

# UNIWIN VERSION 10.1.0 FORETS ALEATOIRES

Révision: 19/11/2024

Définition	
Entrée des données	2
Données manquantes ou non sélectionnées	3
Exemple 1 : Fichier IRIS3 (décision)	
L'option Rapports	
L'option Graphiques	
Exemple 2 : Fichier DIABETES (décision)	
Exemple 3 : Fichier GRAISSE (régression)	16
L'option Rapports	
L'option Graphiques	20
Exemple 4 : Fichier WINES3 (régression)	24
Exemple 5 : Fichier TITANIC (décision)	
Calculs de la matrice de confusion et des indicateurs	
Les variables internes créées par la procédure	30
Références	

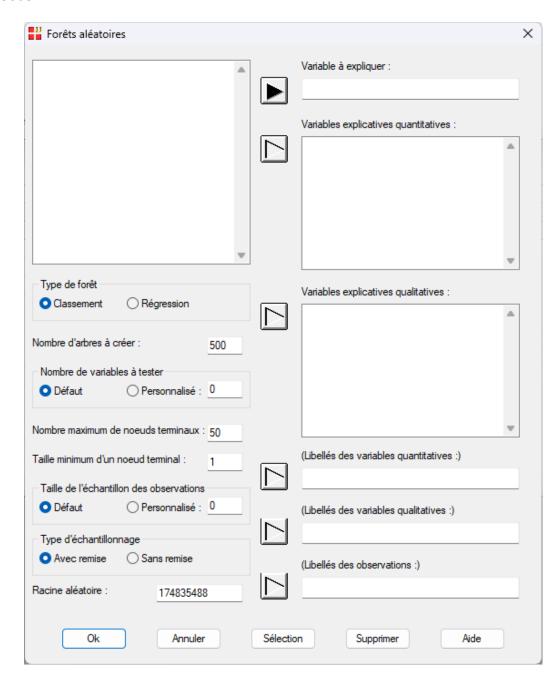
#### **Définition**

La procédure Forêts aléatoires crée des modèles de deux formes : modèles décisionnels qui découpent les observations en groupes basés sur les caractéristiques observées et modèles de régression qui prévoient la valeur d'une variable à expliquer. Les modèles sont élaborés en construisant un grand nombre d'arbres et en faisant la moyenne des prévisions obtenues à partir de ces arbres. Les arbres sont construits en utilisant une procédure similaire à celle des arbres de décision et de régression, avec optimisation aléatoire des nœuds et agrégation de bootstrap (bagging). Les données brutes sont utilisées pour les calculs car la structure d'un arbre n'est pas impactée par les habituelles transformations monotones des données. Les observations sont découpées en deux jeux : un jeu d'apprentissage utilisé pour construire les arbres et un jeu de prévision pour lequel les classes ou valeurs de la variable à expliquer ne sont pas connues et doivent être prévues. La variable à expliquer est soit qualitative, soit quantitative, comme c'est également le cas pour les variables explicatives.

Cette procédure est basée sur le package R 'randomForest'.

#### Entrée des données

Cliquons sur l'icône FORET dans le ruban Expliquer. La boîte de dialogue montrée cidessous s'affiche :



Cette boîte de dialogue permet de définir la variable à expliquer et les variables explicatives quantitatives et qualitatives.

Elle permet également, en option, d'indiquer les noms des variables contenant les libellés des variables quantitatives et qualitatives et les libellés des observations.

Différents critères pour la construction de la forêt doivent être précisés :

<u>Type de forêt</u> : Classement (décision) pour une variable à expliquer qualitative alphanumérique ou Régression pour une variable à expliquer quantitative.

Nombre d'arbres à créer : le nombre d'arbres pour la forêt. La valeur par défaut est 500.

Nombre de variables à tester : le nombre de variables candidates sélectionnées aléatoirement parmi toutes les variables lors de la division d'un nœud. Les valeurs par défaut sont la racine carrée du nombre de variables pour le classement et le nombre de variables divisé par 3 pour la régression.

Nombre maximum de nœuds terminaux : le nombre maximum de nœuds terminaux dans chaque arbre de la forêt.

<u>Taille minimum d'un nœud terminal</u> : la taille minimum d'un nœud terminal dans chaque arbre de la forêt. Des valeurs usuelles sont 1 pour le classement et 5 pour la régression.

<u>Taille de l'échantillon</u>: le nombre d'observations sélectionnées aléatoirement pour construire chaque arbre. Les valeurs par défaut sont le nombre d'observations non manquantes si l'échantillonnage est avec remise et 0,632 fois le nombre d'observations non manquantes si l'échantillonnage est sans remise.

<u>Type d'échantillonnage</u>: permet de choisir un échantillonnage avec ou sans remise.

Racine aléatoire : la racine utilisée pour l'échantillonnage des observations et des variables.

#### Données manquantes ou non sélectionnées

- Les valeurs manquantes dans les variables à expliquer quantitatives et qualitatives ne sont pas autorisées.
- Les valeurs manquantes de la variable à expliquer définissent le jeu de prévision.
- Les données non sélectionnées ne sont pas utilisées.
- Les forêts aléatoires ne nécessitent pas de jeu de validation. Elles utilisent une technique appelée évaluation out-of-bag (évaluation OOB) pour mesurer la qualité du modèle.

#### Exemple 1 : Fichier IRIS3 (décision)

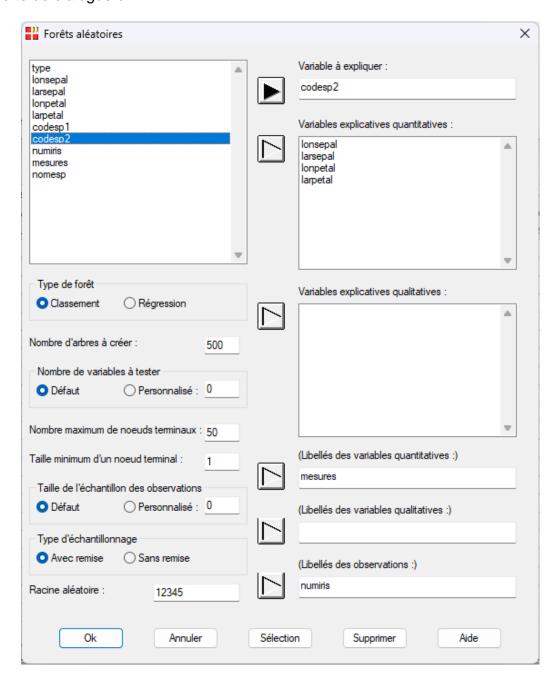
Pour ce premier exemple, nous utiliserons le fichier Iris3. Ce fichier contient les données relatives à 150 iris de trois espèces : Iris Setosa, Iris Versicolor et Iris Virginica. Les mesures effectuées sont : longueur du sépale (lonsepal), longueur du pétale (lonpetal), largeur du sépale (larsepal), largeur du pétale (larpetal).

Ce fichier contient 6 iris pour lesquels les classes d'appartenance sont inconnues. Ils définissent l'échantillon de prévision.



Cliquons sur l'icône ARBRE dans le ruban Expliquer.

La boîte de dialogue ci-dessous s'affiche.



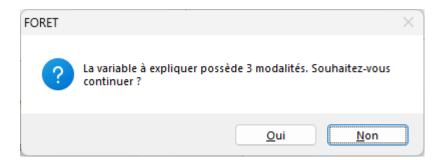
La variable *codesp2* est la variable à expliquer. Elle contient pour chaque observation le libellé de son espèce d'appartenance. Nous choisissons les variables de *lonsepal* à *larpetal* comme variables explicatives quantitatives et laissons les autres paramètres de l'analyse aux valeurs par défaut.

Cliquons sur le bouton Ok.

Un premier message nous indique que les lignes ayant des données manquantes pour la variable à expliquer seront utilisées comme jeu de prévision.

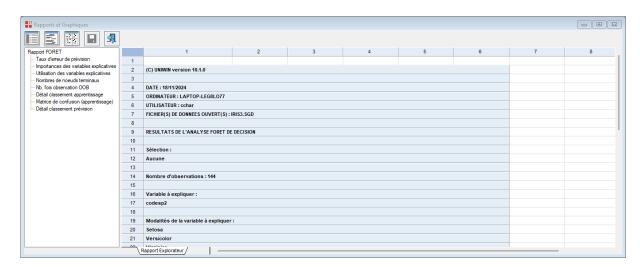


Un second message nous demande de confirmer notre choix d'un arbre de décision en fonction du nombre de modalités de la variable à expliquer :



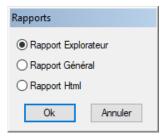
Cliquons sur Oui pour exécuter le traitement de l'analyse.

Après quelques instants, l'écran suivant s'affiche :

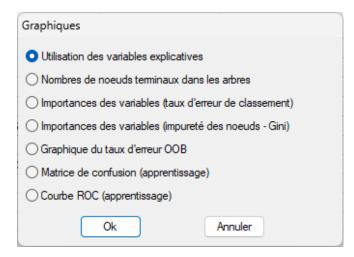


La barre d'outils 'Rapports et Graphiques' permet par l'icône 'Données' de rappeler la boîte de dialogue d'entrée des données.

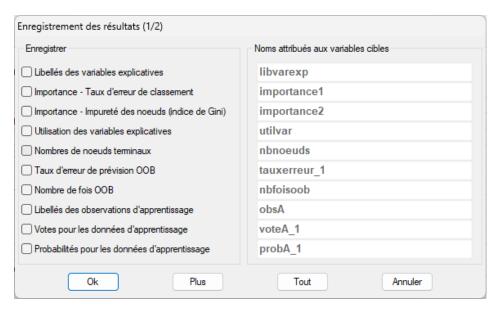
L'icône 'Rapports' affiche la boîte de dialogue des options pour les rapports :



et l'icône 'Graphiques' affiche la boîte de dialogue des options pour les graphiques.



L'icône 'Enregistrer' permet de sélectionner les résultats de l'analyse à enregistrer dans un fichier.

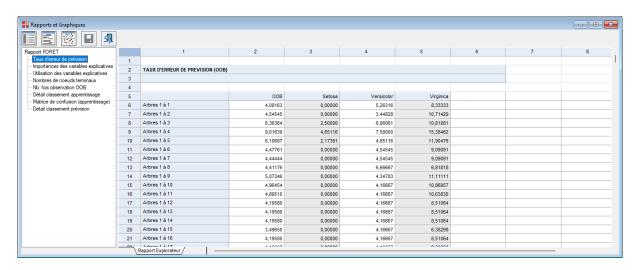


#### L'option Rapports

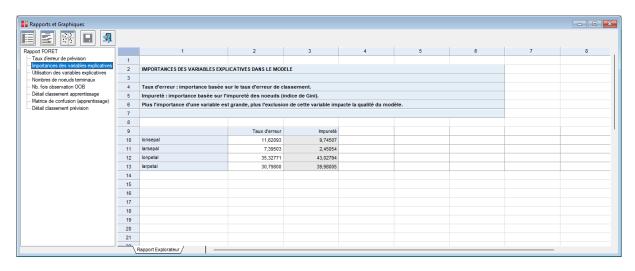
Cette option permet d'obtenir le rapport à l'écran sous la forme d'un explorateur, d'un tableur ou au format HTML.

## Taux d'erreur de prévision OOB

Ce tableau affiche l'évolution du taux d'erreur de prévision OOB (Out Of Bag) en fonction du nombre d'arbres dans la forêt. Il affiche également l'évolution de l'erreur pour chacune des modalités de la variable à expliquer.



## Importances relatives des variables



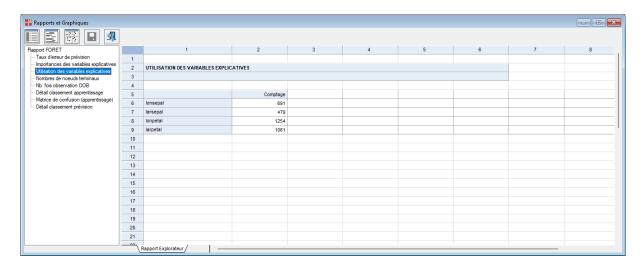
La première mesure est basée sur le taux d'erreur de classement.

La deuxième mesure est basée sur l'impureté des nœuds (indice de Gini).

Pour chacune de ces mesures, les deux variables les plus importantes sont *lonpetal* et *larpetal*.

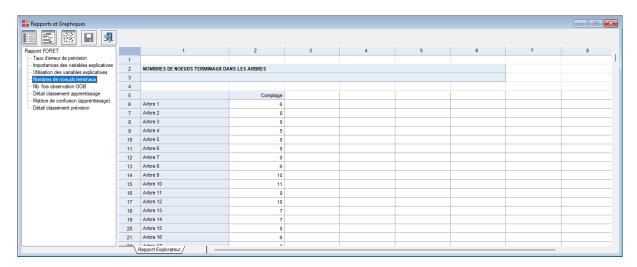
# Utilisation des variables explicatives

Ce tableau indique combien de fois chaque variable a été utilisée pour construire la forêt.



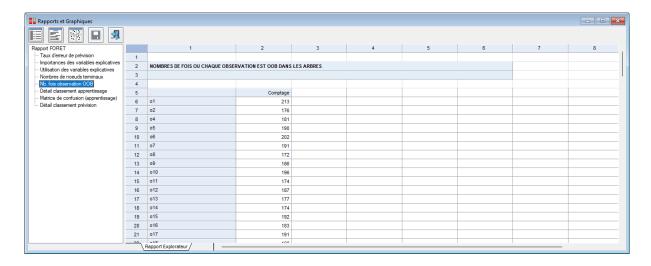
#### Nombres de nœuds terminaux dans les arbres

Ce tableau indique le nombre de nœuds terminaux dans chaque arbre de la forêt.

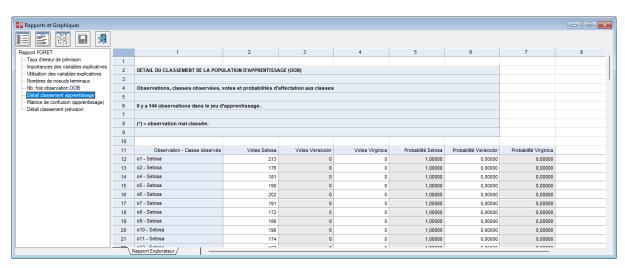


#### Nombre de fois où chaque observation est OOB dans les arbres

Pour chaque observation du jeu d'apprentissage, ce tableau indique le nombre de fois où cette observation a été OOB lors de la construction des arbres.



# Détail du classement de la population d'apprentissage

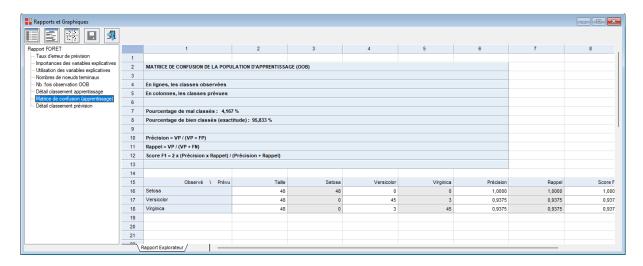


Pour chaque observation de la population d'apprentissage, les votes majoritaires pour chacune des classes et les probabilités d'affectation à chacune des classes sont affichés.

Pour chaque observation, ces votes majoritaires et ces probabilités sont calculés en utilisant uniquement les arbres dans lesquels cette observation est OOB.

Les observations mal classées sont indiquées par une étoile « \* ».

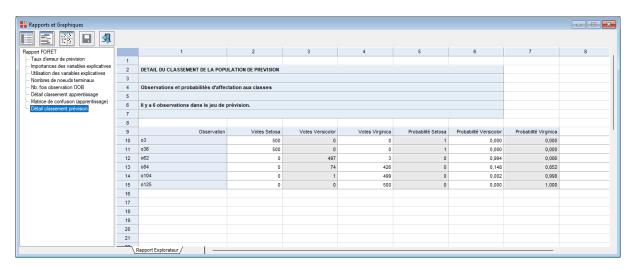
# Matrice de confusion du jeu d'apprentissage (OOB)



Pour chaque classe observée, le tableau affiche les effectifs prévus pour chacune des classes, la précision, le rappel et le score F1.

Voir le paragraphe « Calculs de la matrice de confusion et des indicateurs » pour des détails concernant ces indicateurs.

## Détail du classement de la population de prévision



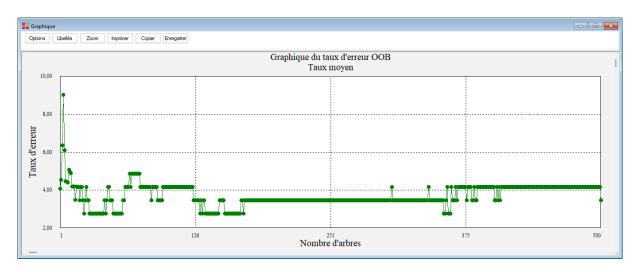
Pour chaque observation de la population de prévision, les votes majoritaires pour chacune des classes et les probabilités d'affectation à chacune des classes sont affichés.

## L'option Graphiques

Cette option permet d'obtenir divers graphiques pour l'analyse.

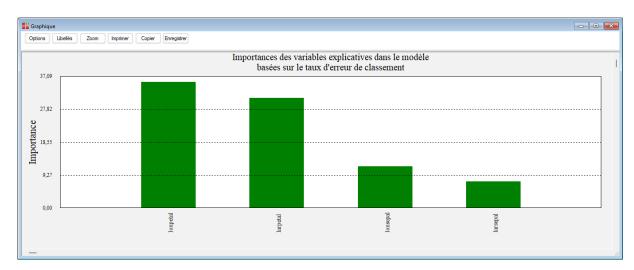
## Graphique du taux d'erreur OOB

Ce graphique affiche l'évolution du taux moyen d'erreur ou du taux d'erreur pour chacune des classes en fonction du nombre d'arbres dans la forêt.



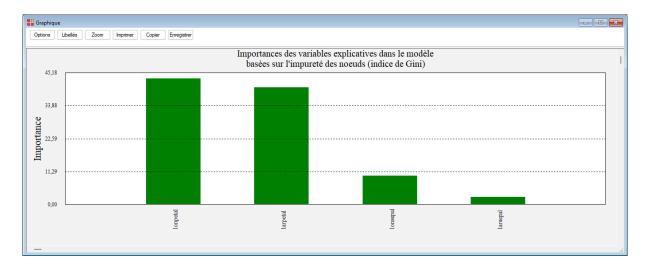
# <u>Graphique de l'importance des variables – Taux d'erreur de classement</u>

Ce graphique affiche l'importance de chaque variable prise en compte lors de la construction des arbres de la forêt. La longueur de chaque barre représente le taux d'erreur de classement. Les variables sont classées de gauche à droite par ordre décroissant d'importance.



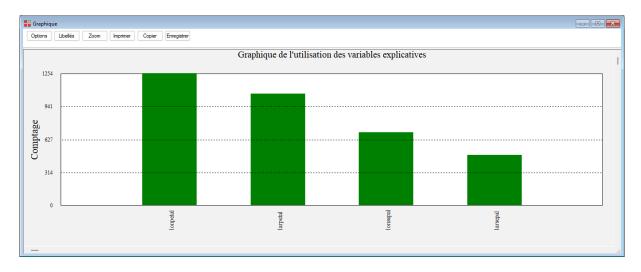
## Graphique de l'importance des variables – Impureté des nœuds (Gini)

Ce graphique affiche l'importance de chaque variable prise en compte lors de la construction des arbres de la forêt. La longueur de chaque barre représente l'impureté des nœuds (indice de Gini). Les variables sont classées de gauche à droite par ordre décroissant d'importance.



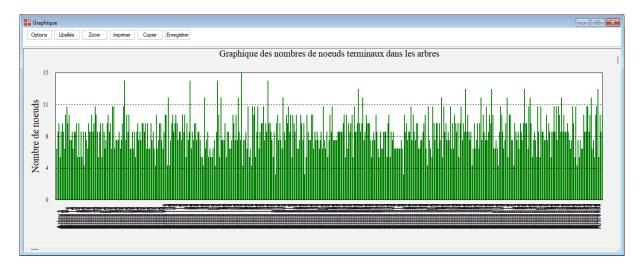
#### Graphique de l'utilisation des variables explicatives

Ce graphique indique le nombre de fois où chaque variable explicative a été sélectionnée pour la division d'un nœud lors de la construction des arbres de la forêt. Les variables sont classées de gauche à droite par ordre décroissant d'utilisation.



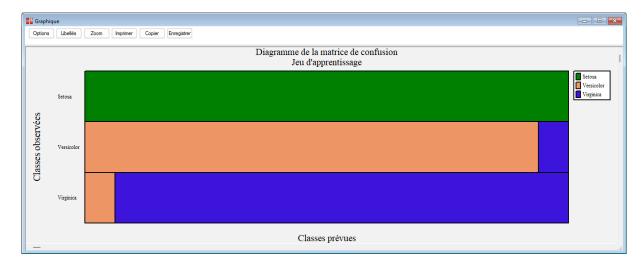
## Graphique des nombres de nœuds terminaux dans les arbres

Ce graphique indique les nombres de nœuds terminaux dans chaque arbre de la forêt.



## Graphique de la matrice de confusion

Ce graphique affiche sous la forme d'un diagramme en mosaïque les données de la matrice de confusion pour le jeu d'apprentissage dans le cas d'un arbre de décision.



#### Courbes ROC

La courbe ROC pour le jeu d'apprentissage n'est disponible que dans le cas de deux classes et pour un arbre de décision.

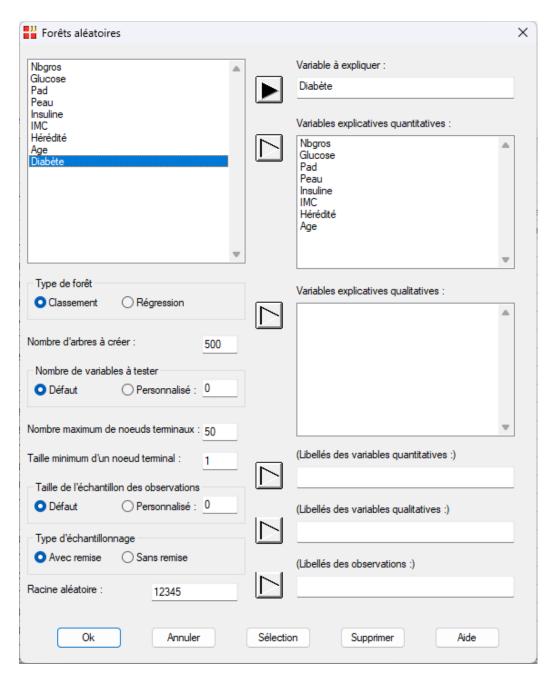
Il y a trois classes dans cet exemple et donc le graphique n'est pas proposé.

#### **Exemple 2 : Fichier DIABETES (décision)**

Nous utiliserons le fichier DIABETES pour ce deuxième exemple.

Une population de 768 femmes âgées d'au moins 21 ans, d'origine indienne Pima et vivant près de Phoenix, en Arizona, a été testée pour le diabète selon les critères de l'Organisation Mondiale de la Santé.

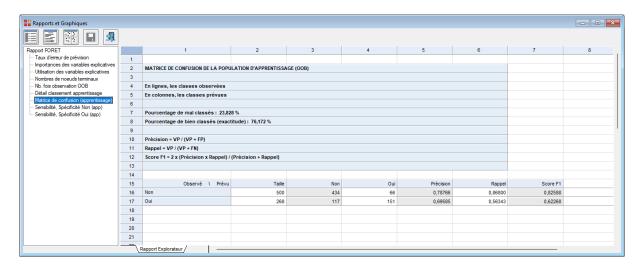
Les données ont été recueillies par l'Institut national américain du diabète et des maladies digestives et rénales.



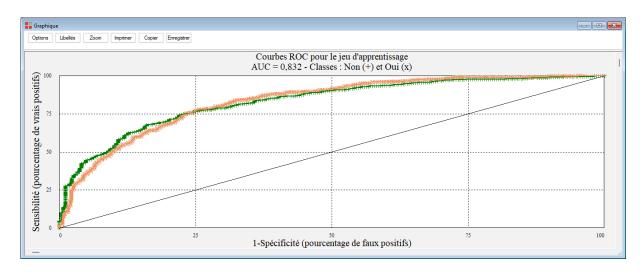
#### Neuf variables ont été collectées :

- Nbgros : nombre de grossesses
- Glucose : concentration plasmatique de glucose à 2 heures dans un test oral de tolérance au glucose
- Pad : pression artérielle diastolique (mm Hg)
- Peau : épaisseur du pli cutané du triceps (mm)
- Insuline : insuline sérique 2 heures (mu U/ml)
- IMC: indice de masse corporelle (poids en kg/(taille en m)^2)
- Hérédité : fonction généalogique du diabète
- Âge : âge en annéesDiabète : oui ou non

Renseignons la boîte de dialogue de l'analyse comme montré ci-dessus, exécutons l'analyse et visualisons la matrice de confusion (OOB).



Visualisons les courbes ROC pour le jeu d'apprentissage (OOB), disponibles dans cet exemple car la variable à expliquer possède deux modalités.



L'aire sous la courbe (AUC) nous indique l'efficacité de la forêt. Plus la valeur de cette aire est élevée, meilleures sont les performances de la forêt pour faire la distinction entre les classes Oui et Non.

#### **Exemple 3 : Fichier GRAISSE (régression)**

Pour 71 sujets féminins en bonne santé, neuf mesures anthropométriques sont utilisées pour modéliser la graisse corporelle.

Graisse graisse corporelle mesurée par DXA (Dual X Ray Absorptiometry)

Age âge (en années)
Taille tour de taille
Hanche tour de hanche
Coude largeur de coude
Genou largeur du genou

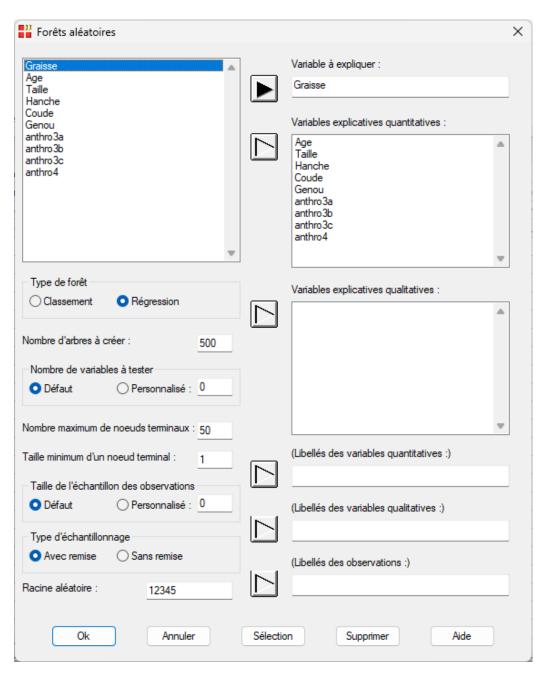
anthro3a somme du logarithme de trois mesures anthropométriques somme du logarithme de trois mesures anthropométriques somme du logarithme de trois mesures anthropométriques anthro4 somme du logarithme de trois mesures anthropométriques

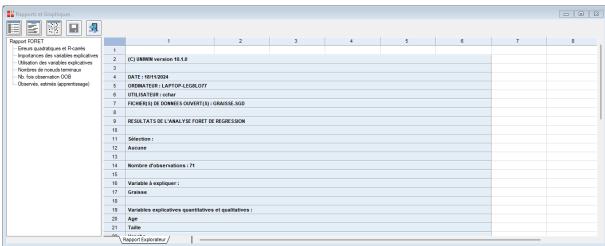
(source: Ada L. Garcia, Karen Wagner, Torsten Hothorn, Corinna Koebnick, Hans-Joachim F. Zunft and Ulrike Trippo (2005), Improved prediction of body fat by measuring skinfold thickness, circumferences, and bone breadths. *Obesity Research*, **13**(3), 626–634.)

Renseignons la boîte de dialogue comme montré ci-dessous (les variables explicatives sélectionnées sont 'Age' à 'anthro4').

Cliquons sur Ok.

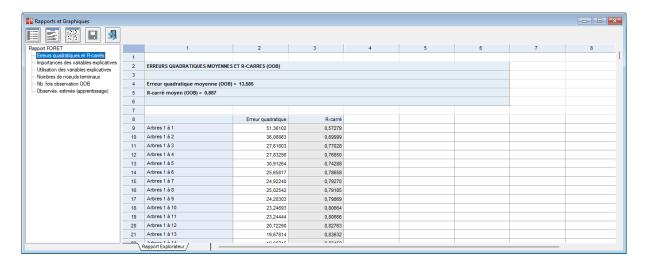
Après quelques instants, la fenêtre du rapport s'affiche.





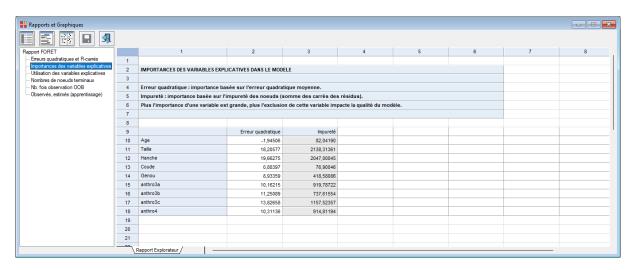
#### L'option Rapports





Ce tableau affiche l'évolution de l'erreur quadratique moyenne (OOB) et du R-carré (OOB) en fonction du nombre d'arbres dans la forêt.

## Importances des variables explicatives

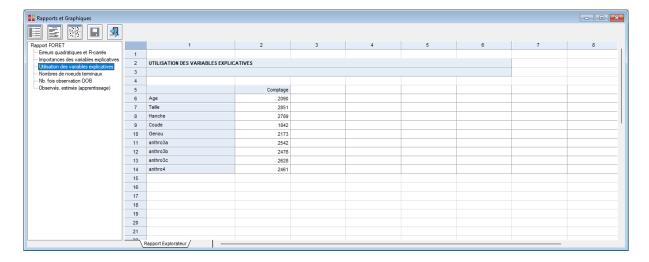


La première mesure est basée sur l'erreur quadratique moyenne. La seconde mesure est basée sur l'impureté des nœuds (somme des carrés des résidus).

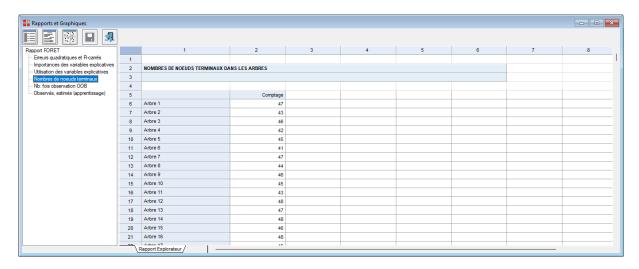
Plus l'importance d'une variable est grande, plus l'exclusion de cette variable impacte la qualité du modèle.

#### Utilisation des variables explicatives

Ce tableau indique combien de fois chaque variable a été utilisée pour construire la forêt.

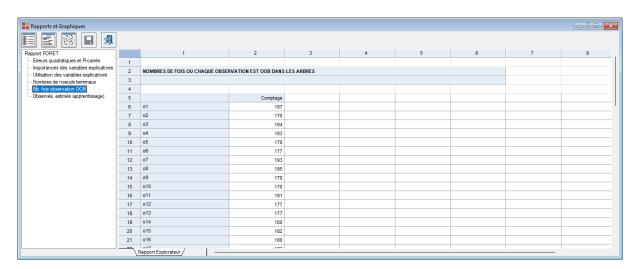


#### Nombres de nœuds terminaux dans les arbres



Ce tableau indique le nombre de nœuds terminaux dans chaque arbre de la forêt.

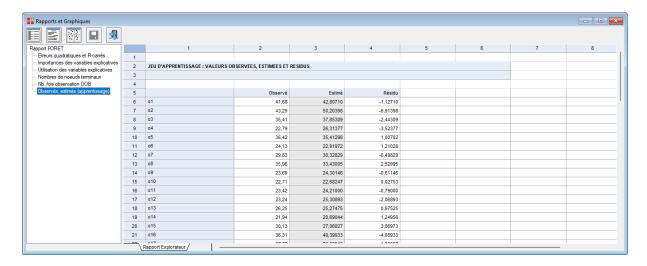
#### Nombre de fois où chaque observation est OOB dans les arbres



Pour chaque observation du jeu d'apprentissage, ce tableau indique le nombre de fois où cette observation a été OOB lors de la construction des arbres.

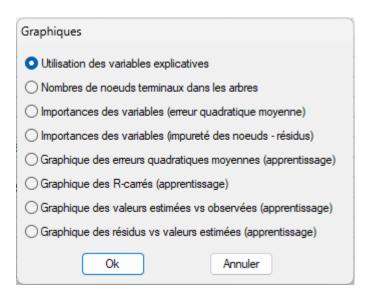
#### Valeurs observées, estimées et résidus

Ce tableau affiche pour chaque observation la valeur observée, la valeur estimée et le résidu.



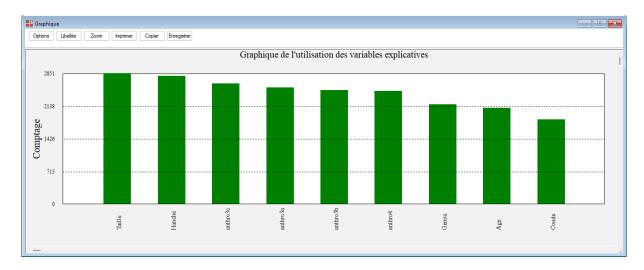
## L'option Graphiques

Cette option permet d'obtenir divers graphiques pour l'analyse.

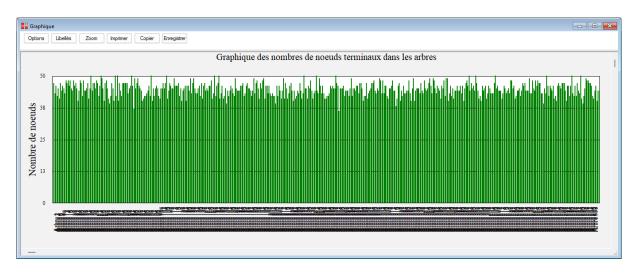


Visualisons les différents graphiques.

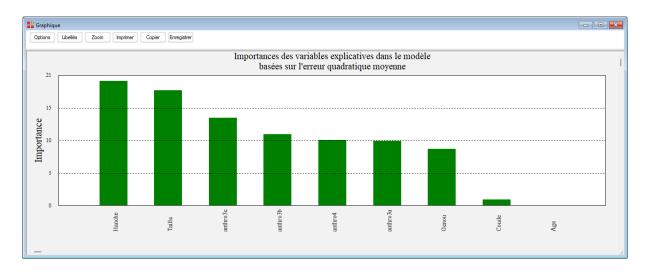
# Utilisation des variables explicatives



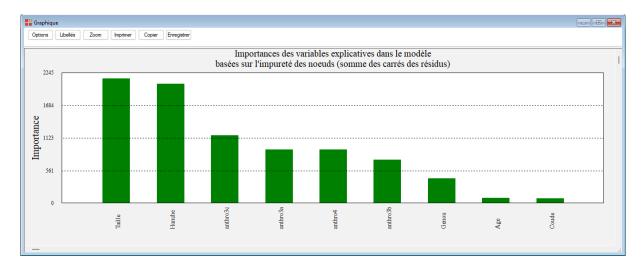
# Nombres de nœuds terminaux dans les arbres



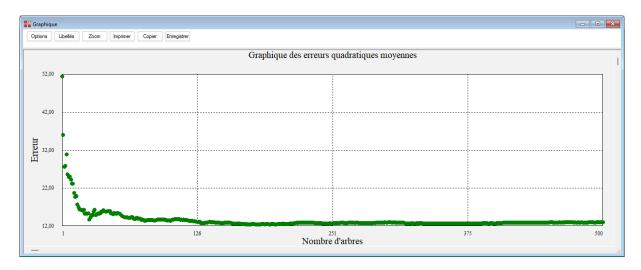
# <u>Importances des variables explicatives (erreur quadratique moyenne)</u>



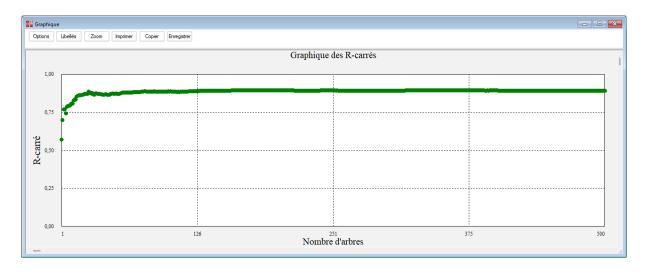
# Importances des variables explicatives (impureté des nœuds)



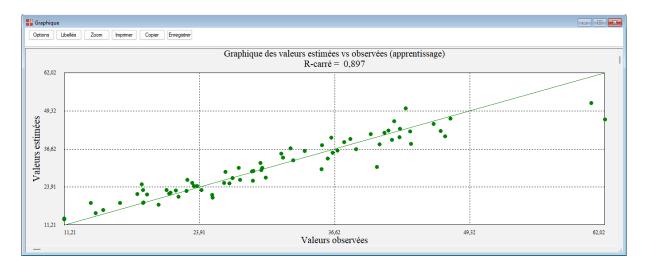
# Graphique des erreurs quadratiques moyennes (OOB)



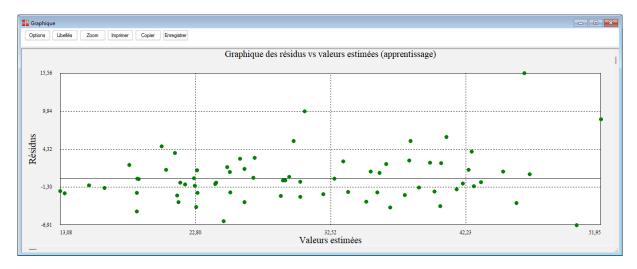
## Graphique des R-carrés (OOB)



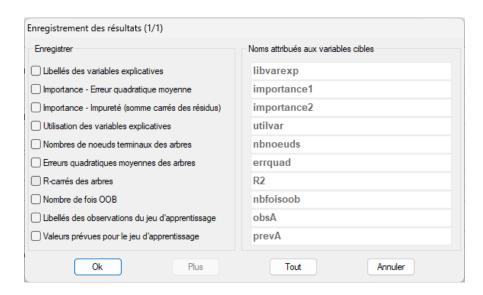
# Graphique des valeurs estimées vs observées



# Graphique des résidus vs valeurs observées



## Les résultats suivants peuvent être enregistrés :



#### **Exemple 4 : Fichier WINES3 (régression)**

Cet ensemble de données contient des informations concernant des variantes rouges et blanches du vin portugais « Vinho Verde » (source Cortez et al., 2009)

Pour des raisons de confidentialité, seules les variables physico-chimiques (entrées) et sensorielles (sortie) sont disponibles :

- Acidité fixe
- Acidité volatile
- Acide citrique
- Sucre résiduel
- Chlorure
- SO2 (teneur en dioxyde de soufre libre)
- TSO2 (teneur totale en dioxyde de soufre)
- Densité
- Hq •
- Sulfate
- Alcool
- Qualité (note entre 0 et 10)

Il y a au total 4898 observations dans ce fichier de données.

La variable 'Jeu' dans le fichier de données indique l'appartenance des observations au jeux d'apprentissage.

La variable quantitative à expliquer est la variable 'Alcool'.

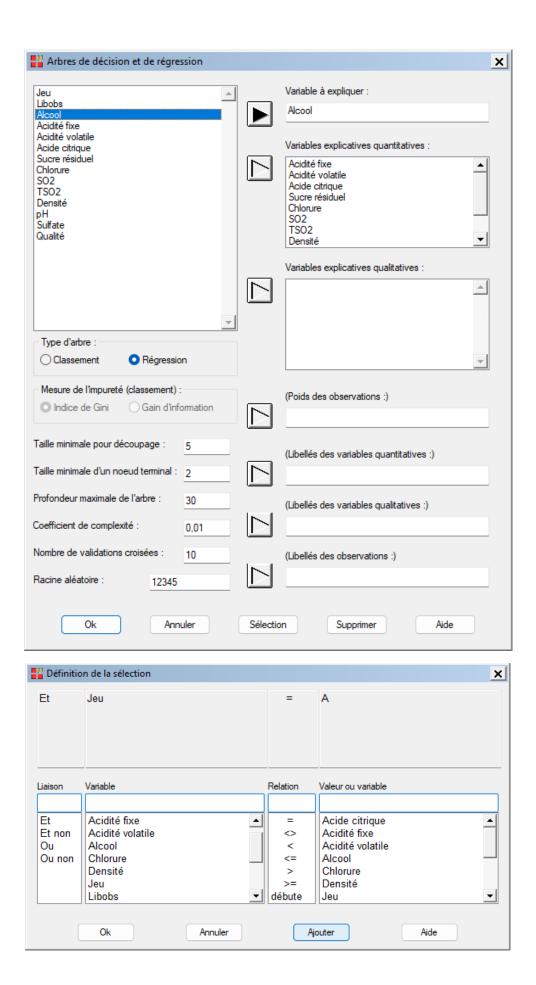
Les variables explicatives sélectionnées sont 'Acidité fixe' à 'Qualité'.

Renseignons la boîte de dialogue comme montré ci-dessous et cliquons sur Ok.

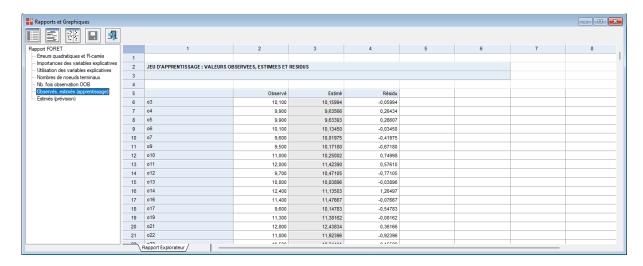
Utilisons le bouton 'Sélection' pour définir le jeu d'apprentissage puis cliquons sur Ok.

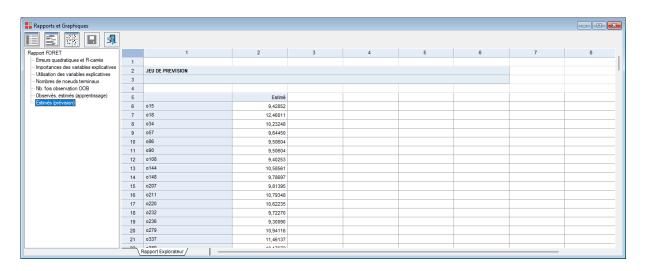
3428 observations seront ainsi utilisées comme jeu d'apprentissage et 245 comme jeu de prévision.

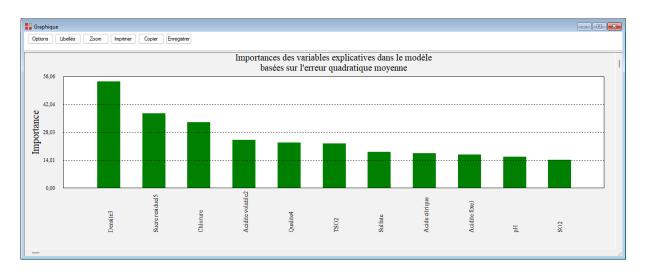
Après quelques instants, la fenêtre 'Rapports et Graphiques' montrée ci-après s'affiche.

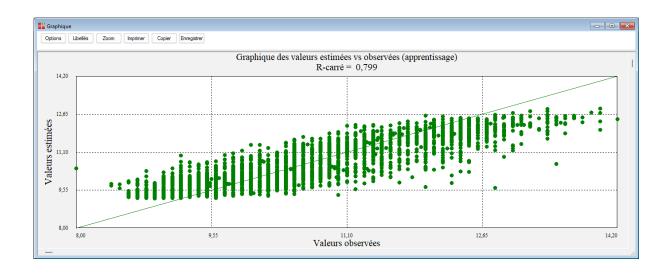


Voici quelques résultats obtenus par cette analyse.









**Exemple 5 : Fichier TITANIC (décision)** 

Pour ce quatrième exemple, nous utiliserons le fichier TITANIC pour construire un arbre de décision.

Ce fichier contient des informations concernant 714 passagers :

Statut Survie ou Décès

Classe du passager (1<sup>ère</sup>, 2<sup>ème</sup> ou 3<sup>ème</sup>)

Sexe Homme ou Femme Age Age du passager

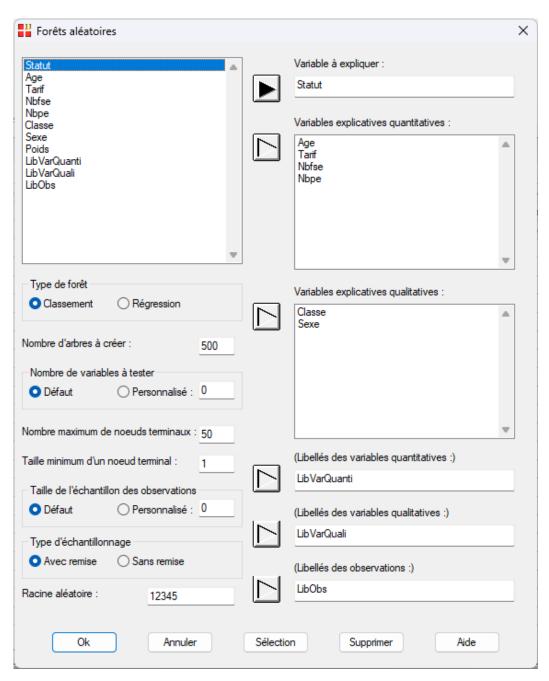
Nbfse Nombre de frères, sœurs ou époux, épouses à bord

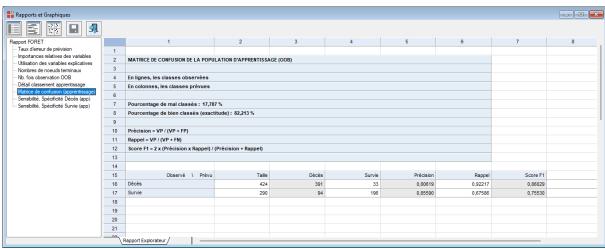
Nbpe Nombre de parents ou enfants à bord

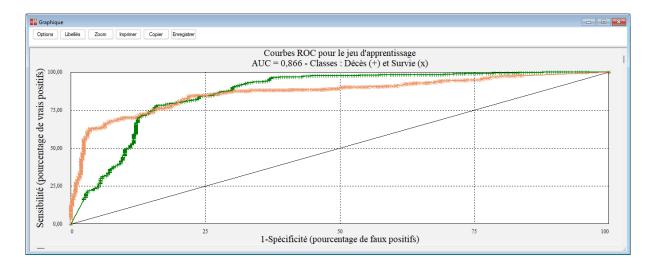
Tarif passager (en £)

Cliquons sur l'icône FORET dans le ruban Expliquer et renseignons la boîte de dialogue comme montré ci-dessous.

Après exécution de la procédure, visualisons la matrice de confusion (OOB) des données d'apprentissage et les courbes ROC associées.







Environ 82 % des passagers sont bien classés par cette analyse et l'aire sous la courbe ROC (AUC) est proche de 0,87.

<u>Note</u>: Pour comparer les performances de plusieurs méthodes d'analyse, cet exemple est traité dans les six analyses AFD, ADB, KNN, BAYES, ANN et ARBRE.

#### Calculs de la matrice de confusion et des indicateurs

Dans le cas de deux classes A et B, nous avons le tableau suivant :

	Prévu A	Prévu B	Total	% correct
Observé A	VP	FN	VP + FN	$\frac{100 * VP}{(VP + FN)}$
Observé B	FP	VN	FP + VN	$\frac{100 * VN}{(VN + FP)}$
Total	VP + FP	FN + VN	VP + FP + VN + FN	
% correct	100 * VP	100 * VN		100 * (VP + VN)
78 COITECT	(VP + FP)	(FN + VN)		(VP + VN + FP + FN)
				% total correctement prévu

Dans le cas multi-classes (plus de 2 classes), chaque classe est étudiée par rapport une classe virtuelle réunissant l'ensemble des autres classes.

#### Définition des indicateurs :

la sensibilité
 la spécificité
 VP / (VP+FN)
 VN / (VN+FP)

l'exactitude (VP+VN) / (VP+VN+FP+FN)

• la précision VP / (VP+FP)

• le rappel VP / (VP+FN)

• le score F1 2 x (précision x rappel) / (précision + rappel)

La <u>sensibilité</u> (ou rappel) indique la capacité du modèle à prévoir les vrais positifs.

La <u>spécificité</u> (ou taux de vrais négatifs) permet de mesurer la capacité du modèle à prévoir les vrais négatifs.

<u>L'exactitude</u> mesure le pourcentage de prévisions correctes par rapport à toutes les prévisions positives et négatives. Elle varie entre 0 et 1 et est sensible aux données déséquilibrées. Plus elle est proche de 1, meilleure est la prévision globale.

Le <u>rappel</u> (ou sensibilité ou taux de vrais positifs) varie entre 0 et 1 et n'est pas sensible aux données déséquilibrées. Un rappel égal à 1 indique une prévision parfaite des positifs.

La <u>précision</u> mesure le pourcentage de prévisions positives correctes. Elle varie entre 0 et 1 et n'est pas sensible aux données déséquilibrées. Une précision égale à 1 indique que tous les positifs sont prédits positifs.

Le <u>score F1</u> combine la précision et le rappel en utilisant les moyennes harmoniques. Il varie entre 0 et 1. Maximiser ce score revient à maximiser la précision et le rappel. Il n'est pas sensible aux données déséquilibrées.

#### Les variables internes créées par la procédure

Cantanii

Voici la liste des variables internes créées par la procédure. A noter que certaines des variables mentionnées ci-dessous peuvent ne pas apparaître, en fonction des options choisies.

variable	Contenu
libvarexp importance1 importance2 utilvar	Libellés des variables explicatives Importances des variables explicatives Importances des variables explicatives Utilisation des variables explicatives
nbnoeuds	Nombres de nœuds terminaux
nbfoisoob	Nombres de fois OOB

Variable

tauxerreur Taux d'erreur de prévision (décision)

errquad Erreurs quadratiques moyennes des arbres (régression)

R2 R-carrés des arbres (régression)

obsA Libellés des observations d'apprentissage

voteA Votes pour les données d'apprentissage (décision)
probA Probabilités pour les données d'apprentissage (décision)
classeA Classes prévues pour les données d'apprentissage (décision)
prevA Valeurs prévues pour les données d'apprentissage (régression)

obsP Libellés des observations de prévision

voteP Votes pour les données de prévision (décision)
probP Probabilités pour les données de prévision (décision)
classeP Classes prévues pour les données de prévision (décision)
prevP Valeurs prévues pour les données de prévision (régression)

seuilA Seuils ROC (décision) specificiteA Spécificités (décision) sensibiliteA Sensibilités (décision)

aireA Aires sous les courbes (décision)

#### Références

Breiman, L., J. H. Friedman, R. A. Olshen, et C. J. Stone. 1984. *Classification and Regression Trees*. ISBN 978-0412048418. CRC.

Documentation du package R – 'randomForest' (2024)

https://cran.r-project.org/web/packages/randomForest/randomForest.pdf