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.

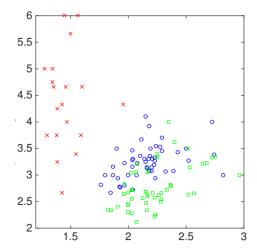
- Les **arbres de décision** sont des algorithmes d'apprentissage supervisé.
- ► Ils peuvent être utilisés dans des contextes de régression et de classification.
- Les arbres de décisions sont en général moins performants que d'autres méthodes d'apprentissage classiques.
- Mais ils peuvent être généralisés 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.

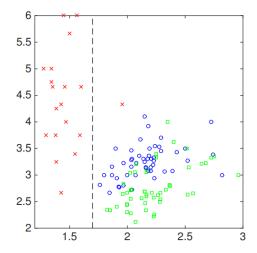
- Les arbres de régression peuvent modéliser une relation *non-linéaire* entre les prédicteurs X_1, \ldots, X_p et la réponse Y.
- ▶ Idée générale: Un arbre de décision partitionne l'espace des prédicteurs $X_1 \times \cdots \times X_p$ en K régions distinctes R_1, \ldots, R_K (cellules, boxes) au sein 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.

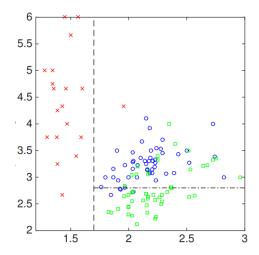
- Les arbres de régression peuvent modéliser une relation *non-linéaire* entre les prédicteurs X_1, \ldots, X_p et la réponse Y.
- ▶ Idée générale: Un arbre de décision partitionne l'espace des prédicteurs $X_1 \times \cdots \times X_p$ en K régions distinctes R_1, \ldots, R_K (cellules, boxes) au sein 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.



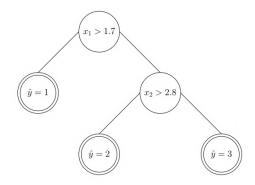
Introduction



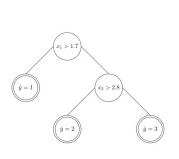
Introduction

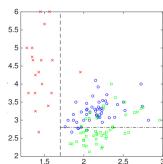


Introduction



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?

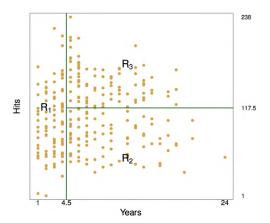
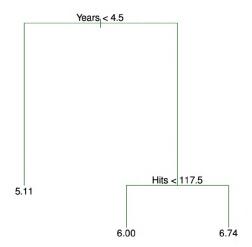


FIGURE 8.2. The three-region partition for the Hitters data set from the regression tree illustrated in Figure 8.1.

Arbres de régression



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

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



- 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 $S_{\text{train}} = \{(\boldsymbol{x_i}, y_i) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R} : i = 1, \dots, N\}.$
- 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 $\binom{51-1}{6-1}>2M$ 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 $\binom{51-1}{6-1}>2M$ 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 $\binom{51-1}{6-1}>2M$ 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 $X_1 \times \cdots \times X_p$ 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, \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 .

 \triangleright 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

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

ightharpoonup 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

$$RSS(R_1, \dots, R_K) = \sum_{k=1}^K \sum_{\{i: \boldsymbol{x}_i \in R_k\}} (y_i - \bar{y}_{R_k})^2$$
$$= \sum_{k=1}^K |R_k - 1| \operatorname{Var}(R_k)$$

▶ 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.,

$$Var(R_1) + Var(R_2) < Var(R)$$
 i.e.

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

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.,

$$Var(R_1) + Var(R_2) < Var(R)$$
 i.e.

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

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

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

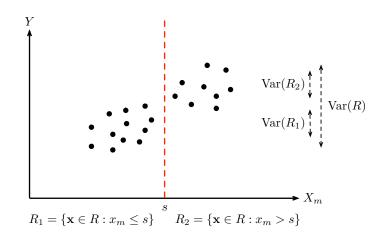
où m est le feature index et s le threshold.

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

$$Var(R_1) + Var(R_2) < Var(R)$$
 i.e.

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

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
```

INTRODUCTION

```
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
```

```
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)
```

```
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 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
                best var red = var 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
                best var red = var 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
                best var red = var red
            end
        end
    end
end
return {"split": best split, "var reduction": best var red}
```

- 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.
 - 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).

- ► 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).

- 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).

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)
```

Introduction

Arbres de régression

```
Algorithm 2: 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[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)
```

```
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 \le 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)
```

```
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 $X_1 \times \cdots \times X_p$ à laquelle appartient x;
- ▶ On prend comme prédiction \hat{y} la moyenne des targets de cette région R_k :

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

manière suivante:

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

- ▶ 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 :

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

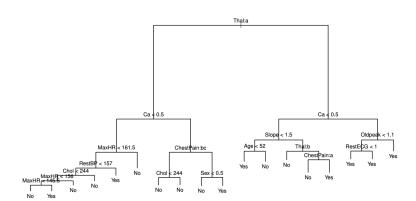
Introduction

- 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.

- 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.

- 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 les plus *pures* (homogènes) possible en termes de targets y_i .

ARBRES DE CLASSIFICATION

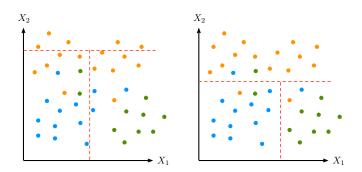
- Soit le train set $S_{\text{train}} = \{(\boldsymbol{x_i}, y_i) \in \mathbb{R}^p \times \mathcal{C} : i = 1, \dots, N\}.$
- ▶ On cherche la partition $R_1, \ldots, R_K \subseteq X_1 \times \cdots \times X_p$ qui minimise une certaine fonction de loss.

- ▶ 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 les plus *pures* (homogènes) possible en termes de targets y_i .

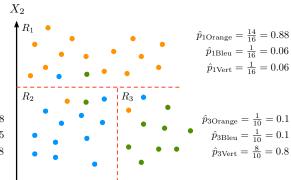
ARBRES DE CLASSIFICATION

- 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 les plus pures (homogènes) possible en termes de targets y_i .

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



▶ Soit \hat{p}_{kc} la proportion de y_i égaux à c dans la région R_k .



 $\hat{p}_{\text{2Orange}} = \frac{1}{13} \simeq 0.08$ $\hat{p}_{\text{2Bleu}} = \frac{11}{13} \simeq 0.85$ $\hat{p}_{\text{2Vert}} = \frac{1}{13} \simeq 0.08$

ARBRES DE CLASSIFICATION

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

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

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

▶ 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.

Introduction

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

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

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

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

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):

$$\operatorname{Ent}(R_1) + \operatorname{Ent}(R_2) < \operatorname{Ent}(R)$$
 i.e.

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

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):

$$\operatorname{Ent}(R_1) + \operatorname{Ent}(R_2) < \operatorname{Ent}(R)$$
 i.e.

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

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

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

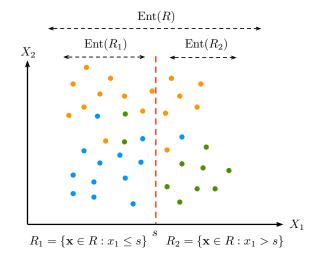
où m est le feature index et s le threshold.

▶ 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):

$$\operatorname{Ent}(R_1) + \operatorname{Ent}(R_2) < \operatorname{Ent}(R)$$
 i.e.

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

▶ 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 $\operatorname{EntRed}(R,R_1,R_2)$.

```
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
 \mbox{ for } \mbox{ m} = 1 \mbox{ to nb } \mbox{ features } \mbox{ 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
 \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)
```

```
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 {"split": best split, "info gain": best info gain}
```

- 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.
- 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).

- ▶ 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).

Recursive Binary Splitting

```
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)
```

Recursive Binary Splitting

```
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)
```

Recursive Binary Splitting

```
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)
```

Introduction

```
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)
```

TITORES 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 > min_samples and depth < 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:
- 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 :

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

- 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;

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

- 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 :

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

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 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 contrer 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 contrer 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 contrer 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.