Jérémie Cabessa Laboratoire DAVID, UVSQ

Introduction

INTRODUCTION

- Les forêts aléatoires sont des modèles ensemblistes (ensemble methods) basés sur les arbres de décision.
- L'idée est de combiner plusieurs arbres de décision afin d'obtenir un modèle plus robuste, i.e., avec une variance réduite.
- La variance d'un modèle représente sa volatilité face à un changement de dataset provenant d'une même distribution.

INTRODUCTION

- Les **forêts aléatoires** sont des modèles ensemblistes (*ensemble methods*) basés sur les arbres de décision.
- L'idée est de combiner plusieurs arbres de décision afin d'obtenir un modèle plus robuste, i.e., avec une variance réduite.
- La variance d'un modèle représente sa volatilité face à un changement de dataset provenant d'une même distribution.

Introduction

- Les forêts aléatoires sont des modèles ensemblistes (ensemble methods) basés sur les arbres de décision.
- L'idée est de combiner plusieurs arbres de décision afin d'obtenir un modèle plus robuste, i.e., avec une variance réduite.
- La variance d'un modèle représente sa volatilité face à un changement de dataset provenant d'une même distribution.

Un résultat de statistique

Soient $\hat{f}_1, \ldots, \hat{f}_B$ des modèles qui sont tous de variance σ^2 . Alors le modèle moyen

$$\hat{f}_{bag} = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{B} \hat{f}_i$$

a une variance réduite de $\frac{\sigma^2}{D}$.

$$\operatorname{Var}\left(\frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B}\hat{f}_{i}\right) = \frac{1}{B^{2}}\operatorname{Var}\left(\sum_{b=1}^{B}\hat{f}_{i}\right) = \frac{1}{B^{2}}\sum_{b=1}^{B}\operatorname{Var}\left(\hat{f}_{i}\right) = \frac{B\sigma^{2}}{B^{2}} = \frac{\sigma^{2}}{B^{2}}$$

Un résultat de statistique

Soient $\hat{f}_1, \dots, \hat{f}_B$ des modèles qui sont tous de variance σ^2 . Alors le *modèle moyen*

$$\hat{f}_{bag} = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{B} \hat{f}_i$$

a une variance réduite de $\frac{\sigma^2}{B}$.

Preuve:

$$\operatorname{Var}\left(\frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B}\hat{f}_{i}\right) = \frac{1}{B^{2}}\operatorname{Var}\left(\sum_{b=1}^{B}\hat{f}_{i}\right) = \frac{1}{B^{2}}\sum_{b=1}^{B}\operatorname{Var}\left(\hat{f}_{i}\right) = \frac{B\sigma^{2}}{B^{2}} = \frac{\sigma^{2}}{B}$$

Ainsi, en prenant la moyenne de plusieurs modèles, on obtient un modèle ensembliste de variance réduite.



Un résultat de statistique

Soient $\hat{f}_1, \dots, \hat{f}_B$ des modèles qui sont tous de variance σ^2 . Alors le *modèle moyen*

$$\hat{f}_{bag} = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{B} \hat{f}_i$$

a une variance réduite de $\frac{\sigma^2}{B}$.

Preuve:

$$\operatorname{Var}\left(\frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B}\hat{f}_{i}\right) = \frac{1}{B^{2}}\operatorname{Var}\left(\sum_{b=1}^{B}\hat{f}_{i}\right) = \frac{1}{B^{2}}\sum_{b=1}^{B}\operatorname{Var}\left(\hat{f}_{i}\right) = \frac{B\sigma^{2}}{B^{2}} = \frac{\sigma^{2}}{B}$$

Ainsi, en prenant la moyenne de plusieurs modèles, on obtient un modèle ensembliste de variance réduite.



La technique du **bagging** (ou **bootstrap aggregation**) se base sur ce résultat.

Soit un dataset $S = \{(\boldsymbol{x_i}, y_i) : i = 1, \dots, N\}$ de taille N.

Pour
$$b = 1, \dots, B$$

- On sample avec remplacement N éléments de S pour créer un nouveau dataset S_b de taille N.
- On entraîne un modèle \hat{f}_b sur le dataset \mathcal{S}_b .

On définit le modèle
$$\hat{f}_{bag} = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{B} \hat{f}_{b}$$

La technique du bagging (ou bootstrap aggregation) se base sur ce résultat.

Soit un dataset
$$S = \{(x_i, y_i) : i = 1, ..., N\}$$
 de taille N .

Pour
$$b = 1, \ldots, B$$

On sample avec remplacement N éléments de S pour créer un nouveau dataset S_b de taille N.

On entraîne un modèle \hat{f}_b sur le dataset \mathcal{S}_b

On définit le modèle
$$\hat{f}_{bag} = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{B} \hat{f}_{b}$$

La technique du **bagging** (ou **bootstrap aggregation**) se base sur ce résultat.

Soit un dataset
$$S = \{(x_i, y_i) : i = 1, ..., N\}$$
 de taille N .

Pour
$$b = 1, \dots, B$$

On sample avec remplacement N éléments de S pour créer un nouveau dataset S_b de taille N.

On entraîne un modèle \hat{f}_b sur le dataset \mathcal{S}_b

On définit le modèle
$$\hat{f}_{bag} = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{B} \hat{f}_{b}$$

La technique du **bagging** (ou **bootstrap aggregation**) se base sur ce résultat.

Soit un dataset $S = \{(x_i, y_i) : i = 1, ..., N\}$ de taille N.

Pour
$$b = 1, \dots, B$$

On sample avec remplacement N éléments de S pour créer un nouveau dataset S_b de taille N.

On entraîne un modèle \hat{f}_b sur le dataset \mathcal{S}_b

On définit le modèle
$$\hat{f}_{bag} = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{B} \hat{f}_{b}$$

La technique du **bagging** (ou **bootstrap aggregation**) se base sur ce résultat.

Soit un dataset $S = \{(\boldsymbol{x_i}, y_i) : i = 1, \dots, N\}$ de taille N.

Pour
$$b = 1, \dots, B$$

On sample avec remplacement N éléments de S pour créer un nouveau dataset S_b de taille N.

On entraîne un modèle \hat{f}_b sur le dataset \mathcal{S}_b .

On définit le modèle
$$\hat{f}_{bag} = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{B} \hat{f}_{b}$$
.

La technique du **bagging** (ou **bootstrap aggregation**) se base sur ce résultat.

Soit un dataset $S = \{(\boldsymbol{x_i}, y_i) : i = 1, \dots, N\}$ de taille N.

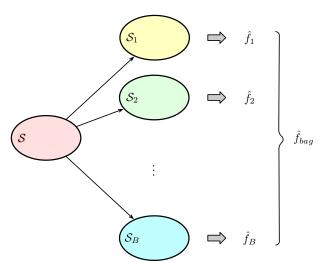
Pour
$$b = 1, \dots, B$$

On sample avec remplacement N éléments de S pour créer un nouveau dataset S_b de taille N.

On entraîne un modèle \hat{f}_b sur le dataset \mathcal{S}_b .

On définit le modèle $\hat{f}_{bag} = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{B} \hat{f}_{b}$.

Introduction



BAGGING (RÉGRESSION)

▶ Dans le cas d'une régression, on a donc le modèle

$$\hat{f}_{bag} = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{B} \hat{f}_b$$

lacktriangle Pour toute data x, on sa prédiction est donnée par

$$\hat{f}_{bag}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{B} \hat{f}_{b}(\boldsymbol{x})$$

BAGGING (RÉGRESSION)

▶ Dans le cas d'une régression, on a donc le modèle

$$\hat{f}_{bag} = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{B} \hat{f}_b$$

lacktriangle Pour toute data x, on sa prédiction est donnée par:

$$\hat{f}_{bag}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{B} \hat{f}_{b}(\boldsymbol{x})$$

BAGGING (CLASSIFICATION)

BAGGING

▶ Dans le cas d'une classification, on définit \hat{f}_{bag} par le principe du vote majoritaire (majority vote) des $\hat{f}_1, \ldots, \hat{f}_B$:

$$\hat{f}_{bag} = \text{MajorityVote}([\hat{f}_1, \dots, \hat{f}_B])$$

Cela signifie que pour toute data x, la prédiction $\hat{f}_{bag}(x)$ est la valeur qui apparait le plus souvent parmi $\hat{f}_1(x), \ldots, \hat{f}_B(x)$:

$$\hat{f}_{bag}(\boldsymbol{x}) = \text{most_freq_value}([\hat{f}_1(\boldsymbol{x}), \dots, \hat{f}_B(\boldsymbol{x})])$$

BAGGING (CLASSIFICATION)

BAGGING

▶ Dans le cas d'une classification, on définit \hat{f}_{bag} par le principe du vote majoritaire (majority vote) des $\hat{f}_1, \ldots, \hat{f}_B$:

$$\hat{f}_{bag} = \text{MajorityVote}([\hat{f}_1, \dots, \hat{f}_B])$$

Cela signifie que pour toute data x, la prédiction $\hat{f}_{bag}(x)$ est la valeur qui apparait le plus souvent parmi $\hat{f}_1(x), \ldots, \hat{f}_B(x)$:

$$\hat{f}_{bag}(\boldsymbol{x}) = \text{most_freq_value}([\hat{f}_1(\boldsymbol{x}), \dots, \hat{f}_B(\boldsymbol{x})])$$

- ▶ Une forêt aléatoire (random forest) est un modèle obtenu à partir de plusieurs arbres de décision.
- On utilise une technique de bagging améliorée pour agréger et décorréler les arbres de décision utilisés.
- La technique de *décorrélation* des arbres de décision a pour but de diminuer la variance du modèle final.

Introduction

- Une forêt aléatoire (random forest) est un modèle obtenu à partir de plusieurs arbres de décision.
- On utilise une technique de bagging améliorée pour agréger et décorréler les arbres de décision utilisés.

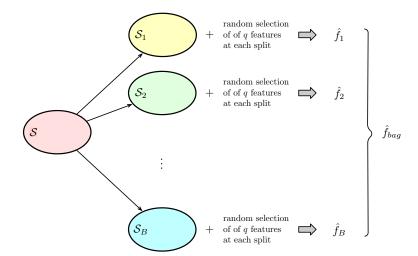
- Une forêt aléatoire (random forest) est un modèle obtenu à partir de plusieurs arbres de décision.
- On utilise une technique de bagging améliorée pour agréger et décorréler les arbres de décision utilisés.
- La technique de *décorrélation* des arbres de décision a pour but de diminuer la variance du modèle final.

- ▶ Une forêt aléatoire (random forest) est un modèle \hat{f}_{bag} obtenu par bagging à partir d'arbres de décision $\hat{f}_1, \ldots, \hat{f}_B$.
- Mais, lors de la construction de chaque \hat{f}_i , on modifie la méthode qui détermine le best split " $X_m \leq s$ " comme suit:
 - \hat{A} chaque split, on sélectionne un sous-ensemble aléatoire de q features X_{i_1},\ldots,X_{i_q} parmi X_1,\ldots,X_p comme candidats au "best split" (on peut prendre $q\sim\sqrt{p}$).
- Les arbres \hat{f}_i auront alors tendance à être différents les uns des autres, donc décorrélés, ce qui diminue la variance de \hat{f}_{bag} .

- ▶ Une forêt aléatoire (random forest) est un modèle \hat{f}_{bag} obtenu par bagging à partir d'arbres de décision $\hat{f}_1, \ldots, \hat{f}_B$.
- Mais, lors de la construction de chaque \hat{f}_i , on modifie la méthode qui détermine le best split " $X_m \leq s$ " comme suit:
 - À chaque split, on sélectionne un sous-ensemble aléatoire de q features X_{i_1}, \ldots, X_{i_q} parmi X_1, \ldots, X_p comme candidats au "best split" (on peut prendre $q \sim \sqrt{p}$).
- Les arbres \hat{f}_i auront alors tendance à être différents les uns des autres, donc décorrélés, ce qui diminue la variance de \hat{f}_{baq} .

- ▶ Une forêt aléatoire (random forest) est un modèle \hat{f}_{bag} obtenu par bagging à partir d'arbres de décision $\hat{f}_1, \ldots, \hat{f}_B$.
- Mais, lors de la construction de chaque \hat{f}_i , on modifie la méthode qui détermine le best split " $X_m \leq s$ " comme suit:
 - À chaque split, on sélectionne un sous-ensemble aléatoire de q features X_{i_1}, \ldots, X_{i_q} parmi X_1, \ldots, X_p comme candidats au "best split" (on peut prendre $q \sim \sqrt{p}$).
- Les arbres \hat{f}_i auront alors tendance à être différents les uns des autres, donc décorrélés, ce qui diminue la variance de \hat{f}_{bag} .

- ▶ Une forêt aléatoire (random forest) est un modèle \hat{f}_{bag} obtenu par bagging à partir d'arbres de décision $\hat{f}_1, \ldots, \hat{f}_B$.
- Mais, lors de la construction de chaque \hat{f}_i , on modifie la méthode qui détermine le best split " $X_m \leq s$ " comme suit:
 - À chaque split, on sélectionne un sous-ensemble aléatoire de q features X_{i_1}, \ldots, X_{i_q} parmi X_1, \ldots, X_p comme candidats au "best split" (on peut prendre $q \sim \sqrt{p}$).
- Les arbres \hat{f}_i auront alors tendance à être différents les uns des autres, donc décorrélés, ce qui diminue la variance de \hat{f}_{bag} .



- **Best split:** algorithme modifié de recherche d'un best split d'une region R d'un dataset.
- On tire aléatoirement q features X_{i_1}, \dots, X_{i_q} parmi les p features X_1, \dots, X_p .
- Parmi ces features, 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 modifié de recherche d'un best split d'une region R d'un dataset.
- On tire aléatoirement q features X_{i_1}, \dots, X_{iq} parmi les p features X_1, \dots, X_p .
- Parmi ces features, 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 modifié de recherche d'un best split d'une region R d'un dataset.
- On tire aléatoirement q features X_{i_1}, \dots, X_{iq} parmi les p features X_1, \dots, X_p .
- Parmi ces features, 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 modifié de recherche d'un best split d'une region R d'un dataset.
- On tire aléatoirement q features X_{i_1}, \dots, X_{iq} parmi les p features X_1, \dots, X_p .
- Parmi ces features, 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
```

```
best info gain =-\infty
selected features = sample(1, p, q)
for m in selected features do
```

```
best info gain =-\infty
selected features = sample(1, p, q)
for m in selected features do
    for s in possible values(X_m) do
```

```
best info gain =-\infty
selected features = sample(1, p, q)
for m in selected features do
    for s in possible values(X_m) do
        split = (m, s)
```

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

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

Introduction

```
best info gain =-\infty
selected features = sample(1, p, q)
for m in selected 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
selected features = sample(1, p, q)
for m in selected 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
selected features = sample(1, p, q)
for m in selected 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
selected features = sample(1, p, q)
for m in selected 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
                  \verb|best| \verb|info| \verb|gain| = \verb|info| \verb|gain|
```

```
best info gain =-\infty
selected features = sample(1, p, q)
for m in selected 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
                  \verb|best| \verb|info| \verb|gain| = \verb|info| \verb|gain|
             end
         end
    end
end
```

```
Algorithm 1: best split(dataset)
best info gain =-\infty
selected features = sample(1, p, q)
for m in selected 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
                 \verb|best| \verb|info| \verb|gain| = \verb|info| \verb|gain|
             end
         end
    end
end
return best split
```

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

num_samples = len(dataset)

if num_samples \geq min_samples and depth \leq max_depth then

split = best_split(dataset)

if split[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 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[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 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[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 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[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 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[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 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[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 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[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 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[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 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[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 3: bagging(dataset)
```

```
n = len(dataset)

dec_trees_l = []

for b = 1 to B do

dataset_new = sample(dataset, n)

dec_tree = build_tree(dataset_new, depth = 0)

dec_trees_l.append(dec_tree)

end

RandomForest = aggregate(dec_trees_l)
```

```
n = len(dataset)

dec_trees_1 = []

for b = 1 to B do

dataset_new = sample(dataset, n)

dec_tree = build_tree(dataset_new, depth = 0)

dec_trees_l.append(dec_tree)

end

RandomForest = aggregate(dec_trees_1)
```

```
n = len(dataset)
dec trees l = []
for b = 1 to B do
    dataset new = sample(dataset, n)
    dec tree = build tree(dataset new, depth = 0)
    dec trees l.append(dec tree)
end
RandomForest = aggregate(dec trees 1)
return RandomForest
```

```
\textbf{Algorithm 3: } \texttt{bagging}(\texttt{dataset})
```

Conclusion

INTRODUCTION

- Les modèles ensemblistes peuvent donner des résultats très intéressants.

CONCLUSION

INTRODUCTION

- Les modèles ensemblistes peuvent donner des résultats très intéressants.
- Les techniques de bagging et les forêts aléatoires améliorent grandement les arbres de décision.
- ► Il existe d'autres technique d'agrégation pour des arbres de décision: le boosting et les bayesian additive regression trees (BART).

CONCLUSION

- Les modèles ensemblistes peuvent donner des résultats très intéressants.
- Les techniques de bagging et les forêts aléatoires améliorent grandement les arbres de décision.
- ▶ Il existe d'autres technique d'agrégation pour des arbres de décision: le boosting et les bayesian additive regression trees (BART).

BIBLIOGRAPHIE



Introduction

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.