IFT870/BIN710
Forage de données

Thème 4 : Fonctions prédictives

Davy Ouedraogo
Département d'informatique

Inspiré des notes de cours de Pre Aida Ouangraoua

Prétraitement

- Rappel : fonctions prédictives
- Évaluation et amélioration de modèles
- Métriques d’évaluation de la performance

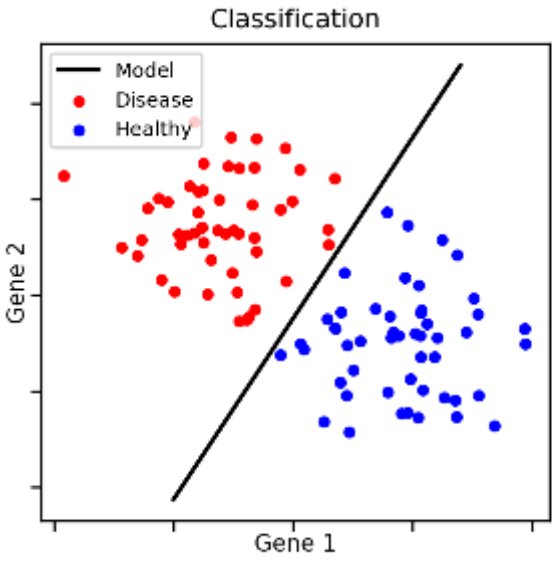
Fonctions prédictives

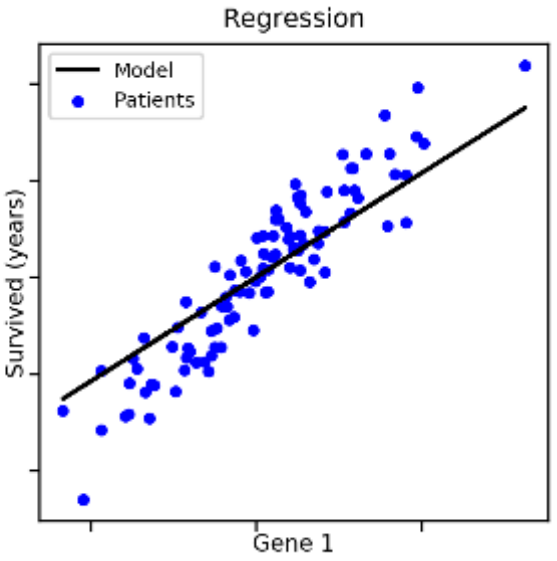
- Pour un ensemble de données observées sous la forme (X,y) où X est un vecteur de valeurs d'attributs et y la valeur d'un attribut cible correspondant, trouver un modèle h qui estime y avec précision étant donné un nouveau vecteur X, i.e. $y \cong h(X)$.
  - **Classification** : attribut cible à valeurs discrètes (catégoriques)
  - **Régression** : attribut cible à valeurs continues (numériques)

y de Classe = {Disease, Healthy}

X de Gene1xGene2

h : Gene1xGene2 → Classe





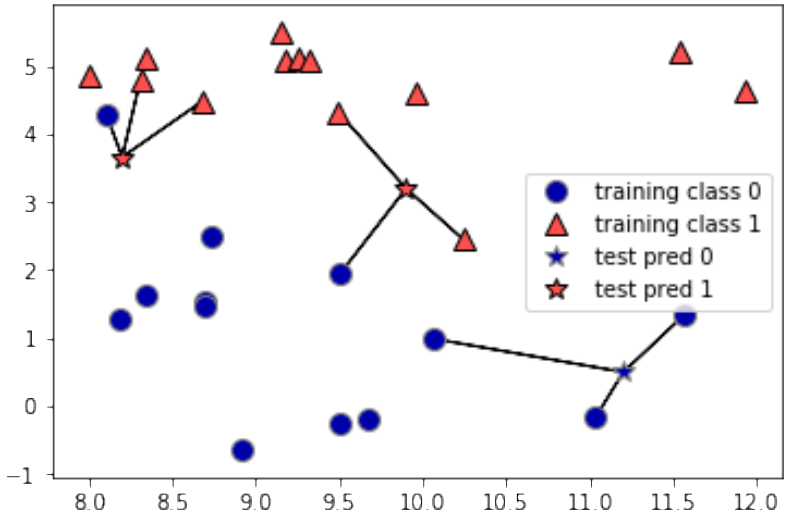
y de AnneesSurvie = R^+

X de Gene2

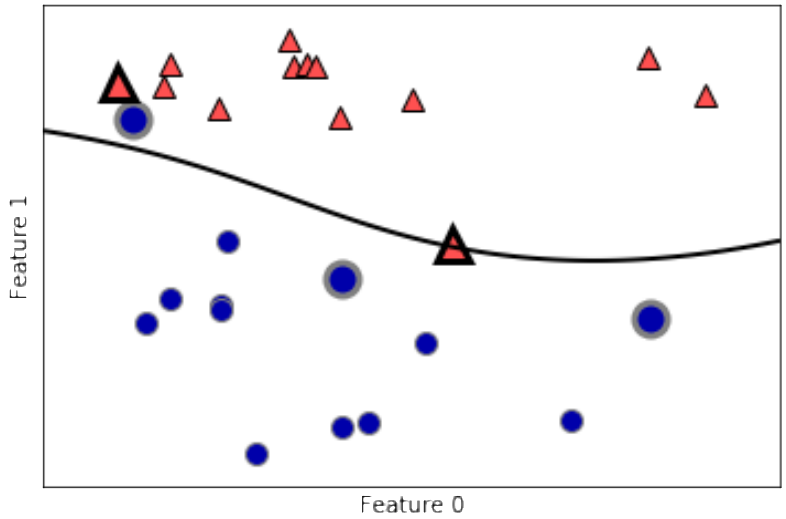
h : Gene2 → AnneeeSurvie

Rappel : quelques algorithmes

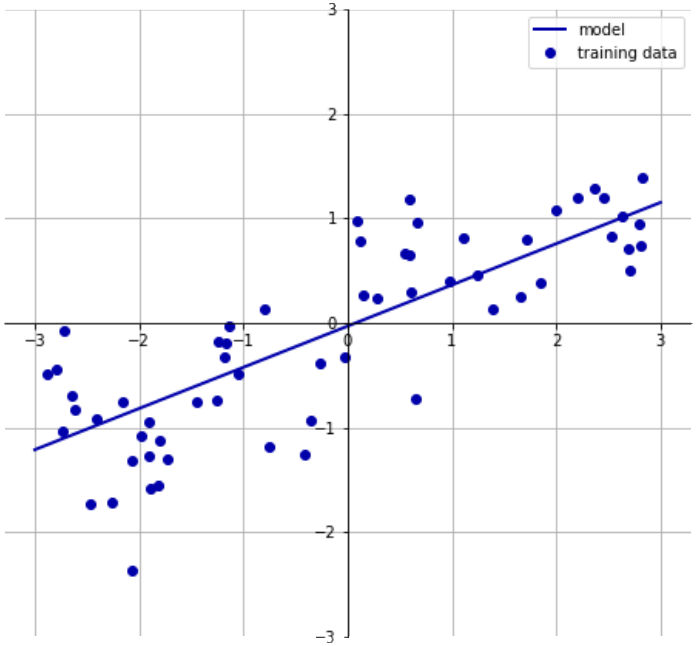
❑ *K* plus proches voisins



❑ Machines à vecteur de support



❑ Modèles linéaires



❑ Classificateur de Bayes Naïf

Frequency Table

		Play Golf	
		Yes	No
Outlook	Sunny	3	2
	Overcast	4	0
	Rainy	2	3

		Play Golf	
		Yes	No
Humidity	High	3	4
	Normal	6	1

		Play Golf	
		Yes	No
Temp.	Hot	2	2
	Mild	4	2
	Cool	3	1

		Play Golf	
		Yes	No
Windy	False	6	2
	True	3	3

Likelihood Table

		Play Golf	
		Yes	No
Outlook	Sunny	3/9	2/5
	Overcast	4/9	0/5
	Rainy	2/9	3/5

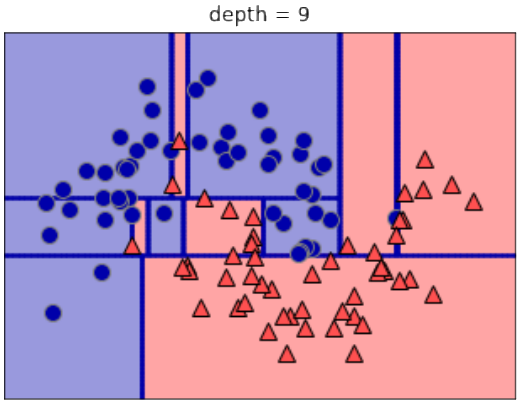
		Play Golf	
		Yes	No
Humidity	High	3/9	4/5
	Normal	6/9	1/5

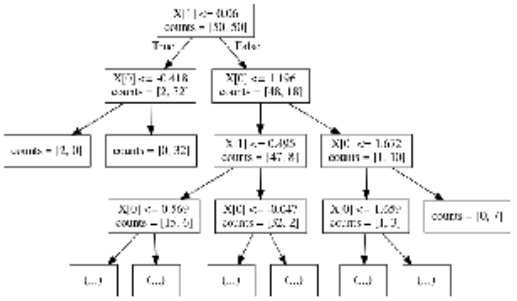
		Play Golf	
		Yes	No
Temp.	Hot	2/9	2/5
	Mild	4/9	2/5
	Cool	3/9	1/5

		Play Golf	
		Yes	No
Windy	False	6/9	2/5
	True	3/9	3/5

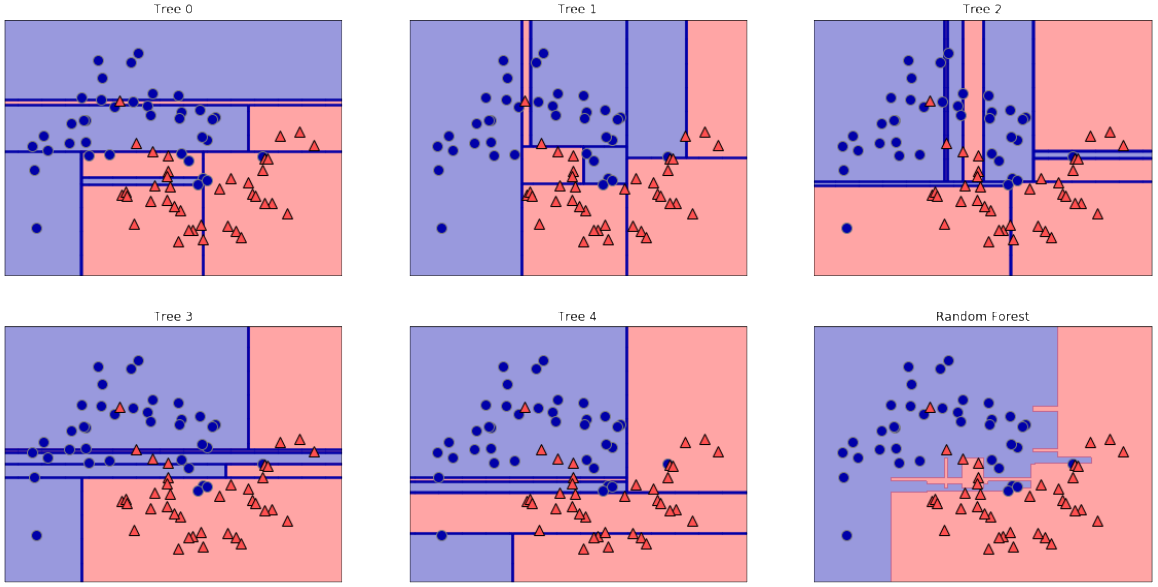
Rappel : quelques algorithmes

❑ Arbres de décision





❑ Ensemble d'arbres de décision

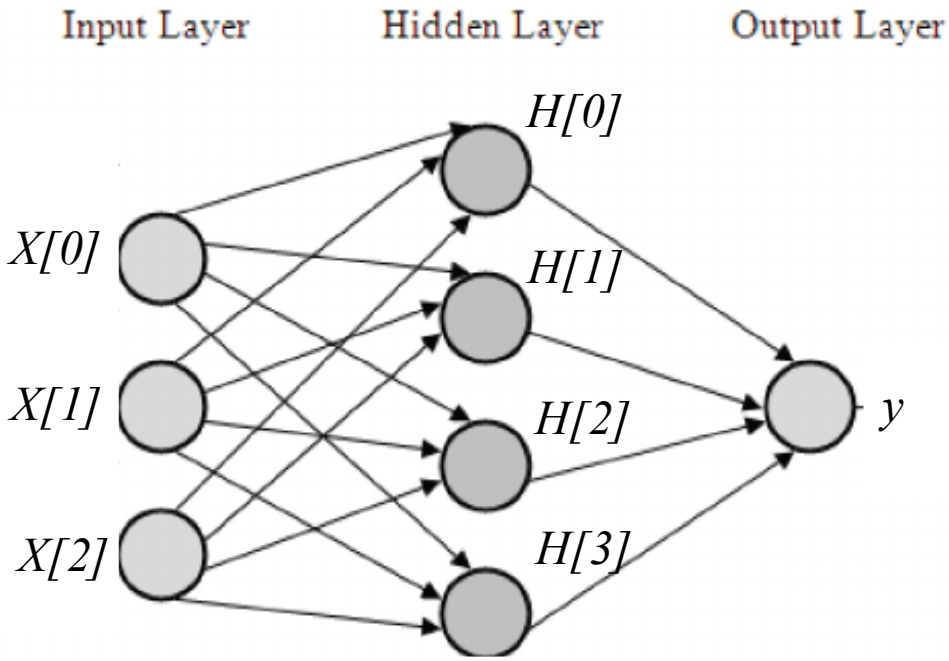


Rappel : quelques algorithmes

❑ Réseaux de neurones

Application d'une fonction non-linéaire aux unités cachés:

- rectified linear unit (relu) (par défaut)
- tangens hyperbolicus (tanh)



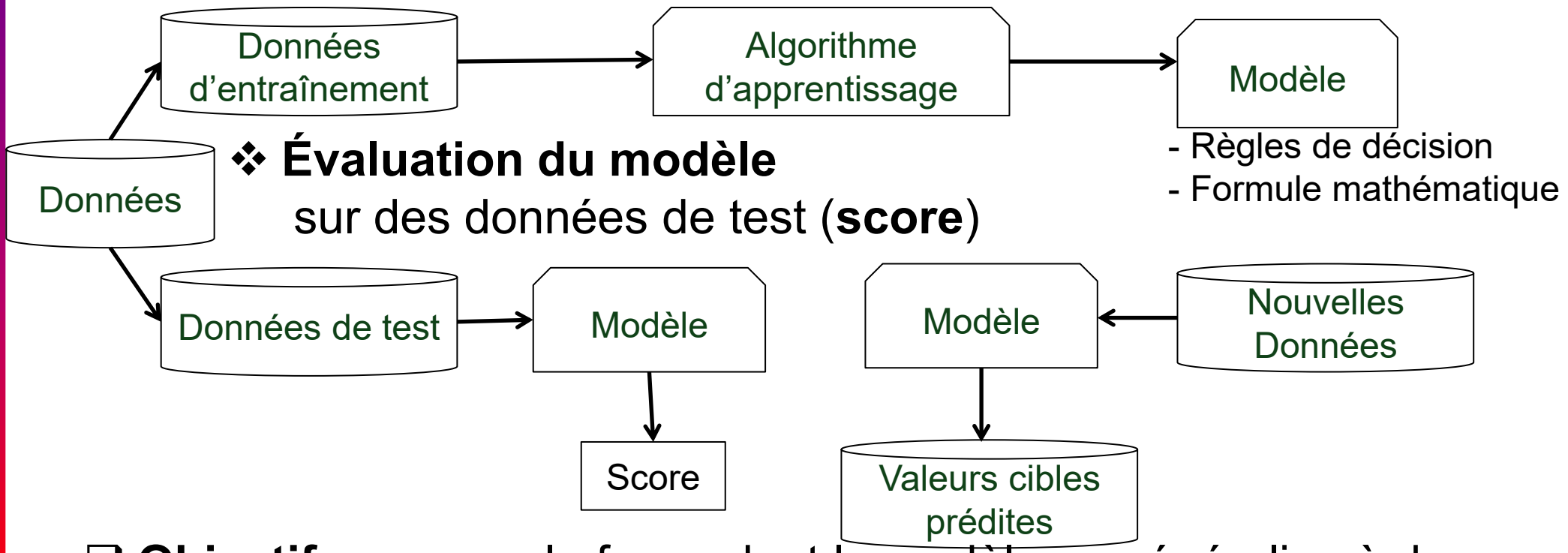
Prétraitement

- **Rappel : fonctions prédictives**
- **Évaluation et amélioration de modèles**
- **Métriques d'évaluation de la performance**

Évaluation et amélioration de modèles

- **Processus à deux étapes** après division des données en un ensemble d'entraînement et un ensemble de test (**train_test_split**)

  - **Construction du modèle**
    sur des données d'entraînement (**fit**)



- **Objectif** : mesurer la façon dont le modèle se généralise à de nouvelles données

Évaluation et amélioration de modèles

❑ Évaluation de la performance de généralisation

❖ Méthode robuste pour évaluer la performance d'un modèle

- **Échantillonnage aléatoire** : répéter train_test_split k fois, et calculer la moyenne des scores obtenus

- **Bootstrap** (pour petit jeu de données de taille n)

Exemple: la méthode de « bootstrap .632 » : tirer aléatoirement 1 donnée n fois avec remise. Environ 63.2% des données sont tirés pour l'entraînement, et les 36.8% de données non-tirées sont gardés pour le test ($(1 - 1/d)^d \approx 0.368$).
Répéter la procédure d'échantillonnage k fois et calculer la moyenne des scores obtenus

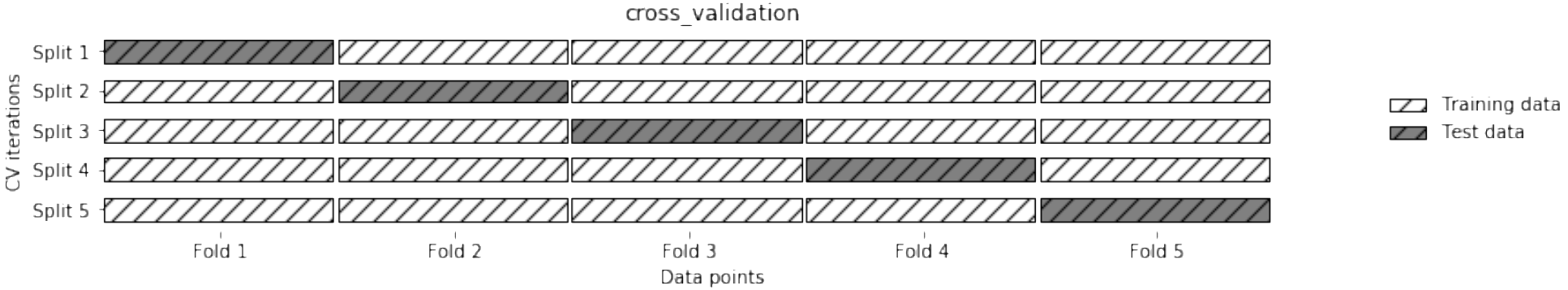
Évaluation et amélioration de modèles

❑ Évaluation de la performance de généralisation

❖ Méthode robuste pour évaluer la performance d'un modèle

- **Cross-validation**

Exemple: k-fold cross-validation (en général k=5 ou 10) : partitionner les données en k sous-ensembles de taille similaire (fold_1, fold_2, … fold_k). Entraîner une séquence de modèles: à la ième itération, utiliser fold_i comme données de test, et les autres comme données d'entraînement.



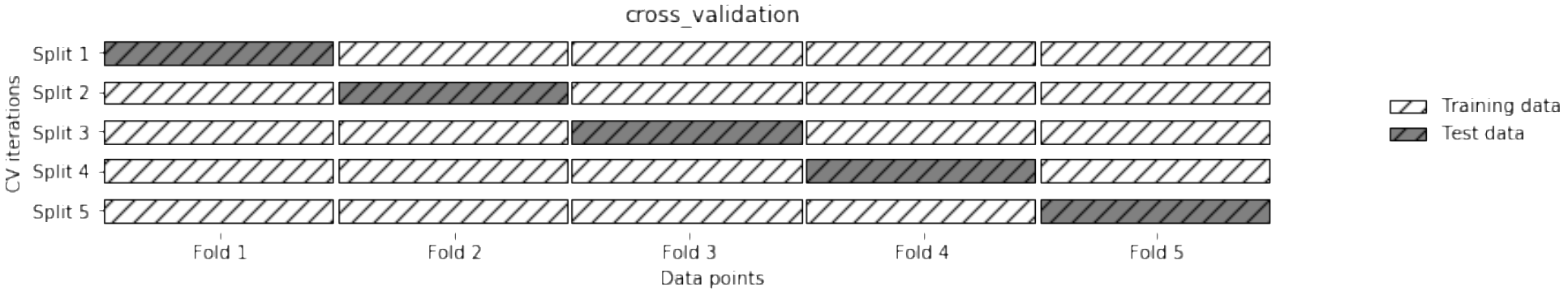
Évaluation et amélioration de modèles

❑ Évaluation de la performance de généralisation

❖ Méthode robuste pour évaluer la performance d'un modèle

- **K-fold cross-validation**

```
from sklean.model_selection import cross_val_score
model = Model()
X,y = donnees.data, donnees.target
scores =  cross_val_score(model, X, y, cv=5)
```



scores : [0.99, 0.9, 0.95, 0.93, 1.0]

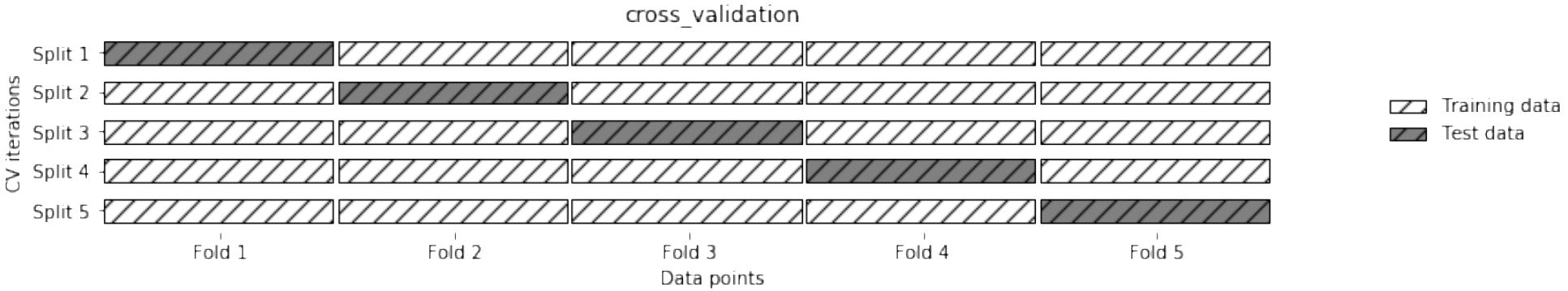
Évaluation et amélioration de modèles

❑ Évaluation de la performance de généralisation

❖ Méthode robuste pour évaluer la performance d'un modèle

- **K-fold cross-validation**

```
from sklean.model_selection import cross_validate
result =  cross_validate(model, X, y, cv=5, return_train_score=True)
```



result : fit_time, score_time, test_score, train_score for all iterations

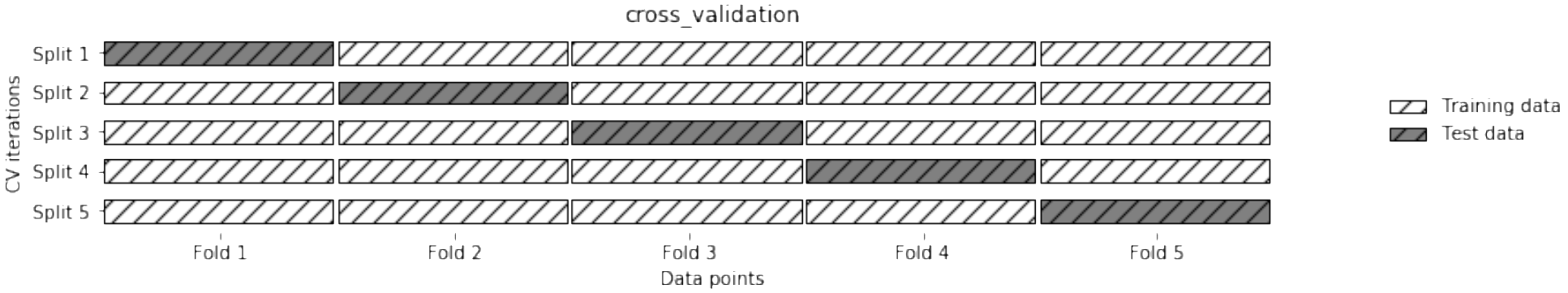
Évaluation et amélioration de modèles

❑ Évaluation de la performance de généralisation

❖ Méthode robuste pour évaluer la performance d'un modèle

- **K-fold cross-validation**

  - ➢ Assure que chaque donnée est utilisée une fois comme test
  - ➢ Évalue la **robustesse** du modèle aux changements de données d'entraînement



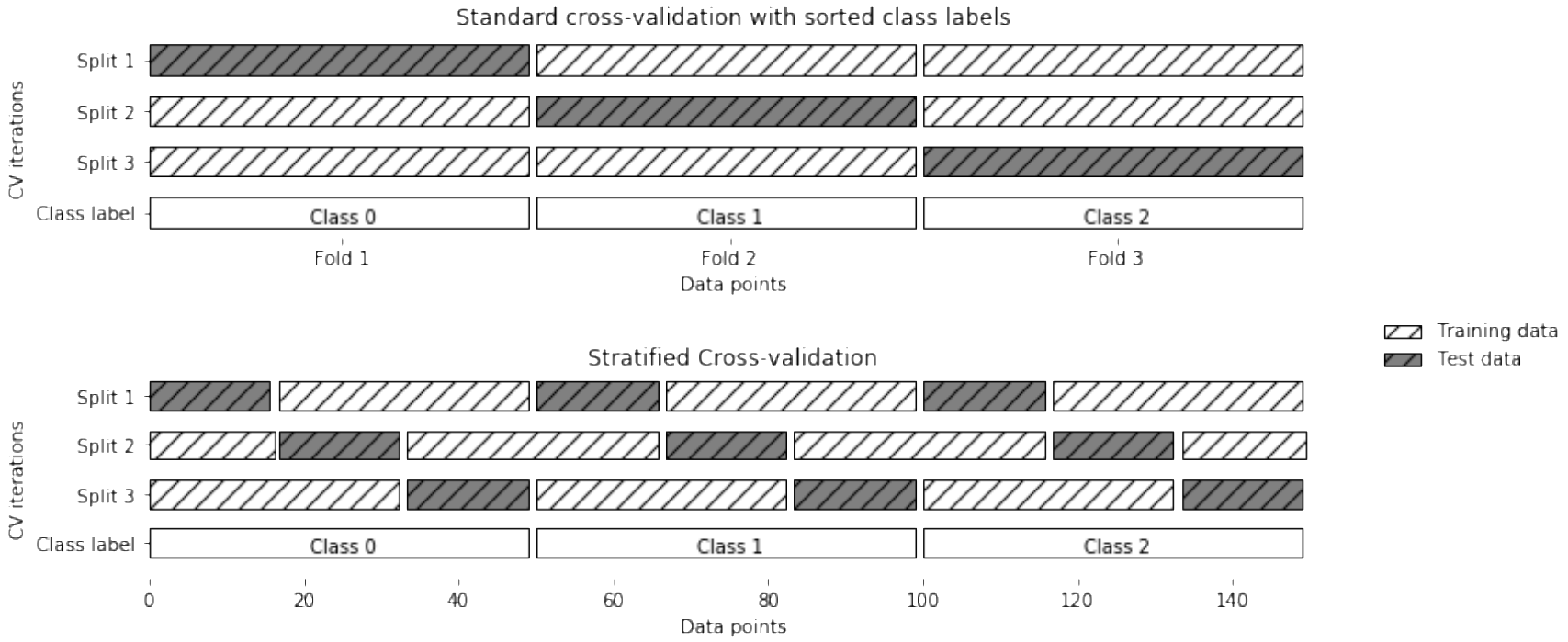
Évaluation et amélioration de modèles

❑ Évaluation de la performance de généralisation

❖ Méthode robuste pour évaluer la performance d'un modèle

- **K-fold stratifié**

Stratifier les parties de telle sorte que les distributions des classes dans les parties sont approximativement les mêmes.



Évaluation et amélioration de modèles

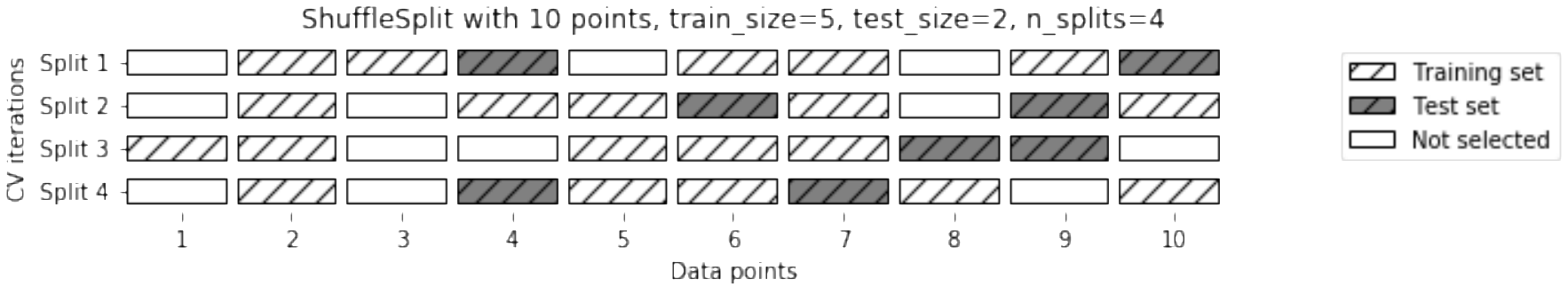
❑ Évaluation de la performance de généralisation

❖ Méthode robuste pour évaluer la performance d'un modèle

- **K-fold : spécification de la stratégie de séparation**

KFold, ShuffleSplit, GroupKFold, LeaveOneOut, StratifiedKFold, StratifiedShuffleSplit

```
from sklean.model_selection import KFold
kfold = KFold(n_splits=5, shuffle = True)
score =  cross_val_score(model, X, y, cv=kfold
```



Évaluation et amélioration de modèles

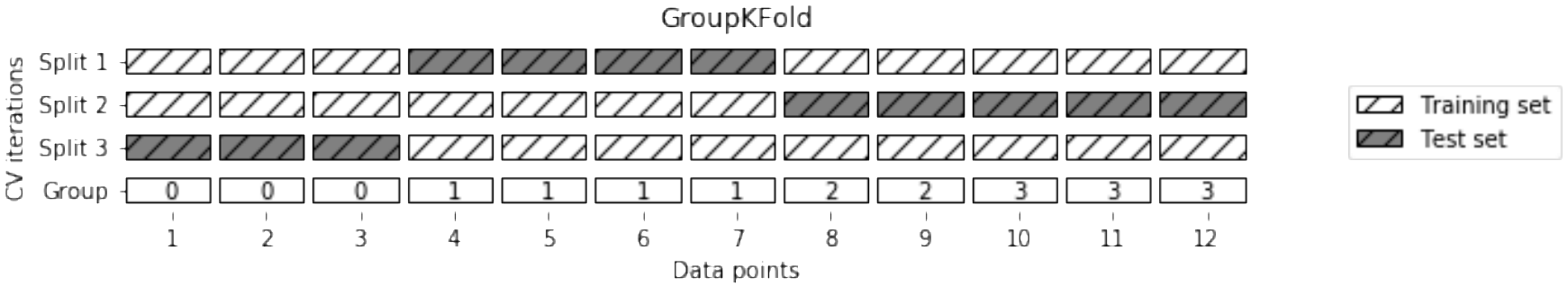
❑ Évaluation de la performance de généralisation

❖ Méthode robuste pour évaluer la performance d'un modèle

- **K-fold : spécification de la stratégie de séparation**

KFold, ShuffleSplit, GroupKFold, LeaveOneOut, StratifiedKFold, StratifiedShuffleSplit

```
from sklean.model_selection import KFold
kfold = KFold(n_splits=5, shuffle = True)
score =  cross_val_score(model, X, y, cv=kfold
```



Évaluation et amélioration de modèles

❑ Amélioration de la performance de généralisation

❖ Méthodes pour comparer/améliorer des modèles

- **Grid search**

Essayer des combinaisons de paramètres pour un modèle afin de choisir la meilleure combinaison

Exemple: Modèle SVC avec les paramètres gamma et C

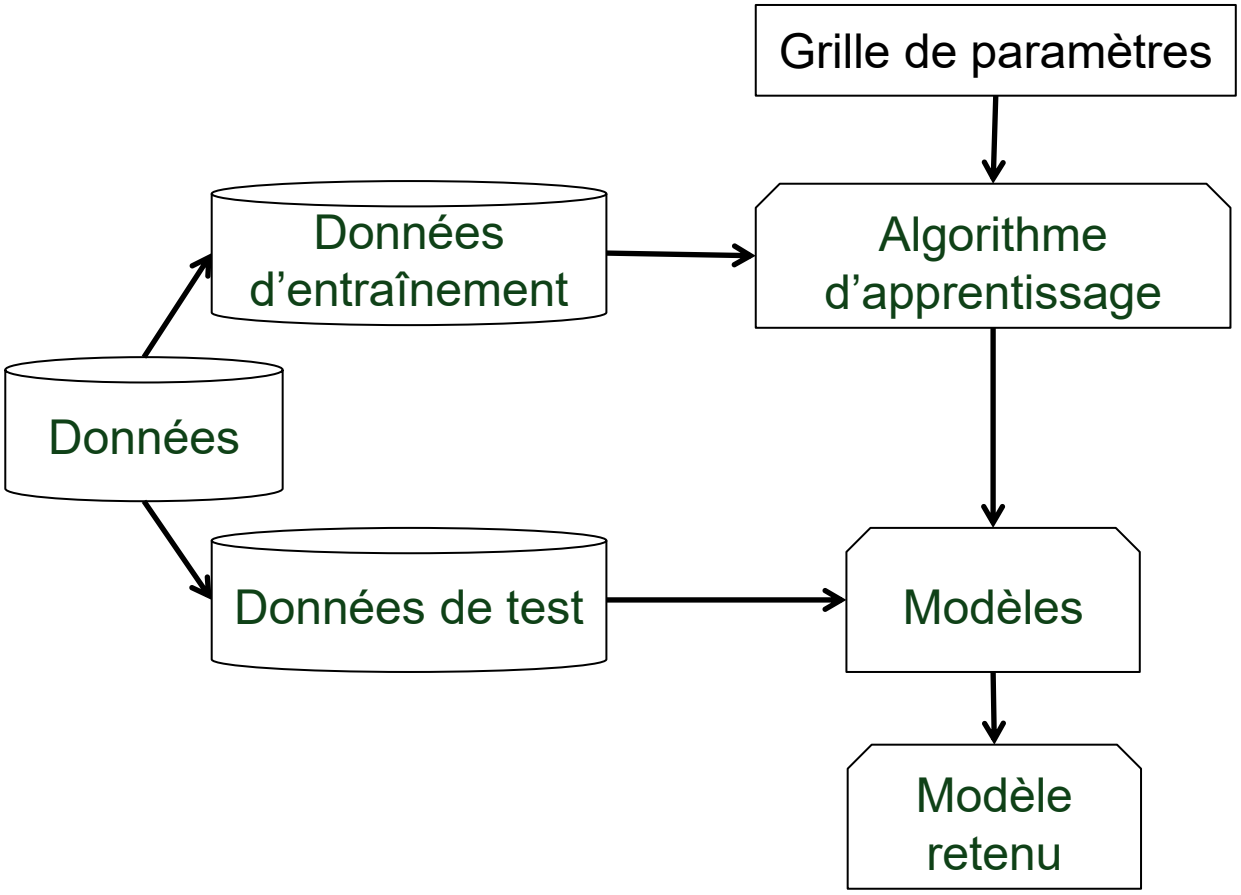
	C=0.001	C=0.01	C=0.1	C=1.0	C=10.0
Gamma=0.001	**SVC(gamma=0.001, C=0.001)**	**SVC(gamma=0.001, C=0.01)**	**SVC(gamma=0.001, C=0.1)**	**SVC(gamma=0.001, C=1.0)**	**SVC(gamma=0.001, C=10.0)**
Gamma=0.01	SVC(gamma=0.01, C=0.001)	SVC(gamma=0.01, C=0.01)	SVC(gamma=0.01, C=0.1)	SVC(gamma=0.01, C=1.0)	SVC(gamma=0.01, C=10.0)
Gamma=0.1	SVC(gamma=0.1, C=0.001)	SVC(gamma=0.1, C=0.01)	SVC(gamma=0.1, C=0.1)	SVC(gamma=0.1, C=1.0)	SVC(gamma=0.1, C=10.0)
Gamma=1.0	SVC(gamma=1, C=0.001)	SVC(gamma=1, C=0.01)	SVC(gamma=1, C=0.1)	SVC(gamma=1, C=1.0)	SVC(gamma=1, C=10.0)
Gamma=10.0	SVC(gamma=10, C=0.001)	SVC(gamma=10, C=0.01)	SVC(gamma=10, C=0.1)	SVC(gamma=10, C=1.0)	SVC(gamma=10, C=10.0)

Évaluation et amélioration de modèles

❑ Amélioration de la performance de généralisation

❖ Méthodes pour comparer/améliorer des modèles

- **Grid search** : approche naïve



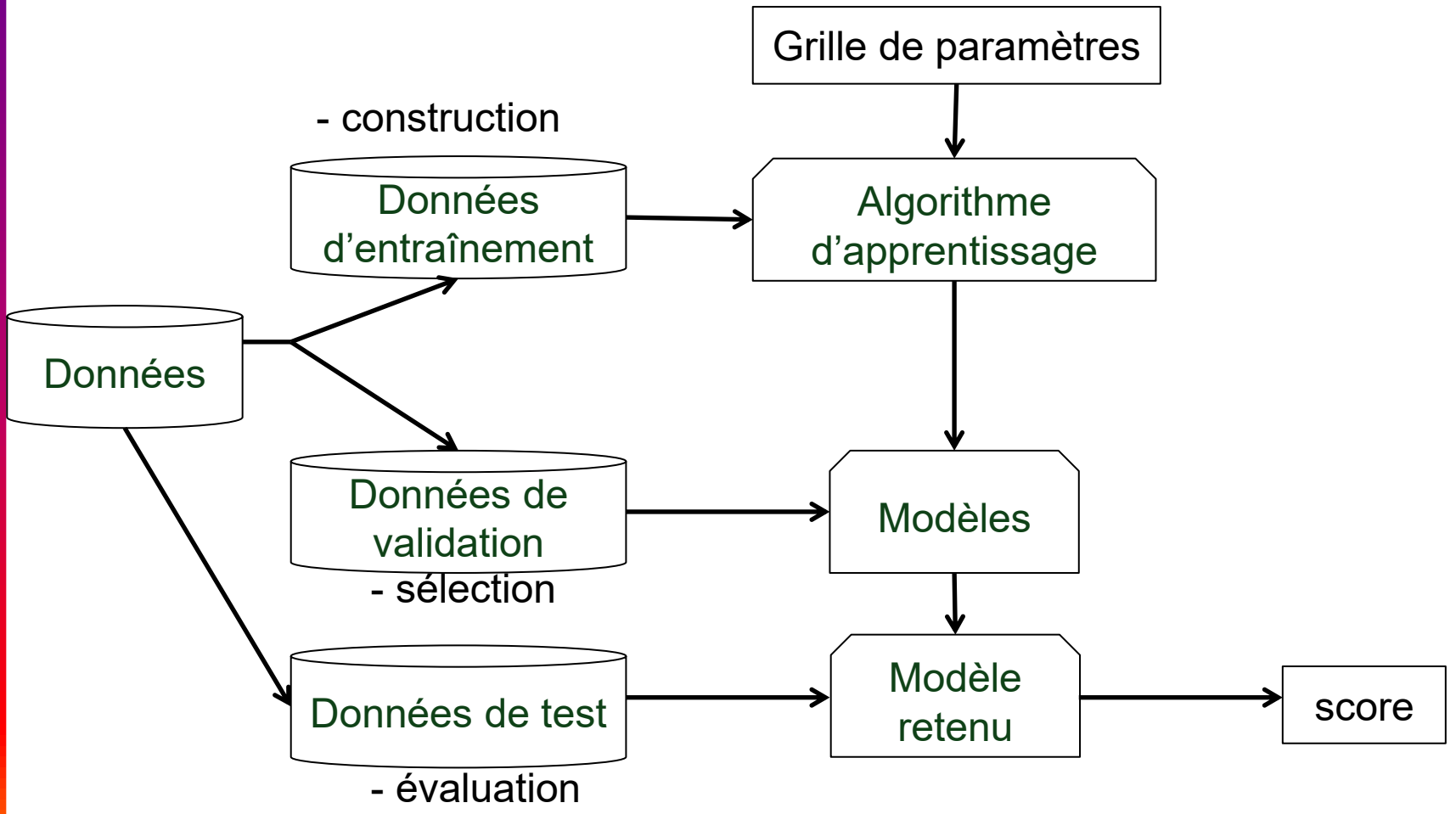
Possibilité de sur-apprentissage !

Évaluation et amélioration de modèles

❑ Amélioration de la performance de généralisation

❖ Méthodes pour comparer/améliorer des modèles

- **Grid search** : nécessaire de partitionner les données en 3

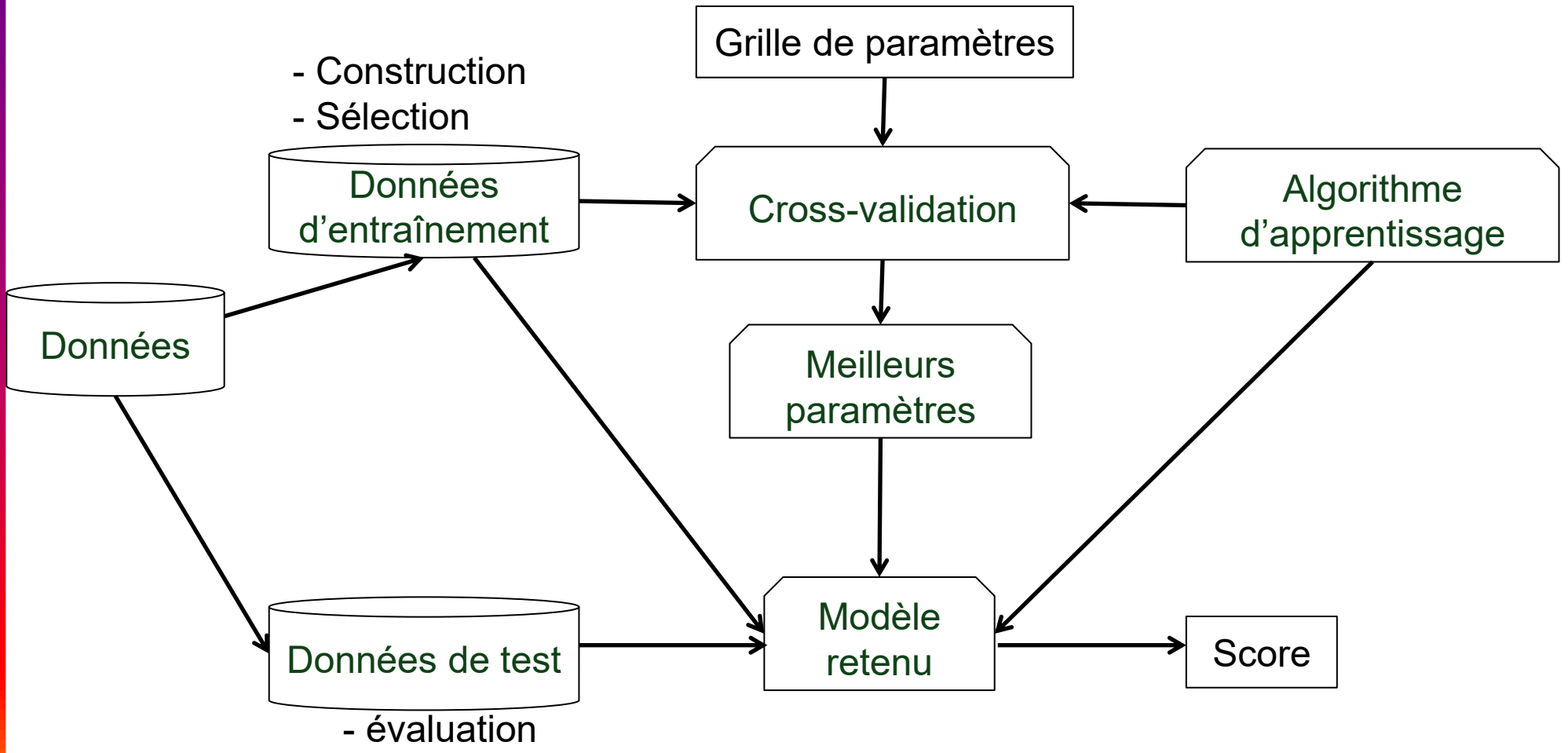


Évaluation et amélioration de modèles

❑ Amélioration de la performance de généralisation

❖ Méthodes pour comparer/améliorer des modèles

- Grid search avec validation croisée



Évaluation et amélioration de modèles

- **Amélioration de la performance de généralisation**
  - **Méthodes pour comparer/améliorer des modèles**
    - Grid search avec validation croisée

```
for gamma in [0.001, 0.01, 0.1, 1, 10]:
    for C in [0.001, 0.01, 0.1, 1, 10]:
        svm = SVC(gamma=gamma, C=C)
        scores = cross_val_score(svm, X_train, y_train, cv=5)
        score = np.mean(scores)
        if score > best_score:
            best_score = score
            best_parameters = {'C': C, 'gamma': gamma}
svm = SVC(**best_parameters)
svm.fit(X_train, y_train)
```

Évaluation et amélioration de modèles

- **Amélioration de la performance de généralisation**
  - **Méthodes pour comparer/améliorer des modèles**
    - Grid search avec validation croisée

```
grille_param = {'C': [0.001, 0.01, 0.1, 1, 10, 100],
                'gamma': [0.001, 0.01, 0.1, 1, 10, 100]}
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
from sklearn.svm import SVC
grid_search = GridSearchCV(SVC(), grille_param, cv=5,
                           return_train_score=True)à
grid_search.fit(X_train, y_train)
```

Évaluation et amélioration de modèles

- **Amélioration de la performance de généralisation**
  - **Méthodes pour comparer/améliorer des modèles**
    - Grid search avec plusieurs grilles de paramètres

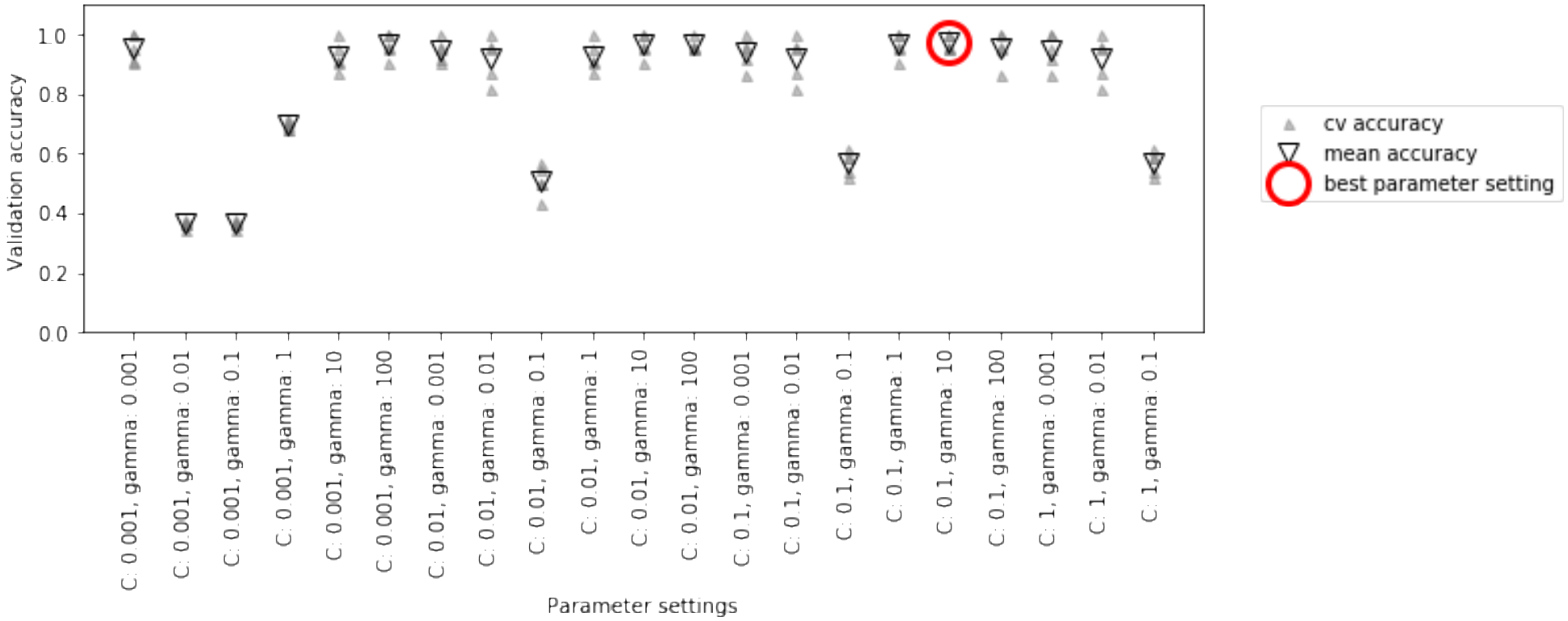
```
grille_param = [{'kernel': ['rbf'],
                 'C': [0.001, 0.01, 0.1, 1, 10, 100],
                 'gamma': [0.001, 0.01, 0.1, 1, 10, 100]},
                {'kernel': ['linear'],
                 'C': [0.001, 0.01, 0.1, 1, 10, 100]}] from
grid_search = GridSearchCV(SVC(), grille_param, cv=5,
                           return_train_score=True)à
grid_search.fit(X_train, y_train)
```

Évaluation et amélioration de modèles

❑ Amélioration de la performance de généralisation

❖ Méthodes pour comparer/améliorer des modèles

- Grid search : analyse des résultats (bien choisir l'espace de recherche)

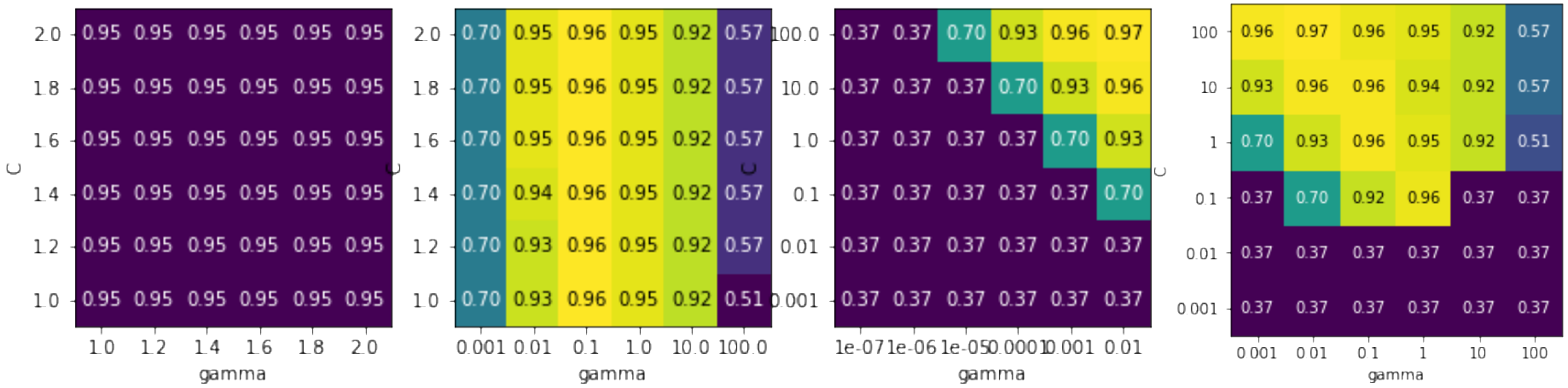


Évaluation et amélioration de modèles

❑ Amélioration de la performance de généralisation

❖ Méthodes pour comparer/améliorer des modèles

- Grid search : analyse des résultats (bien choisir l'espace de recherche)



Prétraitement

- **Rappel : fonctions prédictives**
- **Évaluation et amélioration de modèles**
- **Métriques d'évaluation de la performance**

Métrique d'évaluation de la performance

- **Choix de la métrique en fonction du type d'analyse et des objectifs**
  - Classification binaire, multi-classes, régression ?
  - Jeu de données équilibré, déséquilibré ?

- **Exemple**: pour la classification, la correctitude (accuracy) n'est pas la meilleure métrique si l'une des classes est beaucoup plus fréquentes que les autres (ex: 90%)
  Correctitude : pourcentage de données correctement classées

Métrique d'évaluation de la performance

❑ Métrique pour classification binaire

❖ Matrice de confusion

Une des classes dite « positive », l'autre « négative »

Classe réelle\prédite	C1	C2
C1	True Positives (TP)	False Negatives (FN)
C2	False Positives (FP)	True Negatives (TN)

Métrique d'évaluation de la performance

❑ Métrique pour classification binaire

❖ Matrice de confusion

Une des classes dite « positive », l'autre « négative »

Classe réelle\prédite	C1	C2
C1	True Positives (TP)	False Negatives (FN)
C2	False Positives (FP)	True Negatives (TN)

Correctitude (Accuracy): pourcentage de données classées correctement

Accuracy = (TP + TN)/ (TP+FP+FN+TN)

Taux d'erreur (Error rate):

Error rate = 1- Accuracy = (TP+FP+FN+TN)

Métrique d'évaluation de la performance

❑ Métrique pour classification binaire

❖ Matrice de confusion

Une des classes dite « positive », l'autre « négative »

Classe réelle\prédite	C1	C2
C1	True Positives (TP)	False Negatives (FN)
C2	False Positives (FP)	True Negatives (TN)

Si le jeu de données est déséquilibré (Exemple Pos << Neg):
Sensibilité (Sensitivity): pourcentage de positifs classés correctement : **Sensitivity = TP / (TP+FN)**
Spécificité (Specificity): pourcentage de négatifs classés correctement : **Specificiity = TN / (FP+TN)**

Métrique d'évaluation de la performance

❑ Métrique pour classification binaire

❖ Matrice de confusion

Une des classes dite « positive », l'autre « négative »

Classe réelle\prédite	C1	C2
C1	True Positives (TP)	False Negatives (FN)
C2	False Positives (FP)	True Negatives (TN)

Autre résumé de la matrice de confusion:
Exactitude (Precision): pourcentage de prédits positifs qui sont réellement positifs : **Precision = TP / (TP+FP)**
Complétitude (Recall): pourcentage de positifs qui sont effectivement préditst positifs : **Recall = TP / (TP+FN)**

Métrique d'évaluation de la performance

❑ Métrique pour classification binaire

❖ Matrice de confusion

Une des classes dite « positive », l'autre « négative »

Classe réelle\prédite	C1	C2
C1	True Positives (TP)	False Negatives (FN)
C2	False Positives (FP)	True Negatives (TN)

F-score : moyenne harmonique de l'exactitude et de la complétitude

F-score = 2* (precision * recall)/(precision + recall)