1	m_1
2	8	6	2	10	10	2	9	5	6	m_2
2	9	4	4	7	7	2	3	6	7	m_3
6	1	3	3	9	3	8	10	10	1	m_4
3	7	10	3	2	8	6	9	10	2	m_5
7	10	3	4	9	10	10	8	6	1	m_6

- Les échantillons 2, 3 et 5 **ne contiennent pas** la première observation, donc

$$\hat{Y}_1 = \frac{1}{3}(m_2(X_1) + m_3(X_1) + m_5(X_1)).$$

- On fait de même pour **toutes les observations** $\implies \hat{Y}_2, \dots, \hat{Y}_n$.

Exemple

3	4	6	10	3	9	10	7	7	1	m_1
2	8	6	2	10	10	2	9	5	6	m_2
2	9	4	4	7	7	2	3	6	7	m_3
6	1	3	3	9	3	8	10	10	1	m_4
3	7	10	3	2	8	6	9	10	2	m_5
7	10	3	4	9	10	10	8	6	1	m_6

- Les échantillons 2, 3 et 5 **ne contiennent pas** la première observation, donc

$$\hat{Y}_1 = \frac{1}{3}(m_2(X_1) + m_3(X_1) + m_5(X_1)).$$

- On fait de même pour **toutes les observations** $\implies \hat{Y}_2, \dots, \hat{Y}_n$.
- On **estime l'erreur** selon

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - Y_i)^2.$$

Exemple

- On construit la forêt avec $m = 1$:

```
> foret2 <- randomForest(type~.,data=spam,mtry=1)
> foret2
```

Call:

```
randomForest(formula = type ~ ., data = spam, mtry = 1)
      Type of random forest: classification
      Number of trees: 500
```

No. of variables tried at each split: 1

OOB estimate of error rate: 8.04%

Confusion matrix:

	0	1	class.error
0	1367	27	0.01936872
1	158	748	0.17439294

Exemple

- On construit la forêt avec $m = 1$:

```
> foret2 <- randomForest(type~.,data=spam,mtry=1)
> foret2

Call:
  randomForest(formula = type ~ ., data = spam, mtry = 1)
                Type of random forest: classification
                Number of trees: 500
No. of variables tried at each split: 1

                OOB estimate of  error rate: 8.04%
Confusion matrix:
      0   1 class.error
0 1367  27  0.01936872
1  158 748  0.17439294
```

Conclusion

L'erreur OOB est de 8.04%, elle est de 5.26% lorsque $m = 7$.

- Un des reproches souvent fait aux forêts est l'aspect **boîte noire** et **manque d'interprétabilité** par rapport aux modèles paramétriques tels que le modèle logistique.

Importance des variables

- Un des reproches souvent fait aux forêts est l'aspect **boîte noire** et **manque d'interprétabilité** par rapport aux modèles paramétriques tels que le modèle logistique.
- Il existe plusieurs **indicateurs** qui permettent de mesurer l'**importance des variables** présentes dans le modèle, notamment
 - **Mean decrease accuracy** : comme l'erreur OOB, ce critère est basé sur le fait que toutes les observations **ne sont pas utilisées** pour construire les arbres de la forêt.
 - **Mean decrease in node impurity** : basé sur la mesure d'importance des variables d'un arbre.

Mean decrease in node impurity

- Forêt : $\hat{T}_B(x) = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B T_k(x)$.
- $\mathcal{I}_\ell^2(T_k)$ **importance de la variable** X_ℓ pour l'arbre T_k définie dans le slide 174.

Mean decrease in node impurity

- Forêt : $\hat{T}_B(x) = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B T_k(x)$.
- $\mathcal{I}_\ell^2(T_k)$ **importance de la variable** X_ℓ pour l'arbre T_k définie dans le slide 174.
- L'importance de X_ℓ pour la forêt \hat{T}_B est la **moyenne des importances** de tous les arbres :

$$\mathcal{I}_{\ell, \text{MDI}}^2 = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B \mathcal{I}_\ell^2(T_k).$$

Mean decrease accuracy

- Soit OOB_k l'échantillon Out Of Bag associé au k^{eme} arbre : il contient les observations qui ne sont pas dans le k^{eme} échantillon bootstrap.

Mean decrease accuracy

- Soit OOB_k l'échantillon Out Of Bag associé au k^{eme} arbre : il contient les observations qui ne sont pas dans le k^{eme} échantillon bootstrap.
- Soit E_{OOB_k} l'erreur de prédiction de l'arbre k mesurée sur cet échantillon :

$$E_{OOB_k} = \frac{1}{|OOB_k|} \sum_{i \in OOB_k} (T(X_i, \theta_k, \mathcal{D}_n) - Y_i)^2.$$

Mean decrease accuracy

- Soit OOB_k l'échantillon Out Of Bag associé au k^{eme} arbre : il contient les observations qui **ne sont pas** dans le k^{eme} échantillon bootstrap.
- Soit E_{OOB_k} l'erreur de prédiction de l'arbre k mesurée sur cet échantillon :

$$E_{OOB_k} = \frac{1}{|OOB_k|} \sum_{i \in OOB_k} (T(X_i, \theta_k, \mathcal{D}_n) - Y_i)^2.$$

- Soit OOB_k^ℓ l'échantillon OOB_k dans lequel on a **perturbé aléatoirement** les valeurs de la variable ℓ et $E_{OOB_k^\ell}$ l'erreur de **prédiction** de l'arbre k mesurée sur cet échantillon :

$$E_{OOB_k^\ell}^\ell = \frac{1}{|OOB_k^\ell|} \sum_{i \in OOB_k^\ell} (T(X_i^\ell, \theta_k, \mathcal{D}_n) - Y_i)^2,$$

Idée

- Si la variable ℓ est importante alors sa permutation dans les échantillons OOB doit affecter les erreurs de prévisions.

Idée

- Si la variable ℓ est importante alors sa permutation dans les échantillons OOB doit affecter les erreurs de prévisions.
- $\implies E_{OOB_k}^\ell$ doit être (beaucoup) plus grand que E_{OOB_k} .

Idée

- Si la **variable ℓ est importante** alors sa permutation dans les échantillons OOB doit **affecter les erreurs de prévisions**.
- $\implies E_{OOB_k}^\ell$ doit être (beaucoup) plus grand que E_{OOB_k} .

Définition

L'importance **Mean decrease accuracy** de la variable ℓ est définie par :

$$\mathcal{I}_{\ell, \text{MDA}}^2 = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B (E_{OOB_k}^\ell - E_{OOB_k}).$$

Exemple

- L'importance s'obtient facilement avec la fonction **importance**

```
> foret <- randomForest(type~.,data=spam,importance=TRUE)
> head(importance(foret))
```

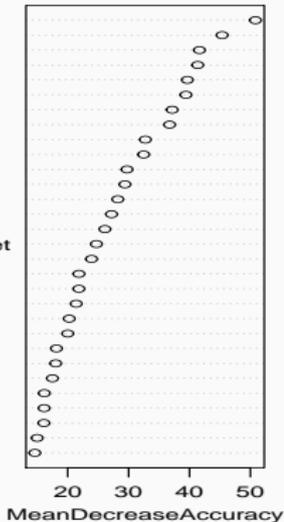
	nonspam	spam	MeanDecreaseAccuracy	MeanDecreaseGini
make	4.668076	8.9121105	9.579412	7.572514
address	9.372921	9.5813681	13.002158	10.886620
all	6.160720	13.6101302	12.846411	29.437015
num3d	6.757530	0.7771223	5.709875	2.075964
our	23.485217	24.4193562	28.223370	68.661351
over	14.224997	13.3619582	18.152737	15.490811

On peut visualiser les importances avec varImpPlot

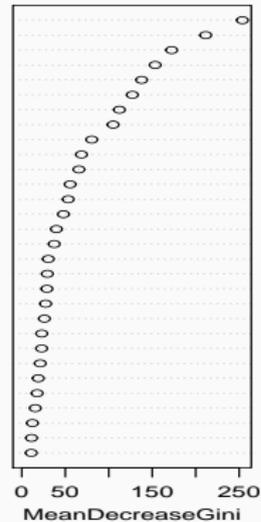
```
> varImpPlot(foret)
```

foret

charExclamation
remove
capitalAve
hp
charDollar
free
capitalLong
edu
capitalTotal
george
your
re
our
num1999
you
charRoundbracket
hpl
num000
meeting
will
business
money
over
num650
internet
email
receive
charSemicolon
num85
pm

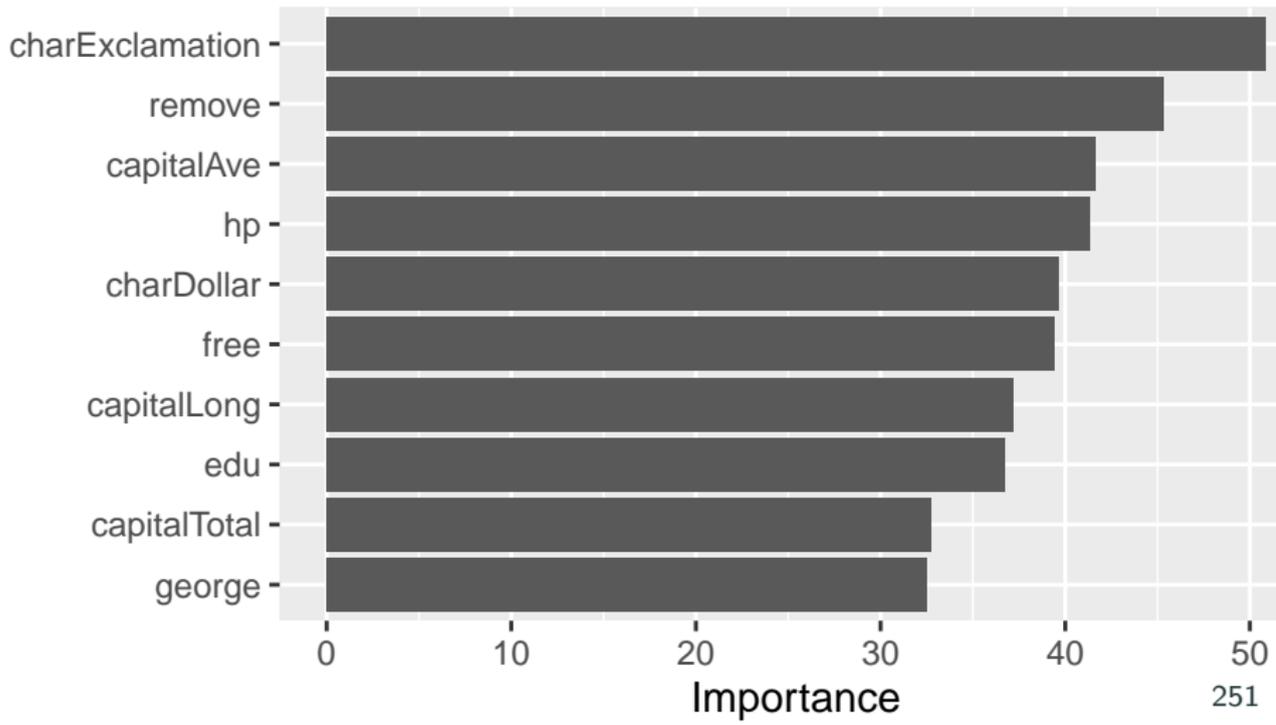


charExclamation
charDollar
remove
free
capitalAve
your
capitalLong
hp
capitalTotal
our
money
num000
you
george
edu
hpl
business
all
num1999
internet
charRoundbracket
receive
will
re
email
mail
over
meeting
num650
address



Ou avec le package vip

```
> vip(foret)
```

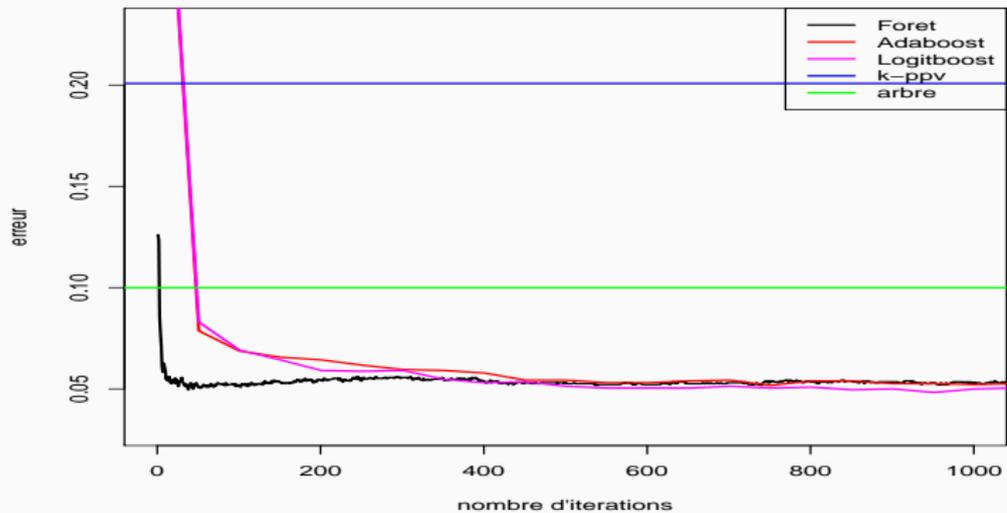


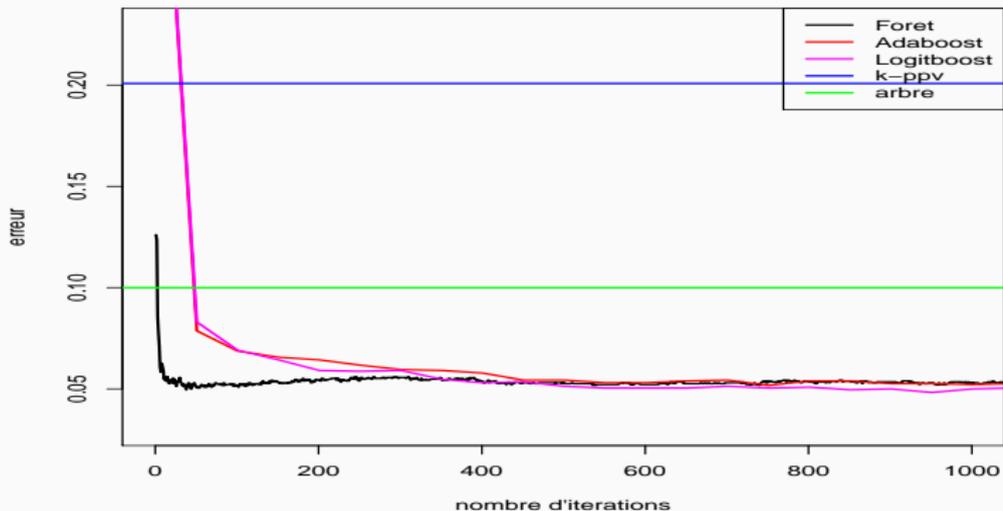
- On compare les performances du boosting (Adaboost et Logitboost), des forêts aléatoires, d'un arbre de classification ainsi que la méthode des k -ppv sur les données spam.

Comparaison de méthodes

- On compare les performances du boosting (Adaboost et Logitboost), des forêts aléatoires, d'un arbre de classification ainsi que la méthode des k -ppv sur les données spam.
- Pour ce faire, on ajuste les différents modèles sur un échantillon d'apprentissage de taille 2300 et on compare les performances de chaque méthode en estimant la probabilité d'erreur par l'erreur empirique calculée sur l'échantillon test de taille 2301 :

$$L_n(\hat{g}) = \frac{1}{n_{test}} \sum_{i \in \mathcal{D}_{test}} \mathbf{1}_{\hat{g}(X_i) \neq Y_i}.$$





Méthode	Erreur
Forêt	0.050
Ada	0.052
Logit	0.048
k-ppv	0.200
arbre	0.100

-  Breiman, L. (1996).
Bagging predictors.
Machine Learning, 26(2) :123–140.
-  Breiman, L., Friedman, J., Olshen, R., and Stone, C. (1984).
Classification and regression trees.
Wadsworth & Brooks.
-  Clémençon, S., Lugosi, G., and Vayatis, N. (2008).
Ranking and empirical minimization of u-statistics.
The Annals of Statistics, 36(2) :844–874.
-  Friedman, J. (1989).
Regularized discriminant analysis.
Journal of the American Statistical Association, 84 :165–175.



Genuer, R. (2010).

Forêts aléatoires : aspects théoriques, sélection de variables et applications.

PhD thesis, Université Paris XI.



Hastie, T., Tibshirani, R., and Friedman, J. (2009).

The Elements of Statistical Learning : Data Mining, Inference, and Prediction.

Springer, second edition.



Kass, G. (1980).

An exploratory technique for investigating large quantities of categorical data.

Applied Statistics, 29(2) :119–127.



Saporta, G. (2011).

Probabilités, analyse des données et statistique.

Tecnip, 3ème édition.