SY09 Printemps 2017
TP 3
Discrimination, théorie bayésienne de la décision

1 Classifieur euclidien, K plus proches voisins

On souhaite étudier les performances du classifieur euclidien et des K plus proches voisins sur différents jeux de données *binaires* (constitués d'individus de $\mathbb{R}^p$ répartis dans $g = 2$ classes).

Vous commencerez par programmer les fonctions puis vous les testerez selon un protocole décrit au paragraphe 1.2, tout d'abord sur des données synthétiques (générées selon une distribution prédéfinie), puis sur des données réelles.

1.1 Programmation

1.1.1 Classifieur euclidien

Compléter les fonctions ceuc.app et ceuc.val.

```
ceuc.app <- function(Xapp, zapp)
{
...
}

ceuc.val <- function(mu, Xtst)
{
...
}
```

La première fait l'apprentissage des paramètres du classifieur euclidien ; elle a pour arguments d'entrée :
- le tableau individus-variables Xapp (de dimensions napp $\times p$) des individus d'apprentissage,
- le vecteur zapp (de longueur napp) des étiquettes associées à chacun de ces individus.

Les arguments de sortie sont les paramètres estimés du classifieur euclidien, sous la forme d'une matrice mu de dimensions $g \times p$.

La seconde fait le classement d'un tableau individus-variables Xtst (de dimensions ntst $\times p$) : elle doit donc prendre en argument d'entrée
- la matrice mu des paramètres estimés,
- l'ensemble à évaluer Xtst,

et retourner un vecteur (de longueur ntst) d'étiquettes prédites.

On pourra s'aider de la fonction distXY fournie qui calcule les distances (euclidiennes au carré) entre les individus de deux ensembles X et Y, et de la fonction which.min qui détermine l'indice de l'élément minimal d'un vecteur.

1.1.2 K plus proches voisins

Compléter les fonctions kppv.val et kppv.tune.

```
kppv.val <- function(Xapp, zapp, K, Xtst)
{
...
}

kppv.tune <- function(Xapp, zapp, Xval, zval, nppv)
{
...
}
```

La première fait le classement d'un tableau individus-variables Xtst : elle prend donc en argument

- les données étiquetées (Xapp et zapp),
- le nombre de voisins K utilisé pour le classement,
- l'ensemble à évaluer Xtst ;

elle retourne donc un vecteur (de longueur ntst) d'étiquettes prédites.

La seconde détermine le nombre « optimal » de voisins K_{opt} (choisi parmi un vecteur nppv de valeurs possibles), c'est-à-dire donnant les meilleurs performances sur un ensemble de validation étiqueté (matrice Xval de dimensions nval $\times$ p et vecteur zval de longueur nval) : elle prend donc en entrée

- le tableau individus-variables Xapp et le vecteur zapp des étiquettes associées, à partir desquels le classement est réalisé ;
- le tableau individus-variables Xval et le vecteur zval à utiliser pour la validation ;
- un ensemble de valeurs nppv correspondant aux différents nombres de voisins à tester.

Elle retourne la valeur Kopt choisie dans l'ensemble nppv et donnant les meilleurs résultats sur Xval.

Il sera évidemment judicieux de faire appel à la fonction kppv.val dans la fonction kppv.tune. On pourra également utiliser les fonctions distXY et which.max dans la fonction kppv.val.

1.1.3 Test des fonctions

Vous pouvez utiliser le jeu de données Synth1-40 pour vérifier que vos fonctions sont justes. Pour visualiser les frontières de décision obtenues à l'aide des fonctions ceuc.val et kppv.val, on utilisera les fonctions front.ceuc et front.kppv fournies (voir paragraphe 1.3.1). La Figure 1 montre les frontières de décision obtenues lorsque la totalité des données sont utilisées pour l'apprentissage du modèle.

```
donn <- read.csv("Synth1-40.csv")
X <- donn[,1:2]
z <- donn[,3]
```

1.2 Évaluation des performances

Pour un jeu de données, lorsqu'on souhaite estimer le taux d'erreur ε d'un classifieur, la technique suivante est généralement utilisée. Elle consiste à répéter N fois la procédure dans laquelle :

1. on sépare aléatoirement l'ensemble des données disponibles, de manière à former un ensemble d'apprentissage et un ensemble de test (et, de manière optionnelle, un ensemble de validation, s'il est nécessaire d'estimer un ou plusieurs hyper-paramètres) ;
2. on apprend les paramètres du modèle sur l'ensemble d'apprentissage ainsi formé (après avoir éventuellement optimisé les hyper-paramètres sur l'ensemble de validation, s'il y a lieu), et on calcule le taux d'erreur obtenu sur l'ensemble de test.

En déterminant de la sorte N séparations aléatoires de l'ensemble de données en un ensemble d'apprentissage et un ensemble de test, on peut ainsi recueillir un échantillon de N estimations $E_1, \ldots, E_N$ du taux d'erreur (généralement effectuées sur l'ensemble de test). On peut alors déterminer une estimation ponctuelle $\widehat{\varepsilon}$ de ε (moyenne) et un intervalle de confiance sur ε.

Attention : en réalité, si l'estimation de l'espérance du taux d'erreur par cette procédure est correcte, l'estimation de la variance est erronée. En effet, les différents ensembles obtenus par redécoupage ne *sont pas distincts (un même individu peut en effet être présent dans plusieurs ensembles d'apprentissage, ou de test). De ce fait, les taux d'erreur moyens E_t calculés (avec $t = 1, \ldots, N$) ne sont pas indépendants. Or l'estimation de la variance réalisée par cette procédure suppose l'indépendance : en conséquence, les estimations de la variance, et donc la largeur des intervalles de confiance sur la base desquels on compare les performances des classifieurs, sont erronées.*

1.2.1 Jeux de données Synth1-40, Synth1-100, Synth1-500 et Synth1-1000

On dispose de cinq jeux de données (téléchargeables sur le site de l'UV) : Synth1-40, Synth1-100, Synth1-500, Synth1-1000, et Synth2-1000. Pour chacun de ces jeux de données, chaque classe a été générée suivant une loi normale bivariée. Les distributions sont les mêmes pour les jeux de données Synth1-40, Synth1-100, Synth1-500 et Synth1-1000, qui ne diffèrent que par le nombre d'exemples disponibles. En revanche, la distribution des données dans Synth2 est différente.

1. Pour chacun des jeux de données, estimer les paramètres μ_k et Σ_k des distributions conditionnelles, ainsi que les proportions π_k des classes.
2. Écrire un script qui effectue $N = 20$ séparations aléatoires de chaque jeu de données en ensembles d'apprentissage et de test, et qui calcule (et stocke) pour chacune le taux d'erreur d'apprentissage et le taux d'erreur de test. On pourra utiliser la fonction separ1 pour séparer les données (voir paragraphe 1.3.2).

   En considérant ensuite l'ensemble des résultats obtenus lors des $N = 20$ expériences, donner l'estimation ponctuelle du taux d'erreur ε ainsi qu'un intervalle de confiance, d'abord à partir des estimations faites sur l'ensemble d'apprentissage, puis celles faites sur l'ensemble de test. Qu'observez-vous ?
3. Effectuer une séparation aléatoire de l'ensemble de données en un ensemble d'apprentissage et un ensemble de test. Déterminer le nombre optimal de voisins à l'aide de la fonction kppv.tune, en utilisant l'ensemble d'apprentissage comme ensemble de validation. Quel est le nombre optimal de voisins déterminé ? Pourquoi ?
4. Comme pour le classifieur euclidien, écrire un script qui effectue $N = 20$ séparations aléatoires de chaque jeu de données en ensembles d'apprentissage, de validation, et de test ; et qui pour chacune détermine le nombre optimal de voisins à partir d'un ensemble de validation spécifique, puis calcule (et stocke) le taux d'erreur sur l'ensemble d'apprentissage et sur l'ensemble de test. On pourra utiliser la fonction separ2 pour séparer les données (voir paragraphe 1.3.2).

   Comme précédemment, déterminer les estimations ponctuelles du taux d'erreur et les intervalles de confiance obtenus à partir des erreurs d'apprentissage, puis des erreurs de test. Comparer avec les résultats obtenus pour le classifieur euclidien, et commenter.

1.2.2 Jeu de données Synth2-1000

On considère maintenant le jeu de données Synth2-1000.

1. Estimer les paramètres μ_k et Σ_k ainsi que les proportions π_k des classes.
2. Comme précédemment, calculer les estimations (ponctuelles et intervalles de confiance) de ε sur l'ensemble d'apprentissage et sur l'ensemble de test. Commenter et interpréter.

1.2.3 Jeux de données réelles

On considère maintenant les jeux de données Pima et Breastcancer. Calculer les estimations (ponctuelles et intervalles de confiance) de ε sur l'ensemble d'apprentissage et sur l'ensemble de test. Commenter et interpréter.

1.3 Note sur les fonctions mises à disposition

1.3.1 Frontières de décision

Les fonctions front.ceuc et front.kppv échantillonnent l'espace des caractéristiques en déterminant une grille de points : on détermine les décisions prises pour les points de cette grille, puis on trace les frontières de décision en utilisant la fonction contour. On peut les appeler comme suit.

```
mu <- ceuc.app(Xapp, zapp)
front.ceuc(mu, Xapp, zapp, 1000)
```

```
Kopt <- kppv.tune(Xapp, zapp, Xval, zval,
        2*(1:6)-1)
front.kppv(Xapp, zapp, Kopt, 1000)
```

1.3.2 Séparation des données

La fonction separ1 détermine un ensemble d'apprentissage (de taille napp $= 2n/3$) et un ensemble de test (de taille ntst $= n/3$). La fonction separ2 détermine des ensembles d'apprentissage (de taille napp $= n/2$), de validation (de taille nval $= n/4$) et de test (de taille ntst $= n/4$).

```
donn.sep <- separ1(X, z)
Xapp <- donn.sep$Xapp
zapp <- donn.sep$zapp
Xtst <- donn.sep$Xtst
ztst <- donn.sep$ztst
```

```
donn.sep <- separ2(X, z)
Xapp <- donn.sep$Xapp
zapp <- donn.sep$zapp
Xval <- donn.sep$Xval
zval <- donn.sep$zval
Xtst <- donn.sep$Xtst
ztst <- donn.sep$ztst
```

2 Règle de Bayes

En réalité, les jeux de données étudiés précédemment ont été obtenus de la manière suivante :

1. tout d'abord, l'effectif n_1 de la classe ω_1 a été déterminé par tirage aléatoire suivant une loi binomiale de paramètres n et $\pi_1 = 0.5$;
2. n_1 individus ont ensuite été générés dans la classe ω_1 suivant une loi normale bivariée de paramètres μ_1 et Σ_1, et $n_2 = n - n_1$ individus ont été générés dans la classe ω_2 suivant une loi normale bivariée de paramètres μ_2 et Σ_2.

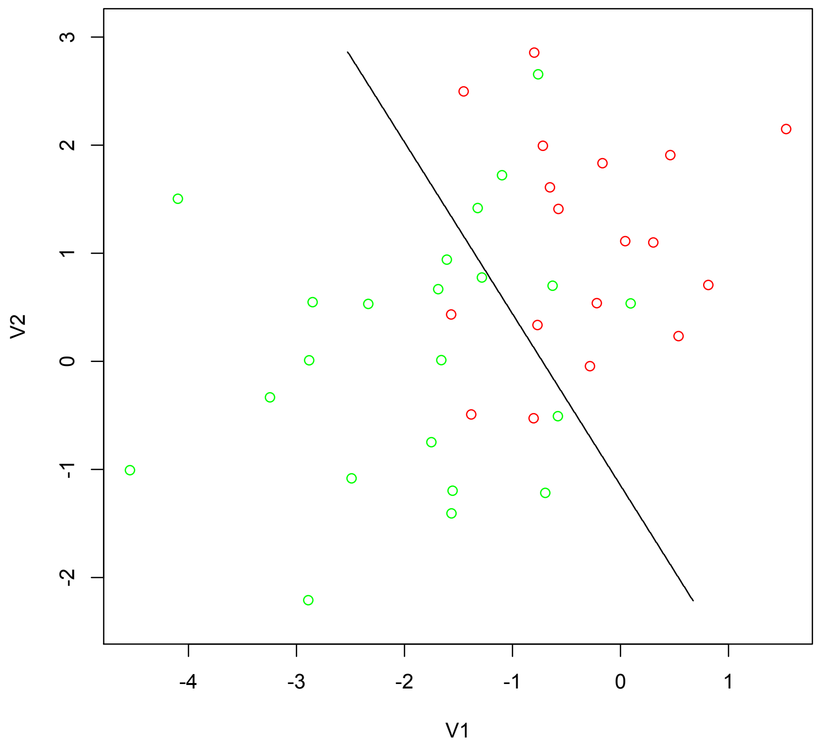
   Pour les jeux de données Synth1-40, Synth1-100, Synth1-500 et Synth1-1000, on a utilisé comme paramètres $n = 40$, $n = 100$, $n = 500$, et $n = 1000$, respectivement ; et
   $$\mu_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mu_2 = \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Sigma_1 = \Sigma_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix};$$
   Pour le jeu de données Synth2-1000, on a utilisé $n = 1000$, et
   $$\mu_1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mu_2 = \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Sigma_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Sigma_2 = \begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

On notera $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2)^T$, $\mu_k = (\mu_{k1}, \mu_{k2})^T$ et $\Sigma_k = \mathrm{diag}(\sigma_{k1}^2, \sigma_{k2}^2)$ pour $k = 1, 2$.

Pour chacun des jeux de données :

1. quelles sont les distributions marginales des variables X^1 et X^2 dans chaque classe ?
2. Calculer l'expression des courbes d'iso-densité dans chacune des classes, en fonction de μ_1, μ_2, σ_1 et σ_2. À quoi correspondent ces courbes ?
3. Montrer que pour les jeux de données Synth1-n, la règle de Bayes est une fonction linéaire de x_1 et x_2 et d'une constante k, que l'on précisera. Représenter la frontière correspondante dans le plan formé par ces variables (on représentera également les données Synth1-1000).
4. Calculer l'expression de la règle de Bayes pour le jeu de données Synth2-1000 en fonction de x_1 et x_2, et montrer qu'elle s'écrit en fonction de deux constantes k_1 et k_2 que l'on précisera. Représenter la frontière correspondante dans le plan formé par les variables x_1 et x_2 (on représentera également les données Synth2-1000).

5. Pour les jeux de données Synth1-n et Synth2-1000, calculer l'expression formelle de l'erreur de Bayes en fonction de k, ou k_1 et k_2 ; calculer sa valeur effective, comparer aux résultats de l'exercice précédent et expliquer.



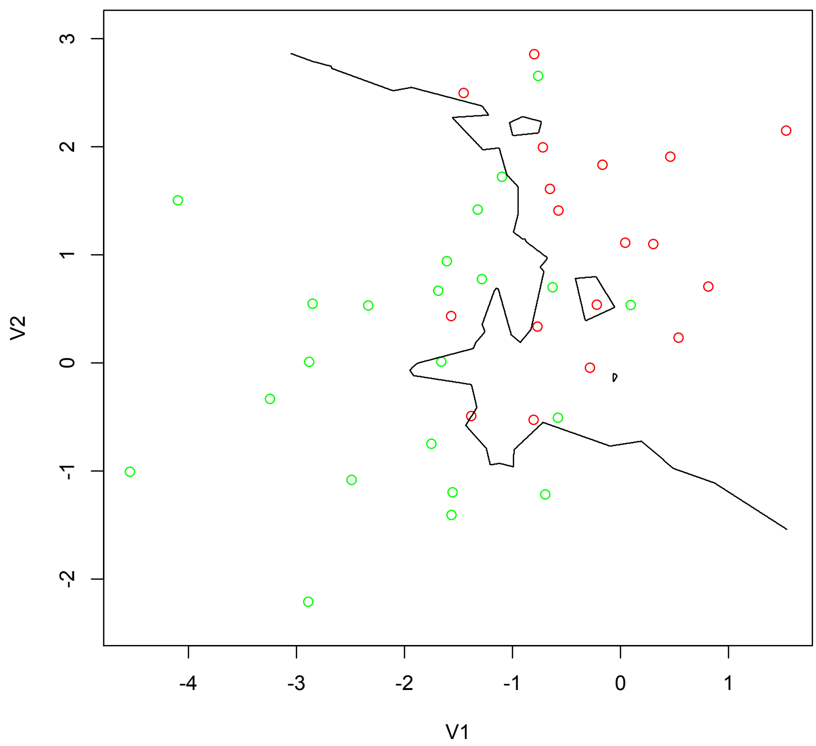


FIGURE 1 – Frontières de décision obtenues en utilisant toutes les données pour l'apprentissage ; classifieur euclidien (haut) et 3-plus proches voisins (bas).