## Relazione Finale: Gli animali e gli alberi

Chiara Camerota

16 gennaio 2018

Esame di Multivariate Analysis & Statistical Learning, Prof. A. Gottard Università degli studi di Firenze

#### Abstract

Il problema affrontato nelle prossime pagine, è di classificazione multinomiale. In particolare, il testo si divide in due parti: la prima chiamata gli animali , in cui viene spiegato brevemente il dataset utilizzato; la seconda chiamata gli alberi, in cui vengono spiegati velocemente i metodi con le relative applicazioni. I metodi utilizzati sono tutti basati su alberi decisionali : CART, Random forest e stochastic gradient boosting.

## 1 Gli animali

#### 1.1 Presentazione dei dati

I dati considerati sono la raccolta di informazioni riguardo 101 animali presenti in uno zoo. Il dataset è formato da una variabile di risposta multinomiale, con 7 gruppi possibili, e un insieme di predittori per lo più booleani. L'obiettivo è quello di classificare gli animali nelle seguenti classi:

- mammiferi
- uccelli
- rettili
- pesci
- anfibi
- insetti
- invertebrati.

I predittori contengono caratteristiche fisiche e caratteriali degli animali, in particolare sono:

```
hair (Booleano): indica se l'animale presenta peli;
feathers (Booleano): indica se ha un piumaggio;
eggs (Booleano): indica se è oviparo;
milk (Booleano): indica se allatta;
airborne (Booleano): indica se è un volatile;
aquatic (Booleano): indica se è acquatico;
predator (Booleano): indica se è predatore;
toothed (Booleano): indica se ha i denti;
 [backbone] (Booleano): indicasese ha una spina dorsale;
breathes (Booleano): indica se respira;
venomous (Booleano): indicase se è velenoso;
fins (Booleano): indicasese ha le pinne;
legs (insieme di valori "0,2,4,5,6,8"): indica il numero di gambe;
tail (Booleano): indica se ha una coda;
domestic (Booleano): indica se è domestico;
catsize (Booleano): indica se ha le dimensioni di un gatto.
```

#### 1.2 Analisi Preliminari

Molto spesso si tende a confondere i problemi di classificazione, con quelli di clustering, quindi è opportuno specificare cosa si intende per i primi, ovvero: l'insieme di metodologie statistiche che aspirano ad assegnare una classe ad un'osservazione di classe sconosciuta, sulla base di informazioni fornite da un campione di classe invece nota.

Avendo a disposizione il numero di classi e le assegnazioni di ognuna, risulta inopportuno usare metodi di clustering ( ovvero: insieme di tecniche che hanno come scopo l'individuazione di gruppi).

Una volta capito il tipo di problema che stiamo affrontando, è importante capire la forma dei dati, un metodo veloce e intuitivo è quello di plottare la densità dei diversi gruppi con le diverse variabili. Nella seguente figura si può notare come la presenza di una classe rispetto ad un'altra sia sbilanciata.

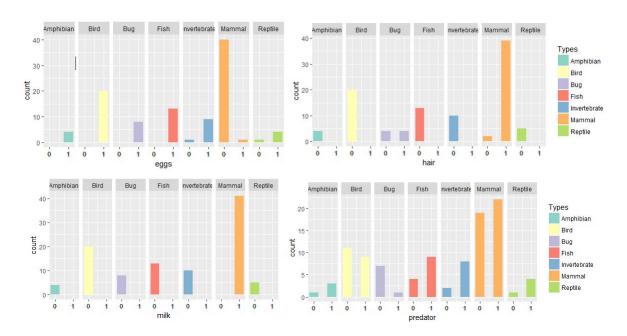


Figure 1: Istogrammi di alcuni predittori per ogni classe

Dall'immagine è intuibile come alcune variabili, tendono a caratterizzare completamente la classe degli animali, per esempio: il fatto che un animale sia oviparo, esclude la sua assegnazione alla classe dei mammiferi (fatta eccezzione per i monotremi).

Un'altra importante relazione da esplorare è la correlazione tra variabili, questa ci darà un'idea completa del legame tra variabili. Il seguente grafico rappresenta le correlazioni, calcolate con l'indice di Sperman, sia graficamente che numericamente.

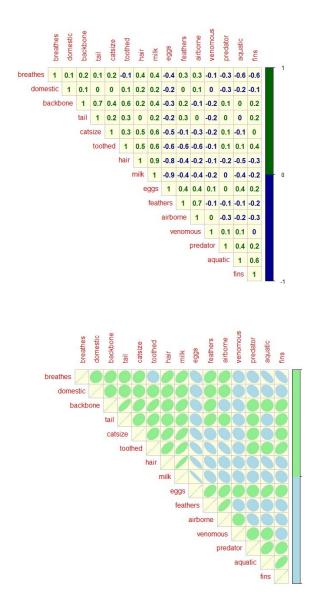


Figure 2: Grafici di correlazione tra i predittori

Possiamo notare che i predittori sono ampiamente e differentemente correlati, per lo più negativamente.

Per applicare i diversi metodi sui dati, è creare un train set, che in questo caso contiene il settanta percento delle osservazioni, e un test set, con le restanti osservazioni.

Attraverso una summary possiamo avere un'idea di come è costituito il train e il test set.

```
> summary(data[dta == 1,])
hair feath
Min. :0.0000 Min. :0
1st Qu.:0.0000 1st Qu.:0
                               feathers
                                                                                     milk
                                                                                                           airborne
                                                                                                                                     aquatic
                                                           eggs
                          Min. :0.0000
1st Qu.:0.0000
                                                    Min. :0.0000
1st Qu.:0.0000
                                                                             Min. :0.0000
1st Qu.:0.0000
                                                                                                       Min. :0.0000
1st Qu.:0.0000
                                                                                                                                 Min. :0.0000
1st Qu.:0.0000
                                                    Median :1.0000
Mean :0.5867
                                                                              Median :0.0000
Mean :0.3867
                                                                                                                                 Median :0.0000
Mean :0.3467
 Median :0.0000
                           Median :0.0000
                                                                                                       Median :0.0000
           :0.4133
                                     :0.2133
                                                                                                                 :0.2533
 Mean
                           Mean
                                                                                                       Mean
  3rd Qu.:1.0000
                           3rd Qu.:0.0000
                                                    3rd Qu.:1.0000
                                                                              3rd Qu.:1.0000
                                                                                                                                 3rd Qu.:1.0000
 Max.
           :1.0000
                           Max.
                                    :1.0000
                                                    Max.
                                                              :1.0000
                                                                              Max.
                                                                                        :1.0000
                                                                                                       Max.
                                                                                                                 :1.0000
                                                                                                                                 Max.
                                                                                                                                           :1.0000
     predator
                               toothed
                                                        backbone
                                                                                  breathes
                                                                                                           venomous
 Min. :0.0000
1st Qu.:0.0000
                          Min. :0.0000
1st Qu.:0.0000
                                                    Min. :0.0000
1st Qu.:1.0000
                                                                                                       Min. :0.00000
1st Qu.:0.00000
                                                                             Min. :0.0000
1st Qu.:1.0000
Median :1.0000
                                                                                                                                            :0.0000
                                                                                                                                  1st Qu.:0.0000
Median :0.0000
Mean :0.1467
3rd Qu.:0.0000
                                                    Median :1.0000
Mean :0.7867
3rd Qu.:1.0000
 Median :1.0000
                           Median :1.0000
                                                                                                       Median :0.00000
 Mean :0.5067
3rd Qu.:1.0000
                                                                                                       Mean :0.06667
3rd Qu.:0.00000
                           Mean :0.5733
3rd Qu.:1.0000
                                                                              Mean :0.7733
3rd Qu.:1.0000
           :1.0000
                                     :1.0000
                                                    Max.
                                                              :1.0000
                                                                                        :1.0000
                                                                                                                 :1.00000
                           Max.
        legs
                                tail
 Min. :0.000
1st Qu.:2.000
                         Min. :0.00
1st Qu.:0.00
                                               Min. :0.0000
1st Qu.:0.0000
                                                                         Min. :0.0000
1st Qu.:0.0000
                                                                                                   Amphibian
                                                                                                                     : 3
:16
                                                                                                   Bird
 Median :2.000
Mean :2.867
                         Median :1.00
Mean :0.72
                                               Median :0.0000
Mean :0.1067
                                                                         Median :0.0000
Mean :0.4133
                                                                                                   Bug
Fish
                                                                                                                     : 6
 3rd Qu.:4.000
                         3rd Qu.:1.00
                                                3rd Qu.:0.0000
                                                                         3rd Qu.:1.0000
                                                                                                   Invertebrate:10
           :8.000
                                                          :1.0000
                                                                                    :1.0000
 Max.
                         Max.
                                   :1.00
                                                Max.
                                                                         Max.
                                                                                                   Mamma 7
                                                                                                                     :29
                                                                                                   Reptile
```

Figure 3: Summary del train set

Figure 4: Summary del test set

## 2 Gli alberi

Gli alberi di decisione, o di classificazione, sono analoghi agli alberi di regressione, infatti usano, non solo, le stesse operazioni sugli alberi, ma anche

la stessa logica.

I dati originari vengono divisi ricorsivamente in due parti rispetto ad uno, o più generici attributi, la suddivisione produce una gerarchia ad albero, dove i sottoinsiemi (di record) vengono chiamati nodi e, quelli finali (o terminali), foglie.

In particolare, i nodi sono etichettati con il nome degli attributi, gli archi sono etichettati con i possibili valori dell'attributo soprastante, mentre le foglie dell'albero sono etichettate con i differenti valori dell'attributo target (valori che descrivono le classi di appartenenza).

Un oggetto è classificato seguendo un percorso lungo l'albero che porti dalla radice ad una foglia. I percorsi rappresentano le regole di classificazione (o regole produttive).

Un'importante differenza tra alberi di classificazione e di regressione è il diverso metodo di valutazione degli split. Nel caso di classificazione non è possibile calcolare l'RSS, per cui si ricorre ad altri metodi, i più comuni sono:

• Classification error rate: proporzione di osservazioni, del train set, nella regione, che non appartengono alla casse più comune;

$$E = 1|-max_k(\hat{p}_{mk})$$

dove  $\hat{p}_{mk}$  indica la proporzione di osservazioni del train set nella regione m-sima che appartiene alla classe k.

Questo indice non è ottimale se si vuole un albero parsimonioso, infatti non risente della grandezza di questo.

• Indice di Gini: misura la variabilità all'interno della classe k.

$$G = \sum_{k=1}^{K} \hat{p}_{mk} (1 - \hat{p}_{mk})$$

Questo indice può indicare anche il grado di purezza di un nodo, infatti se assume bassi valori numerici nella regione di riferimento predomina una classe.

• Cross-entropy: metodo alternativo al precedente.

$$D = -\sum_{k=1}^{K} \hat{p}_{mk} \log \hat{p}_{mk}.$$

Negli ultimi anni, questi metodi sono sempre più utilizzati, infatti sono di semplice interpretazione per gli inesperti, in alcuni casi è possibile visualizzarli e non neccessitano della creazione di variabili dummy in caso di variabili qualitative.

#### 2.1 CART

La tipologia di alberi decisionali più semplice sono i CART (Classification and Regression Tree), di seguito è riportato l'algoritmo.

- 1. Scegli la radice (primo nodo).
- 2. Per ogni predittore X trova il sottoinsieme S che minimizza la somma dell'indice di impurità dei due nodi figli. Scegli la coppia che rende X e S minimo.
- **3.** Quando la regola di uscita è soddisfatta, finisce l'algoritmo. Altrimenti continua ad iterare il punto 2. fino a che non finiscono i nodi figli.

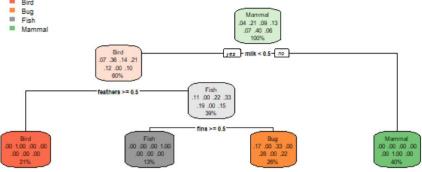
Il precedente algoritmo generalizzato, vale per tutti quei metodi basati sugli alberi decisionali. In particolare applicando particolari funzioni sugli indici di impurità e usando, opportunamente, sottoinsiemi di X e di S, si ottengono diversi metodi, come quelli illustrati dopo.

### 2.2 Applicazione

Il pacchetto usato per le applicazioni è Rpart, questo usa il metodo di cross-validation k-fold con k=10 di default, inoltre si ha la possibilità di scegliere se usare l'indice di Gini o l'error rate come regola di split.

Di seguito sono rappresentati i due alberi ottenuti con le due diverse regole per lo split, come si può notare l'albero finale cambia, anche se come vedremo più avanti, la classificazione è pressochè identica.

# CART usando l'indice di Gini



#### CART usando l'error rate

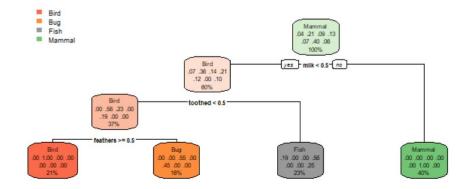


Figure 5: I due diversi alberi finali: il grafico riporta sia le variabili usate per lo split, sia la proporzione di ogni classe presente nel sottoinsieme, sia la percentuale di dati che si trovano in quel gruppo.

Un interessante parametro è quello di complessitá (indicato come  $\it cp$ ) che indica di quanto diminuisce l'errore dopo ogni split, fino ad un minimo fissato

È possibile visualizzare come il cp vari a seconda della grandezza dell'albero e dell'errore relativo.

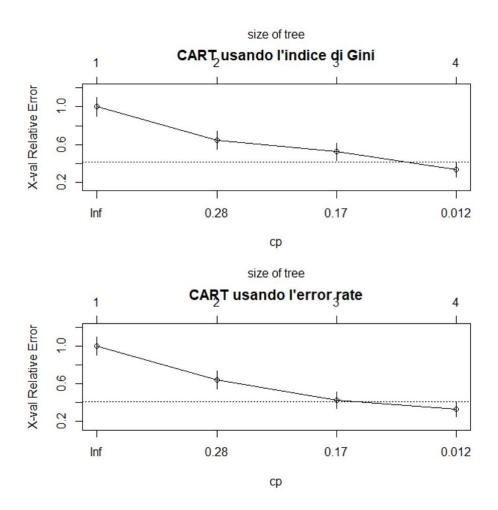


Figure 6: L'andamento del cp

In questo caso la curva dell'albero che usa l'error rate è più rapida dell'altra, questo perchè il terzo split viene fatto su diverse variabili. Provando i due modelli sul test set si nota come entrambi misclassificano le unità che appartengono a classi poco numerose, questo perchè usano solo quattro variabili per la costruzione, ignorando variabili come *backbone* che identifica un'intero gruppo.

	ytest						
cpredg	Amphibian	Bird	Bug	Fish	Invertebrate	Mammal	Reptile
Amphibian	0	0	0	0	0	0	0
Bird	0	5	0	0	0	0	0
Bug	1	0	2	0	5	0	1
Fish	0	0	0	4	0	0	0
Invertebrate	0	0	0	0	0	0	0
Mammal	0	0	0	0	0	13	0
Reptile	0	0	0	0	0	0	0

Figure 7: Matrice di confondimento, usando l'indice di Gini.

	ytest						
cpredi	Amphibian	Bird	Bug	Fish	Invertebrate	Mammal	Reptile
Amphibian	0	0	0	0	0	0	0
Bird	0	5	0	0	0	0	0
Bug	0	0	2	0	5	0	1
Fish	1	0	0	4	0	0	0
Invertebra	te 0	0	0	0	0	0	0
Mammal	0	0	0	0	0	13	0
Reptile	0	0	0	0	0	0	0

Figure 8: Matrice di confondimento, usando l'error rate.

#### 2.3 Random Forest

Il bagging o boostrap aggregation è una procedura volta a ridurre la variabilità presente nei dati, l'idea è semplice: si divide il data set iniziali in più parti, con il metodo boostrap, su ognuna delle quali si costruisce un classificatore, infine si combinano tutti questi.

Un problema di questo metodo è che i classificatori sono altamente correlati tra loro, per evitare questo, nasce la Random Forest: essa costruisce un certo numero di alberi, basati su campioni boostrap, considerando un sottoinsieme di predittori e usando le classiche operazioni sugli alberi.

Una possibilità interessante è che possiamo stilare una graduatoria dei predittori in base alla loro importanza, basata sull'indice di Gini nel nodo corrispondente.

Infine, la Random Forest, al crescere dei campioni boostrap riduce la probabilità di overfitting.

## 2.4 Applicazione

Il pacchetto usato è RandomForest.

In primo luogo è stata applicata una random forest con 150 alberi, usando due variabili a confronto per ogni split, e l'indice di Gini.

Di seguito è riportato il grafico dell'anadamento dell'errore al variare del numero degli alberi.

#### **Random Forest**

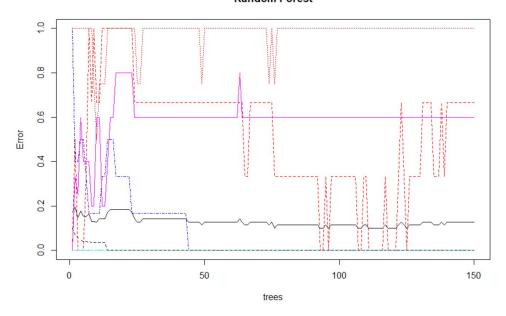


Figure 9: Andamento dell'errore

Avendo un numero parsimonioso di osservazioni, è interessante vedere le variabili più importanti, così da poter provare la perfomance dello stesso modello su un sottoinsieme di predittori.

Applicando la Random Forest solo sulle suddette variabili, otteniamo un errore identico al precente, ma osservando le matrici di confondimento si può notare come gli errori di misclassificazione differiscono, sebbene l'errore totale rimanga identico.

	ytest						
predf	Amphibian	Bird	Bug	Fish	Invertebrate	Mammal	Reptile
Amphibian	1	0	0	0	0	0	0
Bird	0	5	0	0	0	0	1
Bug	0	0	2	0	2	0	0
Fish	0	0	0	4	0	0	0
Invertebrate	0	0	0	0	3	0	0
Mammal	0	0	0	0	0	13	0
Reptile	0	0	0	0	0	0	0

Figure 10: Matrice di confondimento Random Forest

- 18 are ro.	1.10001100	~			CITITION I	CCLLCC		-
	ytest							
predfvi	Amphibian	Bird	Bug	Fish	Invertebrate	Mammal	Reptile	
Amphibian	1	0	0	0	0	0	0	
Bird	0	5	0	0	0	0	1	
Bug	0	0	2	0	3	0	0	
Fish	0	0	0	4	0	0	0	
Invertebrate	0	0	0	0	2	0	0	
Mammal	0	0	0	0	0	13	0	
Reptile	0	0	0	0	0	0	0	

Figure 11: Matrice di confondimento Random Forest con selezione di variabili

## 2.5 Stochastic Gradient Boosting

Il metodo gradient boosting produce un modello predittivo come combinazione di modelli predittivi deboli, in questo caso alberi.

Il modello viene costruito in maniera simile a quello dei metodi di boosting, ma viene generalizzato permettendo l'ottimizzazione di una funzione di perdita differenziabile arbitraria. In particolare, con questa tecnica gli alberi crescono sequenzialmente: ogni albero cresce sfruttando le informazioni di quello precedente.

Una variante molto interessante è la versione stocastica, introdotta da Friedam, motivata dal metodo di bagging di Breiman.

Per ogni iterazione dell'algoritmo, un base learner viene applicato ad un campione casuale senza reintroduzione del train set; in questo modo l'accuratezza del metodo cresce notevolmente.

Il parametro di campionamento f è una frazione del train set, se è pari ad 1, l'algoritmo è deterministico, bassi valori introducono casualità e prevengono l'overfitting, viene usato anche come parametro di regolarizzazione. Tipicamente è impostato a 0.5.

## 2.6 Applicazione

Il pacchetto usato in questo caso è *caret*, che dispone di un'ampia scelta di modelli e di opzioni.

L'output descrive eusastivamente il modello.

```
Stochastic Gradient Boosting
68 samples
16 predictors
  classes: 'Amphibian', 'Bird', 'Bug', 'Fish', 'Invertebrate', 'Mammal', 'Reptile'
Resampling: Cross-Validated (5 fold, repeated 5 times)
Summary of sample sizes: 54, 54, 54, 54, 56, 53, ...
Resampling results across tuning parameters:
  interaction.depth n.trees Accuracy
                              0.8756410
                                        0.8350528
                      50
                     100
  1
                              0.8990989
                                         0.8673443
                              0.9050330
                                         0.8749537
                     150
                              0.8659267
                      50
                                         0.8217592
                              0.8904322
                     100
                                         0.8560520
                     150
                              0.8871648
                                         0.8515514
                      50
                              0.8839560
                                         0.8460873
                     100
                              0.8959267
                                         0.8623446
Tuning parameter 'shrinkage' was held constant at a value of 0.1
parameter 'n.minobsinnode' was held constant at a value of 10
Accuracy was used to select the optimal model using the largest value.
The final values used for the model were n.trees = 150, interaction.depth =
1, shrinkage = 0.1 and n.minobsinnode = 10.
```

Figure 12: Descrizione del modello

È da notare che la cross validation ripetuta aiuta l'accuratezza della classificazione aumentando la variabilità dei sottocampioni.

Il metodo permette anche di vedere l'importanza delle variabili, che ci permette di creare un nuovo modello più parsimonioso.

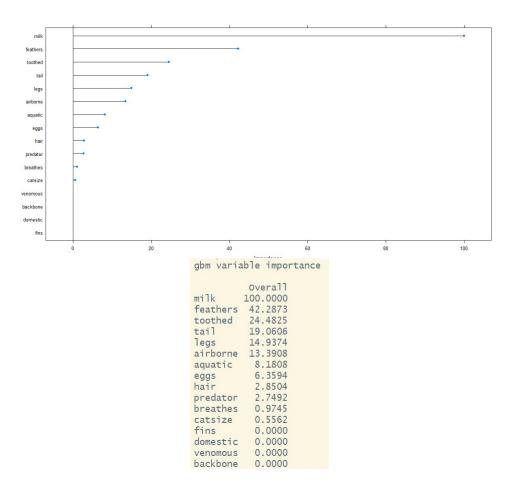


Figure 13: Variabili e relativa importanza

Sebbene riducendo i predittori nel modello l'accuratezza non cambi, cambia invece la curva dell'errore.

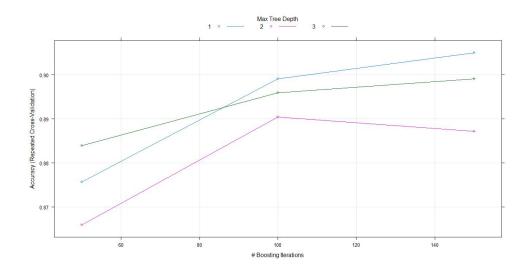


Figure 14: Accuratezza del modello senza selezione di variabili

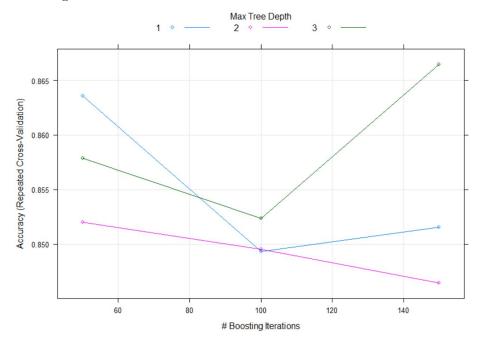


Figure 15: Accuratezza del modello con selezione di variabili

La matrice di confondimento è identica per entrambi i modelli.

	Reference						
Prediction	Amphibian	Bird	Bug	Fish	Invertebrate	Mammal	Reptile
Amphibian	1	0	Ö	0	0	0	0
Bird	0	5	0	0	0	0	0
Bug	0	0	2	0	0	0	0
Fish	0	0	0	7	0	0	0
Invertebrate	0	0	2	0	1	0	0
Mammal	0	0	0	0	0	14	0
Reptile	0	0	0	0	0	0	1

Figure 16: Matrice di confondimento

## 3 Conclusioni

Questo ultima sezione riassume le prestazioni dei modelli attraverso l'errore di missclasifficazione sul test set.

Classificatore	Accuratezza
CART (entrambi)	0.81
Random Forest (senza selezione di variabili)	0.90
Random Forest (con selezione di variabili)	0.93
Stochastic GB (entrambi)	0.93

Sulla base dei test, il modello migliore è la random forest con la selezione di variabili, in quanto meno costoso in termini di parametri e di covariate, ma è più laborioso da ottenere. Mentre lo stochastic gradient boosting da ottimi risultati, e non prevede analisi preliminari.

A mio avviso il metodo migliore è lo stochastic gradient boosting in quanto è più robusto in tutte e due le sue versioni e meno sensibile alla conformazione del test set.

## References

- [1] Johnson, R.A., & Wichern, D.W., Applied multivariate statistical analysis, Pearson 2014
- [2] T. M. Mitchell, Machine Learning, McGraw-Hill, 1997
- [3] T. Hastie, R. Tibshirani, & J. Friedman. The Elements of Statistical Learning. Data Mining, Inference, and Prediction. 2nd edition, Springer, 2009
- [4] Frank, Eibe, et al. Using model trees for classification, Machine Learning 32.1 1998: 63-76
- [5] Frank, E., Wang, Y., Inglis, S., Holmes, G., & Witten, I. H. Using model trees for classification. Machine Learning, 32(1) 1998: 63-76
- [6] FRANK, Eibe, et al. Using model trees for classification. Machine Learning, 1998, 32.1: 63-76
- [7] Ho, Tin Kam Proceedings of the 3rd International Conference on Document Analysis and Recognition, Montreal, QC, 14?16 August 1995. pp. 278?282
- [8] Ho, Tin Kam "The Random Subspace Method for Constructing Decision Forests"; IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. 20 (8): 832?844
- [9] Friedman, J. H., Greedy Function Approximation: A Gradient Boosting Machine., 1999
- [10] Friedman, J. H., Stochastic Gradient Boosting, 1999
- [11] Mason, L.; Baxter, J.; Bartlett, P. L.; Frean, Marcus "Boosting Algorithms as Gradient Descent"; In S.A. Solla and T.K. Leen and K. Müller., Advances in Neural Information Processing Systems 12. MIT Press. pp. 512?518.
- [12] Hastie, T.; Tibshirani, R.; Friedman, J. H. The Elements of Statistical Learning (2nd ed.), New York: Springer, 2009.