Rapport TP2 Arbres

Mathieu Le Séac'h

Classification avec les arbres

```
import os
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns
import graphviz
from matplotlib import rc

from sklearn import tree, datasets, model_selection

from itertools import product
from functools import partial
from collections import defaultdict

from lib.tp_arbres_source import (rand_gauss, rand_bi_gauss, rand_tri_gauss,
                                  rand_checkers, rand_clown,
                                  plot_2d, frontiere)
```

Q1)

Le principe d'un arbre de régression est de créer un arbre de décision à partir du partitionnement de nos données d'apprentissage en plusieurs clusters. Ici un cluster désigne une partie des données d'entrainement dont tous les éléments suivent le même chemin de décisions. Si on dispose d'une fonction de perte l, on va vouloir que la prédiction d'un chemin de décision minimise la perte moyenne avec les données du cluster associé au chemin. On note la prédiction du chemin associé au cluster C, $\hat{C}$ et on a :

$$\hat{C} = \arg\min_{a} \frac{1}{|C|} \sum_{c \in C} l(c, a)$$

Par exemple pour la perte absolue ($l(x,y) := |x-y|$), la prédiction d'un chemin de décision sera la médiane du cluster associé et pour la perte quadratique ($l(x,y) := (x-y)^2$), la prédiction sera le barycentre. À partir de là on peut ensuite définir la mesure d'homogénéité $H_l(C)$ comme étant la moyenne des pertes d'un cluster C par rapport à sa prédiction $\hat{C}$, c'est-à-dire :

$$H(C) := \frac{1}{|C|}\sum_{c\in C} l(c,\hat{C})$$

$$= \min_a \frac{1}{|C|}\sum_{c\in C} l(c,a)$$

En procédant ainsi, à chaque découpage, on va prendre le découpage qui va minimiser la perte moyenne du cluster qu'on découpe. En effet avec $C = C_1 \cup C_2$, on a :

$$\frac{|C_1|}{|C|}H(C_1) + \frac{|C_2|}{|C|}H(C_2) = \frac{1}{|C|}\left(\sum_{c\in C_1} l(c,\hat{C_1}) + \sum_{c\in C_2} l(c,\hat{C_2})\right)$$

C'est bien la perte moyenne si on accepte de découper C en C_1 et C_2, et vu qu'on cherche le découpage C_1, C_2 qui minimise l'expression ci-dessus, on cherche bien le découpage qui va minimiser la perte moyenne de notre arbre de régression sur C.

Par exemple, pour la perte absolue, la prédiction d'un chemin est une médiane du cluster associé et la mesure d'homogénéité du cluster est la somme des distances de ses éléments à cette médiane (peu importe la médiane le résultat est le même). Dans le cas multivarié on prend la médiane pour chaque variable à prédire. Ça correspond au critère `"absolute_error"` de la librairie scikit-learn.

De même pour la perte quadratique, la prédiction d'un chemin est le barycentre du cluster associé et la mesure d'homogénéité est la somme des distances au carré de ses éléments à son barycentre, ce qui correspond également à la variance empirique biaisée dans le cas où Y est univariée (et à l'inertie de Y dans le cas multivariée), et la prédiction d'une feuille est son barycentre. Ça correspond au critère `"squared_error"` de la librairie scikit-learn.

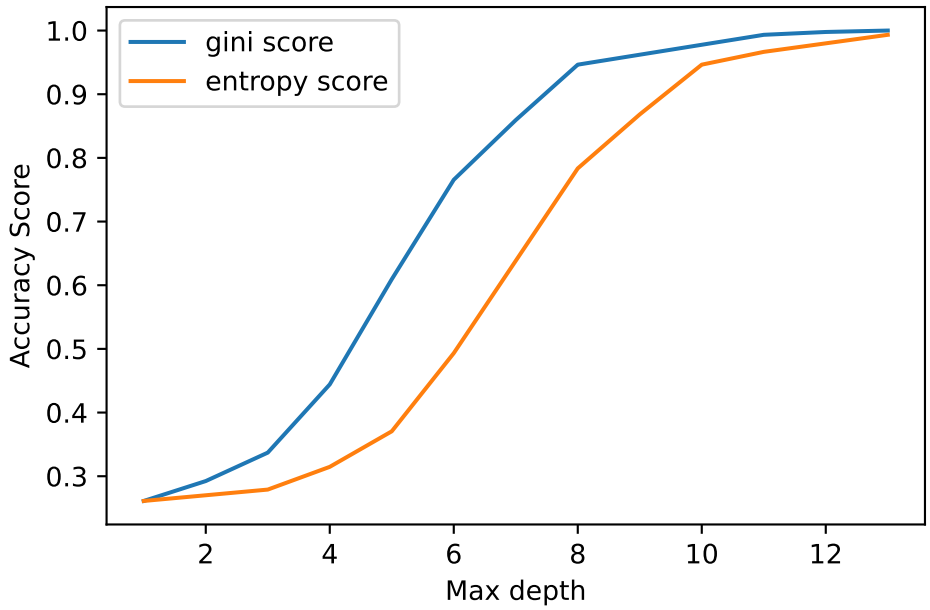
Q2)

On cherche à tracer les courbes donnant le pourcentage d'erreurs commises en fonction de la profondeur maximale de l'arbre. Pour ça on va entraîner nos arbres de décision sur des données générées puis on va tester la précision des prédictions sur ces mêmes données.

```
np.random.seed(10)

criterions = ["gini", "entropy"]
depths = range(1, 14)

n = 456
data = rand_checkers(n//4, n//4, n//4, n//4)
X_train = data[:, :2]
y_train = data[:, 2]

# (T -> S) -> Dict[K, List[T]] -> Dict[K, List[S]]
# applique une fonction à chaque valeur d'un dictionnaire de liste
def fmap_dict_list(f, dic):
    return { key: list(map(f, value)) for key, value in dic.items() }

# instancie tout les classificateurs
def create_all_classifiers(criterions, depths):
    classifiers = defaultdict(list)
    for (criterion, max_depth) in product(criterions, depths):
        classifier = tree.DecisionTreeClassifier(
            criterion=criterion,
            max_depth=max_depth,
        )

        classifiers[criterion].append(classifier)

    return classifiers

# entraîne tout les classificateurs sur les données X_train et y_train
def fit_all_classifiers(classifiers, X_train, y_train):
    return fmap_dict_list(
        lambda classifier: classifier.fit(X_train, y_train),
        classifiers
    )

# calcule tout les scores des classificateurs sur les données X_test et y_test
def compute_all_scores(classifiers, X_test, y_test):
    return fmap_dict_list(
        lambda classifier: classifier.score(X_test, y_test),
        classifiers
    )
```

```
classifiers = create_all_classifiers(criterions, depths)
classifiers = fit_all_classifiers(classifiers, X_train, y_train)
scores = compute_all_scores(classifiers, X_train, y_train)

print(scores)
plt.figure()
for criterion in scores.keys():
    plt.plot(depths, scores[criterion], label=f"{criterion} score")

plt.xlabel('Max depth')
plt.ylabel('Accuracy Score')
plt.legend()
plt.draw()
```

```
{'gini': [0.2611607142857143, 0.2924107142857143, 0.33705357142857145, 0.44419642857142855, 0
```

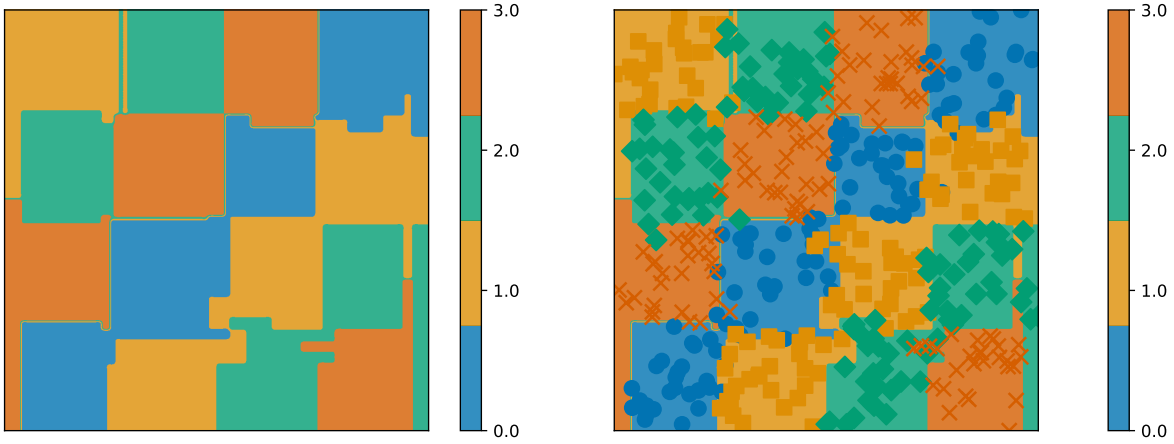


Comme on pouvait s'y attendre, la précision des arbres étant testés sur les données d'apprentissage, plus le modèle a de paramètres (ici de profondeur), mieux il va connaître les données d'apprentissage et donc plus il va être précis dans ses prédictions. On atteint même une précision de 100 % pour le critère de Gini et 99,3 % pour le critère d'Entropie, ça semble indiquer soit que notre modèle est excellent, soit un cas de sur-apprentissage.

Q3)

Comme expliqué à la question précédente, plus la profondeur sera grande, plus l'erreur sera petite. Ainsi avec les profondeurs testées (de 1 à 13), l'arbre de décision qui minimise l'erreur est celui de profondeur 13, cependant dans notre cas le classificateur atteint déjà une précision parfaite à partir d'une profondeur de 16. Ainsi avec le critère d'entropie et une profondeur de 13 on obtient la classification suivante :

```
best_depth = np.argmax(scores["entropy"]) + 1
assert(best_depth == 13)

best_classifier = classifiers["entropy"][best_depth - 1]

plt.figure(figsize=(15, 10))
plt.subplot(2, 2, 1)
frontiere(
    lambda x: best_classifier.predict(x.reshape((1, -1))),
    X_train, y_train,
    step=100, samples=False
)

plt.subplot(2, 1, 1)
plot_2d(X_train, y_train)
frontiere(
    lambda x: best_classifier.predict(x.reshape((1, -1))),
    X_train, y_train,
    step=100, samples=False
)
```



Dans l'ensemble le damier ressemble bien à celui des données, cependant on remarque certains rectangles semblent assez exotiques et ne servent qu'à capturer une infime partie des données. C'est un des symptômes du sur-apprentissage.

Q4)

Maintenant on cherche à visualiser les règles de décisions apprises par l'arbre dans un format intelligible. Pour ce faire on utilise la fonction `tree.export_graphviz` de scikit-learn et la librairie python `graphviz` qu'on exportera dans le fichier `graphviz/checkers.pdf`.

```
dot_data = tree.export_graphviz(
    best_classifier, out_file=None,
    feature_names=["x", "y"],
    filled=True, rounded=True,
    special_characters=True
)
graph = graphviz.Source(dot_data)
graph.render("graphviz/checkers")
```

```
'graphviz/checkers.pdf'
```

En accords avec le score de prédiction du classificateur, une immense majorité des feuilles de l'arbre de décision ont une entropie nulle, c'est-à-dire que le classificateur a trouvé une règle qui permet de prédire exactement la catégorie d'une donnée d'entraînement. De plus il y a aussi une grande partie de feuilles qui ne servent qu'à prédire une seule donnée d'entraînement (sample = 1), c'est à dire que le classificateur a créé une règle spécifique pour une seule donnée observée. Comme pressenti à la question précédente, on est clairement dans un cas de sur-apprentissage.

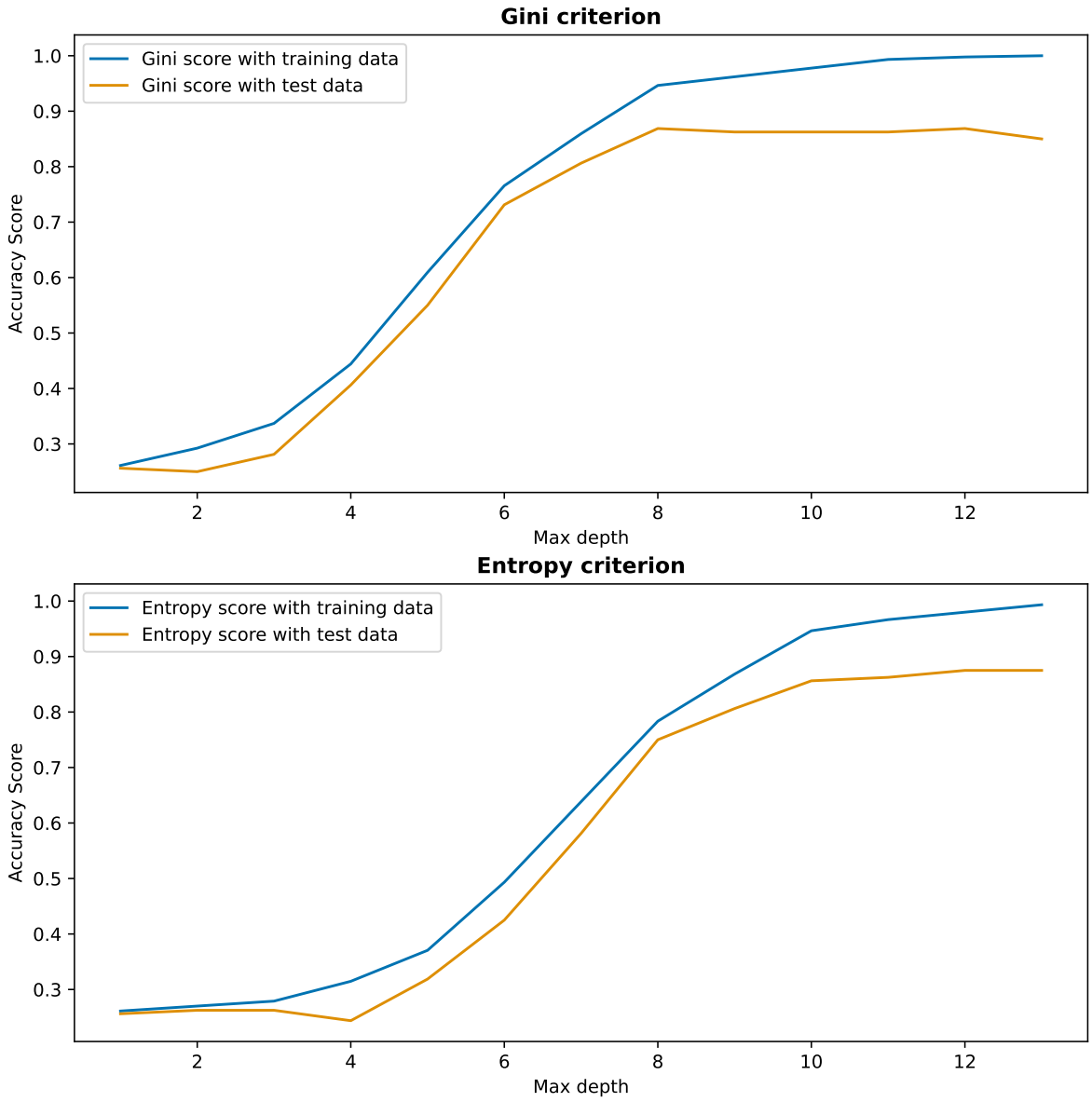
Q5)

Pour avoir une estimation de la précision de notre arbre de décision plus précise, on va générer un échantillon de test et estimer la précision de notre classificateur sur ces données de test puis les comparer avec l'estimation de la précision sur les données d'entraînement.

```
n_test = 160
data_test = rand_checkers(n_test//4, n_test//4, n_test//4, n_test//4)
X_test = data_test[:, :2]
y_test = data_test[:, 2]
```

```
scores_test = compute_all_scores(classifiers, X_test, y_test)

plt.figure(figsize=(10, 10))
for i, criterion in enumerate(scores.keys()):
    plt.subplot(2, 1, i+1)
    plt.plot(
        depths, scores[criterion],
        label=f"{criterion.capitalize()} score with training data"
    )

    print(f"Scores with {criterion} criterion on training data: {scores[criterion]}")

    plt.plot(
        depths, scores_test[criterion],
        label=f"{criterion.capitalize()} score with test data"
    )

    print(f"Scores with {criterion} criterion on test data: {scores_test[criterion]}")

    plt.title(f"{criterion.capitalize()} criterion", weight="bold")
    plt.xlabel("Max depth")
    plt.ylabel("Accuracy Score")
    plt.legend()

plt.draw()
```

```
Scores with gini criterion on training data: [0.2611607142857143, 0.2924107142857143, 0.3370
Scores with gini criterion on test data: [0.25625, 0.25, 0.28125, 0.40625, 0.55, 0.73125, 0.
Scores with entropy criterion on training data: [0.2611607142857143, 0.2700892857142857, 0.2
Scores with entropy criterion on test data: [0.25625, 0.2625, 0.2625, 0.24375, 0.31875, 0.42
```



Pour le critère de Gini on remarque que la précision sur les données de test cesse de croître à partir de la profondeur max de 8. De plus pour les deux critères (de Gini et d'entropie), on remarque que cette fois-ci la précision ne dépasse par le seuil des 90% et ce même en augmentant la profondeur maximum de l'arbre. Donc pour chacun des critères l'estimation de la précision avec les données d'entraînement ont clairement surestimé la précision réelle de l'arbre de décision. Il n'y a plus de doute sur le fait qu'on est dans un cas de sur-apprentissage. En effet notre modèle prédit presque parfaitement les données d'entraînement, mais il surestime sa capacité de généralisation à des données de test.

Q6)

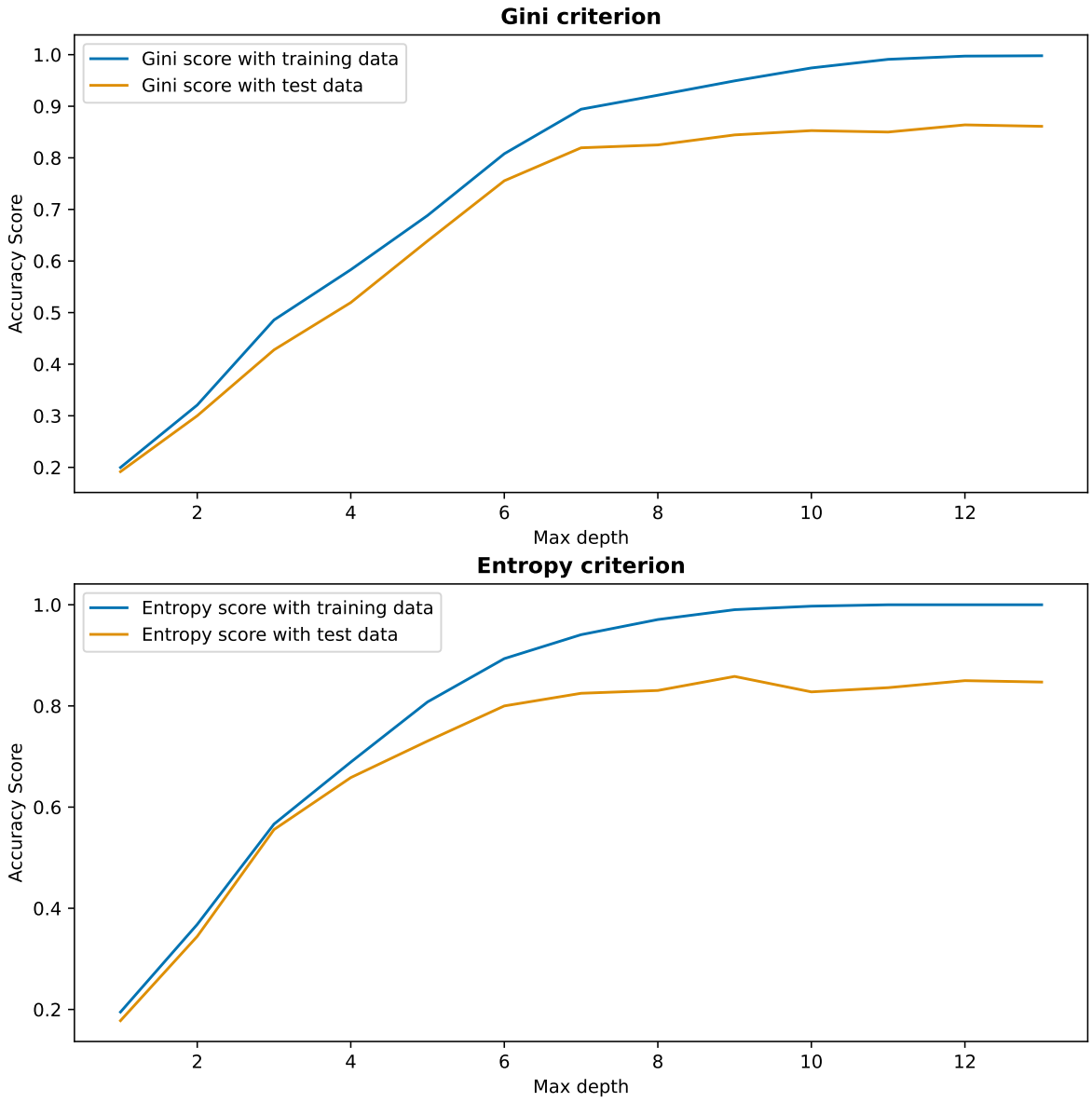
On cherche maintenant à reproduire les questions précédentes sur des données réelles issu du jeu de données `digits` fourni par la librairie scikit-learn.

```
X, y = datasets.load_digits(return_X_y=True)

X_train, X_test, y_train, y_test = model_selection.train_test_split(X, y, test_size=0.2, r

criterions = ["gini", "entropy"]
depths = range(1, 14)

classifiers = create_all_classifiers(criterions, depths)
classifiers = fit_all_classifiers(classifiers, X_train, y_train)

scores = compute_all_scores(classifiers, X_train, y_train)
scores_test = compute_all_scores(classifiers, X_test, y_test)

plt.figure(figsize=(10, 10))
for i, criterion in enumerate(scores.keys()):
    plt.subplot(2, 1, i+1)
    plt.plot(
        depths, scores[criterion],
        label=f"{criterion.capitalize()} score with training data"
    )

    print(f"Scores with {criterion} criterion on training data: {scores[criterion]}")

    plt.plot(
        depths, scores_test[criterion],
        label=f"{criterion.capitalize()} score with test data"
    )

    print(f"Scores with {criterion} criterion on test data: {scores_test[criterion]}")

    plt.title(f"{criterion.capitalize()} criterion", weight="bold")
    plt.xlabel("Max depth")
    plt.ylabel("Accuracy Score")
    plt.legend()

plt.draw()
```

```
best_depth = np.argmax(scores["entropy"]) + 1
best_classifier = classifiers["entropy"][best_depth - 1]

dot_data = tree.export_graphviz(
    best_classifier, out_file=None,
    filled=True, rounded=True,
    special_characters=True
)
graph = graphviz.Source(dot_data)
graph.render("graphviz/digits")
```

```
Scores with gini criterion on training data: [0.19972164231036882, 0.32080723729993044, 0.485
Scores with gini criterion on test data: [0.19166666666666668, 0.3, 0.42777777777777776, 0.5
Scores with entropy criterion on training data: [0.19485038274182323, 0.36812804453723036, 0
Scores with entropy criterion on test data: [0.17777777777777778, 0.34444444444444444, 0.555
```

```
'graphviz/digits.pdf'
```



On retrouve exactement les mêmes problèmes de surapprentissage avec qu'avec nos données simulées. À savoir que sur les données d'entraînement on atteint une précision proche de 100 % alors que sur les données de test on ne dépasse jamais le seuil de 90 % de précision, donc une surestimation de la précision dans le premier cas. De plus en analysant l'arbre de décision généré (`graphviz/digits.pdf`), on observe le même phénomène avec la plupart des feuilles d'entropie nulle et avec seulement une ou deux donnée dedans.

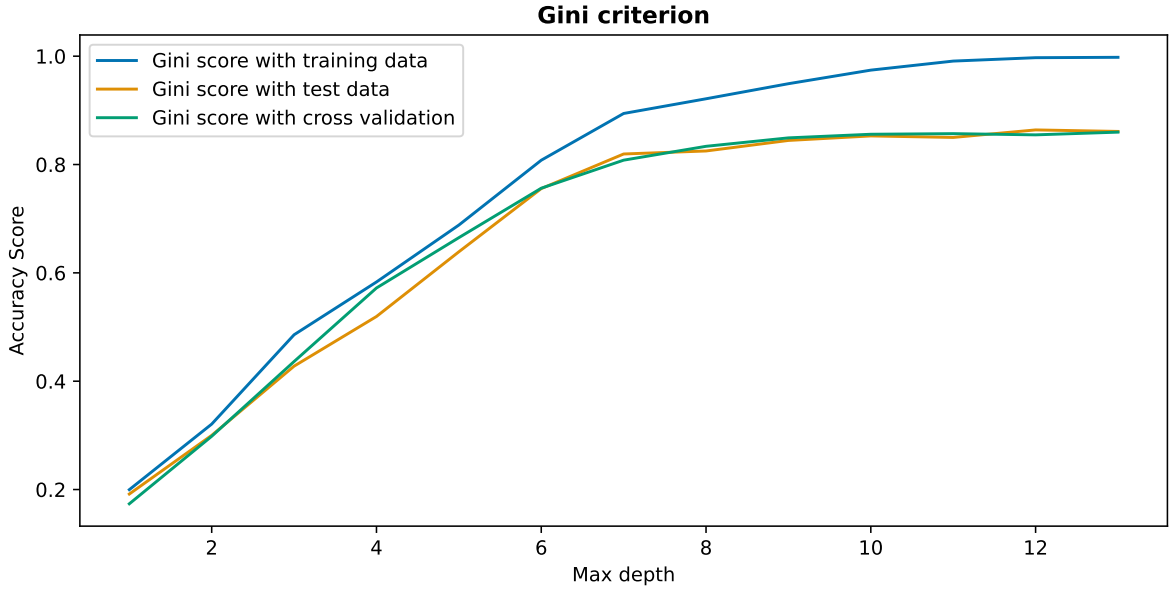
Méthodes de choix de paramètres - Sélection de modèle

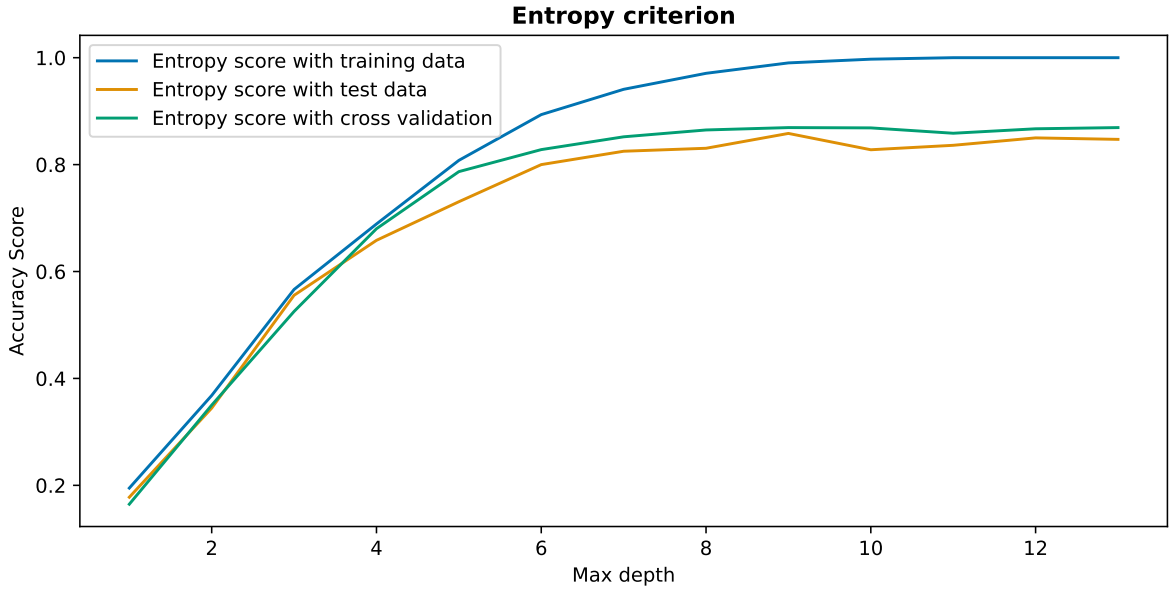
Q7)

On cherche maintenant à estimer le risque (ou de manière équivalente la précision) de manière plus précise en ayant recours à la cross-validation. Le principe consiste à répéter l'étape d'entraînement et d'estimation du risque sur plusieurs partitions en deux de notre jeu de données puis à prendre la moyenne des risques estimés. On va utiliser la fonction `skleanr.model_selection.cross_val_score` avec l'algorithme KFold.

```
classifiers = create_all_classifiers(criterions, depths)

scores_crossval = fmap_dict_list(
    lambda classifier: np.mean(model_selection.cross_val_score(
        classifier, X, y,
        cv = model_selection.KFold(5, shuffle=True, random_state=0)
    )),
    classifiers
)

plt.figure(figsize=(10, 10))
for i, criterion in enumerate(scores.keys()):
    plt.subplot(2, 1, i+1)
    plt.plot(
        depths, scores[criterion],
        label=f"{criterion.capitalize()} score with training data"
    )

    plt.plot(
        depths, scores_test[criterion],
        label=f"{criterion.capitalize()} score with test data"
    )

    plt.plot(
        depths, scores_crossval[criterion],
        label=f"{criterion.capitalize()} score with cross validation"
    )

    plt.title(f"{criterion.capitalize()} criterion", weight="bold")
    plt.xlabel("Max depth")
    plt.ylabel("Accuracy Score")
    plt.legend()
```

```
plt.draw()
```



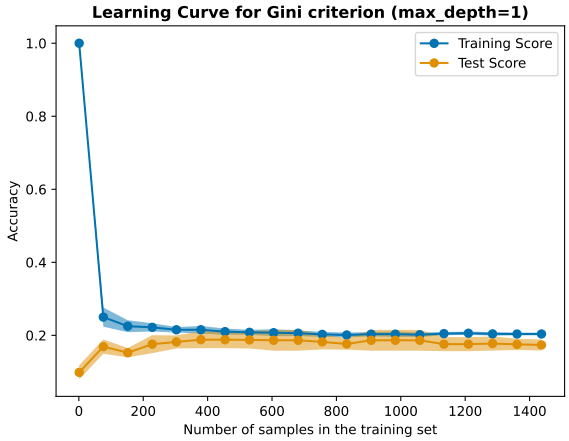


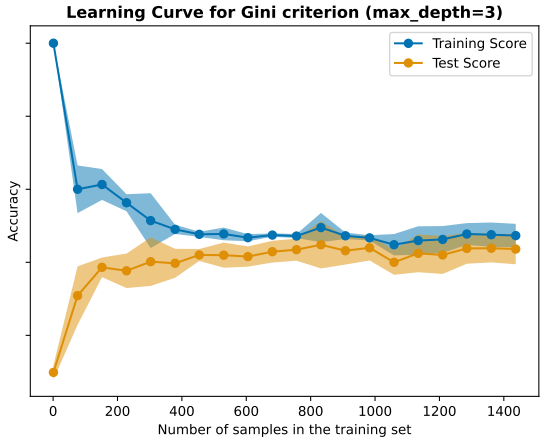
On remarque que l'estimation du risque via la cross-validation semble plus régulière que avec une seule estimation sur un jeu de test.

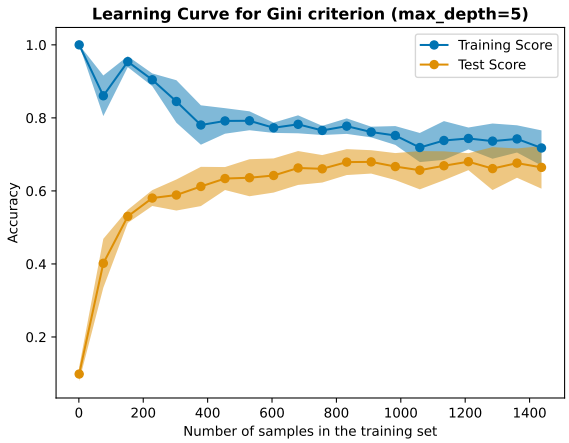
Q8)

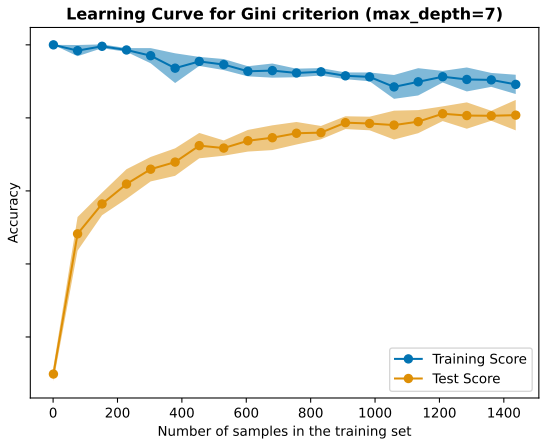
On cherche maintenant à estimer la performance de chacun de nos classificateurs en fonction du nombre de données d'entraînement disponible. Pour ce faire on utilise la fonction `sklearn.model_selection.LearningCurveDisplay`

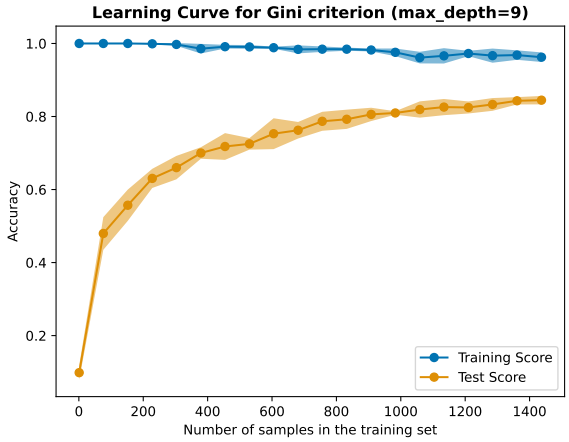
```
for criterion in classifiers.keys():
    fig, ax = plt.subplots(nrows=3, ncols=2, figsize=(15, 17), sharey=True)

    skip = 2
    for i, classifier in enumerate(classifiers[criterion][:12:skip]):
        sub_ax = ax[i//2, i%2]
        model_selection.LearningCurveDisplay.from_estimator(
            classifier,
            X = X, y = y,
            train_sizes = np.linspace(0.001, 1, 20),
            line_kw = {"marker": "o"},
            std_display_style = "fill_between",
            score_name = "Accuracy",
            ax = ax[i//2, i%2],
            cv = model_selection.KFold(5, shuffle=True, random_state=0)
        )

        sub_ax.set_title(
            (f"Learning Curve for {criterion.capitalize()} criterion "
            f"(max_depth={i * skip + 1})"),
            weight="bold"
        )

        sub_ax.legend(["Training Score", "Test Score"])
```

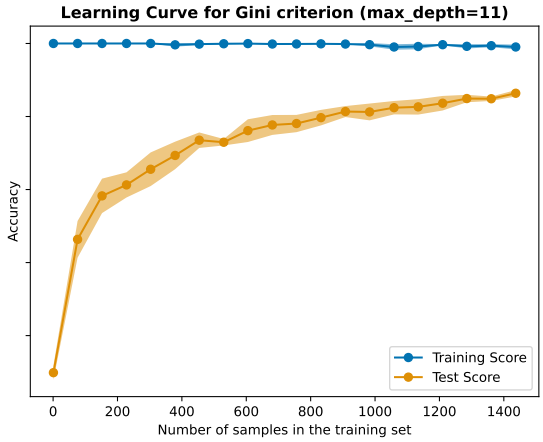

Learning Curve for Gini criterion (max_depth=1)
Training Score
Test Score
Accuracy
Number of samples in the training set

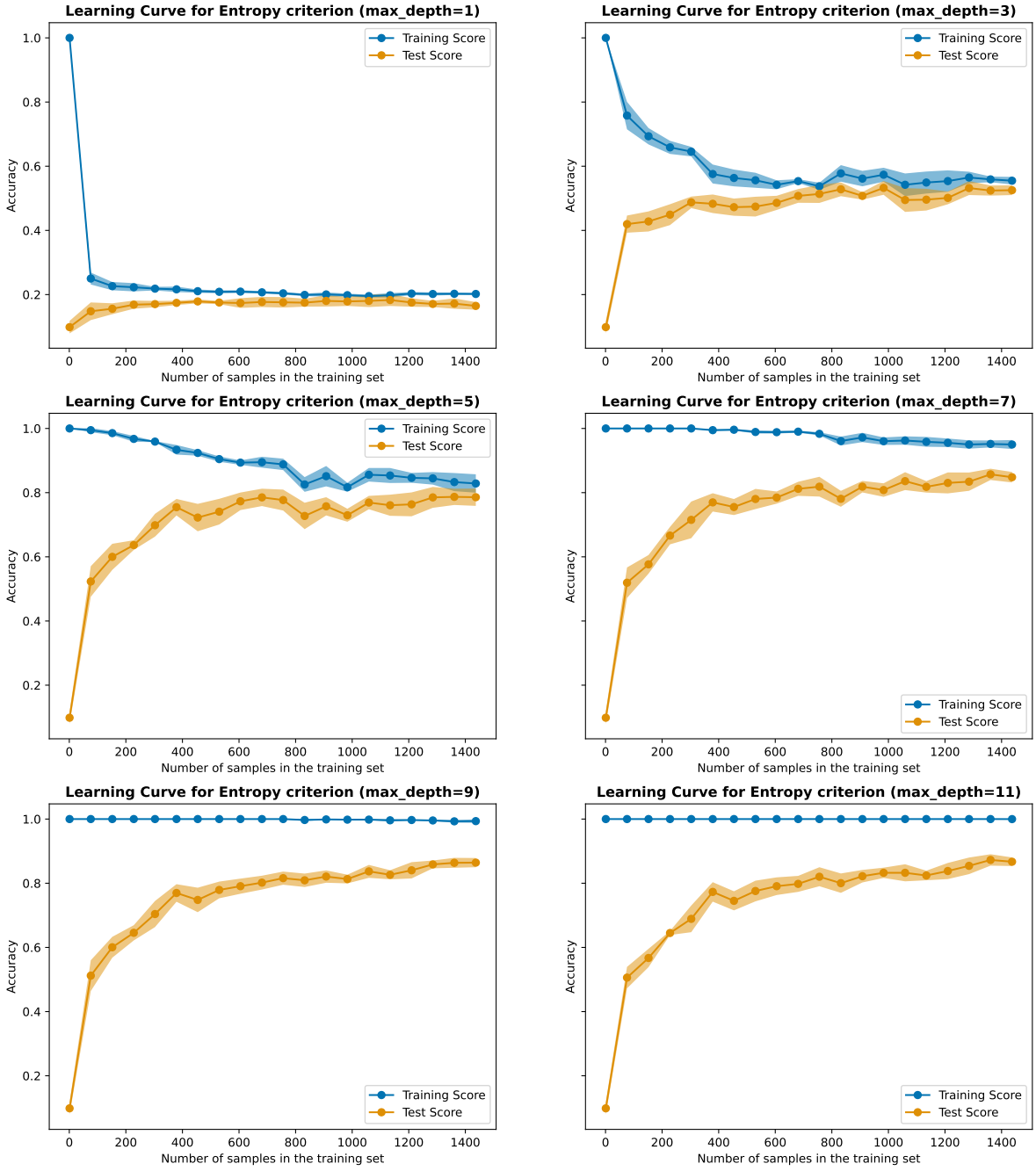

Learning Curve for Gini criterion (max_depth=3)
Training Score
Test Score
Accuracy
Number of samples in the training set


Learning Curve for Gini criterion (max_depth=5)
Training Score
Test Score
Accuracy
Number of samples in the training set


Learning Curve for Gini criterion (max_depth=7)
Training Score
Test Score
Accuracy
Number of samples in the training set


Learning Curve for Gini criterion (max_depth=9)
Training Score
Test Score
Accuracy
Number of samples in the training set


Learning Curve for Gini criterion (max_depth=11)
Training Score
Test Score
Accuracy
Number of samples in the training set



On peut remarquer plusieurs choses. La première c'est que lorsqu'on entraîne le modèle avec trop peu de données par rapport à la profondeur maximum, le modèle aura toujours tendance à être très bon sur les données d'apprentissage quelle que soit sa vraie performance sur les données de test. Ensuite jusqu'à un certain point, plus la profondeur max de l'arbre est

grande, plus le classificateur sera performant sur les données de test, même lorsque les données d'apprentissage seront peu nombreuses. Cependant quelle que soit la profondeur de l'arbre, on n'arrive pas à dépasser 90 % de précision.

Conclusion

Pour tester le risque d'un modèle il ne faut surtout pas utiliser les données d'entraînement. Dans le pire des cas il faut utiliser un jeu de test indépendant de nos données d'apprentissage, et si on peut se le permettre le mieux est d'estimer le risque par cross-validation via par exemple l'algorithme KFold.

Ensuite un modèle a de paramètre, plus il va être performant sur ses données d'apprentissage, notamment dans le cas où il aura plus de paramètres (ici de règles de décisions) que de données à disposition où là il ne fera aucune erreur sur ses données d'apprentissage.

Enfin augmenter le nombre de paramètres permet d'améliorer les performances du modèle, jusqu'à un certain point, même lorsque le modèle est idéalement adapté aux données (comme dans le cas de `rand_checkers`). On peut donc faire de la sélection de modèle en estimant le risque pour voir quel modèle performe le mieux avec le moins de paramètres possibles.