Méthodes par arbres

L. Rouvière

10 novembre 2023

Table des matières

Présentation

Ce tutoriel présente quelques exercices d'application sur les méthodes par arbres. On pourra trouver

- les supports de cours associés à ce tutoriel ainsi que les données utilisées à l'adresse suivante https://lrouviere.github.io/page_perso/grande_dim.html ;
- le tutoriel sans les corrections à l'url https://lrouviere.github.io/TUTO_ARBRES/
- le tutoriel avec les corrigés (à certains moment) à l'url https://lrouviere.github.io/TUTO_ARBRES/correction.

Il est recommandé d'utiliser **mozilla firefox** pour lire le tutoriel.

Des connaissances de base en R et en statistique (modèles de régression) sont nécessaires. Le tutoriel se structure en 4 parties :

- **Arbres** : construction d'arbres et élagages avec `rpart`
- **Forêts aléatoires** : l'algorithme et le choix des paramètres avec `ranger` et `randomForest`
- **Gradient boosting**: l'algorithme et le choix des paramètres avec `gbm` et `xgboost`

partie I

Arbres

1 Méthodes CART

Les méthodes par arbres sont des algorithmes où la prévision s'effectue à partir de **moyennes locales**. Plus précisément, étant donné un échantillon $(x_1, y_1) \dots, (x_n, y_n)$, l'approche consiste à :

- construire une partition de l'espace de variables explicatives ($\mathbb{R}^p$) ;
- prédire la sortie d'une nouvelle observation x en faisant :
  - la moyenne des y_i pour les x_i qui sont dans la même classe que x si on est en régression ;
  - un vote à la majorité parmi les y_i tels que les x_i qui sont dans la même classe que x si on est en classification.

Bien entendu toute la difficulté est de trouver la "bonne partition" pour le problème d'intérêt. Il existe un grand nombre d'algorithmes qui permettent de trouver une partition. Le plus connu est l'algorithme **CART** (Breiman et al. 1984) où la partition est construite par **divisions successives** au moyen d'hyperplan orthogonaux aux axes de $\mathbb{R}^p$. L'algorithme est récursif : il va à chaque étape séparer un groupe d'observations (**nœuds**) en deux groupes (**nœuds fils**) en cherchant la meilleure variable et le meilleur seuil de coupure. Ce choix s'effectue à partir d'un critère **d'impureté** : la meilleure coupure est celle pour laquelle l'impureté des 2 nœuds fils sera minimale. Nous étudions cet algorithme dans cette partie.

1.1 Coupures CART en fonction de la nature des variables

Une partition CART s'obtient en séparant les observations en 2 selon une coupure parallèle aux axes puis en itérant ce procédé de séparation binaire sur les deux groupes… Par conséquent la première question à se poser est : pour un ensemble de données $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ fixé, comment obtenir la meilleure coupure ?

Comme souvent ce sont les données qui vont répondre à cette question. La sélection de la meilleur coupure s'effectue en introduisant une **fonction d'impureté** $\mathcal{J}$ qui va mesurer le degrés d'hétérogénéité d'un nœud $\mathcal{N}$. Cette fonction prendra de

- grandes valeurs pour les nœuds hétérogènes (les valeurs de Y diffèrent à l'intérieur du nœud) ;

- faibles valeurs pour les nœuds homogènes (les valeurs de Y sont proches à l'intérieur du nœud).

On utilise souvent comme fonction d'impureté :

- la **variance** en régression

$$\mathcal{I}(\mathcal{N}) = \frac{1}{|\mathcal{N}|} \sum_{i:x_i \in \mathcal{N}} (y_i - \overline{y}_{\mathcal{N}})^2,$$

  où $\overline{y}_{\mathcal{N}}$ désigne la moyenne des y_i dans $\mathcal{N}$.

- l'impureté de **Gini** en classification binaire

$$\mathcal{I}(\mathcal{N}) = 2p(\mathcal{N})(1 - p(\mathcal{N}))$$

  où $p(\mathcal{N})$ représente la proportion de 1 dans $\mathcal{N}$.

Les coupures considérées par l'algorithme CART sont des hyperplans orthogonaux aux axes de $\mathbb{R}^p$, choisir une coupure revient donc à choisir une variable j parmi les p variables explicatives et un seuil s dans $\mathbb{R}$. On peut donc représenter une coupure par un couple (j, s). Une fois l'impureté définie, on choisira la coupure (j, s) qui **maximise le gain d'impureté** entre le noeud père et ses deux noeuds fils :

$$\Delta(\mathcal{I}) = \mathbf{P}(\mathcal{N})\mathcal{I}(\mathcal{N}) - (\mathbf{P}(\mathcal{N}_1(j,s))\mathcal{I}(\mathcal{N}_1(j,s)) + \mathbf{P}(\mathcal{N}_2(j,s))\mathcal{I}(\mathcal{N}_2(j,s))$$

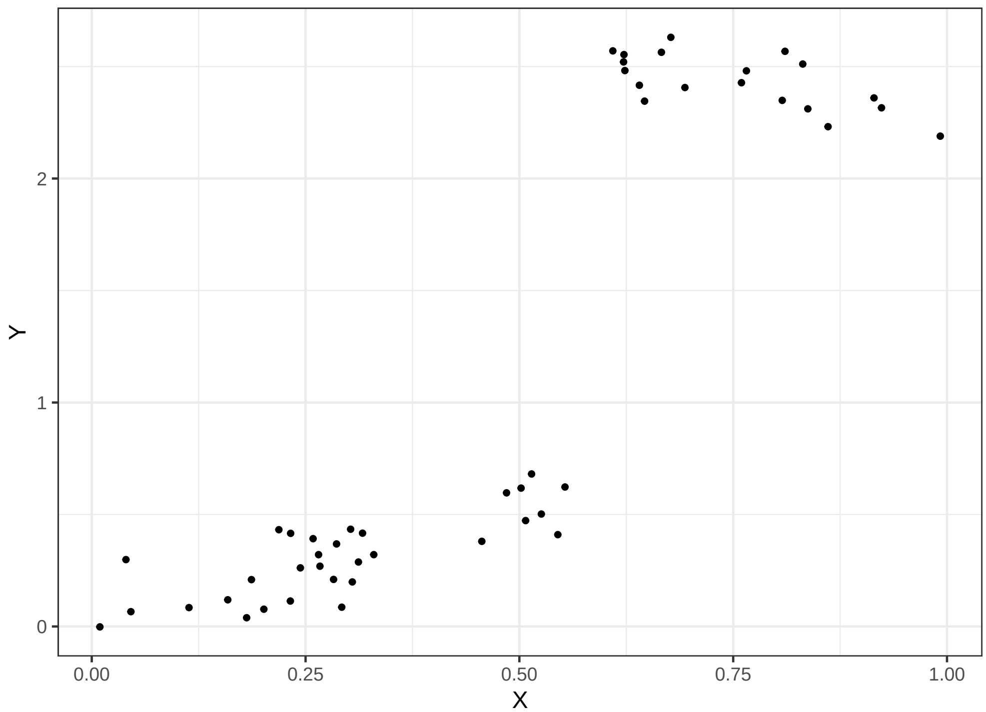
où

- $\mathcal{N}_1(j,s)$ et $\mathcal{N}_2(j,s)$ sont les 2 nœuds fils de $\mathcal{N}$ engendrés par la coupure (j,s) ;
- $\mathbf{P}(\mathcal{N})$ représente la proportion d'observations dans le nœud $\mathcal{N}$.

1.1.1 Arbres de régression

On considère le jeu de données suivant où le problème est d'expliquer la variable quantitative Y par la variable quantitative X.

```
n <- 50
set.seed(1234)
X <- runif(n)
set.seed(5678)
Y <- 1*X*(X<=0.6)+(-1*X+3.2)*(X>0.6)+rnorm(n,sd=0.1)
data1 <- data.frame(X,Y)
ggplot(data1)+aes(x=X,y=Y)+geom_point()
```



1. A l'aide de la fonction **rpart** du package **rpart**, construire un arbre permettant d'expliquer Y par X.

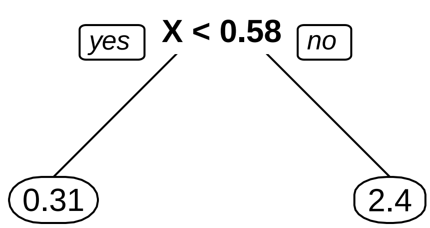
```
library(rpart)
```

```
tree <- rpart(Y~X,data=data1)
```

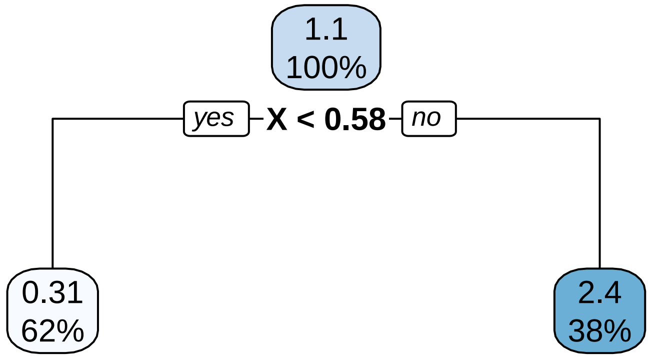
2. Visualiser l'arbre à l'aide des fonctions **prp** et **rpart.plot** du package **rpart.plot**.

```
library(rpart.plot)
```

```
prp(tree)
```



```r
rpart.plot(tree)
```



3. Écrire l'estimateur associé à l'arbre.

   On a un modèle de régression

$$Y = m(X) + \varepsilon$$

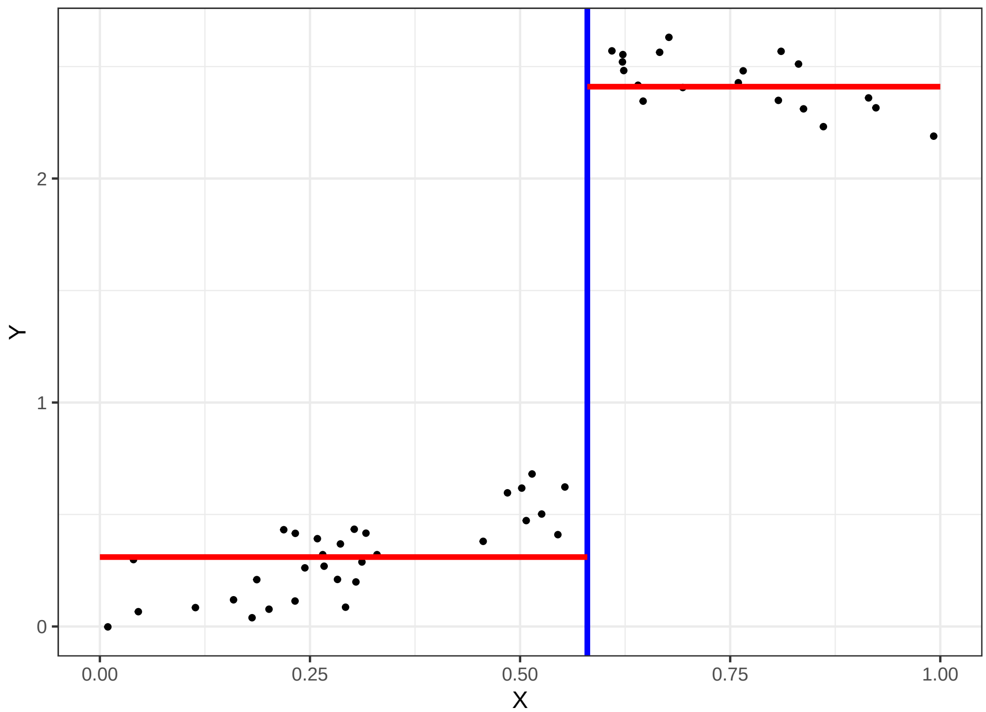
   où la fonction de régression (inconnue) $m(x)$ est estimée par

$$\widehat{m}(x) = 0.31\,\mathbf{1}_{x<0.58} + 2.4\,\mathbf{1}_{x\geq 0.58}.$$

4. Ajouter sur le graphe de la question 1 la partition définie par l'arbre ainsi que les valeurs prédites.

   On obtient une partition avec 2 nœuds terminaux. Cette partition peut être résumée par la question : "est-ce que X est plus petit que 0.58 ?".

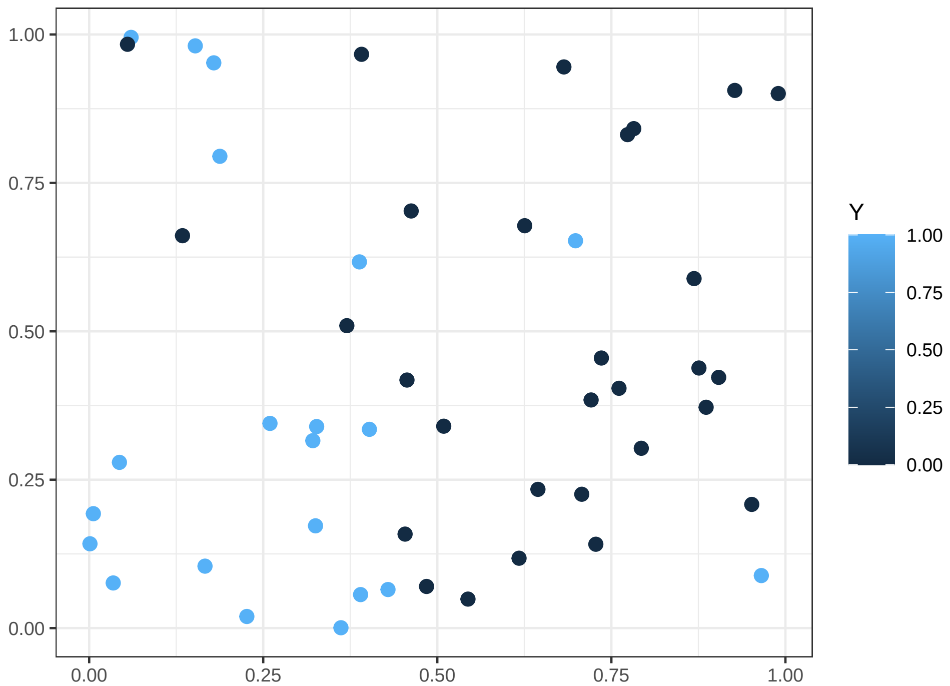
```r
df1 <- data.frame(x=c(0,0.58),xend=c(0.58,1),
                  y=c(0.31,2.41),yend=c(0.31,2.41))
ggplot(data1)+aes(x=X,y=Y)+geom_point()+
  geom_vline(xintercept = 0.58,size=1,color="blue")+
  geom_segment(data=df1,aes(x=x,y=y,xend=xend,yend=yend),
             size=1,color="red")
```



1.1.2 Arbres de classification

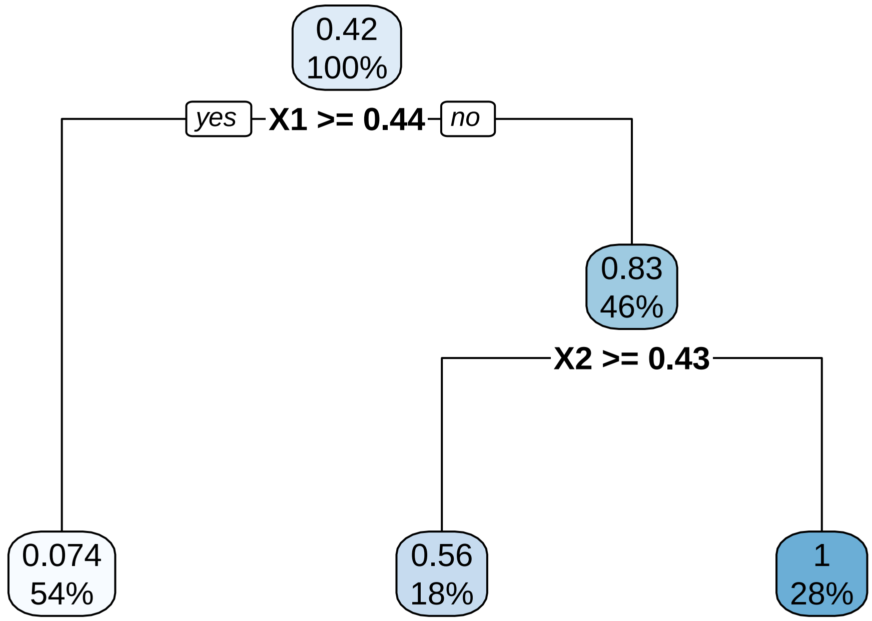
On considère les données suivantes où le problème est d'expliquer la variable binaire Y par deux variables quantitatives X_1 et X_2.

```
n <- 50
set.seed(12345)
X1 <- runif(n)
set.seed(5678)
X2 <- runif(n)
Y <- rep(0,n)
set.seed(54321)
Y[X1<=0.45] <- rbinom(sum(X1<=0.45),1,0.85)
set.seed(52432)
Y[X1>0.45] <- rbinom(sum(X1>0.45),1,0.15)
data2 <- data.frame(X1,X2,Y)
ggplot(data2)+aes(x=X1,y=X2,color=Y)+geom_point(size=2)+
  scale_x_continuous(name="")+
  scale_y_continuous(name="")
```



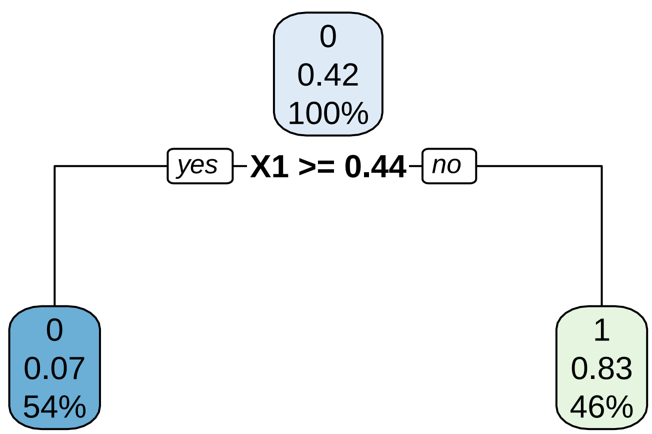
1. Construire un arbre permettant d'expliquer Y par X_1 et X_2. Représenter l'arbre et identifier l'éventuel problème.

```
tree <- rpart(Y~.,data=data2)
rpart.plot(tree)
```



On observe que l'arbre construit est un arbre de ***régression, pas de classification****. Cela vient du fait que Y est considérée par* ***R*** *comme une variable quantitative, il faut la convertir en facteur.*

```
data2$Y <- as.factor(data2$Y)
tree <- rpart(Y~.,data=data2)
rpart.plot(tree)
```



Tout est OK maintenant !

2. Écrire la règle de classification ainsi que la fonction de score définies par l'arbre.

La règle de classification est

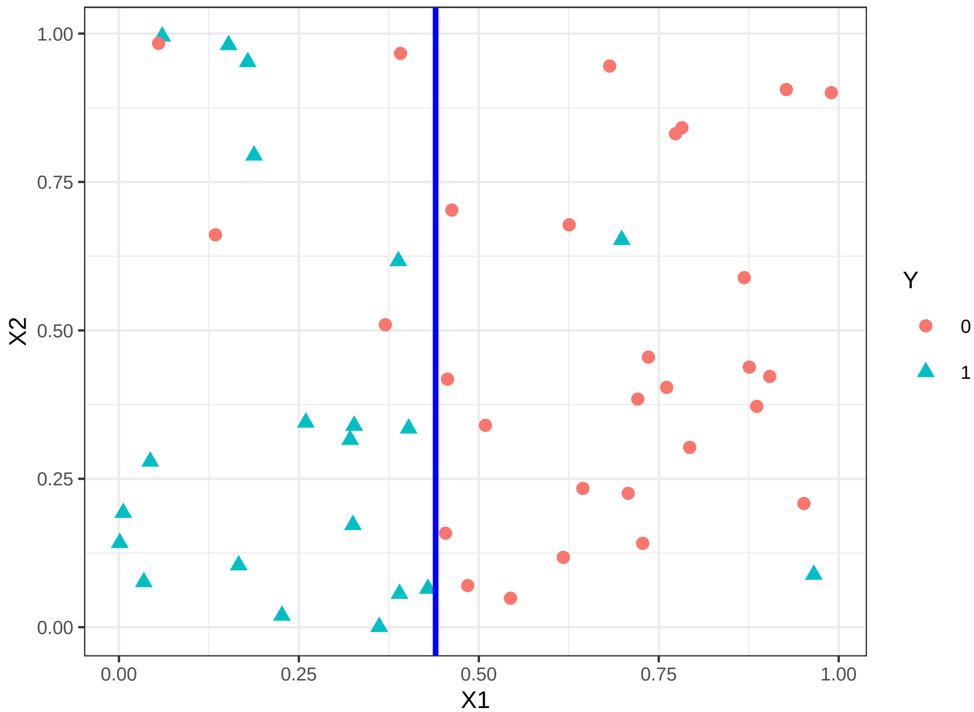
$$\widehat{g}(x) = \mathbf{1}_{X_1 < 0.44}.$$

La fonction de score est donnée par

$$\widehat{S}(x) = \widehat{P}(Y = 1|X = x) = 0.83\mathbf{1}_{X_1 < 0.44} + 0.07\mathbf{1}_{X_1 \geq 0.44}.$$

3. Ajouter sur le graphe de la question 1 la partition définie par l'arbre.

```r
ggplot(data2)+aes(x=X1,y=X2,color=Y,shape=Y)+geom_point(size=2)+
  geom_vline(xintercept = 0.44,size=1,color="blue")
```



1.1.3 Entrée qualitative

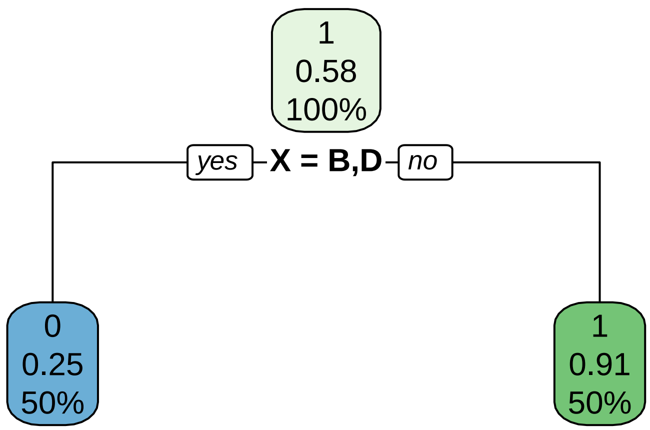
On considère les données

```r
n <- 100
X <- factor(rep(c("A","B","C","D"),n))
set.seed(1234)
```

```r
Y[X=="A"] <- rbinom(sum(X=="A"),1,0.9)
Y[X=="B"] <- rbinom(sum(X=="B"),1,0.25)
Y[X=="C"] <- rbinom(sum(X=="C"),1,0.8)
Y[X=="D"] <- rbinom(sum(X=="D"),1,0.2)
Y <- as.factor(Y)
data3 <- data.frame(X,Y)
```

1. Construire un arbre permettant d'expliquer Y par X.

```r
tree3 <- rpart(Y~.,data=data3)
rpart.plot(tree3)
```



2. Expliquer la manière dont l'arbre est construit dans ce cadre là.

La variable étant qualitative, on ne cherche pas un seuil de coupure pour diviser un nœud en 2. On va ici considérer toutes les partitions binaires de l'ensemble $\{A, B, C, D\}$*. La meilleure partition est* $\{\{A, C\}, \{B, D\}\}$*.*

1.2 Élagage

Le procédé de coupe présenté précédemment permet de définir un très grand nombre d'arbres à partir d'un jeu de données (arbre sans coupure, avec une coupure, deux coupures…). Se pose alors la question de trouver le **meilleur arbre** parmi tous les arbres possibles. Une première idée serait de choisir parmi tous les arbres possibles celui qui optimise un critère de performance. Cette approche, bien que cohérente, n'est généralement pas possible à mettre en œuvre en pratique car le nombre d'arbres à considérer est souvent trop important.

La méthode CART propose une procédure permettant de choisir automatiquement un arbre en 3 étapes :

- On construit un **arbre maximal** (très profond) $\mathcal{T}_{max}$;
- On sélectionne une **suite d'arbres emboités** :

$$\mathcal{T}_{max} = \mathcal{T}_0 \supset \mathcal{T}_1 \supset \cdots \supset \mathcal{T}_K.$$

  La sélection s'effectue en optimisant un critère **Cout/complexité** qui permet de réguler le compromis entre **ajustement** et **complexité** de l'arbre.
- On **sélectionne un arbre** dans cette sous-suite en optimisant un critère de performance.

Cette approche revient à choisir un sous-arbre de l'arbre $\mathcal{T}_{\max}$, c'est-à-dire à enlever des branches à $T_{\max}$, c'est pourquoi on parle **d'élagage**.

1.2.1 Élagage pour un problème de régression

On considère les données **Carseats** du package **ISLR**.

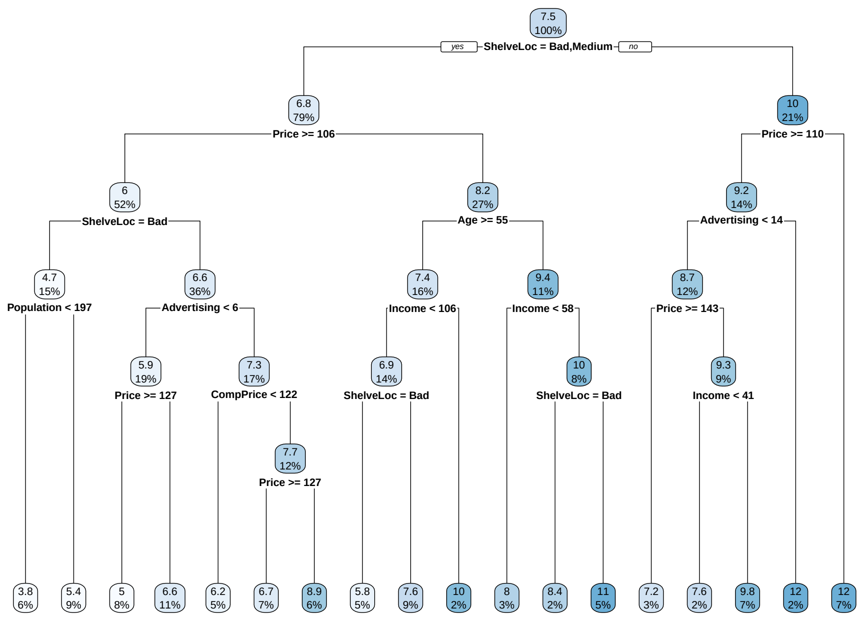
```
library(ISLR)
data(Carseats)
summary(Carseats)
```

```
     Sales          CompPrice       Income        Advertising    
 Min.   : 0.000   Min.   : 77   Min.   : 21.00   Min.   : 0.000  
 1st Qu.: 5.390   1st Qu.:115   1st Qu.: 42.75   1st Qu.: 0.000  
 Median : 7.490   Median :125   Median : 69.00   Median : 5.000  
 Mean   : 7.496   Mean   :125   Mean   : 68.66   Mean   : 6.635  
 3rd Qu.: 9.320   3rd Qu.:135   3rd Qu.: 91.00   3rd Qu.:12.000  
 Max.   :16.270   Max.   :175   Max.   :120.00   Max.   :29.000  
   Population        Price        ShelveLoc        Age          Education   
 Min.   : 10.0   Min.   : 24.0   Bad   : 96   Min.   :25.00   Min.   :10.0  
 1st Qu.:139.0   1st Qu.:100.0   Good  : 85   1st Qu.:39.75   1st Qu.:12.0  
 Median :272.0   Median :117.0   Medium:219   Median :54.50   Median :14.0  
 Mean   :264.8   Mean   :115.8                Mean   :53.32   Mean   :13.9  
 3rd Qu.:398.5   3rd Qu.:131.0                3rd Qu.:66.00   3rd Qu.:16.0  
 Max.   :509.0   Max.   :191.0                Max.   :80.00   Max.   :18.0  
 Urban       US     
 No :118   No :142  
 Yes:282   Yes:258  
```

On cherche ici à expliquer la variable quantitative **Sales** par les autres variables.

1. Construire un arbre permettant de répondre au problème.

```r
tree <- rpart(Sales~.,data=Carseats)
rpart.plot(tree)
```



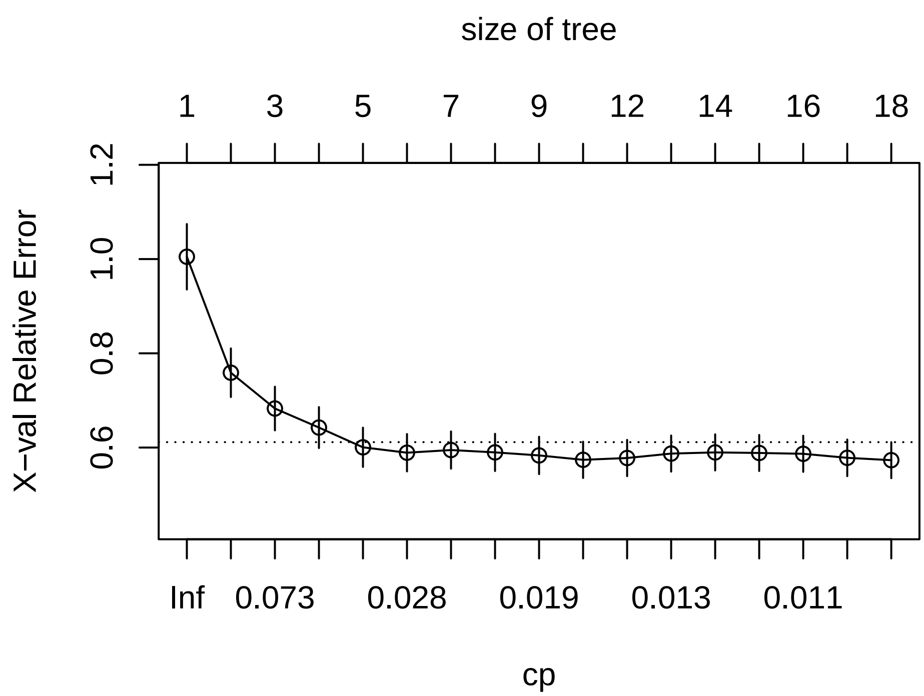
2. Expliquer les sorties de la fonction **printcp** appliquée à l'arbre de la question précédente et calculer le dernier terme de la colonne **rel error**.

```r
printcp(tree)
```

```
Regression tree:
rpart(formula = Sales ~ ., data = Carseats)

Variables actually used in tree construction:
[1] Advertising Age         CompPrice   Income      Population  Price
[7] ShelveLoc

Root node error: 3182.3/400 = 7.9557

n= 400
```

```
          CP nsplit rel error  xerror     xstd
1  0.250510      0   1.00000 1.00492 0.069530
2  0.105073      1   0.74949 0.75877 0.051613
3  0.051121      2   0.64442 0.68283 0.046333
4  0.045671      3   0.59330 0.64240 0.043550
5  0.033592      4   0.54763 0.60051 0.041716
6  0.024063      5   0.51403 0.58903 0.039691
7  0.023948      6   0.48997 0.59472 0.039561
8  0.022163      7   0.46602 0.58972 0.039539
9  0.016043      8   0.44386 0.58329 0.039731
10 0.014027      9   0.42782 0.57392 0.038516
11 0.013145     11   0.39976 0.57780 0.038529
12 0.012711     12   0.38662 0.58719 0.038339
13 0.012147     13   0.37391 0.58970 0.038419
14 0.011888     14   0.36176 0.58850 0.038291
15 0.010778     15   0.34987 0.58673 0.038383
16 0.010506     16   0.33909 0.57818 0.038886
17 0.010000     17   0.32859 0.57320 0.038277
```

```r
plotcp(tree)
```



On peut lire des informations sur la suite d'arbres emboîtés, cette suite est de longueur

17 ici. Dans le dernier tableau, chaque ligne représente un arbre de la suite et on a dans les colonnes :

- ***CP*** *: le paramètre de complexité, plus il est petit plus l'arbre est profond ;*
- ***nsplit*** *: nombre de coupures de l'arbre ;*
- ***rel error*** *contient l'erreur calculée sur les données d'apprentissage. Cette erreur décroit lorsque la complexité augmente et peut être interprétée comme une erreur d'ajustement ;*
- ***xerror*** *: contient l'erreur calculée par validation croisée. Elle peut être interprétée comme une erreur de prévision ;*
- ***xstd*** *correspond à l'écart type estimé de l'erreur.*

*Les types d'erreurs dépendent du problème considéré. Vu qu'on est ici sur un problème de régression, c'est l'**erreur quadratique moyenne** qui est considérée. De plus ces erreurs sont normalisées par rapport à l'erreur de l'arbre racine (sans coupure). Ainsi on retrouve l'erreur demandée avec*

```
Carseats |> mutate(fitted=predict(tree)) |>
  summarise(MSE=mean((fitted-Sales)^2)/mean((Sales-mean(Sales))^2))
```

```
        MSE
1 0.3285866
```

3. Construire une suite d'arbres plus grandes en jouant sur les paramètres `cp` et `minsplit` de la fonction **rpart**.

Il suffit de diminuer les valeurs par défaut de ces paramètres.

```
set.seed(123)
tree1 <- rpart(Sales~.,data=Carseats,cp=0.00001,minsplit=2)
printcp(tree1)
```

```

Regression tree:
rpart(formula = Sales ~ ., data = Carseats, cp = 1e-05, minsplit = 2)

Variables actually used in tree construction:
 [1] Advertising Age         CompPrice   Education   Income      Population
 [7] Price       ShelveLoc   Urban       US

Root node error: 3182.3/400 = 7.9557

n= 400
```

	CP	nsplit	rel error	xerror	xstd
1	2.5051e-01	0	1.00000000	1.00632	0.069635
2	1.0507e-01	1	0.74948961	0.75985	0.051802
3	5.1121e-02	2	0.64441706	0.67592	0.044633
4	4.5671e-02	3	0.59329646	0.67720	0.043488
5	3.3592e-02	4	0.54762521	0.64640	0.043209
6	2.4063e-02	5	0.51403284	0.64674	0.041192
7	2.3948e-02	6	0.48997005	0.63825	0.041103
8	2.2163e-02	7	0.46602225	0.63234	0.040983
9	1.6043e-02	8	0.44385897	0.61886	0.039262
10	1.4027e-02	9	0.42781645	0.61392	0.039072
11	1.3145e-02	11	0.39976237	0.61848	0.039060
12	1.2711e-02	12	0.38661699	0.62070	0.039293
13	1.2147e-02	13	0.37390609	0.62158	0.039768
14	1.1888e-02	14	0.36175900	0.62655	0.039848
15	1.0778e-02	15	0.34987122	0.61565	0.039116
16	1.0506e-02	16	0.33909277	0.62089	0.039292
17	1.0301e-02	17	0.32858663	0.62477	0.039223
18	9.8052e-03	18	0.31828518	0.62074	0.039205
19	9.5324e-03	20	0.29867475	0.62340	0.039696
20	9.3098e-03	21	0.28914234	0.61989	0.039722
21	8.6039e-03	22	0.27983257	0.62566	0.040168
22	8.5728e-03	23	0.27122871	0.61686	0.039659
23	7.7737e-03	25	0.25408305	0.62076	0.040607
24	7.4353e-03	26	0.24630936	0.61125	0.040480
25	6.2838e-03	28	0.23143882	0.59597	0.039395
26	6.1242e-03	29	0.22515504	0.60994	0.040169
27	5.6953e-03	30	0.21903085	0.59896	0.039173
28	5.5687e-03	31	0.21333555	0.60151	0.039820
29	5.4134e-03	32	0.20776686	0.60041	0.039844
30	5.1373e-03	33	0.20235343	0.58408	0.039291
31	4.9581e-03	34	0.19721608	0.58631	0.039265
32	4.8270e-03	35	0.19225798	0.58969	0.039393
33	4.5558e-03	36	0.18743102	0.59070	0.039253
34	4.5456e-03	37	0.18287525	0.58833	0.038997
35	4.3739e-03	38	0.17832965	0.58757	0.038982
36	4.3307e-03	39	0.17395578	0.58716	0.038985
37	4.2485e-03	40	0.16962503	0.58706	0.039096
38	4.0980e-03	41	0.16537650	0.58472	0.039006
39	4.0525e-03	42	0.16127847	0.58935	0.039188
40	4.0054e-03	43	0.15722596	0.58756	0.038706
41	3.6917e-03	44	0.15322052	0.60472	0.039435
42	3.6352e-03	45	0.14952883	0.60179	0.039308

43	3.5301e-03	46	0.14589367	0.60395	0.039286
44	3.5196e-03	47	0.14236356	0.60402	0.039279
45	2.8653e-03	48	0.13884396	0.59319	0.038874
46	2.8565e-03	49	0.13597868	0.58540	0.039159
47	2.8565e-03	50	0.13312217	0.58540	0.039159
48	2.7253e-03	51	0.13026571	0.58760	0.039209
49	2.6841e-03	52	0.12754044	0.58585	0.038937
50	2.6829e-03	54	0.12217220	0.58743	0.038915
51	2.6660e-03	55	0.11948928	0.58794	0.038911
52	2.4588e-03	56	0.11682326	0.58713	0.038864
53	2.3693e-03	57	0.11436443	0.57598	0.038151
54	2.3018e-03	58	0.11199508	0.57746	0.038203
55	2.2746e-03	60	0.10739152	0.58523	0.039585
56	2.2540e-03	61	0.10511688	0.58489	0.039595
57	2.1781e-03	62	0.10286290	0.58466	0.039588
58	2.1645e-03	63	0.10068483	0.58575	0.039509
59	2.0950e-03	64	0.09852033	0.58152	0.039361
60	2.0945e-03	65	0.09642538	0.58236	0.039446
61	2.0740e-03	66	0.09433084	0.58431	0.039597
62	1.8864e-03	67	0.09225680	0.57892	0.039320
63	1.8413e-03	68	0.09037038	0.58456	0.039520
64	1.7921e-03	69	0.08852905	0.58578	0.040068
65	1.7167e-03	70	0.08673697	0.58533	0.039995
66	1.6766e-03	71	0.08502031	0.58336	0.039558
67	1.6704e-03	72	0.08334367	0.58559	0.039491
68	1.6064e-03	73	0.08167332	0.58367	0.039470
69	1.6055e-03	74	0.08006697	0.58229	0.039276
70	1.5103e-03	75	0.07846149	0.58881	0.039911
71	1.4967e-03	76	0.07695120	0.58862	0.039908
72	1.4907e-03	77	0.07545453	0.59042	0.040029
73	1.4007e-03	78	0.07396387	0.60029	0.040368
74	1.4002e-03	79	0.07256317	0.60033	0.040358
75	1.3613e-03	80	0.07116301	0.60705	0.040742
76	1.3589e-03	81	0.06980172	0.61439	0.041431
77	1.3462e-03	82	0.06844282	0.61457	0.041431
78	1.3351e-03	83	0.06709659	0.61405	0.041405
79	1.3304e-03	84	0.06576144	0.61487	0.041409
80	1.3146e-03	85	0.06443102	0.61487	0.041409
81	1.2795e-03	86	0.06311644	0.61217	0.041323
82	1.2412e-03	87	0.06183696	0.61153	0.041238
83	1.2373e-03	88	0.06059575	0.61610	0.041280
84	1.2135e-03	89	0.05935843	0.61519	0.041307
85	1.2002e-03	91	0.05693148	0.61097	0.041152

86	1.1269e-03	92	0.05573126	0.61178	0.041184
87	1.0919e-03	93	0.05460435	0.60862	0.041145
88	1.0898e-03	94	0.05351243	0.60925	0.041145
89	1.0864e-03	95	0.05242260	0.60925	0.041145
90	1.0646e-03	96	0.05133621	0.60693	0.041083
91	1.0116e-03	97	0.05027156	0.60260	0.040185
92	9.5940e-04	98	0.04925996	0.60122	0.040328
93	8.9105e-04	99	0.04830056	0.60234	0.040289
94	8.8465e-04	100	0.04740951	0.60105	0.040619
95	8.7611e-04	101	0.04652486	0.60055	0.040661
96	8.5644e-04	102	0.04564875	0.60111	0.040661
97	8.4568e-04	103	0.04479231	0.60150	0.040657
98	8.3004e-04	104	0.04394663	0.60427	0.040867
99	8.0748e-04	105	0.04311659	0.60590	0.040864
100	7.9944e-04	106	0.04230912	0.60627	0.040864
101	7.5680e-04	107	0.04150968	0.61302	0.041688
102	7.4082e-04	108	0.04075288	0.61164	0.041485
103	7.4043e-04	109	0.04001206	0.61183	0.041479
104	7.3510e-04	110	0.03927163	0.61163	0.041483
105	7.0107e-04	111	0.03853653	0.61182	0.041563
106	6.9184e-04	112	0.03783546	0.60947	0.041716
107	6.7585e-04	113	0.03714362	0.60947	0.041716
108	6.7373e-04	114	0.03646776	0.60689	0.041731
109	6.7173e-04	115	0.03579403	0.60689	0.041731
110	6.6783e-04	116	0.03512230	0.60591	0.041707
111	6.6518e-04	117	0.03445448	0.60613	0.041700
112	6.6451e-04	118	0.03378929	0.60613	0.041700
113	6.0900e-04	119	0.03312478	0.60732	0.041781
114	6.0343e-04	120	0.03251578	0.61077	0.042036
115	5.9465e-04	121	0.03191235	0.61269	0.042102
116	5.8550e-04	123	0.03072304	0.61208	0.042081
117	5.8340e-04	124	0.03013754	0.61187	0.042084
118	5.6972e-04	125	0.02955414	0.61258	0.042084
119	5.6433e-04	126	0.02898442	0.61258	0.042084
120	5.6323e-04	127	0.02842009	0.61228	0.042075
121	5.4821e-04	128	0.02785686	0.60943	0.042014
122	5.4339e-04	131	0.02621222	0.60980	0.042021
123	5.1968e-04	132	0.02566882	0.60983	0.042171
124	5.0869e-04	133	0.02514915	0.60906	0.042168
125	5.0157e-04	134	0.02464045	0.60828	0.042297
126	4.7302e-04	135	0.02413889	0.61003	0.042276
127	4.6969e-04	136	0.02366587	0.60911	0.042228
128	4.6775e-04	137	0.02319618	0.61118	0.042218

129	4.6669e-04	138	0.02272842	0.61118	0.042218
130	4.5761e-04	139	0.02226174	0.60991	0.042232
131	4.5283e-04	140	0.02180413	0.60956	0.042235
132	4.5270e-04	141	0.02135130	0.61176	0.042356
133	4.5251e-04	142	0.02089861	0.61176	0.042356
134	4.4875e-04	143	0.02044610	0.61176	0.042356
135	4.4874e-04	144	0.01999735	0.61164	0.042360
136	4.4666e-04	145	0.01954861	0.61164	0.042360
137	4.3805e-04	146	0.01910194	0.61410	0.042468
138	4.2159e-04	147	0.01866389	0.61468	0.042470
139	4.1179e-04	148	0.01824230	0.61626	0.042531
140	3.8646e-04	149	0.01783051	0.61657	0.042546
141	3.6959e-04	150	0.01744404	0.61985	0.042911
142	3.3035e-04	151	0.01707446	0.62146	0.043372
143	3.0799e-04	152	0.01674411	0.62258	0.043333
144	3.0672e-04	153	0.01643612	0.62274	0.043330
145	3.0672e-04	154	0.01612940	0.62274	0.043330
146	3.0672e-04	155	0.01582268	0.62274	0.043330
147	3.0544e-04	156	0.01551596	0.62274	0.043330
148	3.0094e-04	157	0.01521052	0.62395	0.043352
149	2.9757e-04	158	0.01490958	0.62467	0.043363
150	2.8981e-04	159	0.01461201	0.62274	0.043380
151	2.8923e-04	160	0.01432220	0.62270	0.043354
152	2.8782e-04	161	0.01403296	0.62400	0.043499
153	2.8635e-04	162	0.01374515	0.62400	0.043499
154	2.8189e-04	163	0.01345879	0.62219	0.043487
155	2.8173e-04	164	0.01317690	0.62253	0.043478
156	2.6988e-04	165	0.01289517	0.62531	0.043675
157	2.6283e-04	166	0.01262530	0.62452	0.043671
158	2.5737e-04	167	0.01236246	0.62258	0.043382
159	2.5139e-04	168	0.01210509	0.62028	0.043359
160	2.5003e-04	169	0.01185370	0.61871	0.043243
161	2.3771e-04	170	0.01160367	0.61747	0.043178
162	2.3512e-04	171	0.01136596	0.61853	0.043182
163	2.2600e-04	172	0.01113084	0.61800	0.043165
164	2.1796e-04	173	0.01090483	0.61542	0.043149
165	2.1590e-04	174	0.01068688	0.61466	0.043133
166	2.1121e-04	175	0.01047098	0.61339	0.043099
167	2.0973e-04	176	0.01025977	0.61238	0.043036
168	2.0949e-04	178	0.00984031	0.61238	0.043036
169	2.0779e-04	179	0.00963081	0.61220	0.043040
170	2.0120e-04	180	0.00942302	0.61280	0.043025
171	2.0025e-04	181	0.00922182	0.61280	0.043025

172	1.9247e-04	182	0.00902157	0.61353	0.043060
173	1.8668e-04	183	0.00882910	0.61383	0.043085
174	1.7976e-04	184	0.00864242	0.61349	0.043056
175	1.6630e-04	185	0.00846266	0.61532	0.043131
176	1.6596e-04	186	0.00829637	0.61615	0.043142
177	1.6594e-04	187	0.00813041	0.61615	0.043142
178	1.6347e-04	188	0.00796447	0.61623	0.043140
179	1.6290e-04	189	0.00780100	0.61623	0.043140
180	1.5712e-04	190	0.00763810	0.61644	0.043133
181	1.5619e-04	191	0.00748098	0.61562	0.043119
182	1.5210e-04	192	0.00732479	0.61504	0.043100
183	1.4745e-04	193	0.00717270	0.61484	0.043106
184	1.4354e-04	194	0.00702525	0.61434	0.043095
185	1.3883e-04	195	0.00688171	0.61338	0.043090
186	1.3883e-04	196	0.00674288	0.61357	0.043102
187	1.3613e-04	197	0.00660405	0.61349	0.043104
188	1.3589e-04	198	0.00646792	0.61374	0.043123
189	1.3299e-04	199	0.00633203	0.61225	0.043031
190	1.3241e-04	200	0.00619904	0.61244	0.043040
191	1.3011e-04	201	0.00606664	0.61182	0.043038
192	1.2674e-04	202	0.00593652	0.61207	0.043052
193	1.2674e-04	203	0.00580978	0.61250	0.043040
194	1.2167e-04	204	0.00568304	0.61345	0.043093
195	1.2167e-04	205	0.00556136	0.61264	0.043092
196	1.2105e-04	206	0.00543969	0.61264	0.043092
197	1.1352e-04	207	0.00531864	0.61255	0.043081
198	1.0898e-04	208	0.00520512	0.61236	0.043083
199	1.0860e-04	209	0.00509614	0.61259	0.043076
200	1.0592e-04	210	0.00498754	0.61259	0.043076
201	1.0265e-04	211	0.00488162	0.61474	0.043307
202	9.6794e-05	212	0.00477896	0.61439	0.043163
203	9.5532e-05	213	0.00468217	0.61428	0.043175
204	9.4042e-05	214	0.00458664	0.61450	0.043168
205	9.1257e-05	215	0.00449260	0.61509	0.043172
206	9.0753e-05	216	0.00440134	0.61548	0.043188
207	8.9624e-05	217	0.00431059	0.61573	0.043180
208	8.8270e-05	218	0.00422096	0.61566	0.043182
209	8.7486e-05	219	0.00413269	0.61545	0.043188
210	8.3729e-05	220	0.00404521	0.61466	0.043180
211	8.1451e-05	221	0.00396148	0.61426	0.043159
212	7.9204e-05	222	0.00388003	0.61366	0.043149
213	7.7471e-05	224	0.00372162	0.61346	0.043143
214	7.6989e-05	225	0.00364415	0.61346	0.043143

215	7.4805e-05	227	0.00349017	0.61288	0.043144
216	7.2925e-05	228	0.00341536	0.61356	0.043182
217	7.2160e-05	229	0.00334244	0.61239	0.043184
218	7.1694e-05	230	0.00327028	0.61239	0.043184
219	6.9264e-05	231	0.00319859	0.61315	0.043444
220	6.8065e-05	232	0.00312932	0.61316	0.043445
221	6.8065e-05	233	0.00306126	0.61363	0.043442
222	6.7977e-05	234	0.00299319	0.61363	0.043442
223	6.6383e-05	235	0.00292522	0.61341	0.043441
224	6.6383e-05	236	0.00285883	0.61341	0.043441
225	6.6383e-05	237	0.00279245	0.61341	0.043441
226	6.6203e-05	238	0.00272607	0.61341	0.043441
227	6.5697e-05	239	0.00265986	0.61341	0.043441
228	6.5373e-05	240	0.00259417	0.61341	0.043441
229	6.4356e-05	241	0.00252879	0.61327	0.043444
230	6.3372e-05	242	0.00246444	0.61244	0.043314
231	6.2228e-05	243	0.00240107	0.61268	0.043307
232	6.2225e-05	244	0.00233884	0.61268	0.043307
233	6.0397e-05	245	0.00227661	0.61266	0.043308
234	5.8464e-05	246	0.00221622	0.61302	0.043300
235	5.8137e-05	248	0.00209929	0.61288	0.043302
236	5.4694e-05	249	0.00204115	0.61454	0.043304
237	5.2855e-05	251	0.00193176	0.61433	0.043357
238	5.1331e-05	252	0.00187891	0.61341	0.043318
239	5.1048e-05	253	0.00182758	0.61222	0.043262
240	4.9324e-05	255	0.00172548	0.61222	0.043262
241	4.9278e-05	256	0.00167616	0.61214	0.043261
242	4.9278e-05	257	0.00162688	0.61214	0.043261
243	4.9273e-05	258	0.00157760	0.61214	0.043261
244	4.5298e-05	259	0.00152833	0.61225	0.043257
245	4.3577e-05	260	0.00148303	0.61182	0.043250
246	4.3370e-05	261	0.00143945	0.61153	0.043256
247	4.2422e-05	262	0.00139608	0.61153	0.043256
248	4.0867e-05	263	0.00135366	0.61087	0.043246
249	3.9280e-05	264	0.00131279	0.61059	0.043234
250	3.7840e-05	265	0.00127351	0.61039	0.043239
251	3.7840e-05	266	0.00123567	0.61013	0.043231
252	3.7840e-05	267	0.00119783	0.61013	0.043231
253	3.6955e-05	268	0.00115999	0.61040	0.043226
254	3.5847e-05	269	0.00112304	0.61040	0.043226
255	3.5216e-05	270	0.00108719	0.61040	0.043226
256	3.4708e-05	271	0.00105197	0.61069	0.043225
257	3.4032e-05	272	0.00101727	0.61083	0.043221

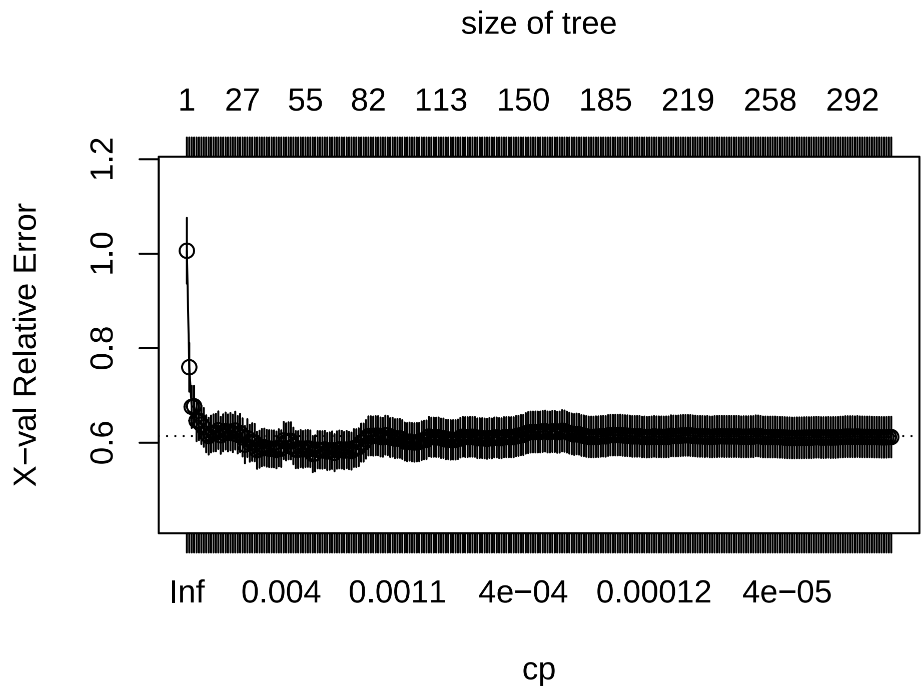
```
258 3.3519e-05    273 0.00098323 0.61077 0.043223
259 3.3247e-05    274 0.00094971 0.61077 0.043223
260 2.9981e-05    275 0.00091647 0.61135 0.043216
261 2.9052e-05    276 0.00088649 0.61163 0.043224
262 2.7245e-05    277 0.00085744 0.61167 0.043189
263 2.5663e-05    278 0.00083019 0.61090 0.043097
264 2.5663e-05    279 0.00080453 0.61090 0.043097
265 2.2814e-05    280 0.00077886 0.61105 0.043094
266 2.2688e-05    281 0.00075605 0.61153 0.043120
267 2.2128e-05    282 0.00073336 0.61091 0.043128
268 2.1877e-05    283 0.00071123 0.61118 0.043154
269 2.1510e-05    284 0.00068936 0.61118 0.043154
270 2.0132e-05    285 0.00066785 0.61155 0.043169
271 2.0132e-05    286 0.00064772 0.61209 0.043176
272 1.8231e-05    287 0.00062758 0.61222 0.043173
273 1.8163e-05    288 0.00060935 0.61289 0.043189
274 1.7618e-05    289 0.00059119 0.61289 0.043189
275 1.7618e-05    290 0.00057357 0.61289 0.043189
276 1.7608e-05    291 0.00055595 0.61289 0.043189
277 1.7110e-05    292 0.00053834 0.61261 0.043152
278 1.5272e-05    293 0.00052123 0.61323 0.043154
279 1.5099e-05    294 0.00050596 0.61262 0.043101
280 1.4162e-05    296 0.00047576 0.61252 0.043100
281 1.4162e-05    297 0.00046160 0.61237 0.043096
282 1.4141e-05    298 0.00044744 0.61237 0.043096
283 1.4141e-05    300 0.00041916 0.61237 0.043096
284 1.3214e-05    301 0.00040502 0.61212 0.043066
285 1.3214e-05    302 0.00039180 0.61186 0.043063
286 1.3093e-05    303 0.00037859 0.61186 0.043063
287 1.2318e-05    304 0.00036550 0.61172 0.043054
288 1.2318e-05    305 0.00035318 0.61141 0.043044
289 1.1454e-05    306 0.00034086 0.61140 0.043044
290 1.1082e-05    307 0.00032941 0.61149 0.043050
291 1.0621e-05    308 0.00031832 0.61200 0.043160
292 1.0000e-05    312 0.00027584 0.61200 0.043160
```

On obtient ici une suite de près de 300 arbres. On remarque que

- *l'erreur d'ajustement ne cesse de décroître, ceci est logique vu le procédé de construction : on ajuste de mieux en mieux lorsqu'on augmente le nombre de coupures ;*
- *l'erreur de prévision décroit avant de d'augmenter à nouveau. C'est le phénomène bien connu du **sur-apprentissage**.*

4. Expliquer la sortie de la fonction **plotcp** appliquée à l'arbre de la question précédente.

```r
plotcp(tree1)
```



On obtient un graphe qui permet de visualiser l'erreur quadratique calculée par validation croisée (erreur de prévision) en fonction du paramètre ***cp*** *ou* ***nsplit****.*

5. Sélectionner le "meilleur" arbre dans la suite construite.

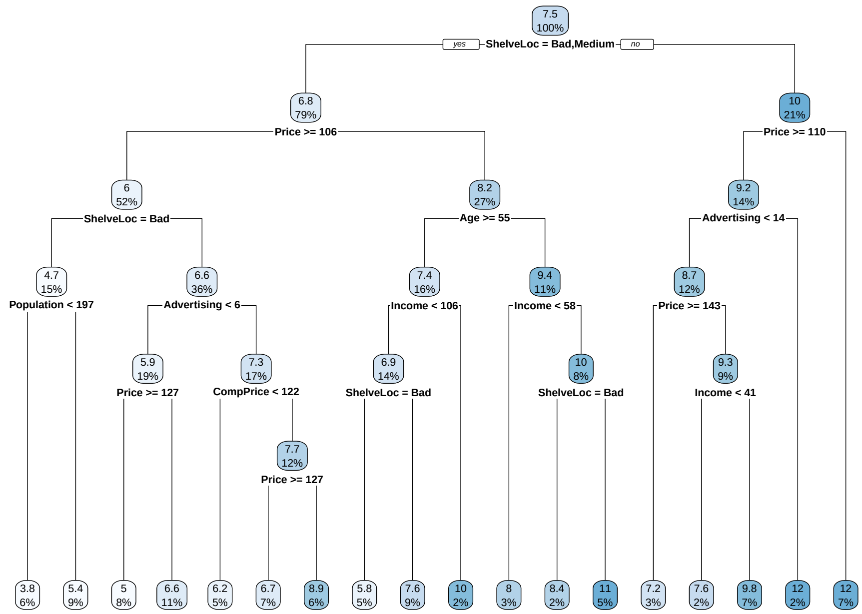
   La manière classique revient à choisir l'arbre qui a la plus petite erreur de prévision. Cela revient à aller chercher dans le tableau de la fonction ***printcp*** *l'arbre qiu possède la plus petite erreur de prévision. On peut obtenir la valeur optimale de* ***cp*** *avec*

```r
cp_opt <- tree1$cptable |> as.data.frame() |>
  filter(xerror==min(xerror)) |> dplyr::select(CP) |>
  as.numeric()
cp_opt
```

```
[1] 0.002369349
```

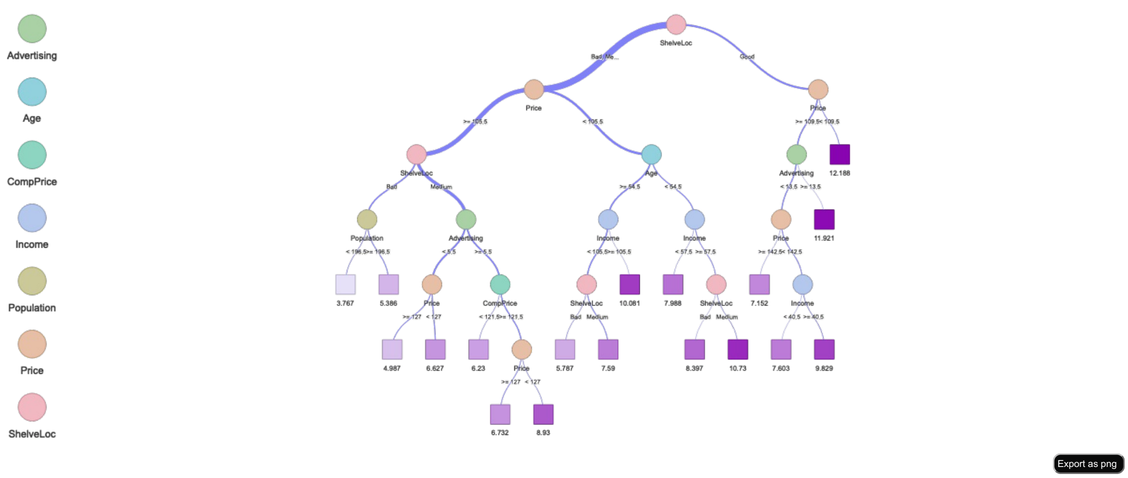
6. Visualiser l'arbre choisi (utiliser la fonction **prune**).

```r
tree_opt <- prune(tree,cp=cp_opt)
rpart.plot(tree_opt)
```



*La fonction **visTree** du package **visNetwork** permet de donner une visualisation interactive de l'arbre.*

```
library(visNetwork)
visTree(tree_opt)
```



*Une **application Shiny** est également proposée pour visualiser les arbres*

```
visTreeEditor(Carseats)
```

7. On souhaite prédire les valeurs de Y pour de nouveaux individus à partir de l'arbre sélectionné. Pour simplifier on considèrera ces 4 individus :

```
(new_ind <- Carseats |> as_tibble() |>
   slice(3,58,185,218) |> dplyr::select(-Sales))
```

```
# A tibble: 4 x 10
  CompPrice Income Advertising Population Price ShelveLoc   Age Education Urban
      <dbl>  <dbl>       <dbl>      <dbl> <dbl> <fct>     <dbl>     <dbl> <fct>
1       113     35          10        269    80 Medium       59        12 Yes
2        93     91           0         22   117 Bad          75        11 Yes
3       132     33           7         35    97 Medium       60        11 No
4       106     44           0        481   111 Medium       70        14 No
# i 1 more variable: US <fct>
```

Calculer les valeurs prédites.

```
predict(tree_opt,newdata=new_ind)
```

```
       1        2        3        4
7.590278 3.767200 7.590278 6.626512
```

8. Séparer les données en un échantillon d'apprentissage de taille 250 et un échantillon test de taille 150.

```
n.train <- 250
set.seed(1234)
perm <- sample(nrow(Carseats))
train <- Carseats[perm[1:n.train],]
test <- Carseats[-perm[1:n.train],]
```

9. On considère la suite d'arbres définie par

```
set.seed(4321)
tree <- rpart(Sales~.,data=train,cp=0.000001,minsplit=2)
```

Dans cette suite, sélectionner

- un arbre très simple (avec 2 ou 3 coupures)
- un arbre très grand
- l'arbre optimal (avec la procédure d'élagage classique).

```
printcp(tree)
```

```
Regression tree:
rpart(formula = Sales ~ ., data = train, cp = 1e-06, minsplit = 2)

Variables actually used in tree construction:
 [1] Advertising Age         CompPrice   Education   Income      Population
 [7] Price       ShelveLoc   Urban       US

Root node error: 1930.1/250 = 7.7203

n= 250

           CP nsplit  rel error  xerror     xstd
1   2.1456e-01      0 1.0000e+00 1.00199 0.090218
2   9.9792e-02      1 7.8544e-01 0.86595 0.075513
3   5.5822e-02      2 6.8565e-01 0.82348 0.071817
4   5.5012e-02      3 6.2983e-01 0.76327 0.065209
5   4.7593e-02      4 5.7481e-01 0.75011 0.065969
6   3.2780e-02      5 5.2722e-01 0.69666 0.062659
7   3.2081e-02      6 4.9444e-01 0.71690 0.062718
8   2.8747e-02      7 4.6236e-01 0.71639 0.062790
9   2.7988e-02      8 4.3361e-01 0.69569 0.059348
10  1.8568e-02      9 4.0563e-01 0.70266 0.064934
11  1.8305e-02     10 3.8706e-01 0.75844 0.071881
12  1.7705e-02     11 3.6875e-01 0.75332 0.071355
13  1.6028e-02     12 3.5105e-01 0.77667 0.075496
14  1.4152e-02     13 3.3502e-01 0.76655 0.074752
15  1.4119e-02     14 3.2087e-01 0.80299 0.082942
16  1.1545e-02     15 3.0675e-01 0.82136 0.082988
17  1.1033e-02     16 2.9520e-01 0.80368 0.081778
18  1.0407e-02     17 2.8417e-01 0.80205 0.081219
19  9.6380e-03     18 2.7377e-01 0.80105 0.081149
20  9.4448e-03     19 2.6413e-01 0.79823 0.081147
21  9.2825e-03     21 2.4524e-01 0.79320 0.081143
22  8.7958e-03     22 2.3596e-01 0.76562 0.078130
23  8.7574e-03     23 2.2716e-01 0.76141 0.078054
24  7.9616e-03     24 2.1840e-01 0.76444 0.077936
25  7.0728e-03     25 2.1044e-01 0.77626 0.077783
26  7.0288e-03     27 1.9630e-01 0.77706 0.078603
27  6.7205e-03     28 1.8927e-01 0.77012 0.077833
28  6.5421e-03     29 1.8255e-01 0.76052 0.075687
29  6.4728e-03     30 1.7600e-01 0.77588 0.075711
30  5.7670e-03     31 1.6953e-01 0.77776 0.075870
```

31	5.0693e-03	32	1.6376e-01	0.79694	0.077306
32	4.9069e-03	34	1.5363e-01	0.78951	0.077248
33	4.7845e-03	35	1.4872e-01	0.78954	0.077227
34	4.7623e-03	36	1.4393e-01	0.79479	0.078655
35	4.7423e-03	38	1.3441e-01	0.79479	0.078655
36	4.3579e-03	39	1.2967e-01	0.78334	0.078557
37	4.3530e-03	40	1.2531e-01	0.78187	0.078607
38	4.1413e-03	41	1.2096e-01	0.78700	0.078606
39	4.0455e-03	42	1.1681e-01	0.78351	0.078553
40	3.9302e-03	43	1.1277e-01	0.76858	0.075026
41	3.8957e-03	45	1.0491e-01	0.76858	0.075026
42	3.8803e-03	46	1.0101e-01	0.77054	0.075020
43	3.8596e-03	47	9.7133e-02	0.77054	0.075020
44	3.5520e-03	48	9.3273e-02	0.76480	0.074222
45	3.5181e-03	49	8.9721e-02	0.75251	0.074226
46	3.4216e-03	50	8.6203e-02	0.75336	0.074228
47	3.1866e-03	51	8.2782e-02	0.75473	0.074308
48	3.1193e-03	52	7.9595e-02	0.75621	0.074297
49	3.0949e-03	53	7.6476e-02	0.75747	0.074346
50	2.8538e-03	54	7.3381e-02	0.76454	0.074387
51	2.7245e-03	55	7.0527e-02	0.75920	0.074369
52	2.6778e-03	56	6.7802e-02	0.75964	0.074366
53	2.2840e-03	57	6.5125e-02	0.75580	0.074519
54	2.1373e-03	58	6.2841e-02	0.74584	0.074550
55	2.1338e-03	59	6.0703e-02	0.73895	0.074268
56	1.9958e-03	60	5.8570e-02	0.73653	0.074241
57	1.9324e-03	61	5.6574e-02	0.73663	0.073524
58	1.8577e-03	62	5.4641e-02	0.73454	0.073556
59	1.7446e-03	63	5.2784e-02	0.73777	0.073803
60	1.7300e-03	64	5.1039e-02	0.73668	0.073751
61	1.7199e-03	65	4.9309e-02	0.73848	0.073725
62	1.6642e-03	67	4.5869e-02	0.73425	0.073646
63	1.5818e-03	68	4.4205e-02	0.72999	0.073374
64	1.4176e-03	69	4.2623e-02	0.74065	0.074144
65	1.2535e-03	70	4.1205e-02	0.73915	0.074086
66	1.2528e-03	71	3.9952e-02	0.73727	0.074038
67	1.2241e-03	72	3.8699e-02	0.73623	0.074052
68	1.1710e-03	73	3.7475e-02	0.74071	0.074539
69	1.0861e-03	74	3.6304e-02	0.73962	0.074496
70	1.0751e-03	75	3.5218e-02	0.73945	0.074716
71	1.0619e-03	76	3.4143e-02	0.73833	0.074740
72	1.0396e-03	77	3.3081e-02	0.73833	0.074740
73	1.0031e-03	78	3.2041e-02	0.73390	0.073412

74	9.8653e-04	79	3.1038e-02	0.73390	0.073412
75	9.7982e-04	80	3.0052e-02	0.73362	0.073421
76	9.6068e-04	81	2.9072e-02	0.73336	0.073431
77	9.0157e-04	82	2.8111e-02	0.73346	0.073239
78	8.5140e-04	83	2.7210e-02	0.74355	0.073608
79	8.2985e-04	84	2.6358e-02	0.74289	0.073577
80	7.6578e-04	85	2.5529e-02	0.75270	0.074401
81	7.5439e-04	87	2.3997e-02	0.75068	0.071516
82	7.1170e-04	88	2.3243e-02	0.74411	0.071166
83	6.8926e-04	89	2.2531e-02	0.74202	0.071059
84	6.7218e-04	90	2.1842e-02	0.73282	0.070730
85	6.7025e-04	91	2.1169e-02	0.73262	0.070738
86	6.6158e-04	92	2.0499e-02	0.73262	0.070738
87	6.3418e-04	93	1.9838e-02	0.73337	0.070711
88	5.8450e-04	94	1.9203e-02	0.73500	0.071237
89	5.6893e-04	95	1.8619e-02	0.73223	0.070717
90	5.5273e-04	96	1.8050e-02	0.73659	0.070702
91	5.4467e-04	97	1.7497e-02	0.73718	0.070776
92	5.4467e-04	98	1.6953e-02	0.73718	0.070776
93	5.3718e-04	99	1.6408e-02	0.73718	0.070776
94	5.2351e-04	100	1.5871e-02	0.73718	0.070776
95	5.0781e-04	101	1.5347e-02	0.73857	0.071077
96	4.9273e-04	102	1.4839e-02	0.73897	0.071303
97	4.7591e-04	103	1.4347e-02	0.73723	0.071291
98	4.7283e-04	104	1.3871e-02	0.73289	0.071245
99	4.7167e-04	105	1.3398e-02	0.73289	0.071245
100	4.6792e-04	106	1.2926e-02	0.73367	0.071229
101	4.4890e-04	107	1.2458e-02	0.73271	0.071251
102	4.4497e-04	108	1.2009e-02	0.73500	0.071336
103	4.3662e-04	109	1.1565e-02	0.73626	0.071314
104	4.0289e-04	110	1.1128e-02	0.73827	0.071318
105	3.9917e-04	111	1.0725e-02	0.73714	0.071225
106	3.5812e-04	112	1.0326e-02	0.73757	0.071280
107	3.4136e-04	113	9.9677e-03	0.73935	0.071322
108	3.4092e-04	114	9.6264e-03	0.73935	0.071322
109	3.1735e-04	115	9.2854e-03	0.73935	0.071322
110	2.9187e-04	116	8.9681e-03	0.74282	0.072752
111	2.8919e-04	117	8.6762e-03	0.74209	0.072720
112	2.6331e-04	118	8.3870e-03	0.74465	0.072682
113	2.5547e-04	119	8.1237e-03	0.74431	0.072695
114	2.5495e-04	120	7.8683e-03	0.74576	0.072656
115	2.3380e-04	121	7.6133e-03	0.74654	0.072644
116	2.2890e-04	122	7.3795e-03	0.74668	0.072724

117	2.2642e-04	123	7.1506e-03	0.74690	0.072727
118	2.0984e-04	124	6.9242e-03	0.74265	0.072544
119	2.0200e-04	125	6.7143e-03	0.74425	0.072512
120	1.9608e-04	126	6.5123e-03	0.74161	0.072178
121	1.8717e-04	127	6.3163e-03	0.74511	0.072464
122	1.8717e-04	128	6.1291e-03	0.74799	0.072449
123	1.8580e-04	129	5.9419e-03	0.74770	0.072459
124	1.8476e-04	130	5.7561e-03	0.74770	0.072459
125	1.7793e-04	131	5.5714e-03	0.74719	0.072478
126	1.7444e-04	132	5.3934e-03	0.75014	0.072719
127	1.7244e-04	133	5.2190e-03	0.75150	0.072759
128	1.5738e-04	134	5.0466e-03	0.75072	0.072755
129	1.5505e-04	135	4.8892e-03	0.75222	0.072736
130	1.5275e-04	136	4.7341e-03	0.75193	0.072741
131	1.4819e-04	137	4.5814e-03	0.75415	0.072836
132	1.4370e-04	138	4.4332e-03	0.75422	0.072833
133	1.4148e-04	139	4.2895e-03	0.75413	0.072836
134	1.3805e-04	140	4.1480e-03	0.75413	0.072836
135	1.3430e-04	141	4.0100e-03	0.74921	0.071582
136	1.2773e-04	142	3.8757e-03	0.74657	0.071549
137	1.2334e-04	143	3.7479e-03	0.74713	0.071529
138	1.2312e-04	144	3.6246e-03	0.74737	0.071512
139	1.2024e-04	145	3.5015e-03	0.74737	0.071512
140	1.1979e-04	146	3.3812e-03	0.74737	0.071512
141	1.1629e-04	147	3.2615e-03	0.74785	0.071532
142	1.1285e-04	148	3.1452e-03	0.74861	0.071529
143	1.1222e-04	149	3.0323e-03	0.74823	0.071534
144	1.1026e-04	150	2.9201e-03	0.74823	0.071534
145	1.0832e-04	151	2.8098e-03	0.74823	0.071534
146	1.0640e-04	152	2.7015e-03	0.74763	0.071529
147	1.0640e-04	153	2.5951e-03	0.74763	0.071529
148	1.0611e-04	154	2.4887e-03	0.74763	0.071529
149	1.0260e-04	155	2.3826e-03	0.74763	0.071529
150	9.6395e-05	156	2.2800e-03	0.74796	0.071519
151	9.1612e-05	157	2.1836e-03	0.74794	0.071510
152	9.1612e-05	158	2.0920e-03	0.74575	0.071262
153	9.0178e-05	159	2.0004e-03	0.74575	0.071262
154	8.8088e-05	160	1.9102e-03	0.74505	0.071262
155	8.2225e-05	161	1.8221e-03	0.74505	0.071262
156	8.1241e-05	162	1.7399e-03	0.74505	0.071262
157	7.8365e-05	163	1.6587e-03	0.74505	0.071262
158	7.7933e-05	164	1.5803e-03	0.74444	0.071272
159	7.6301e-05	165	1.5024e-03	0.74439	0.071302

160	7.2769e-05	166	1.4261e-03	0.74487	0.071275
161	6.7381e-05	167	1.3533e-03	0.74537	0.071259
162	6.4264e-05	168	1.2859e-03	0.74567	0.071240
163	6.2200e-05	169	1.2216e-03	0.74575	0.071237
164	6.2200e-05	170	1.1594e-03	0.74484	0.071204
165	5.9104e-05	172	1.0350e-03	0.74682	0.071255
166	5.7226e-05	173	9.7594e-04	0.74664	0.071254
167	5.2975e-05	174	9.1872e-04	0.74630	0.071256
168	5.0154e-05	175	8.6574e-04	0.74784	0.071591
169	4.5138e-05	176	8.1559e-04	0.74775	0.071593
170	4.3548e-05	177	7.7045e-04	0.74783	0.071590
171	3.7343e-05	178	7.2690e-04	0.74733	0.071588
172	3.3574e-05	179	6.8956e-04	0.74901	0.071885
173	3.2132e-05	181	6.2241e-04	0.74965	0.071873
174	3.1933e-05	182	5.9028e-04	0.74965	0.071873
175	3.1735e-05	183	5.5835e-04	0.74965	0.071873
176	2.8211e-05	184	5.2661e-04	0.74871	0.071893
177	2.6528e-05	186	4.7019e-04	0.74910	0.071893
178	2.4895e-05	187	4.4366e-04	0.74849	0.071891
179	2.3315e-05	189	3.9387e-04	0.74884	0.071879
180	2.2406e-05	190	3.7055e-04	0.74863	0.071879
181	2.1787e-05	191	3.4815e-04	0.74883	0.071893
182	2.0310e-05	192	3.2636e-04	0.74905	0.071891
183	1.8885e-05	193	3.0605e-04	0.74848	0.071856
184	1.7512e-05	194	2.8717e-04	0.74842	0.071854
185	1.7486e-05	195	2.6965e-04	0.74764	0.071829
186	1.6191e-05	196	2.5217e-04	0.74786	0.071823
187	1.5967e-05	198	2.1978e-04	0.74741	0.071800
188	1.4922e-05	199	2.0382e-04	0.74741	0.071800
189	1.3816e-05	200	1.8890e-04	0.74746	0.071784
190	1.3704e-05	201	1.7508e-04	0.74738	0.071787
191	1.3704e-05	202	1.6138e-04	0.74738	0.071787
192	1.3134e-05	203	1.4767e-04	0.74738	0.071787
193	1.2538e-05	204	1.3454e-04	0.74713	0.071769
194	1.2469e-05	205	1.2200e-04	0.74686	0.071769
195	9.3520e-06	206	1.0953e-04	0.74739	0.071770
196	9.3520e-06	207	1.0018e-04	0.74683	0.071766
197	8.3935e-06	208	9.0826e-05	0.74686	0.071762
198	7.4868e-06	210	7.4039e-05	0.74709	0.071770
199	6.2951e-06	211	6.6552e-05	0.74743	0.071763
200	5.0775e-06	212	6.0257e-05	0.74757	0.071758
201	4.9739e-06	213	5.5179e-05	0.74752	0.071756
202	4.9739e-06	214	5.0205e-05	0.74752	0.071756

```
203 4.7731e-06    215 4.5232e-05 0.74752 0.071756
204 4.1967e-06    217 3.5685e-05 0.74745 0.071757
205 4.1492e-06    218 3.1488e-05 0.74741 0.071759
206 3.7304e-06    219 2.7339e-05 0.74701 0.071761
207 3.1346e-06    220 2.3609e-05 0.74663 0.071759
208 2.4956e-06    221 2.0474e-05 0.74656 0.071748
209 2.2106e-06    222 1.7979e-05 0.74660 0.071747
210 2.2106e-06    223 1.5768e-05 0.74670 0.071746
211 1.6580e-06    224 1.3557e-05 0.74670 0.071746
212 1.4594e-06    226 1.0241e-05 0.74634 0.071706
213 1.2694e-06    227 8.7821e-06 0.74652 0.071710
214 1.2694e-06    229 6.2433e-06 0.74652 0.071710
215 1.0000e-06    230 4.9739e-06 0.74652 0.071710
```

```
simple.tree <- prune(tree,cp=0.1)
large.tree <- prune(tree,cp=1e-6)
#cp_opt <- tree$cptable[which.min(tree$cptable[,"xerror"]),"CP"]
cp_opt <- tree$cptable |> as.data.frame() |>
  filter(xerror==min(xerror)) |>
  dplyr::select(CP) |> as.numeric()
opt.tree <- prune(tree,cp=cp_opt)
```

10. Calculer l'erreur quadratique de ces 3 arbres en utilisant l'échantillon test.

Pour chaque arbre T on calcule

$$\frac{1}{n_{test}} \sum_{i \in test} (Y_i - T(X_i))^2.$$

On définit une table qui regroupe les prédictions des 3 arbres sur l'échantillon test :

```
data.prev <- data.frame(simple=predict(simple.tree,newdata = test),
                        large=predict(large.tree,newdata = test),
                        opt=predict(opt.tree,newdata = test),
                        obs=test$Sale)
```

On en déduit les erreurs quadratique

```
data.prev |> summarise_at(1:3,~mean((obs-.)^2))
```

```
    simple   large      opt
1 5.800361 5.43738 4.469369
```

L'arbre sélectionné a ici la plus petite erreur.

11. Refaire la comparaison avec une validation croisée 10 blocs.

    On créé tout d'abord les blocs.

```
library(caret)
K <- 10
set.seed(1234)
kfolds <- createFolds(1:nrow(Carseats),k=K)
```

    On fait la validation croisée.

```
prev <- matrix(0,nrow=nrow(Carseats),ncol=3) |> as.data.frame()
names(prev) <- c("simple","large","opt")
for (j in 1:K){
  train <- Carseats[-kfolds[[j]],]
  test <- Carseats[kfolds[[j]],]
  tree <- rpart(Sales~.,data=train,minsplit=2,cp=1e-9)
  simple <- prune(tree,cp=tree$cptable[2,1])
  large <- prune(tree,cp=1e-9)
  cp_opt <- tree$cptable |> as.data.frame() |>
    filter(xerror==min(xerror)) |>
    dplyr::select(CP) |> as.numeric()
  opt <- prune(tree,cp=cp_opt)
  prev[kfolds[[j]],1] <- predict(simple,newdata=test)
  prev[kfolds[[j]],2] <- predict(large,newdata=test)
  prev[kfolds[[j]],3] <- predict(opt,newdata=test)
}
prev |> mutate(obs=Carseats$Sales) |>
  summarize_at(1:3,~mean((obs-.)^2))
```

```
    simple   large      opt
1 6.003064 4.79406 4.556404
```

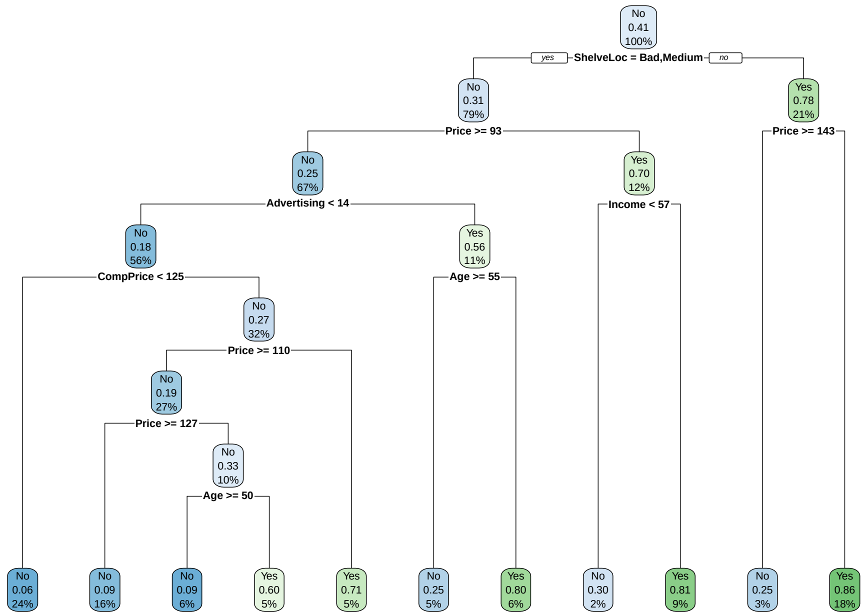
1.2.2 Élagage en classification binaire et matrice de coût

On considère ici les mêmes données que précédemment mais on cherche à expliquer une version binaire de la variable **Sales**. Cette nouvelle variable, appelée `High` prend pour valeurs `No` si `Sales` est inférieur ou égal à 8, `Yes` sinon. On travaillera donc avec le jeu `data1` défini ci-dessous.

```
High <- ifelse(Carseats$Sales<=8,"No","Yes")
data1 <- Carseats |> dplyr::select(-Sales) |> mutate(High)
```

1. Construire un arbre permettant d'expliquer `High` par les autres variables (sans `Sales` évidemment !) et expliquer les principales différences par rapport à la partie précédente précédente.

```
set.seed(321)
tree <- rpart(High~.,data=data1)
rpart.plot(tree)
```



*L'arbre construit est un **arbre de classification**. Le procédé de découpe des noeuds est différent : il utilise l'impureté de Gini au lieu de la variance.*

2. Expliquer l'option `parms` dans la commande :

```
tree1 <- rpart(High~.,data=data1,parms=list(split="information"))
tree1$parms
```

```
$prior
   1    2
0.59 0.41

$loss
     [,1] [,2]
[1,]    0    1
[2,]    1    0
```

```
$split
[1] 2
```

*On change de fonction d'impureté (**information** au lieu de **Gini**).*

3. Expliquer les sorties de la fonction **printcp** sur le premier arbre construit et retrouver la valeur du dernier terme de la colonne **rel error**.

```
printcp(tree)
```

```
Classification tree:
rpart(formula = High ~ ., data = data1)

Variables actually used in tree construction:
[1] Advertising Age         CompPrice   Income      Price       ShelveLoc

Root node error: 164/400 = 0.41

n= 400

        CP nsplit rel error  xerror     xstd
1 0.286585      0   1.00000 1.00000 0.059980
2 0.109756      1   0.71341 0.71341 0.055477
3 0.045732      2   0.60366 0.66463 0.054298
4 0.036585      4   0.51220 0.64634 0.053821
5 0.027439      5   0.47561 0.60976 0.052806
6 0.024390      7   0.42073 0.58537 0.052083
7 0.012195      8   0.39634 0.56707 0.051515
8 0.010000     10   0.37195 0.53659 0.050518
```

On peut lire des informations sur la suite d'arbres emboîtés, cette suite est de longueur 17 ici. Dans le dernier tableau, chaque ligne représente un arbre de la suite et on a dans les colonnes :

- ***CP** : le paramètre de complexité, plus il est petit plus l'arbre est profond ;*
- ***nsplit** : nombre de coupures de l'arbre ;*
- ***rel error** contient l'erreur calculée sur les données d'apprentissage. Cette erreur décroit lorsque la complexité augmente et peut être interprétée comme une erreur d'ajustement ;*
- ***xerror** : contient l'erreur calculée par validation croisée. Elle peut être interprétée comme une erreur de prévision ;*
- ***xstd** correspond à l'écart type estimé de l'erreur.*

*Les types d'erreurs dépendent du problème considéré. Vu qu'on est ici sur un problème de classification, c'est l'**erreur de classification** qui est considérée. De plus ces erreurs sont normalisées par rapport à l'erreur de l'arbre racine (sans coupure). Ainsi on retrouve l'erreur demandée avec*

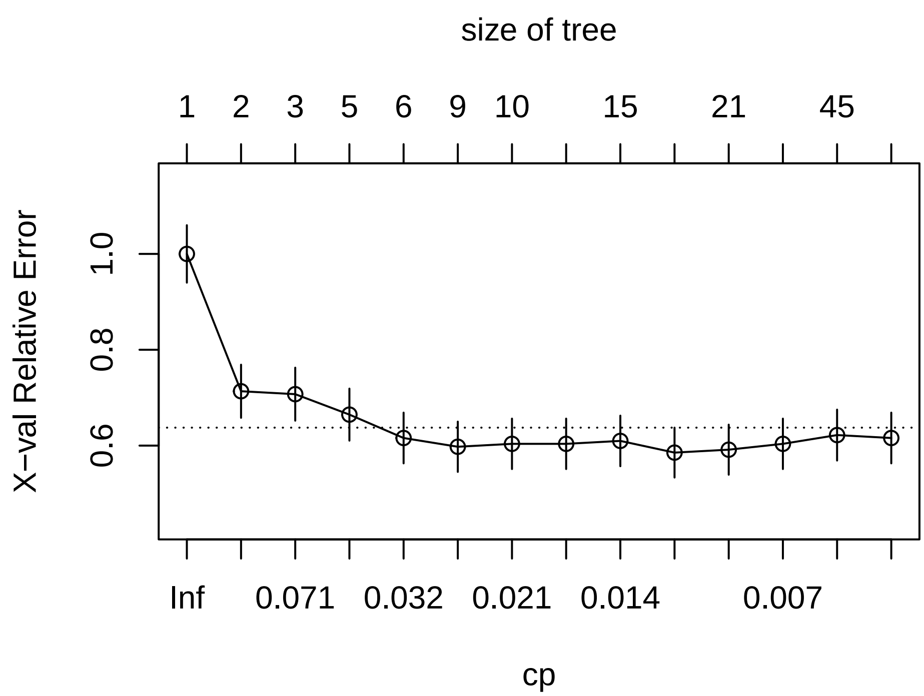
```
data1 |> mutate(fitted=predict(tree,type="class")) |>
  summarise(MC=mean(fitted!=High)/mean(High=="Yes"))
```

```
         MC
1 0.3719512
```

```
#mean(predict(arbre,type="class")!=donnees$High)/mean(donnees$High=="Yes")
```

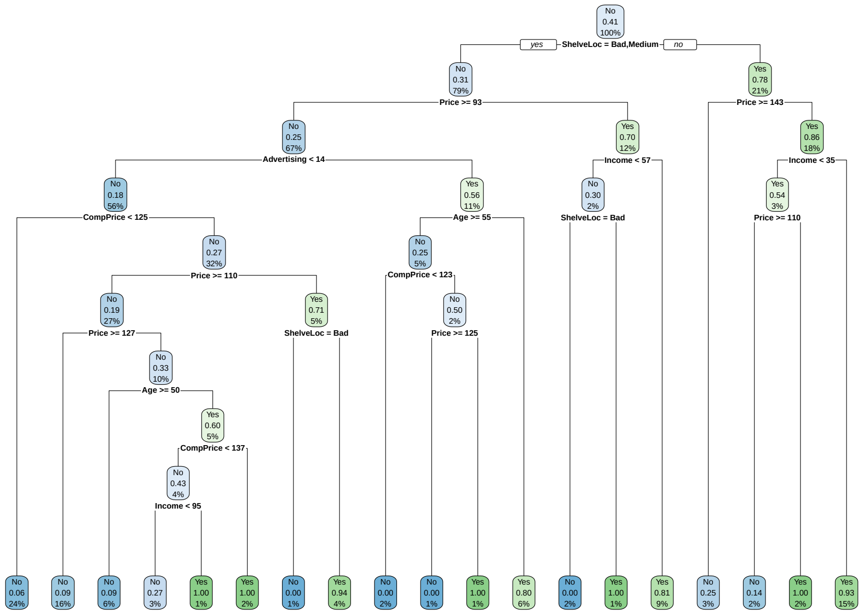
4. Sélectionner un arbre optimal dans la suite.

```
tree1 <- rpart(High~.,data=data1,cp=0.000001,minsplit=2)
plotcp(tree1)
```




```
cp_opt <- tree1$cptable |> as.data.frame() |>
  slice(which.min(xerror)) |>
  dplyr::select(CP) |> as.numeric()
tree_sel <- prune(tree1,cp=cp_opt)
```

```
rpart.plot(tree_sel)
```



5. On considère la suite d'arbres

```
tree2 <- rpart(High~.,data=data1,
               parms=list(loss=matrix(c(0,5,1,0),ncol=2)),
               cp=0.01,minsplit=2)
```

Expliquer les sorties des commandes suivantes. On pourra notamment calculer le dernier terme de la colonne **rel error** de la table **cptable**.

```
tree2$parms
```

```
$prior
   1    2
0.59 0.41

$loss
     [,1] [,2]
[1,]    0    1
[2,]    5    0

$split
[1] 1
```

```r
printcp(tree2)
```

```
Classification tree:
rpart(formula = High ~ ., data = data1, parms = list(loss = matrix(c(0,
    5, 1, 0), ncol = 2)), cp = 0.01, minsplit = 2)

Variables actually used in tree construction:
[1] Advertising Age         CompPrice   Education   Income      Population
[7] Price       ShelveLoc

Root node error: 236/400 = 0.59

n= 400

         CP nsplit rel error xerror    xstd
1  0.101695      0   1.00000 5.0000 0.20840
2  0.050847      2   0.79661 3.7119 0.20834
3  0.036017      3   0.74576 3.1653 0.20197
4  0.035311      5   0.67373 2.9449 0.19818
5  0.025424      9   0.50847 2.4915 0.18872
6  0.016949     11   0.45763 2.3559 0.18485
7  0.015537     16   0.37288 2.0339 0.17491
8  0.014831     21   0.28814 2.0339 0.17491
9  0.010593     23   0.25847 1.8983 0.16982
10 0.010000     25   0.23729 1.8263 0.16664
```

Le critère est ici modifié, on utilise une ***erreur de classification pondérée*** *pour choisir l'arbre. On rappelle que l'erreur de classification est définie par*

$$L(g) = P(g(X) \neq Y) = E[\alpha_1 1_{g(X)=0,Y=1} + \alpha_2 1_{g(X)=1,Y=0}]$$

avec $\alpha_1 = \alpha_2 = 1$*. Cette erreur donne donc le même poids aux deux erreurs possible (prédire 1 à tort ou prédire 0 à tort). Utiliser cette erreur revient donc à supposer qu'elles ont la même importance pour le problème considéré. Ce n'est bien entendu pas toujours le cas en pratique. La matrice* ***loss*** *contient les valeurs de* α_1 *et* α_2 *et modifier ces valeurs permettra de donner des poids différents à ces deux erreurs.*

Avec cette nouvelle commande, on donne un poids de 5 pour une erreur et de 1 pour l'autre. On obtient le terme demandé avec

```r
prev <- predict(tree2,type="class")
conf <- table(data1$High,prev)
conf
```

```
     prev
      No Yes
  No  185  51
  Yes   1 163
```

```
loss <- tree2$parms$loss
(conf[1,2]*loss[1,2]+
    conf[2,1]*loss[2,1])/nrow(data1)/mean(data1$High=="No")
```

```
[1] 0.2372881
```

6. Comparer les valeurs ajustées par les deux arbres considérés.

```
summary(predict(tree_sel,type="class"))
```

```
 No Yes
240 160
```

```
summary(predict(tree2,type="class"))
```

```
 No Yes
186 214
```

*Il y a plus de **`Yes`** prédits dans le second arbre. Cela vient des changements dans la matrice loss : la perte pour prédire **`No`** au lieu de **`Yes`** est de 5 pour le second arbre. Cela signifie bien détecter les **`Yes`** est plus important pour cet arbre, c'est donc tout à fait normal qu'il prédise plus souvent **`Yes`** que le premier.*

*Cette stratégie de changer la matrice de coût peut se révéler intéressante dans le cas de **données déséquilibrées** : une modalité de la cible sous-représentée par rapport à l'autre. En effet, pour de tels problèmes il est souvent très important de bien détecter la modalité sous-représentée. On pourra donc donner un poids plus fort lorsqu'on détecte mal cette modalité.*

1.2.3 Calcul de la sous-suite d'arbres optimaux

Exercice 1.1 (Minimisation du critère coût/complexité)**.** On considère l'algorithme qui permet de calculer les suites $(\alpha_m)_m$ et $(T_{\alpha_m})_m$ du théorème présenté en cours. Pour simplifier on se place en classification binaire et on considère les notations suivantes (en plus de celles présentées dans le chapitre) :

- $R(t)$: erreur de classification dans le nœud t pondérée par la proportion d'individus dans le nœud (nombre d'individus dans t sue le nombre total d'individus).

- T^t : la branche de l'arbre T issue du nœud interne t.
- $R(T^t)$: l'erreur de la branche T^t pondérée par la proportion d'individus dans le nœud.

L'algorithme suivant présente le calcul explicite des suites $(\alpha_m)_m$ et $(T_{\alpha_m})_m$.

Initialisation : on pose $\alpha_0 = 0$ et on calcule l'arbre maximale T_0 qui minimise $C_0(T)$. On fixe $m = 0$. Répéter jusqu'à obtenir l'arbre racine

1. Calculer pour tous les nœuds t internes de T_{α_m}
$$g(t) = \frac{R(t) - R(T^t_{\alpha_m})}{|T^t_{\alpha_m}| - 1}$$
2. Choisir le nœud interne t_m qui minimise $g(t)$.
3. On pose
$$\alpha_{m+1} = g(t_m) \quad \text{et} \quad T_{\alpha_{m+1}} = T_{\alpha_m} - T^{t_m}_{\alpha_m}.$$
4. Mise à jour : $m := m + 1$.

Retourner : les suites finies $(\alpha_m)_m$ et $(T_{\alpha_m})_m$.

On propose d'utiliser cet algorithme sur l'arbre construit suivant

```
gen_class_bin2D <- function(n=100,graine=1234,bayes=0.1){
  set.seed(graine)
  grille <- 0.1
  X1 <- runif(n)
  X2 <- runif(n)
  Y <- rep(0,n)
  cond0 <- (X1>0.2 & X2>=0.8) | (X1>0.6 & X2<0.4) | (X1<0.25 & X2<0.5)
  cond1 <- !cond0
  Y[cond0] <- rbinom(sum(cond0),1,bayes)
  Y[cond1] <- rbinom(sum(cond1),1,1-bayes)
  donnees <- tibble(X1,X2,Y=as.factor(Y))
  px1 <- seq(0,1,by=grille)
  px2 <- seq(0,1,by=grille)
  px <- expand.grid(X1=px1,X2=px2)
  py <- rep(0,nrow(px))
  cond0 <- (px[,1]>0.2 & px[,2]>=0.8) |
    (px[,1]>0.6 & px[,2]<0.4) |
    (px[,1]<0.25 & px[,2]<0.5)
  cond1 <- !cond0
  py[cond0] <- 0
  py[cond1] <- 1
  df <- px |> as_tibble() |> mutate(Y=as.factor(py))
  p <- ggplot(df)+aes(x=X1,y=X2,fill=Y)+
```

```
    geom_raster(hjust=1,vjust=1)
  return(list(donnees=donnees,graphe=p))
}
don.2D.arbre <- gen_class_bin2D(n=150,graine=3210,bayes=0.05)$donnees
set.seed(123)
T0 <- rpart(Y~.,data=don.2D.arbre)
rpart.plot(T0,extra = 1)
```

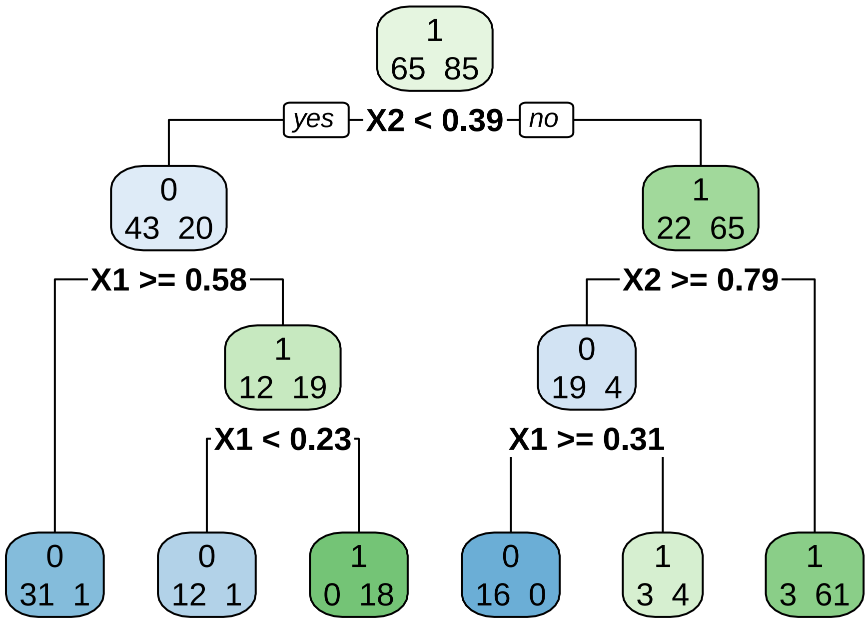


Figure 1.1: L'arbre T_0.

Cet arbre n'est pas l'arbre maximal mais la manière d'élaguer est identique.

1. Calculer pour les 5 nœuds internes de T_0 la fonction $g(t)$.

   On numérote les nœuds internes de haut en bas et de gauche à droite. On commence par le nœud t_5, celui qui correspond à la coupure `X1>=0.31`*. On a*

$$R(t_5) = \frac{4}{23}\,\frac{23}{150} = \frac{4}{150} \quad \text{et} \quad R(T_0^{t_5}) = \frac{3}{23}\,\frac{23}{150} = \frac{3}{150}.$$

   On déduit

$$g(t_5) = \frac{4/150 - 3/150}{2-1} = \frac{1}{150}.$$

   On fait de même pour les 4 autres nœuds internes et on obtient les résultats suivants :

t	t_1	t_2	t_3	t_4	t_5
$R(t)$	*65/150*	*20/150*	*22/150*	*12/150*	*4/150*
$R(T_0^t)$	*8/150*	*2/150*	*6/150*	*1/150*	*3/150*
$\|T_0^t\|$	*6*	*3*	*3*	*2*	*2*
$g(t)$	*11.4/150*	*9/150*	*8/150*	*11/150*	*1/150*

2. En déduire la valeur de α_1 ainsi que l'arbre T_{α_1}.

   $g(t)$ est minimum en t_5 On a donc $\alpha_1 = g(t_5)$ et $T_{\alpha_1} = T_0 - T_0^{t_5}$, c'est-à-dire T_0 auquel on enlève la coupure `X1>=0.31`.

3. Retrouver cette valeur en utilisant la fonction `printcp` et représenter l'arbre T_1 en utilisant `prune`.

   On se rappelle que `printcp` normalise toutes les erreurs par rapport à celle de l'arbre racine, par conséquent la valeur de α_1 affichée par `printcp` sera

   $$\frac{1}{150}\frac{150}{65} = \frac{1}{65} \approx 0.01538.$$

   En effet :

```r
printcp(T0)
```

```
Classification tree:
rpart(formula = Y ~ ., data = don.2D.arbre)

Variables actually used in tree construction:
[1] X1 X2

Root node error: 65/150 = 0.43333

n= 150

        CP nsplit rel error  xerror     xstd
1 0.353846      0   1.00000 1.00000 0.093370
2 0.230769      1   0.64615 0.70769 0.086883
3 0.138462      2   0.41538 0.50769 0.078053
4 0.015385      4   0.13846 0.21538 0.054812
5 0.010000      5   0.12308 0.26154 0.059730
```

   Et on peut visualiser l'arbre avec

```r
T1 <- prune(T0,cp=0.015385)
rpart.plot(T1,extra = 1)
```

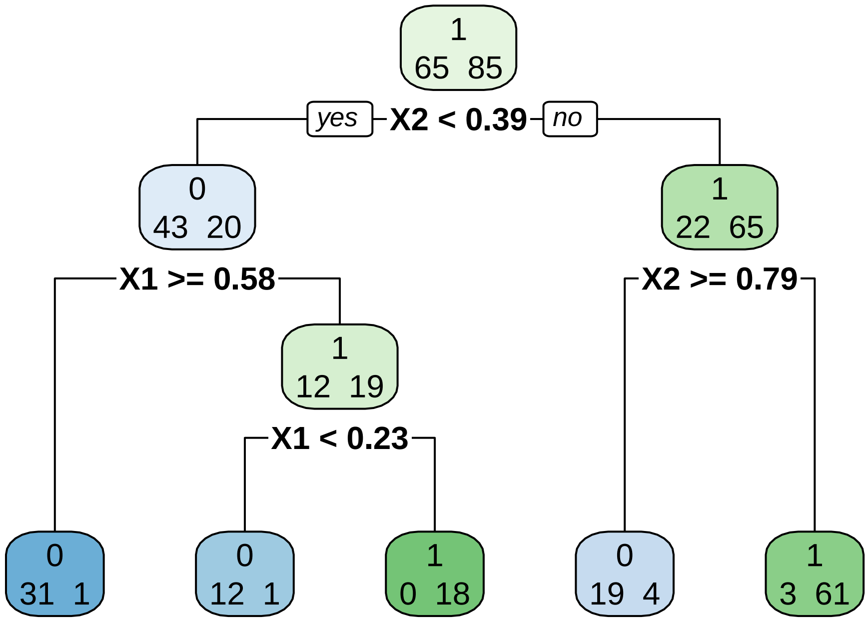


Figure 1.2: L'arbre T_{α_1}.

4. Faire le même travail pour calculer α_2 et T_{α_2}.

   On se place maintenant dans T_{α_1} qui contient 4 nœuds internes et on calcule $g(t)$ pour ces 4 nœuds :

t	t_1	t_2	t_3	t_4
$R(t)$	65/150	20/150	22/150	12/150
$R(T^t_{\alpha_1})$	9/150	18/150	7/150	1/150
$\lvert T^t_{\alpha_1}\rvert$	5	3	2	2
$g(t)$	14/150	9/150	15/150	11/150

   On supprimera ici t_2 avec on posera $\alpha_2 = 9/65 \approx 0.13846$ (on normalise). On peut tracer T_{α_2} :

```r
T2 <- prune(T0,cp=0.138462)
rpart.plot(T2,extra = 1)
```

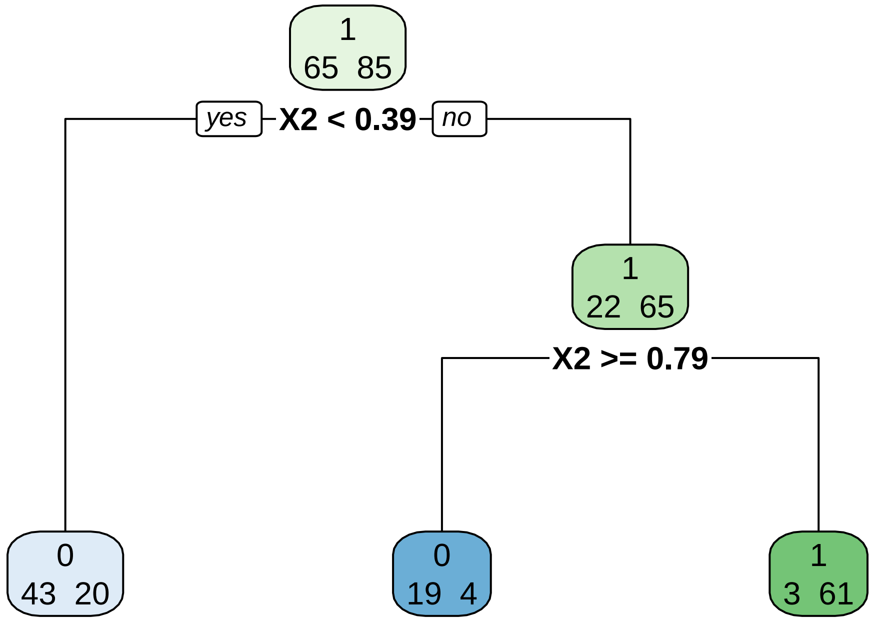


Figure 1.3: L'arbre T_{α_2}.

partie II

Agrégation

2 Forêts aléatoires

Les méthodes par arbres présentées précédemment sont des algorithmes qui possèdent tout un tas de qualités (facile à mettre en œuvre, interprétable…). Ce sont néanmoins rarement les algorithmes qui se révèlent les plus performants. Les méthodes d'agrégation d'arbres présentées dans cette partie sont souvent beaucoup plus pertinentes, notamment en terme de qualité de prédiction. Elles consistent à construire un très grand nombre d'arbres "simples" : $g_1, \dots, g_B$ et à les agréger en faisant la moyenne :

$$\frac{1}{B}\sum_{k=1}^{B} g_k(x).$$

Les forêts aléatoires (Breiman 2001) et le gradient boosting (Friedman 2001) utilisent ce procédé d'agrégation. Dans ce chapitre on étudiera ces algorithmes sur le je de données `spam` :

```
library(kernlab)
data(spam)
set.seed(1234)
spam <- spam[sample(nrow(spam)),]
```

Le problème est d'expliquer la variable binaire **type** par les autres.

L'algorithme des forêts aléatoires consiste à construire des arbres sur des échantillons bootstrap et à les agréger. Il peut s'écrire de la façon suivante :

Entrées :

- $x \in \mathbb{R}^d$ l'observation à prévoir, $\mathcal{D}_n$ l'échantillon ;
- B nombre d'arbres ; n_{max} nombre max d'observations par nœud
- $m \in \{1, \dots, d\}$ le nombre de variables candidates pour découper un nœud.

Algorithme : pour $k = 1, \dots, B$:

1. Tirer un échantillon *bootstrap* dans $\mathcal{D}_n$
2. Construire un *arbre CART sur cet échantillon bootstrap*, chaque coupure est sélectionnée en minimisant la fonction de coût de CART sur un ensemble de m variables choisies au hasard parmi les d. On note $T(., \theta_k, \mathcal{D}_n)$ l'arbre construit.

Sortie : l'estimateur $T_B(x) = \frac{1}{B}\sum_{k=1}^{B} T(x, \theta_k, \mathcal{D}_n)$.

Cet algorithme peut être utilisé sur **R** avec la fonction **randomForest** du package **randomForest** ou la fonction **ranger** du package **ranger**.

Exercice 2.1 (Biais et variance des algorithmes bagging)**.** Comparer le biais et la variance de la forêt $T_B(x)$ au biais et à la variance d'un arbre de la forêt $T(x, \theta_k, \mathcal{D}_n)$. On pourra utiliser $\rho(x) = \mathrm{corr}(T(x, \theta_1, \mathcal{D}_n), T(x, \theta_2, \mathcal{D}_n))$ pour comparer les variances.

Pour simplifier les notations on considère $T_1, \dots, T_B$ B variables aléatoires de même loi et de variance σ^2. Il est facile de voir que $\mathbf{E}[\bar{T}] = \mathbf{E}[T_1]$. Pour la variance on a

$$\begin{aligned}\mathbf{V}[\bar{T}] =& \frac{1}{B^2}\mathbf{V}\left[\sum_{i=1}^{B} T_i\right] = \frac{1}{B^2}\left[\sum_{i=1}^{V}\mathbf{V}[T_i] + \sum_{i\neq j}\mathbf{cov}(T_i, T_j)\right] \\ =& \frac{1}{B^2}\left[B\sigma^2 + B(B-1)\rho\sigma^2\right] = \rho\sigma^2 + \frac{1-\rho}{B}\sigma^2.\end{aligned}$$

Considérons $\rho \leq 0$. On déduit de l'équation précédente que $B \leq 1 - 1/\rho$. Par exemple si $\rho = -1$, B doit être inférieur ou égal à 2. Il n'est en effet pas possible de considérer 3 variables aléatoires de même loi dont les corrélations 2 à 2 sont égales à -1. De même si $\rho = -1/2$, $B \leq 3$…

Exercice 2.2 (RandomForest versus ranger)**.** On sépare le jeu de données `spam` en un échantillon d'apprentissage et un échantillon test :

```
set.seed(1234)
library(tidymodels)
data_split <- initial_split(spam, prop = 3/4)
spam.app <- training(data_split)
spam.test  <- testing(data_split)
```

1. Entraîner une forêt aléatoire sur les données d'apprentissage uniquement en utilisant les paramètres par défaut de la fonction **randomForest**. Commenter.

   ```
   library(randomForest)
   set.seed(123)
   (foret1 <- randomForest(type~.,data=spam.app))
   ```

   ```
   Call:
    randomForest(formula = type ~ ., data = spam.app)
                  Type of random forest: classification
                        Number of trees: 500
   No. of variables tried at each split: 7
   ```

```
        OOB estimate of  error rate: 4.72%
Confusion matrix:
        nonspam spam class.error
nonspam    2023   58  0.02787122
spam        105 1264  0.07669832
```

Il s'agit d'une forêt de classification avec 500 arbres. Le paramètre `mtry` *vaut 7 et l'erreur OOB est de 4.72%.*

2. Calculer les groupes prédits pour les individus de l'échantillon test et en déduire une estimation de l'erreur de classification.

```
prev.class <- predict(foret1,newdata=spam.test)
head(prev.class)
```

```
   4046    1685    3000    1403    1014     561
nonspam    spam nonspam    spam    spam    spam
Levels: nonspam spam
```

```
mean(prev.class!=spam.test$type)
```

```
[1] 0.04952215
```

3. Calculer les estimations de la probabilité de spam pour les individus de l'échantillon test.

```
prev.prob <- predict(foret1,newdata=spam.test,type="prob")
head(prev.prob)
```

```
     nonspam  spam
4046   0.780 0.220
1685   0.010 0.990
3000   0.908 0.092
1403   0.216 0.784
1014   0.028 0.972
561    0.054 0.946
```

4. Refaire les questions précédentes avec la fonction **ranger** du package **ranger** (voir https://arxiv.org/pdf/1508.04409.pdf).

```
library(ranger)
```

```
(foret2 <- ranger(type~.,data=spam.app))
```

```
Ranger result

Call:
 ranger(type ~ ., data = spam.app)

Type:                             Classification
Number of trees:                  500
Sample size:                      3450
Number of independent variables:  57
Mtry:                             7
Target node size:                 1
Variable importance mode:         none
Splitrule:                        gini
OOB prediction error:             4.99 %
```

```r
class.ranger <- predict(foret2,data=spam.test)$predictions
head(class.ranger)
```

```
[1] nonspam spam    nonspam spam    spam    spam
Levels: nonspam spam
```

```r
mean(class.ranger!=spam.test$type)
```

```
[1] 0.04865334
```

Si on souhaite estimer les probabilités d'être (ou pas) spam, il faut le spécifier dans la construction de la forêt :

```r
foret.prob <- ranger(type~.,data=spam.app,probability=TRUE)
prob.ranger <- predict(foret.prob,data=spam.test)$predictions
head(prob.ranger)
```

```
        nonspam       spam
[1,] 0.74964937 0.25035063
[2,] 0.01032460 0.98967540
[3,] 0.90508132 0.09491868
[4,] 0.31905319 0.68094681
[5,] 0.03715000 0.96285000
[6,] 0.07066232 0.92933768
```

5. Comparer les temps de calcul de **randomForest** et **ranger**.

```r
system.time(randomForest(type~.,data=spam.app))
```

```
 user  system elapsed 
6.195   0.128   6.376 
```

```r
system.time(ranger(type~.,data=spam.app))
```

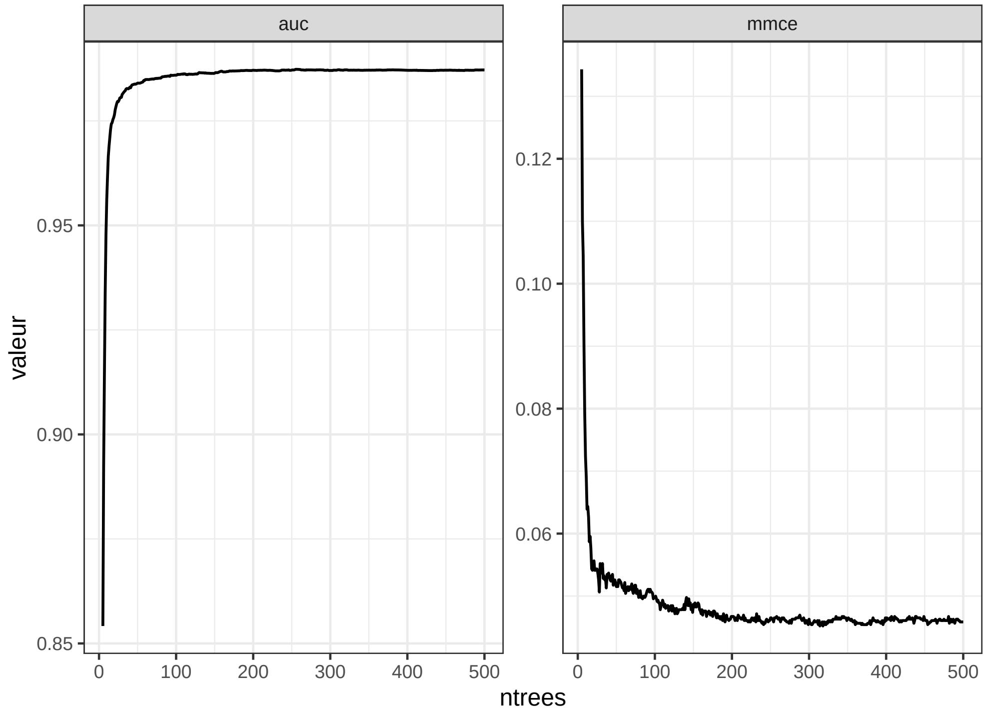
```
 user  system elapsed 
2.066   0.022   0.360 
```

ranger *est beaucoup plus rapide.*

Exercice 2.3 (Sélection des paramètres)**.** Nous nous intéressons ici au choix des paramètres de la forêt aléatoire.

1. Expliquer la sortie suivante.

```r
set.seed(12345)
library(OOBCurve)
foret1 <- ranger(type~.,data=spam,keep.inbag=TRUE)
spam.task <- mlr::makeClassifTask(data=spam,target="type")
erreurs <- OOBCurve(foret1,measures = list(mmce, auc),
                task=spam.task,data=spam)
erreurs1 <- erreurs |> as_tibble() |> mutate(ntrees=1:500) |>
  filter(ntrees>=5) |>
  pivot_longer(-ntrees,names_to="Erreur",values_to="valeur")
ggplot(erreurs1)+aes(x=ntrees,y=valeur)+geom_line()+
  facet_wrap(~Erreur,scales="free")
```



Ce graphe permet de visualiser l'évolution des erreurs OOB (AUC et erreur de classification) en fonction du nombre d'arbres. Il peut être utilisé pour voir si l'algorithme a bien "convergé". Si ce n'est pas le cas, il faut construire une forêt avec plus d'arbres.

2. Construire la forêt avec `mtry=1` et comparer ses performances avec celle construite précédemment.

```
set.seed(321)
foret2 <- ranger(type~.,data=spam,mtry=1)
foret1
```

```
Ranger result

Call:
 ranger(type ~ ., data = spam, keep.inbag = TRUE)

Type:                             Classification
Number of trees:                  500
Sample size:                      4601
Number of independent variables:  57
Mtry:                             7
Target node size:                 1
```

```
Variable importance mode:         none
Splitrule:                        gini
OOB prediction error:             4.59 %
```

```
foret2
```

```
Ranger result

Call:
 ranger(type ~ ., data = spam, mtry = 1)

Type:                             Classification
Number of trees:                  500
Sample size:                      4601
Number of independent variables:  57
Mtry:                             1
Target node size:                 1
Variable importance mode:         none
Splitrule:                        gini
OOB prediction error:             8.09 %
```

La forêt `foret1` est plus performante en terme d'erreur de classification OOB.

3. A l'aide des outils `tidymodels` sélectionner les paramètres `mtry` et `min_n` dans les grilles `c(1,6,seq(10,50,by=10),57)` et `c(1,5,100,500)`. On pourra notamment visualiser les critères en fonction des valeurs de paramètres.

   On commence par construire la grille :

   ```
   rf_grid <- expand.grid(mtry=c(1,6,seq(10,50,by=10),57),
                          min_n=c(1,5,100,500))
   ```

   On définit le workflow

   ```
   set.seed(1234)
   blocs <- vfold_cv(spam, v = 10)
   tune_spec <- rand_forest(mtry = tune(),min_n= tune()) |>
     set_engine("ranger") |>
     set_mode("classification")
   rf_wf <- workflow() |> add_model(tune_spec) |> add_formula(type ~ .)
   ```

   On effectue la validation croisée en parallélisant :

```r
cl <- makePSOCKcluster(4)
registerDoParallel(cl)
rf_res <- rf_wf |> tune_grid(resamples = blocs,grid = rf_grid)
on.exit(stopCluster(cl))
```

On étudie les meilleures valeurs de paramètres pour les deux critères considérés :

```r
rf_res |> show_best("roc_auc")
```

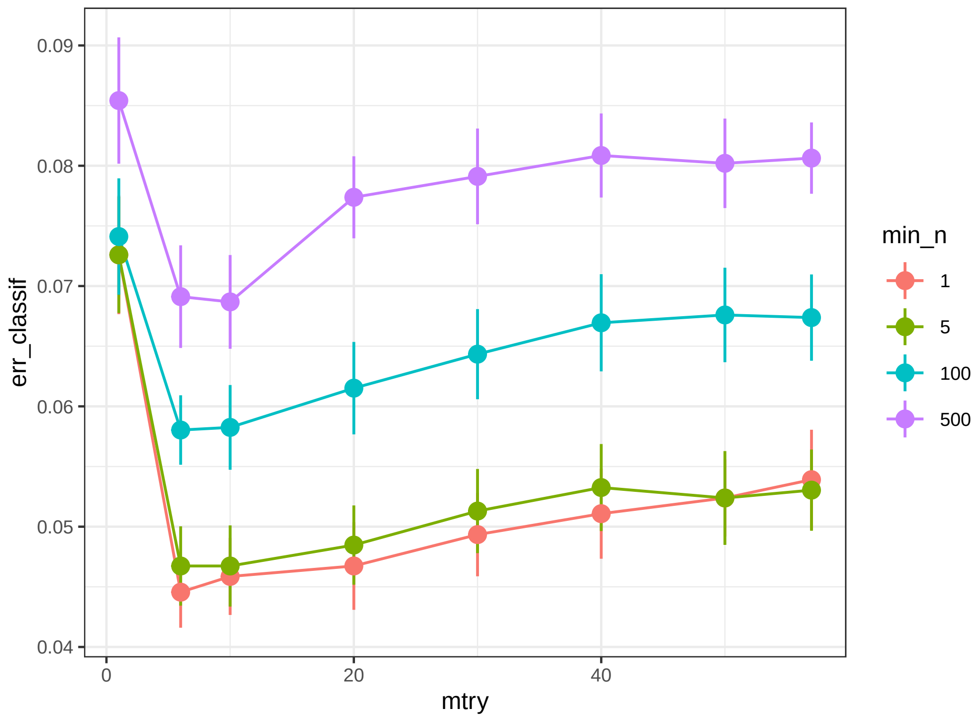
```
# A tibble: 5 x 8
   mtry min_n .metric .estimator  mean     n std_err .config
  <dbl> <dbl> <chr>   <chr>      <dbl> <int>   <dbl> <chr>
1     6     1 roc_auc binary     0.988    10 0.00157 Preprocessor1_Model02
2     6     5 roc_auc binary     0.988    10 0.00168 Preprocessor1_Model10
3    10     1 roc_auc binary     0.987    10 0.00188 Preprocessor1_Model03
4    10     5 roc_auc binary     0.987    10 0.00178 Preprocessor1_Model11
5    20     1 roc_auc binary     0.985    10 0.00195 Preprocessor1_Model04
```

```r
rf_res |> show_best("accuracy")
```

```
# A tibble: 5 x 8
   mtry min_n .metric  .estimator  mean     n std_err .config
  <dbl> <dbl> <chr>    <chr>      <dbl> <int>   <dbl> <chr>
1     6     1 accuracy binary     0.955    10 0.00296 Preprocessor1_Model02
2    10     1 accuracy binary     0.954    10 0.00320 Preprocessor1_Model03
3     6     5 accuracy binary     0.953    10 0.00330 Preprocessor1_Model10
4    10     5 accuracy binary     0.953    10 0.00337 Preprocessor1_Model11
5    20     1 accuracy binary     0.953    10 0.00364 Preprocessor1_Model04
```

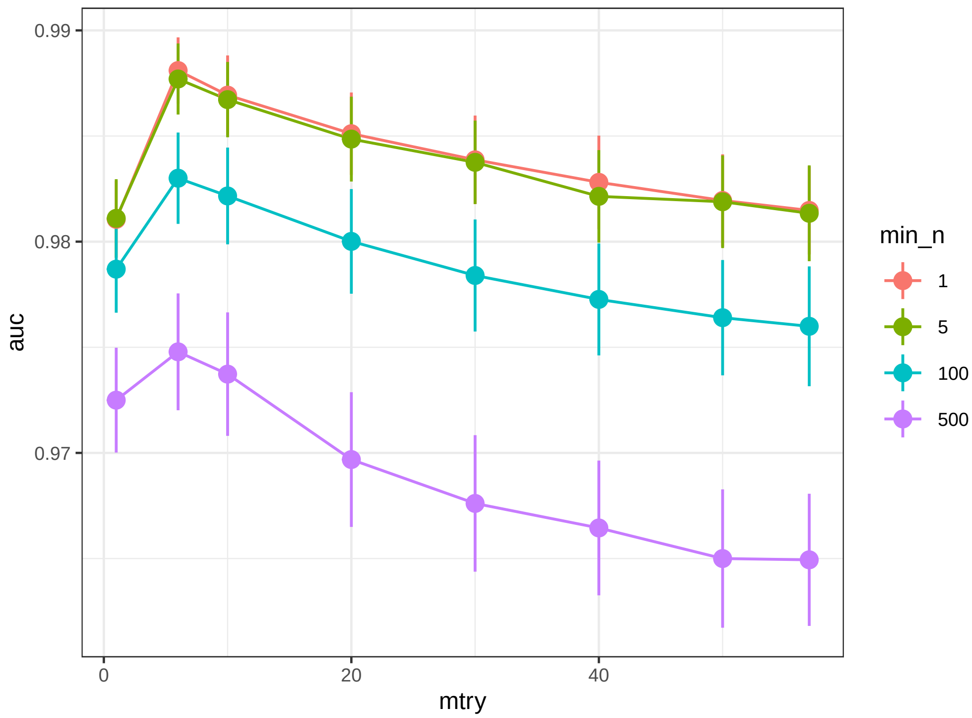
On visualise les erreurs de classification

```r
rf_res |> collect_metrics() |> filter(.metric=="accuracy") |>
  mutate(min_n=as.factor(min_n),err_classif=1-mean) |>
  ggplot()+aes(x=mtry,y=err_classif,color=min_n)+geom_line()+
  geom_pointrange((aes(ymin=err_classif-std_err,
                       ymax=err_classif+std_err)))
```



et les AUC

```
rf_res |> collect_metrics() |> filter(.metric=="roc_auc") |>
  mutate(min_n=as.factor(min_n),auc=mean) |>
  ggplot()+aes(x=mtry,y=auc,color=min_n)+geom_line()+
  geom_pointrange((aes(ymin=mean-std_err,ymax=mean+std_err)))
```

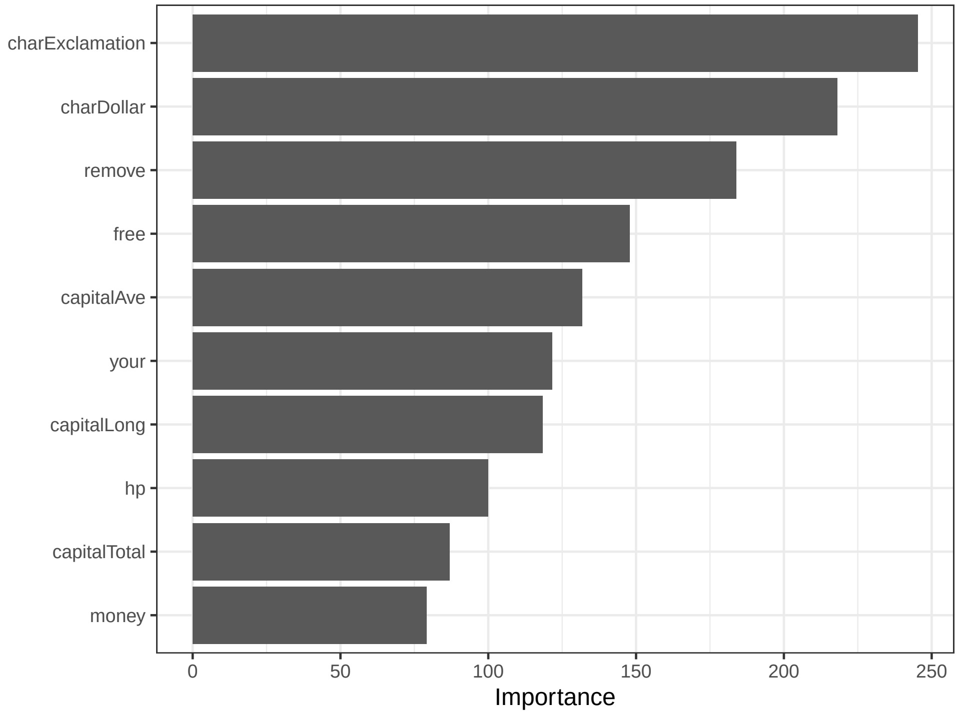


On retrouve bien des petites valeurs pour **`min_n`** *: il faut des arbres profonds pour que la forêt soit performante. Les valeurs optimales de* **`mtry`** *se situent autours de la valeur par défaut (7 ici). On peut donc conserver cette valeur pour ré-ajuster la forêt sur toutes les données :*

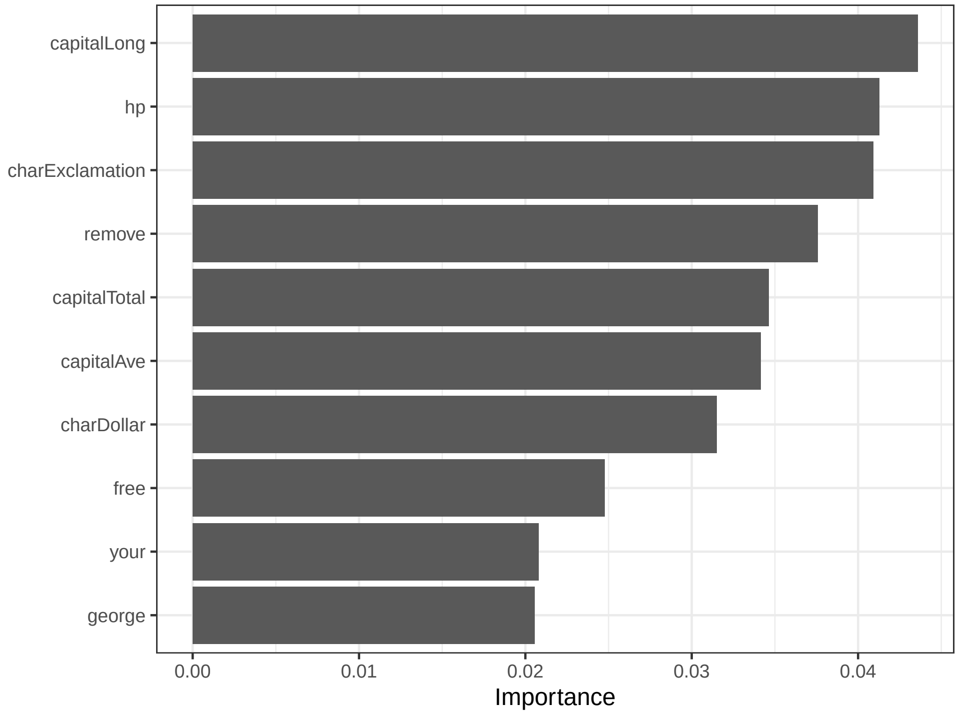
```
foret_finale <- rf_wf |>
  finalize_workflow(list(mtry=7,min_n=1)) |>
  fit(data=spam)
```

4. Visualiser l'importance des variables pour les scores d'impureté et de permutations.

```
set.seed(1234)
foret.imp <- ranger(type~.,data=spam,importance="impurity")
foret.perm <- ranger(type~.,data=spam,importance="permutation")
vip::vip(foret.imp)
```




```
vip::vip(foret.perm)
```



Exercice 2.4 (Arbre vs forêt aléatoire)**.** Proposer et mettre en œuvre une procédure permettant de comparer les performances (courbes ROC, AUC et accuracy) d'un arbre CART utilisant la procédure d'élagage proposée dans la Section 1.2 avec une forêt aléatoire.

On peut envisager différentes stratégies pour répondre à cette question. Il convient de bien préciser ce que l'on souhaite faire. Il ne s'agit pas de sélectionner les paramètres d'un algorithme. On souhaite comparer deux algorithmes de prévision :

- *un arbre CART qui utilise la procédure d'élagage CART : création de la suite optimale de sous arbre puis sélection d'un arbre dans cette suite en estimant l'erreur de classification par validation croisée ;*
- *une forêt aléatoire qui prend les valeurs par défaut pour* `nodesize` *et qui sélection* `mtry` *en minimisant l'erreur OOB (c'est un choix).*

Il faut estimer les risques demandés en se donnant une stratégie de ré-échantillonnage. On choisit une validation croisée 10 blocs :

```
set.seed(123)
blocs <- vfold_cv(spam, v = 10)
```

On crée une fonction spécifique à chaque algorithme qui calculera les prévisions de nouveaux individus :

```r
prev.arbre <- function(df,newX){
  arbre <- rpart(type~.,data=df,cp=1e-8,minsplit=15)
  cp_opt <- arbre$cptable |> as.data.frame() |>
    filter(xerror==min(xerror)) |>
    dplyr::select(CP) |> slice(1) |> as.numeric()
  arbre.opt <- prune(arbre,cp=cp_opt)
  predict(arbre,newdata=newX,type="prob")[,2]
}
```

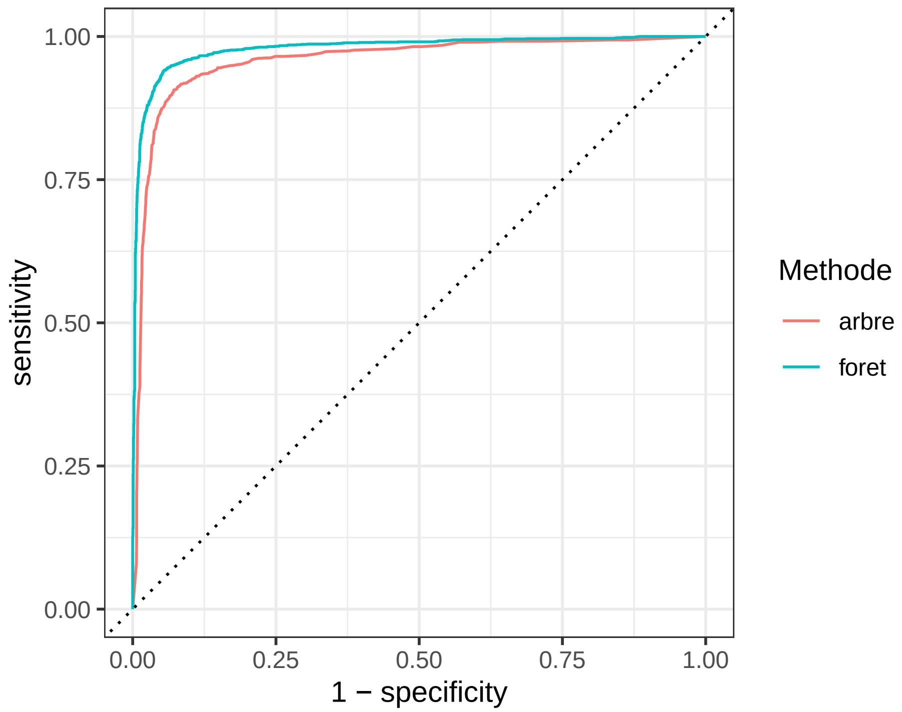
```r
prev.foret <- function(df,grille.mtry=c(seq(1,55,by=5),57),newX){
  err <- rep(0,length(grille.mtry))
  for (m in 1:length(grille.mtry)){
    err[m] <- ranger(type~.,data=df)$prediction.error
  }
  foret <- ranger(type~.,data=df,probability=TRUE,
                  mtry=grille.mtry[which.min(err)])
  predict(foret,data=newX,type="response")$predictions[,2]
}
```

On effectue la validation croisée :

```r
set.seed(321)
score <- as_tibble(matrix(0,nrow=nrow(spam),ncol=2))
names(score) <- c("arbre","foret")
for (k in 1:10){
  k
  ind.app <- blocs$splits[[k]]$in_id
  dapp <- spam[ind.app,]
  dtest <- spam[-ind.app,]
  score[-ind.app,1] <- prev.arbre(df=dapp,newX = dtest)
  score[-ind.app,2] <- prev.foret(df=dapp,newX = dtest)
}
score1 <- score |> mutate(obs=spam$type) |>
  pivot_longer(-obs,names_to = "Methode",values_to = "Prob") |>
  mutate(class=recode_factor(as.numeric(Prob>0.5),
                             `0`="nonspam",`1`="spam"))
```

On déduit la courbe ROC, l'AUC

```r
score1 |> group_by(Methode) |>
  roc_curve(obs,Prob,event_level="second") |> autoplot()
```




```
score1 |> group_by(Methode) |> roc_auc(obs,Prob,event_level="second")
```

```
# A tibble: 2 x 4
  Methode .metric .estimator .estimate
  <chr>   <chr>   <chr>          <dbl>
1 arbre   roc_auc binary         0.958
2 foret   roc_auc binary         0.979
```

et l'accuracy

```
score1 |> group_by(Methode) |> accuracy(obs,class)
```

```
# A tibble: 2 x 4
  Methode .metric  .estimator .estimate
  <chr>   <chr>    <chr>          <dbl>
1 arbre   accuracy binary         0.919
2 foret   accuracy binary         0.939
```

3 Gradient boosting

Les algorithmes de gradient boosting permettent de minimiser des pertes empiriques de la forme

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\ell(y_i, f(x_i)).$$

où $\ell : \mathbb{R}\times\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ est une fonction de coût convexe en son second argument. Il existe plusieurs type d'algorithmes boosting. Un des plus connus et utilisés a été proposé par Friedman (2001), c'est la version que nous étudions dans cette partie.

Cette approche propose de chercher la meilleure combinaison linéaire d'arbres binaires, c'est-à-dire que l'on recherche $g(x)=\sum_{m=1}^{M}\alpha_m h_m(x)$ qui minimise

$$\mathcal{R}_n(g)=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\ell(y_i, g(x_i)).$$

Optimiser sur toutes les combinaisons d'arbres binaires se révélant souvent trop compliqué, Friedman (2001) utilise une descente de gradient pour construire la combinaison d'arbres de façon récursive. L'algorithme est le suivant :

Entrées :

- $d_n=(x_1,y_1),\dots,(x_n,y_n)$ l'échantillon, λ un paramètre de régularisation tel que $0<\lambda\leq 1$.
- $M\in\mathbb{N}$ le nombre d'itérations.
- paramètres de l'arbre (nombre de coupures…)

Itérations :

1. Initialisation : $g_0(.)=\operatorname{argmin}_c \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\ell(y_i,c)$
2. Pour $m=1$ à M :

    a. Calculer l'opposé du gradient $-\frac{\partial}{\partial g(x_i)}\ell(y_i,g(x_i))$ et l'évaluer aux points $g_{m-1}(x_i)$:

    $$U_i=-\frac{\partial}{\partial g(x_i)}\ell(y_i,g(x_i))\Big|_{g(x_i)=g_{m-1}(x_i)},\quad i=1,\dots,n.$$

    b. Ajuster un arbre sur l'échantillon $(x_1,U_1),\dots,(x_n,U_n)$, on le note h_m.

c. Mise à jour : $g_m(x) = g_{m-1}(x) + \lambda h_m(x)$.

Sortie : la suite $(g_m(x))_m$.

Sur **R** On peut utiliser différents packages pour faire du gradient boosting. Nous utilisons ici le package **gbm** (Ridgeway 2006).

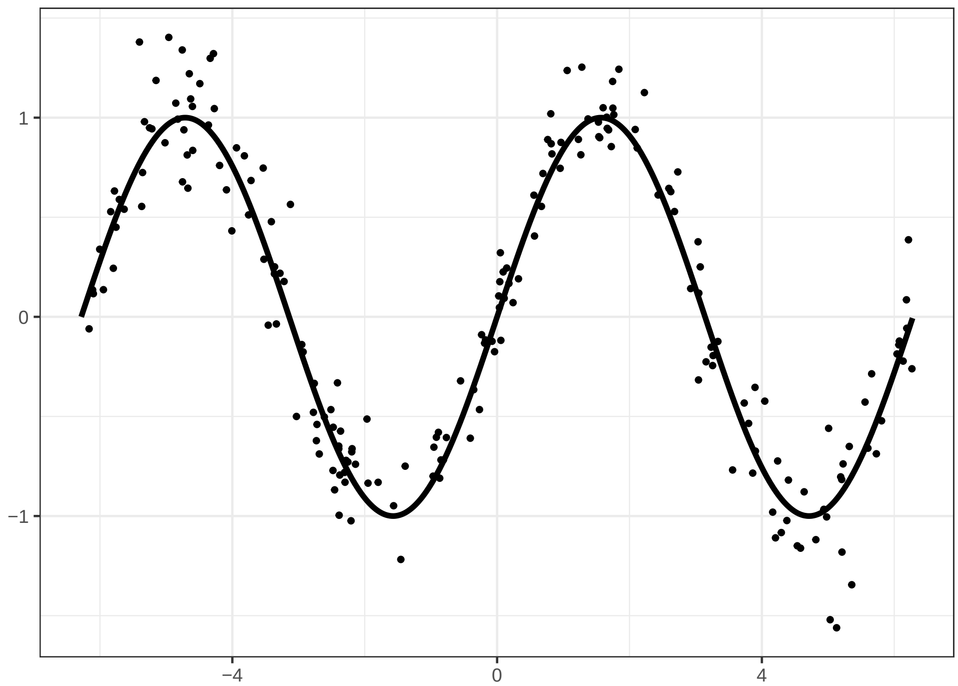
3.1 Un exemple simple en régression

On considère un jeu de données $(x_i, y_i), i = 1, \dots, 200$ issu d'un modèle de régression

$$y_i = m(x_i) + \varepsilon_i$$

où la vraie fonction de régression est la fonction **sinus** (mais on va faire comme si on ne le savait pas).

```
x <- seq(-2*pi,2*pi,by=0.01)
y <- sin(x)
set.seed(1234)
X <- runif(200,-2*pi,2*pi)
Y <- sin(X)+rnorm(200,sd=0.2)
df1 <- data.frame(X,Y)
df2 <- data.frame(X=x,Y=y)
p1 <- ggplot(df1)+aes(x=X,y=Y)+geom_point()+
  geom_line(data=df2,linewidth=1)+xlab("")+ylab("")
p1
```



1. Rappeler ce que siginifie le L_2-boosting.

   Il s'agit de l'algorithme de gradient boosting présenté ci-dessus appliqué à la fonction de perte

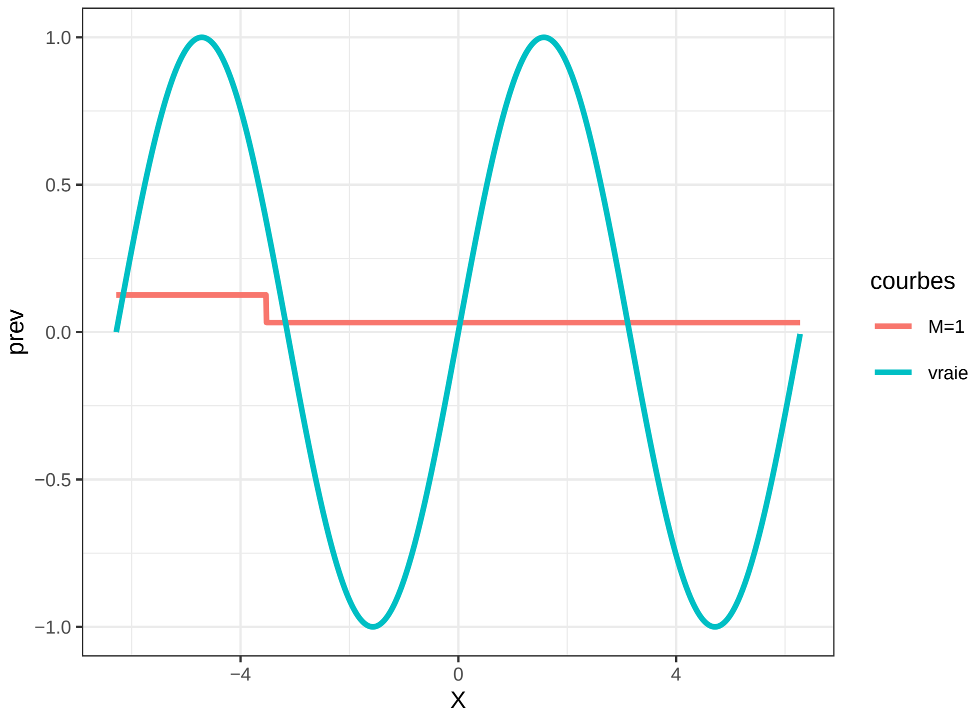
   $$\ell(y, f(x)) = \frac{1}{2}(y - f(x))^2.$$

2. A l'aide de la fonction **gbm** du package **gbm** construire un algorithme de L_2-boosting. On utilisera 500000 itérations et gardera les autres valeurs par défaut de paramètres, à l'exception de `bag.fraction` qu'on prendra égal à 1.

```
library(gbm)
L2boost <- gbm(Y~.,data=df1,n.trees = 500000,
               distribution="gaussian",bag.fraction = 1)
```

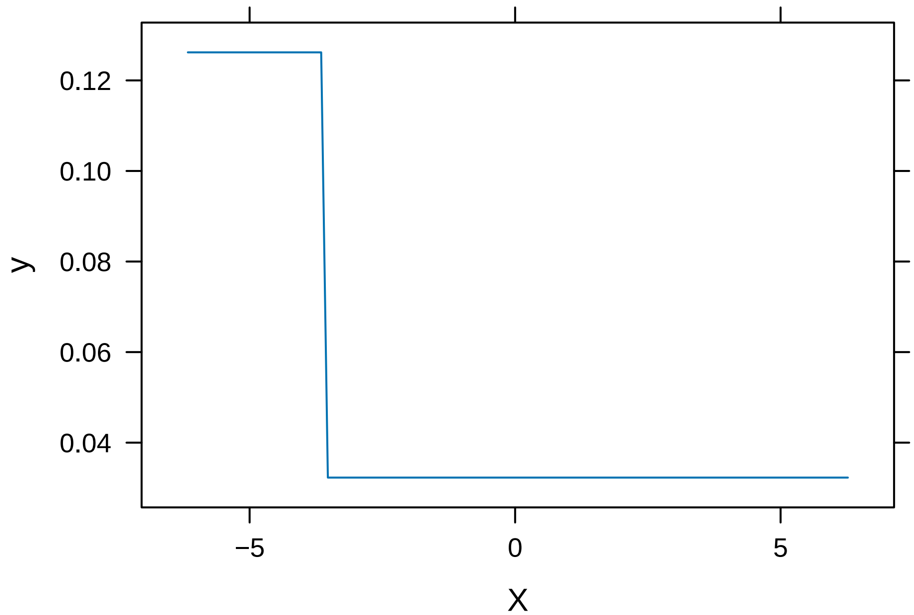
3. Visualiser l'estimateur à la première itération. On pourra faire un **predict** avec l'option `n.trees` ou utiliser directement la fonction **plot.gbm** avec l'option `n.trees`.

```
prev1 <- predict(L2boost,newdata=df2,n.trees=1)
df3 <- df2 |> rename(vraie=Y) |> mutate(`M=1`=prev1)
df4 <- df3 |> pivot_longer(-X,names_to="courbes",values_to="prev")
ggplot(df4)+aes(x=X,y=prev,color=courbes)+geom_line(size=1)
```



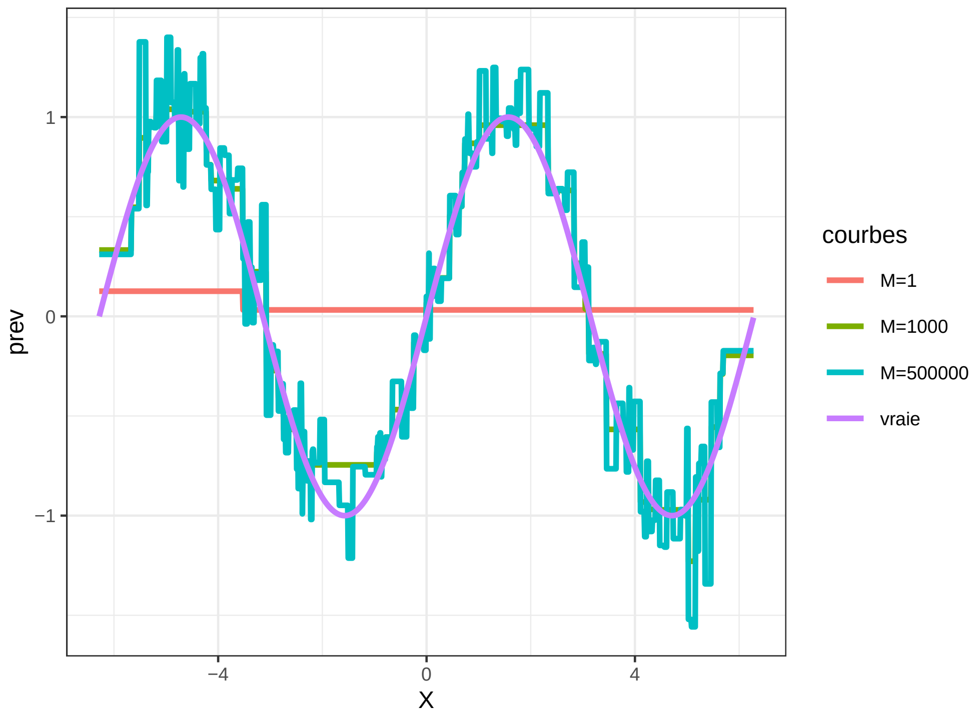
On remarque que l'estimateur est un arbre avec une seule coupure. On aurait aussi pu utiliser :

```
plot(L2boost,n.trees=1)
```



4. Faire de même pour les itérations 1000 et 500000.

```
prev1000 <- predict(L2boost,newdata=df2,n.trees=1000)
prev500000 <- predict(L2boost,newdata=df2,n.trees=500000)
df31 <- df3 |> mutate(`M=1000`=prev1000,`M=500000`=prev500000)
df41 <- df31 |> pivot_longer(-X,names_to="courbes",values_to="prev")
ggplot(df41)+aes(x=X,y=prev,color=courbes)+geom_line(size=1)
```

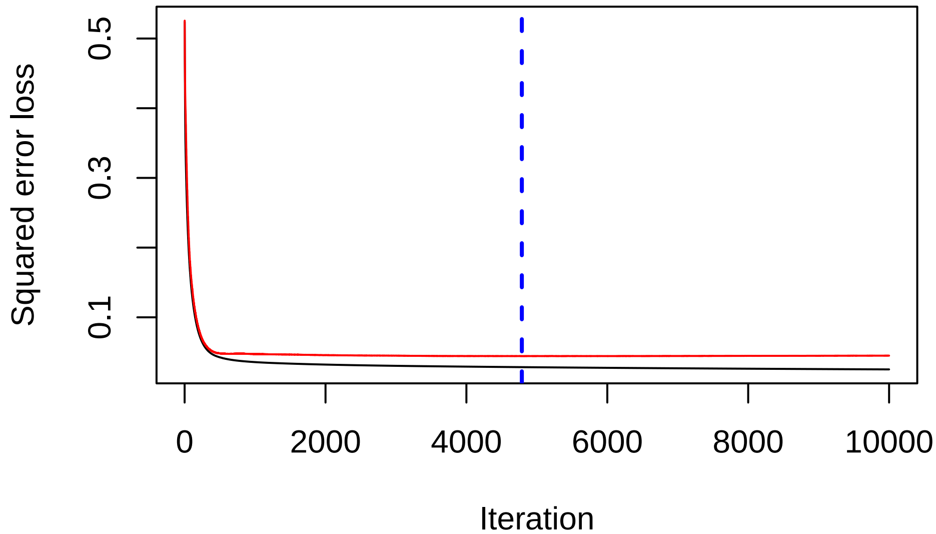


On sur-ajuste lorsque le nombre d'itérations est trop important.

5. Sélectionner le nombre d'itérations par la procédure de votre choix.

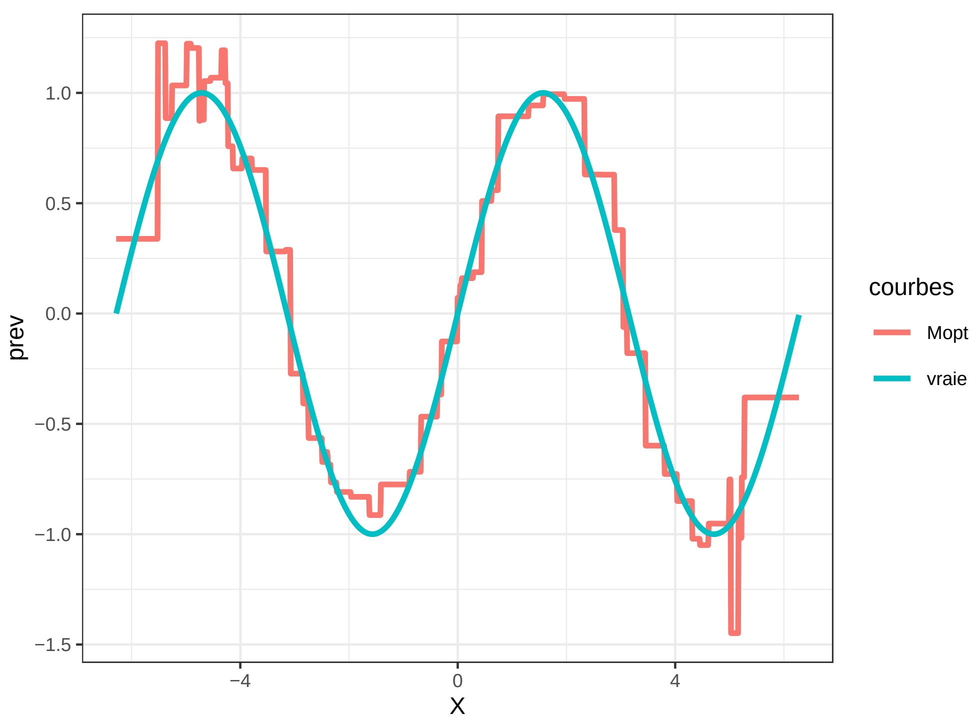
   *On propose de faire une validation hold out. C'est assez facile avec **gbm** il suffit de renseigner l'option **`train.fraction`** de **gbm**.*

```
#parallel:::setDefaultClusterOptions(setup_strategy = "sequential")
L2boost.sel <- gbm(Y~.,data=df1,n.trees = 10000,distribution="gaussian",
                   bag.fraction = 1,train.fraction=0.75)
iter_opt <- gbm.perf(L2boost.sel)
```



6. Représenter l'estimateur sélectionné.

```
prev_opt <- predict(L2boost.sel,newdata=df2,n.trees=iter_opt)
df5 <- df2 |> rename(vraie=Y) |> mutate(Mopt=prev_opt)
df51 <- df5 |> pivot_longer(-X,names_to="courbes",values_to="prev")
ggplot(df51)+aes(x=X,y=prev,color=courbes)+geom_line(size=1)
```



3.2 Adaboost et logitboost pour la classification binaire.

On considère le jeu de données **spam** du package **kernlab**.

```
library(kernlab)
data(spam)
set.seed(1234)
spam <- spam[sample(nrow(spam)),]
```

1. Exécuter la commande et commenter la sortie.

   ```
   model_ada1 <- gbm(type~.,data=spam,distribution="adaboost",
                     interaction.depth=2,
                     shrinkage=0.05,n.trees=500)
   ```

   On obtient le message d'erreur suivant :

   ```
   model_ada1 <- gbm(type~.,data=spam,distribution="adaboost",
                     interaction.depth=2,
                     shrinkage=0.05,n.trees=500)
   ```

   ```
   Error in gbm.fit(x = x, y = y, offset = offset, distribution = distribution, : This vers
   ```

2. Proposer une correction permettant de faire fonctionner l'algorithme.

   Il est nécessaire que la variable qualitative à expliquer soit codée 0-1 pour adaboost.

   ```
   spam1 <- spam
   spam1$type <- as.numeric(spam1$type)-1
   set.seed(1234)
   model_ada1 <- gbm(type~.,data=spam1,distribution="adaboost",
                     interaction.depth=2,
                     shrinkage=0.05,n.trees=500)
   ```

3. Expliciter le modèle ajusté par la commande précédente.

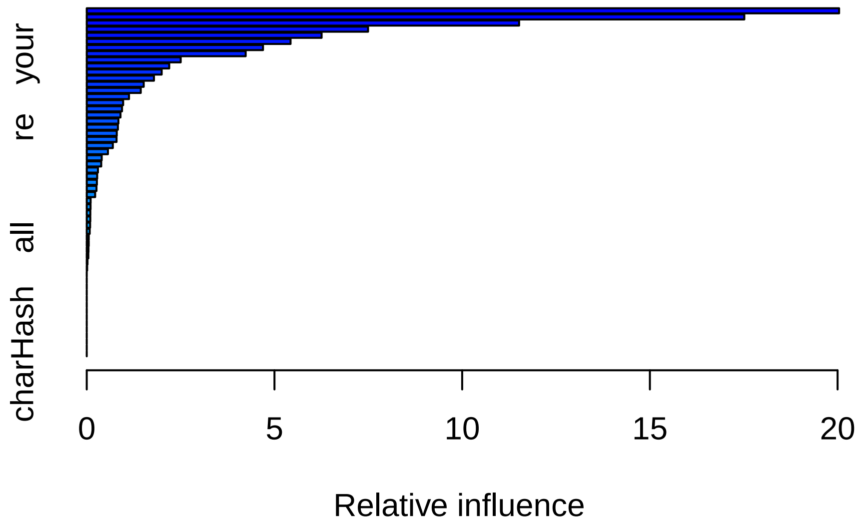
   L'algorithme ***gbm*** *est une descente de gradient qui minimise la fonction de perte*

   $$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\ell(y_i,g(x_i)).$$

   Dans le cas de ***adaboost*** *on utilise la perte exponentielle :* $\ell(y,g(x))=\exp(-yg(x))$.

4. Effectuer un **summary** du modèle ajusté. Expliquer la sortie.

```r
summary(model_ada1)
```



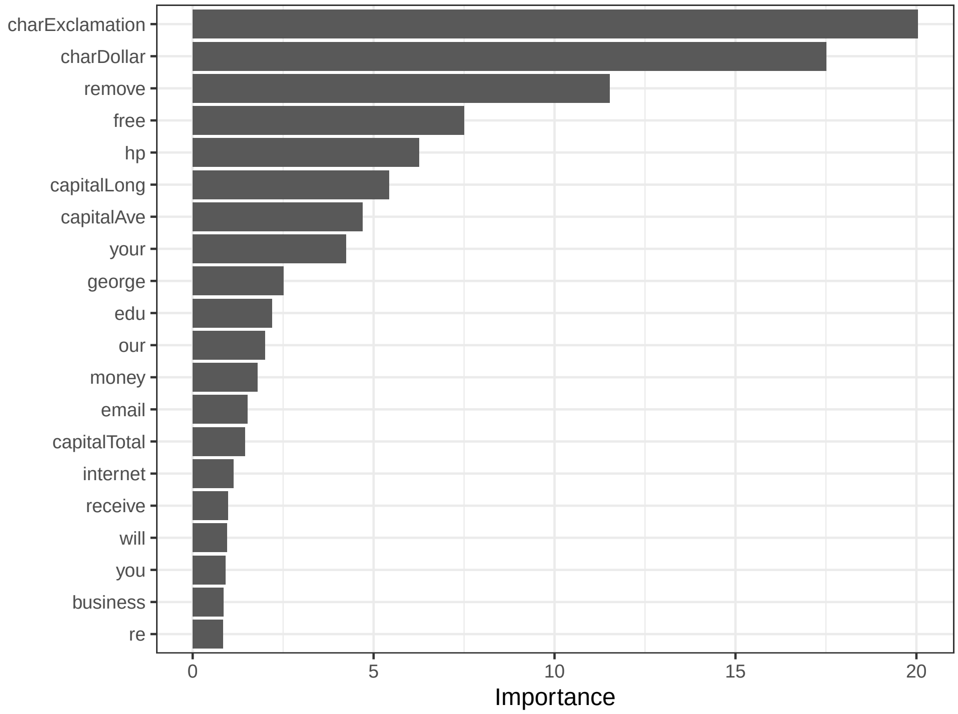

```
                            var     rel.inf
charExclamation charExclamation 20.04035224
charDollar           charDollar 17.51535261
remove                   remove 11.51692621
free                       free  7.49397637
hp                           hp  6.25654932
capitalLong         capitalLong  5.42905223
capitalAve           capitalAve  4.69521299
your                       your  4.23371585
george                   george  2.50300727
edu                         edu  2.19692796
our                         our  1.99655393
money                     money  1.79063219
email                     email  1.51773292
capitalTotal       capitalTotal  1.43872496
internet               internet  1.12579132
receive                 receive  0.97001932
will                       will  0.94015881
you                         you  0.89915372
business               business  0.84418397
re                           re  0.82959153
num1999                 num1999  0.80016393
num650                   num650  0.79468746
meeting                 meeting  0.69494729
num000                   num000  0.56448978
```

```
charRoundbracket   charRoundbracket  0.39921437
report                       report  0.38621968
charSemicolon         charSemicolon  0.29835251
credit                       credit  0.27841575
over                           over  0.27064075
order                         order  0.26017226
mail                           mail  0.22398163
technology               technology  0.10340435
hpl                             hpl  0.10151723
original                   original  0.09615196
font                           font  0.09539134
make                           make  0.08995855
project                     project  0.07970985
all                             all  0.05392468
people                       people  0.05359692
address                     address  0.04690996
parts                         parts  0.04260362
conference               conference  0.02037549
num85                         num85  0.01155488
num3d                         num3d  0.00000000
addresses                 addresses  0.00000000
lab                             lab  0.00000000
labs                           labs  0.00000000
telnet                       telnet  0.00000000
num857                       num857  0.00000000
data                           data  0.00000000
num415                       num415  0.00000000
pm                               pm  0.00000000
direct                       direct  0.00000000
cs                               cs  0.00000000
table                         table  0.00000000
charSquarebracket charSquarebracket  0.00000000
charHash                   charHash  0.00000000
```

On obtient un indicateur qui permet de mesurer l'importance des variable dans la construction de la méthode.

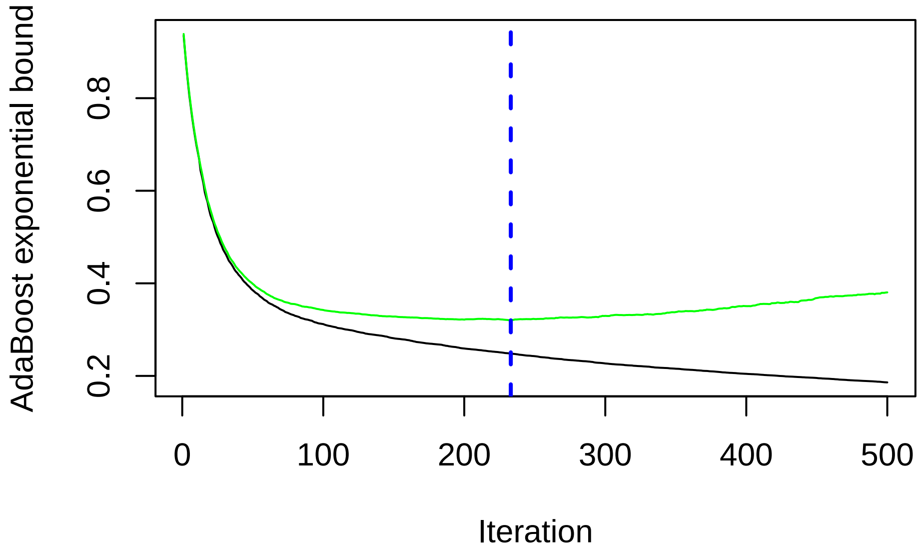
5. Utiliser la fonction **vip** du package **vip** pour retrouver ce sorties.

```r
library(vip)
vip(model_ada1,num_features = 20L)
```



6. Sélectionner le nombre d'itérations pour l'algorithme adaboost en faisant une validation croisée 5 blocs.

```
model_ada2 <- gbm(type~.,data=spam1,distribution="adaboost",
                  interaction.depth=2,bag.fraction=1,
                  cv.folds = 5,n.trees=500)
gbm.perf(model_ada2)
```




```
[1] 233
```

7. Pour l'estimateur sélectionné, calculer la prévision (label et probabilité d'être un spam) de l'individu suivant :

```
xnew <- spam[1000,-58]
```

On obtient la probabilité d'être spam avec

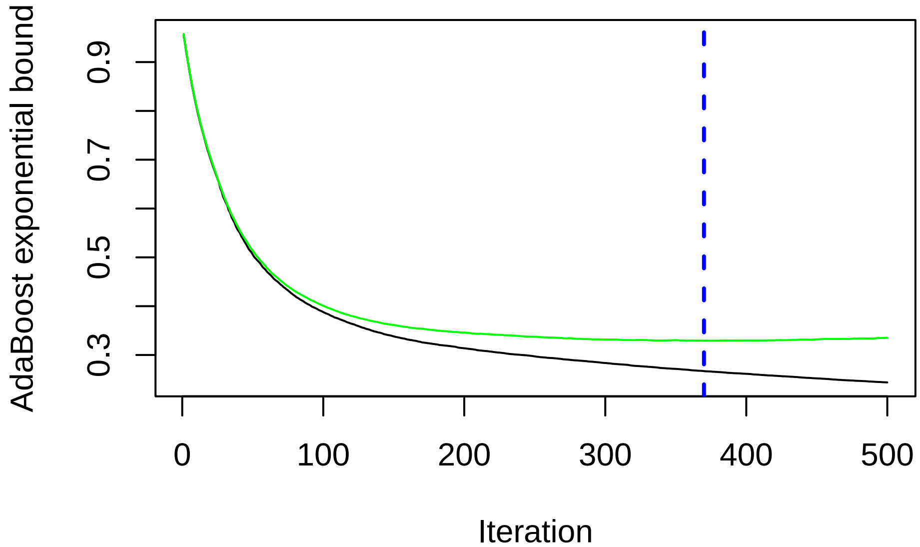
```
predict(model_ada2,newdata=xnew,type="response")
```

```
[1] 0.0007065154
```

*On prédira donc **nonspam**.*

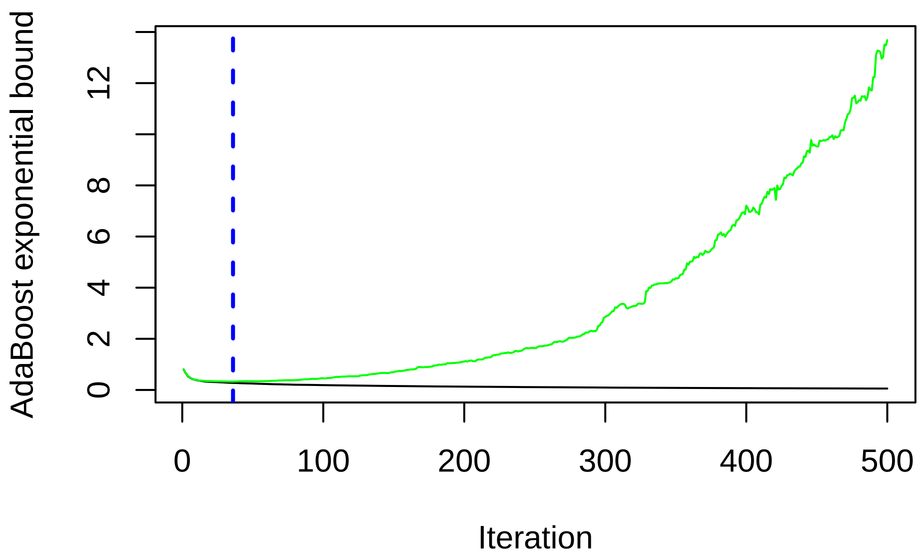
8. Faire la même procédure en changeant la valeur du paramètre **shrinkage** (par exemple 0.05 et 0.5). Interpréter.

```
model_ada3 <- gbm(type~.,data=spam1,distribution="adaboost",
                  interaction.depth=2,bag.fraction=1,
                  cv.folds = 5,n.trees=500,shrinkage=0.05)
gbm.perf(model_ada3)
```




```
[1] 370
```

```
model_ada4 <- gbm(type~.,data=spam1,distribution="adaboost",
                  interaction.depth=2,bag.fraction=1,
                  cv.folds = 5,n.trees=500,shrinkage=0.5)
gbm.perf(model_ada4)
```




```
[1] 36
```

*Le nombre d'itérations optimal augmente lorsque **shrinkage** diminue. C'est logique car ce dernier paramètre contrôle la vitesse de descente de gradient : plus il est grand, plus* *on minimise vite et moins on itère. Il faut néanmoins veiller à ne pas le prendre trop petit pour avoir un estimateur stable. Ici, 0.05 semble être une bonne valeur.*

9. Expliquer la différence entre **adaboost** et **logitboost** et précisez comment on peut mettre en œuvre ce dernier algorithme.

   *La seule différence se situe au niveau de la **fonction de perte**, adaboost utilise*

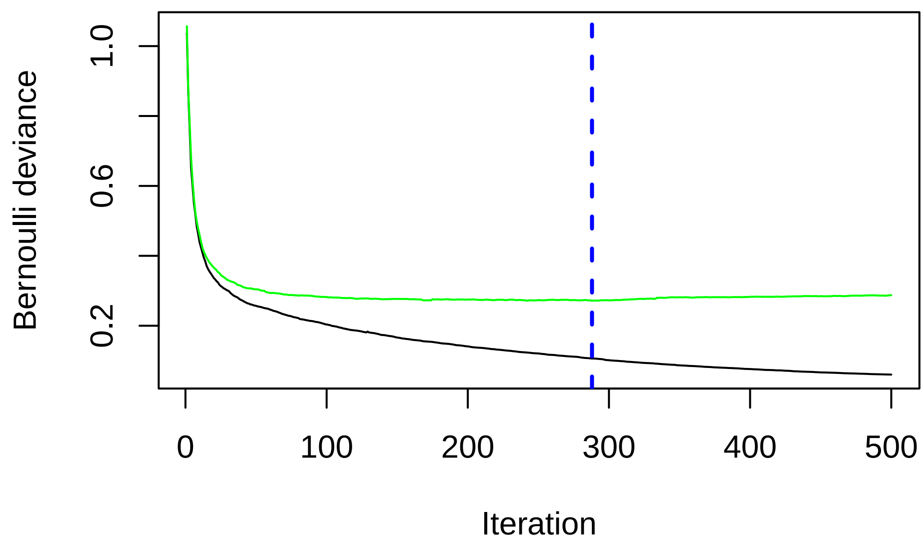
   $$\exp(-yg(x))$$

   tandis que logitboost utilise

   $$\log(1 + \exp(-2yg(x)))$$

   *Avec **gbm** il faudra utiliser l'option `distribution="bernoulli"` pour faire du logitboost, par exemple :*

```
set.seed(4321)
logitboost <- gbm(type~.,data=spam1,distribution="bernoulli",
                  interaction.depth=2,
                  bag.fraction=1,cv.folds = 5,
                  n.trees=500,shrinkage=0.4)
gbm.perf(logitboost)
```




```
[1] 288
```

3.3 Comparaison de méthodes

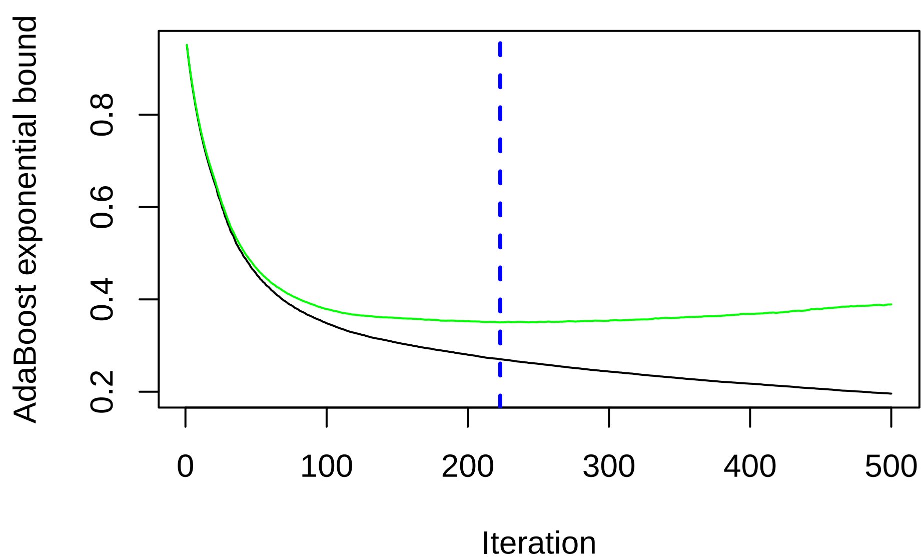
On reprend les données `spam` de l'exercice précédent et on les coupe en un échantillon d'apprentissage pour entraîner les algorithmes et un échantillon test pour les comparer :

```r
set.seed(1234)
perm <- sample(1:nrow(spam))
app <- spam[perm[1:3000],]
test <- spam[-perm[1:3000],]
```

1. Sur les données d'apprentissage uniquement, entraîner

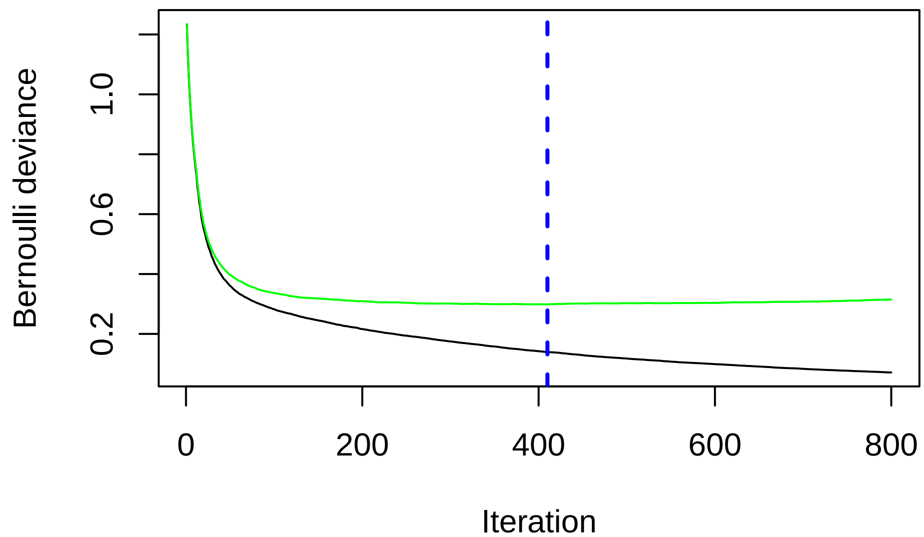
    - l'algorithme **adaboost** en sélectionnant le nombre d'itérations par validation croisée
    - l'algorithme **logitboost** en sélectionnant le nombre d'itérations par validation croisée
    - une **forêt aléatoire** avec les paramètres par défaut
    - un **arbre CART**

```r
set.seed(4321)
app1 <- app |> mutate(type=as.numeric(type)-1)
model_ada <- gbm(type~.,data=app1,distribution="adaboost",
                 interaction.depth=3,bag.fraction=1,
                 shrinkage = 0.05,
                 cv.folds = 5,n.trees=500)
nb_ada <- gbm.perf(model_ada)
```




```r
set.seed(5432)
model_logit <- gbm(type~.,data=app1,distribution="bernoulli",
                   interaction.depth=3,bag.fraction=1,
                   cv.folds = 5,n.trees=800)
```

```
nb_logit <- gbm.perf(model_logit)
```



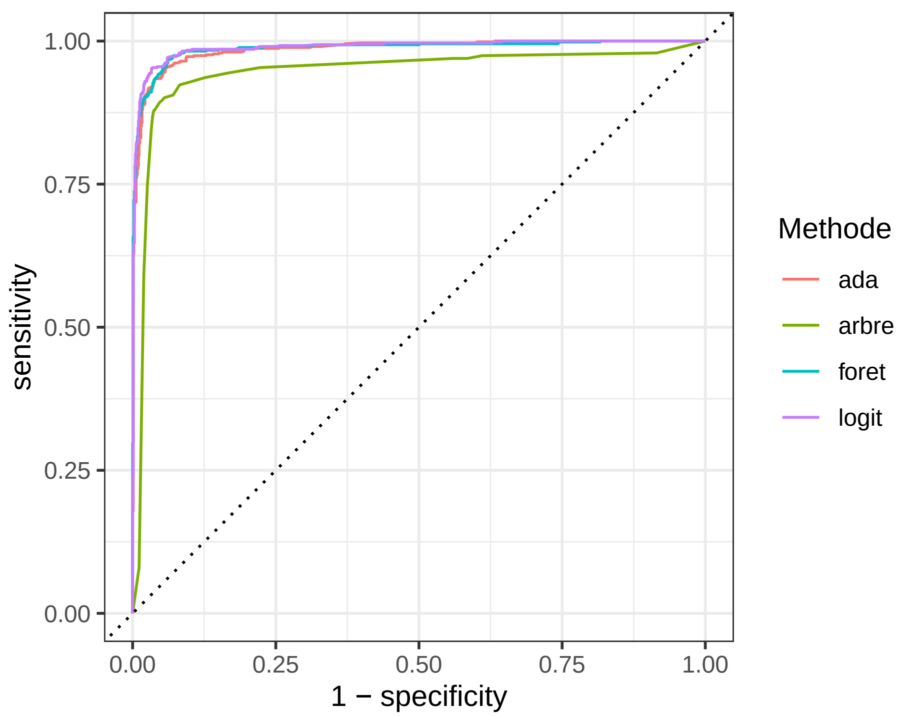

```
library(ranger)
foret <- ranger(type~.,data=app,probability=TRUE)
library(rpart)
arbre <- rpart(type~.,data=app,cp=1e-8,minsplit=2)
cp_opt <- arbre$cptable |> as.data.frame() |>
    filter(xerror==min(xerror)) |> dplyr::select(CP) |>
    dplyr::slice(1) |> as.numeric()
arbre.opt <- prune(arbre,cp=cp_opt)
```

2. Pour les 4 algorithmes, calculer, pour tous les individus de l'échantillon `test`, la probabilité que ce soit un spam. On pourra stocker toutes ces probabilités dans un même `tibble`.

```
prob <- tibble(ada=predict(model_ada,newdata=test,n.trees=nb_ada,
                           type="response"),
               logit=predict(model_logit,newdata=test,n.trees=nb_logit,
                             type="response"),
               foret=predict(foret,data=test)$prediction[,2],
               arbre=predict(arbre.opt,newdata=test)[,2],
               obs=test$type)
```

3. Comparer les 3 algorithmes avec la courbe ROC, l'AUC et l'erreur de classification.

```r
library(tidymodels)
prob1 <- prob |> pivot_longer(-obs,names_to="Methode",
                               values_to="score")
prob1 |> group_by(Methode) |>
  roc_curve(truth=obs,score,event_level="second") |>
  autoplot()
```




```r
prob1 |> group_by(Methode) |>
  roc_auc(truth=obs,score,event_level="second") |>
  arrange(desc(.estimate))
```

```
# A tibble: 4 x 4
  Methode .metric .estimator .estimate
  <chr>   <chr>   <chr>          <dbl>
1 logit   roc_auc binary         0.989
2 foret   roc_auc binary         0.987
3 ada     roc_auc binary         0.986
4 arbre   roc_auc binary         0.944
```

```r
prob1 |> mutate(class=recode(round(score),
                             `0`="nonspam",`1`="spam")) |>
  group_by(Methode) |> summarize(err=mean(class!=obs)) |>
  arrange(err)
```

```
# A tibble: 4 x 2
  Methode    err
  <chr>    <dbl>
1 logit   0.0412
2 ada     0.0525
3 foret   0.0525
4 arbre   0.0750
```

4. Comment aurait-on pu faire pour obtenir des résultats plus précis ?

   Avec une validation croisée plutôt qu'un simple découpage apprentissage/test.

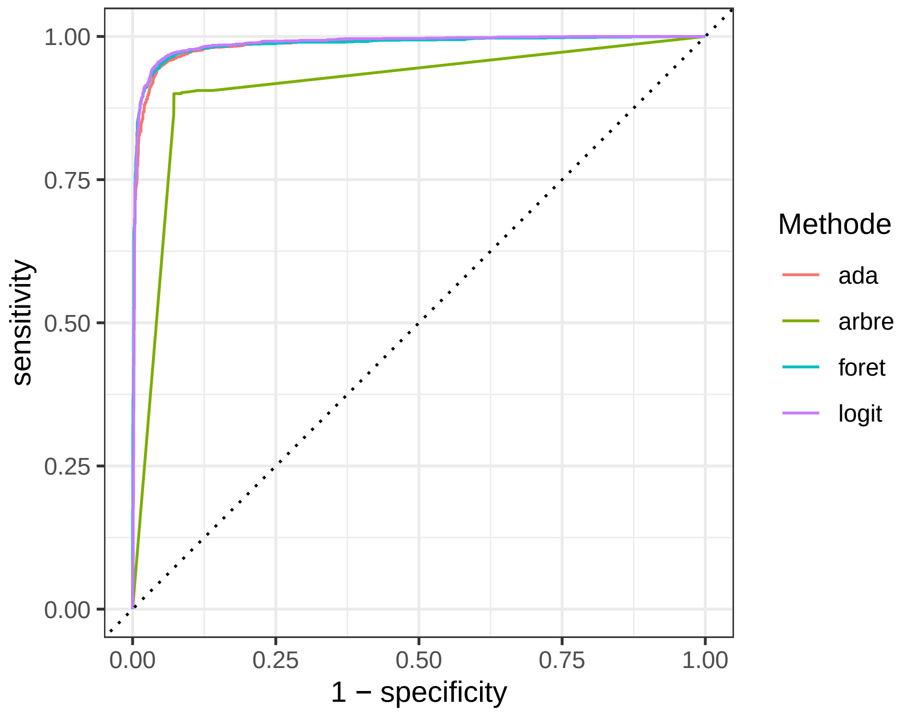
```r
set.seed(1234)
bloc <- sample(1:10,nrow(spam),replace=TRUE)
table(bloc)
```

```
bloc
  1   2   3   4   5   6   7   8   9  10
438 455 449 439 496 471 442 472 470 469
```

```r
library(rpart)
set.seed(5678)
spam1 <- spam |> mutate(type=as.numeric(type)-1)
score <- matrix(0,nrow=nrow(spam),ncol=4) |> as_tibble()
names(score) <- c("arbre","ada","logit","foret")
for (k in 1:10){
  #print(k)
  ind.test <- bloc==k
  dapp <- spam1[!ind.test,]
  dtest <- spam1[ind.test,]
  dapp2 <- spam[!ind.test,]
  dtest2 <- spam[ind.test,]
  arbre <- rpart(type~.,data=dapp2,cp=1e-8,minsplit=2)
  cp_opt <- arbre$cptable |> as.data.frame() |>
    filter(xerror==min(xerror)) |> dplyr::select(CP) |>
    slice(1) |> as.numeric()
  arbre.opt <- prune(arbre,cp=cp_opt)
  ada <- gbm(type~.,data=dapp,distribution="adaboost",
             interaction.depth=3,bag.fraction=1,
             shrinkage = 0.05,
```

```
              cv.folds = 5,n.trees=500)
  nb_ada <- gbm.perf(ada,plot.it=FALSE)
  logit <- gbm(type~.,data=dapp,distribution="bernoulli",
               interaction.depth=3,bag.fraction=1,
               cv.folds = 5,n.trees=800)
  nb_logit <- gbm.perf(logit,plot.it=FALSE)
  foret <- ranger(type~.,data=dapp2,probability=TRUE)

  score[ind.test,] <- tibble(arbre=predict(arbre,newdata=dtest,
                                     type="prob")[,2],
                             ada=predict(ada,newdata=dtest,
                                     n.trees=nb_ada,
                                     type="response"),
                             logit=predict(logit,newdata=dtest,
                                     n.trees=nb_logit,
                                     type="response"),
                             foret=predict(foret,
                                     data=dtest)$prediction[,2])
}
```

```
score1 <- score |> mutate(obs=spam$type) |>
  pivot_longer(-obs,names_to="Methode",values_to="score")
score1 |> group_by(Methode) |>
  roc_curve(truth=obs,score,event_level="second") |>
  autoplot()
```




```
score1 |> group_by(Methode) |>
  roc_auc(truth=obs,score,event_level="second") |>
  arrange(desc(.estimate))
```

```
# A tibble: 4 x 4
  Methode .metric .estimator .estimate
  <chr>   <chr>   <chr>          <dbl>
1 logit   roc_auc binary         0.988
2 foret   roc_auc binary         0.986
3 ada     roc_auc binary         0.985
4 arbre   roc_auc binary         0.912
```

3.4 Xgboost

L'algorithme **xgboost** Chen et Guestrin (2016) va plusloin que le **gradient boosting** en minimisant une approximation à l'odre 2 de la fonction de perte et en ajoutant un terme de régularisation dans la fonction objectif. On cherche toujours des combinaisons d'arbres

$$f_b(x) = f_{b-1}(x) + h_b(x) \quad \text{où} \quad h_b(x) = w_{q(x)}$$

est un arbre à T feuilles : $w \in \mathbb{R}^T$ et $q : \mathbb{R}^d \to \{1, 2, \dots, T\}$. À l'étape b, on cherche l'arbre qui minimise la **fonction objectif** de la forme

$$\begin{aligned}
\mathrm{obj}^{(b)} &= \sum_{i=1}^{n} \ell(y_i, f_b(x_i)) + \sum_{j=1}^{b} \Omega(h_j) \\
&= \sum_{i=1}^{n} \ell(y_i, f_{b-1}(x_i) + h_b(x_i)) + \sum_{j=1}^{b} \Omega(h_j)
\end{aligned}$$

où $\Omega(h_j)$ est un terme de **régularisation** qui va pénaliser h_j en fonction de son nombre de feuilles T et des valeurs prédites w. Un développement limité à l'ordre 2 permet d'approcher cette fonction par

$$\mathrm{obj}^{(b)} = \sum_{i=1}^{n} [\ell_i^{(1)} h_b(x_i) + \frac{1}{2} \ell_i^{(2)} h_b^2(x_i)] + \Omega(h_b) + \text{constantes},$$

avec

$$\ell_i^{(1)} = \frac{\partial \ell(y_i, f(x))}{\partial f(x)} (f_{b-1}(x_i)) \quad \text{et} \quad \ell_i^{(2)} = \frac{\partial^2 \ell(y_i, f(x))}{\partial f(x)^2} (f_{b-1}(x_i)).$$

Pour les arbres, la fonction de régularisation a la forme suivante :

$$\Omega(h) = \Omega(T, w) = \gamma T + \frac{1}{2} \lambda \sum_{j=1}^{T} w_j^2,$$

où γ et λ contrôlent le **poids** que l'on donne aux paramètres de l'arbre. On obtient au final l'algorithme suivant

1. Initialisation $f_0 = h_0$.
2. Pour $b = 1, \dots, B$

   a) Ajuster un arbre h_b à T feuilles qui minimise

   $$\sum_{i=1}^{n} [\ell_i^{(1)} h_b(x_i) + \frac{1}{2} \ell_i^{(2)} h_b^2(x_i)] + \gamma T + \frac{1}{2} \lambda \sum_{j=1}^{T} w_j.$$

   b) Mettre à jour
   $$f_b(x) = f_{b-1}(x) + h_b(x).$$

3. Sortie : la suite d'algorithmes $(f_b)_b$.

On pourra trouver plus de précisions ici : https://xgboost.readthedocs.io/en/stable/tutorials/index.html

Exercice 3.1 (Prise en main des principales fonction de xgboost)**.** On commence par charger le package

```
library(xgboost)
```

et on reprend les données sur le **sinus** de la Section 3.1 :

```
x <- seq(-2*pi,2*pi,by=0.01)
y <- sin(x)
set.seed(1234)
X <- runif(200,-2*pi,2*pi)
Y <- sin(X)+rnorm(200,sd=0.2)
df1 <- data.frame(X,Y)
df2 <- data.frame(X=x,Y=y)
```

La fonction `xgboost` requiert que les données possèdent la classe `xgb.DMatrix`, on peut l'obtenir avec

```
X_mat <- xgb.DMatrix(as.matrix(df1[,1]),label=df1$Y)
```

1. Expliquer la sortie

```
boost1 <- xgboost(data=X_mat,nrounds = 5,
                  params=list(objective="reg:squarederror"))
```

```
[1] train-rmse:0.633250
[2] train-rmse:0.468674
[3] train-rmse:0.354599
[4] train-rmse:0.275842
[5] train-rmse:0.224803
```

```
boost1
```

```
##### xgb.Booster
raw: 16.5 Kb
call:
  xgb.train(params = params, data = dtrain, nrounds = nrounds,
    watchlist = watchlist, verbose = verbose, print_every_n = print_every_n,
    early_stopping_rounds = early_stopping_rounds, maximize = maximize,
    save_period = save_period, save_name = save_name, xgb_model = xgb_model,
```

```
    callbacks = callbacks)
params (as set within xgb.train):
  objective = "reg:squarederror", validate_parameters = "TRUE"
xgb.attributes:
  niter
callbacks:
  cb.print.evaluation(period = print_every_n)
  cb.evaluation.log()
niter: 5
nfeatures : 1
evaluation_log:
 iter train_rmse
    1  0.6332497
    2  0.4686737
    3  0.3545990
    4  0.2758424
    5  0.2248031
```

On a ici entraîné **`xgboost`** *avec la fonction de perte quadratique et 5 itérations.*

2. Faire la même chose avec 100 itération et un `learning rate` de 0.1.

```
boost2 <- xgboost(data=X_mat,nrounds = 100,
                  params=list(objective="reg:squarederror",eta=0.1),
                  verbose = FALSE)
```

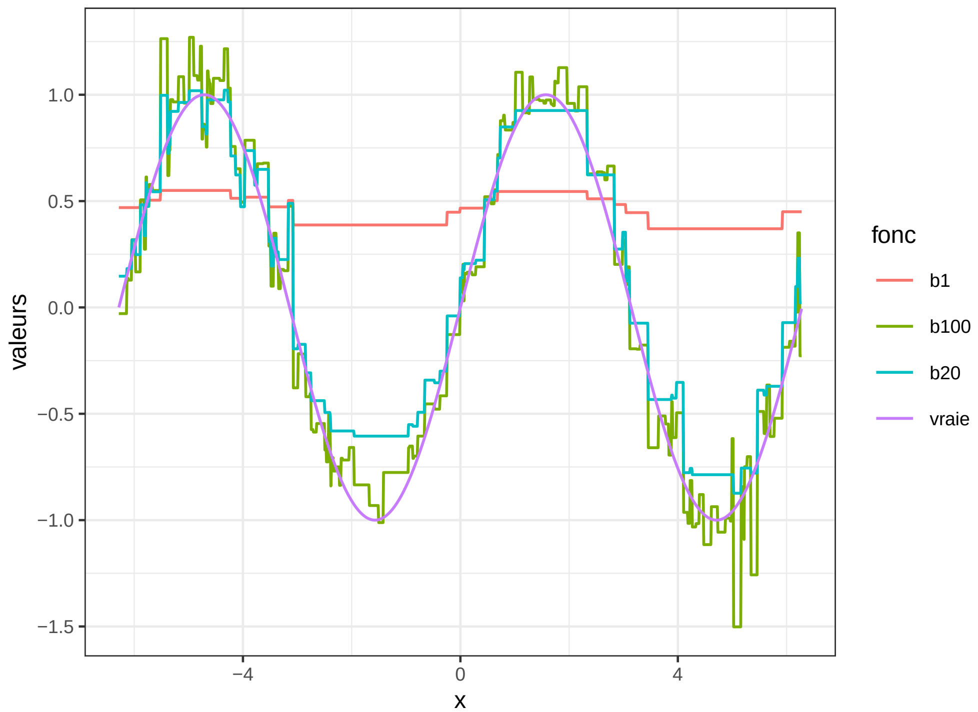
3. On peut obtenir les valeurs prédites entre -2π et 2π pour 100 itérations avec

```
Xtest <- as.matrix(df2$X)
prev100 <- predict(boost2,newdata=Xtest,iterationrange = c(1,101))
```

Tracer les estimateurs **xgboost** pour 1 itération, 20 itérations et 100 itérations. Commenter.

```
prev1 <- predict(boost2,newdata=Xtest,iterationrange=c(1,2))
prev20 <- predict(boost2,newdata=Xtest,iterationrange=c(1,21))
```

```
tbl <- tibble(x=df2$X,vraie=df2$Y,b1=prev1,b20=prev20,b100=prev100) |>
  pivot_longer(-x,names_to = "fonc",values_to = "valeurs")
ggplot(tbl)+aes(x=x,y=valeurs,color=fonc)+geom_line()
```



Comme pour le gradient boosting, l'algorithme sous-apprend si le nombre d'arbres est trop petit et sur-apprend lorsqu'il est trop grand.

4. Commenter la sortie

```
set.seed(123)
sel.xgb <- xgb.cv(data = X_mat,
                  nrounds = 100, objective = "reg:squarederror",
                  eval_metric = "rmse",
                  nfold=5,eta=0.1,
                  early_stopping_rounds=10,
                  verbose=FALSE)
sel.xgb$evaluation_log |> head()
```

```
   iter train_rmse_mean train_rmse_std test_rmse_mean test_rmse_std
1:    1       0.7894653    0.012973111      0.7906004    0.05513590
2:    2       0.7189852    0.011889426      0.7228767    0.05364182
3:    3       0.6556685    0.010877136      0.6607388    0.05284791
4:    4       0.5985454    0.010104324      0.6055111    0.05240736
5:    5       0.5471973    0.009379501      0.5567722    0.05117564
6:    6       0.5007942    0.008971210      0.5129458    0.04971156
```

```
(ite.opt.xgb <- sel.xgb$best_iteration)
```

```
[1] 27
```

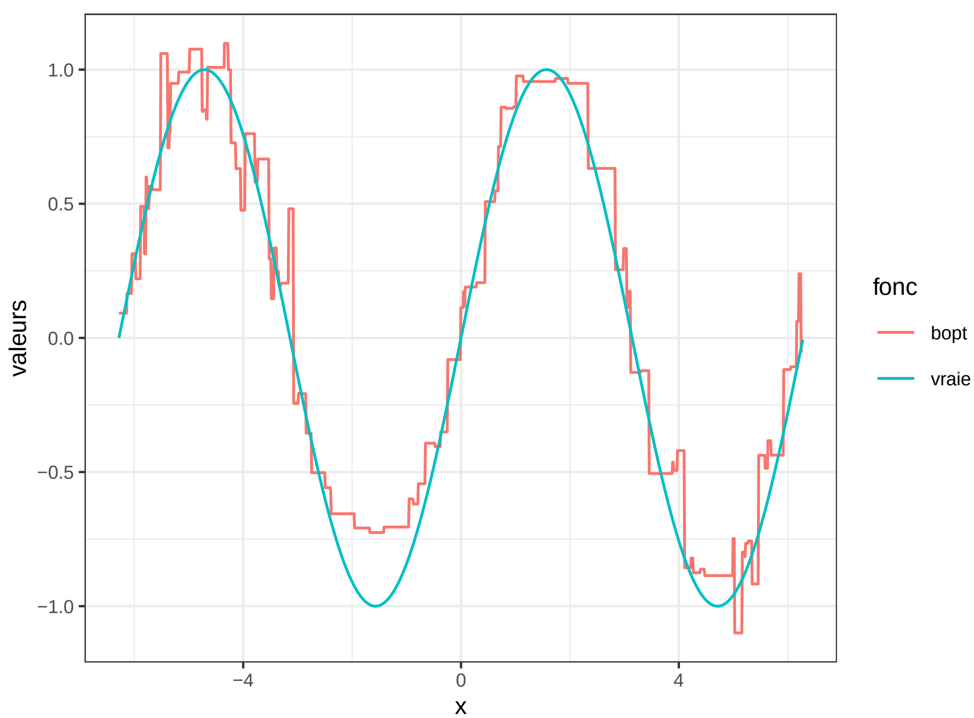
```
sel.xgb$niter
```

```
[1] 37
```

On effectue une validation croisée 5 blocs pour choisir le nombre d'itérations. L'argument `early_stopping_rounds=10` permet de stopper l'algorithme lorsque l'erreur de prévision commence à trop remonter.

5. Tracer les prévisions pour l'algorithme sélectionné.

```
prev_opt <- predict(boost2,newdata=Xtest,
                    iterationrange=c(1,ite.opt.xgb))
tbl <- tibble(x=df2$X,vraie=df2$Y,bopt=prev_opt) |>
  pivot_longer(-x,names_to = "fonc",values_to = "valeurs")
ggplot(tbl)+aes(x=x,y=valeurs,color=fonc)+geom_line()
```



Exercice 3.2 (Xgboost sur les données spam)**.** On reprend les données spam de la Section 3.2. Entraîner un algorithme **xgboost** avec la fonction de perte `binary:logistic` et en sélec-

tionnant la nombre d'itérations par validation croisée en optimisant l'AUC. **Attention** cette fonction de perte requiert que la variable à expliquer prenne pour valeurs 0 ou 1 en classe `numeric`.

```
spam1 <- as_tibble(spam) |>
  mutate(type=as.numeric(fct_recode(type,`1`="spam",`0`="nonspam"))-1)
X_mat <- xgb.DMatrix(as.matrix(spam1[,1:56]),label=spam1$type)
```

On teste la fonction ***`xgboost`*** *pour voir si les donées sont au bon format.*

```
boost1 <- xgboost(data=X_mat,nrounds = 5,
                  params=list(objective="binary:logistic"))
```

```
[1] train-logloss:0.499990
[2] train-logloss:0.387195
[3] train-logloss:0.318618
[4] train-logloss:0.262772
[5] train-logloss:0.224457
```

On peut maintenant faire la valisation croisée :

```
set.seed(123)
sel.xgb <- xgb.cv(data = X_mat,
                  nrounds = 500, objective = "binary:logistic",
                  eval_metric = "auc",
                  nfold=5,eta=0.1,
                  early_stopping_rounds=10,
                  prediction=TRUE,
                  verbose=FALSE)
(ite.opt.xgb <- sel.xgb$best_iteration)
```

```
[1] 198
```

```
sel.xgb$niter
```

```
[1] 208
```

```
sel.xgb$evaluation_log
```

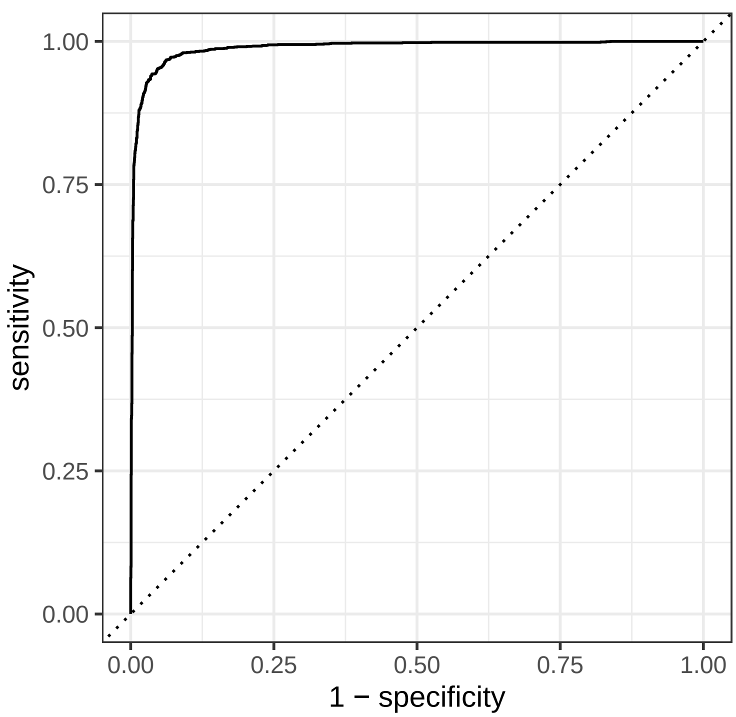
```
     iter train_auc_mean train_auc_std test_auc_mean test_auc_std
  1:    1      0.9500731  2.121192e-03     0.9306506 0.0034779143
  2:    2      0.9564121  4.808012e-03     0.9425352 0.0035386497
  3:    3      0.9621426  1.063738e-03     0.9493209 0.0035729044
  4:    4      0.9641394  2.185222e-03     0.9528820 0.0039124835
  5:    5      0.9677919  3.347806e-03     0.9577987 0.0064362485
 ---
204:  204      0.9995687  4.404906e-05     0.9884326 0.0009331813
205:  205      0.9995765  4.599862e-05     0.9884267 0.0009201703
206:  206      0.9995785  4.314789e-05     0.9884106 0.0009008832
207:  207      0.9995888  3.724468e-05     0.9884006 0.0009117750
208:  208      0.9995943  3.701767e-05     0.9883994 0.0009253329
```

On récupère les prévisions issues de la validation croisée

```
score <- tibble(prev=sel.xgb$pred,obs=spam$type)
```

pour tracer la courbe ROC et calculer l'AUC :

```
score |> roc_curve(truth=obs,prev,event_level="second") |>
  autoplot()
```



```
score |> roc_auc(truth=obs,prev,event_level="second")
```

```
# A tibble: 1 x 3
  .metric .estimator .estimate
  <chr>   <chr>          <dbl>
1 roc_auc binary         0.988
```

Exercice 3.3 (Sélection avec tidymodels)**.** Refaire l'exercice précédent avec la syntaxe `tidymodels`. On choisira notamment :

- la profondeur des arbres dans le vecteur

  ```
  c(1,3,8,10)
  ```

- le nombre d'itérations entre 1 et 500 avec un `early_stopping` toujours égal à 10 et un learning rate à 0.05.

On pourra consulter la page https://www.tidymodels.org/find/parsnip/ pour trouver les noms de paramètre du `worfklow` et sur le tutoriel https://juliasilge.com/blog/shelter-animals/ pour la stratégie. Elle est ici de fixer le nombre d'itérations à 500 puisqu'on utilise le **early stopping** en séparant les données en 2. On initialisera donc le workflow avec

```
library(tidymodels)
tune_spec <-
  boost_tree(tree_depth=tune(),trees=500,learn_rate=0.05,
             stop_iter=10) |>
  set_mode("classification") |>
  set_engine("xgboost",validation=0.2)

xgb_wf <- workflow() |>
  add_model(tune_spec) |>
  add_formula(type ~ .)
```

On définit la grille de paramètres et le ré-échantillonnage :

```
set.seed(321)
grille <- expand.grid(tree_depth=c(1,3,8,10))
re_ech <- vfold_cv(spam,v=5)
```

On fait la validation croisée :

```
xgb_tidy <- xgb_wf |>
  tune_grid(
    resamples = re_ech,
```

```
    grid = grille,
    metrics=metric_set(roc_auc))
```

On visualise les résultats et on choisit la meilleure valeur :

```
xgb_tidy |> collect_metrics()
```

```
# A tibble: 4 x 7
  tree_depth .metric .estimator  mean     n  std_err .config
       <dbl> <chr>   <chr>      <dbl> <int>    <dbl> <chr>
1          1 roc_auc binary     0.981     5 0.00144  Preprocessor1_Model1
2          3 roc_auc binary     0.988     5 0.000946 Preprocessor1_Model2
3          8 roc_auc binary     0.987     5 0.000569 Preprocessor1_Model3
4         10 roc_auc binary     0.988     5 0.000862 Preprocessor1_Model4
```

```
(best_par <- xgb_tidy |> select_best())
```

```
# A tibble: 1 x 2
  tree_depth .config
       <dbl> <chr>
1         10 Preprocessor1_Model4
```

On finit en entraînant l'algorithme sur toute les données pur la valeur choisie :

```
final_xgb <-
  xgb_wf |>
  finalize_workflow(best_par) |>
  fit(data=spam)
```

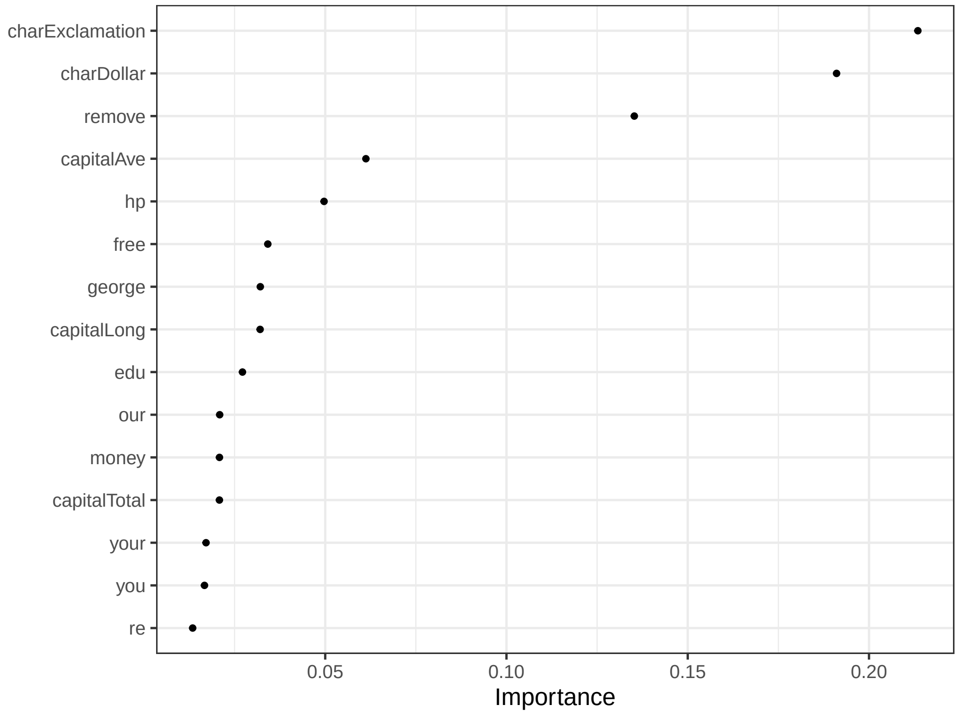
*On peut retrouver le nombre d'itérations sélectionnés par **early stopping** avec*

```
mod_final <- final_xgb$fit$fit$fit
mod_final$best_iteration
```

```
[1] 136
```

On visualise enfin l'importance des variables avec

```r
final_xgb |> extract_fit_parsnip() |>
  vip(num_features = 15, geom = "point")
```



Références

Breiman, L. 2001. « Random forests ». *Machine learning* 45: 5-32.

Breiman, L., J. Friedman, R. Olshen, et C. Stone. 1984. *Classification and regression trees*. Wadsworth & Brooks.

Chen, T., et C. Guestrin. 2016. « XGBoost: A Scalable Tree Boosting System ». In *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, 785-94. KDD '16. New York, NY, USA: ACM. https://doi.org/10.1145/2939672.2939785.

Friedman, J. H. 2001. « Greedy Function Approximation: A Gradient Boosting Machine ». *Annals of Statistics* 29: 1189-1232.

Ridgeway, G. 2006. « Generalized boosted models: A guide to the gbm package ».