

# Classification supervisée

L. Rouvière

*laurent.rouviere@univ-rennes2.fr*

6 janvier 2021

## Table des matières

<b>I</b>	<b>Le problème de la classification supervisée</b>	<b>3</b>
<b>1</b>	<b>Quelques exemples</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Cadre mathématique</b>	<b>5</b>
2.1	L'erreur de classification . . . . .	5
2.2	La courbe ROC . . . . .	6
2.3	Un exemple : l'algorithme des plus proches voisins . . . . .	8
<b>3</b>	<b>Estimation de l'erreur</b>	<b>10</b>
<b>4</b>	<b>Le sur-apprentissage</b>	<b>13</b>
<b>II</b>	<b>L'analyse discriminante</b>	<b>15</b>
<b>1</b>	<b>Le modèle d'analyse discriminante linéaire</b>	<b>15</b>
1.1	Une seule variable explicative . . . . .	15
1.2	LDA : cas général . . . . .	17
<b>2</b>	<b>Réduction de dimension</b>	<b>21</b>
2.1	Recherche d'axes discriminants . . . . .	22
2.2	Classification . . . . .	29
<b>3</b>	<b>Analyse discriminante quadratique et régularisation</b>	<b>33</b>
3.1	Analyse discriminante quadratique . . . . .	33
3.2	Régularisation . . . . .	36
<b>III</b>	<b>Arbres</b>	<b>40</b>
<b>1</b>	<b>Arbres binaires</b>	<b>40</b>

<b>2</b>	<b>Choix des découpes</b>	<b>43</b>
2.1	Cas de la régression . . . . .	44
2.2	Cas de la classification supervisée . . . . .	45
<b>3</b>	<b>Elagage</b>	<b>46</b>
<b>4</b>	<b>Importance des variables</b>	<b>53</b>
<b>5</b>	<b>Annexe : arbres Chaid</b>	<b>54</b>
5.1	Regroupement des modalités . . . . .	55
5.2	Division d'un nœud . . . . .	57
5.3	Choix des paramètres . . . . .	58
<b>IV</b>	<b>Bagging et forêts aléatoires</b>	<b>63</b>
<b>1</b>	<b>Bagging</b>	<b>63</b>
<b>2</b>	<b>Forêts aléatoires</b>	<b>66</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>72</b>

## Présentation

- *Objectifs* : comprendre les aspects **théoriques** et **pratiques** des algorithmes de référence en apprentissage supervisé.
- *Pré-requis* : théorie des probabilités, modèle linéaire, analyses factorielles (ACP/ACM). R, niveau avancé.
- *Enseignant* : Laurent Rouvière [laurent.rouviere@univ-rennes2.fr](mailto:laurent.rouviere@univ-rennes2.fr)
  - **Recherche** : statistique non paramétrique, apprentissage statistique
  - **Enseignements** : statistique et probabilités (Université, école d'ingénieur et de commerce, formation continue).
  - **Consulting** : energie, finance, marketing, sport.

## Programme

- 14h *CM* + 6h ou 8h *TP* + 3 ou 4h *évaluation*.
- *Matériel* :
  - slides
  - tutoriel R : exercices et compléments de cours à travailler seul
  - disponible à l'url [https://lrouviere.github.io/classif\\_sup/](https://lrouviere.github.io/classif_sup/)
- *4 parties* :
  1. **Cadre mathématique de la classification supervisée** : 3h.
  2. **Analyse discriminante linéaire** : 4h.
  3. **Arbres** : 3h.
  4. **Introduction aux forêts aléatoires** : 2h.

## Première partie

# Le problème de la classification supervisée

## 1 Quelques exemples

### Prévision de pics d'ozone

- On a mesuré pendant 366 jours la *concentration maximale* en ozone (V4) ;
- On dispose également d'autres *variables météorologiques* (température, nébulosité, vent...).

```
> Ozone[1:5,]  
V1 V2 V3 V4 V5 V6 V7 V8 V9 V10 V11 V12 V13  
1 1 1 4 3 5480 8 20 NA NA 5000 -15 30.56 200  
2 1 2 5 3 5660 6 NA 38 NA NA -14 NA 300  
3 1 3 6 3 5710 4 28 40 NA 2693 -25 47.66 250  
4 1 4 7 5 5700 3 37 45 NA 590 -24 55.04 100  
5 1 5 1 5 5760 3 51 54 45.32 1450 25 57.02 60
```

### Question

Peut-on **prédire** la concentration maximale en ozone du **lendemain** à partir des prévisions météorologiques ?

### Détection de clients à risque

- Une chaîne de magasins a mis en place une carte de crédit.
- Elle dispose d'un *historique de 145 clients* dont 40 ont connu des défauts de paiement.
- Elle connaît également d'autres *caractéristiques* sur ses clients (sexe, taux d'endettement, revenus mensuels, dépenses effectuées sur certaines gammes de produit...)

### Question

Comment **prédire** si un nouveau client connaîtra des défauts de paiement ?

### Iris de Fisher

On a mesuré sur 150 iris de 3 espèces différentes (Setosa, Versicolor, Virginica) les quantités suivantes :

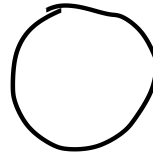
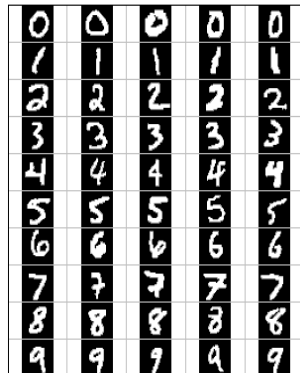
- Longueur et largeur des pétales ;
- Longueur et largeur des sépales.

```
> summary(iris)  
Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width Species  
Min. :4.300 Min. :2.000 Min. :1.000 Min. :0.100 setosa :50  
1st Qu.:5.100 1st Qu.:2.800 1st Qu.:1.600 1st Qu.:0.300 versicolor:50  
Median :5.800 Median :3.000 Median :4.350 Median :1.300 virginica :50  
Mean :5.843 Mean :3.057 Mean :3.758 Mean :1.199  
3rd Qu.:6.400 3rd Qu.:3.300 3rd Qu.:5.100 3rd Qu.:1.800  
Max. :7.900 Max. :4.400 Max. :6.900 Max. :2.500
```

### Question

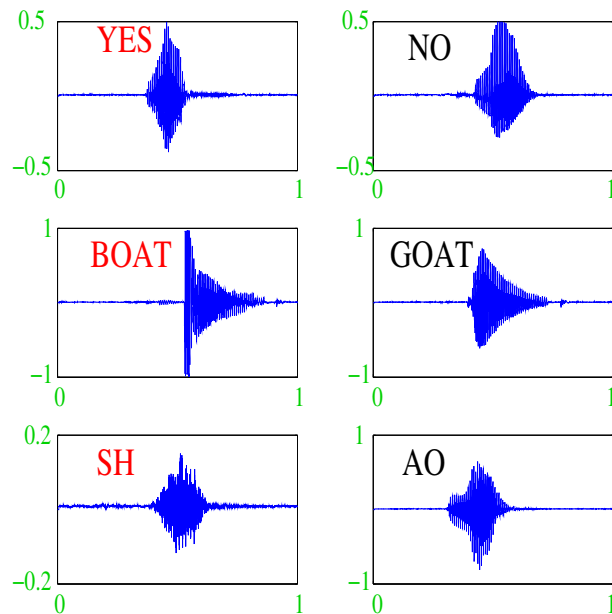
Comment **identifier l'espèce** d'un iris à partir de ces 4 caractéristiques ?

## Reconnaissance de l'écriture



Qu'est-ce qui est écrit ? 0, 1, 2... ?

## Reconnaissance de la parole



## Détection de spam

- Sur 4601 mails, on a pu identifier 1813 spams.
- On a également mesuré sur chacun de ces mails la présence ou absence de 57 mots.

```
> spam[1:5,c(1:8,58)]
  make address  all num3d  our over remove internet type
1 0.00  0.64 0.64    0 0.32 0.00  0.00    0.00 spam
2 0.21  0.28 0.50    0 0.14 0.28  0.21    0.07 spam
3 0.06  0.00 0.71    0 1.23 0.19  0.19    0.12 spam
4 0.00  0.00 0.00    0 0.63 0.00  0.31    0.63 spam
5 0.00  0.00 0.00    0 0.63 0.00  0.31    0.63 spam
```

### Question

Peut-on construire à partir de ces données une méthode de **détection automatique** de spam ?

## Variable à expliquer et variables explicatives

- Les exemples précédents appartiennent à une *même famille de problèmes*.
- Il s'agit d'*expliquer une variable* (notée  $Y$ ) par  $p$  variables (notées  $X_1, \dots, X_p$ ).

$Y$	$X$
maxO3	vent, pluie, maxO3v...
bon/mauvais payeur	sexe, revenus...
espèces de l'iris	longueur et largeur des pétales et sépales
spam ou pas spam	présence/absence de certains mots
Chiffre	Images
Mot	Courbes

## Des problématiques diverses

- *Apprentissage supervisé* : **expliquer/prédire** une sortie  $y \in \mathcal{Y}$  à partir d'entrées  $x \in \mathcal{X}$  ;
- *Apprentissage non supervisé* : établir une **typologie** des observations ;
- *Règles d'association* : mesurer le **lien** entre différents produits ;
- *Systèmes de recommandation* : **identifier** les produits susceptibles d'intéresser des consommateurs.

## Nombreuses applications

finance, économie, marketing, biologie, médecine...

### Dans ce cours

On va se focaliser sur le problème **d'apprentissage supervisé** avec une sortie **qualitative**.

## 2 Cadre mathématique

### Formalisation mathématique

- Les *données* :  $(x_1, y_1) \dots, (x_n, y_n)$  où  $x_i \in \mathbb{R}^p$  et  $y_i \in \mathcal{Y} = \{1, \dots, K\}$ .
- *Modélisation* : ces données sont vues comme des **réalisations de variables aléatoires i.i.d**  $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$  de **loi inconnue**.
- *Objectif* : **prédire** et/ou **expliquer** les sorties  $y_i$  par les entrées  $x_i$ .  $\implies$  trouver une fonction  $g : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathcal{Y}$  telle que

$$g(x_i) \approx y_i, \quad \forall i = 1, \dots, n.$$

### Définition

On appelle *règle de classification* toute fonction  $g : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathcal{Y}$  qui, à une entrée  $x \in \mathbb{R}^p$ , renvoie une prévision  $g(x) \in \mathcal{Y}$ .

### 2.1 L'erreur de classification

#### Règle optimale

- Il existe un grand nombre de façons de construire des règles  $g$ .
- Nécessité de se donner des *critères de performance*.

## Définition

Etant donnée une règle de classification  $g : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathcal{Y}$ , on appelle *probabilité d'erreur* ou **erreur de classification** de  $g$  le réel

$$L(g) = \mathbf{E}[\mathbf{1}_{g(X) \neq Y}] = \mathbf{P}(g(X) \neq Y).$$

## Objectif

Pour ce critère de performance, le problème sera donc de construire une règle telle que sa *probabilité d'erreur* soit **la plus petite possible**.

## Règle de Bayes

— Problème facile d'un point de vue *théorique*...

## Théorème

La **règle de Bayes**  $g^* : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathcal{Y}$  définie par

$$g^*(x) = \operatorname{argmax}_{k \in \mathcal{Y}} \mathbf{P}(Y = k | X = x)$$

est **optimale** au sens où  $L(g^*) \leq L(g)$  pour toute règle  $g$ .

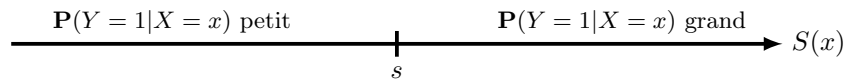
## Remarque

Cette règle est *naturelle* : elle consiste à affecter un nouvel individu dans le groupe  $k$  qui maximise  $\mathbf{P}(Y = k | X = x)$ .

## 2.2 La courbe ROC

### Fonction de score

- On se place ici dans un cadre de *classification binaire* ( $\mathcal{Y} = \{-1, 1\}$ ).
- On a vu que la construction d'une règle de classification est basée sur l'*estimation du score*  $S(x) = \mathbf{P}(Y = 1 | X = x)$ .



- Une fois le score obtenu, on peut classer en *fixant un seuil*  $s$  :

$$g_s(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } S(x) \geq s \\ -1 & \text{sinon.} \end{cases}$$

- La **courbe ROC** permet de visualiser la performance de l'estimateur de  $S(x)$  *sans fixer de seuil*.

Pour  $s$  fixé a deux types d'erreur :

$$\alpha(s) = \mathbf{P}(S(X) \geq s | Y = -1) \quad \text{et} \quad \beta(s) = \mathbf{P}(S(X) < s | Y = 1).$$

## Courbe ROC

C'est la courbe paramétrée définie par

$$\begin{cases} x(s) = \alpha(s) = \mathbf{P}(S(X) > s | Y = -1) \\ y(s) = 1 - \beta(s) = \mathbf{P}(S(X) \geq s | Y = 1) \end{cases}$$

## Propriétés

- $\forall S$  on a  $x(-\infty) = y(-\infty) = 1$  et  $x(+\infty) = y(+\infty) = 0$ .  $\implies$  la courbe ROC vit dans le **carré**  $[0, 1]^2$ .
- **Score parfait** :  $\exists s^*$  tel que  $\alpha(s^*) = \beta(s^*) = 0 \implies$  passe par le point  $(0, 1)$ .
- **Score aléatoire** :  $S(X) \perp\!\!\!\perp Y \implies x(s) = y(s) \forall s$  (première bissectrice).

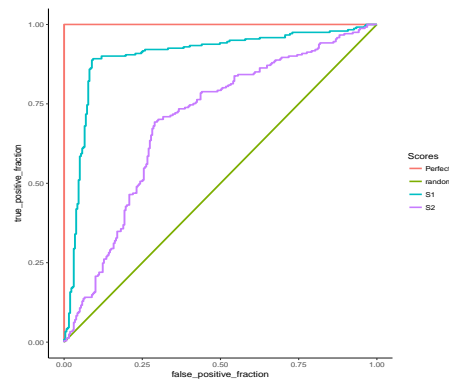
## Aire sous la courbe ROC (AUC)

- L' $AUC$  est un critère numérique naturel pour mesurer la **performance** de  $S$ .
- $0.5 \leq AUC(S) \leq 1$  (plus il est proche de 1, mieux c'est).

## Propriété voir [Cléménçon et al., 2008]

- Etant données deux observations  $(X_1, Y_1)$  et  $(X_2, Y_2)$  indépendantes et de même loi que  $(X, Y)$ , on a

$$AUC(S) = \mathbf{P}(S(X_1) \geq S(X_2) | (Y_1, Y_2) = (1, -1)).$$



```
> library(pROC)
> df1 %>% group_by(Scores) %>% summarize(roc(D,M))
## # A tibble: 4 x 2
##   Scores 'auc(D, M)'
##   <chr>    <dbl>
## 1 Perfect      1
## 2 random      0.5
## 3 S1          0.896
## 4 S2          0.699
```

- D'un point de vue *théorique*, la règle de Bayes et le score optimal se déduisent des probabilités  $\mathbf{P}(Y = k | X = x)$ .
- Problème plus *difficile* d'un point de vue *pratique*...

## Travail statistique

- Les probabilités  $\mathbf{P}(Y = k | X = x)$  sont **inconnues**.
- Le job du statisticien sera de
  1. **Estimer** les probabilités  $\mathbf{P}(Y = k | X = x)$  à l'aide de l'**échantillon**  $\mathcal{D}_n = (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ .
  2. En déduire une **règle de classification**  $\hat{g}_n(\cdot) = \hat{g}_n(\cdot, \mathcal{D}_n)$  telle que  $L(\hat{g}_n) \approx L(g^*)$ .

## Exemple

Si pour une *nouvelle valeur*  $x$ , on a

$$\hat{\mathbf{P}}(Y = 1 | X = x) = 0.2, \quad \hat{\mathbf{P}}(Y = 2 | X = x) = 0.35, \quad \hat{\mathbf{P}}(Y = 3 | X = x) = 0.45$$

alors on *prédira*  $\hat{Y} = \hat{g}(x) = 3$ .

## 2.3 Un exemple : l'algorithme des plus proches voisins

### Un exemple : la règle des plus proches voisins

- Etant donné un entier  $k \leq n$ , elle consiste à affecter un nouvel individu  $x$  dans le *groupe majoritaire de ses plus proches voisins* :

$$\hat{g}_n(x) = \operatorname{argmax}_{k \in \mathcal{Y}} \sum_{i \in \text{kppv}(x)} \mathbf{1}_{Y_i=k}$$

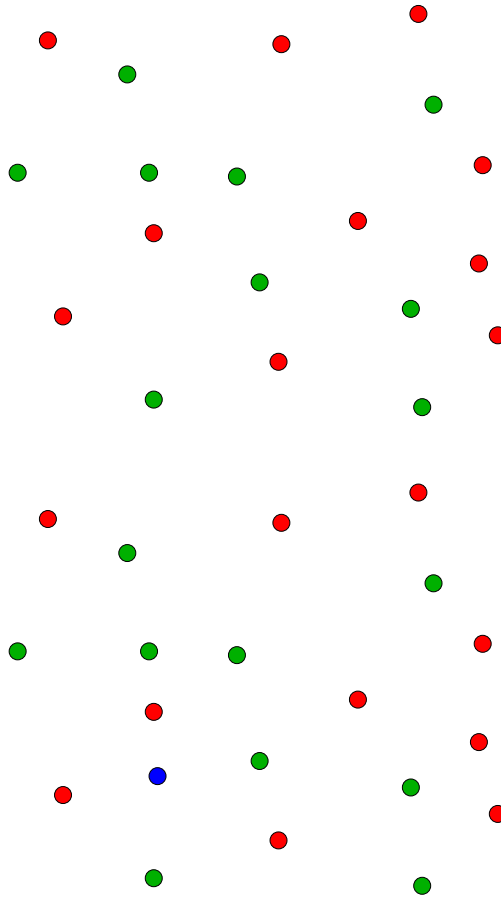
où  $\text{kppv}(x) = \{i : X_i \text{ fait partie des kppv de } x \text{ parmi } \{X_1, \dots, X_n\}\}$ .

#### Remarque importante

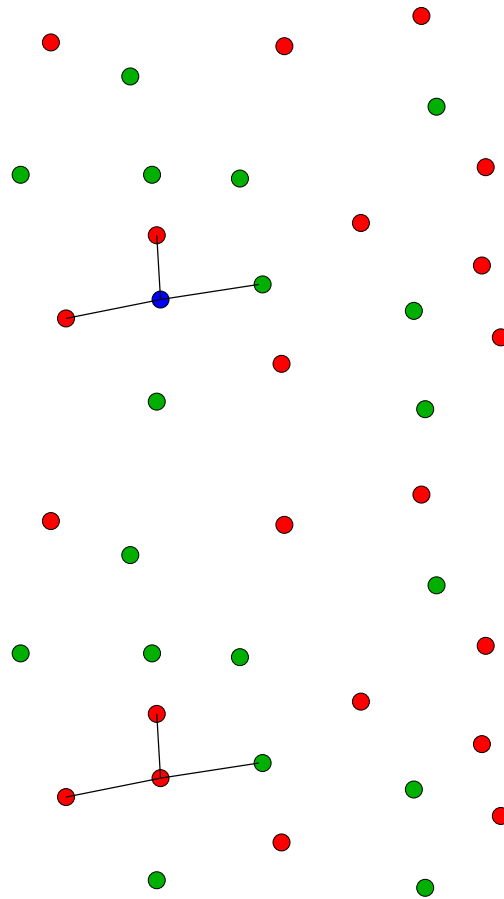
Le paramètre  $k$  est **crucial** pour la qualité de l'estimation :

1.  **$k$  grand** : estimateur « constant », variance faible, biais fort ;
2.  **$k$  petit** : « sur-ajustement », variance forte, biais faible.

#### Exemple : règle des 3-ppv

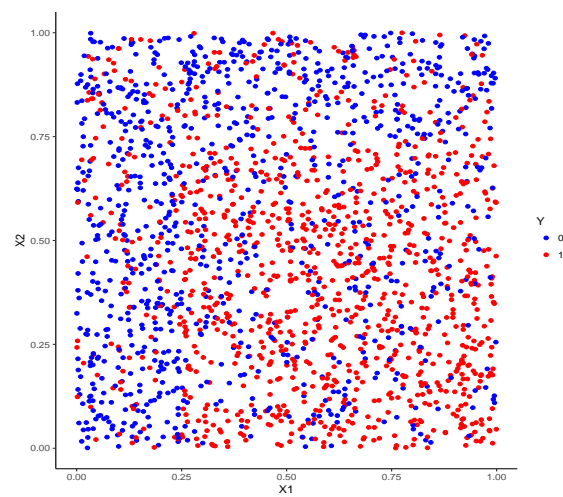






### Un exemple

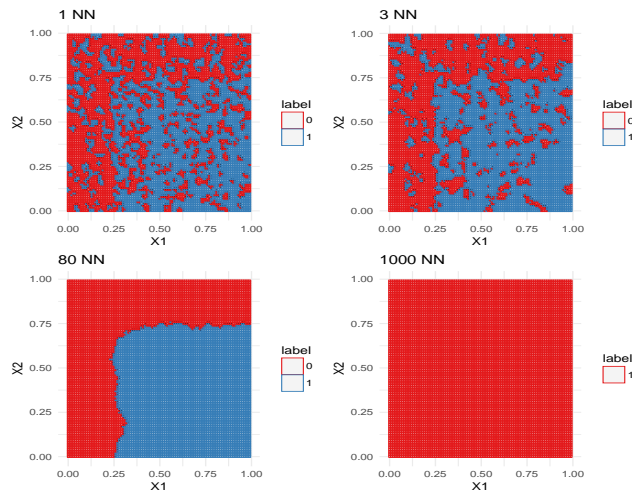
- On cherche à expliquer une variable  $Y$  *binaire* par 2 variables  $X_1$  et  $X_2$  quantitatives. On dispose de  $n = 2000$  observations.



### Représentation des règles des $k$ ppv

#### Conclusion

On visualise bien l'importance du choix de  $k$  (parce qu'on est en 2d...)



### 3 Estimation de l'erreur

#### Rappels

- $n$  observations  $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$  i.i.d à valeurs dans  $\mathbb{R}^p \times \mathcal{Y}$ .

#### Objectif

On cherche une **règle de prévision**  $g_n(x) = g_n(x, \mathcal{D}_n)$  qui soit "proche" de l'oracle  $g^*$  défini par

$$g^* \in \underset{g}{\operatorname{argmin}} L(g)$$

où  $L(g) = \mathbf{P}(g(X) \neq Y)$ .

#### Question

Etant donné un algorithme  $g_n$ , que vaut son erreur

$$L(g_n) = \mathbf{P}(g_n(X) \neq Y) ?$$

#### Risque empirique

- La loi de  $(X, Y)$  étant *inconnue* en pratique, il est *impossible de calculer*  $L(g_n) = \mathbf{P}(g_n(X) \neq Y) = \mathbf{E}[\mathbf{1}_{g_n(X) \neq Y}]$ .
- **Première approche** :  $L(g_n)$  étant une espérance, on peut l'estimer (LGN) par sa *version empirique*

$$L_n(g_n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{g_n(X_i) \neq Y_i}.$$

#### Problème

- L'échantillon  $\mathcal{D}_n$  a *déjà été utilisé* pour construire l'algorithme de prévision  $g_n \implies$  La LGN ne peut donc s'appliquer !
- *Conséquence* :  $L_n(g_n)$  conduit souvent à une **sous-estimation** de  $L(g_n)$ .

#### Une solution

Utiliser des méthodes de type **validation croisée** ou **bootstrap**.

## Apprentissage - Validation ou validation hold out

- L'approche consiste à séparer l'échantillon  $\mathcal{D}_n$  en :
  1. un *échantillon d'apprentissage*  $\mathcal{D}_{n,app}$  pour construire la règle  $g_n$  ;
  2. un *échantillon de validation* ou *test*  $\mathcal{D}_{n,test}$  pour estimer le risque de  $g_n$ .

### Algorithme

**Entrées.**  $\mathcal{D}_n$  : données,  $\{\mathcal{A}, \mathcal{V}\}$  : partition de  $\{1, \dots, n\}$ .

1. Construire l'algorithme de prédiction sur  $\mathcal{D}_{n,app} = \{(X_i, Y_i) : i \in \mathcal{A}\}$ , on le note  $g_{n,app}$  ;
2. Calculer  $\hat{L}_n(g_{n,app}) = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \sum_{i \in \mathcal{V}} \mathbf{1}_{g_{n,app}(X_i) \neq Y_i}$ .

### Commentaires

Nécessite d'avoir un **nombre suffisant d'observations** dans

1.  $\mathcal{D}_{n,app}$  pour bien *ajuster l'algorithme de prévision* ;
2.  $\mathcal{D}_{n,test}$  pour bien *estimer l'erreur de l'algorithme*.

## Validation croisée K-blocs

- **Principe** : répéter l'algorithme apprentissage/validation sur *différentes partitions*.

### Algorithme - CV

**Entrées.**  $\mathcal{D}_n$  : données,  $K$  un entier qui divise  $n$  ;

1. Construire une partition  $\{\mathcal{I}_1, \dots, \mathcal{I}_K\}$  de  $\{1, \dots, n\}$  ;
2. Pour  $k = 1, \dots, K$ 
  - (a)  $\mathcal{I}_{app} = \{1, \dots, n\} \setminus \mathcal{I}_k$  et  $\mathcal{I}_{test} = \mathcal{I}_k$  ;
  - (b) Construire l'algorithme de prédiction sur  $\mathcal{D}_{n,app} = \{(X_i, Y_i) : i \in \mathcal{I}_{app}\}$ , on le note  $g_{n,k}$  ;
  - (c) En déduire  $g_n(X_i) = g_{n,k}(X_i)$  pour  $i \in \mathcal{I}_{test}$  ;

**Retourner**

$$\hat{L}_n(g_n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{g_n(X_i) \neq Y_i}.$$

### Commentaires

- Plus adapté que la technique apprentissage/validation lorsqu'on a *peu d'observations*.
- Le *choix de K* doit être fait par l'utilisateur (souvent  $K = 10$ ).

### Leave one out

- Lorsque  $K = n$ , on parle de validation croisée *leave one out* ;
- Le risque est alors estimé par

$$\hat{L}_n(g_n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{g_n^i(X_i) \neq Y_i}$$

où  $g_n^i$  désigne l'algorithme de prévision construit sur  $\mathcal{D}_n$  *amputé de la i-ème observation*.

### Exemple

- On estime les probabilités d'erreur pour les règles de 1, 10, 20 et 95 ppv.

```
> dim(donnees)
[1] 500 3
> head(donnees)
      X1      X2 Y
1 0.1328209 0.3843303 0
2 0.5311487 0.4381712 0
3 0.9785594 0.4039880 1
4 0.5988594 0.3720228 1
5 0.3109124 0.4178881 0
6 0.5964184 0.1043874 1
```

1. On sépare les données en 2

```
> set.seed(1234)
> ind.app <- sample(500,300)
> dapp <- donnees[ind.app,]
> dtest <- donnees[-ind.app,]
```

2. On ajuste les 4 modèles sur les données d'*apprentissage uniquement* et on calcule les prévisions pour les données test.

```
> library(class)
> m1 <- knn(train=dapp[,1:2],test=dtest[,1:2],cl=dapp$Y,k=1)
> m10 <- knn(train=dapp[,1:2],test=dtest[,1:2],cl=dapp$Y,k=10)
> m20 <- knn(train=dapp[,1:2],test=dtest[,1:2],cl=dapp$Y,k=20)
> m95 <- knn(train=dapp[,1:2],test=dtest[,1:2],cl=dapp$Y,k=95)
```

3. On compare les *prévisions* aux *valeurs observées* pour en déduire les estimations de la probabilité d'erreur :

```
> mean(m1!=dtest$Y)
[1] 0.155
> mean(m10!=dtest$Y)
[1] 0.12
> mean(m20!=dtest$Y)
[1] 0.135
> mean(m95!=dtest$Y)
[1] 0.16
```

## Package Caret

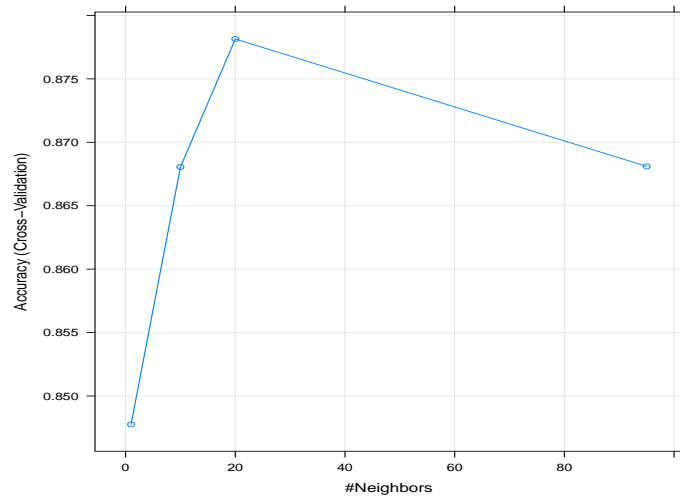
- Il existe des packages (tels que *caret*) dédiés à l'estimation de critères d'erreur (et/ou au calibrage de paramètres) :

```
> library(caret)
> ctrl <- trainControl(method="cv")
> gr <- data.frame(k=c(1,10,20,95))
> a <- train(Y~.,data=donnees,method="knn",tuneGrid=gr,trControl=ctrl)
> a
k-Nearest Neighbors
500 samples
 2 predictor
 2 classes: '0', '1'
No pre-processing
Resampling: Cross-Validated (10 fold)
Summary of sample sizes: 450, 449, 451, 449, 451, 450, ...
Resampling results across tuning parameters:
  k  Accuracy  Kappa
  1  0.8477719 0.6901196
 10  0.8680576 0.7329527
 20  0.8781425 0.7542075
 95  0.8681000 0.7300775

Accuracy was used to select the optimal model using the largest value.
The final value used for the model was k = 20.
```

## Package Caret

```
> plot(a)
```



## 4 Le sur-apprentissage

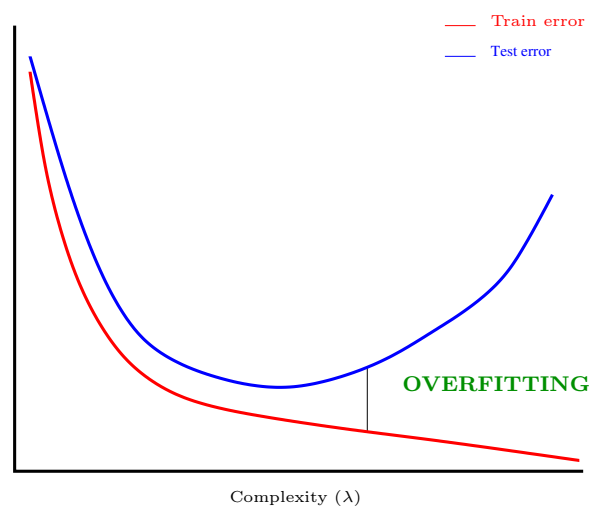
- La plupart des algorithmes de prévision *dépendent d'un paramètre  $\lambda$* .
- Ce paramètre représente souvent une mesure de la *complexité du modèle*.

### Complexité

- $\lambda$  petit  $\Rightarrow$  modèle restrictif  $\Rightarrow$  mauvais ajustement  $\Rightarrow$  biais  $\nearrow$ , variance  $\searrow$
- $\lambda$  grand  $\Rightarrow$  modèle flexible (complexe)  $\Rightarrow$  **sur-apprentissage (ou overfitting)**  $\Rightarrow$  biais  $\searrow$ , variance  $\nearrow$

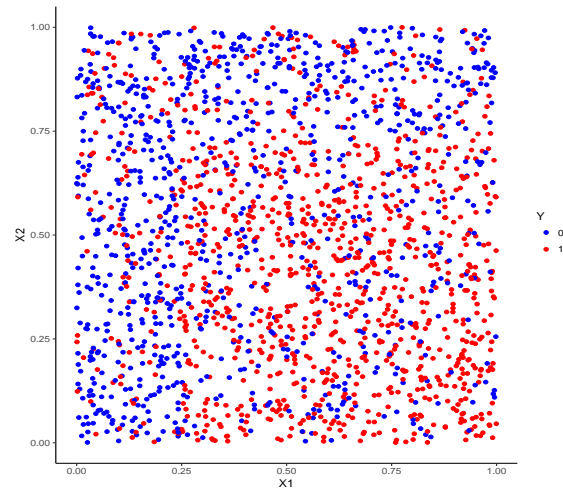
### Overfitting

Très bon ajustement sur les données d'apprentissage (i.e.  $g(X_i) = Y_i$ ) mais **faible performance prédictive** sur des **nouveaux individus**.

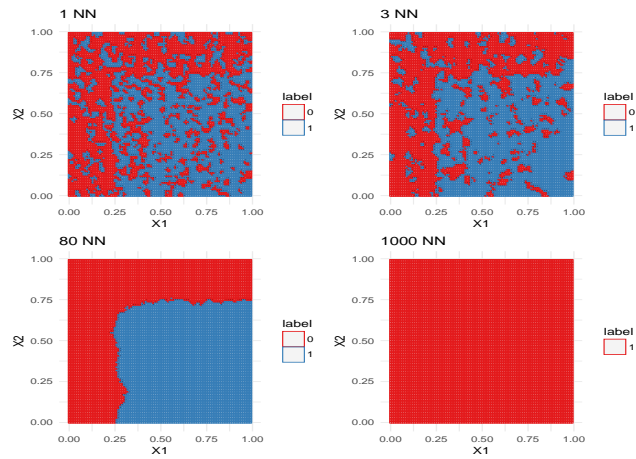


### Un exemple

- On cherche à expliquer une variable  $Y$  *binnaire* par 2 variables  $X_1$  et  $X_2$  quantitatives. On dispose de  $n = 2000$  observations.



## Overfitting pour les $k$ -ppv



## Conclusion

Surapprentissage pour les petites valeurs de  $k$ , voir aussi

[https://lrouviere.shinyapps.io/overfitting\\_app/](https://lrouviere.shinyapps.io/overfitting_app/)

## Deuxième partie

# L'analyse discriminante

- *Modèle de référence* permettant d'expliquer une variable qualitative  $Y$  par plusieurs variables  $X_1, \dots, X_p$ .
- Approche *modèle* mais aussi *géométrique* pour caractériser cette méthode.
- Références : [Saporta, 2011] et [Hastie et al., 2009].

### Notations

- $n$ -échantillon i.i.d  $\mathcal{D}_n = (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$  avec  $X_i$  à valeurs dans  $\mathbb{R}^p$  et  $Y_i$  dans  $\mathcal{Y} = \{1, \dots, K\}$ .
- On veut *estimer*  $\mathbf{P}(Y = k|X = x), k = 1, \dots, K$ .

### Notations

On note :

- $f_k(x), k = 1, \dots, K$  les densités des lois de  $X|Y = k$  ;
- $f(x)$  la densité de  $X$ .
- $\pi_k = \mathbf{P}(Y = k)$  les probabilités **a priori** d'appartenance aux groupes.

### Formule de Bayes

#### Théorème de Bayes

Les probabilités *a posteriori* d'appartenance aux groupes  $1, \dots, K$  sont données par

$$\mathbf{P}(Y = k|X = x) = \frac{\pi_k f_k(x)}{\sum_{\ell=1}^K \pi_\ell f_\ell(x)}.$$

### Conséquence

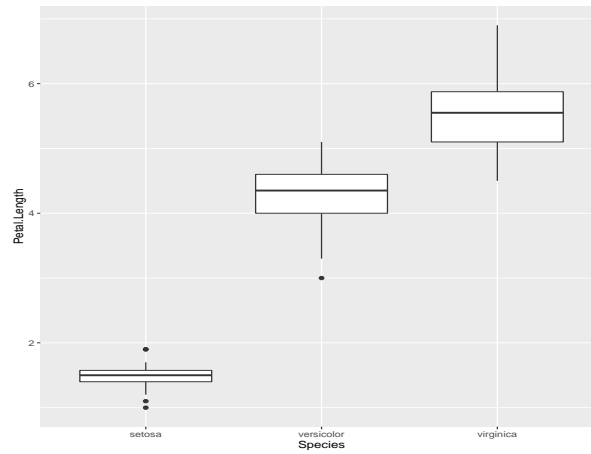
Une bonne estimation des densités de  $X|Y = k$  nous donnera une **bonne estimation des probabilités  $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$** .

## 1 Le modèle d'analyse discriminante linéaire

### 1.1 Une seule variable explicative

- On commence d'abord par expliquer l'espèce des iris par la longueur des pétales *uniquement*.
- On peut visualiser ce problème à l'aide d'un **boxplot**.

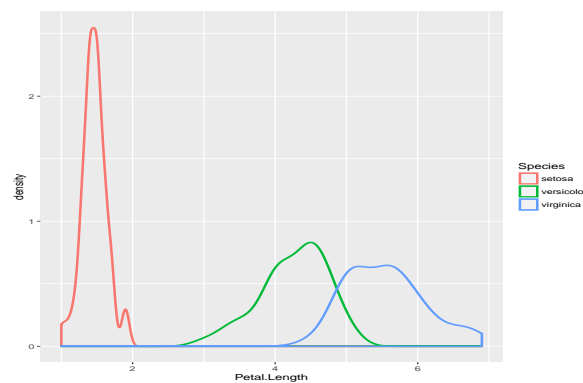
```
> ggplot(iris)+aes(x=Species,y=Petal.Length)+geom_boxplot()+theme_bw()
```



## Représentation sous forme de densités

- La fonction `geom_density` permet de représenter des estimateurs des densités conditionnelles des lois conditionnelles de  $X|Y = j$ ,  $j = 1, 2, 3$ .

```
> ggplot(iris)+aes(x=Petal.Length,color=Species)+geom_density(size=1)
```



## Un modèle

- Les trois densités conditionnelles du graphe précédent ressemblent à des densités *gaussiennes*.
- Si on désigne par  $X$  la variable (quantitative) *Petal.Length* et par  $Y$  la variable (qualitative) *Species*, on peut être tenté de **supposer** que les lois de  $X$  sachant  $Y = k$  sont des lois gaussiennes  $\mathcal{N}(\mu_k, \sigma^2)$ ,  $k = 1, 2, 3$ .
- La densité de  $X$  sachant  $Y = k$  s'écrit alors

$$f_{X|Y=k}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x - \mu_k)^2}{2\sigma^2}\right).$$

## Estimation des paramètres inconnus

- Pour calculer les *probabilités a posteriori*  $\mathbf{P}(Y = k|X = x)$  il faut estimer les **paramètres inconnus** du modèle :
  - les paramètres  $\mu_k \in \mathbb{R}$  et  $\sigma^2 \in \mathbb{R}^+$  des lois gaussiennes ;
  - les probabilités a priori  $\pi_k = \mathbf{P}(Y = k) \in [0, 1]$ .

## Les estimateurs



Ces quantités sont naturellement **estimées à partir des données**  $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$  selon

$$\hat{\mu}_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i:Y_i=k} X_i, \quad \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{k=1}^K \sum_{i:Y_i=k} (X_i - \hat{\mu}_k)^2$$

$$\hat{\pi}_k = \frac{n_k}{n} \quad \text{avec} \quad n_k = \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{\{Y_i=k\}}$$

## Exemple sur R

```
> model <- lda(Species~Petal.Length,data=iris)
> model
Call:
lda(Species ~ Petal.Length, data = iris)

Prior probabilities of groups: ==>  $\hat{\pi}_k$ 
      setosa versicolor virginica 
0.3333333  0.3333333  0.3333333 

Group means: ==>  $\hat{\mu}_k$ 
      Petal.Length
setosa      1.462
versicolor  4.260
virginica   5.552

Coefficients of linear discriminants:
      LD1
Petal.Length 2.323774
```

## Prévisions

- **predict** permet de *prédire* l'espèce de nouveaux iris uniquement à partir de leur longueur de pétales

```
> don_pred
      Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
      5.0          3.6          1.4          0.2
      5.5          2.4          3.7          1.0
      7.1          3.0          5.9          2.1
      6.7          3.3          5.7          2.5
```

```
> predict(model,newdata=don_pred)
$class
[1] setosa    versicolor virginica  virginica
Levels: setosa versicolor virginica
$posterior
      setosa    versicolor    virginica 
1.000000e+00 2.589892e-10 6.170197e-21 
3.123152e-06 9.997752e-01 2.217125e-04 
1.113402e-23 9.723296e-04 9.990277e-01 
9.198362e-22 3.913109e-03 9.960869e-01
```

## 1.2 LDA : cas général

- On souhaite maintenant *expliquer* l'espèce des iris par les **4 variables explicatives** Sepal.Length, Sepal.Width, Petal.Length, Petal.Width.
- On notera  $X_1, X_2, X_3, X_4$  ces 4 variables et  $X = (X_1, X_2, X_3, X_4)$ .
- La méthodologie est *identique* au cas précédent :
  1. On modélise les lois conditionnelles de  $X|Y = k$  par des lois gaussiennes **multivariées** (**vecteurs gaussien**).
  2. On utilise la **formule de Bayes** pour en déduire la loi de  $Y|X = x$ .

### LDA : cas général

- La loi de  $X|Y = k$  est *modélisée par une loi normale multivariée*  $\mathcal{N}(\mu_k, \Sigma)$  où  $\mu_k \in \mathbb{R}^p$  et  $\Sigma$  est une matrice  $p \times p$  définie positive. La densité de  $X|Y = k$  est alors donnée par :

$$f_{X|Y=k}(x) = \frac{1}{(2\pi\det(\Sigma))^{p/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x - \mu_k)^t \Sigma^{-1}(x - \mu_k)\right).$$

- La loi conditionnelle de  $Y|X = x$  se déduit de la *formule de Bayes*

$$\mathbf{P}(Y = k|X = x) = \frac{\pi_k f_{X|Y=k}(x)}{f(x)}$$

où  $f(x)$ , la densité de  $X$ , se déduit des densités conditionnelles  $f_{X|Y=k}(x)$  et des probabilités a priori  $\pi_k = \mathbf{P}(Y = k)$ .

## Estimations

- Ici encore il faut *estimer les paramètres inconnus* du modèle :
  - les vecteurs  $\mu_k \in \mathbb{R}^p, k = 1, \dots, K$  et la matrice de variance-covariance  $p \times p$   $\Sigma$  des lois gaussiennes ;
  - les probabilités a priori  $\pi_k = \mathbf{P}(Y = k)$ .

### Les estimateurs

Ces quantités sont naturellement estimées à partir des données  $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$  selon

$$\hat{\mu}_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i:Y_i=k} X_i, \quad \hat{\Sigma} = \frac{1}{n-K} \sum_{k=1}^K \sum_{i:Y_i=k} (X_i - \hat{\mu}_k)(X_i - \hat{\mu}_k)^t$$

$$\hat{\pi}_k = \frac{n_k}{n} \quad \text{avec} \quad n_k = \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{\{Y_i=k\}}.$$

## Exemple sur R

```
> model_complet<- lda(Species~.,data=iris)
> model_complet
Call:
lda(Species ~ ., data = iris)

Prior probabilities of groups: ==>  $\hat{\pi}_k$ 
      setosa versicolor virginica 
0.3333333 0.3333333 0.3333333 

Group means: ==>  $\hat{\mu}_k$ 
      Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
setosa           5.006      3.428         1.462      0.246
versicolor       5.936      2.770         4.260      1.326
virginica         6.588      2.974         5.552      2.026
```

## Prévisions

- La fonction *predict* permet de *prédire* le groupe de nouveaux individus :

```
> don_pred
      Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
      5.0          3.6         1.4         0.2
      5.5          2.4         3.7         1.0
      7.1          3.0         5.9         2.1
      6.7          3.3         5.7         2.5
```

```
> predict(model_complet,newdata=don_pred)
$class
[1] setosa  versicolor virginica virginica
Levels: setosa versicolor virginica
```

```
$posterior
      setosa  versicolor  virginica
5  1.000000e+00  1.637387e-22  1.082605e-42
82  9.648075e-16  9.999997e-01  3.266704e-07
103 1.231264e-42  2.592826e-05  9.999741e-01
145 4.048249e-46  2.524984e-07  9.999997e-01
```

## Règle de classification

- La manière la plus naturelle de classer une nouvelle observation  $x \in \mathbb{R}^p$  est de *choisir le groupe qui maximise*

$$\mathbf{P}(Y = k|X = x).$$

- Comparons les valeurs de ces probabilités pour les groupes  $k$  et  $\ell$  :

$$\begin{aligned} \log \frac{\mathbf{P}(Y = k|X = x)}{\mathbf{P}(Y = \ell|X = x)} &= \log \frac{f_k(x)}{f_\ell(x)} + \log \frac{\pi_k}{\pi_\ell} \\ &= \log \frac{\pi_k}{\pi_\ell} - \frac{1}{2}(\mu_k + \mu_\ell)^t \Sigma^{-1}(\mu_k - \mu_\ell) \\ &\quad + x^t \Sigma^{-1}(\mu_k - \mu_\ell) \end{aligned} \quad (1)$$

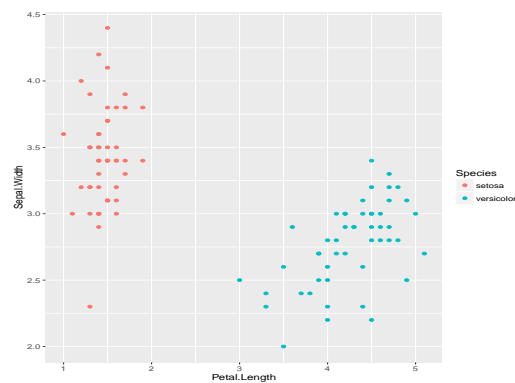
## Conclusion

La **frontière** entre les classes  $k$  et  $\ell$  est **linéaire** en  $x$  !

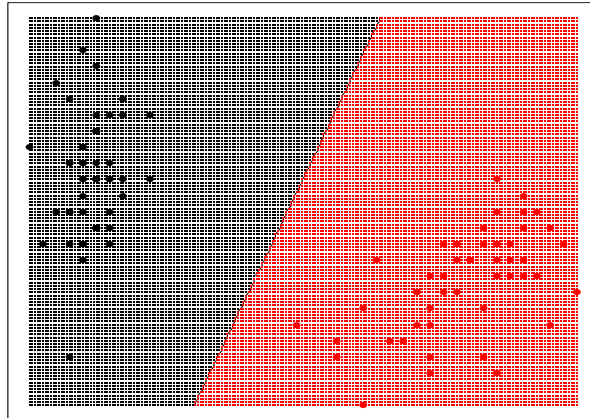
## Exemple

- *Frontière* LDA entre "Setosa" et "Versicolor" avec 2 variables

```
> iris1 <- iris %>% filter(Species%in%c("setosa","versicolor")) %>%
  select(Petal.Length,Sepal.Width,Species)
> ggplot(iris1)+aes(x=Petal.Length,y=Sepal.Width,color=Species)+geom_point()
```



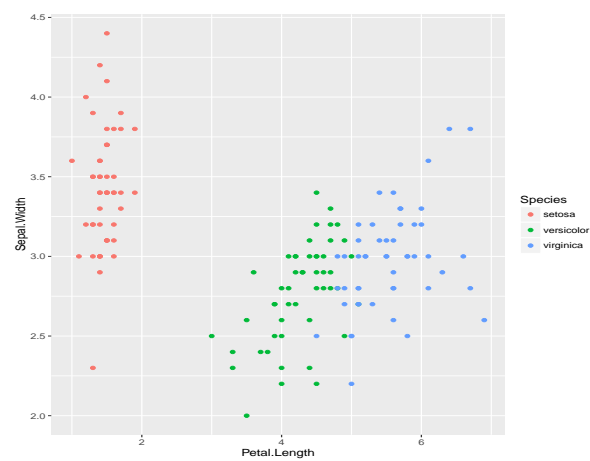
## Frontière deux classes



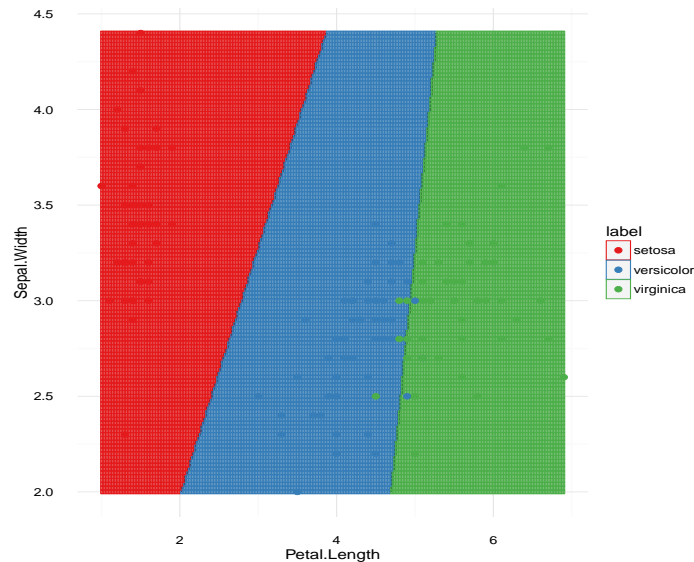
### Exemple - 3 classes

— On fait de même pour les 3 espèces (*3 classes*).

```
> ggplot(iris)+aes(x=Petal.Length,y=Sepal.Width,color=Species)+geom_point()
```



### Frontière trois classes



## Fonctions linéaires discriminantes

### Définition

On appelle *fonctions linéaires discriminantes* les fonctions

$$\delta_k(x) = x^t \Sigma^{-1} \mu_k - \frac{1}{2} \mu_k^t \Sigma^{-1} \mu_k + \log \pi_k, \quad k = 1, \dots, K.$$

### Propriété

D'après (1),

$$\operatorname{argmax}_k \mathbf{P}(Y = k | X = x) = \operatorname{argmax}_k \delta_k(x).$$

### Conclusion

Choisir le groupe qui *maximise les probabilités a posteriori* revient à choisir le groupe qui *maximise les fonctions linéaires discriminantes*.

## 2 Réduction de dimension

- LDA a été présentée comme une méthode de classification *restreinte à un modèle gaussien*.
- La popularité de cette approche est également (surtout ?) due à une *vision géométrique* de cette méthode.
- L'analyse discriminante linéaire s'interprète également comme une méthode de *réduction de dimension* (démarche similaire à l'ACP).
- C'est également un outil de *visualisation de données*.

### Introduction

- *Données* :  $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$  où  $x_i \in \mathbb{R}^p$  et  $y_i \in \{1, \dots, K\}$ .
- *Problème* : expliquer les sorties  $y_i$  par les entrées  $x_i$ .
- Traditionnellement l'*analyse discriminante* se présente selon deux aspects :
  1. **objectif prédictif** (partie précédente) : il s'agit de prédire le groupe d'un nouvel individu  $x \in \mathbb{R}^p$  ;
  2. **objectif descriptif** (cette partie) : il s'agit de trouver des sous-espaces de faibles dimensions tels que les observations projetées sur ces sous-espaces soient *au mieux* séparées.

## 2.1 Recherche d'axes discriminants

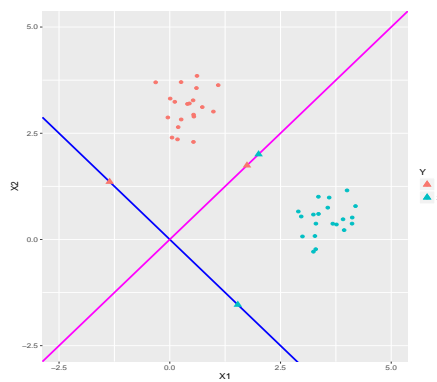
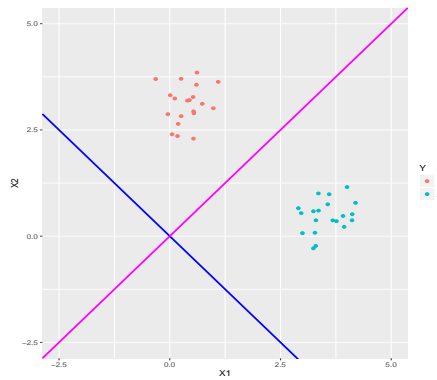
### Notations

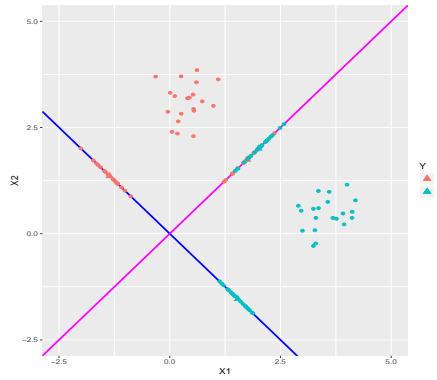
- Données :  $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$  où  $x_i \in \mathbb{R}^p$  et  $y_i \in \{1, \dots, K\}$ .
- $g$  le centre de gravité des données  $g = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$ .
- $g_k$  le centre de gravité du groupe  $k$  :

$$g_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i: y_i=k} x_i.$$



### Le problème





### Le problème

Trouver un sous espace de dimension 1 tel que les observations projetées sur ce sous espace soient **au mieux** séparées.

### L'approche de Fisher

#### Axe discriminant

Chercher une combinaison linéaire  $a_1X_1 + \dots + a_pX_p$  telle que

1. les centres de gravité de chaque groupe projetés sur cet axe soient **au mieux séparés** ;
2. la distance entre les observations projetées et leur centre de gravité projeté soit **minimale**.

Cette approche revient à

- *maximiser* la distance (ou variance) **inter-classes** ;
- *minimiser* la distance (ou variance) **intra-classes**.

### Décomposition de la variance

- Variance *totale*

$$V = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - g)(X_i - g)^t.$$

- Variance *inter-classes* (between)

$$B = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^K n_k (g_k - g)(g_k - g)^t.$$

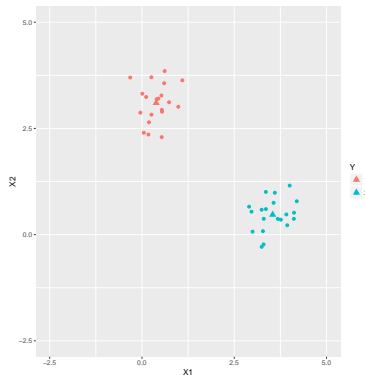
- Variance *intra-classes* (within)

$$W = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^K n_k V_k \quad \text{avec} \quad V_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i: Y_i=k} (X_i - g_k)(X_i - g_k)^t.$$

### Propriété

$$V = B + W$$

## Exemple



$$\begin{pmatrix} 2.63 & -2.04 \\ -2.04 & 1.90 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.49 & -2.08 \\ -2.08 & 1.73 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0.14 & 0.04 \\ 0.03 & 0.17 \end{pmatrix}$$

## Projection - Rappels

- Le *projeté* d'un vecteur  $u$  sur la **droite** engendrée par un vecteur  $v$  est

$$\pi_v(u) = \frac{\langle u, v \rangle}{\|v\|^2} v.$$

- Si  $v$  est de norme **1**, alors

$$\|\pi_v(u)\|^2 = v^t u u^t v.$$

## Variances projetées

Soit  $a \in \mathbb{R}^p$  de *norme 1* :

- Variance **totale** sur  $\text{vect}(a)$  :

$$V(a) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|\pi_a(X_i) - \pi_a(g)\|^2 = a^t V a.$$

- Variance **inter** sur  $\text{vect}(a)$  :

$$B(a) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^K n_k \|\pi_a(g_k) - \pi_a(g)\|^2 = a^t B a.$$

- Variance **intra** sur  $\text{vect}(a)$  :

$$W(a) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^K \sum_{i: Y_i=K} \|\pi_a(X_i) - \pi_a(g_k)\|^2 = a^t W a.$$

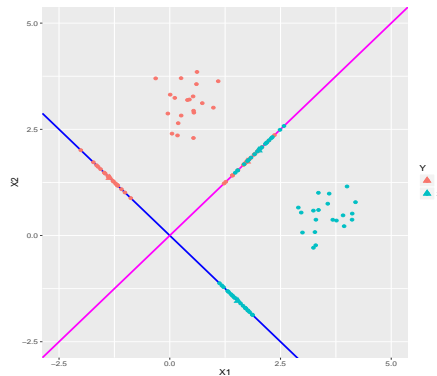
## Propriété

$$V(a) = B(a) + W(a).$$



V(a)	B(a)	W(a)
0.218	0.034	0.184
4.308	4.187	0.121

## Exemple



### Axe discriminant

Un axe  $a$  est *discriminant* si

- Variance *inter* projetée **grande**  $\implies B(a)$  grande
- Variance *intra* projetée **petite**  $\implies W(a)$  petite.

### Coefficient de Rayleigh

Fisher propose d'utiliser comme mesure de la qualité d'un axe de discrimination le **coefficient de Rayleigh**

$$J(a) = \frac{B(a)}{W(a)} = \frac{a^t B a}{a^t W a}.$$

## Première variable discriminante

### Le problème d'optimisation

Le problème consiste à trouver  $a \in \mathbb{R}^p$  qui maximise le **coefficient de Rayleigh**

$$\frac{a^t B a}{a^t W a},$$

ou de façon **équivalente**

$$\max_a a^t B a \quad \text{sous la contrainte} \quad a^t W a = 1.$$

### Solution

Elle est donnée par un **vecteur propre** associé à la plus **grande valeur propre** de  $W^{-1}B$ .

## Exemple

```
> mod
Call:
lda(Y ~ ., data = D)

Prior probabilities of groups:
```

$V(a)$	$B(a)$	$W(a)$	Rayleigh
0.218	0.034	0.184	0.185
4.308	4.187	0.121	34.603
4.325	4.208	0.117	35.966

```

1 2
0.5 0.5

Group means:
      X1      X2
1 0.3850758 3.1009709
2 3.5410917 0.4692031

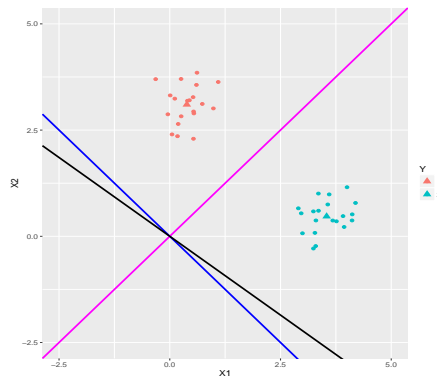
Coefficients of linear discriminants: ⇒ axe a
      LD1
X1 2.284995
X2 -1.694860

```

### Sorties R

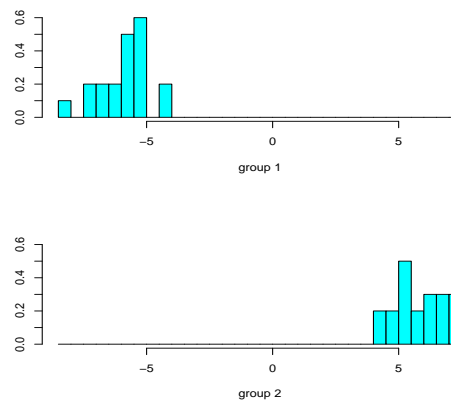
On a  $a_1 = 2.284995$  et  $a_2 = -1.694860$ .

### Exemple



### plot.lda

```
> plot(mod)
```

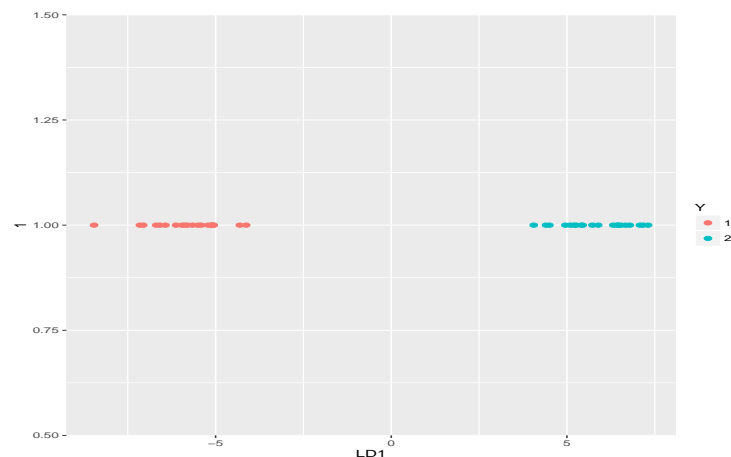


— On peut également représenter les *projections* des individus sur le *premier axe discriminant*

```

> score1 <- predict(mod)$x
> donnees1 <- data.frame(score1,Y=D$Y)
> ggplot(donnees1)+aes(x=LD1,y=1,col=Y)+geom_point(size=2)

```



## Autres axes

- Les  $a_1, \dots, a_p$  s'appellent *coordonnées discriminantes*.
- La variable  $a_1X_1 + \dots + a_pX_p$  s'appelle *première variable discriminante* (ou première variable *canonique*).
- Les centres  $g_1, \dots, g_K$  appartiennent à un espace de *dimension*  $K - 1$ . Si  $K \geq 3$ , on peut poursuivre les projections (comme pour l'ACP).

## Calcul des autres variables discriminantes

- On cherche  $a_2$  orthogonal à  $a_1$  (par rapport à  $W$ ) qui **maximise**  $\frac{a_2^t B a_2}{a_2^t W a_2}$ .
- La solution est donnée par le vecteur propre associé à la **deuxième plus grande valeur propre** de  $W^{-1}B$ .

## Remarque

La matrice  $W^{-1}B$  possède au plus  $K - 1$  *valeurs propres non nulles*, on peut donc avoir au maximum  $K - 1$  variables discriminantes.

## Les iris de Fisher

```

> mod1 <- lda(Species~.,data=iris)
> mod1
Prior probabilities of groups:
  setosa versicolor virginica
 0.3333333 0.3333333 0.3333333
Group means:
      Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
setosa           5.006      3.428       1.462      0.246
versicolor       5.936      2.770       4.260      1.326
virginica         6.588      2.974       5.552      2.026

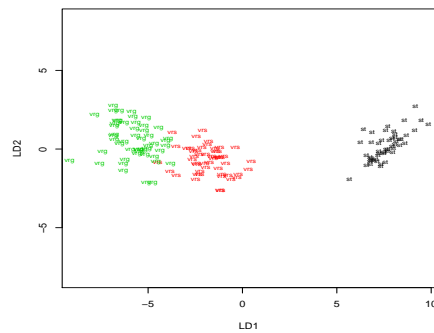
Coefficients of linear discriminants:
      LD1      LD2
Sepal.Length 0.8293776 0.02410215
Sepal.Width  1.5344731 2.16452123
Petal.Length -2.2012117 -0.93192121
Petal.Width  -2.8104603 2.83918785

Proportion of trace:
      LD1      LD2
0.9912 0.0088

```

## Représentation des individus sur les deux premiers axes

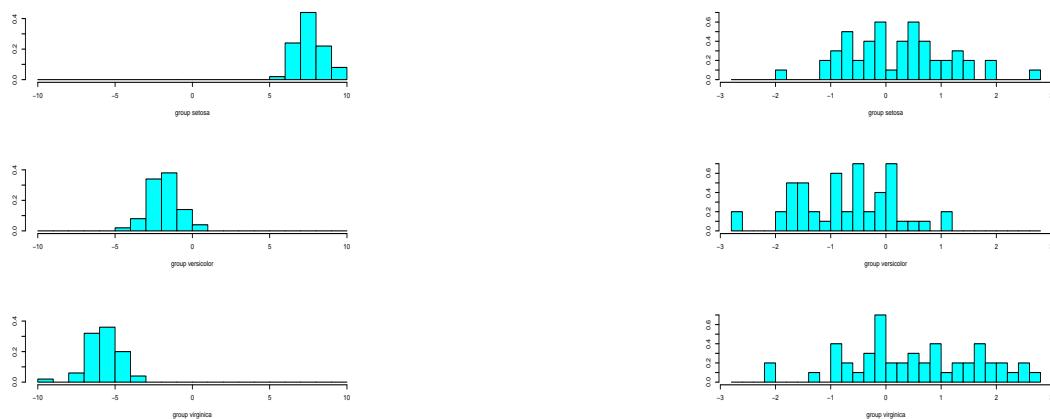
```
> plot(mod1)
```



### Comparaison des axes discriminants

Le premier axe est (clairement) **plus discriminant** que le second.

### Représentation des groupes par axes



### Interprétation

On visualise à nouveau que le premier axe est beaucoup **plus discriminant** que le second.

### Performances des variables canoniques

— On a

$$J(a_k) = \frac{a_k^t B a_k}{a_k^t W a_k} = \lambda_k$$

où  $\lambda_k$  est la  $k$ -ème valeur propre de  $W^{-1}B$

### Une mesure de performance

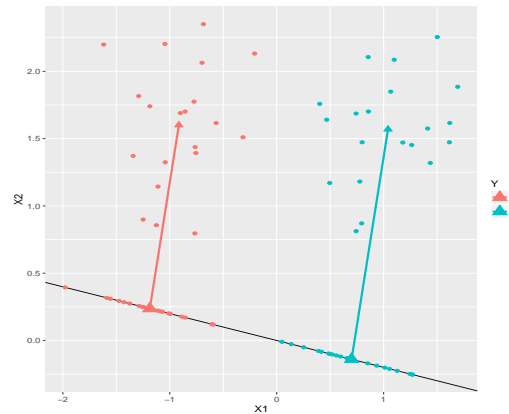
On peut donc mesurer la **performance de la  $k$ -ème variable canonique** par

$$\frac{\lambda_k}{\sum_{j=1}^{K-1} \lambda_j}.$$

Proportion of trace:	
LD1	LD2
0.9912	0.0088

## 2.2 Classification

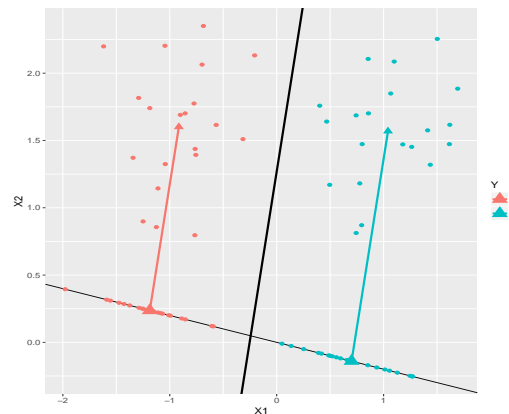
### Le problème de la classification



#### Question

Comment classer un **nouveau point**  $x = (x_1, x_2)$  ?

#### Une idée naturelle



#### Réponse

Utiliser l'axe **orthogonal à l'axe discriminant** passant par le point **équidistant** des projetés des centres de gravité.

#### Règle de Mahalanobis

#### Règle géométrique

On classe  $x$  dans le groupe 1 si

$$\|\pi_a(x) - \pi_a(g_1)\| \leq \|\pi_a(x) - \pi_a(g_2)\|.$$

#### Propriété

La règle géométrique est équivalente à classer  $x$  dans le groupe qui minimise la *distance de Mahalanobis*

$$d(x, g_k) = (x - g_k)^t W^{-1} (x - g_k).$$

- La propriété se **généralise** à un nombre de groupes  $K$  quelconque.

## Lien LDA descriptif/Prédictive

### LDA prédictive

On affecte un nouvel individu  $x$  au groupe  $k$  qui maximise

- la probabilité **a posteriori** :  $\mathbf{P}(Y = k|x = x)$
- la **fonction linéaire discriminante**

$$\delta_k(x) = x^t \Sigma^{-1} \mu_k - \frac{1}{2} \mu_k^t \Sigma^{-1} \mu_k + \log \pi_k$$

- la distance de Mahalanobis "corrigée"

$$-\frac{1}{2} (x - \mu_k)^t \Sigma^{-1} (x - \mu_k) + \log \pi_k$$

### LDA géométrique

On affecte un nouvel individu  $x$  au groupe  $k$  qui minimise la *distance de Mahalanobis*

$$d(x, g_k) = (x - g_k)^t W^{-1} (x - g_k).$$

### Remarque (importante)

Dans le cas où on estime

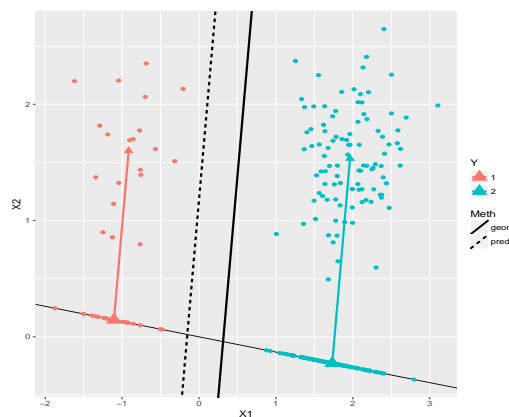
- $\mu_k$  par  $g_k$
- $\Sigma$  par  $W$ ,

et que  $\pi_k = 1/K, k = 1, \dots, K$  les règles *prédictives et géométriques coïncident*.

### Conséquence

La règle géométrique correspond à la règle probabiliste lorsque les **probabilités a priori** de chaque groupe sont **identiques**.

### Exemple



### Remarque

La règle **géométrique** "favorise" les groupes à **faibles effectifs**.

## Quelques tests

- LDA peut-être accompagnée de quelques *tests statistiques*.
- Par exemple :  $H_0 : \mu_1 = \dots = \mu_K = 0$ .
- **Λ de Wilks** :

$$\Lambda = \frac{|W|}{|V|} = \frac{|W|}{|W + B|}$$

suit la *loi de Wilks* de paramètres  $(p, n - K, K - 1)$  sous  $H_0$ .

- **Lawley-Hotelling** :  $\text{tr}(W^{-1}B)$  suit la loi de  $T_0^2$  généralisé de *Hotelling* sous  $H_0$  (approximable par un  $\chi_{p(K-1)}^2$ ).

## Exemple

- Sous *R*, la fonction **manova** permet de mettre en œuvre ces tests.

```
> D <- as.matrix(iris[,1:4])
> mod <- manova(D~iris$Species)
> summary(mod, test="Wilks")
              Df      Wilks approx F num Df den Df    Pr(>F)
iris$Species   2 0.023439   199.15      8   288 < 2.2e-16 ***
Residuals    147
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
> summary(mod, test="Hotelling-Lawley")
              Df Hotelling-Lawley approx F num Df den Df    Pr(>F)
iris$Species   2          32.477    580.53      8   286 < 2.2e-16 ***
Residuals    147
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

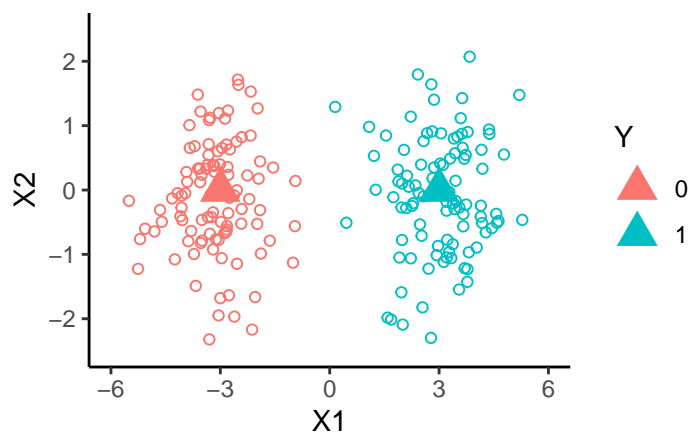
## Bilan

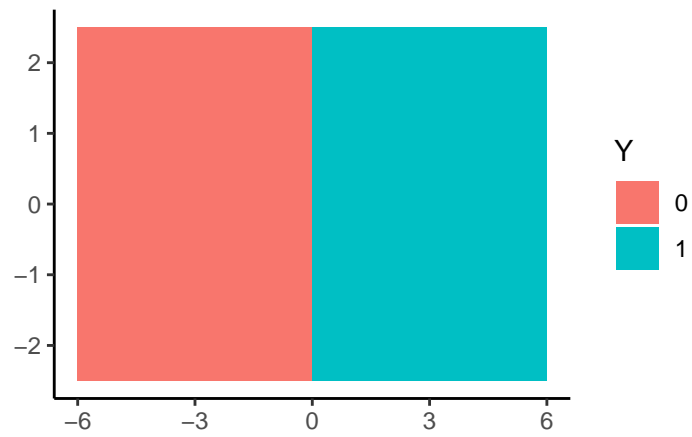
- *LDA* : règle **linéaire** qui va classer
  - au **centre de gravité le plus proche** ;
  - en prenant en compte la structure de **covariance** des données.
- En effet pour 2 groupes, on classera groupe 2 si

$$x^t \Sigma^{-1}(\mu_2 - \mu_1) > \frac{1}{2}(\mu_2 + \mu_1)^t \Sigma^{-1}(\mu_2 - \mu_1) - \log\left(\frac{\pi_2}{\pi_1}\right).$$

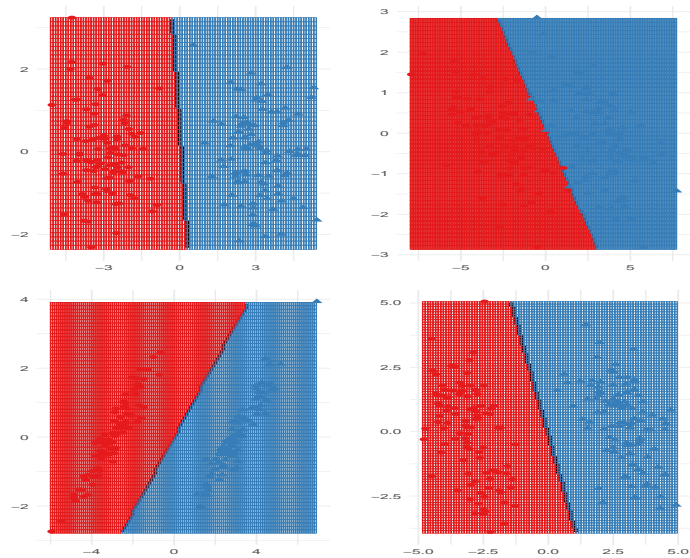
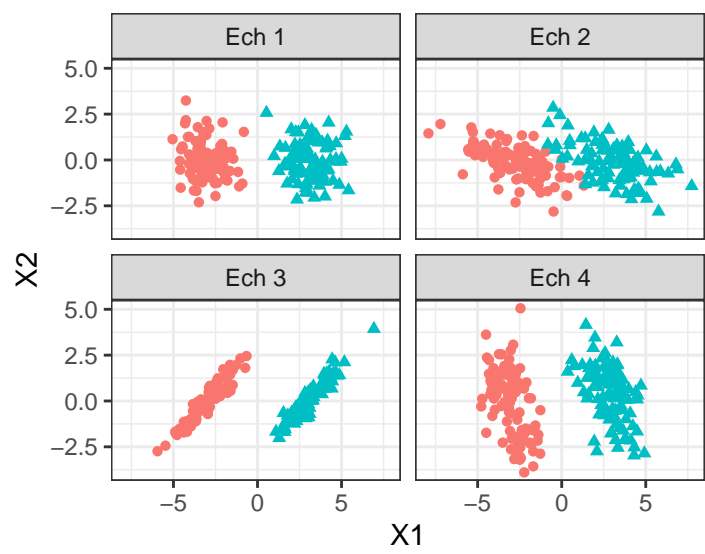
- *Remarque* : si  $\Sigma = \text{Id}$  alors il suffit de regarder la distance euclidienne aux centre de gravités.

## Exemple : $\Sigma = \text{Id}$





Exemple :  $\Sigma \neq \text{Id}$





### 3 Analyse discriminante quadratique et régularisation

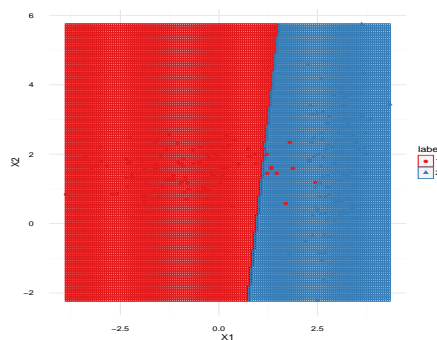
#### 3.1 Analyse discriminante quadratique

##### Rappels LDA

1. Suppose  $X|Y = k \sim \mathcal{N}(\mu_k, \Sigma)$ ;
2. Estime  $\mu_k$  et  $\Sigma$  par *maximum de vraisemblance*;
3. Bayes pour obtenir les *probabilités a posteriori*

$$\mathbf{P}(Y = k|X = x) = \frac{\pi_k f_k(x)}{\sum_{\ell=1}^K \pi_\ell f_\ell(x)}.$$

##### Exemple



##### Remarques

- LDA peut être *mise en défaut* lorsque les *matrices de variance-covariance* sont *différentes*.
- L'*analyse discriminante quadratique* propose d'utiliser des matrices de variance-covariance *différentes* pour chaque groupe.

##### QDA

##### Modèle QDA

$$X|Y = k \sim \mathcal{N}(\mu_k, \Sigma_k).$$

##### Estimation

- Les paramètres  $\mu_k$  et  $\pi_k = \mathbf{P}(Y = k)$  sont estimés de la *même façon* que pour l'*analyse discriminante linéaire*.
- Les *matrices de variance-covariance*  $\Sigma_k$  sont « naturellement » estimées selon

$$\hat{\Sigma}_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i:Y_i=k} (X_i - \hat{\mu}_k)(X_i - \hat{\mu}_k)^t.$$

##### Formule de Bayes

$$\mathbf{P}(Y = k|X = x) = \frac{\pi_k f_k(x)}{\sum_{\ell=1}^K \pi_\ell f_\ell(x)}.$$

## Fonctions linéaires discriminantes

- Même principe que pour LDA mais *FLD différentes*.

### Définition

On appelle *fonctions linéaires discriminantes* (pour QDA) les fonctions

$$\delta_k(x) = -\frac{1}{2} \log |\Sigma_k| - \frac{1}{2} (x - \mu_k)^t \Sigma_k^{-1} (x - \mu_k) + \log \pi_k, \quad k = 1, \dots, K.$$

### Propriété

$$\operatorname{argmax}_k \mathbf{P}(Y = k | X = x) = \operatorname{argmax}_k \delta_k(x).$$

### Conclusion

Choisir le groupe qui *maximise les probabilités a posteriori* revient à choisir le groupe qui *maximise les fonctions linéaires discriminantes*.

## Frontières pour QDA

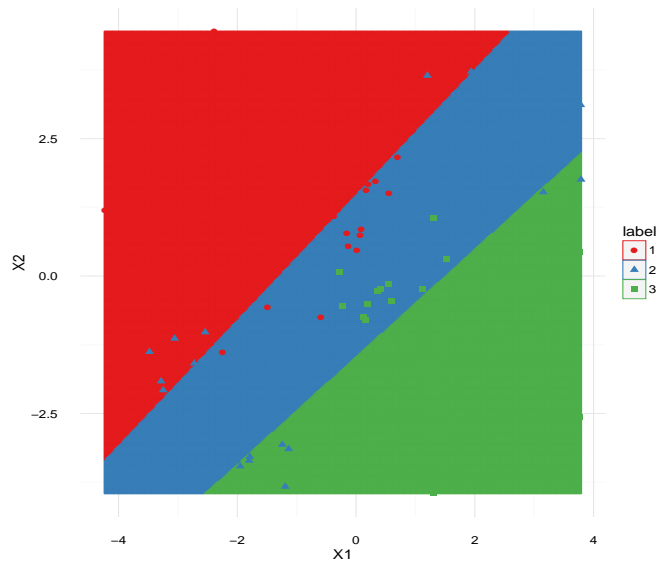
- Les *frontières* entre les groupes  $k$  et  $\ell$   
 $\{x \text{ tq } \delta_k(x) = \delta_\ell(x)\}$   
sont ici *quadratiques* en  $x$  (linéaires pour LDA).

### Exemple

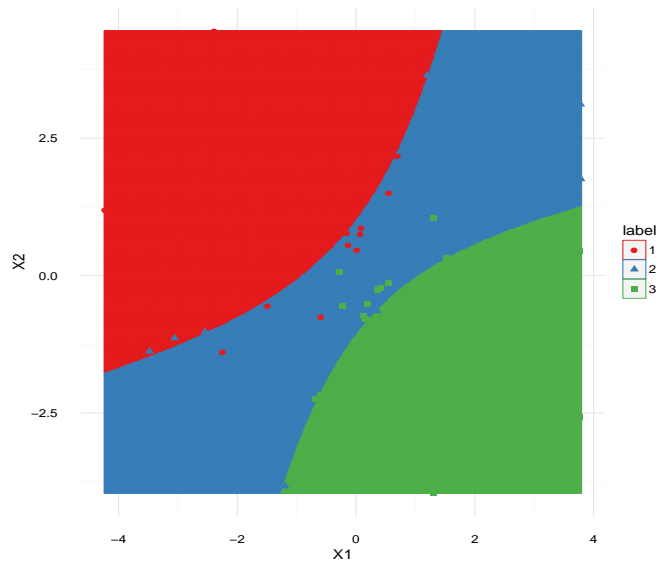
- On compare LDA et QDA sur les données du graphe ci-dessous



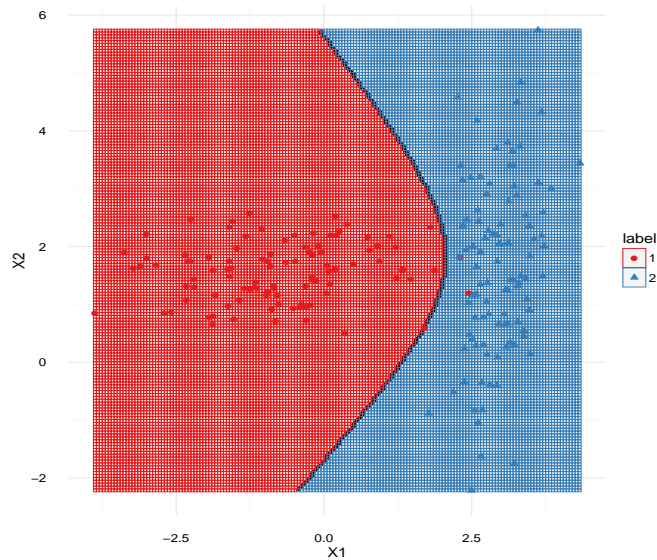
## Frontières LDA



### Frontières QDA



### Autre exemple



## LDA vs QDA

- QDA est *plus flexible* que LDA : LDA est en quelques sortes « emboîtée » dans QDA.
- QDA permet donc a priori de modéliser une *gamme plus large* de phénomènes.
- Mais... Le *prix à payer* se situe au niveau de l'estimation :
  - $(K - 1) \times (p + 1)$  paramètres pour LDA ;
  - $(K - 1) \times (p(p + 3)/2 + 1)$  pour QDA.

### Conclusion

QDA est **plus complexe**  $\implies$  plus de paramètres à estimer  $\implies$  estimateurs **moins précis**.

## 3.2 Régularisation

### Régularisation 1

- [Friedman, 1989] propose de *combiner* LDA et QDA.
- On reste dans le *modèle gaussien* mais
- les matrices de *variance-covariance* des lois  $X|Y = k$  sont estimées par

$$(1 - \lambda)\hat{\Sigma}_k + \lambda\hat{\Sigma}.$$

#### Role de $\lambda$

- $\lambda = 0 \implies$  QDA ;
- $\lambda = 1 \implies$  LDA.
- $\lambda \in [0, 1]$  est un paramètre à **calibrer**.

### Régularisation 2

- [Friedman, 1989] (toujours...) propose de *régulariser la matrice de variance-covariance* pour LDA :

$$(1 - \gamma)\hat{\Sigma} + \gamma\hat{\sigma}^2 I_p.$$

#### Role de $\gamma$

- $\gamma = 0 \implies$  LDA ;
- $\gamma \in [0, 1]$  est un paramètre à **calibrer**.

## Le coin R

- La fonction `rda` du package *klaR* permet de combiner les deux pénalités en estimant les matrices de variance-covariance selon

$$(1 - \gamma)\hat{\Sigma}_k(\lambda) + \gamma \frac{\text{trace}(\hat{\Sigma}_k(\lambda))}{p} I_p.$$

avec

$$\hat{\Sigma}_k(\lambda) = (1 - \lambda)\hat{\Sigma}_k + \lambda\hat{\Sigma}.$$

### Roles de $\gamma$ et $\lambda$

- $\gamma = 0, \lambda = 0 \implies$  QDA ;
- $\gamma = 0, \lambda = 1 \implies$  LDA ;
- Le problème est de bien choisir  $\lambda$  et  $\gamma$ .

## Exemple

- La fonction `rda` propose de sélectionner automatiquement ces paramètres

```
> set.seed(1234)
> rda(Species~.,data=iris)
Call:
rda(formula = Species ~ ., data = iris)

Regularization parameters:
      gamma      lambda
0.09303661 0.85993116

Prior probabilities of groups:
      setosa versicolor virginica
0.3333333  0.3333333  0.3333333

Misclassification rate:
  apparent: 2 %
cross-validated: 2 %
```

## Sélection avec caret

On peut bien entendu également utiliser la fonction `train` du package `caret`.

```
> ctrl <- trainControl(method="cv")
> gr <- expand.grid(data.frame(gamma=seq(0,1,by=0.1),lambda=seq(0,1,by=0.1)))
> set.seed(12345)
> train(Species~.,data=iris,method="rda",tuneGrid=gr,trControl=ctrl)
Regularized Discriminant Analysis
```

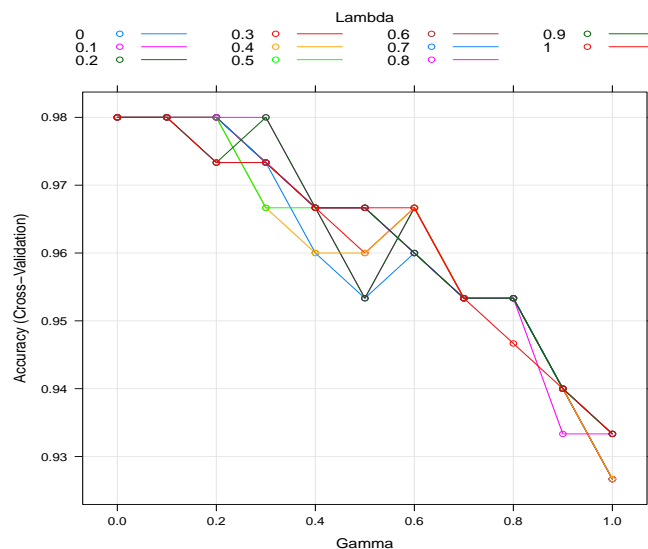
```
150 samples
 4 predictor
 3 classes: 'setosa', 'versicolor', 'virginica'
```

```
No pre-processing
Resampling: Cross-Validated (10 fold)
Summary of sample sizes: 135, 135, 135, 135, 135, 135, ...
Resampling results across tuning parameters:
```

gamma	lambda	Accuracy	Kappa
0.0	0.0	0.9800000	0.97
0.0	0.1	0.9800000	0.97
0.0	0.2	0.9800000	0.97
0.0	0.3	0.9800000	0.97
0.0	0.4	0.9800000	0.97
0.0	0.5	0.9800000	0.97
0.0	0.6	0.9800000	0.97
0.0	0.7	0.9800000	0.97
0.0	0.8	0.9800000	0.97
0.0	0.9	0.9800000	0.97
0.0	1.0	0.9800000	0.97
0.1	0.0	0.9800000	0.97
0.1	0.1	0.9800000	0.97
0.1	0.2	0.9800000	0.97
0.1	0.3	0.9800000	0.97
0.1	0.4	0.9800000	0.97
0.1	0.5	0.9800000	0.97
0.1	0.6	0.9800000	0.97

0.1	0.7	0.9800000	0.97
0.1	0.8	0.9800000	0.97
0.1	0.9	0.9800000	0.97
0.1	1.0	0.9800000	0.97
0.2	0.0	0.9733333	0.96
0.2	0.1	0.9800000	0.97
0.2	0.2	0.9800000	0.97

Accuracy was used to select the optimal model using the largest value.  
The final values used for the model were gamma = 0 and lambda = 1.



## Sélection de variables

- Tout comme pour les modèles linéaire et logistique, on peut chercher à *sélectionner des variables* pour un modèle d'analyse discriminante linéaire (les **objectifs sont identiques**).
- L'approche est similaire, on se donne un *critère de choix de modèle* (par exemple estimation de la probabilité d'erreur) et on utilise des *techniques pas à pas*.
- Sur R, les fonctions **stepClass** et **train** des packages *klaR* et *caret* permettent de faire de la sélection de variables.

## Sélection avec stepClass

```
> stepclass(Species~.,data=iris,method="lda",direction="both")
'steppwise classification', using 10-fold cross-validated
correctness rate of method lda'.
150 observations of 4 variables in 3 classes; direction: both
stop criterion: improvement less than 5%.
correctness rate: 0.96; in: "Petal.Width"; variables (1): Petal.Width

hr.elapsed min.elapsed sec.elapsed
0.000      0.000      0.194
method      : lda
final model : Species ~ Petal.Width
<environment: 0x12d5b5e38>
correctness rate = 0.96
```

## Sélection avec train

```
> sllda <- train(Species ~ ., data = iris,
  method = "stepLDA",
  trControl = trainControl(method = "cv"))
> sllda$finalModel
method      : lda
```

```
final model : y ~ Petal.Width  
<environment: 0x12c509298>  
correctness rate = 0.96
```

## Bilan

- L'analyse discriminante est une méthode *simple* permettant de répondre au problème de classification supervisée.
- Elle est implémentée dans tous les *logiciels statistiques*.
- Elle peut se révéler performante même lorsque les "hypothèses modèles" ne sont **pas vérifiées** (justifié par l'approche géométrique).
- Plutôt utilisée pour des variables explicatives quantitatives à la base mais *peut s'adapter à des variables qualitatives* :
  1. **codage disjonctif** des variables qualitatives ;
  2. faire une analyse discriminante sur les axes d'une **analyse des correspondances multiples** (ACM)  $\implies$  méthode *DISQUAL* (voir [**Saporta, 2011**]).

## Troisième partie

# Arbres

### Présentation

- Les arbres sont des algorithmes de prédiction qui fonctionnent en *régression et en discrimination*.
- Il existe *différentes variantes* permettant de construire des prédicteurs par arbres.
- Nous nous focalisons dans cette partie sur la *méthode CART* [Breiman et al., 1984] qui est la plus utilisée. La méthode **CHAID** est proposée en *annexe*.

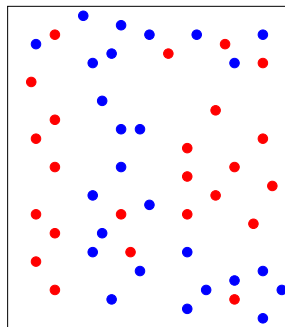
## 1 Arbres binaires

### Notations

- On cherche à *expliquer une variable*  $Y$  par  $p$  *variables explicatives*  $X_1, \dots, X_p$ .
- $Y$  peut admettre un nombre quelconque de modalités et les variables  $X_1, \dots, X_p$  peuvent être *qualitatives et/ou quantitatives*.
- Néanmoins, pour simplifier on se place dans un premier temps en *discrimination binaire* :  $Y$  admet 2 modalités (-1 ou 1). On suppose de plus que l'on a simplement 2 variables explicatives quantitatives.

### Représentation des données

- On dispose de  $n$  observations  $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$  où  $X_i \in \mathbb{R}^2$  et  $Y_i \in \{-1, 1\}$ .



### Approche par arbres

Trouver une **partition** des observations qui *sépare* "au mieux" les points rouges des points bleus.

### Définitions

#### Arbre binaire

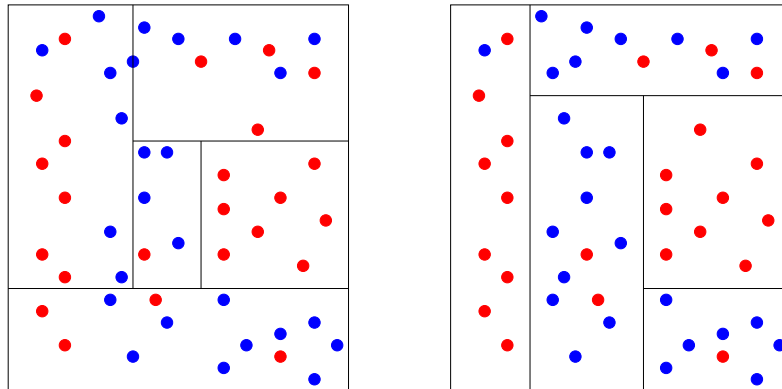
Un *arbre binaire de décision* CART est

- un algorithme de *moyennage local* par partition (moyenne ou vote à la majorité sur les éléments de la partition),
- dont la partition est construite par *divisions successives* au moyen d'*hyperplans orthogonaux aux axes* de  $\mathbb{R}^p$ , dépendant des données  $(X_i, Y_i)$ .

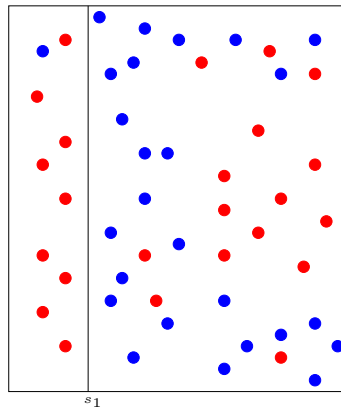
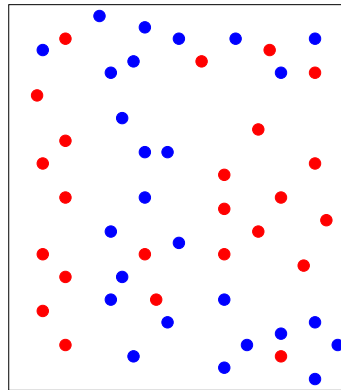


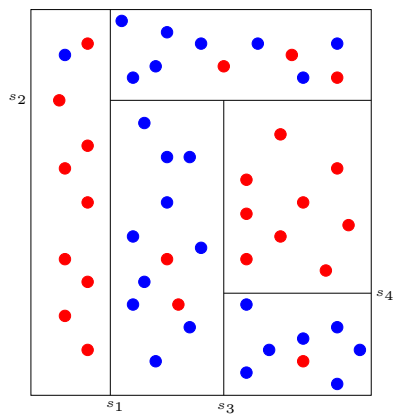
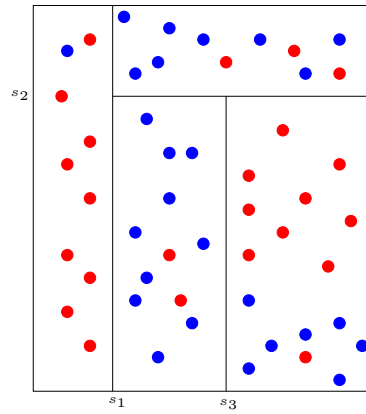
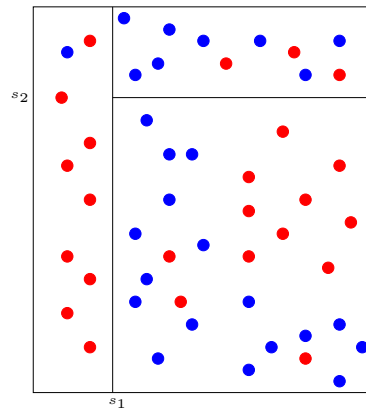
## Arbres binaires

- La *méthode CART* propose de construire une partition basée sur des divisions *successives parallèles aux axes*.
- 2 exemples de partition :

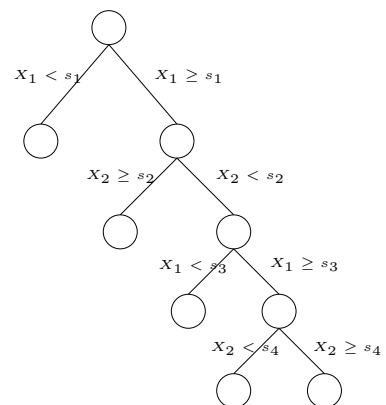
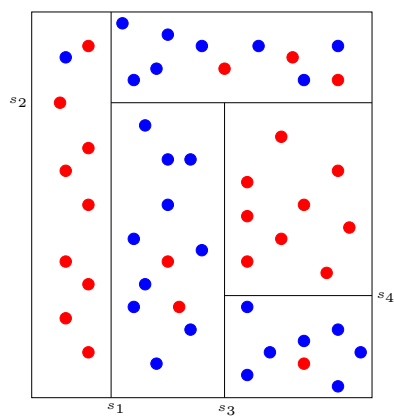


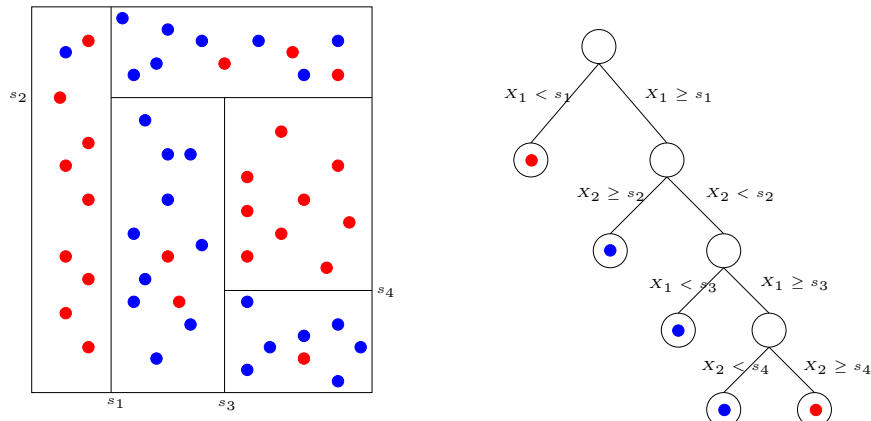
- A chaque étape, la méthode cherche une *nouvelle division* : une *variable* et un *seuil* de coupure.





## Représentation de l'arbre





### Règle de classification

On effectue un **vote à la majorité** dans les nœuds terminaux de l'arbre.

### Définitions

#### Définition

- Les éléments de la partition d'un arbre sont appelés les *nœuds terminaux* ou les *feuilles* de l'arbre.
- L'ensemble  $\mathbb{R}^p$  constitue le *nœud racine*.
- Chaque division définit deux nœuds, les *nœuds fils à gauche et à droite*.

## 2 Choix des découpes

### Questions

1. Comment **choisir les découpes** ?
  2. Faut-il **stopper les découpes** ? Si oui, quand ?
- A chaque étape, on cherche un *couple*  $(j, s)$  qui split un nœud  $\mathcal{N}$  en deux nœuds fils :

$$\mathcal{N}_1(j, s) = \{X \in \mathcal{N} | X_j \leq s\} \quad \text{et} \quad \mathcal{N}_2(j, s) = \{X \in \mathcal{N} | X_j > s\}.$$

- La sélection du couple  $(j, s)$  s'effectue en optimisant un critère qui mesure l'*(im)pureté* ou l'*hétérogénéité* des deux nœuds fils.

### Critère de découpe

- L'*impureté*  $\mathcal{I}$  d'un nœud doit être :
  1. **faible** lorsque un nœud est homogène : les valeurs de  $Y$  dans le nœud sont *proches*.
  2. **élevée** lorsque un nœud est hétérogène : les valeurs de  $Y$  dans le nœud sont *dispersés*.

### L'idée

Une fois  $\mathcal{I}$  défini, on choisira le couple  $(j, s)$  qui *maximise le gain d'impureté* :

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

## 2.1 Cas de la régression

— Une mesure naturelle de l'*impureté* d'un nœud  $\mathcal{N}$  en *régression* est la **variance** du nœud :

$$\mathcal{I}(\mathcal{N}) = \frac{1}{|\mathcal{N}|} \sum_{i: X_i \in \mathcal{N}} (Y_i - \bar{Y}_{\mathcal{N}})^2,$$

où  $\bar{Y}_{\mathcal{N}}$  désigne la moyenne des  $Y_i$  dans  $\mathcal{N}$ .

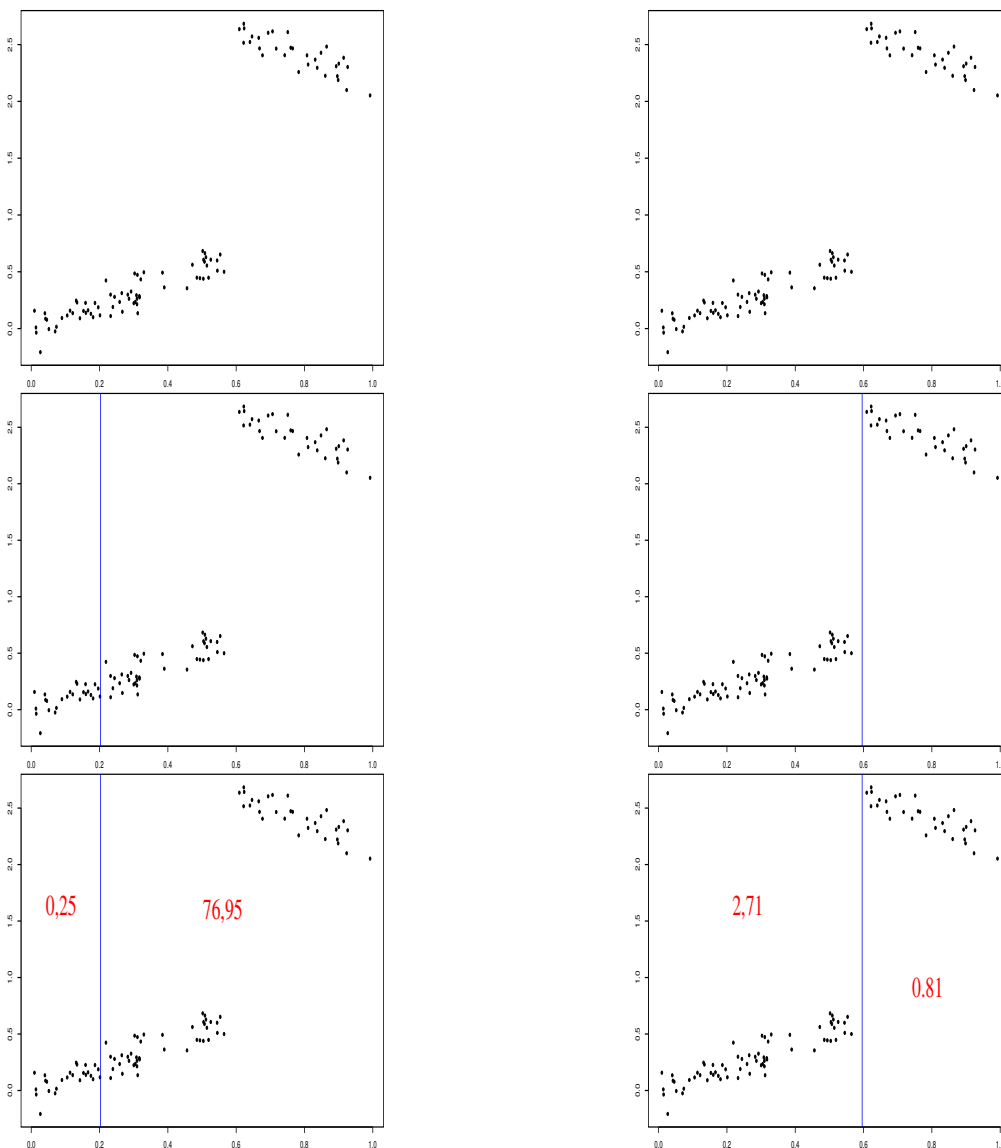
### Découpe en régression

A chaque étape, on choisit le couple  $(j, s)$  qui minimise

$$\sum_{X_i \in \mathcal{N}_1(j, s)} (Y_i - \bar{Y}_1)^2 + \sum_{X_i \in \mathcal{N}_2(j, s)} (Y_i - \bar{Y}_2)^2$$

où  $\bar{Y}_k = \frac{1}{|\mathcal{N}_k(j, s)|} \sum_{X_i \in \mathcal{N}_k(j, s)} Y_i, k = 1, 2$ .

### Exemple



### Sélection

On choisira le seuil de **droite**.

## 2.2 Cas de la classification supervisée

- Les  $Y_i, i = 1, \dots, n$  sont à valeurs dans  $\{1, \dots, K\}$ .
- On cherche une fonction  $\mathcal{I}$  telle que  $\mathcal{I}(\mathcal{N})$  soit
  - *petite* si un *label majoritaire* se distingue clairement dans  $\mathcal{N}$  ;
  - *grande* sinon.

### Impureté

L'**impureté** d'un nœud  $\mathcal{N}$  en classification se mesure selon

$$\mathcal{I}(\mathcal{N}) = \sum_{j=1}^K f(p_j(\mathcal{N}))$$

où

- $p_j(\mathcal{N})$  représente la proportion d'observations de la classe  $j$  dans le nœud  $\mathcal{N}$ .
- $f$  est une fonction (concave)  $[0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^+$  telle que  $f(0) = f(1) = 0$ .

### Exemples de fonctions $f$

- Si  $\mathcal{N}$  est pur, on veut  $\mathcal{I}(\mathcal{N}) = 0 \implies$  c'est pourquoi  $f$  doit vérifier  $f(0) = f(1) = 0$ .
- Les 2 mesures d'impureté les plus classiques sont :
  1. *Gini* :  $f(p) = p(1 - p)$  ;
  2. *Information* :  $f(p) = -p \log(p)$ .

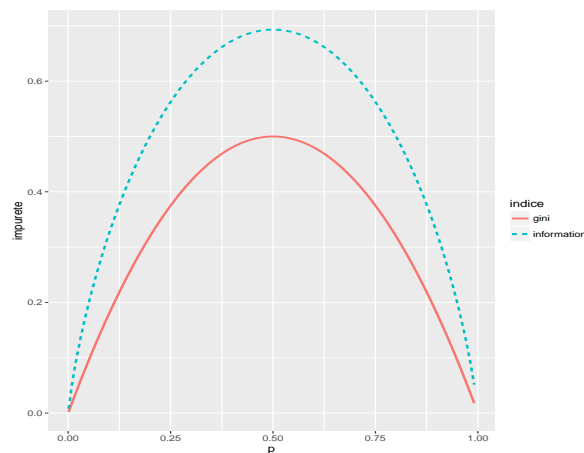
### Cas binaire

Dans ce cas on a

1.  $\mathcal{I}(\mathcal{N}) = 2p(1 - p)$  pour **Gini**
2.  $\mathcal{I}(\mathcal{N}) = -p \log p - (1 - p) \log(1 - p)$  pour **Information**

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

### Impureté dans le cas binaire



## Découpe en classification supervisée

— On rappelle que pour un nœud  $\mathcal{N}$  donné et un couple  $(j, s)$ , on note

$$\mathcal{N}_1(j, s) = \{X \in \mathcal{N} | X_j \leq s\} \quad \text{et} \quad \mathcal{N}_2(j, s) = \{X \in \mathcal{N} | X_j > s\}.$$

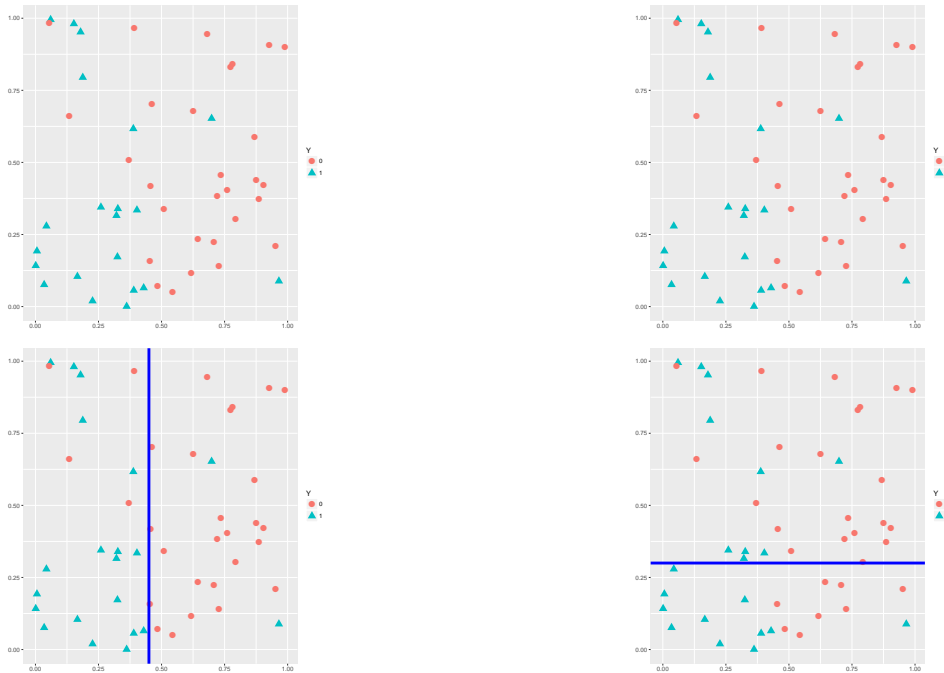
**Choix de  $(j, s)$**

Pour une mesure d'impureté  $\mathcal{I}$  donnée, on choisira le couple  $(j, s)$  qui **maximise le gain d'impureté** :

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

## Exemple

$$\mathcal{I}(\mathcal{N}) = 0.4872$$



	$\mathcal{I}(\mathcal{N}_1)$	$\mathcal{I}(\mathcal{N}_2)$	$\Delta(\mathcal{I})$
Gauche	0.287	0.137	0.281
Droite	0.488	0.437	0.031

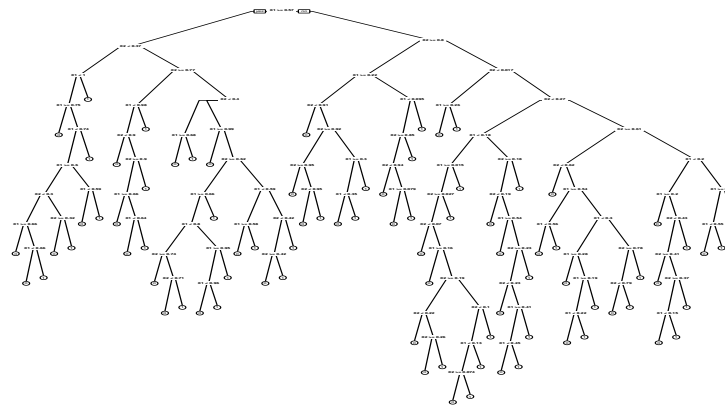
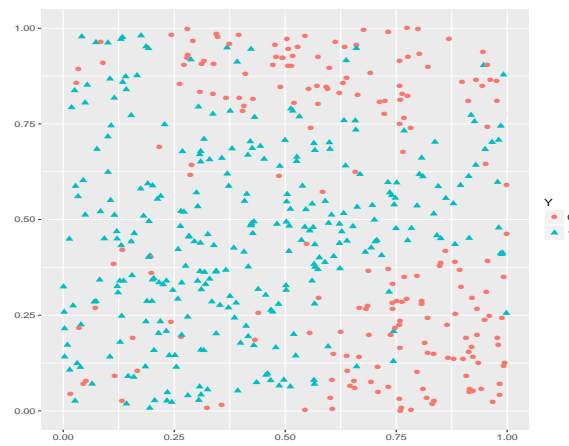
## Conclusion

On choisira la découpe de **gauche**.

## 3 Elagage

### Questions

- Comment construire un *"bon"* arbre?
- Construire l'arbre *maximal*? (on découpe les nœuds jusqu'à ce qu'on ne puisse plus).
- Faut-il se donner un *critère d'arrêt*?
- Faut-il construire un arbre grand et choisir un *sous-arbre* de ce dernier?



## Un exemple en discrimination

### Arbre optimal ?

Intuitivement, on a envie de faire à peu près 5 classes.

### Arbre « maximal »

```
> library(rpart)
> library(rpart.plot)
> arbre1 <- rpart(Y~.,data=donnees,cp=0.0001,minsplit=2)
> prp(arbre1)
```

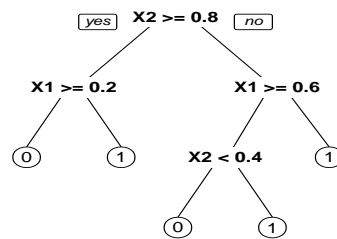
### Un arbre plus petit

```
> arbre2 <- rpart(Y~.,data=donnees)
> prp(arbre2)
```

## Comparaison des deux arbres

- On compare les performances des deux arbres en estimant leur *probabilité de mauvais classement* sur un échantillon test :

```
> prev1 <- predict(arbre1,newdata=dtest,type="class")
> prev2 <- predict(arbre2,newdata=dtest,type="class")
> round(mean(prev1!=dtest$Y),3)
[1] 0.157
```

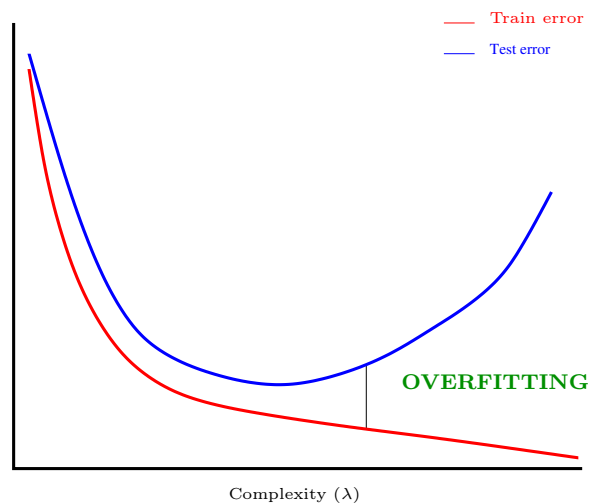


```
> round(mean(prev2!=dtest$Y),3)
[1] 0.115
```

## Conclusion

La performance *n'augmente pas forcément avec la profondeur*.

## Sur-ajustement pour les arbres



## Remarque

La *complexité* d'un arbre est mesurée par sa **taille** ou **profondeur**.

## Biais et variance

La **profondeur** régule le compromis biais/variance :

1. **Peu de découpes** (arbres peu profonds)  $\implies$  arbres stables  $\implies$  **peu de variance**... mais... *beaucoup de biais*.



2. **Beaucoup de découpes** (arbres profonds)  $\implies$  arbres instables  $\implies$  **peu de biais**... mais... *beaucoup de variance* (*surapprentissage*).

### Principe d'élagage [Breiman et al., 1984]

Plutôt que de choisir « quand couper » on raisonne en 3 temps :

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

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

3. On *sélectionne un arbre* dans cette sous-suite.

### Arbres emboîtés

#### Construction de la suite de sous arbres

- Soit  $T$  un arbre à  $|T|$  nœuds terminaux  $\mathcal{N}_1, \dots, \mathcal{N}_{|T|}$ .
- Soit  $R(\mathcal{N})$  le risque (l'erreur) dans le nœud  $\mathcal{N}$  :
  - *Régression* :

$$R(\mathcal{N}) = \frac{1}{|\mathcal{N}|} \sum_{i: X_i \in \mathcal{N}} (Y_i - \bar{Y}_{\mathcal{N}})^2.$$

- *Classification binaire* :

$$R(\mathcal{N}) = \frac{1}{|\mathcal{N}|} \sum_{i: X_i \in \mathcal{N}} \mathbf{1}_{Y_i \neq Y_{\mathcal{N}}}.$$

### Définition

Soit  $\alpha > 0$ , on pose

$$C_{\alpha}(T) = \sum_{m=1}^{|T|} N_m R(\mathcal{N}_m) + \alpha |T|.$$

### Idée

- $C_{\alpha}(T)$  est un critère qui prend en compte l'**adéquation** d'un arbre et sa **complexité**.
- L'**idée** est de chercher un arbre  $T_{\alpha}$  qui minimise  $C_{\alpha}(T)$  pour une valeur de  $\alpha$  bien choisie.

### Remarque

- $\alpha = 0 \implies T_{\alpha} = T_0 = T_{max}$ .
- $\alpha = +\infty \implies T_{\alpha} = T_{+\infty} = \text{arbre sans coupure}$ .
- $\alpha$  est appelé *paramètre de complexité* et  $C_{\alpha}(T)$  le *cout* de l'arbre  $T$ .

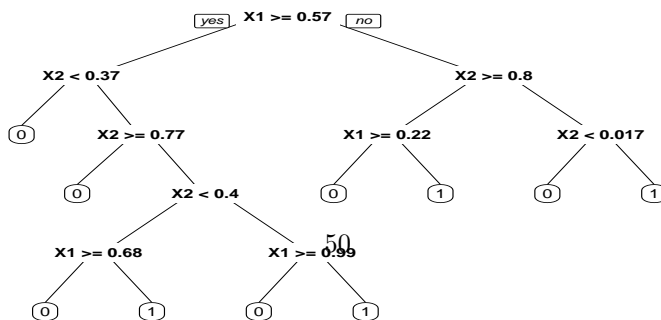
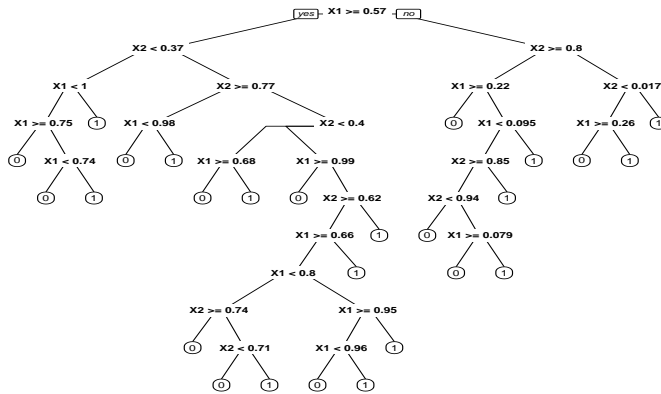
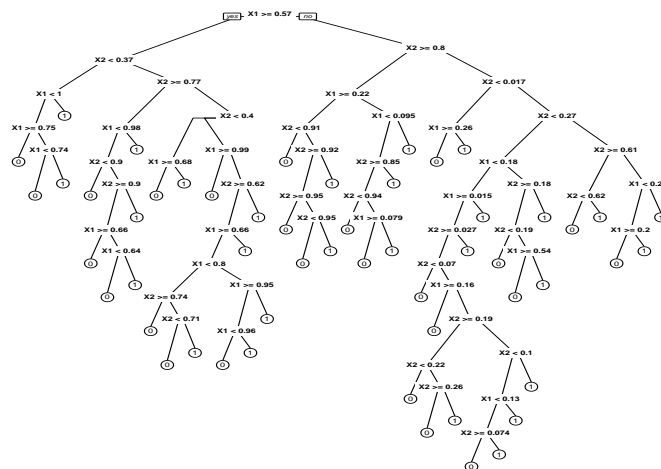
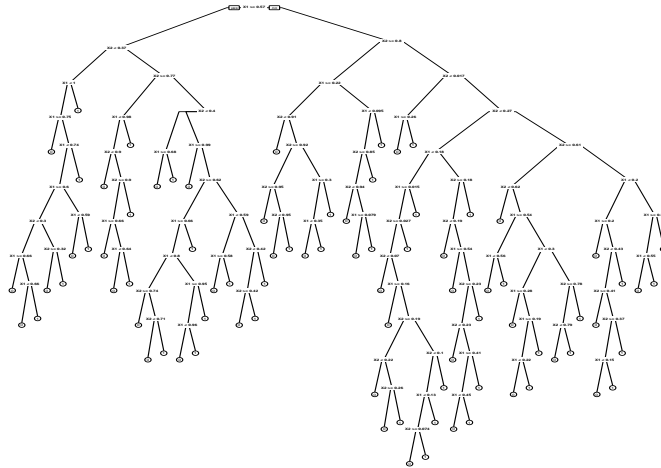
### Théorème [Breiman et al., 1984]

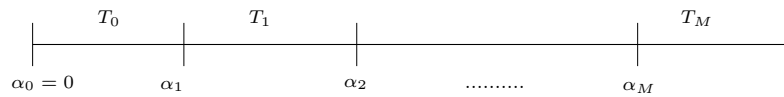
Il existe une sous-suite finie  $\alpha_0 = 0 < \alpha_1 < \dots < \alpha_M$  avec  $M < |T_{max}|$  et une suite associée d'*arbres emboîtés*

$$T_{max} = T_0 \supset T_1 \supset \dots \supset T_M$$

telles que  $\forall \alpha \in [\alpha_m, \alpha_{m+1}[$

$$T_m = \underset{T}{\operatorname{argmin}} C_{\alpha}(T).$$





## Conséquences

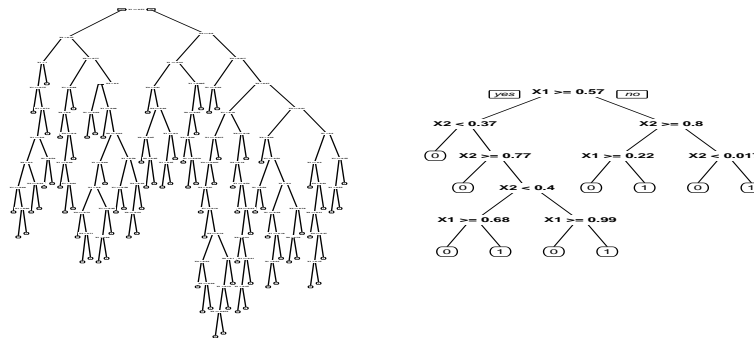
- On se ramène à une **sous-suite finie** d'arbres (emboîtés).
- Il reste à choisir un arbre (ou **une valeur de  $\alpha$** ).

## Exemple

```
> printcp(arbre)
Classification tree:
rpart(formula = Y ~ ., data = donnees, cp = 1e-04, minsplit = 2)
Variables actually used in tree construction:
[1] X1 X2
Root node error: 204/500 = 0.408
n= 500
```

	CP	nsplit	rel error	xerror	xstd
1	0.2941176	0	1.000000	1.00000	0.053870
2	0.1225490	1	0.705882	0.71569	0.049838
3	0.0931373	3	0.460784	0.49020	0.043844
4	0.0637255	4	0.367647	0.43627	0.041928
5	0.0122549	5	0.303922	0.34314	0.038034
6	0.0098039	7	0.279412	0.34314	0.038034
7	0.0049020	9	0.259804	0.36275	0.038923
8	0.0040107	25	0.181373	0.34804	0.038260
9	0.0036765	41	0.112745	0.39216	0.040184
10	0.0032680	49	0.083333	0.40196	0.040586
11	0.0024510	52	0.073529	0.41176	0.040980
12	0.0001000	82	0.000000	0.43137	0.041742

```
> arbre1 <- prune(arbre, cp=0.005)
> prp(arbre)
> prp(arbre1)
```



## Choix d'un arbre

Il reste à **sélectionner** un arbre dans la suite

$$T_{max} = T_0 \supset T_1 \supset \dots \supset T_M$$

## Sélection d'un arbre

### Choix d'un risque

La sélection de l'**arbre final** s'effectue en choisissant l'élément de la suite qui minimise le risque moyen  $E[R(Y, T_m(X))]$ . Par exemple,

1. l'**erreur quadratique**  $\mathbf{E}[(Y - T_m(X))^2]$  en *régression*;
2. la **probabilité d'erreur**  $\mathbf{P}(Y \neq T_m(X))$  en *discrimination binaire*.

Ce risque (inconnu) est estimé par **validation croisée**.

## Choix de l'arbre final

L'approche consiste à

1. *estimer le risque* pour chaque  $\alpha_m$ .
2. choisir le  $\alpha_m$  qui *minimise le risque estimé*  $\implies T_{\alpha_m}$ .

## Elagage/pruning - Algorithme

### Algorithme

1. Calculer la suite  $\alpha_0 = 0 < \alpha_1 < \dots < \alpha_M$  et poser

$$\beta_1 = 0, \quad \beta_2 = \sqrt{\alpha_1 \alpha_2}, \quad \beta_3 = \sqrt{\alpha_2 \alpha_3}, \quad \dots, \quad \beta_{M+1} = \infty.$$

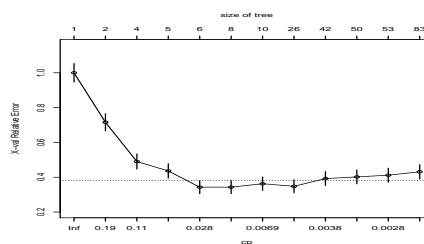
2. *Séparer les données* en  $K$  blocs  $G_1, \dots, G_k$  de taille  $k/n$ . Pour  $i = 1, \dots, k$  :
  - (a) Construire les arbres  $T_{\beta_1}, \dots, T_{\beta_{M+1}}$  sur l'ensemble des observations *privé du ième bloc*.
  - (b) En déduire pour tout  $j \in G_i$  et tout  $m \leq M+1$ ,  $\hat{Y}_j(\beta_m) = T_{\beta_m}(X_j)$ .
3. Calculer  $\mathcal{R}(m) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n R(Y_i, \hat{Y}_i(\beta_m))$  pour  $m = 1, \dots, M+1$ .
4. *Choisir*  $\alpha_{m^*}$  tel que  $\beta_{m^*+1} = \operatorname{argmin}_{m \leq M+1} \mathcal{R}(m)$ .

— Estimations  $\mathcal{R}(m) \implies$  colonne *xerror* de la fonction **printcp** :

	CP	nsplit	rel error	xerror	xstd
1	0.2941176	0	1.000000	1.00000	0.053870
2	0.1225490	1	0.705882	0.71569	0.049838
3	0.0931373	3	0.460784	0.49020	0.043844
4	0.0637255	4	0.367647	0.43627	0.041928
5	0.0122549	5	0.303922	0.34314	0.038034
6	0.0098039	7	0.279412	0.34314	0.038034
7	0.0049020	9	0.259804	0.36275	0.038923

— On peut représenter les erreurs en fonction des  $\alpha_m$  à l'aide de **plotcp**

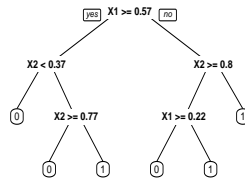
```
> plotcp(arbre3)
```



$\implies$  On choisira l'arbre à **5 coupures**.

## Tracé de l'arbre final

```
> alpha_opt <- arbre$cpstable[which.min(arbre$cpstable[, "xerror"]), "CP"]
> arbre_final <- prune(arbre, cp=alpha_opt)
> prp(arbre_final)
```



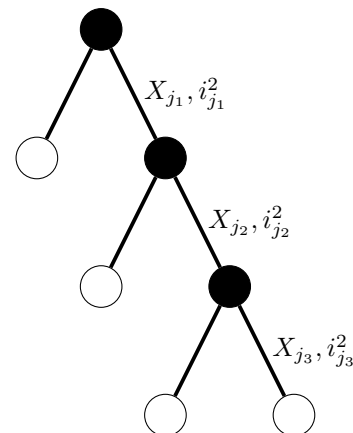
## 4 Importance des variables

- La *visualisation de l'arbre* peut donner une idée sur l'**importance des variables** dans l'algorithme.
- *Pas suffisant!* Il se peut en effet que des variables possèdent une grande importance sans pour autant apparaître explicitement dans l'arbre!
  - Difficile de **quantifier l'importance** juste en regardant l'arbre!
  - Il se peut en effet que des variables possèdent une grande importance **sans pour autant apparaître explicitement** dans l'arbre!

### Mesure d'importance d'un arbre

Basée sur le **gain d'impureté** des nœuds internes.

- Nœuds internes  $\Rightarrow N_t, t = 1, \dots, J - 1$ ;
- Variables de coupure  $\Rightarrow X_{j_t}$ ;
- Gain d'impureté  $\Rightarrow i_{j_t}^2$ .



### Mesure d'impureté de la variable $\ell$

$$\mathcal{I}_{\ell}^2(T) = \sum_{t=1}^{J-1} i_t^2 \mathbf{1}_{j_t=\ell}.$$

### Le coin R

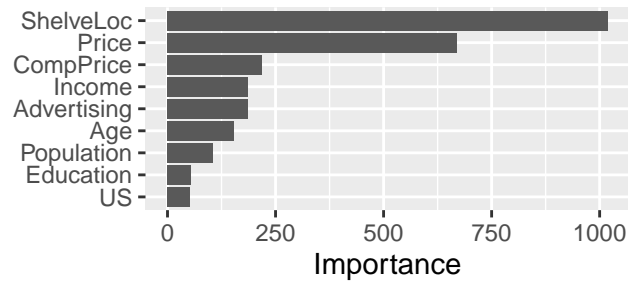
- On peut récupérer les *importances* dans la sortie de **rpart**

```

> round(tree$variable.importance)
ShelveLoc   Price  CompPrice   Income Advertising   Age  Population   Education   US
1019       669      218      186      186      153      105      55      52
  
```

- Et les visualiser avec la fonction *vip* du package **vip** :

```
> vip(tree)
```



### Règle de classification et score par arbre

— L'arbre final  $\mathcal{T}$  renvoie une *partition* de  $\mathbb{R}^p$  en  $|\mathcal{T}|$  nœuds terminaux  $\mathcal{N}_1, \dots, \mathcal{N}_{|\mathcal{T}|}$ .

— Règle de classification :

$$\hat{g}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } \sum_{i: X_i \in \mathcal{N}(x)} \mathbf{1}_{Y_i=1} \geq \sum_{i: X_i \in \mathcal{N}(x)} \mathbf{1}_{Y_i=0} \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

où  $\mathcal{N}(x)$  désigne le nœud terminal qui contient  $x$ .

— Score :

$$\hat{S}(x) = \hat{\mathbf{P}}(Y = 1 | X = x) = \frac{1}{n} \sum_{i: X_i \in \mathcal{N}(x)} \mathbf{1}_{Y_i=1}.$$

### Fonction predict

— La fonction **predict** (**predict.rpart**) permet d'estimer la *classe* ou le *score* :

```
> x_new <- data.frame(X1=0.5, X2=0.85)
> predict(arbre_final, newdata=x_new)
0 1
1 0.9 0.1
> predict(arbre_final, newdata=x_new, type="class")
1
0
Levels: 0 1
```

### Bilan

- Méthode « simple » relativement facile à mettre en œuvre.
- Fonctionne en *régression* et en *discrimination*.
- Résultats *interprétables* (à condition que l'arbre ne soit pas trop profond).
- Un *inconvenient* : méthode connue pour être *instable*, sensible à de légères perturbations de l'échantillon.
- Cet inconvenient sera un avantage pour des *agrégations bootstrap*  $\implies$  *forêts aléatoires*.

## 5 Annexe : arbres Chaid

- **CHAID** : Chi2 Automatic Interaction Detection [Kass, 1980].
- 2 étapes  $\chi^2$  dans le procédé de division d'un nœud :
  - regrouper les modalités *peu discriminantes* de chaque variable explicative  $X_j$  ;
  - choisir la *variable* à utiliser pour scinder le nœud.

## $\chi^2$ d'indépendance : rappel

- Soient  $X$  et  $Y$  deux variables aléatoires à valeurs dans  $E$  et  $F$ . On souhaite tester au niveau  $\alpha$  les hypothèses  $H_0$  : " $X$  et  $Y$  sont indépendantes" contre  $H_1$  : " $X$  et  $Y$  ne sont pas indépendantes".
- On se donne  $(E_1, \dots, E_I)$  et  $(F_1, \dots, F_J)$  deux partitions de  $E$  et  $F$ .
- On dispose de  $n$  mesures du couple  $(X, Y)$  et on désigne par  $N_{ij}$  l'effectif observé dans la classe  $E_i \times F_j$ .

	$F_1$	$\dots$	$F_j$	$\dots$	$F_J$	Total
$E_1$	$N_{11}$	$\dots$	$N_{1j}$	$\dots$	$N_{1J}$	$N_{1\bullet}$
$\vdots$						$\vdots$
$E_i$	$N_{i1}$	$\dots$	$N_{ij}$	$\dots$	$N_{iJ}$	$N_{i\bullet}$
$\vdots$						$\vdots$
$E_I$	$N_{I1}$	$\dots$	$N_{Ij}$	$\dots$	$N_{IJ}$	$N_{I\bullet}$
Total	$N_{\bullet 1}$	$\dots$	$N_{\bullet j}$	$\dots$	$N_{\bullet J}$	$n$

## Le test

### Propriété

Sous  $H_0$  la statistique

$$X_n = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \frac{\left( \frac{N_{i\bullet} N_{\bullet j}}{n} - N_{ij} \right)^2}{\frac{N_{i\bullet} N_{\bullet j}}{n}}$$

converge en loi vers la loi  $\chi^2_{(I-1)(J-1)}$ .

### Conséquence

- Au niveau  $\alpha$ , on rejettera l'hypothèse  $H_0$  si  $X_{obs}$  est supérieure au quantile d'ordre  $1-\alpha$  de la loi du  $\chi^2_{(I-1)(J-1)}$ .
- Une forte valeur de  $X_{obs}$  (ou une faible valeur de la probabilité critique) signifiera un lien fort entre les deux variables.

## Chaid : le principe

- On suppose dans un premier temps que toutes les variables explicatives  $X_j, j = 1, \dots, p$  sont qualitatives à  $M_j$  modalités.

### Division d'un nœud

1. Regroupement des modalités peu discriminantes de chaque variable  $X_j$  ;
2. Choix de la variable  $X_j$  la plus discriminante
3. Le nœud est alors divisé en un nombre de nœuds fils égal au nombre de modalités créées à l'étape 1.

## 5.1 Regroupement des modalités

1. On se place dans un nœud  $\mathcal{N}$  et on considère une variable  $X_j$  à  $M_j$  modalités ;
2. Les observations dans le nœud définissent la table de contingence suivante

	$M_1$	$\dots$	$M_j$
1			
$\vdots$			
$K$			

3.  $\forall (M_i, M_\ell) \in \{M_1, \dots, M_j\}^2$ , on calcule la statistique du  $\chi^2$  croisant  $Y$  et les modalités  $(M_i, M_\ell) \implies \chi^2(M_i, M_\ell)$  et  $p(M_i, M_\ell)$  la probabilité critique associée.

### Remarque

- 2 modalités *discriminantes*  $\implies$  dépendance *forte* dans le test avec  $Y \implies$  "Fort rejet" de  $H_0 \implies \chi^2$  *élevé* ou *pc faible*;
- Regrouper les *modalités peu discriminantes* revient donc à regrouper celles qui ont un  $\chi^2$  *faible* ou *une pc grande*.

4. On choisit la *paire de modalités* qui minimise le  $\chi^2$  :

$$(\tilde{M}_i, \tilde{M}_\ell) = \underset{(M_i, M_\ell) \in \{M_1, \dots, M_j\}^2}{\operatorname{argmin}} \chi^2(M_i, M_\ell) = \underset{(M_i, M_\ell) \in \{M_1, \dots, M_j\}^2}{\operatorname{argmax}} p(M_i, M_\ell).$$

5. Si  $p(\tilde{M}_i, \tilde{M}_\ell) > \alpha_2$  ( $\alpha_2 \in ]0, 1[$  *fixé par l'utilisateur*) alors on **regroupe les modalités  $\tilde{M}_i$  et  $\tilde{M}_\ell$**  et on retourne à l'étape 2 avec le tableau à  $M_j - 1$  modalités

	$M_1$	$\dots$	$M_j - 1$
1			
$\vdots$			
$K$			

Sinon, on stoppe les regroupements.

## Exemple

— On considère la variable *marstat* :

```
> aa <- table(USvoteS$vote3, USvoteS$marstat)
> aa
```

	married	widowed	divorced	never married
Gore	246	57	82	111
Bush	315	44	48	60

— On calcule les *probabilités critiques* pour les **6 croisements** :

```
> res <- matrix(0, nrow=4, ncol=4)
> rownames(res) <- levels(USvoteS$marstat)
> colnames(res) <- levels(USvoteS$marstat)
> for (i in 1:3)
+   for (j in (i+1):4)
+     res[i,j] <- chisq.test(aa[,c(i,j)])$p.value
+
+
> res
```

	married	widowed	divorced	never married
married	0	0.0194	7.64e-05	1.41e-06
widowed	0	0.0000	3.06e-01	1.65e-01
divorced	0	0.0000	0.00e+00	7.42e-01
never married	0	0.0000	0.00e+00	0.00e+00

### Exemple de regroupement

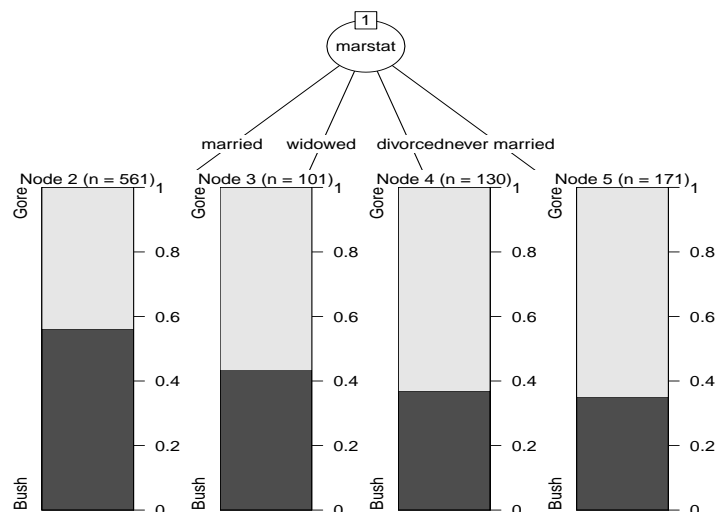
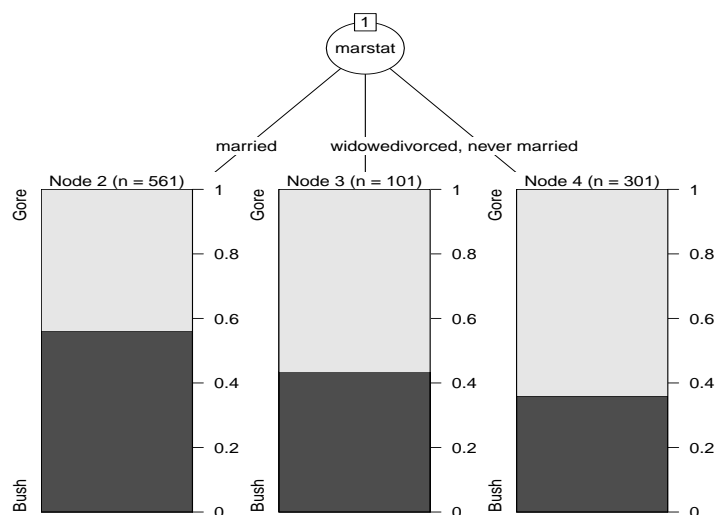
Les modalités **divorced** et **never married** sont regroupées (si  $\alpha_2 < 0.742$ ).

— En effet

```
> ctrl <- chaid_control(minsplit = 20, alpha2=0.74)
> a1 <- chaid(vote3~marstat, data=USvoteS, control = ctrl)
> plot(a1)
```

```
> ctrl <- chaid_control(minsplit = 20, alpha2=0.75)
> a2 <- chaid(vote3~marstat, data=USvoteS, control = ctrl)
> plot(a2)
```





## Variables continues et ordinales

- Variables **ordinales** : le traitement est *identique*. Seules les *modalités contiguës* peuvent être regroupées.
- Variables **continues** : traitées comme des variables ordinales. Penser à utiliser *as.ordered* sur **R**.

## 5.2 Division d'un nœud

### Un autre $\chi^2$ pour choisir la variable

- La phase *regroupement* effectuée, il faut choisir une variable parmi les  $p$  variables regroupées pour *diviser* le nœud.

- *Idée* : faire un  $\chi^2$  pour chaque variable :

	$(X_1, M_1)$	...	$(X_1, M_{1j})$	$(X_2, M_1)$	...	$(X_2, M_{2j})$	...
1							
$\vdots$							
$K$							

- $\implies p$  probabilités critiques  $p(X_1), \dots, p(X_p)$  et
- $X_j$  discriminante  $\implies$  rejet de  $H_0 \implies p(X_j)$  petite.
- On choisit la variable  $j$  qui possède la plus petite probabilité critique.

### Correction de Bonferroni

- Tendance à *favoriser* les variables ayant subi le *plus de regroupements* (erreur de type 1).
- Pour rééquilibrer, les probabilités critiques sont multipliées par le **coefficient de Bonferroni** :

$$p'(X_j) = b_j p(X_j)$$

où  $b_j$  correspond au nombre de manières les regrouper les  $M_j$  modalités initiales de  $X_j$  en  $\tilde{M}_j$  modalités finales.

- Variable *qualitative* et **ordinaire** :

$$b_j = \sum_{i=0}^{\tilde{M}_j-1} (-1)^i \frac{(\tilde{M}_j - i)^{M_j}}{i! (\tilde{M}_j - i)!} \quad b_j = \binom{M_j - 1}{\tilde{M}_j - 1}.$$

- On choisira la variable  $j^*$  qui *minimise*  $p'(X_j)$ ...
- à condition que  $p'(X_j)$  soit *plus petit qu'un certain seuil*  $\alpha_4$  fixé par l'utilisateur.
- Le nœud sera scindé en *autant de groupes* que  $X_j$  possède de *modalités* (après la phase de regroupement).

### Critère d'arrêt

Un nœud ne sera pas divisé si :

- $p'(X_j) > \alpha_4$  pour *tout*  $j = 1, \dots, p$ .
- le nœud est *pur* ou quasiment pur.
- le nœud contient *trop peu d'observations*...

### Remarque

Sur **R**, on pourra regarder la fonction **chaid.control** :

```
chaid_control(alpha2 = 0.05, alpha3 = -1, alpha4 = 0.05,
              minsplit = 20, minbucket = 7, minprob = 0.01,
              stump = FALSE, maxheight = -1)
```

## 5.3 Choix des paramètres

- En plus des paramètres associés au critère d'arrêt, *deux paramètres sont à calibrer* pour construire l'arbre : les niveaux  $\alpha_2$  et  $\alpha_4$ .
- Il en existe un troisième ( $\alpha_3$ ) qui concerne la remise en cause des *regroupements des modalités*.

### Choix de $\alpha_4$

Degrés d'**exigence pour couper un nœud** :

- **petit** : très exigeant  $\implies$  arbres peu profonds (beaucoup de biais et peu de variance) ;
- **grand** : peu exigeant  $\implies$  arbres profonds (beaucoup de variance et peu de biais).

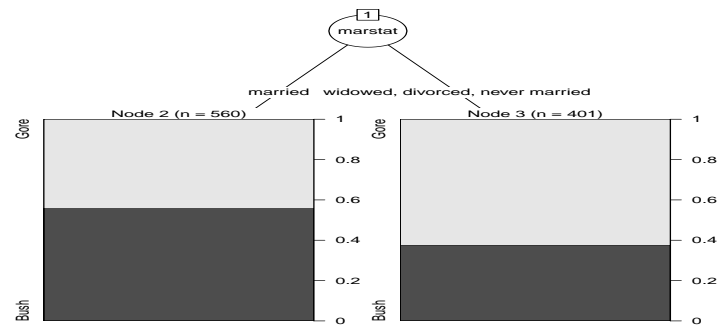
### Choix de $\alpha_2$

Degrés d'**exigence pour regrouper des modalités** :

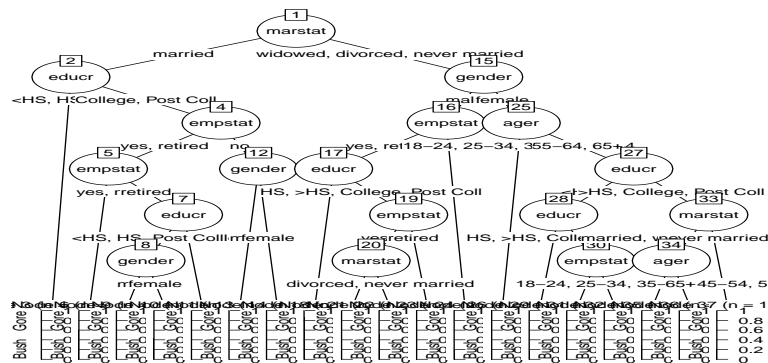
- **petit** : peu exigeant  $\implies$  beaucoup de regroupements (on se rapproche des arbres binaires) ;
- **grand** : très exigeant  $\implies$  peu de regroupements.

### Illustration $\alpha_4$

```
> ctrl <- chaid_control(minsplit = 20,alpha4=0.0005)
> a1 <- chaid(vote3~.,data=USvoteS,control=ctrl)
> plot(a1)
```

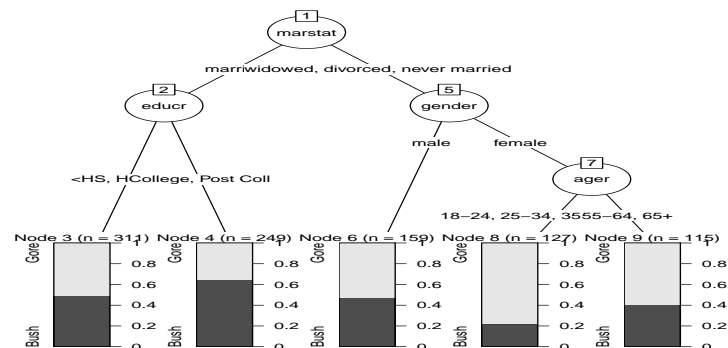


```
> ctrl <- chaid_control(minsplit = 20,alpha4=0.25)
> a2 <- chaid(vote3~.,data=USvoteS,control=ctrl)
> plot(a2)
```

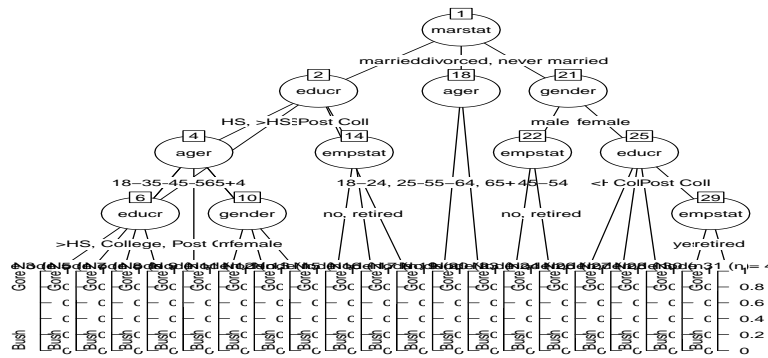


## Illustration $\alpha_2$

```
> ctrl <- chaid_control(minsplit = 20,alpha2=0.005)
> a3 <- chaid(vote3~.,data=USvoteS,control=ctrl)
> plot(a3)
```



```
> ctrl <- chaid_control(minsplit = 20,alpha2=0.5)
> a4 <- chaid(vote3~.,data=USvoteS,control=ctrl)
> plot(a4)
```



## En pratique...

- L'influence de ces deux paramètres est bien entendu *conjointe*.
- Il n'est pas facile de les calibrer simultanément.
- *Approche classique* : évaluer les **performances** (erreur de classification AUC...) pour plusieurs valeurs de  $(\alpha_2, \alpha_4)$  sur un **échantillon test** ou par **validation croisée**.

## Exemple

- On veut expliquer avec un *arbre CHAID* la variable **chd** par les autres variables du jeu de données *SAheart*.

```
> donnees <- SAheart
> donnees$chd <- as.factor(donnees$chd)
> for (i in c(1:4,6:9)){donnees[,i] <- as.ordered(donnees[,i])}
```

- On va séparer l'échantillon en 2 et *estimer l'erreur de classification* sur une grille de valeur de  $\alpha_2$  et  $\alpha_4$  :

```
> alpha2 <- seq(0.01,0.35,by=0.05)
> alpha4 <- seq(0.01,0.35,by=0.05)
> gr.alpha <- expand.grid(alpha2,alpha4)
> names(gr.alpha) <- c("alpha2","alpha4")
> gr.alpha$perf <- 0
> set.seed(1234)
> perm <- sample(nrow(SAheart))
> dapp <- donnees[perm[1:300],]
> dtest <- donnees[~perm[1:300],]
```

- On estime *l'erreur de classification* sur les données test :

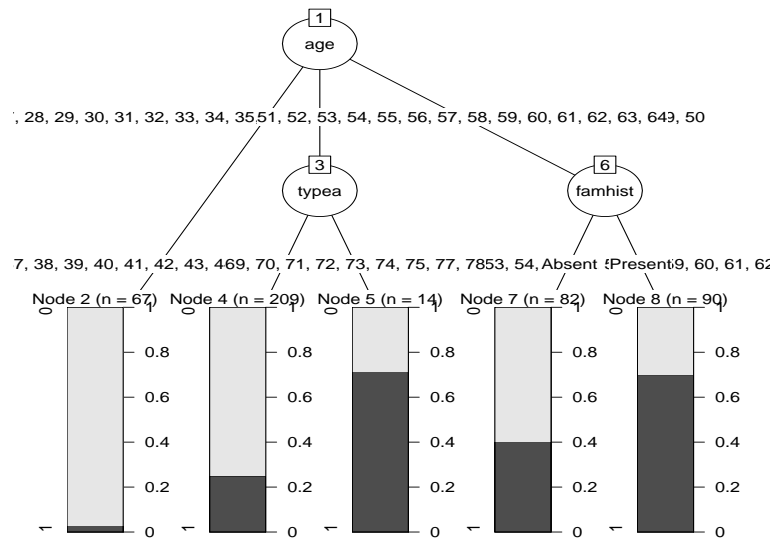
```
> for (i in 1:nrow(gr.alpha)){
>   ctrl <- chaid_control(alpha2=gr.alpha[i,1],alpha4=gr.alpha[i,2])
>   a <- chaid(chd~.,data=dapp,control=ctrl)
>   prev <- predict(a,newdata = dtest)
>   gr.alpha$perf[i] <- mean(prev!=dtest$chd)
> }
```

- On récupère les valeurs de  $\alpha_2$  et  $\alpha_4$  qui minimisent l'erreur estimée :

```
> alpha_opt <- gr.alpha[which.min(gr.alpha$perf),]
> alpha_opt
  alpha2 alpha4      perf
1  0.01  0.01 0.2716049
```

- On peut *tracer l'arbre sélectionné* :

```
> ctrl <- chaid_control(alpha2=alpha_opt[1],alpha4=alpha_opt[2])
> arbre_final <- chaid(chd~.,data=donnees,control=ctrl)
> plot(arbre_final)
```



## Avec Caret

- On peut faire la même chose avec *caret* (en plus efficace) :

```
> grille <- gr.alpha[,1:2]
> grille$alpha3 <- -1
> library(doMC)
> registerDoMC(cores = 3)
> bb <- train(donnees[,-10], donnees$chd, method="chaid",
+           tuneGrid=grille, trControl=ctrl1, metric="Accuracy")
> bb
CHi-squared Automated Interaction Detection

462 samples
 9 predictor
 2 classes: '0', '1'

No pre-processing
Resampling: Repeated Train/Test Splits Estimated (1 reps, 75%)
Summary of sample sizes: 300
Resampling results across tuning parameters:
```

alpha2	alpha4	Accuracy	Kappa
0.01	0.01	0.7283951	0.3847747
0.01	0.06	0.7283951	0.3847747
0.01	0.11	0.7283951	0.3847747
0.01	0.16	0.7283951	0.3847747
0.01	0.21	0.7283951	0.3847747
0.01	0.26	0.6851852	0.2528486
0.01	0.31	0.6851852	0.2528486
0.06	0.01	0.6851852	0.2528486
0.06	0.06	0.6851852	0.2528486
0.06	0.11	0.6851852	0.2528486
0.06	0.16	0.6851852	0.2528486
0.06	0.21	0.6851852	0.2528486
0.06	0.26	0.6728395	0.3284843
0.06	0.31	0.6728395	0.2302313
0.11	0.01	0.6419753	0.2394366
0.11	0.06	0.6419753	0.2839506
0.11	0.11	0.6419753	0.2839506
0.11	0.16	0.6419753	0.2839506
0.11	0.21	0.6419753	0.2839506
0.11	0.26	0.6296296	0.2646391
0.11	0.31	0.6419753	0.2839506
0.16	0.01	0.6419753	0.2394366
0.16	0.06	0.6419753	0.2839506
0.16	0.11	0.6419753	0.2839506
0.16	0.16	0.6419753	0.2839506
0.16	0.21	0.6419753	0.2839506
0.16	0.26	0.6296296	0.2646391
0.16	0.31	0.6419753	0.2839506
0.21	0.01	0.6419753	0.2394366
0.21	0.06	0.6419753	0.2394366
0.21	0.11	0.6419753	0.2394366
0.21	0.16	0.6419753	0.2394366
0.21	0.21	0.6419753	0.2394366

0.21	0.26	0.6419753	0.2394366
0.21	0.31	0.6419753	0.2394366
0.26	0.01	0.6419753	0.2394366
0.26	0.06	0.6419753	0.2394366
0.26	0.11	0.6419753	0.2394366
0.26	0.16	0.6419753	0.2394366
0.26	0.21	0.6419753	0.2394366
0.26	0.26	0.6419753	0.2394366
0.26	0.31	0.6419753	0.2394366
0.31	0.01	0.6419753	0.2394366
0.31	0.06	0.6419753	0.2394366
0.31	0.11	0.6419753	0.2394366
0.31	0.16	0.6419753	0.2394366
0.31	0.21	0.6419753	0.2394366
0.31	0.26	0.6419753	0.2394366
0.31	0.31	0.6419753	0.2394366

Tuning parameter 'alpha3' was held constant at a value of -1  
Accuracy was used to select the optimal model using the largest value.  
The final values used for the model were alpha2 = 0.01, alpha3 = -1  
and alpha4 = 0.21.

## Quatrième partie

# Bagging et forêts aléatoires

### Cadre

- Idem que précédemment, on cherche à *expliquer* une variable  $Y$  par  $d$  variables explicatives  $X_1, \dots, X_d$ .
- Pour simplifier on se place en *régression* :  $Y$  est à valeurs dans  $\mathbb{R}$  mais tout ce qui va être fait s'étant directement à la *classification binaire ou multiclassées*.
- *Notations* :
  - $(X, Y)$  un couple aléatoire à valeurs dans  $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$ .
  - $\mathcal{D}_n = (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$  un  $n$ -échantillon i.i.d. de même loi que  $(X, Y)$ .

## 1 Bagging

- Le *bagging* désigne un ensemble de méthodes introduit par Léo Breiman [Breiman, 1996].
- *Bagging* : vient de la contraction de **B**ootstrap **A**ggregating.
- *Idée* : plutôt que de construire un seul estimateur, en construire un grand nombre (sur des échantillons *bootstrap*) et les *agréger*.

### Pourquoi agréger ?

- On se place dans le *modèle de régression*

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

- On note

$$\hat{m}_B(x) = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B m_k(x)$$

un estimateur de  $m$  obtenu en *agrégeant*  $B$  estimateurs  $m_1, \dots, m_B$ .

- *Rappels* :  $\hat{m}_B(x) = \hat{m}_B(x; (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n))$  et  $m_k(x) = m_k(x; (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n))$  sont des *variables aléatoires*.
- On peut *mesurer l'intérêt d'agréger* en comparant les performances de  $\hat{m}_B(x)$  à celles des  $m_k(x), k = 1, \dots, B$  (en comparant, par exemple, le *biais* et la *variance* de ces estimateurs).

### Biais et variance

- *Hypothèse* : les variables aléatoires  $m_1, \dots, m_B$  sont i.i.d.

- *Biais* :

$$\mathbf{E}[\hat{m}_B(x)] = \mathbf{E}[m_k(x)].$$

#### *Conclusion*

Agréger ne modifie *pas* le biais.

- *Variance* :

$$\mathbf{V}[\hat{m}_B(x)] = \frac{1}{B} \mathbf{V}[m_k(x)].$$

#### *Conclusion*

Agréger *tue* la variance.

- Les conclusions précédentes sont vraies sous l'hypothèse que les variables aléatoires  $m_1, \dots, m_B$  sont **i.i.d.**
- Les estimateurs  $m_1, \dots, m_B$  étant construits sur le même échantillon, l'hypothèse d'indépendance n'est clairement pas raisonnable !

### Idée

"Atténuer" la dépendance entre les estimateurs  $m_k, k = 1, \dots, B$  en introduisant de **nouvelles sources d'aléa**.

### Idée : échantillons bootstrap

- Echantillon *initial* :

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
---	---	---	---	---	---	---	---	---	----

- Echantillons *bootstrap* :

3	4	6	10	3	9	10	7	7	1	$m_1$
2	8	6	2	10	10	2	9	5	6	$m_2$
2	9	4	4	7	7	2	3	6	7	$m_3$
6	1	3	3	9	3	8	10	10	1	$m_4$
3	7	10	3	2	8	6	9	10	2	$m_5$
	$\vdots$								$\vdots$	
7	10	3	4	9	10	10	8	6	1	$m_B$

- A la fin, on *agrège* :

$$\hat{m}_B(x) = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B m_k(x).$$

### Bagging

- Les estimateurs  $m_k$  ne vont pas être construits sur l'échantillon  $\mathcal{D}_n = (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ , mais sur des *échantillons bootstrap* de  $\mathcal{D}_n$ .

### Bagging

#### Entrées :

- $x \in \mathbb{R}^d$  l'observation à prévoir ;  $\mathcal{D}_n$  l'échantillon
- un régresseur (arbre CART, 1 plus proche voisin...)
- $B$  le nombre d'estimateurs que l'on agrège.

Pour  $k = 1, \dots, B$  :

1. Tirer un échantillon *bootstrap* dans  $\mathcal{D}_n$  ;
2. Ajuster le régresseur sur cet échantillon bootstrap :  $m_k(x)$ .

**Sortie** : l'estimateur  $\hat{m}_B(x) = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B m_k(x)$ .



## Tirage de l'échantillon bootstrap

- Les tirages bootstrap sont représentés par  $B$  variables aléatoires  $\theta_k, k = 1, \dots, B$ .
- Les tirages bootstrap sont généralement effectués selon la même loi et de façon indépendante :  $\theta_1, \dots, \theta_B$  sont *i.i.d.* de même loi que  $\theta$ .
- 2 techniques sont généralement utilisées :
  1. tirage de  $n$  observations avec remise ;
  2. tirage de  $\ell < n$  observation sans remise.

### Conséquence

Les estimateurs agrégés contiennent 2 sources d'aléa (échantillon et tirage bootstrap) :

$$m_k(x) = m(x, \theta_k, \mathcal{D}_n).$$

## Choix du nombre d'itérations

- Deux paramètres sont à choisir : le nombre d'itérations  $B$  et le régresseur.
- On a d'après la loi des grands nombres

$$\begin{aligned} \lim_{B \rightarrow \infty} \hat{m}_B(x) &= \lim_{B \rightarrow \infty} \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B m_k(x) = \lim_{B \rightarrow \infty} \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B m(x, \theta_k, \mathcal{D}_n) \\ &= \mathbf{E}_\theta[m(x, \theta, \mathcal{D}_n)] = \bar{m}(x, \mathcal{D}_n) \quad p.s|\mathcal{D}_n. \end{aligned}$$

- Lorsque  $B$  est grand,  $\hat{m}_B$  se "stabilise" vers l'estimateur *bagging*  $\bar{m}(x, \mathcal{D}_n)$ .

### Conséquence importante

Le nombre d'itérations  $B$  n'est pas un paramètre à calibrer, il est conseillé de le prendre le plus grand possible en fonction du temps de calcul.

## Choix du régresseur

### Propriété : biais et variance

On a

$$\mathbf{E}[\hat{m}_B(x)] = \mathbf{E}[m_k(x, \theta_k, \mathcal{D}_n)]$$

et

$$\mathbf{V}[\hat{m}_B(x)] = \rho(x) \mathbf{V}[m(x, \theta_k, \mathcal{D}_n)] + \frac{1 - \rho(x)}{B} \mathbf{V}[m(x, \theta_k, \mathcal{D}_n)]$$

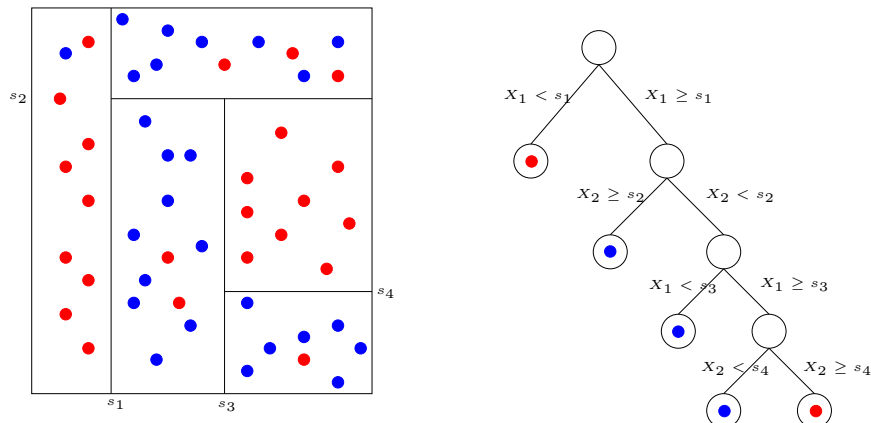
où  $\rho(x) = \text{corr}(m(x, \theta_k, \mathcal{D}_n), m(x, \theta_{k'}, \mathcal{D}_n))$  pour  $k \neq k'$ .

### Conséquence

- Bagging ne modifie pas le biais.
- Pour  $B$  grand,  $\mathbf{V}[\hat{m}_B(x)] \approx \rho(x) \mathbf{V}[m_k(x, \theta_k(\mathcal{D}_n))] \implies$  la variance diminue d'autant plus que la corrélation entre les prédicteurs diminue.
- Il est donc nécessaire d'agréger des estimateurs sensibles à de légères perturbations de l'échantillon.
- Les arbres sont connus pour posséder de telles propriétés.

## 2 Forêts aléatoires

### Rappels sur les arbres



### Paramètre à calibrer

Profondeur de l'arbre :

- **petite** : biais  $\nearrow$ , variance  $\searrow$
- **grande** : biais  $\searrow$ , variance  $\nearrow$

### Définition

- Comme son nom l'indique, une *forêt aléatoire* est définie à partir d'un ensemble d'arbres.

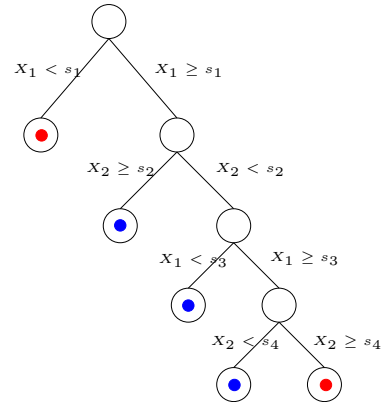
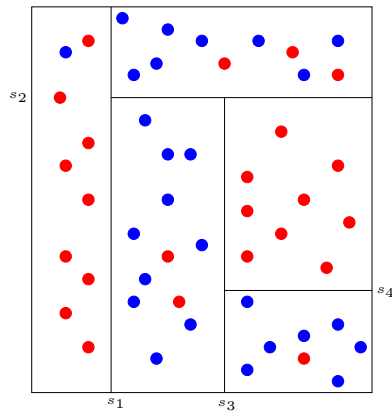
### Définition

Soit  $T_k(x), k = 1, \dots, B$  des prédicteurs par arbre ( $T_k : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ ). Le prédicteur des *forêts aléatoires* est obtenu par agrégation de cette collection d'arbres :

$$\hat{T}_B(x) = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B T_k(x).$$

### Forêts aléatoires

- Forêts aléatoires = *collection d'arbres*.
- Les forêts aléatoires les plus utilisées sont (de loin) celles proposées par *Léo Breiman* (au début des années 2000).
- Elles consistent à *agréger* des arbres construits sur des *échantillons bootstrap*.
- On pourra trouver de la doc à l'url <http://www.stat.berkeley.edu/~breiman/RandomForests/> et consulter la thèse de Robin Genuer [Genuer, 2010].



### Arbres pour forêt

- Breiman propose de sélectionner la "meilleure" variable dans un ensemble composé **uniquement de  $m$  variables choisies aléatoirement parmi les  $d$  variables initiales**.
- Objectif : **diminuer la corrélation** entre les arbres que l'on agrège.

### Algorithme : randomforest

#### 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.

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  $T(\cdot, \theta_k, \mathcal{D}_n)$  l'arbre construit.

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

### Commentaires

- Si on est en discrimination ( $Y$  qualitative), l'étape d'agrégation consiste à faire *voter les arbres à la majorité*.
- Il y a deux sources d'aléa présentes dans  $\theta_k$  : le **tirage bootstrap** et **les  $m$  variables sélectionnées** à chaque étape de la construction de l'arbre.
- Méthode *simple à mettre en oeuvre* et déjà *implémentée* sur la plupart des logiciels statistiques (sur R, il suffit de lancer la fonction *randomForest* du package **randomForest**).
- Estimateur connu pour fournir des *estimations précises* sur des données complexes (beaucoup de variables, données manquantes...).
- Estimateur *peu sensible* au choix de ses paramètres ( $B, n_{max}, m...$ )

## Choix des paramètres

- $B$  : réglé... *le plus grand possible*.

### Intérêt du bagging (rappel)

Diminuer la variance des estimateurs qu'on agrège :

$$\mathbf{V}[\hat{T}_B(x)] = \rho(x)\mathbf{V}[T(x, \theta_k, \mathcal{D}_n)] + \frac{1 - \rho(x)}{B}\mathbf{V}[T(x, \theta_k, \mathcal{D}_n)]$$

### Conséquence

- Le biais n'étant pas amélioré par "l'agrégation bagging", il est recommandé d'agréger des estimateurs qui possèdent un biais faible (*contrairement au boosting*).
- On choisira donc des arbres "*profonds*", c'est-à-dire avec **peu d'observations dans les nœuds terminaux**.
- Par défaut dans **randomForest**,  $n_{max} = 5$  en régression et 1 en classification.

## Choix de $m$

- Il est en *relation avec la corrélation* entre les arbres  $\rho(x)$ .
- Ce paramètre a une (légère) influence sur le compromis biais/variance de la forêt.
- $m \searrow$ 
  1. tendance à se rapprocher d'un *choix "aléatoire"* des variables de découpe des arbres  $\implies$  les arbres sont de plus en plus différents  $\implies \rho(x) \searrow \implies$  **la variance de la forêt diminue**.
  2. mais... le biais des arbres  $\nearrow \implies$  les **biais de la forêt**  $\nearrow$ .
- Inversement lorsque  $m \nearrow$ .

### Conclusion

- Il est recommandé de comparer les performances de la forêt pour **plusieurs valeurs de  $m$** .
- Par défaut  $m = d/3$  en régression et  $\sqrt{d}$  en classification.

## Application sur les données spam

```
> library(randomForest)
> foret1 <- randomForest(type~.,data=spam)
> foret1

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

      OOB estimate of  error rate: 5.26%
Confusion matrix:
  0   1 class.error
0 1352  42  0.03012912
1   79 827  0.08719647
```

## Mesure de performance

- Comme pour les autres classifieurs et régresseurs il convient de définir des critères qui permettent de *mesurer la performance des forêts aléatoires*.
- **Exemples :**
  - Erreur de prédiction :  $\mathbf{E}[(Y - \hat{T}_B(X))^2]$  en régression ;
  - Probabilité d'erreur :  $\mathbf{P}(Y \neq \hat{T}_B(X))$  en classification.
- Comme pour les autres méthodes, ces critères peuvent être évalués par *apprentissage/validation* ou *validation croisée*.
- La phase *bootstrap* des algorithmes bagging permet de définir une nouvelle méthode d'estimation de ces critères : méthode **OOB (Out Of Bag)**.

## Erreur Out Of Bag

- Pour chaque observation  $(X_i, Y_i)$  de  $\mathcal{D}_n$ , on désigne par  $\mathcal{I}_B$  l'ensemble des arbres de la forêt qui *ne contiennent pas cette observation* dans leur échantillon bootstrap.
- La prévision de  $Y$  au point  $X_i$  se fait selon

$$\hat{Y}_i = \frac{1}{|\mathcal{I}_B|} \sum_{k \in \mathcal{I}_B} T(X_i, \theta_k, \mathcal{D}_n).$$

## Estimateurs Out Of Bag

- L'**erreur de prédiction** est estimée par  $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - Y_i)^2$ .
- La **probabilité d'erreur** est estimée par  $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{\hat{Y}_i \neq Y_i}$ .

## Exemple

3	4	6	10	3	9	10	7	7	1	$m_1$
2	8	6	2	10	10	2	9	5	6	$m_2$
2	9	4	4	7	7	2	3	6	7	$m_3$
6	1	3	3	9	3	8	10	10	1	$m_4$
3	7	10	3	2	8	6	9	10	2	$m_5$
7	10	3	4	9	10	10	8	6	1	$m_6$

- Les échantillons 2, 3 et 5 *ne contiennent pas* la première observation, donc

$$\hat{Y}_1 = \frac{1}{3}(m_2(X_1) + m_3(X_1) + m_5(X_1)).$$

- On fait de même pour *toutes les observations*  $\Rightarrow \hat{Y}_2, \dots, \hat{Y}_n$ .
- On **estime l'erreur** selon

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - Y_i)^2.$$

## Exemple

- On construit la forêt avec  $m = 1$  :

```
> foret2 <- randomForest(type~.,data=spam,mtry=1)
> foret2

Call:
randomForest(formula = type ~ ., data = spam, mtry = 1)
```

```

Type of random forest: classification
Number of trees: 500
No. of variables tried at each split: 1

OOB estimate of error rate: 8.04%
Confusion matrix:
  0  1 class.error
0 1367 27 0.01936872
1 158 748 0.17439294

```

## Conclusion

L'erreur OOB est de 8.04%, elle est de 5.26% lorsque  $m = 7$ .

## Importance des variables

- Un des reproches souvent fait aux forêts est l'aspect *boîte noire* et *manque d'interprétabilité* par rapport aux modèles paramétriques tels que le modèle logistique.
- Il existe plusieurs *indicateurs* qui permettent de mesurer l'*importance des variables* présentes dans le modèle, notamment
  - **Mean decrease accuracy** : comme l'erreur OOB, ce critère est basé sur le fait que toutes les observations *ne sont pas utilisées* pour construire les arbres de la forêt.
  - **Mean decrease in node impurity** : basé sur la mesure d'importance des variables d'un arbre.

## Mean decrease in node impurity

- Forêt :  $\hat{T}_B(x) = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B T_k(x)$ .
- $\mathcal{I}_\ell^2(T_k)$  **importance de la variable**  $X_\ell$  pour l'arbre  $T_k$  définie dans le slide ??.
- L'importance de  $X_\ell$  pour la forêt  $\hat{T}_B$  est la *moyenne des importances* de tous les arbres :

$$\mathcal{I}_{\ell, \text{MDI}}^2 = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B \mathcal{I}_\ell^2(T_k).$$

## Mean decrease accuracy

- Soit  $OOB_k$  l'échantillon *Out Of Bag* associé au  $k^{\text{eme}}$  arbre : il contient les observations qui **ne sont pas** dans le  $k^{\text{eme}}$  échantillon bootstrap.
- Soit  $E_{OOB_k}$  l'erreur de prédiction de l'arbre  $k$  mesurée sur cet échantillon :

$$E_{OOB_k} = \frac{1}{|OOB_k|} \sum_{i \in OOB_k} (T(X_i, \theta_k, \mathcal{D}_n) - Y_i)^2.$$

- Soit  $OOB_k^\ell$  l'échantillon  $OOB_k$  dans lequel on a *perturbé aléatoirement* les valeurs de la variable  $\ell$  et  $E_{OOB_k^\ell}$  l'erreur de prédiction de l'arbre  $k$  mesurée sur cet échantillon :

$$E_{OOB_k}^\ell = \frac{1}{|OOB_k^\ell|} \sum_{i \in OOB_k^\ell} (T(X_i^\ell, \theta_k, \mathcal{D}_n) - Y_i)^2,$$

## Idée

- Si la **variable  $\ell$  est importante** alors sa permutation dans les échantillons OOB doit **affecter les erreurs de prévisions**.
- $\Rightarrow E_{OOB_k}^\ell$  doit être (beaucoup) plus grand que  $E_{OOB_k}$ .

## Définition

L'importance **Mean decrease accuracy** de la variable  $\ell$  est définie par :

$$\mathcal{I}_{\ell, \text{MDA}}^2 = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B (E_{OOB_k}^{\ell} - E_{OOB_k}).$$

## Exemple

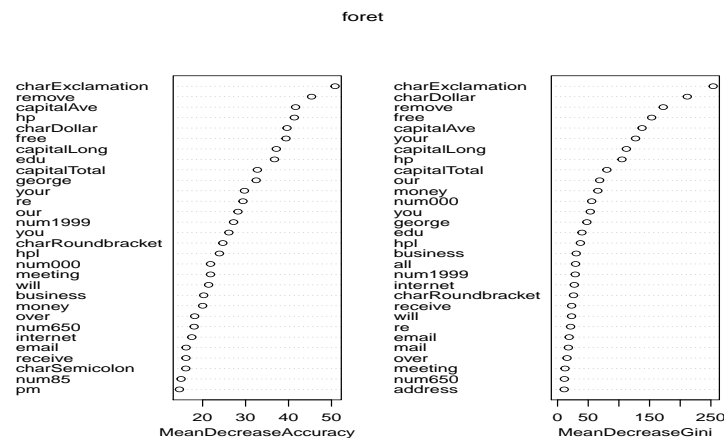
- L'importance s'obtient facilement avec la fonction **importance**

```
> foret <- randomForest(type=".", data=spam, importance=TRUE)
> head(importance(foret))
```

	nonspam	spam	MeanDecreaseAccuracy	MeanDecreaseGini
make	4.668076	8.9121105	9.579412	7.572514
address	9.372921	9.5813681	13.002158	10.886620
all	6.160720	13.6101302	12.846411	29.437015
num3d	6.757530	0.7771223	5.709875	2.075964
our	23.485217	24.4193562	28.223370	68.661351
over	14.224997	13.3619582	18.152737	15.490811

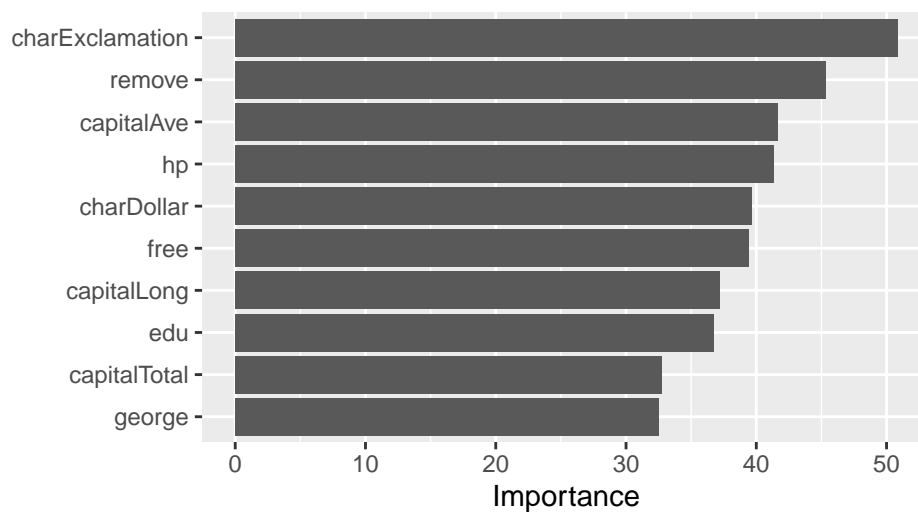
On peut visualiser les *importances* avec **varImpPlot**

```
> varImpPlot(foret)
```



Ou avec le package **vip**

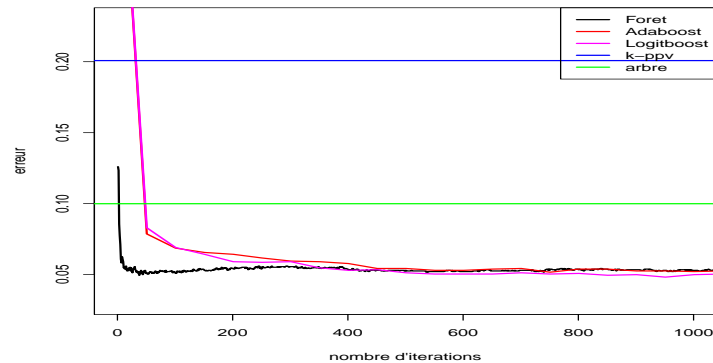
```
> vip(foret)
```



## Comparaison de méthodes

- On compare les performances du boosting (Adaboost et Logitboost), des forêts aléatoires, d'un arbre de classification ainsi que la méthode des  $k$ -ppv sur les données *spam*.
- Pour ce faire, on ajuste les différents modèles sur un échantillon d'apprentissage de taille 2300 et on compare les performances de chaque méthode en estimant la probabilité d'erreur par l'erreur empirique calculée sur l'échantillon test de taille 2301 :

$$L_n(\hat{g}) = \frac{1}{n_{test}} \sum_{i \in \mathcal{D}_{test}} \mathbf{1}_{\hat{g}(X_i) \neq Y_i}.$$



Méthode	Erreur
Forêt	0.050
Ada	0.052
Logit	0.048
$k$ -ppv	0.200
arbre	0.100

## Références

- [Breiman, 1996] Breiman, L. (1996). Bagging predictors. *Machine Learning*, 26(2) :123–140.
- [Breiman et al., 1984] Breiman, L., Friedman, J., Olshen, R., and Stone, C. (1984). *Classification and regression trees*. Wadsworth & Brooks.
- [Cléménçon et al., 2008] Cléménçon, S., Lugosi, G., and Vayatis, N. (2008). Ranking and empirical minimization of u-statistics. *The Annals of Statistics*, 36(2) :844–874.
- [Friedman, 1989] Friedman, J. (1989). Regularized discriminant analysis. *Journal of the American Statistical Association*, 84 :165–175.
- [Genuer, 2010] Genuer, R. (2010). *Forêts aléatoires : aspects théoriques, sélection de variables et applications*. PhD thesis, Université Paris XI.
- [Hastie et al., 2009] Hastie, T., Tibshirani, R., and Friedman, J. (2009). *The Elements of Statistical Learning : Data Mining, Inference, and Prediction*. Springer, second edition.
- [Kass, 1980] Kass, G. (1980). An exploratory technique for investigating large quantities of categorical data. *Applied Statistics*, 29(2) :119–127.
- [Saporta, 2011] Saporta, G. (2011). *Probabilités, analyse des données et statistique*. Tecnip, 3ème edition.