SY09 Printemps 2022
TD/TP 11 — Arbres de décision

Une implémentation des arbres de décision est disponible dans `scikit-learn`. Il faut importer la classe `DecisionTreeClassifier`

```
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
```

Les arguments intéressants lors de l'instanciation de la classe sont les suivants :
- `criterion` : le critère utilisé pour évaluer la qualité d'une séparation,
- `max_leaf_nodes` : le nombre maximum de feuilles autorisée lors de la construction de l'arbre,
- `max_depth` : la profondeur maximale autorisée lors de la construction de l'arbre,
- `max_features` : le nombre de caractéristiques à retenir de manière aléatoire pour la recherche de la meilleure séparation,
- `ccp_alpha` : paramètre λ utilisé pour l'élagage coût–complexité.

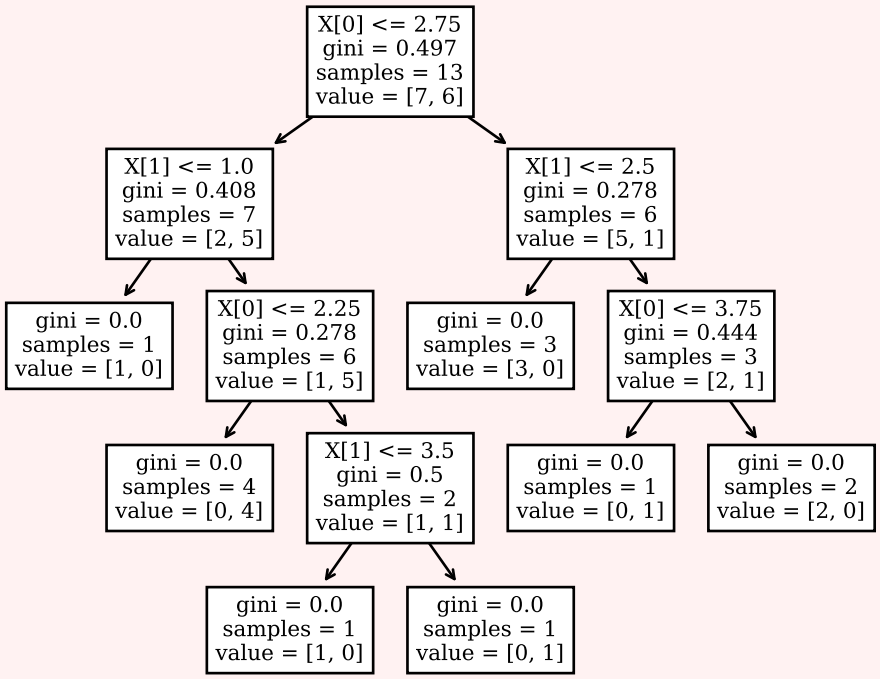
1 Arbres de décision

1 Retrouver l'arbre construit dans le polycopié de cours en utilisant le jeu de données `data/toy2.csv`.

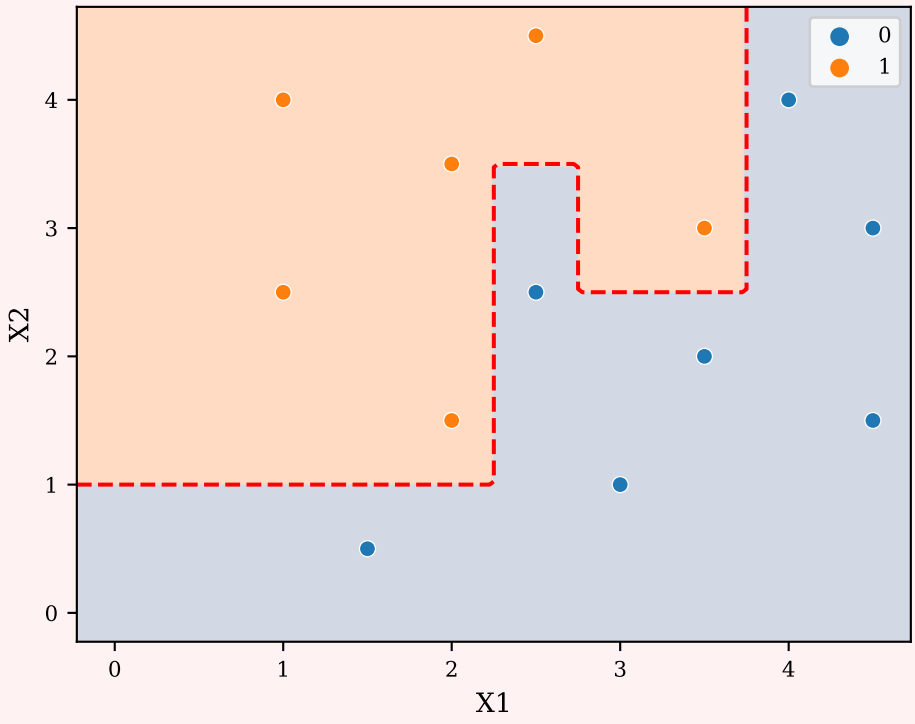
Pour visualiser l'arbre construit, on pourra utiliser la fonction `plot_tree` avec

```
from sklearn.tree import plot_tree
```

```
In [1]: from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
        from sklearn.tree import plot_tree

        Xy = pd.read_csv("data/toy2.csv")
        X = Xy.iloc[:, :-1]
        y = Xy.iloc[:, -1]

        cls = DecisionTreeClassifier()
        cls.fit(X, y)
        plot_tree(cls)
        plt.show()
```




```
In [2]: sns.scatterplot(x="X1", y="X2", hue="y", data=Xy)
        add_decision_boundary(cls)
        plt.show()
```



2 Retrouver le critère de Gini du nœud racine (sans séparation).

Les proportions des classes sont 6/13 et 7/13. Le critère de Gini est donc $6/13(1-6/13)+7/13(1-7/13) = 84/169 \simeq 0.497$.

3 Montrer que le gain dû à la première séparation, en termes de critère de Gini, vaut $\simeq 0.347985$.

Les effectifs et les indices de Gini de tous les nœuds sont accessibles via l'attribut `tree_`, en spécifiant l'indice du nœud :

```
<gini> = cls.tree_.impurity[<indice d'un noeud>]
<effectif noeud> = cls.tree_.n_node_samples[<indice d'un noeud>]
```

L'indice du nœud racine est 0, et les indices des autres nœuds peuvent être calculés comme suit :

```
<indice du noeud fils gauche> = cls.tree_.children_left[<indice d'un noeud>]
<indice du noeud fils droit> = cls.tree_.children_right[<indice d'un noeud>]
```

Pour calculer le gain d'une séparation, en termes de critère de Gini, il suffit de calculer la différence entre le critère avant séparation et la somme pondérée (par les effectifs des nœuds) des critères après séparation :

```
In  [3]: gini_left = cls.tree_.impurity[cls.tree_.children_left[0]]
         gini_left
Out [3]: 0.40816326530612246
In  [4]: gini_right = cls.tree_.impurity[cls.tree_.children_right[0]]
         gini_right
Out [4]: 0.2777777777777778
In  [5]: count_left = cls.tree_.n_node_samples[cls.tree_.children_left[0]]
         count_left
Out [5]: 7
In  [6]: count_right = cls.tree_.n_node_samples[cls.tree_.children_right[0]]
         count_right
Out [6]: 6
In  [7]: (count_left * gini_left + count_right * gini_right) / (count_left +
         ↪  count_right)
Out [7]: 0.34798534798534797
```

2 Modèles basés sur les arbres

2.1 *Bagging*

Dans cette section, nous allons recréer manuellement les différentes étapes de la technique du *bagging* pour les arbres de décision. La première étape consiste à créer plusieurs jeux de données avec la technique du *bootstrap*.

4 Créer trois jeux de données échantillonnés par *bootstrap* grâce à la fonction `resample` disponible avec

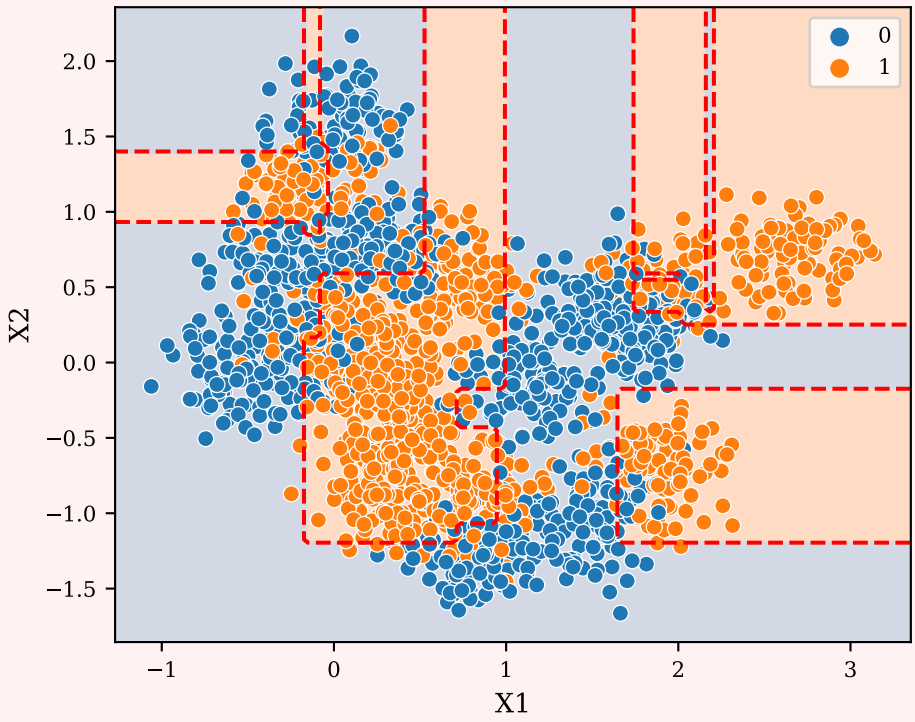
```
from sklearn.utils import resample
```

On utilisera le jeu de données `Synth1-2000.csv` du TP07.

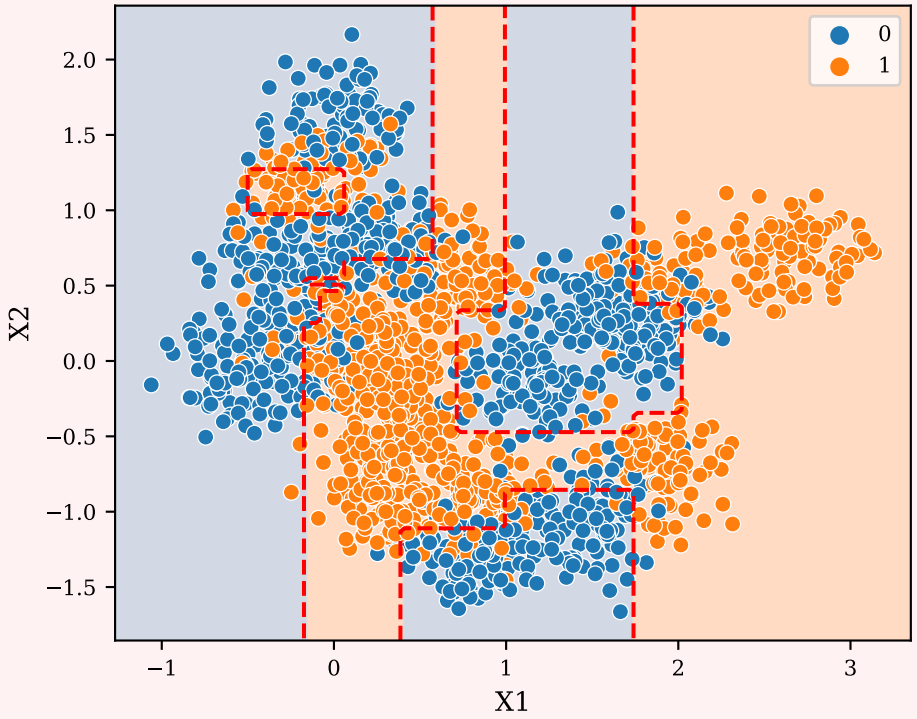
```
In [8]: Xy = pd.read_csv("../TP07_K_plus_proches_voisins/data/Synth1-2000.csv")
        X = Xy.iloc[:, :-1]
        y = Xy.iloc[:, -1]

        from sklearn.utils import resample
        X1, y1 = resample(X, y)
        X2, y2 = resample(X, y)
        X3, y3 = resample(X, y)
```

5 Apprendre un arbre de décision limité à 50 feuilles maximum sur chaque réplication du jeu de données. Afficher leurs régions de décision respectives.

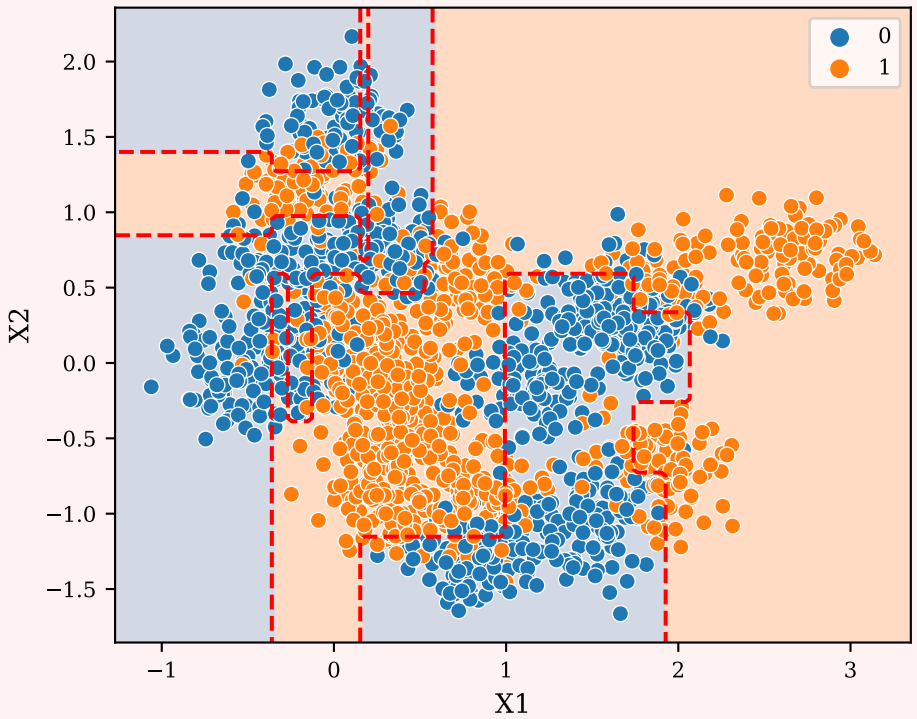
```
In [9]: from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier

        params = {"max_leaf_nodes": 30}
        clf1 = DecisionTreeClassifier(**params)
        clf1.fit(X1, y1)
        sns.scatterplot(x="X1", y="X2", hue="y", data=Xy)
        add_decision_boundary(clf1)
        plt.show()
```




```
In [10]: clf2 = DecisionTreeClassifier(**params)
         clf2.fit(X2, y2)
         sns.scatterplot(x="X1", y="X2", hue="y", data=Xy)
         add_decision_boundary(clf2)
         plt.show()
```



In [11]:
```
clf3 = DecisionTreeClassifier(**params)
clf3.fit(X3, y3)
sns.scatterplot(x="X1", y="X2", hue="y", data=Xy)
add_decision_boundary(clf3)
plt.show()
```



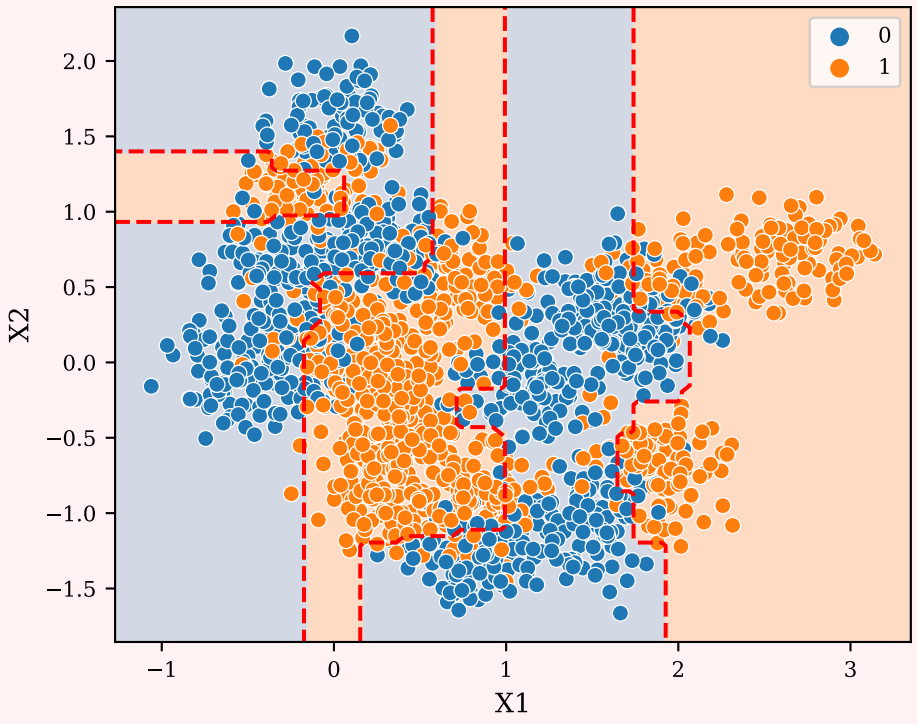
6 En utilisant les trois modèles précédents, compléter la fonction suivante qui réalise l'agrégation

des trois fonctions de décision. On pourra utiliser la fonction `np.where`.

```
def aggregating(X):
  y1 = ...
  y2 = ...
  y3 = ...

  return ...
```

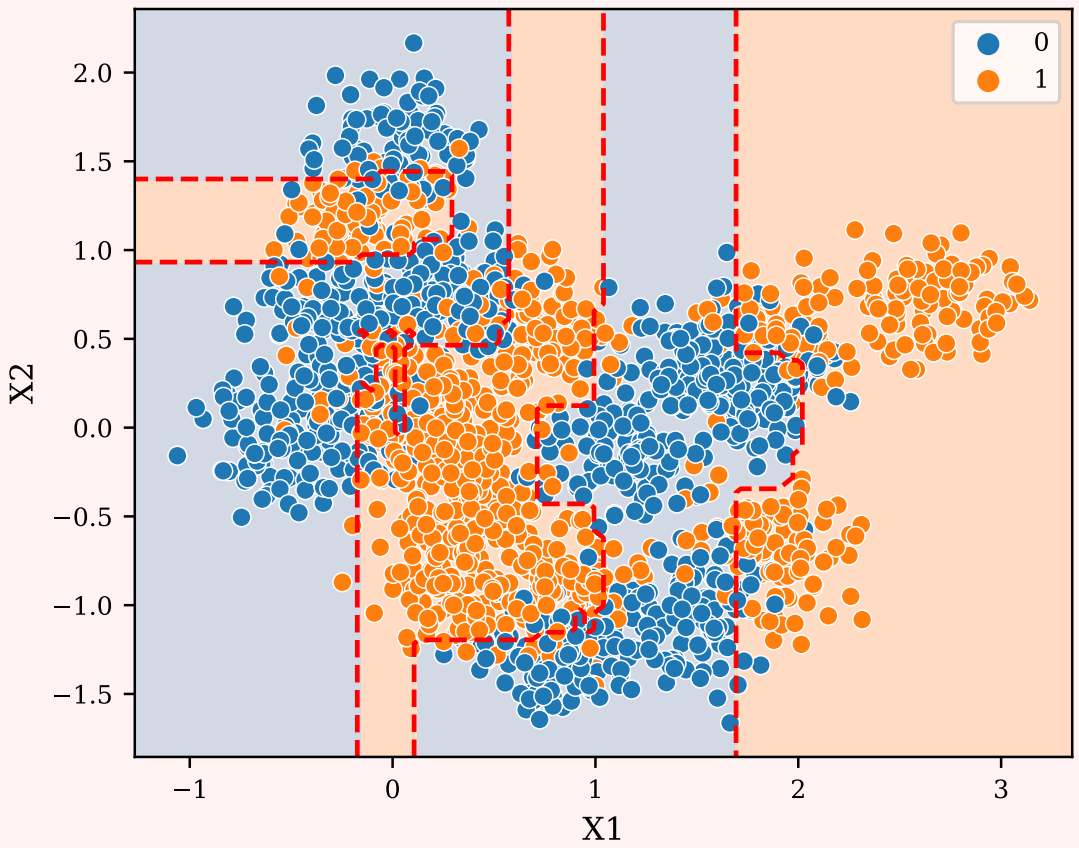
Utiliser ensuite cette fonction avec `add_decision_boundary` en spécifiant `model_classes` pour afficher les frontières de décision du modèle agrégé.

```
In [12]: def aggregating(X):
             y1 = clf1.predict(X)
             y2 = clf2.predict(X)
             y3 = clf3.predict(X)

             return np.where((y1 + y2 + y3) > 1.5, 1, 0)

         sns.scatterplot(x="X1", y="X2", hue="y", data=Xy)
         add_decision_boundary(aggregating, model_classes=[0, 1])
         plt.show()
```



7 Réaliser le même travail en utilisant cette fois la classe `BaggingClassifier`.

```
In [13]: from sklearn.ensemble import BaggingClassifier

         model = DecisionTreeClassifier(**params)
         clf = BaggingClassifier(model, n_estimators=3)
         clf.fit(X, y)
         sns.scatterplot(x="X1", y="X2", hue="y", data=Xy)
         add_decision_boundary(clf)
         plt.show()
```



2.2 Forêt aléatoire

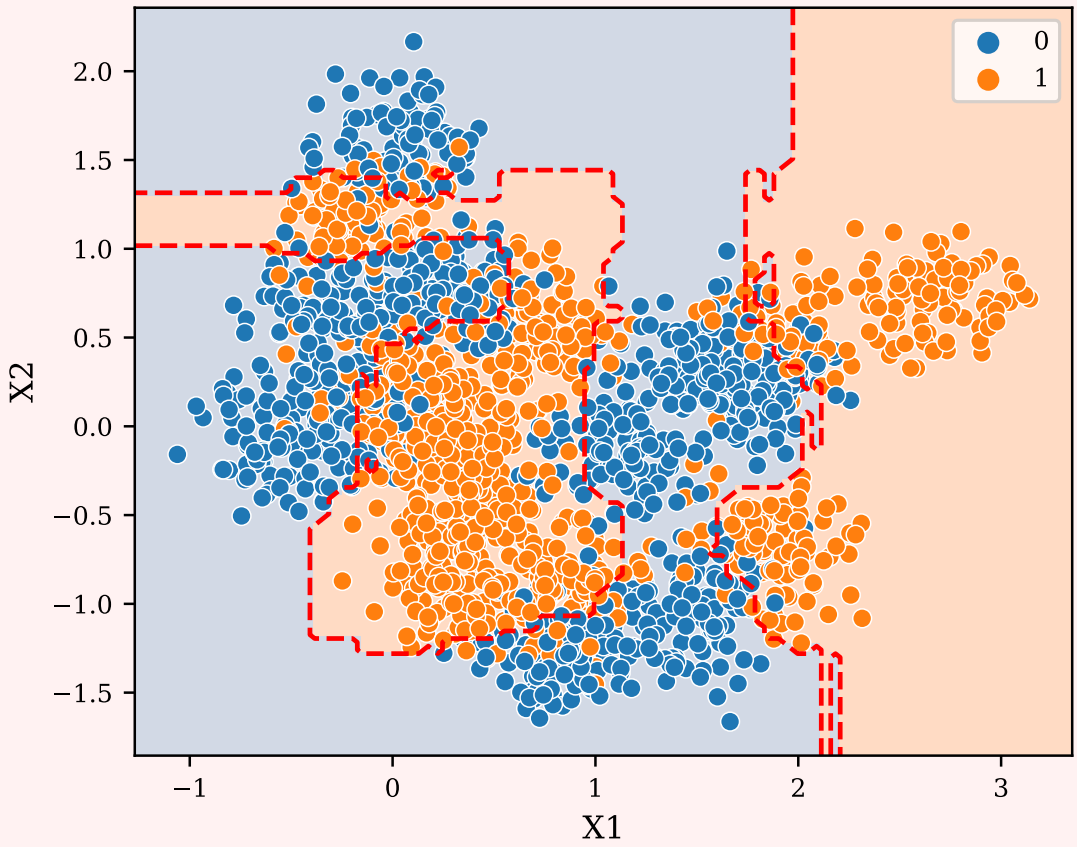
Une implémentation des forêts aléatoires est disponible dans `scikit-learn`. Il faut importer la classe `RandomForestClassifier`

```
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
```

En plus des arguments des arbres de décision, on trouve l'argument `n_estimators` qui fixe le nombre d'arbres utilisés dans la forêt. De plus, l'argument `max_features` est cette fois fixé par défaut à $\sqrt{p}$ (avec p le nombres de caractéristiques).

8 Apprendre une forêt aléatoire sur le jeu de données précédent et visualiser le résultat.

In [14]:
```
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier

Xy = pd.read_csv("../TP07_K_plus_proches_voisins/data/Synth1-2000.csv")
X = Xy.iloc[:, :-1]
y = Xy.iloc[:, -1]

clf = RandomForestClassifier(n_estimators=100, **params)
clf.fit(X, y)
sns.scatterplot(x="X1", y="X2", hue="y", data=Xy)
add_decision_boundary(clf)
plt.show()
```



2.3 Élagage coût-complexité et validation croisée

Dans cette section, on se propose d'implémenter la recherche du paramètre λ optimal par validation croisée telle que décrite aux pages 127 à 128 du polycopié de cours.

9 On commence par déterminer les valeurs λ_k pour la séquence $(\mathcal{A}_k, \lambda_k)$ d'arbres appris sur l'ensemble d'apprentissage total $\mathcal{T}$.

La série des λ_k est disponible grâce à la fonction `cost_complexity_pruning_path`.

```
In [15]: from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier

         Xy = pd.read_csv("../TP07_K_plus_proches_voisins/data/Synth1-2000.csv")

         X = Xy.iloc[:, :-1]
         y = Xy.iloc[:, -1]

         clf = DecisionTreeClassifier()
         clf.fit(X, y)

         # Détermination des λ_k sur le jeu de données global
         lambdas = clf.cost_complexity_pruning_path(X, y)["ccp_alphas"]
         lambdas = np.unique(lambdas)
```

10 Calculer les moyennes géométriques $\overline{\lambda}_k = \sqrt{\lambda_k \lambda_{k+1}}$.

```
In [16]: lambdas_moy = np.sqrt(lambdas[:-1] * lambdas[1:])
```

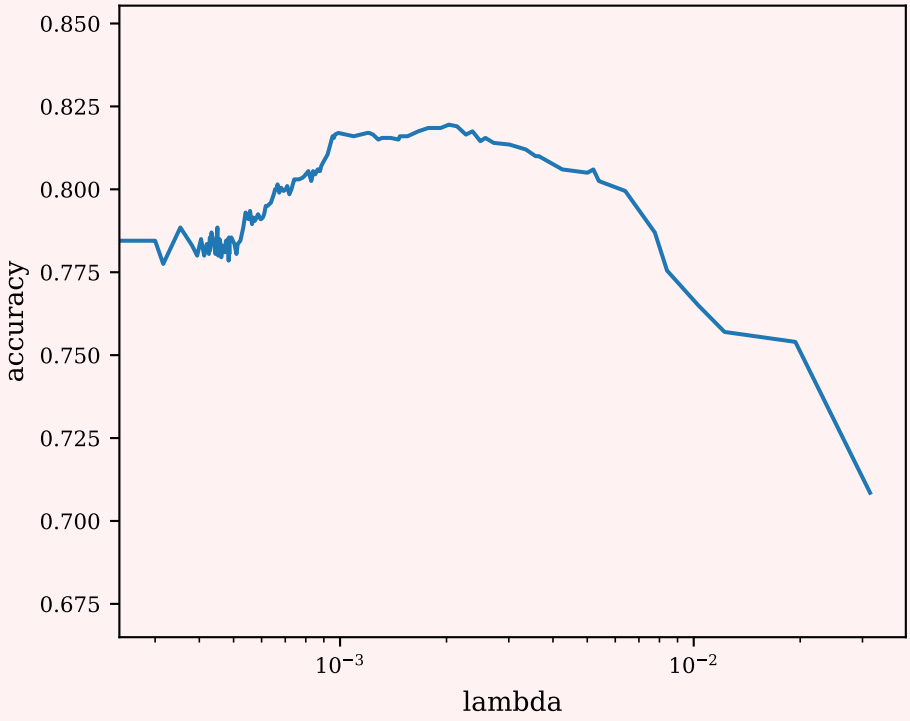
11 Compléter le générateur suivant qui génère les erreurs $\widehat{\varepsilon}_v\left(\mathcal{A}^v\left(\overline{\lambda}_k\right)\right)$ pour chaque k et chaque v.

```
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
from sklearn.model_selection import KFold
from sklearn.metrics import accuracy_score
from sklearn.utils import check_X_y


def decision_tree_cross_validation_accuracies(X, y, n_folds, lambdas):
    X, y = check_X_y(X, y)

    # Création d'un object `KFold` pour la validation croisée
    kf = ...

    for train_index, val_index in kf:
        # Création de `X_train`, `y_train`, `X_val` et `y_val`
        raise NotImplementedError

        for k, lmb in enumerate(lambdas):
            # Création d'un arbre avec un coefficient coût-complexité
            # égal à `lmb`
            clf = ...

            # Apprentissage sur l'ensemble d'apprentissage et calcul
            # de la précision sur l'ensemble de validation
            ...
            yield k, acc
```

```
In [17]: from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
         from sklearn.model_selection import KFold
         from sklearn.metrics import accuracy_score
         from sklearn.utils import check_X_y


         def decision_tree_cross_validation_accuracies(X, y, n_folds, lambdas):
             X, y = check_X_y(X, y)

             # Création d'un object `KFold` pour la validation croisée
             kf = KFold(n_splits=n_folds, shuffle=True).split(X)

             for train_index, val_index in kf:
                 # Création de `X_train`, `y_train`, `X_val` et `y_val`
                 X_train = X[train_index, :]
                 y_train = y[train_index]
                 X_val = X[val_index, :]
                 y_val = y[val_index]

                 for k, lmb in enumerate(lambdas):
                     # Création d'un arbre avec un coefficient coût-complexité
                     # égal à `lmb`
                     clf = DecisionTreeClassifier(ccp_alpha=lmb)

                     # Apprentissage sur l'ensemble d'apprentissage et calcul
                     # de la précision sur l'ensemble de validation
                     clf.fit(X_train, y_train)
                     pred = clf.predict(X_val)
                     acc = accuracy_score(y_val, pred)
                     yield k, lmb, acc
```

12 Créer le jeu de données issu du générateur précédent. Agréger les erreurs de tous les plis ensemble et afficher les erreurs de validation en fonction des $\overline{\lambda}_k$.

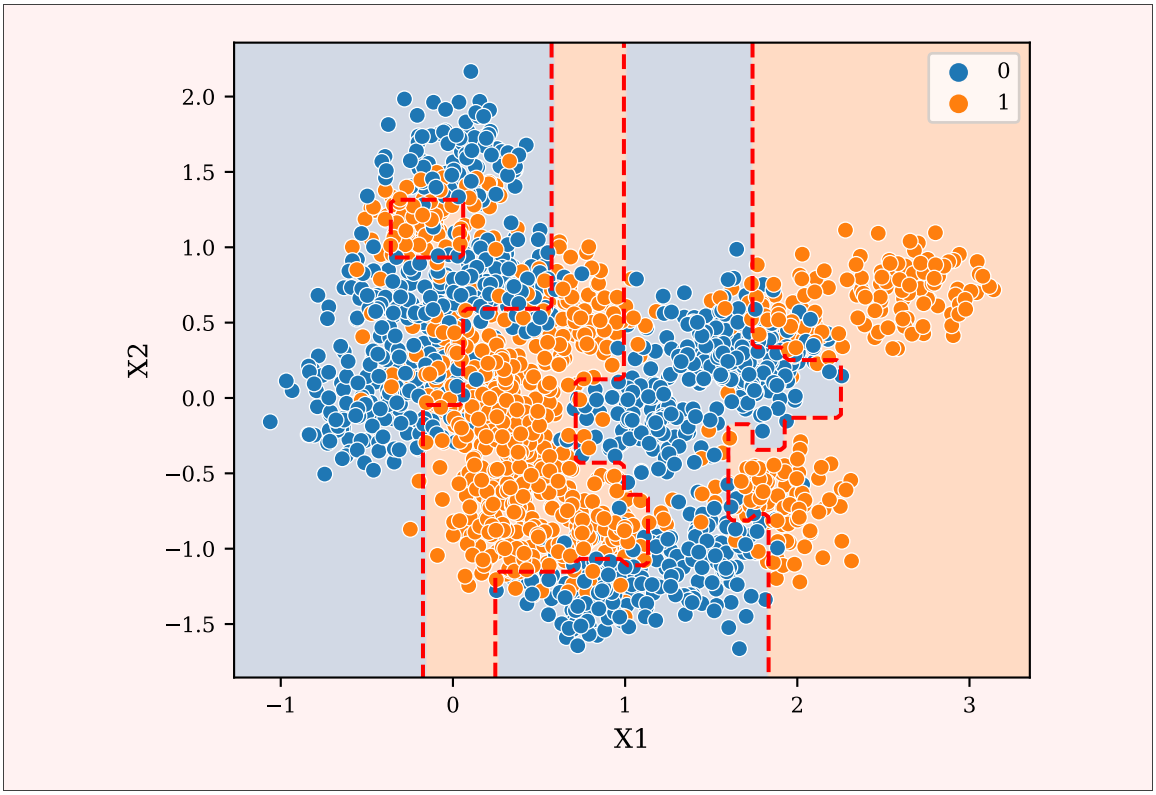
```
In [18]: n_folds = 10

         df = pd.DataFrame(
             decision_tree_cross_validation_accuracies(X, y, n_folds,
              ↪ lambdas_moy),
             columns=["k", "lambda", "accuracy"],
         )
         sns.lineplot(x="lambda", y="accuracy", data=df, ci="sd")
         plt.xscale('log')
         plt.show()
```



13 En déduire le sous-arbre optimal obtenu par cette procédure et afficher sa frontière de décision.

Le sous-arbre optimal est obtenu pour la valeur de λ qui maximise la précision.

```
In [19]: valid = df.groupby("k").mean()
         lmb = lambdas_moy[valid.accuracy.idxmax()]

         clf = DecisionTreeClassifier(ccp_alpha=lmb)
         clf.fit(X, y)
         sns.scatterplot(x="X1", y="X2", hue="y", data=Xy)
         add_decision_boundary(clf)
         plt.show()
```



2.4 Comparaison de la diversité des arbres

Dans cette section, on se propose d'illustrer le bénéfice du paramètre `max_features` en terme de diversité des arbres appris.

Pour évaluer la diversité des arbres, on choisit de comparer les ensembles de caractéristiques sélectionnées pour effectuer des séparations jusqu'à une certaine profondeur.

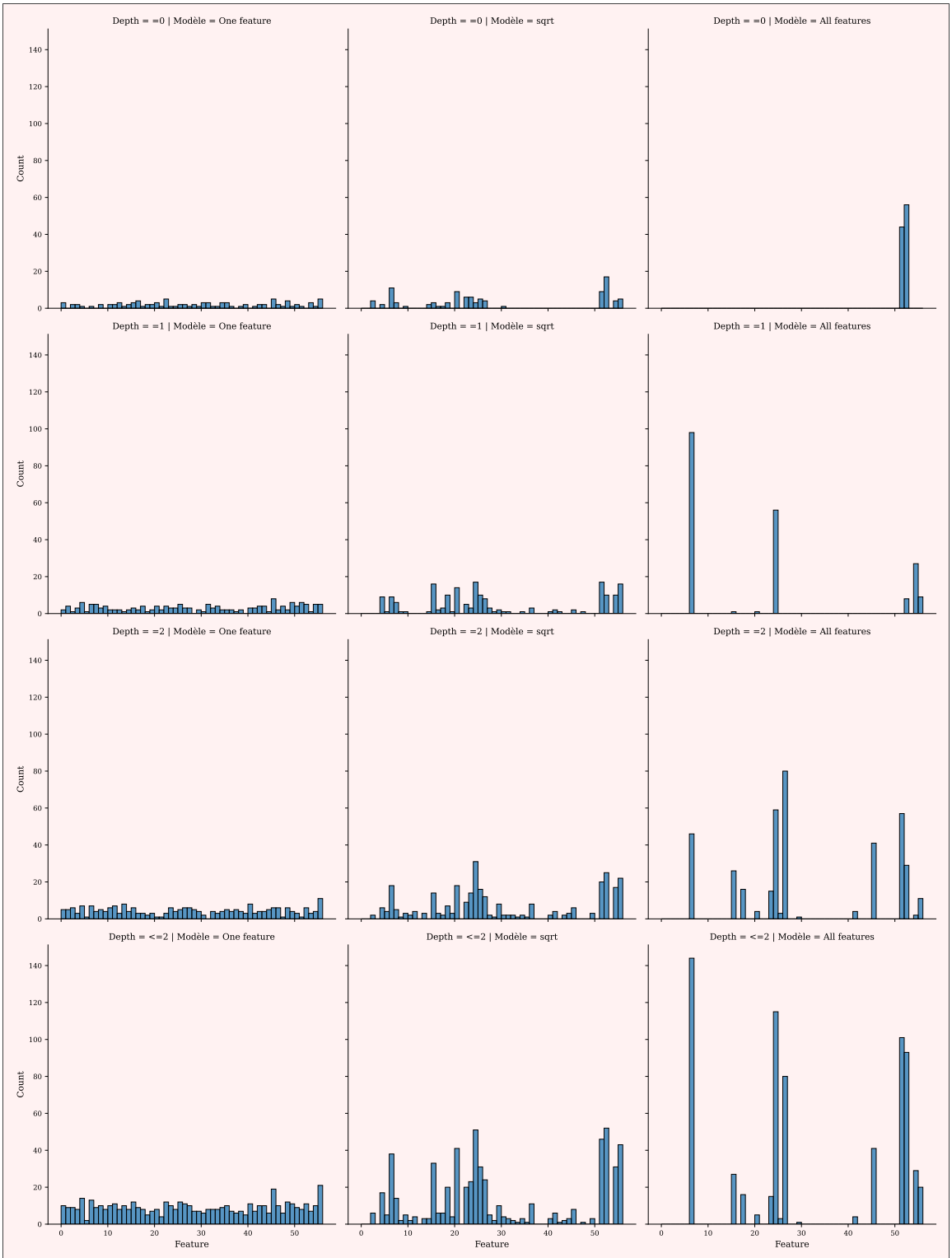
On pourra utiliser la fonction suivante qui génère les indices des caractéristiques utilisées dans les séparations jusqu'à une certaine profondeur.

```
def features_depth(model, depth, acc=False):
    """Génère les indices des caractéristiques utilisées dans un arbre.

    L'argument `model` est l'arbre. Les indices sont générés
    uniquement à la profondeur `depth` sauf si `acc` est vrai. Dans ce
    cas, toutes les caractéristiques jusqu'à la profondeur `depth`
    sont générées.

    """

    tree = model.tree_
    def gen_id(i, depth):
        if tree.feature[i] >= 0:
            if acc or depth == 0:
                yield tree.feature[i]
        if depth != 0:
            yield from gen_id(tree.children_left[i], depth - 1)
            yield from gen_id(tree.children_right[i], depth - 1)

    yield from gen_id(0, depth)
```

14 Afficher la distribution des caractéristiques retenues à la profondeur 0, 1, 2 pour une forêt de 100 arbres en faisant varier `max_features`. Que peut-on constater ? Quelle est la distribution lorsque `max_features` vaut 1 ?

On utilisera le jeu de données `spams` disponible avec le TP09.

In [20]:
```
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
from sklearn import datasets

spam =
↪ pd.read_csv("../TP09_Analyse_discriminante_de_donnees_gaussiennes"
            "/data/spambase.csv", index_col=0)

X = spam.iloc[:, :-1]
y = spam.iloc[:, -1]

models = [
    ("One feature", RandomForestClassifier(**params, max_features=1)),
    ("sqrt", RandomForestClassifier(**params)),
    ("All features", RandomForestClassifier(**params,
    ↪ max_features=None)),
]

def gen_data(models, X, y):
    for name, model in models:
        model.fit(X, y)
        for ct in model.estimators_:
            # La première séparation uniquement
            for feat in features_depth(ct, 0, acc=False):
                yield (name, feat, "=0")
            # Les deux séparations suivantes
            for feat in features_depth(ct, 1, acc=False):
                yield (name, feat, "=1")
            # Les 4 séparations à la profondeur 2
            for feat in features_depth(ct, 2, acc=False):
                yield (name, feat, "=2")
            # Les 7 séparations accumulées
            for feat in features_depth(ct, 2, acc=True):
                yield (name, feat, "<=2")

df = pd.DataFrame(gen_data(models, X, y), columns=["Modèle", "Feature",
↪ "Depth"])

sns.displot(x="Feature", col="Modèle", row="Depth", binwidth=1,
↪ data=df)
```



Malgré les données construites par *bootstrap*, la caractéristique choisie pour la première séparation est toujours la même dans le cas `All features`. Pour le modèle `sqrt`, on observe plus de diversité même si un certain nombre de caractéristiques ne sont jamais choisie. Pour le modèle `One feature`, le sous-ensemble de caractéristiques potentielles est réduit à un singleton, la distribution des caractéristiques est donc uniforme.