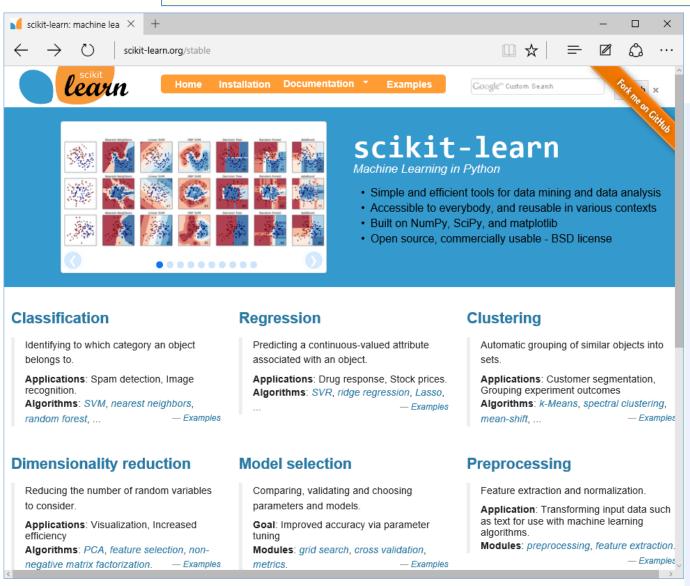
Machine Learning avec scikit-learn Programmation Python

Ricco Rakotomalala

http://eric.univ-lyon2.fr/~ricco/cours/cours_programmation_python.html

Scikit-learn?

Scikit-learn est une librairie pour Python spécialisée dans le machine learning (apprentissage automatique). Nous utilisons la version 0.19.0 dans ce tutoriel.



Machine Learning? Une discipline de l'informatique (intégrée dans l'intelligence artificielle) destinée à modéliser les relations entre les données. Dans un autre domaine, on parlerait de modélisation statistique, ou de méthodes de data mining, ou encore d'analyse de données.

On retrouve bien – quelle que soit l'appellation utilisée – les grands thèmes du traitement statistique des données [cf. <u>Introduction à la Data Science</u>]

Impossible de tout traiter dans un seul support. Nous choisissons l'axe de l'analyse prédictive en déroulant une étude de cas.

- 1. Schéma typique d'une démarche d'analyse prédictive
- 2. Stratégie et évaluation sur les petits échantillons
- 3. Scoring Ciblage
- 4. Recherche des paramètres optimaux des algorithmes

5. Sélection de variables

Données – PIMA INDIAN DIABETES



Download: Data Folder, Data Set Description

Abstract: From National Institute of Diabetes and Digestive and Kidney Diseases; In Peter Turney)

Data Set Characteristics:	Multivariate	Number of Instances:	768	Are
Attribute Characteristics:	Integer, Real	Number of Attributes:	8	Date
Associated Tasks:	Classification	Missing Values?	Yes	Nun

Source:

Original Owners:

National Institute of Diabetes and Digestive and Kidney Diseases

Donor of database:

Vincent Sigillito (vgs '@' aplcen.apl.jhu.edu) Research Center, RMI Group Leader Applied Physics Laboratory The Johns Hopkins University Johns Hopkins Road Laurel, MD 20707 (301) 953-6231

Objectif : Prédire / expliquer l'occurrence du diabète (variable à prédire) à partir des caractéristiques des personnes (âge, IMC, etc.) (variables explicatives).

Fichier texte « pima.txt » avec séparateur

« tabulation », première ligne = noms des variables.

	🗎 pima	a.txt 🖾											
	1 pregnant		diastolic		triceps		bodymass				^		
		pedigree		age plasma		serum d		diabete					
	2	6	72	35	33.6	0.62	27	50	148	0	positive		
	3	1	66	29	26.6	0.3	51	31	85	0	negative		
ln	4	8	64	0	23.3	0.6	72	32	183	0	positive		
4	5	1	66	23	28.1	0.1	57	21	89	94	negative		
e	6	0	40	35	43.1	2.28	88	33	137	168	positive		
ate	7	5	74	0	25.6	0.20	1	30	116	0	negative		
\dashv	8	3	50	32	31 0.24	48	26	78	88	posi	itive		
ın	9	10	0	0	35.3	0.13	34	29	115	0	negative		
	10	2	70	45	30.5	0.15	58	53	197	543	positive		
	11	8	96	0	0 0.23	32	54	125	0	posi	itive		
	12	4	92	0	37.6	0.19	91	30	110	0	negative		
	13	10	74	0	38 0.53	37	34	168	0	posi	itive		
	14	10	80	0	27.1	1.44	11	57	139	0	negative		
	15	1	60	23	30.1	0.39	98	59	189	846	positive		
	16	5	72	19	25.8	0.58	37	51	166	175	positive		
	17	7	0	0	30 0.48	84	32	100	0	posi	itive		
	18	0	84	47	45.8	0.5	51	31	118	230	positive		
	19	7	74	0	29.6	0.25	54	31	107	0	positive		
	20	1	30	38	43.3	0.18	33	33	103	83	negative		
	21	1	70	30	34.6	0.52	29	32	115	96	positive		
	22	3	88	41	39.3	0.70)4	27	126	235	negative		
	23	8	84	0	35.4	0.38	88	50	99	0	negative		~
	Ln : 1	Col:1	Sel:	0 0		Dos\\	Windo	WS	UT	F-8		INS	.::

Schéma typique (standard) de l'analyse prédictive

ANALYSE PRÉDICTIVE

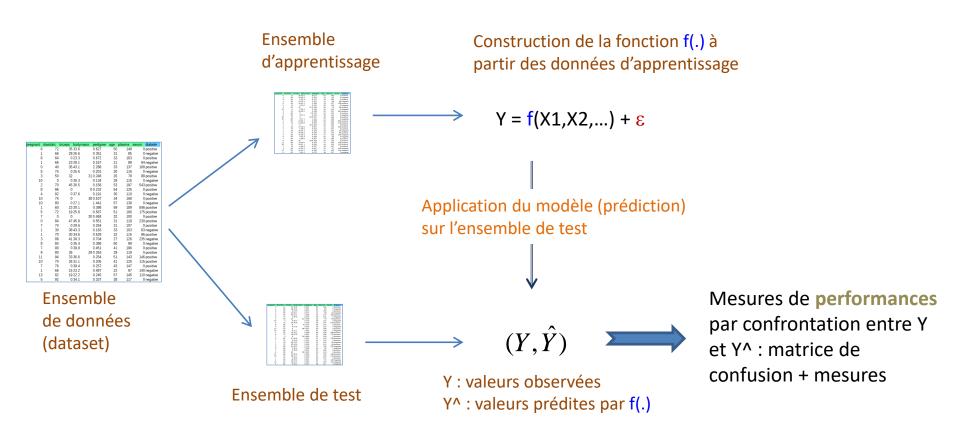
Analyse prédictive

Y : variable cible (diabète)

X1, X2, ...: variables explicatives

f(.) une fonction qui essaie d'établir la relation Y = f(X1, X2, ...)

f(.) doit être « aussi précise que possible »...



Pandas: Python Data Analysis Library. Très pratique pour la manipulation des données, avec un type data.frame inspiré de R.

```
#utilisation de la librairie Pandas
#spécialisée - entres autres - dans la manipulation des données
import pandas
                                                                 header = 0, la première ligne (n°0)
pima = pandas.read_table("pima.txt",sep="\t",header=0)
                                                                 correspond aux noms de variables.
#dimensions
print(pima.shape) # (768, 9) 768 lignes (obs.) et 9 colonnes (variables)
#liste des colonnes
print(pima.columns) # Index(['pregnant', 'diastolic', 'triceps', 'bodymass', 'pedigree', 'age', 'plasma', 'serum', 'diabete'], dtype='object')
                                                       int64
                                            pregnant
#liste des colonnes et leurs types
                                            diastolic
                                                      int64
                                           triceps
                                                      int64
print(pima.dtypes) <</pre>
                                            bodymass float64
                                            pedigree
                                                      float64
                                            age
                                                     int64
                                            plasma
                                                      int64
                                                      int64
                                            serum
                                           diabete
                                                      object
```

dtype: object (chaîne de caractères)

```
#transformation en matrice numpy - seul reconnu par scikit-learn
data = pima.as_matrix()
#X matrice des var. explicatives
X = data[:,0:8]
#y vecteur de la var. à prédire
y = data[:,8]
#utilisation du module model_selection de scikit-learn (sklearn)
from sklearn import model_selection
#subdivision des données – éch.test = 300 ; éch.app = 768 – éch.test = 468
X_app,X_test,y_app,y_test = model_selection.train_test_split(X,y,test_size = 300,random_state=0)
print(X_app.shape,X_test.shape,y_app.shape,y_test.shape)
        (468,8)
                     (300,8)
                                      (468,)
                                                  (300,)
```

#à partir du module linear_model du package sklearn #importer la classe LogisticRegression from sklearn.linear_model import LogisticRegression

#création d'une instance de la classe Ir = LogisticRegression()

#exécution de l'instance sur les données d'apprentissage #c.à-d. construction du modèle prédictif modele = Ir.fit(X_app,y_app)

#les sorties sont très pauvres à la différence des logiciels de stat #les coefficients...

print(modele.coef_,modele.intercept_)

Nous utilisons la <u>régression</u>
<u>logistique</u>, très populaire en
France. D'autres <u>approches</u>
<u>supervisées</u> sont disponibles
dans scikit-learn.

On ne dispose pas des indicateurs usuels de la régression logistique (tests de significativité, écarts-type des coefficients, etc.)

[[8.75111754e-02 -1.59515113e-02 1.70447729e-03 5.18540256e-02 5.34746050e-01 1.24326526e-02 2.40105095e-02 -2.91593120e-04]] [-5.13484535]

Commentaires sur les résultats de la régression logistique

<u>Attention</u>: La régression logistique de <u>scikit-learn</u> s'appuie sur un algorithme différent de celui des logiciels de statistique.

Coefficients du logiciel SAS

Variable	Coefficient
Intercept	8.4047
pregnant	-0.1232
diastolic	0.0133
triceps	-0.0006
bodymass	-0.0897
pedigree	-0.9452
age	-0.0149
plasma	-0.0352
serum	0.0012

Coefficients du modèle élaboré sur la totalité des données (scikit-learn)

Variable	Coefficient				
Intercept	5.8844				
pregnant	-0.1171				
diastolic	0.0169				
triceps	-0.0008				
bodymass	-0.0597				
pedigree	-0.6776				
age	-0.0072				
plasma	-0.0284				
serum	0.0006				



Les coefficients sont du même ordre mais différents. Ca ne veut pas dire que le modèle est moins performant en prédiction.

sklearn.linear_model.LogisticRegression

class sklearn.linear_model.LogisticRegression(penalty="12", dual=False,
tol=0.0001, C=1.0, fit_intercept=True, intercept_scaling=1, class_weight=None,
random_state=None, solver='liblinear', max_iter=100, multi_class='ovr', verbose=0)
[source_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false_false

Logistic Regression (aka logit, MaxEnt) classifier.

In the multiclass case, the training algorithm uses the one-vs-rest (OvR) scheme if the 'multi_class' option is set to 'ovr' and uses the cross-entropy loss, if the 'multi_class' option is set to 'multinomial'. (Currently the 'multinomial' option is supported only by the 'lbfgs' and 'newton-cg' solvers.)

This class implements regularized logistic regression using the liblinear library, newton-cg and lbfgs solvers. It can handle both dense and sparse input. Use C-ordered arrays or CSR matrices containing 64-bit floats for optimal performance; any other input format will be converted (and copied).

The newton-cg and lbfgs solvers support only L2 regularization with primal formulation. The liblinear solver supports both L1 and L2 regularization, with a dual formulation only for the L2 penalty.

Prédiction et évaluation sur l'échantillon test

```
#prediction sur l'échantillon test
y_pred = modele.predict(X_test)
#importation de metrics - utilisé pour les mesures de performances
from sklearn import metrics
#matrice de confusion
                                                            Matrice de confusion
#confrontation entre Y obs. sur l'éch. test et la prédiction
                                                            Ligne: observé
cm = metrics.confusion_matrix(y_test,y_pred)
                                                            Colonne: prédiction
print(cm)
#taux de succès
acc = metrics.accuracy_score(y_test,y_pred)
print(acc) # 0.793 = (184 + 54)/(184 + 17 + 45 + 54)
#taux d'erreur
err = 1.0 - acc
print(err) \# 0.206 = 1.0 - 0.793
#sensibilité (ou rappel)
se = metrics.recall_score(y_test,y_pred,pos_label='positive')
print(se) \# 0.545 = 54 / (45 + 54)
```

[[184 17] [45 54]]

Construction de sa propre mesure de performance (ex. Spécificité)

```
#écrire sa propre func. d'éval - ex. specificité
def specificity(y,y_hat):
  #matrice de confusion – un objet numpy.ndarray
  mc = metrics.confusion_matrix(y,y_hat)
  #"negative" est sur l'indice 0 dans la matrice
  import numpy
  res = mc[0,0]/numpy.sum(mc[0,:])
  #retour
  return res
#
#la rendre utilisable - transformation en objet scorer
specificite = metrics.make_scorer(specificity,greater_is_better=True)
#utilisation de l'objet scorer
#remarque : modele est le modèle élaboré sur l'éch. d'apprentissage
sp = specificite(modele,X_test,y_test)
print(sp) # 0.915 = 184 / (184 + 17)
```

Remarque: utiliser les packages comme simples boîtes à outils est une chose, savoir programmer en Python en est une autre. C'est indispensable si l'on veut aller plus loin et exploiter au mieux le dispositif.

Stratégie et évaluation sur les petits échantillons

VALIDATION CROISÉE

```
Pourquoi la validation croisée
                                                              Problème : lorsque l'on traite un petit fichier (en
 #importer la classe LogisticRegression
                                                              nombre d'obs.), le schéma apprentissage – test
 from sklearn.linear_model import LogisticRegression
                                                              est pénalisant (apprentissage : on réduit
                                                              l'information disponible pour créer le modèle ;
 #création d'une instance de la classe
                                                              test : un faible effectif produit des estimations
 Ir = LogisticRegression()
                                                              des performances très instables).
                                                              Solution: (1) construire le modèle sur la totalité
 #exécution de l'instance sur la totalité des données (X,y)
                                                              des données, (2) évaluer les performances à
 modele\_all = Ir.fit(X,y)
                                                              l'aide des techniques de ré-échantillonnage (ex.
 #affichage
                                                              validation croisée)
 print(modele_all.coef_,modele_all.intercept_)
 # [[ 1.17056955e-01 -1.69020125e-02 7.53362852e-04 5.96780492e-02 6.77559538e-01 7.21222074e-03 2.83668010e-02 -6.41169185e-04]] [-5.8844014]
 #!!! Les coefficients sont différents de ceux estimés sur l'éch. d'apprentissage (on a plus d'obs. ici) !!!
 #utilisation du module model selection
 from sklearn import model_selection
                                                                                            0.74025974
                                                                                            0.75324675
                                                                                            0.79220779
 #évaluation en validation croisée : 10 cross-validation
                                                                                            0.72727273
 succes = model_selection.cross_val_score(lr,X,y,cv=10,scoring='accuracy')
                                                                                            0.74025974
                                                                                            0.74025974
 #détail des itérations
                                                                                            0.81818182
 print(succes)
                                                                                            0.79220779
                                                                                            0.73684211
 #moyenne des taux de succès = estimation du taux de succès en CV
                                                                                            0.82894737
 print(succes.mean()) # 0.767
```

Dans un schéma apprentissage - test

SCORING

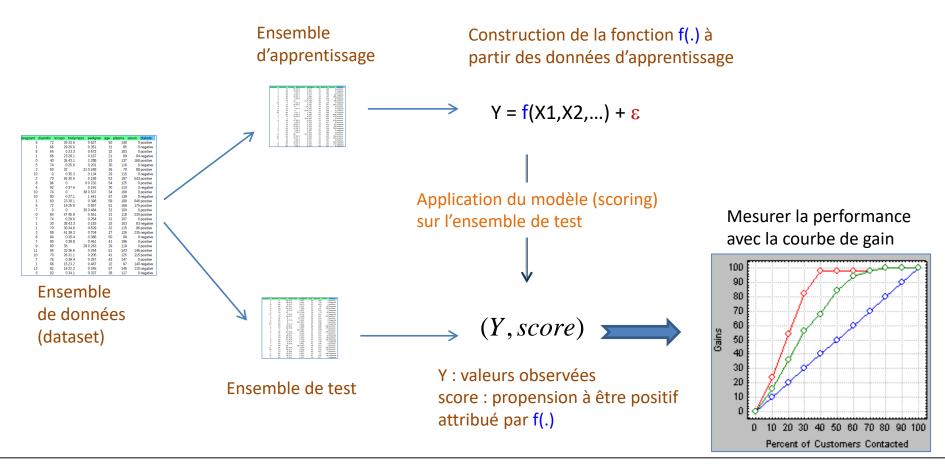
Scoring - Ciblage

Ex. de ciblage : faire la promotion d'un produit auprès d'un ensemble de clients

Objectif: contacter le moins de personnes possible, obtenir le max. d'achats

<u>Démarche</u>: attribuer un score aux individus, les trier de manière décroissante (score élevé = forte appétence au produit), estimer à l'aide de la courbe de gain le nombre d'achats en fonction d'une taille de cible choisie.

Remarque : L'idée peut être transposée à d'autres domaines (ex. dépistage de maladie)



```
#classe Régression Logistique
                                                                   Probas. d'affectation aux classes
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
                                                                           Negative, Positive
#création d'une instance de la classe
                                                                        [ 0.13761678.
                                                                                     0.86238322].
Ir = LogisticRegression()
                                                                        [ 0.78665037, 0.21334963],
                                                                         0.84104937, 0.15895063],
                                                                         0.39960826, 0.60039174],
#modélisation sur les données d'apprentissage
                                                                         0.81646421, 0.18353579],
                                                                        [ 0.91705129, 0.08294871],
modele = Ir.fit(X_app,y_app)
                                                                         0.32575719,
                                                                                     0.67424281],
                                                                         0.27436772.
                                                                                     0.72563228],
#calcul des probas d'affectation sur ech. test
                                                                         0.56763049,
                                                                                     0.43236951],
probas = Ir.predict_proba(X_test)
#score de 'presence'
                                                                             Classe d'appartenance
score = probas[:,1] # [0.86238322 0.21334963 0.15895063 ...]
                                                                               Negative, Positive
#transf. en 0/1 de Y test
                                                                                     [ 0., 1.],
pos = pandas.get_dummies(y_test).as_matrix() <
#on ne récupère que la 2è colonne (indice 1)
pos = pos[:,1] # [ 1 0 0 1 0 0 1 1 ...]
                                                                                           1.1.
#nombre total de positif
import numpy
npos = numpy.sum(pos) # 99 – il y a 99 ind. "positifs" dans l'échantillon test
```

L'individu n°55 a le score le plus faible, suivi du n°45, ..., l'individu n°159 a le score le plus élevé. #index pour tri selon le score croissant index = numpy.argsort(score) # [55 45 265 261 ... 11 255 159] #inverser pour score décroissant – on s'intéresse à forte proba. en priorité index = index[::-1] # [159 255 11 ... 261 265 45 55] #tri des individus (des valeurs 0/1) Le score est pas trop mal, il place bien les 'positifs' sort_pos = pos[index] # [1 1 1 1 1 0 1 1 ...] en tête des données après le tri décroissant. #somme cumulée cpos = numpy.cumsum(sort_pos) # [1 2 3 4 5 5 6 7 ... 99] #rappel rappel = cpos/npos # [1/99 2/99 3/99 4/99 5/99 5/99 6/99 7/99 ... 99/99] #nb. obs ech.test n = y_test.shape[0] # 300, il y a 300 ind. dans l'éch. test #taille de cible – séquence de valeurs de 1 à 300 avec un pas de 1 taille = numpy.arange(start=1,stop=301,step=1) # [1 2 3 4 5 ... 300] #passer en proportion taille = taille / n # [1/300 2/300 3/300 ... 300/300]

Construction de la courbe de gain (3/3)

```
#graphique avec matplotlib import matplotlib.pyplot as plt
```

```
#titre et en-têtes
plt.title('Courbe de gain')
plt.xlabel('Taille de cible')
plt.ylabel('Rappel')
```

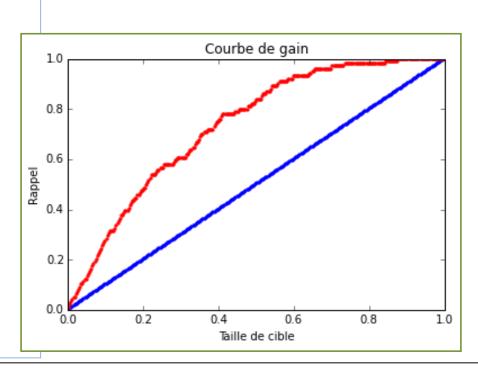
#limites en abscisse et ordonnée plt.xlim(0,1) plt.ylim(0,1)

#astuce pour tracer la diagonale
plt.scatter(taille,taille,marker='.',color='blue')

#insertion du couple (taille, rappel)
plt.scatter(taille,rappel,marker='.',color='red')

#affichage
plt.show()

Objectif: Réaliser le graphique à partir des vecteurs 'taille' et 'rappel' – On parle de « courbe de gain » ou « courbe lift cumulée ».



Recherche des paramètres optimaux des algorithmes

GRID SEARCH

```
#svm
from sklearn import svm
#par défaut un noyau RBF et C = 1.0
mvs = svm.SVC()
#modélisation
modele2 = mvs.fit(X_app,y_app)
#prédiction ech. test
y_pred2 = modele2.predict(X_test)
#matrice de confusion
print(metrics.confusion_matrix(y_test,y_pred2))
#succès en test
```

<u>Problème</u>: De nombreux algorithmes de machine learning reposent sur des paramètres qui ne sont pas toujours évidents à déterminer pour obtenir les meilleurs performances sur un jeu de données à traiter. Ex. **SVM**.

```
class sklearn.svm.SVC(C=1.0, kernel='rbf', degree=3, gamma=0.0, coef0=0.0, shrinking=True, probability=False, tol=0.001, cache_size=200, class_weight=None, verbose=False, max_iter=-1, random_state=None)
```

La méthode ne fait pas mieux que le classifieur par défaut (prédire systématiquement 'negative', classe majoritaire). Matrice de confusion :

[[201 0] [99 0]]

print(metrics.accuracy_score(y_test,y_pred2)) # 0.67

C'est la méthode (SVM) qui est inapte ou c'est le paramétrage qui est inadapté ?

Détermination des meilleurs valeurs des paramètres

```
#import de la classe
                                                                    Stratégie : Grille de recherche. On
from sklearn import model_selection
                                                                     indique les paramètres à faire varier,
#combinaisons de paramètres à évaluer
                                                                     scikit-learn les croise et mesure les
parametres = [{'C':[0.1,1,10],'kernel':['rbf','linear']}]
                                                                     performances en validation croisée.
#évaluation en validation croisée de 3 x 2 = 6 configurations
#accuracy sera le critère à utiliser pour sélectionner la meilleure config
#mvs est l'instance de la classe svm.SVC (cf. page précédente)
grid = model_selection. GridSearchCV(estimator=mvs,param_grid=parametres,scoring='accuracy')
                                                                                                      mean_test_score
#lancer la recherche – attention, gourmand en calculs
                                                                           {'C': 0.1, 'kernel': 'rbf'}
                                                                                                            0.638889
                                                                       {'C': 0.1, 'kernel': 'linear'}
                                                                                                            0.752137
grille = grid.fit(X_app,y_app)
                                                                             {'C': 1, 'kernel': 'rbf'}
                                                                                                            0.638889
                                                                         {'C': 1, 'kernel': 'linear'}
                                                                                                            0.747863
                                                                            {'C': 10, 'kernel': 'rbf'}
                                                                                                            0.638889
                                                                        {'C': 10, 'kernel': 'linear'}
#résultat pour chaque combinaison
                                                                                                            0.756410
print(pandas.DataFrame.from_dict(grille.cv_results_).loc[:,["params","mean_test_score"]]) ____
#meilleur paramétrage
print(grille.best_params_) # {'C' : 10, 'kernel' : 'linear'}
#meilleur performance – estimée en interne par validation croisée
print(grille best score) # 0.7564
#prédiction avec le modèle « optimal » c.-à-d. {'C' : 10, 'kernel' : 'linear'}
y_pred3 = grille.predict(X_test)
#taux de succès en test
print(metrics.accuracy_score(y_test,y_pred3)) # 0.7833, on se rapproche de la rég. logistique
```

R.R. – Université Lyon 2

22

Réduire le modèle aux variables explicatives les plus pertinentes

SÉLECTION DE VARIABLES

Sélection de variables (1/2)

<u>Liste initiale des variables :</u> pregnant, diastolic, triceps, bodymass, pedigree, age, plasma, serum.

Objectif: la sélection de variables - la recherche de

avantages : interprétation, déploiement (moins de

var. à renseigner), performances en généralisation

Méthode: Nous implémentons la méthode RFE de

scikit-learn : elle élimine au fur et à mesure les

(étrange : les variables ne sont pas toujours à la

variables me paraît nécessaire), et s'arrête quand

on arrive à la moitié ou à un nombre spécifié de

coefficients les plus faibles en valeur absolue

même échelle ??? une standardisation des

modèles parcimonieux - présente plusieurs

(ou du moins maintien des performances).

```
#importer la classe LogisticRegression from sklearn.linear_model import LogisticRegression
```

#création d'une instance de la classe

Ir = LogisticRegression()

#algorithme de sélection de var.

from sklearn.feature_selection import RFE
selecteur = RFE(estimator=Ir)

#lancer la recherche

sol = selecteur.fit(X_app,y_app)

#nombre de var. sélectionnées

print(sol.n_features_) # $4 \rightarrow 4 = 8 / 2$ variables sélectionnées

#liste des variables sélectionnées

print(sol.support_) # [True False False True True False True False]

<u>Variables sélectionnées :</u> pregnant, bodymass, pedigree, plasma.

#ordre de suppression

print(sol.ranking_) # [1 2 4 1 1 3 1 5]

Serum a été retirée en premier, puis **triceps**, puis **âge**, puis **diastolic**. Les variables restantes sont indexées **1**.

variables.

```
#réduction de la base d'app. aux var. sélectionnées
#en utilisant le filtre booléen sol.support
X_new_app = X_app[:,sol.support_]
print(X_new_app.shape) # (468, 4) \rightarrow 4 variables restantes
#construction du modèle sur les explicatives sélectionnées
modele_sel = lr.fit(X_new_app,y_app)
#réduction de la base test aux mêmes variables
X_new_test = X_test[:,sol.support_]
print(X_new_test.shape) # (300, 4)
#prédiction du modèle réduit sur l'éch. test
y_pred_sel = modele_sel.predict(X_new_test)
#évaluation
```

print(metrics.accuracy_score(y_test,y_pred_sel)) # 0.787

Aussi bien (presque, 0.793) que le modèle initial, mais avec moitié moins de variables.

De la documentation à profusion (n'achetez pas des livres sur Python)

Site du cours

http://eric.univ-lyon2.fr/~ricco/cours/cours programmation python.html

Site de Python

Welcome to Python - https://www.python.org/

Python 3.4.3 documentation - https://docs.python.org/3/index.html

Portail Python

Page Python de <u>Developpez.com</u>

Quelques cours en ligne

P. Fuchs, P. Poulain, « Cours de Python » sur Developpez.com

G. Swinnen, « Apprendre à programmer avec Python » sur Developpez.com

« Python », Cours interactif sur Codecademy

POLLS (KDnuggets)

Data Mining / Analytics Tools Used

Python, 4^{ème} en 2015

What languages you used for data mining / data science?

Python, 3ème en 2014 (derrière R et SAS)