Arbres de décision

Jérémie Cabessa Laboratoire DAVID, UVSQ

- Les **arbres de décision** sont des algorithmes d'apprentissage supervisé.
- Ils peuvent être utilisés dans des contextes de régression et de classification.
- Les arbres de décisions sont en général moins performants que d'autres méthodes d'apprentissage classiques.
- Mais ils peuvent être généralisés de manières très performantes: bagging, random forests (forêts aléatoires), boosting.

- Les **arbres de décision** sont des algorithmes d'apprentissage supervisé.
- ▶ Ils peuvent être utilisés dans des contextes de *régression* et de *classification*.
- Les arbres de décisions sont en général moins performants que d'autres méthodes d'apprentissage classiques.
- Mais ils peuvent être généralisés de manières très performantes: bagging, random forests (forêts aléatoires), boosting.

- Les **arbres de décision** sont des algorithmes d'apprentissage supervisé.
- ► Ils peuvent être utilisés dans des contextes de régression et de classification.
- Les arbres de décisions sont en général moins performants que d'autres méthodes d'apprentissage classiques.
- Mais ils peuvent être généralisés de manières très performantes: bagging, random forests (forêts aléatoires), boosting.

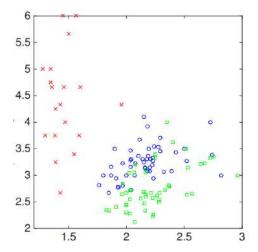
- Les **arbres de décision** sont des algorithmes d'apprentissage supervisé.
- ► Ils peuvent être utilisés dans des contextes de régression et de classification.
- Les arbres de décisions sont en général moins performants que d'autres méthodes d'apprentissage classiques.
- Mais ils peuvent être généralisés de manières très performantes: bagging, random forests (forêts aléatoires), boosting.

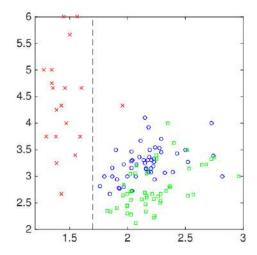
- Les arbres de régression peuvent modéliser une relation nonlinéaire entre les prédicteurs X_1, \ldots, X_p et la réponse Y.
- ▶ Idée générale: Un arbre de décision partitionne l'espace des prédicteurs $X_1 \times \cdots \times X_p$ en K régions distinctes R_1, \ldots, R_K (cellules, boxes) au sein desquelles les data se ressemblent.
- Les exemples x_i qui appartiennent à une même région R_k ont des réponses y_i qui sont proches les unes des autres.

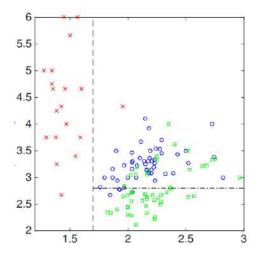
- Les arbres de régression peuvent modéliser une relation *non-linéaire* entre les prédicteurs X_1, \ldots, X_p et la réponse Y.
- ▶ Idée générale: Un arbre de décision partitionne l'espace des prédicteurs $X_1 \times \cdots \times X_p$ en K régions distinctes R_1, \ldots, R_K (cellules, boxes) au sein desquelles les data se ressemblent.
- Les exemples x_i qui appartiennent à une même région R_k ont des réponses y_i qui sont proches les unes des autres.

- Les arbres de régression peuvent modéliser une relation *non-linéaire* entre les prédicteurs X_1, \ldots, X_p et la réponse Y.
- ▶ Idée générale: Un arbre de décision partitionne l'espace des prédicteurs $X_1 \times \cdots \times X_p$ en K régions distinctes R_1, \ldots, R_K (cellules, boxes) au sein desquelles les data se ressemblent.
- Les exemples x_i qui appartiennent à une même région R_k ont des réponses y_i qui sont proches les unes des autres.

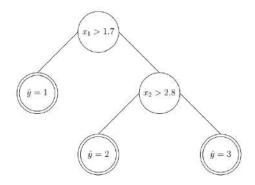
Introduction



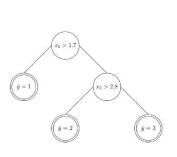


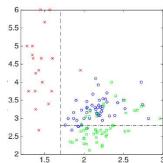


Introduction



Introduction





- Les arbres de régression (régression trees) sont utilisés lorsque la variable réponse est *quantitative* (continue).
- ▶ Un arbre de décision T correspond à une partition R_1, \ldots, R_K de l'espace des prédicteurs $X_1 \times \cdots \times X_p$.
- Comment construire cette partition?

- Les arbres de régression (régression trees) sont utilisés lorsque la variable réponse est *quantitative* (continue).
- ▶ Un arbre de décision T correspond à une partition R_1, \ldots, R_K de l'espace des prédicteurs $X_1 \times \cdots \times X_p$.
- Comment construire cette partition?

- Les arbres de régression (régression trees) sont utilisés lorsque la variable réponse est *quantitative* (continue).
- ▶ Un arbre de décision T correspond à une partition R_1, \ldots, R_K de l'espace des prédicteurs $X_1 \times \cdots \times X_p$.
- Comment construire cette partition?

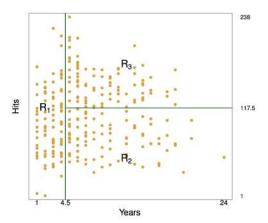
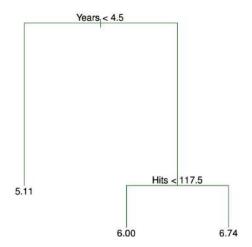


FIGURE 8.2. The three-region partition for the Hitters data set from the regression tree illustrated in Figure 8.1.

Arbres de régression



- Soit le train set $S_{\text{train}} = \{(\boldsymbol{x_i}, y_i) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R} : i = 1, \dots, N\}.$

$$RSS(R_1, ..., R_K) = \sum_{k=1}^{K} \sum_{\{i: \boldsymbol{x}_i \in R_k\}} (y_i - \bar{y}_{R_k})^{T}$$

$$\overline{n}n_k = \frac{1}{|B_k|} \sum_{(k \neq k \in B_k)} m$$

- ▶ Soit le train set $S_{\text{train}} = \{(\boldsymbol{x_i}, y_i) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R} : i = 1, \dots, N\}.$
- ▶ On cherche la partition $R_1, \ldots, R_K \subseteq X_1 \times \cdots \times X_p$ qui minimise la somme des carrés des résidus (residual sum of squares)

$$RSS(R_1, ..., R_K) = \sum_{k=1}^{K} \sum_{\{i: \boldsymbol{x_i} \in R_k\}} (y_i - \bar{y}_{R_k})^2$$

où \bar{y}_{R_k} est la moyenne des réponses associées aux x_i de la région R_k :

$$\bar{y}_{R_k} = \frac{1}{|R_k|} \sum_{\{i: \boldsymbol{x}_i \in R_k\}} y$$

- Soit le train set $S_{\text{train}} = \{(\boldsymbol{x_i}, y_i) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R} : i = 1, \dots, N\}.$
- lacktriangle On cherche la partition $R_1, \ldots, R_K \subseteq X_1 \times \cdots \times X_p$ qui minimise la somme des carrés des résidus (residual sum of squares)

$$RSS(R_1, ..., R_K) = \sum_{k=1}^{K} \sum_{\{i: \boldsymbol{x_i} \in R_k\}} (y_i - \bar{y}_{R_k})^2$$

$$\bar{y}_{R_k} = \frac{1}{|R_k|} \sum_{\{i: \boldsymbol{x}_i \in R_k\}} y$$

- ▶ Soit le train set $S_{\text{train}} = \{(\boldsymbol{x_i}, y_i) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R} : i = 1, \dots, N\}.$
- ▶ On cherche la partition $R_1, \ldots, R_K \subseteq X_1 \times \cdots \times X_p$ qui minimise la somme des carrés des résidus (residual sum of squares)

$$RSS(R_1,...,R_K) = \sum_{k=1}^{K} \sum_{\{i: \boldsymbol{x_i} \in R_k\}} (y_i - \bar{y}_{R_k})^2$$

où \bar{y}_{R_k} est la moyenne des réponses associées aux x_i de la région R_k :

$$\bar{y}_{R_k} = \frac{1}{|R_k|} \sum_{\{i: \boldsymbol{x}_i \in R_k\}} y_i$$

- ▶ Computationnellement, on ne peut pas tester toutes les partitions R_1, \ldots, R_K possibles (le problème de minimisation de la RSS est NP-hard).
- Pour N=51 points et K=6 cellules, on a $\binom{51-1}{6-1}>2K$ partitions possibles (résultat combinatoire).
- Pour construire la partition R_1, \ldots, R_K , on utilise un algorithme top-down, récursif et gourmand (greedy): recursive binary splitting.

▶ Computationnellement, on ne peut pas tester toutes les partitions R_1, \ldots, R_K possibles (le problème de minimisation de la RSS est NP-hard).

- ▶ Pour N=51 points et K=6 cellules, on a $\binom{51-1}{6-1}>2K$ partitions possibles (résultat combinatoire).
- Pour construire la partition R_1, \ldots, R_K , on utilise un algorithme top-down, récursif et gourmand (greedy): recursive binary splitting.

▶ Computationnellement, on ne peut pas tester toutes les partitions R_1, \ldots, R_K possibles (le problème de minimisation de la RSS est NP-hard).

- Pour N=51 points et K=6 cellules, on a $\binom{51-1}{6-1}>2K$ partitions possibles (résultat combinatoire).
- Pour construire la partition R_1, \ldots, R_K , on utilise un algorithme top-down, récursif et gourmand (greedy): recursive binary splitting.

- ▶ Idée générale (rappel): Un arbre de décision partitionne l'espace des prédicteurs $X_1 \times \cdots \times X_p$ en K régions distinctes R_1, \ldots, R_K (cellules, boxes) au sein desquelles les data se ressemblent.
- Les exemples x_i qui appartiennent à une même région R_k ont des réponses y_i qui sont proches les unes des autres.
- On veut minimiser la *variance* des réponses des données au sein des régions R_1, \ldots, R_K .

▶ Idée générale (rappel): Un arbre de décision partitionne l'espace des prédicteurs $X_1 \times \cdots \times X_n$ en K régions distinctes R_1, \dots, R_K

Les exemples x_i qui appartiennent à une même région R_k ont des réponses y_i qui sont proches les unes des autres.

(cellules, boxes) au sein desquelles les data se ressemblent.

On veut minimiser la *variance* des réponses des données au sein des régions R_1, \ldots, R_K .

- ▶ Idée générale (rappel): Un arbre de décision partitionne l'espace des prédicteurs $X_1 \times \cdots \times X_n$ en K régions distinctes R_1, \ldots, R_K (cellules, boxes) au sein desquelles les data se ressemblent.
- Les exemples x_i qui appartiennent à une même région R_k ont des réponses y_i qui sont proches les unes des autres.
- On veut minimiser la variance des réponses des données au sein des régions R_1, \ldots, R_K .

Pour une région R_k , la variance des réponses est donnée par

$$Var(R_k) = \frac{1}{|R_k - 1|} \sum_{\{i: x_i \in R_k\}} (y_i - \bar{y}_{R_k})^2$$

où \bar{y}_{R_k} est la moyenne des réponses associées aux x_i de la région R_k .

Ainsi, la minimisation des variances individuelles des régions R_1, \ldots, R_K correspond bien à la minimisation de la

$$RSS(R_1, ..., R_K) = \sum_{k=1}^{K} \sum_{\{i: \boldsymbol{x_i} \in R_k\}} (y_i - \bar{y}_{R_k})^2$$

Pour une région R_k , la variance des réponses est donnée par

$$Var(R_k) = \frac{1}{|R_k - 1|} \sum_{\{i: x_i \in R_k\}} (y_i - \bar{y}_{R_k})^2$$

où \bar{y}_{R_k} est la moyenne des réponses associées aux x_i de la région R_k .

lacktriangle Ainsi, la minimisation des variances individuelles des régions R_1,\dots,R_K correspond bien à la minimisation de la

$$RSS(R_1, ..., R_K) = \sum_{k=1}^{K} \sum_{\{i: \boldsymbol{x_i} \in R_k\}} (y_i - \bar{y}_{R_k})^2$$

▶ Un split de la région R est un tuple (m,s) qui partitionne R en deux sous-régions

$$R_1 = \{ \boldsymbol{x} \in R : x_m \le s \}$$
 et $R_2 = \{ \boldsymbol{x} \in R : x_m > s \}$

où m est le feature index et s le threshold.

Un split (m, s) de R en R_1 et R_2 est dit bon s'il engendre une réduction de variance, i.e.,

$$Var(R_1) + Var(R_2) < Var(R)$$
 ssi

$$VarRed(R, R_1, R_2) = Var(R) - (Var(R_1) + Var(R_2)) > 0$$

Un split (m, s) de R est dit optimal s'il engendre une réduction de variance plus grande que celle associée à tout autre split.

▶ Un *split* de la région R est un tuple (m,s) qui partitionne R en deux sous-régions

$$R_1 = \{ x \in R : x_m \le s \}$$
 et $R_2 = \{ x \in R : x_m > s \}$

où m est le feature index et s le threshold.

▶ Un split (m, s) de R en R_1 et R_2 est dit bon s'il engendre une réduction de variance, i.e.,

$$Var(R_1) + Var(R_2) < Var(R)$$
 ssi

$$VarRed(R, R_1, R_2) = Var(R) - (Var(R_1) + Var(R_2)) > 0$$

Un split (m, s) de R est dit *optimal* s'il engendre une réduction de variance plus grande que celle associée à tout autre split.

Introduction

▶ Un split de la région R est un tuple (m, s) qui partitionne R en deux sous-régions

$$R_1 = \{ x \in R : x_m \le s \}$$
 et $R_2 = \{ x \in R : x_m > s \}$

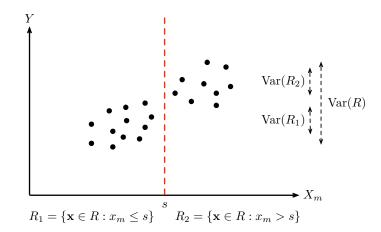
où m est le feature index et s le threshold.

▶ Un split (m,s) de R en R_1 et R_2 est dit bon s'il engendre une réduction de variance, i.e.,

$$Var(R_1) + Var(R_2) < Var(R)$$
 ssi

$$VarRed(R, R_1, R_2) = Var(R) - (Var(R_1) + Var(R_2)) > 0$$

▶ Un split (m, s) de R est dit *optimal* s'il engendre une réduction de variance plus grande que celle associée à tout autre split.



- Best split: algorithme de recherche d'un best split d'une region R d'un dataset.
- On test tous les splits possibles (m,s) de R en R_1 et R_2 .
- On garde celui qui est associé à la plus grande réduction de variance $VarRed(R, R_1, R_2)$.

- Best split: algorithme de recherche d'un best split d'une region R d'un dataset.
- On test tous les splits possibles (m, s) de R en R_1 et R_2 .
- On garde celui qui est associé à la plus grande réduction de variance $VarRed(R, R_1, R_2)$.

- Best split: algorithme de recherche d'un best split d'une region R d'un dataset.
- On test tous les splits possibles (m,s) de R en R_1 et R_2 .
- On garde celui qui est associé à la plus grande réduction de variance $VarRed(R, R_1, R_2)$.

```
best var red = -\infty
```

```
best var red = -\infty
for m = 1 to nb features do
```

```
best var red = -\infty
for m = 1 to nb features do
    for s in possible values(X_m) do
```

```
best var red = -\infty
for m = 1 to nb features do
    for s in possible values(X_m) do
        split = (m, s)
```

```
best var red = -\infty
for m = 1 to nb features do
    for s in possible values(X_m) do
        split = (m, s)
        data 1, data r = split data(dataset, split)
```

```
best var red = -\infty
for m = 1 to nb features do
    for s in possible values(X_m) do
        split = (m, s)
        data 1, data r = split data(dataset, split)
        if data 1 and data r not empty then
```

INTRODUCTION

```
best var red = -\infty
for m = 1 to nb features do
    for s in possible values(X_m) do
        split = (m, s)
        data 1, data r = split data(dataset, split)
        if data 1 and data r not empty then
            var red = variance reduction(dataset, data 1, data r)
```

INTRODUCTION

```
best var red = -\infty
for m = 1 to nb features do
    for s in possible values(X_m) do
        split = (m, s)
        data 1, data r = split data(dataset, split)
        if data 1 and data r not empty then
            var red = variance reduction(dataset, data 1, data r)
            if var red > best var red then
```

INTRODUCTION

```
best var red = -\infty
for m = 1 to nb features do
    for s in possible values(X_m) do
        split = (m, s)
        data 1, data r = split data(dataset, split)
        if data 1 and data r not empty then
            var red = variance reduction(dataset, data 1, data r)
            if var red > best var red then
                best split = split
```

```
best var red = -\infty
for m = 1 to nb features do
    for s in possible values(X_m) do
         split = (m, s)
         data 1, data r = split data(dataset, split)
         if data 1 and data r not empty then
              var red = variance reduction(dataset, data 1, data r)
              if var red > best var red then
                  best split = split
                  \verb|best| | \verb|var| | | \verb|red| = \verb|var| | | \verb|red| |
```

```
best var red = -\infty
for m = 1 to nb features do
    for s in possible values(X_m) do
         split = (m, s)
         data 1, data r = split data(dataset, split)
         if data 1 and data r not empty then
              var red = variance reduction(dataset, data 1, data r)
              if var red > best var red then
                  best split = split
                  \verb|best| | \verb|var| | | \verb|red| = \verb|var| | | \verb|red| |
              end
         end
    end
end
```

```
Algorithm 1: best split(dataset)
best var red = -\infty
for m = 1 to nb features do
    for s in possible values(X_m) do
         split = (m, s)
         data 1, data r = split data(dataset, split)
         if data 1 and data r not empty then
              var red = variance reduction(dataset, data 1, data r)
             if var red > best var red then
                  best split = split
                  \verb|best| | \verb|var| | | \verb|red| = \verb|var| | | \verb|red| |
              end
         end
    end
end
return best split
```

- Recursive Binary Splitting: algorithme récursif qui construit l'arbre de décision de haut en bas.

- Recursive Binary Splitting: algorithme récursif qui construit l'arbre de décision de haut en bas.
- On commence avec le dataset complet R.

- ► Recursive Binary Splitting: algorithme récursif qui construit l'arbre de décision de haut en bas.
- On commence avec le dataset complet R.
- On cherche son best split (m, s).
- Ce split partitionne R en R_1 (fils gauche) et R_2 (fils droit).
- Récursivement, on cherche les best splits et les partitions associées pour les fils gauche et droit R_1 et R_2 de R.
- On s'arrête lorsque la région R_1 ou R_2 est trop petite, ou lorsqu'une profondeur maximale est atteinte (condition d'arrêt).

- ► Recursive Binary Splitting: algorithme récursif qui construit l'arbre de décision de haut en bas.
- On commence avec le dataset complet R.
- On cherche son best split (m, s).
- Ce split partitionne R en R_1 (fils gauche) et R_2 (fils droit).
- Récursivement, on cherche les best splits et les partitions associées pour les fils gauche et droit R₁ et R₂ de R.
- On s'arrête lorsque la région R_1 ou R_2 est trop petite, ou lorsqu'une profondeur maximale est atteinte (condition d'arrêt).

- ▶ Recursive Binary Splitting: algorithme récursif qui construit l'arbre de décision de haut en bas.
- On commence avec le dataset complet R.
- On cherche son best split (m, s).
- Ce split partitionne R en R_1 (fils gauche) et R_2 (fils droit).
- Récursivement, on cherche les best splits et les partitions associées pour les fils gauche et droit R_1 et R_2 de R.
- On s'arrête lorsque la région R_1 ou R_2 est trop petite, ou lorsqu'une profondeur maximale est atteinte (condition d'arrêt).

- ▶ Recursive Binary Splitting: algorithme récursif qui construit l'arbre de décision de haut en bas.
- On commence avec le dataset complet R.
- On cherche son best split (m, s).
- Ce split partitionne R en R_1 (fils gauche) et R_2 (fils droit).
- Récursivement, on cherche les best splits et les partitions associées pour les fils gauche et droit R_1 et R_2 de R.
- On s'arrête lorsque la région R_1 ou R_2 est trop petite, ou lorsqu'une profondeur maximale est atteinte (condition d'arrêt).

```
Algorithm 2: build_tree(dataset, depth = 0)

num_samples = len(dataset)

if num_samples \geq \min_samples and \depth \leq \max_depth \text{then}

split = \text{best_split}(\dataset)

if \split[var_reduction] \geq 0 \text{ then}

subtree _ left = \text{build_tree}(\split[\dataset_left], \depth + 1)

subtree _ right = \text{build_tree}(\split[\dataset_left], \depth + 1)

return DecTree(\split, \subtree_left, \subtree_right)

else

value = leaf_value(\dataset)

return DecTree(\split)
```

```
Algorithm 2: build_tree(dataset, depth = 0)

num_samples = len(dataset)

if num_samples \geq min_samples and depth \leq max_depth then

split = best_split(dataset)

if split[var_reduction] \geq 0 then

subtree_left = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)

subtree_right = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)

return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else

value = leaf_value(dataset)

return DecTree(value)
```

```
Algorithm 2: build_tree(dataset, depth = 0)

num_samples = len(dataset)

if num_samples \geq min_samples and depth \leq max_depth then

| split = best_split(dataset)
| if split[var_reduction] \geq 0 then

| subtree_left = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)
| subtree_right = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)
| return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else

| value = leaf_value(dataset)
| return DecTree(value)
```

```
Algorithm 2: build_tree(dataset, depth = 0)

num_samples = len(dataset)

if num_samples \geq min_samples and depth \leq max_depth then

| split = best_split(dataset)
| if split[var_reduction] \geq 0 then

| subtree_left = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)
| subtree_right = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)
| return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else

| value = leaf_value(dataset)
| return DecTree(value)
```

```
Algorithm 2: build_tree(dataset, depth = 0)

num_samples = len(dataset)

if num_samples \geq min_samples and depth \leq max_depth then

| split = best_split(dataset)
| if split[var_reduction] \geq 0 then

| subtree_left = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)
| subtree_right = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)
| return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else

| value = leaf_value(dataset)
| return DecTree(value)
```

Introduction

```
Algorithm 2: build_tree(dataset, depth = 0)

num_samples = len(dataset)

if num_samples \geq min_samples and depth \leq max_depth then

split = best_split(dataset)

if split[var_reduction] \geq 0 then

subtree_left = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)

subtree_right = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)

return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else

value = leaf_value(dataset)

return DecTree(value)
```

```
Algorithm 2: build_tree(dataset, depth = 0)

num_samples = len(dataset)

if num_samples \geq min_samples and depth \leq max_depth then

| split = best_split(dataset)
| if split[var_reduction] \geq 0 then
| subtree_left = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)
| subtree_right = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)
| return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else
| value = leaf_value(dataset)
| return DecTree(value)
```

```
Algorithm 2: build_tree(dataset, depth = 0)

num_samples = len(dataset)

if num_samples \geq min_samples and depth \leq max_depth then

| split = best_split(dataset)
| if split[var_reduction] \geq 0 then

| subtree_left = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)
| subtree_right = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)
| return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else

| value = leaf_value(dataset)
| return DecTree(value)
```

```
Algorithm 2: build_tree(dataset, depth = 0)

num_samples = len(dataset)

if num_samples > min_samples and depth < max_depth then

| split = best_split(dataset)
| if split[var_reduction] > 0 then

| subtree_left = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)
| subtree_right = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)
| return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else

| value = leaf_value(dataset)
| return DecTree(value)
```

- Une fois l'arbre de décision construit (par Recursive Binary Splitting), la prédiction \hat{y} associée à la data x est obtenue de la manière suivante:
- ▶ On cherche la région R_k de l'espace des features $X_1 \times \cdots \times X_p$ à laquelle appartient x;
- ▶ On prend comme prédiction \hat{y} la moyenne des targets de cette région R_k :

$$\hat{y} = \frac{1}{|R_k|} \sum_{\{i: \boldsymbol{x_i} \in R_k\}} y$$

- Une fois l'arbre de décision construit (par Recursive Binary Splitting), la prédiction \hat{y} associée à la data x est obtenue de la manière suivante:
- ▶ On cherche la région R_k de l'espace des features $X_1 \times \cdots \times X_n$ à laquelle appartient x;

$$\hat{y} = \frac{1}{|R_k|} \sum_{\{i: \boldsymbol{x_i} \in R_k\}} y$$

- Une fois l'arbre de décision construit (par Recursive Binary Splitting), la prédiction \hat{y} associée à la data x est obtenue de la manière suivante:
- ▶ On cherche la région R_k de l'espace des features $X_1 \times \cdots \times X_p$ à laquelle appartient x;
- ▶ On prend comme prédiction \hat{y} la moyenne des targets de cette région R_k :

$$\hat{y} = \frac{1}{|R_k|} \sum_{\{i: \boldsymbol{x}_i \in R_k\}} y_i$$

ARBRES DE CLASSIFICATION (CLASSIFICATION TREES)

- Les arbres de classification (classification trees) sont utilisés lorsque la variable réponse est *qualitative* (discrète).
- ▶ Un arbre de classification T correspond aussi à une partition R_1, \ldots, R_K de l'espace des prédicteurs $X_1 \times \cdots \times X_p$.
- Le principe est très similaire à celui d'un arbre de régression.

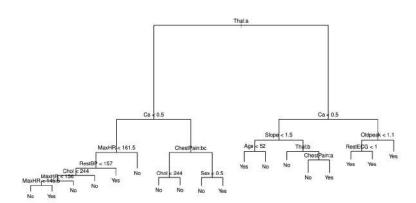
ARBRES DE CLASSIFICATION (CLASSIFICATION TREES)

- Les arbres de classification (classification trees) sont utilisés lorsque la variable réponse est *qualitative* (discrète).
- ▶ Un arbre de classification T correspond aussi à une partition R_1, \ldots, R_K de l'espace des prédicteurs $X_1 \times \cdots \times X_p$.
- Le principe est très similaire à celui d'un arbre de régression.

ARBRES DE CLASSIFICATION (CLASSIFICATION TREES)

- Les arbres de classification (classification trees) sont utilisés lorsque la variable réponse est *qualitative* (discrète).
- ▶ Un arbre de classification T correspond aussi à une partition R_1, \ldots, R_K de l'espace des prédicteurs $X_1 \times \cdots \times X_p$.
- Le principe est très similaire à celui d'un arbre de régression.

Arbres de Classification



- ▶ Soit le train set $S_{\text{train}} = \{(\boldsymbol{x_i}, y_i) \in \mathbb{R}^p \times \mathcal{C} : i = 1, \dots, N\}.$
- ▶ On cherche la partition $R_1, \ldots, R_K \subseteq X_1 \times \cdots \times X_p$ qui minimise une certaine fonction de loss.
- Cette fois, on ne considère pas la somme des carrés des résidus (residual sum of squares) $RSS(R_1, ..., R_K)$.
- On aimerait que les régions R_1, \ldots, R_K soient le plus *pures* (homogènes) possible en termes de leur targets y_i .

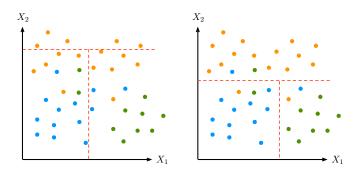
- Soit le train set $S_{\text{train}} = \{(\boldsymbol{x_i}, y_i) \in \mathbb{R}^p \times \mathcal{C} : i = 1, \dots, N\}.$
- ▶ On cherche la partition $R_1, \ldots, R_K \subseteq X_1 \times \cdots \times X_p$ qui minimise une certaine fonction de loss.

- Soit le train set $S_{\text{train}} = \{(\boldsymbol{x_i}, y_i) \in \mathbb{R}^p \times \mathcal{C} : i = 1, \dots, N\}.$
- ▶ On cherche la partition $R_1, \ldots, R_K \subseteq X_1 \times \cdots \times X_p$ qui minimise une certaine fonction de loss.
- Cette fois, on ne considère pas la somme des carrés des résidus (residual sum of squares) $RSS(R_1,\ldots,R_K)$.

ARBRES DE CLASSIFICATION

- Soit le train set $S_{\text{train}} = \{(\boldsymbol{x_i}, y_i) \in \mathbb{R}^p \times \mathcal{C} : i = 1, \dots, N\}.$
- ▶ On cherche la partition $R_1, \ldots, R_K \subseteq X_1 \times \cdots \times X_p$ qui minimise une certaine fonction de loss
- Cette fois, on ne considère pas la somme des carrés des résidus (residual sum of squares) $RSS(R_1,\ldots,R_K)$.
- \triangleright On aimerait que les régions R_1, \ldots, R_K soient le plus pures (homogènes) possible en termes de leur targets y_i .

La partition de droite est plus pure (homogène) que celle de gauche.



Introduction

La pureté d'une région R_k est donnée par son indice de Gini ou son entropie.

$$Gini(R_k) = \sum_{c=1}^{C} \hat{p}_{kc} (1 - \hat{p}_{kc})$$

$$Ent(R_k) = -\sum_{c=1}^{C} \hat{p}_{kc} \log(\hat{p}_{kc})$$

où \hat{p}_{kc} est la proportion des y_i égaux à c dans la région R_k .

La pureté d'une région R_k est donnée par son *indice de Gini* ou son *entropie*.

$$Gini(R_k) = \sum_{c=1}^{C} \hat{p}_{kc} (1 - \hat{p}_{kc})$$

$$Ent(R_k) = -\sum_{c=1}^{C} \hat{p}_{kc} \log(\hat{p}_{kc})$$

où \hat{p}_{kc} est la proportion des y_i égaux à c dans la région R_k .

▶ Remarque: plus la région R_k est *pure*, plus les \hat{p}_{kc} successifs sont proches de 0 ou de 1, et donc plus $\mathrm{Gini}(R_k)$ et $\mathrm{Ent}(R_k)$ sont proches de 0.

ARBRES DE CLASSIFICATION

Ainsi, la minimisation des indices de Gini ou des entropies des régions R_1, \ldots, R_K correspond à la minimisation des fonctions de coût suivantes:

$$Gini(R_1, ..., R_K) = \sum_{k=1}^{K} \sum_{c=1}^{C} \hat{p}_{kc} (1 - \hat{p}_{kc})$$

$$Entropy(R_1, ..., R_K) = -\sum_{k=1}^{K} \sum_{c=1}^{C} \hat{p}_{kc} \log(\hat{p}_{kc})$$

▶ Un *split* de la région R est un tuple (m,s) qui partitionne R en deux sous-régions

$$R_1 = \{ \boldsymbol{x} \in R : x_m \le s \} \text{ et } R_2 = \{ \boldsymbol{x} \in R : x_m > s \}$$

où m est le feature index et s le threshold.

▶ Un split (m, s) de R en R_1 et R_2 est bon s'il engendre un gain informationnel, c'est-à-dire une réduction de l'entropie (ou de l'indice de Gini):

$$\operatorname{Ent}(R_1) + \operatorname{Ent}(R_2) < \operatorname{Ent}(R)$$
 ssi

$$\operatorname{EntRed}(R, R_1, R_2) = \operatorname{Ent}(R) - (\operatorname{Ent}(R_1) + \operatorname{Ent}(R_2)) > 0$$

Un split (m,s) de R est dit *optimal* s'il engendre un gain informationnel plus grand que celui associé à tout autre split.

▶ Un *split* de la région R est un tuple (m,s) qui partitionne R en deux sous-régions

$$R_1 = \{ x \in R : x_m \le s \} \text{ et } R_2 = \{ x \in R : x_m > s \}$$

où m est le feature index et s le threshold.

▶ Un split (m,s) de R en R_1 et R_2 est bon s'il engendre un gain informationnel, c'est-à-dire une réduction de l'entropie (ou de l'indice de Gini):

$$\operatorname{Ent}(R_1) + \operatorname{Ent}(R_2) < \operatorname{Ent}(R)$$
 ssi

$$\operatorname{EntRed}(R, R_1, R_2) = \operatorname{Ent}(R) - (\operatorname{Ent}(R_1) + \operatorname{Ent}(R_2)) > 0$$

Un split (m,s) de R est dit *optimal* s'il engendre un gain informationnel plus grand que celui associé à tout autre split.

ARBRES DE CLASSIFICATION

Introduction

▶ Un split de la région R est un tuple (m, s) qui partitionne R en deux sous-régions

$$R_1 = \{ x \in R : x_m \le s \} \text{ et } R_2 = \{ x \in R : x_m > s \}$$

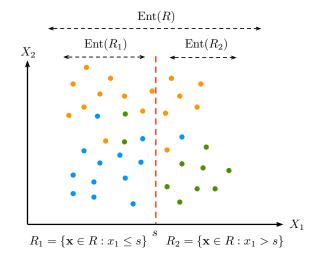
où m est le feature index et s le threshold.

▶ Un split (m, s) de R en R_1 et R_2 est bon s'il engendre un gain informationnel, c'est-à-dire une réduction de l'entropie (ou de l'indice de Gini):

$$\operatorname{Ent}(R_1) + \operatorname{Ent}(R_2) < \operatorname{Ent}(R)$$
 ssi

$$\operatorname{EntRed}(R, R_1, R_2) = \operatorname{Ent}(R) - (\operatorname{Ent}(R_1) + \operatorname{Ent}(R_2)) > 0$$

▶ Un split (m, s) de R est dit optimal s'il engendre un gain informationnel plus grand que celui associé à tout autre split.



- Best split: algorithme de recherche d'un best split d'une region R d'un dataset.
- On test tous les splits possibles (m,s) de R en R_1 et R_2 .
- On garde celui qui est associé à la plus grande réduction d'entropie $\operatorname{EntRed}(R,R_1,R_2)$.

- Best split: algorithme de recherche d'un best split d'une region R d'un dataset.
- On test tous les splits possibles (m, s) de R en R_1 et R_2 .
- On garde celui qui est associé à la plus grande réduction d'entropie $\operatorname{EntRed}(R, R_1, R_2)$.

- Best split: algorithme de recherche d'un best split d'une region R d'un dataset.
- On test tous les splits possibles (m,s) de R en R_1 et R_2 .
- On garde celui qui est associé à la plus grande réduction d'entropie $\operatorname{EntRed}(R,R_1,R_2)$.

INTRODUCTION

ARBRES DE CLASSIFICATION

```
best info gain =-\infty
```

INTRODUCTION

```
best info gain =-\infty
 \mbox{ for } \mbox{ m} = 1 \mbox{ to nb } \mbox{ features } \mbox{ do}
```

```
best info gain =-\infty
for m = 1 to nb features do
    for s in possible values(X_m) do
```

```
best info gain =-\infty
 \mbox{ for } \mbox{ m} = 1 \mbox{ to nb } \mbox{ features } \mbox{ do} 
      for s in possible values(X_m) do
            split = (m, s)
```

```
best info gain =-\infty
for m = 1 to nb features do
    for s in possible values(X_m) do
        split = (m, s)
        data 1, data r = split data(dataset, split)
```

```
best info gain =-\infty
 \mbox{ for } \mbox{ m} = 1 \mbox{ to nb } \mbox{ features } \mbox{ do} 
     for s in possible values(X_m) do
          split = (m, s)
          data 1, data r = split data(dataset, split)
          if data 1 and data r not empty then
```

```
best info gain =-\infty
for m = 1 to nb features do
    for s in possible values(X_m) do
        split = (m, s)
        data 1, data r = split data(dataset, split)
        if data 1 and data r not empty then
            info gain = information gain(dataset, data 1, data r)
```

```
best info gain =-\infty
for m = 1 to nb features do
    for s in possible values(X_m) do
        split = (m, s)
        data 1, data r = split data(dataset, split)
        if data 1 and data r not empty then
            info gain = information gain(dataset, data 1, data r)
            if info gain > best info gain then
```

```
best info gain =-\infty
for m = 1 to nb features do
    for s in possible values(X_m) do
        split = (m, s)
        data 1, data r = split data(dataset, split)
        if data 1 and data r not empty then
            info gain = information gain(dataset, data 1, data r)
            if info gain > best info gain then
                best split = split
```

```
best info gain =-\infty
for m = 1 to nb features do
    for s in possible values(X_m) do
        split = (m, s)
        data 1, data r = split data(dataset, split)
        if data 1 and data r not empty then
            info gain = information gain(dataset, data 1, data r)
            if info gain > best info gain then
                best split = split
                best info gain = info gain
```

```
best info gain =-\infty
for m = 1 to nb features do
    for s in possible values(X_m) do
        split = (m, s)
        data 1, data r = split data(dataset, split)
        if data 1 and data r not empty then
            info gain = information gain(dataset, data 1, data r)
            if info gain > best info gain then
                best split = split
                best info gain = info gain
            end
        end
    end
end
```

```
Algorithm 3: best split(dataset)
best info gain =-\infty
for m = 1 to nb features do
    for s in possible values(X_m) do
        split = (m, s)
        data 1, data r = split data(dataset, split)
        if data 1 and data r not empty then
            info gain = information gain(dataset, data 1, data r)
            if info gain > best info gain then
                best split = split
                best info gain = info gain
            end
        end
    end
end
return best split
```

▶ Recursive Binary Splitting: algorithme récursif qui construit l'arbre de décision de haut en bas.

- ullet On commence avec le dataset complet R
- On cherche son best split (m, s).
- Ce split partitionne R en R_1 (fils gauche) et R_2 (fils droit).
- Récursivement, on cherche les best splits et les partitions associées pour les fils gauche et droit R_1 et R_2 de R.
- On s'arrête lorsque la région R_1 ou R_2 est trop petite, ou lorsqu'une profondeur maximale est atteinte (condition d'arrêt).

- ► Recursive Binary Splitting: algorithme récursif qui construit l'arbre de décision de haut en bas.
- On commence avec le dataset complet R.
- On cherche son best split (m, s)
- Ce split partitionne R en R_1 (fils gauche) et R_2 (fils droit).
- Récursivement, on cherche les best splits et les partitions associées pour les fils gauche et droit R₁ et R₂ de R.
- On s'arrête lorsque la région R_1 ou R_2 est trop petite, ou lorsqu'une profondeur maximale est atteinte (condition d'arrêt).

- Recursive Binary Splitting: algorithme récursif qui construit l'arbre de décision de haut en bas.
 - On commence avec le dataset complet R.
 - On cherche son best split (m, s).

- ▶ Recursive Binary Splitting: algorithme récursif qui construit l'arbre de décision de haut en bas.
- On commence avec le dataset complet R.
- On cherche son best split (m, s).
- Ce split partitionne R en R_1 (fils gauche) et R_2 (fils droit).
- Récursivement, on cherche les best splits et les partitions associées pour les fils gauche et droit R_1 et R_2 de R.
- On s'arrête lorsque la région R_1 ou R_2 est trop petite, ou lorsqu'une profondeur maximale est atteinte (condition d'arrêt).

- Recursive Binary Splitting: algorithme récursif qui construit l'arbre de décision de haut en bas.
- On commence avec le dataset complet R.
- On cherche son best split (m, s).
- Ce split partitionne R en R_1 (fils gauche) et R_2 (fils droit).
- Récursivement, on cherche les best splits et les partitions associées pour les fils gauche et droit R_1 et R_2 de R.

► Recursive Binary Splitting: algorithme récursif qui construit l'arbre de décision de haut en bas.

- On commence avec le dataset complet R.
- On cherche son best split (m, s).
- Ce split partitionne R en R_1 (fils gauche) et R_2 (fils droit).
- Récursivement, on cherche les best splits et les partitions associées pour les fils gauche et droit R_1 et R_2 de R.
- On s'arrête lorsque la région R_1 ou R_2 est trop petite, ou lorsqu'une profondeur maximale est atteinte (condition d'arrêt).

```
Algorithm 4: build_tree(dataset, depth = 0)

num_samples = len(dataset)

if num_samples \geq min_samples and depth \leq max_depth then

split = best_split(dataset)

if split[info_gain] \geq 0 then

subtree_left = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)

subtree_right = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)

return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else

value = leaf_value(dataset)

return DecTree(unlug)
```

```
Algorithm 4: build_tree(dataset, depth = 0)

num_samples = len(dataset)

if num_samples \geq min_samples and depth \leq max_depth then

split = best_split(dataset)

if split[info_gain] \geq 0 then

subtree_left = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)

subtree_right = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)

return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else

value = leaf_value(dataset)

return DecTree(value)
```

```
Algorithm 4: build_tree(dataset, depth = 0)

num_samples = len(dataset)

if num_samples \geq min_samples and depth \leq max_depth then

split = best_split(dataset)

if split[info_gain] \geq 0 then

subtree_left = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)

subtree_right = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)

return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else

value = leaf_value(dataset)

return DecTree(value)
```

```
Algorithm 4: build_tree(dataset, depth = 0)

num_samples = len(dataset)

if num_samples \geq min_samples and depth \leq max_depth then

split = best_split(dataset)

if split[info_gain] \geq 0 then

subtree_left = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)

subtree_right = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)

return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else

value = leaf_value(dataset)

return DecTree(value)
```

Arbres de Classification

```
Algorithm 4: build_tree(dataset, depth = 0)

num_samples = len(dataset)

if num_samples \geq min_samples and depth \leq max_depth then

split = best_split(dataset)

if split[info_gain] \geq 0 then

subtree_left = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)

subtree_right = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)

return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else

value = leaf_value(dataset)

return DecTree(value)
```

```
Algorithm 4: build_tree(dataset, depth = 0)

num_samples = len(dataset)

if num_samples \geq min_samples and depth \leq max_depth then

split = best_split(dataset)

if split[info_gain] \geq 0 then

subtree_left = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)

subtree_right = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)

return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else

value = leaf_value(dataset)

return DecTree(value)
```

```
Algorithm 4: build_tree(dataset, depth = 0)

num_samples = len(dataset)

if num_samples \geq min_samples and depth \leq max_depth then

| split = best_split(dataset)
| if split[info_gain] \geq 0 then
| subtree_left = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)
| subtree_right = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)
| return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else
| value = leaf_value(dataset)
| return DecTree(value)
```

Arbres de Classification

```
Algorithm 4: build_tree(dataset, depth = 0)

num_samples = len(dataset)

if num_samples > min_samples and depth \le max_depth then

| split = best_split(dataset)

if split[info_gain] > 0 then

| subtree_left = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)
| subtree_right = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)
| return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else

| value = leaf_value(dataset)
| return DecTree(value)
```

```
Algorithm 4: build_tree(dataset, depth = 0)

num_samples = len(dataset)

if num_samples \geq min_samples and depth \leq max_depth then

| split = best_split(dataset)
| if split[info_gain] \geq 0 then
| subtree_left = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)
| subtree_right = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)
| return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else
| value = leaf_value(dataset)
| return DecTree(value)
```

- Une fois l'arbre de décision construit (par Recursive Binary Splitting), la prédiction \hat{y} associée à la data x est obtenue de la manière suivante:

$$\hat{y} = \arg\max_{c=1,\dots,C} \hat{p}_{kc}$$

ARBRES DE CLASSIFICATION

ARRES DE RÉCRESSION

- Une fois l'arbre de décision construit (par Recursive Binary Splitting), la prédiction \hat{y} associée à la data x est obtenue de la manière suivante:
- ightharpoonup On cherche la région R_k de l'espace des features $X_1 \times \cdots \times X_n$ à laquelle appartient x;

$$\hat{y} = \arg\max_{c=1,\dots,C} \hat{p}_{kc}$$

Arbres de Classification

- Une fois l'arbre de décision construit (par Recursive Binary Splitting), la prédiction \hat{y} associée à la data x est obtenue de la manière suivante:
- ▶ On cherche la région R_k de l'espace des features $X_1 \times \cdots \times X_p$ à laquelle appartient x;
- ▶ On prend comme prédiction \hat{y} la target qui apparaît le plus souvent dans cette région R_k :

$$\hat{y} = \arg\max_{c=1,\dots,C} \hat{p}_{kc}$$

CONCLUSION

- Les arbres de décision sont intuitifs, interprétables, et peuvent gérer des variables qualitatives (discrètes) sans introduire de "dummy variables".
- Les arbres de décision sont bien meilleurs que les méthodes de régression linéaire lorsque la relation entre les prédicteurs et la réponse est non-linéaire.
- Les arbres de décision manquent de robustesse: un petit changement dans le dataset peut engendrer un grand changement dans l'arbre associé.
- ► Il existe des méthodes pour pallier cela: bagging, boosting et random forests (cf. chapitre suivant).

INTRODUCTION

- Les arbres de décision sont intuitifs, interprétables, et peuvent gérer des variables qualitatives (discrètes) sans introduire de "dummy variables".
- Les arbres de décision sont bien meilleurs que les méthodes de régression linéaire lorsque la relation entre les prédicteurs et la réponse est non-linéaire.
- Les arbres de décision manquent de robustesse: un petit changement dans le dataset peut engendrer un grand changement dans l'arbre associé.
- ▶ Il existe des méthodes pour pallier cela: *bagging*, *boosting* et *random forests* (cf. chapitre suivant).

CONCLUSION

- Les arbres de décision sont intuitifs, interprétables, et peuvent gérer des variables qualitatives (discrètes) sans introduire de "dummy variables".
- Les arbres de décision sont bien meilleurs que les méthodes de régression linéaire lorsque la relation entre les prédicteurs et la réponse est non-linéaire.
- Les arbres de décision manquent de robustesse: un petit changement dans le dataset peut engendrer un grand changement dans l'arbre associé.
- ▶ Il existe des méthodes pour pallier cela: *bagging*, *boosting* et *random forests* (cf. chapitre suivant).

- Les arbres de décision sont intuitifs, interprétables, et peuvent gérer des variables qualitatives (discrètes) sans introduire de "dummy variables".
- Les arbres de décision sont bien meilleurs que les méthodes de régression linéaire lorsque la relation entre les prédicteurs et la réponse est non-linéaire.
- Les arbres de décision manquent de robustesse: un petit changement dans le dataset peut engendrer un grand changement dans l'arbre associé
- ▶ Il existe des méthodes pour pallier cela: bagging, boosting et random forests (cf. chapitre suivant).

BIBLIOGRAPHIE



James, G., Witten, D., Hastie, T., and Tibshirani, R. (2013). An Introduction to Statistical Learning: with Applications in R, volume 103 of Springer Texts in Statistics.

Springer, New York.