# Tidymodels

Xavier Gendre, Nicolas Klutchnikoff, Martial Krawier

## Introduction

## Chargement des packages

Dans cette section, nous allons apprendre à utiliser un ensemble de packages destinés à la modélisation statistique.

```
library(tidyverse)
```

## -- Attaching packages ------- tidymodels 0.1.2 -## v broom 0.7.3 v recipes 0.1.15

## v dials 0.0.9 v rsample 0.0.9 ## v infer 0.5.4 v tune 0.1.3

#### Prérecquis

- Tidyverse
- Connaissances statistiques
- Outils usuels (lm, anova, glmnet)

#### Travail typique :

- · Importations des données
- · Exploration/nettoyage/mise en forme
- modélisation
- · vérification des performances
- · comparaison de modèles

{Recipes}

#### Présentation

On utilisera des données sur l'habitat à Ames, Iowa. L'un des objectifs que l'on peut poursuivre (et qui a été proposé dans un projet Kaggle) est de prédire le prix de vente des logements.

data(ames)
Ames <- ames</pre>

On peut explorer ces données rapidement pour s'en faire une idée. C'est une étape importante, qui ne doit pas être négligée.

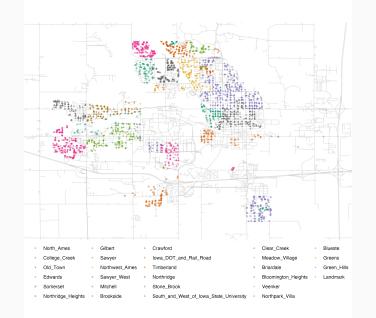
### Aperçu (1)

#### glimpse(ames)

## Rows: 2,930

```
## Columns: 74
## $ MS SubClass
                                                          <fct> One Story 1946 and Newer All Styles, One Story 1946~
## $ MS_Zoning
                                                          <fct> Residential Low Density, Residential High Density, ~
## $ Lot Frontage
                                                          <dbl> 141, 80, 81, 93, 74, 78, 41, 43, 39, 60, 75, 0, 63,~
## $ Lot Area
                                                          <int> 31770, 11622, 14267, 11160, 13830, 9978, 4920, 5005~
## $ Street
                                                          <fct> Pave, 
## $ Allev
                                                          <fct> No Alley Access, No Alley Access, No Alley Access, ~
## $ Lot Shape
                                                          <fct> Slightly Irregular, Regular, Slightly Irregular, Re~
## $ Land Contour
                                                          <fct> Lvl, Lvl, Lvl, Lvl, Lvl, Lvl, HLS, Lvl, Lvl, L~
## $ Utilities
                                                          <fct> AllPub, AllPub, AllPub, AllPub, AllPub, AllPub, All~
## $ Lot Config
                                                          <fct> Corner, Inside, Corner, Corner, Inside, Inside, Ins-
## $ Land Slope
                                                          ## $ Neighborhood
                                                          <fct> North Ames, North Ames, North Ames, Gil~
## $ Condition 1
                                                          <fct> Norm, Feedr, Norm, Norm, Norm, Norm, Norm, Norm, No~
## $ Condition 2
                                                          <fct> Norm, Norm, Norm, Norm, Norm, Norm, Norm, Norm, Nor-
## $ Bldg Type
                                                          <fct> OneFam, OneFam, OneFam, OneFam, OneFam, OneFam, Twn~
## $ House Style
                                                          <fct> One Story, One Story, One Story, One Story, Two Sto~
## $ Overall Cond
                                                          <fct> Average, Above Average, Above Average, Average, Ave~
                                                          <int> 1960, 1961, 1958, 1968, 1997, 1998, 2001, 1992, 199~
## $ Year Built
```

## Aperçu (2)



## Visualisation du prix

0e+00

20+05

```
ames %>%
  ggplot() +
  aes(x = Sale_Price) +
  geom_histogram(bins = 50)
   400
   300
   200
   100
     0
```

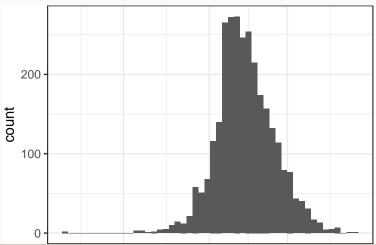
40+05

6e±05

80+0

## Transformation logarithmique

```
ames %>%
  ggplot() +
  aes(x = Sale_Price) +
  geom_histogram(bins = 50) +
  scale_x_log10()
```



## Pour aller plus loin

Il est également possible d'obtenir rapidement un rapport automatique en s'aidant de packages spécialisés.

Visualiser le rapport. Bien utile 2

#### Dans la suite

Pour la suite, nous travaillerons sur les prix transformés et sur une partie seulement des variables comme prédicteurs :

- · Neighborhood: variable qualitative, avec 29 voisins;
- Gr\_Liv\_Area : variable continue qui représente la surface habitable en pied au carré;
- Year\_Built : variable discrète qui représente l'année de construction.
- Bldg\_Type : variable qualitative qui représente le type de bâtiment : OneFam (n=1814), TwoFmCon (n=45), Duplex (n=76), Twnhs (n=76) et TwnhsE (n=188).

```
ames <- Ames %>%
  mutate(Sale_Price = log10(Sale_Price)) %>%
  select(Sale_Price, Neighborhood, Gr_Liv_Area, Year_Built, Bldg_Type)
```

## Version simple

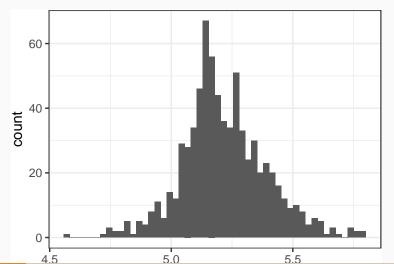
```
set.seed(123)
# Save the split information for an 80/20 split of the data
ames_split <- initial_split(ames, prob = 0.80)</pre>
ames_split
## <Analysis/Assess/Total>
## <2198/732/2930>
ames_train <- training(ames_split)</pre>
ames test <- testing(ames split)</pre>
dim(ames_train)
## [1] 2198
```

## Visualisation (train)

```
ames_train %>%
  ggplot() +
  aes(x = Sale_Price) +
  geom_histogram(bins = 50)
   200
   150
   100
    50
      0
```

## Visualisation (test)

```
ames_test %>%
  ggplot() +
  aes(x = Sale_Price) +
  geom_histogram(bins = 50)
```



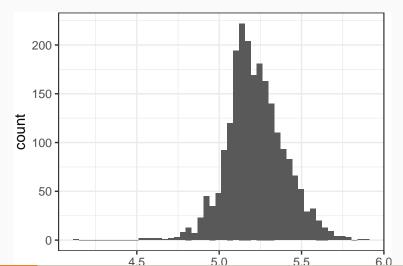
## Échantillonnage stratifié

Pour corriger ce défaut, il est possible de stratifier l'échantillonnage par rapport à l'une des variables, ici la variable d'intérêt. Puisque cette variable est quantitative, les données sont séparées en quartiles et l'échantillonnage est effectué dans chacun des quartiles. Pour une variable qualitative l'échantillonnage est effectué dans chacune des modalités pour s'assurer d'une bonne distribution des modalités sous-représentées.

```
set.seed(123)
ames_split <- initial_split(ames, prob = 0.80, strata = Sale_Price)
ames_train <- training(ames_split)
ames_test <- testing(ames_split)</pre>
```

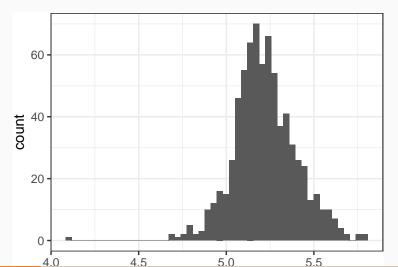
### Visualisation (train)

```
ames_train %>%
  ggplot() +
  aes(x = Sale_Price) +
  geom_histogram(bins = 50)
```



### Visualisation (test)

```
ames_test %>%
  ggplot() +
  aes(x = Sale_Price) +
  geom_histogram(bins = 50)
```



## La méthode classique

```
lm(Sale_Price ~ Neighborhood +
     log10(Gr Liv Area) +
     Year Built +
     Bldg Type,
   data = ames train)
##
## Call:
## lm(formula = Sale Price ~ Neighborhood + log10(Gr Liv Area) +
##
       Year_Built + Bldg_Type, data = ames_train)
##
## Coefficients:
                                             (Intercept)
##
##
                                               -0.827298
##
                              NeighborhoodCollege_Creek
##
                                                0.013164
##
                                   NeighborhoodOld_Town
                                               -0.028325
##
##
                                    NeighborhoodEdwards
##
                                               -0.048051
##
                                   NeighborhoodSomerset
##
                                                0.050520
```

#### Que se passe-t-il?

Pour construire la matrice de design, plusieurs manipulations des données sont effectuées. Nous pouvons les décomposer en plusieurs étapes :

- La variable Sale\_Price est définie comme variable d'intérêt tandis que les autres servent de variables prédictives;
- Une transformation continue (logarithmique) est appliquée à la variable continue Gr\_Liv\_Area;
- Les variables qualitatives Bldg\_Type et Neighborhood qui ne peuvent pas être utilisées directement pour effectuer une régression linéaire sont transformées en plusieurs variables numériques (presque une par modalité).

### Un mélange des genres

On comprend ici qu'on fait deux choses différentes simultanément dans le code ci-dessus :

- On décrit le rôle des différentes variables et la façon dont on souhaite les utiliser à l'aide de la formule;
- On utilise une fonction de R qui va faire tourner une méthode statistique (ici la fonction lm() et la méthode des moindres carrés ordianaires).

#### Écrire une recette

```
simple ames <- recipe(</pre>
    Sale Price ~ Neighborhood + Gr Liv Area + Year Built + Bldg Type,
    data = ames train) %>%
  step_log(Gr_Liv_Area, base = 10) %>%
  step dummy(all nominal())
simple ames
## Data Recipe
##
## Inputs:
##
##
        role #variables
##
   outcome
##
   predictor
##
## Operations:
##
## Log transformation on Gr_Liv_Area
## Dummy variables from all_nominal()
```

#### Qu'est-ce?

```
class(simple_ames)
```

```
## [1] "recipe"
```

Il s'agit d'un objet R qui définit une série d'étapes de préparation des données en vue du traitement statistique par différents modèles.

ATTENTION! ces étapes ne sont pas effectuées. Il s'agit seulement de décrire ce qui devrait être fait.

- La fonction recipe() sert à préciser les rôles des différentes variables (variable d'intérêt ou variable prédictive). De plus le fait de passer les données permet à la fonction de connaître la nature de chacune des variables (continue, catégorielle, etc.)
- La première étape est d'appliquer une transformation logarithmique à la variable Gr\_Liv\_Area à l'aide de la fonction step\_log().
- La dernière étape permet de sélectionner toutes les variables catégorielles (all\_nominal()) et de les dummyfier.

### Quel est l'avantage?

- Les recettes pourront servir à plusieurs modèles (compatibles mais on verra qu'il y en a de plus en plus). Elles ne sont pas couplées aux fonctions statistiques comme lm() ou glmnet().
- Les recettes sont plus souples que les formules et permettent plus de liberté dans la préparation des données.
- 3. Le syntaxe est compacte. all\_nominal(), all\_numeric(),
   all\_predictors() et all\_outcomes() qui peuvent être
   comparées à start\_with() ou contains()de {dplyr}.

#### Utiliser la recette

Il faut commencer par **estimer** toutes les quantités requises pour les différentes étapes. Ceci se fait à l'aide de la fonction **prep()**.

```
simple_ames <- prep(simple_ames, training = ames_train)</pre>
simple ames
## Data Recipe
##
## Inputs:
##
         role #variables
##
##
      outcome
    predictor
##
##
  Training data contained 2199 data points and no missing data.
##
## Operations:
##
## Log transformation on Gr Liv Area [trained]
## Dummy variables from Neighborhood, Bldg Type [trained]
```

### On peut mettre à cuire (1)

Enfin, on peut utiliser notre recette sur un jeu de données (l'échantillon de test par exemple) à l'aide de bake().

```
test_ex <- bake(simple_ames, new_data = ames_test)
names(test_ex) %>% head()

## [1] "Gr_Liv_Area" "Year_Built"
## [3] "Sale_Price" "Neighborhood_College_Creek"
## [5] "Neighborhood_Old_Town" "Neighborhood_Edwards"
```

#### On peut mettre à cuire (2)

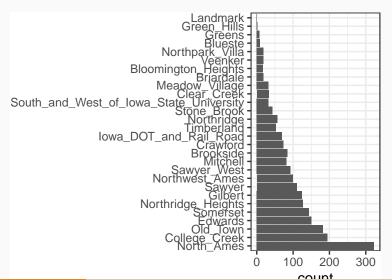
Ou sur l'échantillon d'apprentissage lui-même (remarquer le **NULL** pour éviter de refaire des calculs effectués lors de la préparation)

## Étape d'encodage des données qualitatives

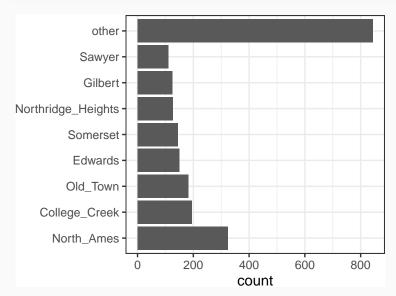
- step\_unknown() permet de convertir les données manquantes vers un niveau spécifié d'une variable catégorielle.
- step\_novel() autorise la présence d'un nouveau niveau dans les données au moment de la cuisson.
- step\_other() permet d'analyser la fréquence des facteurs et de regrouper les facteurs les moins représentés dans un niveau fourre-tout (un seuil peut être précisé).

#### Exemple (1)

```
ggplot(ames_train, aes(y = Neighborhood)) +
  geom_bar() +
  labs(y = NULL)
```

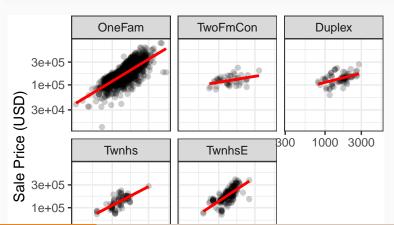


#### Exemple (2)



### Prendre en compte les intéractions (1)

```
ggplot(ames_train, aes(x = Gr_Liv_Area, y = 10^Sale_Price)) +
  geom_point(alpha = .2) +
  facet_wrap(~ Bldg_Type) +
  geom_smooth(method = lm, formula = y ~ x, se = FALSE, col = "red") +
  scale_x_log10() +
  scale_y_log10() +
  labs(x = "General Living Area", y = "Sale Price (USD)")
```



#### Prendre en compte les intéractions (2)

Une remarque sur la remarque : contrairement à **Gr\_Liv\_Area**, la variable **Sale\_Price** a été transformée à l'aide d'un **mutate()** en dehors de la recette. C'est la méthode recommandée.

#### Prendre en compte les intéractions (3)

Attention! le comportement est différent de celui des formules usuelles de R.

```
step_interact(~ Gr_Liv_Area:Bldg_Type)
```

ne fonctionnerait pas car on ne peut créer une interaction qu'entre variables quantitatives. On doit donc :

- · avoir créé les variables factices binaires;
- · compris la convention de nommage des variables ainsi crées.

#### D'ailleurs :

```
simple_ames %>%
prep() %>%
bake(new_data = NULL) %>%
select(contains("_x_")) %>%
names()
```

```
## [1] "Gr_Liv_Area_x_Bldg_Type_TwoFmCon" "Gr_Liv_Area_x_Bldg_Type_Duplex"
## [3] "Gr_Liv_Area_x_Bldg_Type_Twnhs" "Gr_Liv_Area_x_Bldg_Type_TwnhsE"
```

#### Gérer les données non équilibrées

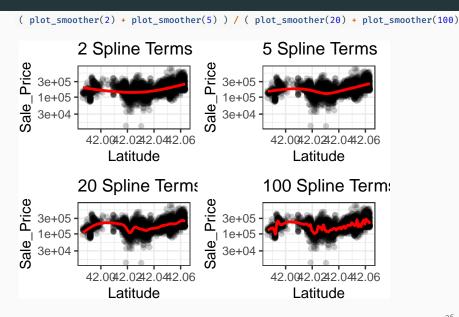
Attention, il y a un nouveau package {themis} qui contient des étapes de recettes dédiées au données non équilibrées. À utiliser sur l'échantillon d'entraînement.

```
## Registered S3 methods overwritten by 'themis':
## method from
## bake.step_downsample recipes
## bake.step_upsample recipes
## prep.step_downsample recipes
## prep.step_upsample recipes
```

## Utilisation des splines naturelles (1)

```
library(patchwork)
library(splines)
plot_smoother <- function(deg_free) {</pre>
  ggplot(Ames, aes(x = Latitude, y = Sale_Price)) +
    geom_point(alpha = .2) +
    scale_y_log10() +
    geom_smooth(
      method = lm,
      formula = y \sim ns(x, df = deg free),
      col = "red",
      se = FALSE
    ) +
    ggtitle(paste(deg_free, "Spline Terms"))
```

#### Utilisation des splines naturelles (2)



## Utilisation des splines naturelles (3)

```
data = Ames) %>%
  step_log(Gr Liv Area, base = 10) %>%
  step other(Neighborhood, threshold = 0.01) %>%
  step dummv(all nominal()) %>%
  step_interact( ~ Gr_Liv_Area:starts_with("Bldg_Type_") ) %>%
  step ns(Latitude. deg free = 20) %>%
  ## On devrait arrêter ICI. C'est juste pour visualiser ;-)
  prep() %>%
  bake(new data = NULL) %>%
  select(contains("_ns")) %>%
  names()
   [1] "Latitude ns 01" "Latitude ns 02" "Latitude ns 03" "Latitude ns 04"
##
##
   [5] "Latitude_ns_05" "Latitude_ns_06" "Latitude_ns_07" "Latitude_ns_08"
   [9] "Latitude ns 09" "Latitude ns 10" "Latitude ns 11" "Latitude ns 12"
##
## [13] "Latitude ns 13" "Latitude ns 14" "Latitude ns 15" "Latitude ns 16"
## [17] "Latitude ns 17" "Latitude ns 18" "Latitude ns 19" "Latitude ns 20"
```

recipe(Sale Price ~ Neighborhood + Gr Liv Area + Year Built + Bldg Type + Latitude,

#### Bilan des recettes (1)

```
ames <- mutate(Ames. Sale Price = log10(Sale Price))
set.seed(123)
ames split <- initial split(ames. prob = 0.80. strata = Sale Price)
ames_train <- training(ames_split)</pre>
ames test <- testing(ames split)
ames rec <-
  recipe(Sale Price ~ Neighborhood + Gr Liv Area + Year Built + Bldg Type +
           Latitude + Longitude, data = ames_train) %>%
  step log(Gr Liv Area, base = 10) %>%
  step_other(Neighborhood, threshold = 0.01) %>%
  step dummy(all nominal()) %>%
  step_interact( ~ Gr_Liv_Area:starts_with("Bldg_Type_") ) %>%
  step ns(Latitude, Longitude, deg free = 20)
```

#### Bilan des recettes (modèle usuel de R)

```
ames_rec_prepped <- prep(ames_rec)
ames_train_prepped <- bake(ames_rec_prepped, new_data = ames_train)
ames_test_prepped <- bake(ames_rec_prepped, ames_test)
# Fit the model; Note that the column Sale_Price has already been
# log transformed.
lm_fit <- lm(Sale_Price ~ ., data = ames_train_prepped)</pre>
```

Si la fonction prep() est utilise sans argument elle fait la préparation en utilisant les données qui ont été mentionnées dans l'agument data = . de la recette.

#### Bilan des recettes (coup d'oeil)

La fonction <code>glance()</code> est disponible dans le package <code>{broom}</code>dont on reparlera plus loin.

```
glance(lm_fit)
```

```
A tibble: 1 x 12
##
    r.squared adj.r.squared sigma statistic p.value df logLik
                                                        AIC
                                                              BIC
       < fdb>
                 <fdh> <fdh>
                                ##
## 1
       0.822
                  0.816 0.0757 140.
                                         0
                                             70 2592, -5040, -
4630.
## # ... with 3 more variables: deviance <dbl>, df.residual <int>, nobs <int>
```

#### Bilan des recettes (estimation des paramètres du modèle)

Les coefficients du modèle peuvent être extraits à l'aide de la fonction tidy() du même package :

```
tidy(lm_fit)
```

```
A tibble: 71 x 5
##
     term
                                       estimate std.error statistic
                                                                     p.value
##
     <chr>>
                                          <dbl>
                                                   <dbl>
                                                             <dbl>
                                                                       <dbl>
    1 (Intercept)
                                                                   7.32e- 2
##
                                      -0.531
                                                0.296
                                                           -1.79
##
    2 Gr Liv Area
                                                0.0161
                                                           40.3
                                                                    1.46e-
                                       0.648
264
##
    3 Year Built
                                       0.00194
                                                0.000139
                                                           13.9
                                                                   2.69e- 42
    4 Neighborhood College Creek
                                                           -2.71
                                                                    6.83e- 3
##
                                      -0.0898
                                                0.0332
##
    5 Neighborhood Old Town
                                      -0.0516
                                                0.0129
                                                           -4.01
                                                                    6.20e-
    6 Neighborhood Edwards
##
                                      -0.153
                                                0.0274
                                                           -5.57
                                                                   2.91e-
##
    7 Neighborhood Somerset
                                       0.0364
                                                0.0189
                                                            1.92
                                                                    5.50e-
##
    8 Neighborhood Northridge Heights
                                       0.0984
                                                0.0272
                                                            3.61
                                                                   3.10e-
##
    9 Neighborhood Gilbert
                                       0.000728
                                                0.0219
                                                             0.0333 9.73e-
## 10 Neighborhood Sawver
                                      -0.156
                                                0.0263
                                                            -5.93
                                                                   3.59e-
                                                                           9
  # ... with 61 more rows
```

## Bilan des recettes (prédiction)

#### Sur une recette directement

On peut **tifyfier** une recette pour voir à quoi elle ressemble… et beacoup d'autres objets R!

tidy(ames\_rec\_prepped)

```
## # A tibble: 5 x 6
    number operation type trained skip id
##
##
     <int> <chr>      <chr>      <lgl>
                                  <lgl> <chr>
## 1
        1 step
                   log
                        TRUE
                                  FALSE log u4pZz
## 2
        2 step
                   other TRUE
                                   FALSE other XqiIK
## 3
                   dummv TRUE
                                   FALSE dummy ht3jv
        3 step
## 4
        4 step
                   interact TRUE
                                   FALSE interact K2XxD
         5 step
                                   FALSE ns_vqtIn
## 5
                   ns
                           TRUE
```

{parsnip}

# {parsnip}

#### library(rstanarm)

```
## Loading required package: Rcpp
##
## Attaching package: 'Rcpp'
## The following object is masked from 'package:rsample':
##
##
       populate
## This is rstanarm version 2.21.1
## - See https://mc-stan.org/rstanarm/articles/priors for changes to default priors
## - Default priors may change, so it's safest to specify priors, even if equivalen
## - For execution on a local, multicore CPU with excess RAM we recommend calling
##
     options(mc.cores = parallel::detectCores())
```

## Création d'un modèle (les bases)

#### Pour créer un modèle avec {tidymodels} il faut:

- le modèle mathématique qu'on souhaite utiliser (régression linéaire, forêt aléatoire, plus proches voisins, etc.);
- indiquer quel moteur on souhaite utiliser (le plus souvent le package);
- préciser si nécessaire le mode de prédiction : regression, classification;

## Principe

Le package {parsnip} est en quelque sorte une couche d'abstraction qui permet de ne pas dépendre de la façon dont les différents package ont été conçus. La fonction translate() permet de visualiser comment le code saisi par l'utilisateur est converti dans la syntaxe requise par le package de traitement statistique.

## Exemple (1)

```
linear_reg() %>% set_engine("lm") %>% translate()

## Linear Regression Model Specification (regression)

##

## Computational engine: lm

##

## Model fit template:

## stats::lm(formula = missing_arg(), data = missing_arg(), weights = missing_arg()
```

## Exemple (2)

```
linear_reg() %>% set_engine("glmnet") %>% translate()

## Linear Regression Model Specification (regression)
##

## Computational engine: glmnet
##

## Model fit template:
## glmnet::glmnet(x = missing_arg(), y = missing_arg(), weights = missing_arg(),
## family = "gaussian")
```

## Exemple (3)

```
linear_reg() %>% set_engine("stan") %>% translate()

## Linear Regression Model Specification (regression)

##

## Computational engine: stan

##

## Model fit template:

## rstanarm::stan_glm(formula = missing_arg(), data = missing_arg(),

## weights = missing arg(), family = stats::gaussian, refresh = 0)
```

## Utilisation sur des données (1)

```
lm model <-</pre>
  linear_reg() %>%
  set_engine("lm")
lm_form_fit <-</pre>
  lm model %>%
  fit(
    Sale_Price ~ Longitude + Latitude,
    data = ames_train
lm_xy_fit <-</pre>
  lm_model %>%
  fit xv(
    x = ames_train %>% select(Longitude, Latitude),
    y = ames_train %>% pull(Sale_Price)
```

#### Utilisation sur des données (2)

```
lm_form_fit

## parsnip model object

##

## Fit time: 2ms

##

## Call:

## stats::lm(formula = Sale_Price ~ Longitude + Latitude, data = data)

##

## Coefficients:

## (Intercept) Longitude Latitude

## -316.368 -2.083 3.010
```

## Utilisation sur des données (3)

```
lm_xy_fit

## parsnip model object

##
## Fit time: 1ms
##
## Call:
## stats::lm(formula = ..y ~ ., data = data)
##
## Coefficients:
## (Intercept) Longitude Latitude
## -316.368 -2.083 3.010
```

# Utilisation sur des données (4)

Différence principale : avec fit() des variables factices sont potentiellement crées. Pas avec fit\_xy() qui utilise les données telles qu'elles sont.

## Un exemple pourles forêts aléatoires (1)

```
rand_forest(trees = 1000, min_n = 5) %>%
  set engine("ranger") %>%
  set_mode("regression") %>%
  translate()
## Random Forest Model Specification (regression)
##
## Main Arguments:
##
   trees = 1000
     min n = 5
##
##
## Computational engine: ranger
##
## Model fit template:
## ranger::ranger(x = missing_arg(), y = missing_arg(), case.weights = missing_arg()
       num.trees = 1000, min.node.size = min rows(~5, x), num.threads = 1,
##
##
       verbose = FALSE, seed = sample.int(10<sup>5</sup>, 1))
```

# Un exemple pourles forêts aléatoires (2)

On remarque que le mode de est spécifié car les forêts aléatoires peuvent être utiliées aussi bien pour prédire des variables catégorielles que continues.

Les fonctions de modélisation (comme rand\_forest(), possèdent deux catégories d'arguments :

- les arguments principaux sont les plus utilisés et existent dans les différents packages (engines) éventuellement sous des noms différents;
- Les arguments spécifiques aux différents moteurs, ou plus rarement utilisés.

## Cueillette (1)

De nombreuses quantités sont stockées dans les modèles de {parsnip}.

```
lm_xy_fit %>% pluck("fit") # lm_form_fit$fit

##
## Call:
## stats::lm(formula = ..y ~ ., data = data)
##
## Coefficients:
## (Intercept) Longitude Latitude
## -316.368 -2.083 3.010
```

## Cueillette (2)

#### tidy(lm\_form\_fit)

## **Principes**

Pour faire des prédictions, {parsnip} suit tout le temps ces quelques règles :

- · Les résultats sont des tiblles, toujours;
- · Les noms des variables sont prévisibles;
- · Il y a toujours le même nombre de lignes que les données d'entrée.

# Exemple (1)

```
ames_test_small <- ames_test %>% slice(1:5)
predict(lm_form_fit, new_data = ames_test_small)

## # A tibble: 5 x 1

## .pred

## <dbl>
## 1 5.22

## 2 5.29

## 3 5.28

## 4 5.26

## 5 5.24
```

# Exemple (2)

```
ames_test_small %>%
 select(Sale Price) %>%
 bind_cols(predict(lm form fit, ames test small)) %>%
 # Add 95% prediction intervals to the results:
 bind cols(predict(lm form fit. ames test small. type = "pred int"))
## # A tibble: 5 x 4
##
    Sale_Price .pred .pred_lower .pred_upper
        <dbl> <dbl>
                       <dbl>
                                 <dbl>
##
## 1
       5.39 5.22
                     4.90
                                  5.53
## 2 5.28 5.29
                     4.97
                                  5.60
## 3 5.27 5.28 4.96
                                  5.59
## 4 5.60 5.26
                     4.95
                                  5.58
## 5
        5.02 5.24
                   4.93
                                  5.55
```

# Exemple (3)

On a toujours le même nom de variable pour la prévision! Même en changeant de méthode statistique et de package.

```
tree model <-
  decision_tree(min_n = 2) %>%
  set_engine("rpart") %>%
  set_mode("regression")
tree_fit <-
  tree model %>%
  fit(Sale_Price ~ Longitude + Latitude, data = ames_train)
ames_test_small %>%
  select(Sale_Price) %>%
  bind_cols(predict(tree_fit, ames_test_small))
## # A tibble: 5 x 2
```

## Sale\_Price .pred ## <dbl> <dbl> ## 1 5.39 5.16 ## 2 5.28 5.31

5.27 5.31

## 3

# Convention de nommage des variables

type value	column name(s)
numeric	.pred
class	.pred_class
prob	.pred_{class levels}
conf_int	.pred_lower, .pred_upper
pred_int	.pred_lower, .pred_upper

{Workflows}

# Worflows = pipeline

Attention! La terminologie pour ce qui est appelé Workflows dans {tidymodels} est appelé pipeline en Python ou Spark. Mais ona déjà %>% qui génère un pipeline.

# Un workflow simpliste (1)

```
lm_model <-
linear_reg() %>%
set_engine("lm")

lm_wflow <-
workflow() %>%
add_model(lm_model)
```

# Un workflow simpliste (2)

## Model: linear\_reg()

##

```
lm_wflow
## Preprocessor: None
## Model: linear_reg()
##
## -- Model -----
## Linear Regression Model Specification (regression)
##
## Computational engine: lm
### On ajoute une formule
lm_wflow <-
  lm_wflow %>%
  add_formula(Sale_Price ~ Longitude + Latitude)
lm wflow
## == Workflow ========
## Preprocessor: Formula
```

65

```
lm_fit <- fit(lm_wflow, ames_train)</pre>
lm_fit
## Preprocessor: Formula
## Model: linear reg()
##
## -- Preprocessor ------
## Sale_Price ~ Longitude + Latitude
##
## -- Model -----
##
## Call:
## stats::lm(formula = ..y ~ ., data = data)
##
## Coefficients:
## (Intercept) Longitude Latitude
## -316.368 -2.083
                      3.010
```

#### Predict

```
predict(lm_fit, ames_test %>% head(5))

## # A tibble: 5 x 1

## .pred

## <dbl>
## 1 5.22

## 2 5.29

## 3 5.28

## 4 5.26

## 5 5.24
```

# Un peu de changement (1)

```
lm wflow %>% update formula(Sale Price ~ Longitude)
## Preprocessor: Formula
## Model: linear_reg()
##
## -- Preprocessor ------
## Sale_Price ~ Longitude
##
## -- Model -----
## Linear Regression Model Specification (regression)
##
## Computational engine: lm
### Un peu de changement (2)
lm wflow %>% remove formula()
## Preprocessor: None
## Model: linear_reg()
##
                                               68
```

## -- Model -----

# Mais... et ma recette? (1)

```
ames rec
## Data Recipe
##
## Inputs:
##
         role #variables
##
##
     outcome
##
    predictor
                       6
##
## Operations:
##
  Log transformation on Gr Liv Area
## Collapsing factor levels for Neighborhood
## Dummy variables from all nominal()
## Interactions with Gr_Liv_Area:starts_with("Bldg_Type_")
## Natural Splines on Latitude, Longitude
```

# Mais... et ma recette? (2)

```
lm_wflow <-
lm_wflow %>%
remove_formula() %>%
add_recipe(ames_rec)
```

# Mais... et ma recette? (3)

### La puissance du workflow (1)

```
lm_wflow
## == Workflow ========
## Preprocessor: Recipe
## Model: linear_reg()
##
## -- Preprocessor ------
## 5 Recipe Steps
##
## * step log()
## * step_other()
## * step dummv()
## * step_interact()
## * step_ns()
##
## -- Model -----
## Linear Regression Model Specification (regression)
##
## Computational engine: lm
```

### La puissance du workflow (2)

De même predict() automatise la cuisson! Pas de bake()...

```
predict(lm_fit, ames_test %>% head(5))

## # A tibble: 5 x 1

## .pred

## <dbl>
## 1 5.31

## 2 5.30

## 3 5.17

## 4 5.52

## 5 5.09
```

### BILAN (1)

```
ames <- mutate(Ames. Sale Price = log10(Sale Price))
set.seed(1234)
ames_split <- initial_split(ames, prob = 0.80, strata = Sale_Price)</pre>
ames train <- training(ames split)
ames test <- testing(ames split)</pre>
ames test small <- ames test %>% head(5)
ames rec <-
  recipe(Sale_Price ~ Neighborhood + Gr_Liv_Area + Year_Built + Bldg_Type +
           Latitude + Longitude, data = ames_train) %>%
  step log(Gr Liv Area, base = 10) %>%
  step_other(Neighborhood, threshold = 0.01) %>%
  step dummy(all nominal()) %>%
  step_interact( ~ Gr_Liv_Area:starts_with("Bldg_Type_") ) %>%
  step ns(Latitude, Longitude, deg free = 20)
```

### BILAN (2)

```
lm_model <- linear_reg() %>% set_engine("lm")
lm_wflow <-
 workflow() %>%
  add_model(lm_model) %>%
  add_recipe(ames_rec)
lm_fit <- fit(lm_wflow, ames_train)</pre>
lm_pred <- ames_test_small %>%
  select(Sale_Price) %>%
  bind_cols(predict(lm_fit, ames_test_small)) %>%
  bind_cols(predict(lm form fit, ames test small, type = "pred int"))
```

### BILAN (3)

#### lm\_pred

```
## # A tibble: 5 x 4
##
     Sale_Price .pred .pred_lower .pred_upper
##
          <dbl> <dbl>
                           <dbl>
                                        <dbl>
## 1
          5.24 5.16
                             4.91
                                         5.54
## 2
           5.33 5.38
                             4.95
                                         5.57
## 3
          4.98 5.06
                             4.93
                                         5.55
## 4
          5.31 5.35
                             4.99
                                         5.62
## 5
           5.30 5.24
                             4.99
                                         5.62
```

{yardstick}

# Critères d'évaluation empirique des modèles

L'idée est de valider la qualité d'un modèle sur la partie de l'échantillon qui n'a pas servie à estimer les paramètres du modèle. On dispose de plusiers métriques pour décider la qualité d'un modèle :

- · RMSE;
- R-carré;
- etc.

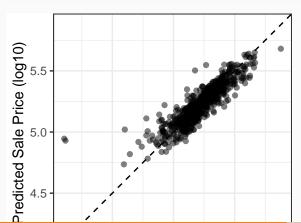
# Métriques pour régression (1)

ames test res <-

```
predict(lm fit, new data = ames test %>% select(-Sale Price)) %>%
 bind_cols(ames_test %>% select(Sale_Price))
ames test res
## # A tibble: 731 x 2
     .pred Sale_Price
##
##
  <dbl>
              <dbl>
  1 5.16 5.24
##
##
  2 5.38 5.33
  3 5.06
          4.98
##
##
   4 5.35
          5.31
##
   5 5.24
          5.30
##
   6 5.26
          5.26
## 7 5.42
          5.34
## 8 5.28
          5.26
##
   9 5.01
          5.10
## 10 5.17 5.05
## # ... with 721 more rows
```

# Métriques pour régression (2)

```
ggplot(ames_test_res, aes(x = Sale_Price, y = .pred)) +
    # Create a diagonal line:
    geom_abline(lty = 2) +
    geom_point(alpha = 0.5) +
    labs(y = "Predicted Sale Price (log10)", x = "Sale Price (log10)") +
    # Scale and size the x- and y-axis uniformly:
    coord_obs_pred()
```



# Métriques pour régression (3)

```
rmse(ames_test_res, truth = Sale_Price, estimate = .pred)

## # A tibble: 1 x 3

## .metric .estimator .estimate

## <chr> <chr> <dbl>
## 1 rmse standard 0.0854
```

# Métriques pour régression (3)

## 3 mae standard 0.0564

On notera qu'il peut y avoir plusieurs variables dans ames\_test\_res et que certaines métriques ne sont pas symétriques. Il faut donc faire attention.

# Métrique pour classification binaire (1)

Nous considérons un exemple factice (les données sont disponibles dans le package {yardstick}).

```
data(two_class_example)
str(two_class_example)

## 'data.frame': 500 obs. of 4 variables:
## $ truth : Factor w/ 2 levels "Class1", "Class2": 2 1 2 1 2 1 1 1 2 2 ...
## $ Class1 : num    0.00359  0.67862  0.11089  0.73516  0.01624 ...
## $ Class2 : num    0.996  0.321  0.889  0.265  0.984 ...
## $ predicted: Factor w/ 2 levels "Class1", "Class2": 2 1 2 1 2 1 1 1 2 2 ...
```

# Métrique pour classification binaire (2)

Les probabilités estimées d'appartenance aux différentes classes (la somme vaut 1) permet de prédire la classe en affectant chaque ligne à la classe la plus probable.

```
conf_mat(two_class_example, truth = truth, estimate = predicted)
```

```
## Truth

## Prediction Class1 Class2

## Class1 227 50

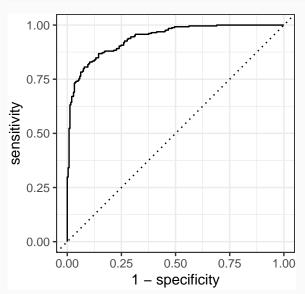
## Class2 31 192
```

### Métriques pour classification binaire (3)

## 3 f meas binary 0.849

# Métriques pour classification binaire (4)

two\_class\_curve <- roc\_curve(two\_class\_example, truth, Class1)
autoplot(two\_class\_curve)</pre>



# Métriques pour classification binaire (5)

## <chr> <chr> <dbl> ## 1 roc auc binary 0.939

```
roc_auc(two_class_example, truth, Class1)
## # A tibble: 1 x 3
## .metric .estimator .estimate
```

# Évaluation des performances

### Après le modèle linéaire, les forêts aléatoires (1)

De la même manière qu'on a créé un worflow pour le modèle linéaire, on en crée un pour les forêts aléatoires.

```
rf model <-
  rand_forest(trees = 1000) %>%
  set engine("ranger") %>%
  set_mode("regression")
rf wflow <-
  workflow() %>%
  add formula(
   Sale Price ~ Neighborhood + Gr Liv Area + Year Built + Bldg Type +
      Latitude + Longitude) %>%
  add model(rf model)
rf_fit <- rf_wflow %>% fit(data = ames_train)
```

# Après le modèle linéaire, les forêts aléatoires (2)

```
lm_fit
## Preprocessor: Recipe
## Model: linear_reg()
##
## -- Preprocessor ------
## 5 Recipe Steps
##
## * step log()
## * step_other()
## * step_dummy()
## * step_interact()
## * step_ns()
##
## -- Model ------ [about ##
##
## Call:
## stats::lm(formula = ..y ~ ., data = data)
##
## Coefficients:
                                                        87
                               (Intercept)
##
```

# Après le modèle linéaire, les forêts aléatoires (2)

## Mtrv:

## Target node size:

```
rf_fit
## Preprocessor: Formula
## Model: rand forest()
##
## -- Preprocessor -----
## Sale Price ~ Neighborhood + Gr Liv Area + Year Built + Bldg Type +
##
     Latitude + Longitude
##
## -- Model -----
## Ranger result
##
## Call:
## ranger::ranger(x = maybe_data_frame(x), y = y, num.trees = ~1000, num.thre
##
## Type:
                           Regression
## Number of trees:
                           1000
## Sample size:
                           2199
## Number of independent variables:
```

5

88

### Comparaison naïve, erreur apparente (1)

```
estimate_perf <- function(model, dat) {</pre>
  # Capture the names of the objects used
  cl <- match.call()</pre>
  obj name <- as.character(cl$model)</pre>
  data name <- as.character(cl$dat)</pre>
  data_name <- gsub("ames_", "", data_name)</pre>
  # Estimate these metrics:
  reg_metrics <- metric_set(rmse, rsq)</pre>
  model %>%
    predict(dat) %>%
    bind cols(dat %>% select(Sale Price)) %>%
    reg_metrics(Sale_Price, .pred) %>%
    select(-.estimator) %>%
    mutate(object = obj name, data = data name)
```

# Comparaison naïve, erreur apparente (2)

# Comparaison naïve, erreur apparente (3)

```
estimate_perf(rf_fit, ames_train)
```

On préfère conserver les forêts aléatoires.

# Comparaison naïve, erreur apparente (4)

```
estimate_perf(rf_fit, ames_test)
## # A tibble: 2 x 4
```

Déception!

# **Principes**

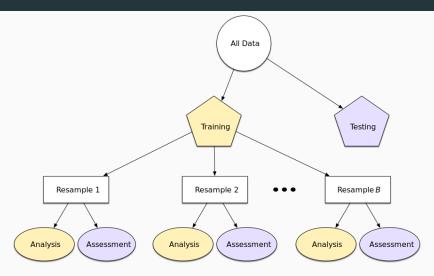


FIGURE 2 : Principe du rééchantillonage

# Cross-validation (1)

Exemple avec 3 blocs.

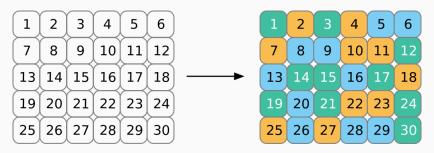


FIGURE 3: Validation croisée 3\_blocs

# Cross-validation (2)

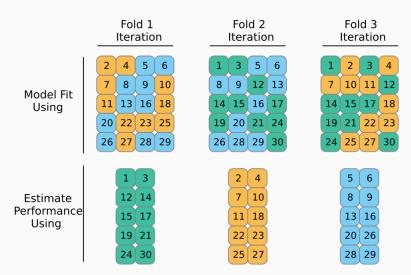


FIGURE 4: Validation croisée en action

### Bootstrap, tirage avec remise.

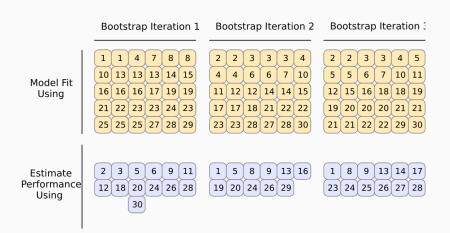


FIGURE 5: Bootstrapt

# Validation croisée en pratique (1)

Il faut comprendre que chaque ligne représente un découpage de l'échantillon **train** en deux sous-échantillon **analysis** et **assesment** un peu de la même façon qu'on avait découpé les données en **train** et **test** au début.

# Validation croisée en pratique (2)

### On peut retrouver ces données

```
# For the first fold:
ames_folds$splits[[1]] %>% analysis() %>% dim()

## [1] 1979   74
ames_folds$splits[[3]] %>% assessment() %>% dim()

## [1] 220   74
```

# Bootstrap en pratique

```
ames_bootstrap <- bootstraps(ames_train, times = 5)
ames_bootstrap %>%
  pluck("splits", 1) %>%
  assessment() %>%
  dim()
## [1] 806 74
```

# Principe

L'idée est d'évaluer les performances :

- · à chacune des itérations;
- en apprenant (fit()) sur l'échantillon d'analyse;
- en calculant la métrique sur les prédictions sur l'échaintillon d'évaluation

PUIS de moyenner les métriques sur l'enble des itérations

#### Remarque

Comme le même procédé est fait de façon systématique, il existe une fonction pour automatiser cette tâche : fit\_resamples() qui va remplacer fit() dans un workflow par exemple.

### Exemple (1)

##

##

##

##

## ##

##

##

```
keep pred <- control resamples(save pred = TRUE)</pre>
set.seed(130)
rf res <-
 rf wflow %>%
 fit resamples(resamples = ames folds, control = keep pred)
rf res
## # Resampling results
## # 10-fold cross-validation
## # A tibble: 10 x 5
     splits
##
                      id .metrics
                                              .notes
                                                             .predictions
##
     st>
                      <chr> <list>
                                          t>
                                                              st>
   1 <split [1979/220]> Fold01 <tibble [2 x 4]> <tibble [0 x 1]> <tibble [220 x 4~
##
```

2 <split [1979/220]> Fold02 <tibble [2 x 4]> <tibble [0 x 1]> <tibble [220 x 4~

3 <split [1979/220]> Fold03 <tibble [2 x 4]> <tibble [0 x 1]> <tibble [220 x 4~

4 <split [1979/220]> Fold04 <tibble [2 x 4]> <tibble [0 x 1]> <tibble [220 x 4~

5 <split [1979/220]> Fold05 <tibble [2 x 4]> <tibble [0 x 1]> <tibble [220 x 4~

6 <split [1979/220]> Fold06 <tibble [2 x 4]> <tibble [0 x 1]> <tibble [220 x 4~

7 <split [1979/220]> Fold07 <tibble [2 x 4]> <tibble [0 x 1]> <tibble [220 x 4~

8 <split [1979/220]> Fold08 <tibble [2 x 4]> <tibble [0 x 1]> <tibble [220 x 4~

9 <split [1979/220]> Fold09 <tibble [2 x 4]> <tibble [0 x 1]> <tibble [220 x 4~ ## 10 <split [1980/219]> Fold10 <tibble [2 x 4]> <tibble [0 x 1]> <tibble [219  $^{\times}$ 4~

### Exemple (2)

#### collect\_metrics(rf\_res)

### Exemple (3)

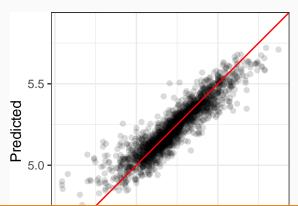
```
assess_res <- collect_predictions(rf_res)
assess_res</pre>
```

```
## # A tibble: 2.199 x 5
##
     id
            .pred .row Sale Price .config
     <chr> <dbl> <int>
                            <dhl> <chr>
##
##
   1 Fold01 5.23
                     11
                              5.27 Preprocessor1 Model1
   2 Fold01 5.29
##
                  47
                              5.24 Preprocessor1 Model1
##
   3 Fold01 5.32
                     52
                              5.27 Preprocessor1 Model1
##
    4 Fold01 5.44
                   94
                              5.39 Preprocessor1 Model1
    5 Fold01 5.03
##
                   111
                              5.07 Preprocessor1 Model1
##
   6 Fold01 5.17
                   115
                              5.25 Preprocessor1 Model1
##
   7 Fold01 5.36
                   117
                              5.26 Preprocessor1 Model1
##
   8 Fold01 5.26
                  118
                              5.28 Preprocessor1 Model1
##
   9 Fold01 5.15
                  134
                              4.99 Preprocessor1 Model1
## 10 Fold01 5.12
                   140
                              5.20 Preprocessor1 Model1
## # ... with 2.189 more rows
```

# Exemple (4)

C'est pas trop mal...

```
assess_res %>%
  ggplot(aes(x = Sale_Price, y = .pred)) +
  geom_point(alpha = .15) +
  geom_abline(col = "red") +
  coord_obs_pred() +
  ylab("Predicted")
```



# Comparaison de modèles

### Modèle linéaire avec splines

On redéfinit le workflow basé sur la recette avec les splines

```
lm_with_splines_res <-
lm_wflow %>%
fit_resamples(resamples = ames_folds, control = keep_pred)
```

### Modèle linéaire sans spline (1)

### On définit une nouvelle recette

### Modèle linéaire sans spline (2)

On définit un nouveau worflow basé sur cette recette

```
lm_no_splines_res <-
lm_wflow %>%
  remove_recipe() %>%
  add_recipe(no_spline_rec) %>%
  fit_resamples(resamples = ames_folds, control = keep_pred)
```

### Comparaison des modèles (1)

# Comparaison des modèles (2)

Les deux modèles sont très proches => on conserve le plus simple.

# Optimisation des paramètres d'un modèle

### Paramètre à optimiser dans une recette

La fonction tune() permet de délarer certains paramètres comme étant à optimiser.

```
ames rec <-
  recipe(Sale_Price ~ Neighborhood + Gr_Liv_Area + Year_Built + Bldg_Type +
           Latitude + Longitude, data = ames train) %>%
  step_log(Gr_Liv_Area, base = 10) %>%
  step other(Neighborhood, threshold = tune()) %>%
  step_dummy(all_nominal()) %>%
  step interact( ~ Gr Liv Area:starts with("Bldg Type ") ) %>%
  step_ns(Longitude, deg_free = tune("longitude df")) %>%
  step_ns(Latitude, deg_free = tune("latitude df"))
recipes_param <- parameters(ames_rec)</pre>
recipes_param
```

```
## Collection of 3 parameters for tuning
##
## identifier type object
## threshold threshold nparam[+]
## longitude df deg_free nparam[+]
## latitude df deg free nparam[+]
```

### Workflow (1)

```
wflow param <-
  workflow() %>%
  add_recipe(ames_rec) %>%
  add_model(rf_spec) %>%
  parameters()
wflow_param
## Collection of 6 parameters for tuning
##
      identifier
##
                      tvpe
                             obiect
##
                      mtry nparam[?]
            mtrv
                     trees nparam[+]
##
           trees
##
           min n
                     min n nparam[+]
       threshold threshold nparam[+]
##
##
    longitude df deg_free nparam[+]
     latitude df deg_free nparam[+]
##
##
## Model parameters needing finalization:
##
      # Randomly Selected Predictors ('mtry')
##
## See `?dials::finalize` or `?dials::update.parameters` for more information.
```

# Workflow (2)

Des fonctions spécifiques ont été créées.

```
mtry()
## # Randomly Selected Predictors (quantitative)
## Range: [1, ?]
threshold()
## Threshold (quantitative)
## Range: [0, 1]
```

# Workflow (3)

Mais attention aux conventions de nommage.

```
spline_degree()
```

```
## Piecewise Polynomial Degree (quantitative)
## Range: [1, 10]
```

### Workflow (4)

```
flow_param <- wflow_param %>%
  update(mtry = mtry(c(1, 10)))
flow_param
## Collection of 6 parameters for tuning
##
      identifier
##
                      type
                              object
##
                      mtry nparam[+]
            mtrv
##
           trees
                     trees nparam[+]
##
           min n
                     min_n nparam[+]
##
       threshold threshold nparam[+]
##
    longitude df deg free nparam[+]
     latitude df deg_free nparam[+]
##
```

# Workflow (5)

```
flow_param %>% pull_dials_object("trees")
```

```
## # Trees (quantitative)
## Range: [1, 2000]
```

# Workflow (5)

```
grid_regular(flow_param, levels = 2)
```

```
## # A tibble: 64 x 6
##
      mtry trees min_n threshold `longitude df` `latitude df`
##
     <int> <int> <int>
                          <dbl>
                                        <int>
                                                      <int>
##
         1
               1
                    2
        10
               1
                    2
##
##
       1 2000
                  2
##
        10 2000
##
       1
               1
                  40
              1
       10
                  40
##
##
       1 2000
                  40
                            0
##
       10 2000 40
##
        1
               1
                    2
                            0.1
## 10
        10
               1
                    2
                            0.1
## # ... with 54 more rows
```

Remarque 64 lignes = 2<sup>6</sup> (6 paramètres)

# Workflow(6)

```
rf_tune <- workflow() %>%
  add_recipe(ames_rec) %>%
  add_model(rf_spec) %>%
  tune_grid(
    vfold_cv(ames_train),
    grid = flow_param %>% grid_regular(levels = 2),
    metrics = metric_set(rmse)
)
```

### Workflow (7)

```
show best(rf tune. metric = "rmse") %>%
 glimpse()
## Rows: 5
## Columns: 12
## $ mtrv
                  <int> 10. 10. 10. 10. 10
## $ trees
                   <int> 2000, 2000, 2000, 2000, 2000
## $ min n
                  <int> 2. 2. 2. 2. 2
## $ threshold <dbl> 0.0, 0.1, 0.1, 0.1, 0.0
## $ `longitude df` <int> 1, 15, 15, 1, 15
## $ `latitude df` <int> 1, 15, 1, 15, 1
## $ .metric
                  <chr> "rmse", "rmse", "rmse", "rmse", "rmse"
## $ .estimator
                   <chr> "standard", "standard", "standard", "standard", "standa~
## $ mean
                   <dbl> 0.07007959, 0.07052850, 0.07067338, 0.07096647, 0.07134~
## $ n
                   <int> 10. 10. 10. 10. 10
## $ std err
                   <dbl> 0.001505927, 0.001789790, 0.001611371, 0.001664433, 0.0~
## $ .config
                  <chr> "Preprocessor1 Model4". "Preprocessor8 Model4". "Prepro~
```