# 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.

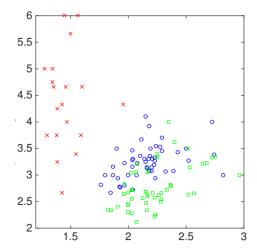
- Les **arbres de décision** sont des algorithmes d'apprentissage supervisé.
- ► Ils peuvent être utilisés dans des contextes de régression et de classification.
- Les arbres de décisions sont en général moins performants que d'autres méthodes d'apprentissage classiques.
- Mais ils peuvent être généralisés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

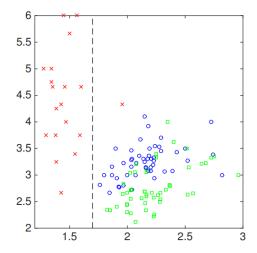
- Les arbres de régression peuvent modéliser une relation *non-linéaire* entre les prédicteurs  $X_1, \ldots, X_p$  et la réponse Y.
- ▶ Idée générale: Un arbre de décision partitionne l'espace des prédicteurs  $X_1 \times \cdots \times X_p$  en K régions distinctes  $R_1, \ldots, R_K$  (cellules, boxes)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

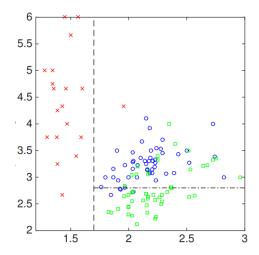
- Les arbres de régression peuvent modéliser une relation *non-linéaire* entre les prédicteurs  $X_1, \ldots, X_p$  et la réponse Y.
- ▶ Idée générale: Un arbre de décision partitionne l'espace des prédicteurs  $X_1 \times \cdots \times X_p$  en K régions distinctes  $R_1, \ldots, R_K$  (cellules, boxes)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



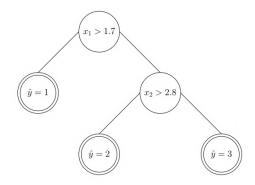
Introduction



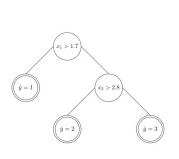
Introduction

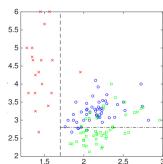


Introduction



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?

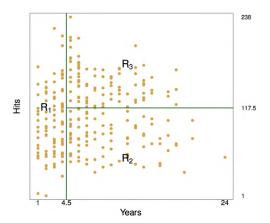
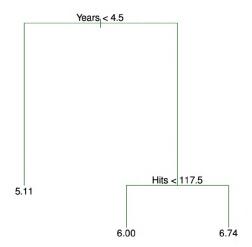


FIGURE 8.2. The three-region partition for the Hitters data set from the regression tree illustrated in Figure 8.1.

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  $\mathit{split}$  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 $\mathit{split}$ de la région R est un tuple (m,s) qui partitionne R en deux sous-régions

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

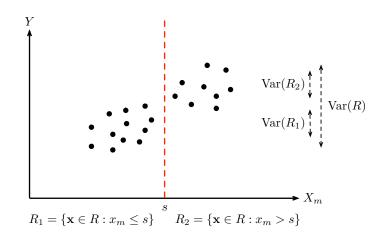
où m est le feature index et s le threshold.

▶ 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).

```
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_right], 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_right], 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_right], 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_right], 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_right], depth + 1)
| return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else

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

# Arbres de régression

```
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_right], 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_right], 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_right], 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] \geq 0 then

| subtree_left = build_tree(split[dataset_left], depth + 1)
| subtree_right = build_tree(split[dataset_right], 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  $R_k$ :

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

- 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  $R_k$ :

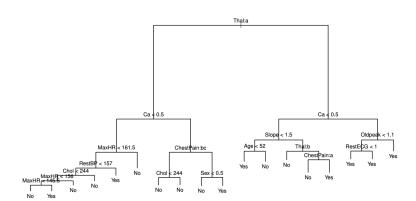
$$\hat{y} = \frac{1}{|R_k|} \sum_{\{i: \boldsymbol{x_i} \in R_k\}} y_i$$

- 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

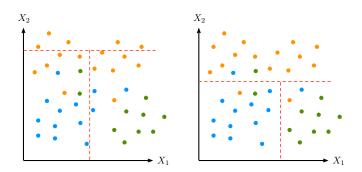
- Soit le train set  $S_{\text{train}} = \{(\boldsymbol{x_i}, y_i) \in \mathbb{R}^p \times \mathcal{C} : i = 1, \dots, N\}.$
- ▶ On cherche la partition  $R_1, \ldots, R_K \subseteq X_1 \times \cdots \times X_p$  qui minimise une certaine fonction de loss.

- ▶ 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  $y_i$ .

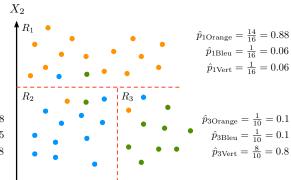
### ARBRES DE CLASSIFICATION

- 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 $\mathit{split}$ 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

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

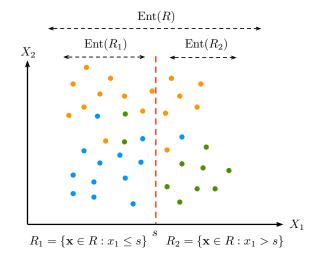
où m est le feature index et s le threshold.

▶ 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 R<sub>1</sub> et R<sub>2</sub> 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_right], depth + 1)

return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else

value = leaf_value(dataset)
```

### **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_right], 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_right], 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_right], 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_right], depth + 1)
| return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else

| value = leaf_value(dataset)
```

#### 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_right], 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_right], 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 \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_right], 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_right], depth + 1)
| return DecTree(split, subtree_left, subtree_right)

else

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

## 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  $R_k$ :

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

- 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.