Apprentissage Automatique
Arbres de décisions & méthodes ensemblistes

S. Herbin, A. Chan Hon Tong

stephane.herbin@onera.fr

Introduction

Rappel du dernier cours

- Principes généraux d'apprentissage : données apprentissage/validation/test, optimisation, évaluation
- Deux algorithmes élémentaires de *classification supervisée* : plus proche voisin, classifieur Bayésien

Objectifs de ce cours

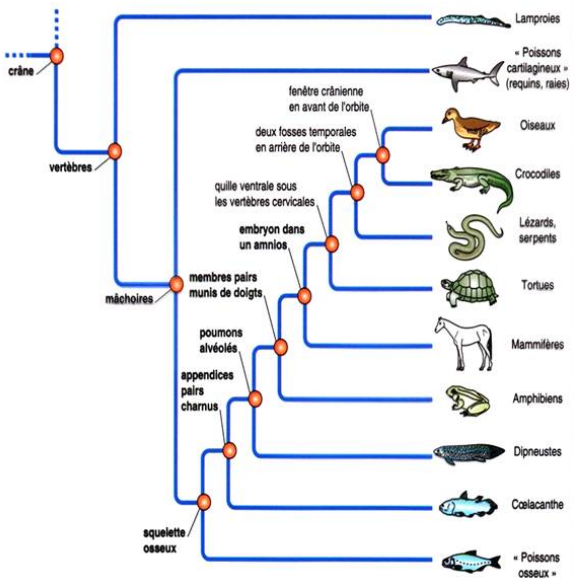
- Un nouveau type de classifieur : l'arbre de décision
- Un principe de conception : les approches ensemblistes
  Intuition : « un groupe prend plus souvent de meilleures décisions qu'un individu »

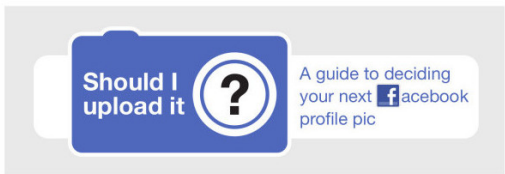
Arbres de décision et méthodes ensemblistes : plan

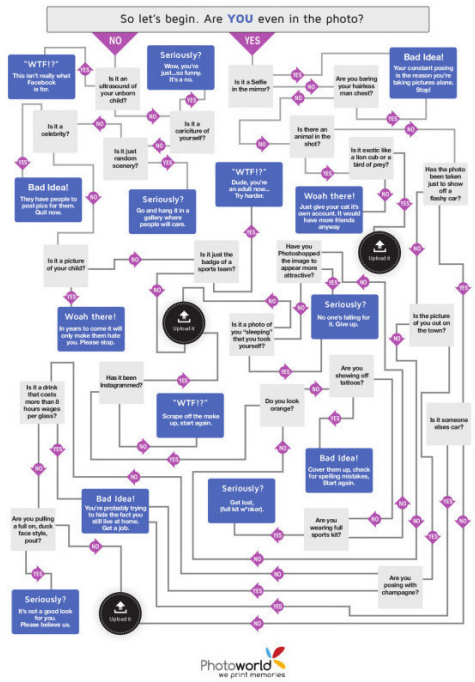
Arbres de décision

Arbres de décision

Un modèle intuitif : décomposer une décision globale en une séquence de décisions locales (questions)







➠ Ou bien encore comme dans le *jeu des 20 questions*

Arbres de décision

Exemple : attendre une table ou partir ?

- Un problème de décision binaire.
- Questions possibles : Autre restaurant à proximité ? Bar dans le restaurant ? Est-on vendredi ? Avons-nous faim ? Le restaurant est-il plein ? Est-il cher ? Quel est le type de restaurant ? Temps d'attente estimé ? Avons-nous une réservation ? Pleut-il ?

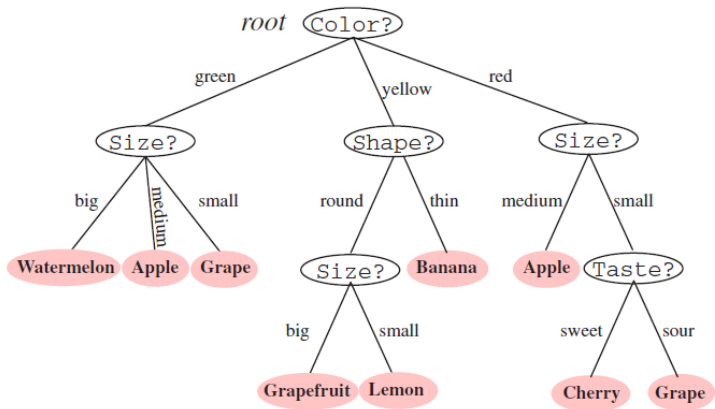
12 exemples d'apprentissage.

Example	Attributes										Target
	Alt	*Bar*	*Fri*	*Hun*	*Pat*	*Price*	*Rain*	*Res*	*Type*	*Est*	*Wait*
X_1	T	F	F	T	Some	$$$	F	T	French	0–10	T
X_2	T	F	F	T	Full	$	F	F	Thai	30–60	F
X_3	F	T	F	F	Some	$	F	F	Burger	0–10	T
X_4	T	F	T	T	Full	$	F	F	Thai	10–30	T
X_5	T	F	T	F	Full	$$$	F	T	French	>60	F
X_6	F	T	F	T	Some	$$	T	T	Italian	0–10	T
X_7	F	T	F	F	None	$	T	F	Burger	0–10	F
X_8	F	F	F	T	Some	$$	T	T	Thai	0–10	T
X_9	F	T	T	F	Full	$	T	F	Burger	>60	F
X_{10}	T	T	T	T	Full	$$$	F	T	Italian	10–30	F
X_{11}	F	F	F	F	None	$	F	F	Thai	0–10	F
X_{12}	T	T	T	T	Full	$	F	F	Burger	30–60	T

Arbres de décision

Principe

- Classification en posant une séquence de questions fermées (= nombre fini de réponses possibles)
- Questions organisées sous forme d'arbre : la question suivante dépend de la réponse à la question précédente
- La réponse à la dernière question définit la prédiction finale



Arbres de décision

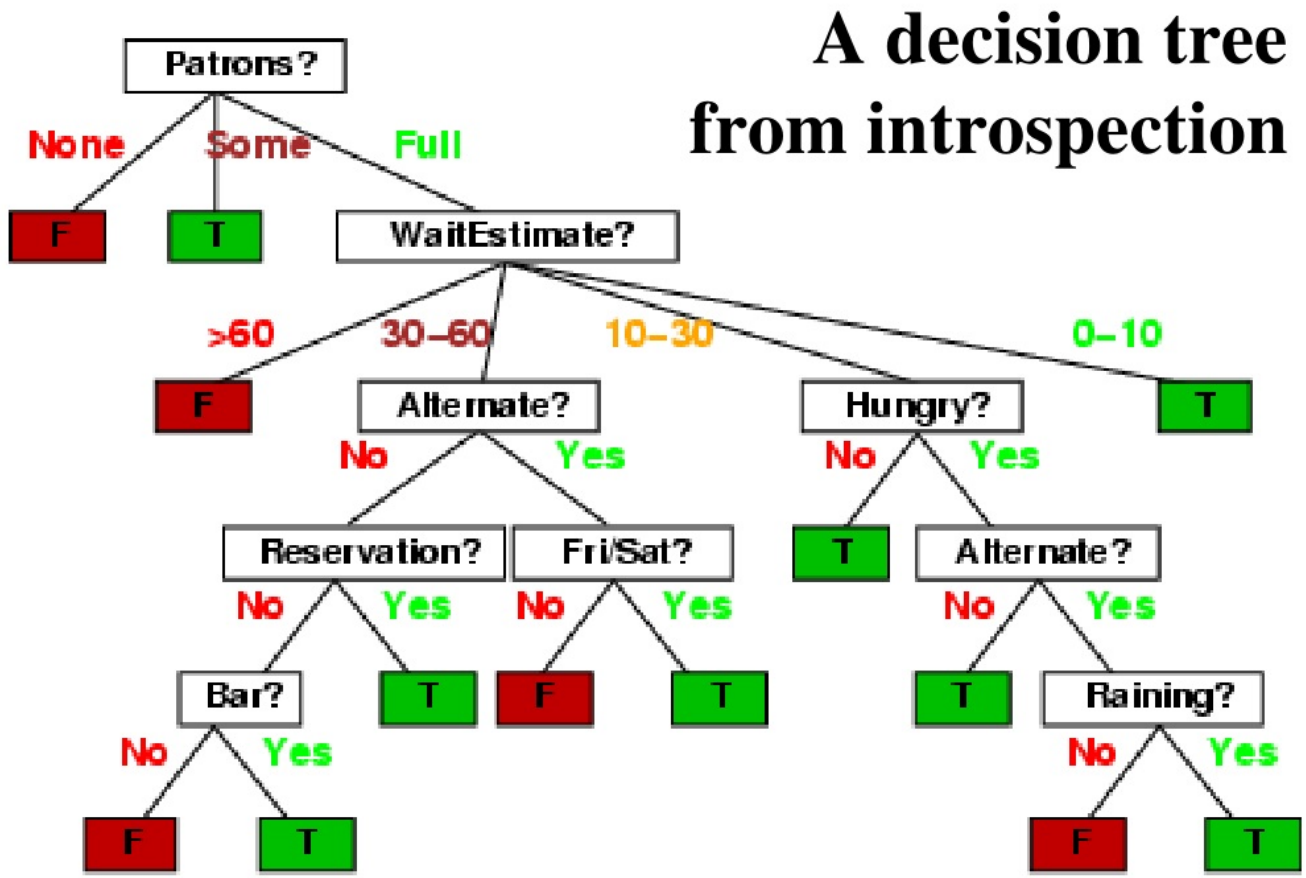


Figure 1 – Un arbre « expert » pour résoudre le problème du restaurant.

Arbres de décision

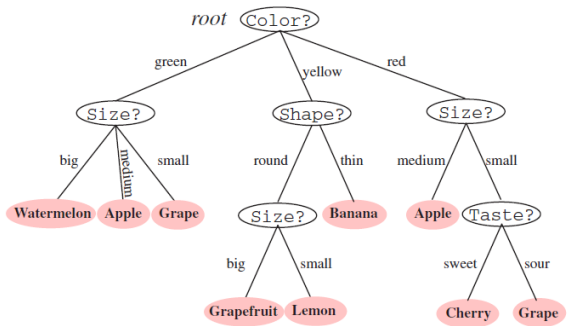
Questions type

- Sur la valeur d'un attribut caractéristique
- Sur la véracité d'une clause logique
- Sur l'appartenance à un intervalle ou un sous-ensemble
- Sur des attributs discrets ou numériques
- ...

Grande flexibilité possible mais les questions doivent être simples (à calculer)

Arbres de décision : structure

- Données codée comme ensemble d'attributs (ex : attributs d'un fruit = couleur, taille forme, goût...)
- Noeud de décision associé à un test ou question sur un des attributs
- Branches qui représentent les valeurs possibles de l'attribut testé ou des réponses aux questions
- Noeud terminal ou feuille, liée à la classe (prédiction)



Arbres de décision : principe de prédiction

- Les questions découpent (partitionnent) l'espace des attributs à chaque étape
- Le noeud terminal code un élément de la partition
- Toutes les données codées par le noeud terminal ont la même prédiction

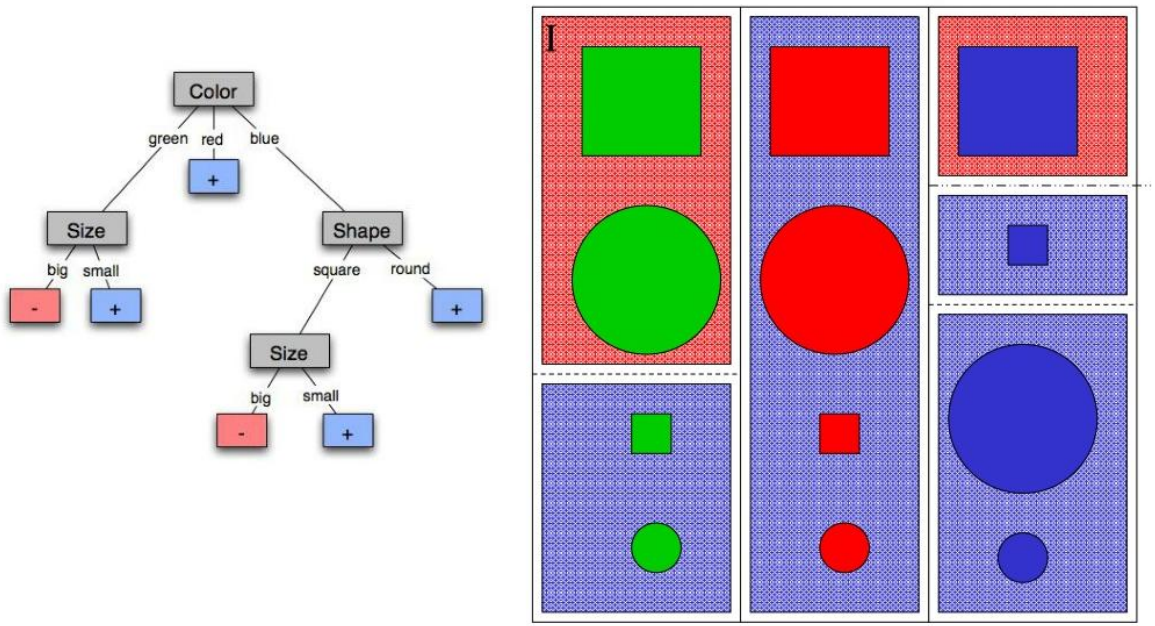


Figure 2 – Partition sur des données symboliques. Les questions portent sur la valeur d'un attribut discret.

Arbres de décision

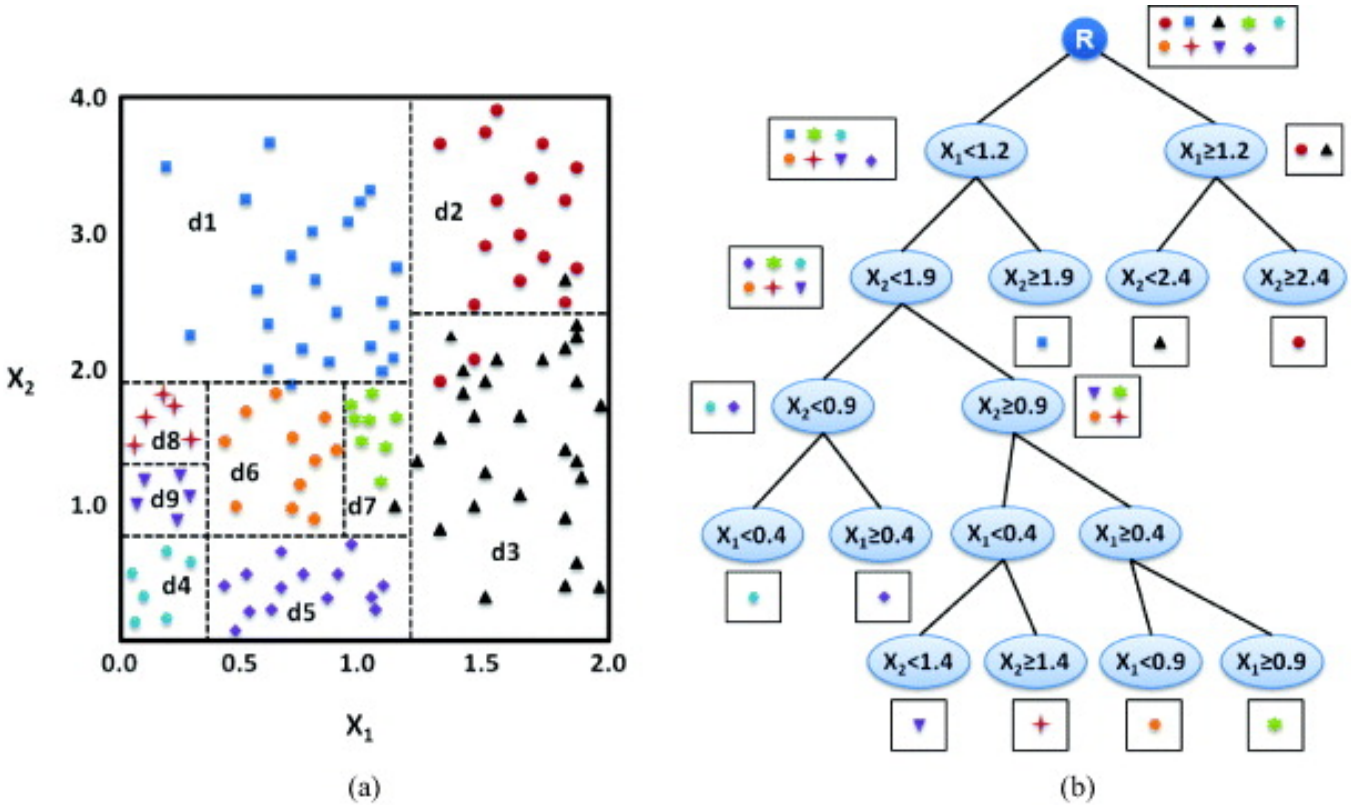
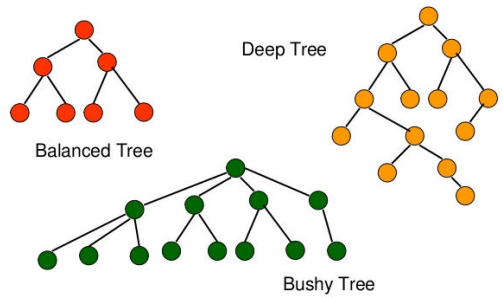


Figure 3 – Partition sur des données numériques. Les questions sont des tests comparant la valeur d'une dimension à un seuil.

Arbres de décision

Quelles questions se poser pour construire un arbre ?



Questions globales :

- Quelle structure choisir ? (profond, équilibré,...) ?
- Combien de découpages par noeud ? (binaire, plus)
- Quand s'arrêter de découper ?

Questions locales :

- Quel attribut choisir, et quel test lui appliquer ?
- Si l'arbre est trop grand, comment l'élaguer ?
- Si une feuille n'est pas pure, quelle classe attribuer ?

Arbres de décision : position du problème d'apprentissage

Soit $X = \{(x_j, y_j)\}_{j \leq N}$ des données décrites chacune par un ensemble d'attributs $x_j = \{A_i^j\}_{1 \leq j \leq M}$, avec A_i^j à valeurs numériques ou symboliques, et y_i la prédiction (vérité terrain).

Recherche du plus petit arbre de décision compatible avec X :

- Principe du rasoir d'Occam : trouver l'hypothèse la plus simple possible compatible avec les données
- Principe Minimum Description Length : trouver l'hypothèse qui produit le plus petit nombre d'opérations

Mais... recherche optimale impossible (problème NP-complet)
➠ Algorithmes spécifiques assurant une erreur sur l'ensemble d'apprentissage minimale, et un arbre cohérent avec *la plupart* des données.

Arbres de décision : algorithmes

Principe général

Construction top-down récursive d'un *petit* arbre cohérent avec la *plupart* des données.

Trois étapes

1. Décider si un noeud est terminal
2. Si un noeud n'est pas terminal, choisir un attribut, un test et des branches possible
3. Si un noeud est terminal, lui associer une classe

Arbres de décision : algorithmes

Choisir un attribut et un test

➠ Algorithmes récursifs (par exemple ID3, C4.5, CART...)

Fonction Construire-arbre(X)
SI tous les points de X sont de même classe,
créer une feuille associée à cette classe
SINON

- choisir la meilleure paire (A_i,test) pour créer un noeud
- ce test sépare X en 2 parties X_g et X_d
- Construire-arbre(X_g)
- Construire-arbre(X_d)

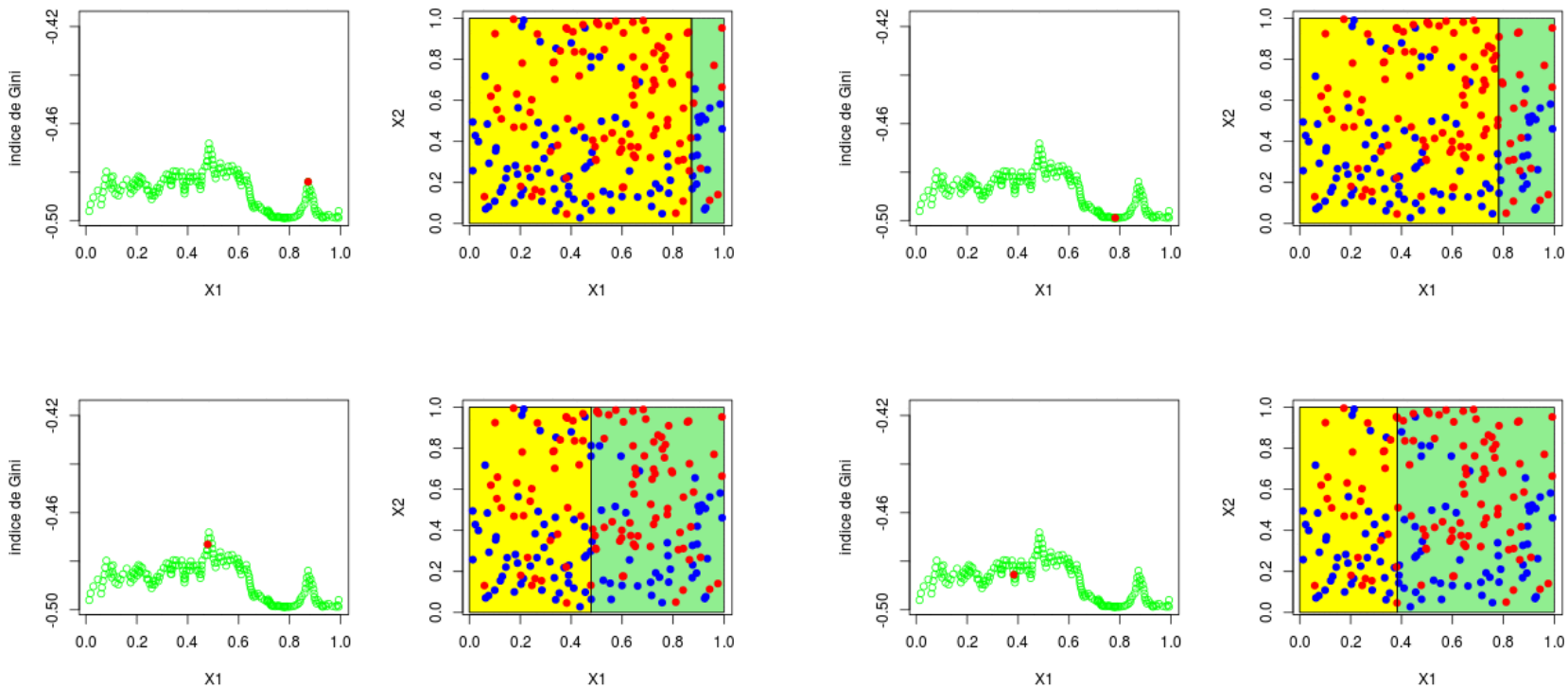
Arbres de décision : algorithmes

Critères de sélection d'un noeud

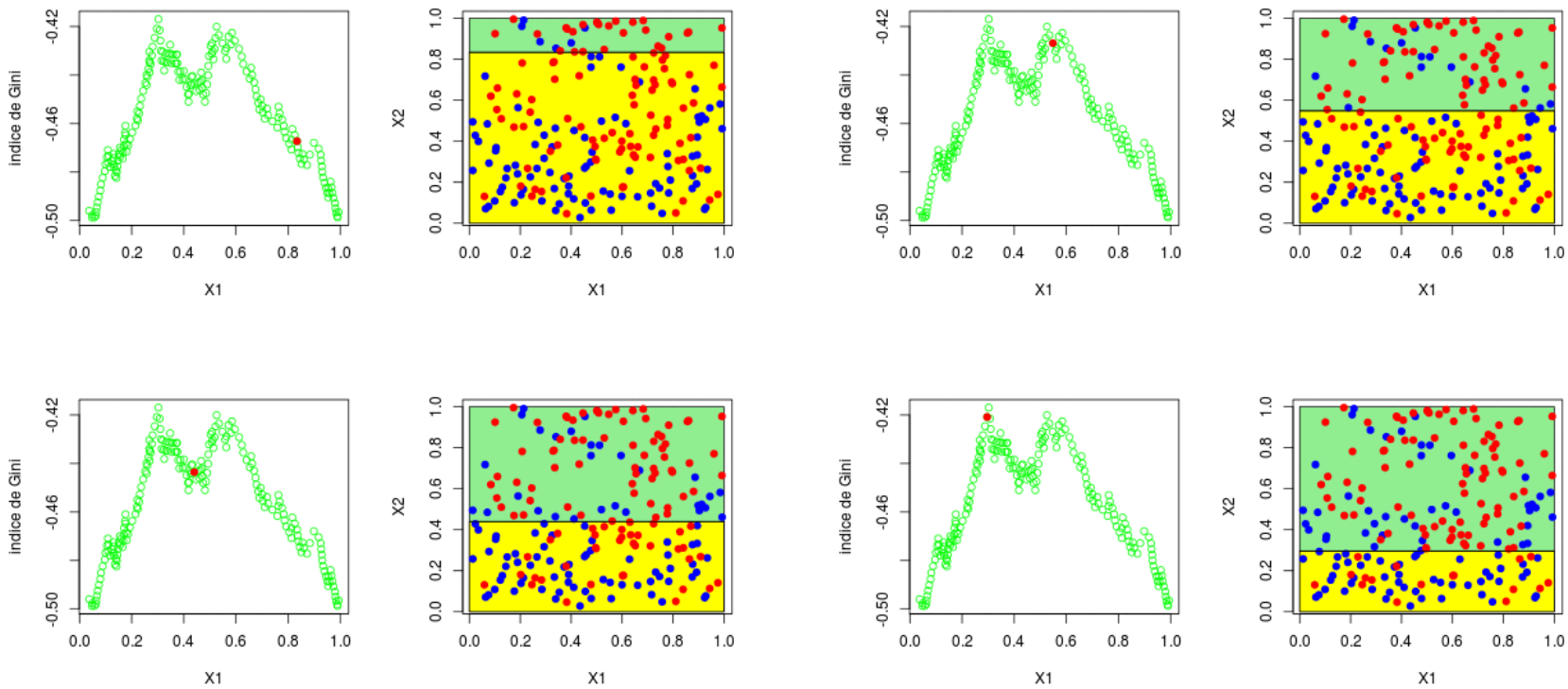
➠ Mesure de l'hétérogénéité (ou de la pureté).

- Entropie : $H = -\sum p(c_k) log_2(p(c_k))$ avec $p(c_k) = N_k/N$ probabilité de la classe c_k dans l'ensemble courant
  ➞ ID3, C4.5, mesure l'information
- Indice de Gini : $I = \sum p(c_k)(1 - p(c_k)) = 1 - \sum p(c_k)^2$
  ➞ CART, mesure les inégalités
- Indice d'erreur : $I = 1 - max(p(c_k))$

Arbres de décision : algorithmes



Arbres de décision : algorithmes



Arbres de décision : algorithmes

Choix attribut et test

➠ Gain d'homogénéité apporté par un test T pour séparer un noeud V en noeuds V_j.

- À chaque noeud, choix de T maximisant $Gain(V, T) = I(V) - \sum_j p(V_j) I(V_j)$
- En pratique, approche empirique pour tout A_i tri des valeurs par ordre croissant et tests tirés selon une approche dichotomique (médiane, etc...)

Arbres de décision

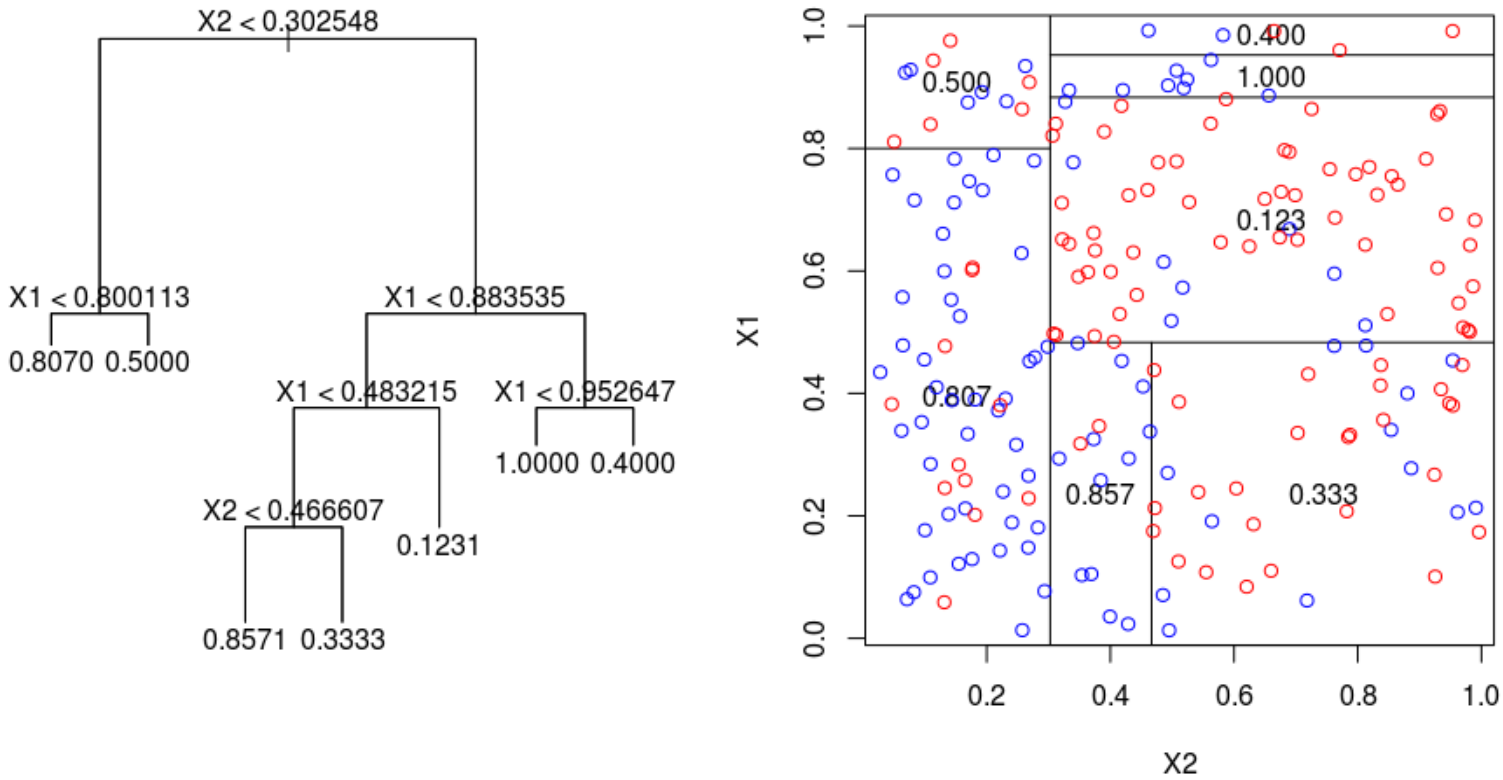


Figure 4 – Arbre et partition obtenu en utilisant un critère de type Gini.

Arbres de décision

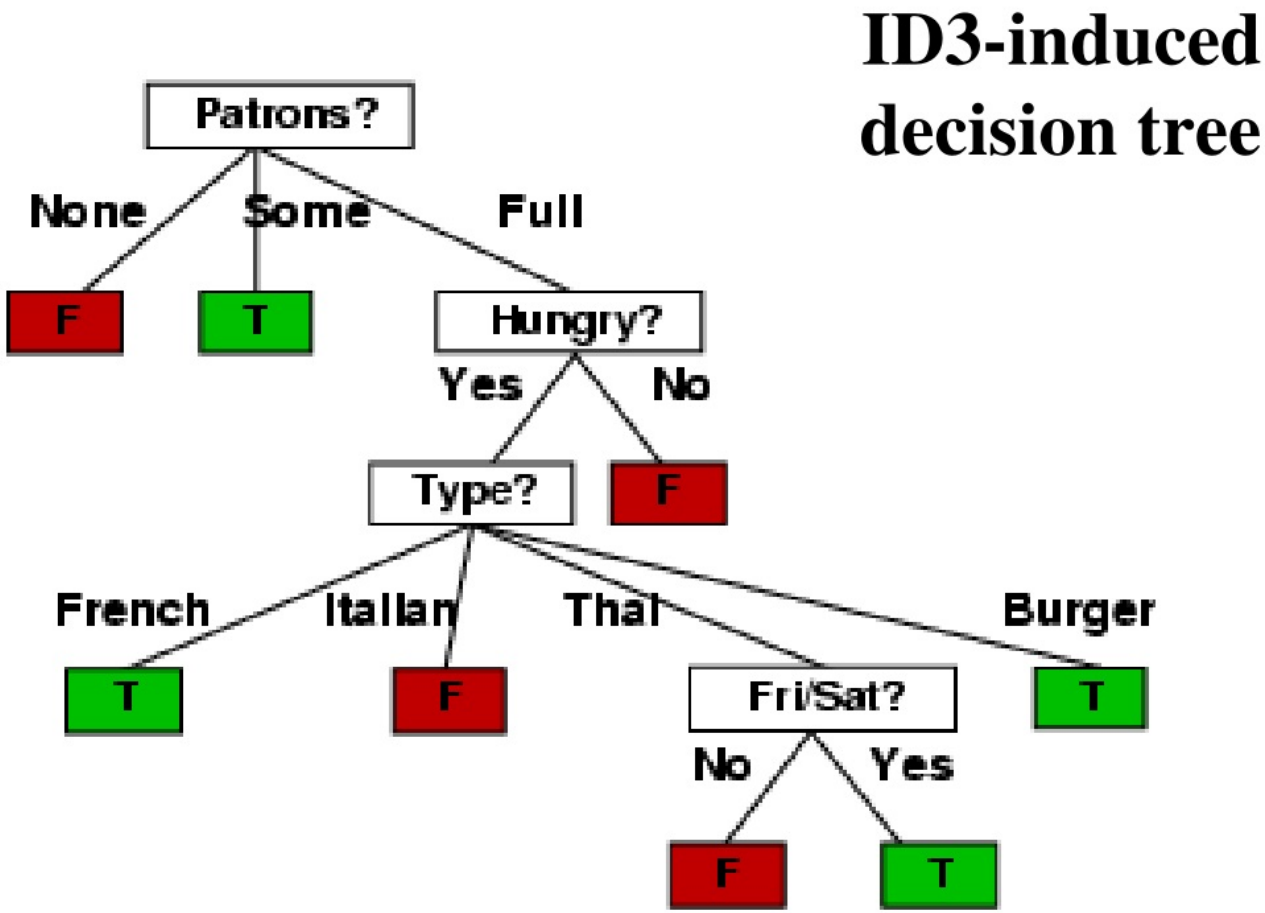
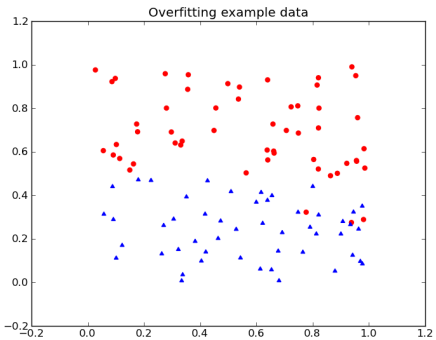
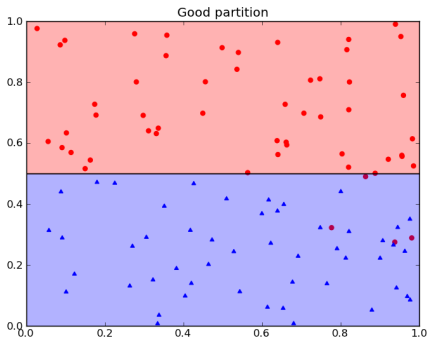
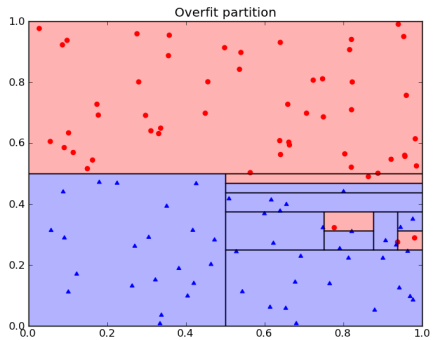


Figure 5 – Un arbre « appris » pour résoudre le problème du restaurant.

Arbres de décision : comportement



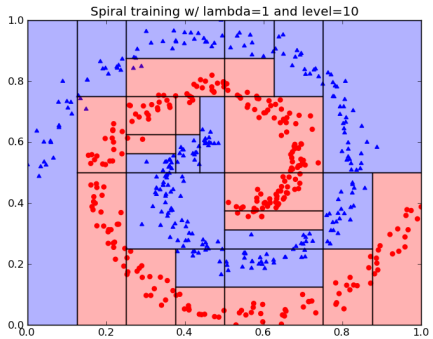


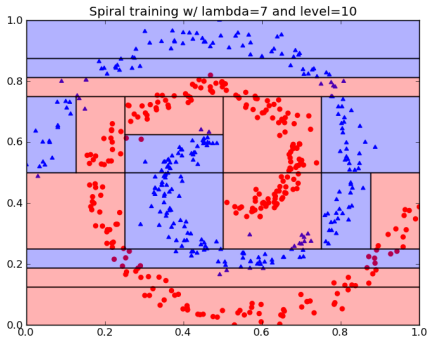


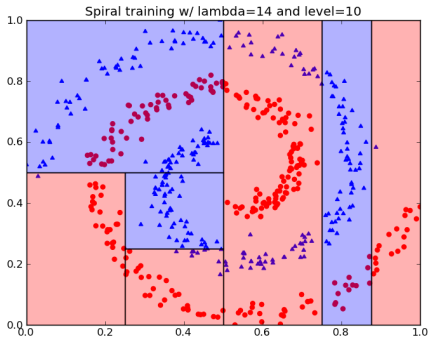
Sur-apprentissage

- Un arbre trop précis risque de mal généraliser (cf. k-NN)
- Les arbres peuvent être mal équilibrés
- On peut utiliser des techniques d'élagage (« pruning ») pour améliorer a posteriori la qualité des arbres

Arbres de décision : comportement







La complexité peut être contrôlée

- en limitant la profondeur
- en minorant le gain en homogénéité
- en ajoutant une pénalisation de complexité dans le coût
- en garantissant une bonne estimation des coûts (par ex. un nombre minimal d'échantillons par noeud)

Arbres de décision : Résumé

Points clés des arbres de décision

+ Interprétabilité
+ Apprentissage et classification rapides et efficaces, y compris en grande dimension.
- Tendance au surapprentissage (mais moyen de contrôle de la complexité)
- Sensibilité au bruit et aux points aberrants, instabilité

Utilisations

+ Classification ou régression...
+ Capable de traiter des données numériques, mais aussi symboliques

Méthodes ensemblistes

Méthodes ensemblistes

Définition

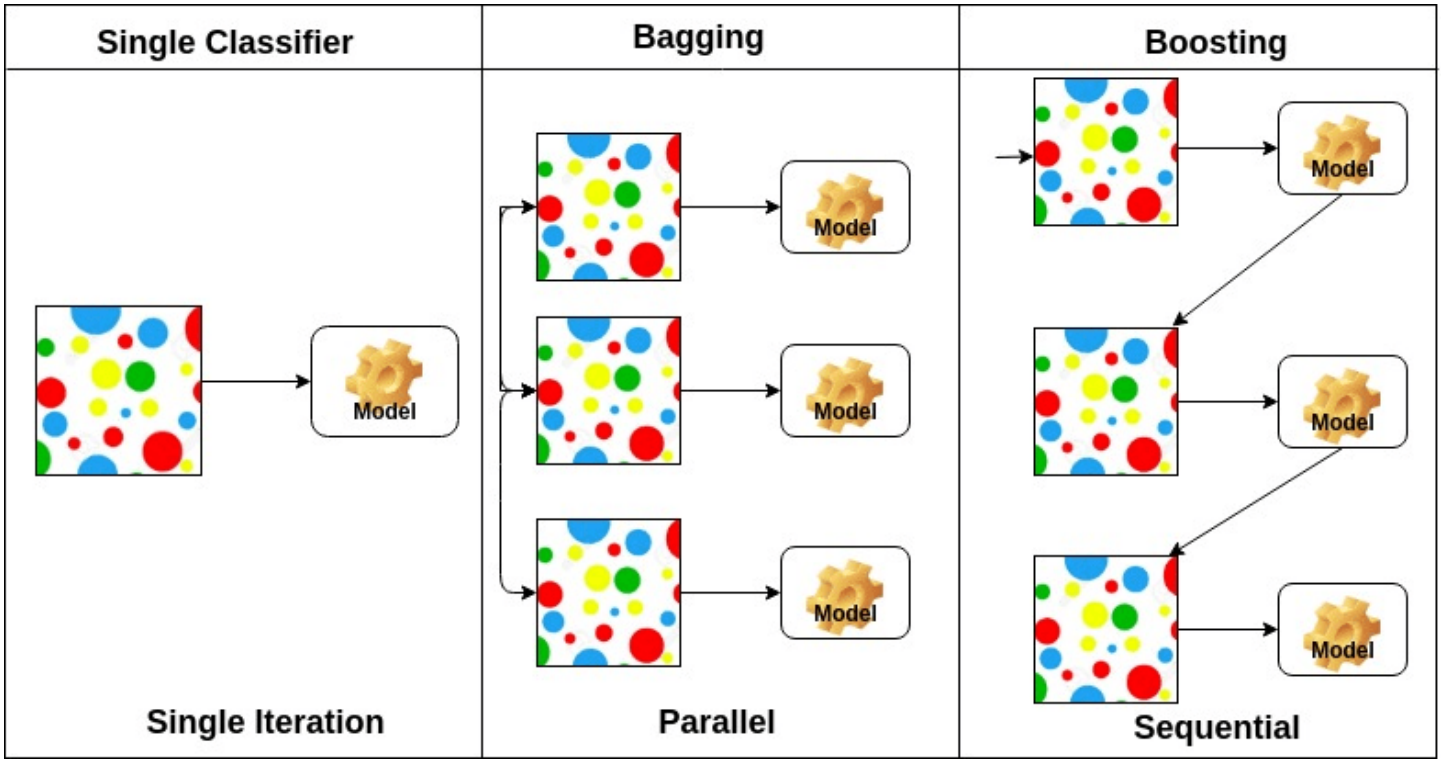
- Méthodes agrégeant des *ensembles* de classifieurs ;
- Produire une variété de classifieurs : en échantillonnant différemment les données, en modifiant les structures de classifieurs ;
- Classe finale = fusion des prédictions.

Principe

- *L'union fait la force* : tirer parti de plusieurs classifieurs plus ou moins médiocres pour construire un classifieur performant
  ➟ *Réduit la variance* d'apprentissage et moyenne les erreurs

Méthodes ensemblistes

Deux grandes approches : bagging et boosting



Bagging

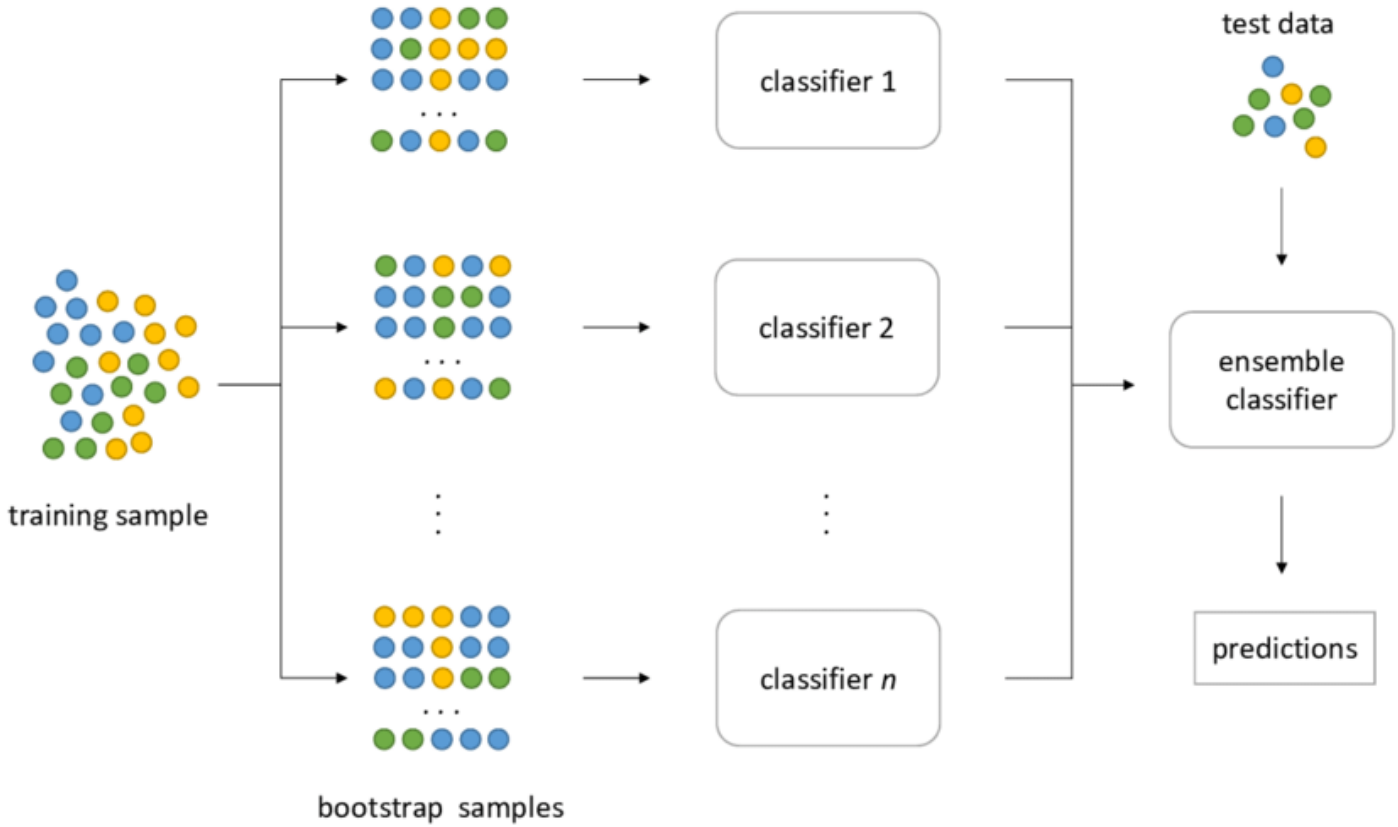
Génération de jeux de données multiples

- Construction de $\tilde{X}_1, ..., \tilde{X}_K$ par tirage avec remise sur X.
- $\tilde{X}_k$ similaires, mais pas trop (proba d'un exemple de ne pas être sélectionné $p = (1 - 1/N)^N$. Quand $N \to \infty$, $p \to 0.3679$.)
- Entraîner K fois le même algorithme f_k (arbre, réseau de neurones, SVM..) sur chaque $\tilde{X}_k$ et agréger par vote majoritaire ou moyenne $f(x) = \frac{1}{K} \sum f_k(x)$

Conséquence

- Chaque classifieur commet des erreurs différentes, liées à $\tilde{X}_k$ $\rightarrow$ l'agrégat a une plus faible variance d'apprentissage
- Méthode pour *régulariser* le processus de prédiction.

Bagging


training sample
bootstrap samples
classifier 1
classifier 2
classifier n
test data
ensemble classifier
predictions

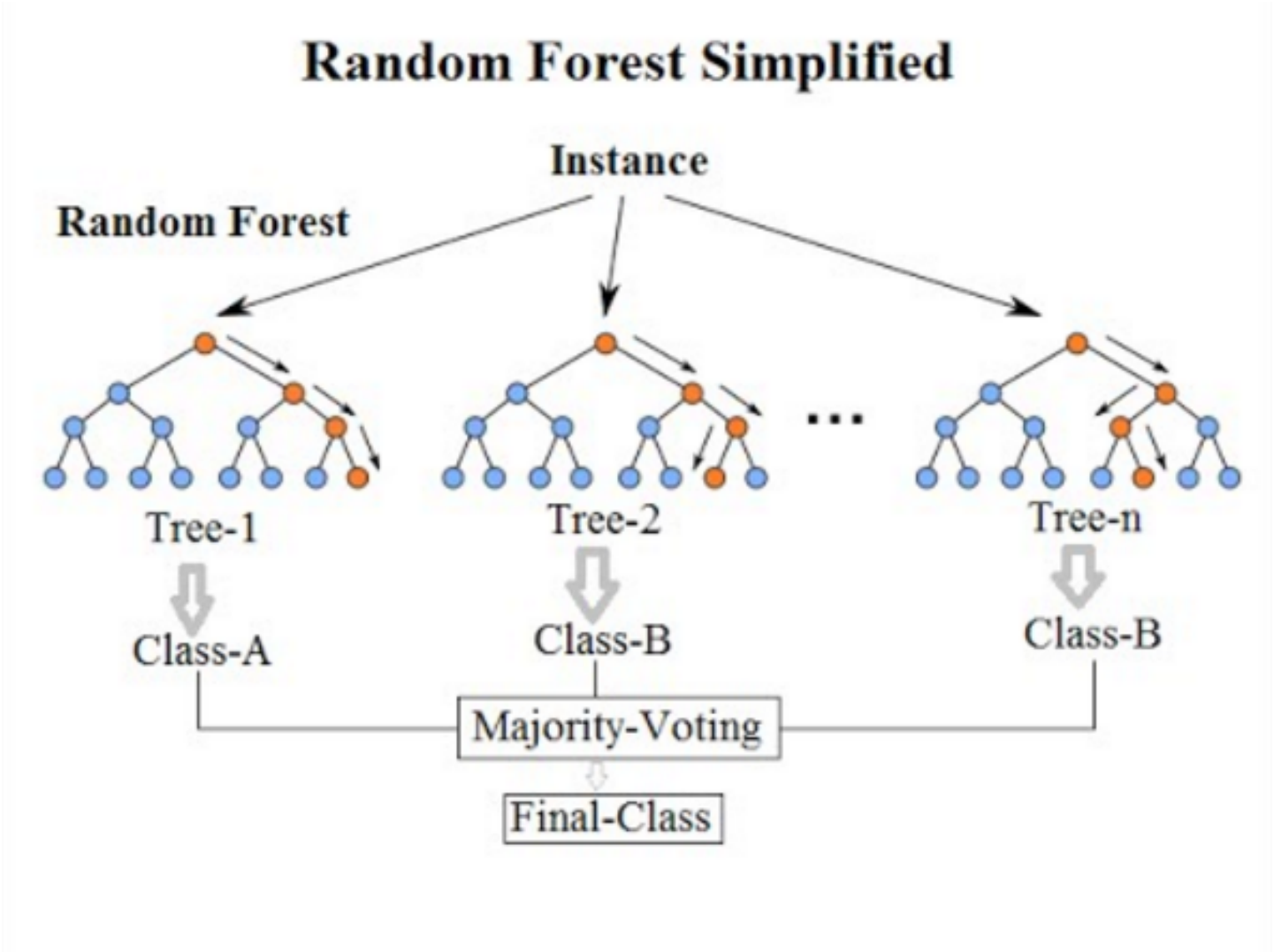
Random Forests

Forêts aléatoires ou *Random forests*

➠ Combiner hasard et bagging pour construire un ensemble d'arbres de décision encore plus varié (=forêt)

- La partie calculatoire des arbres de décision est la construction incrémentale de leur structure (meilleure paire attribut & test)
- Structure = paramètre de contrôle des arbres (profondeur max, critère de pureté des noeuds, nombre d'échantillons par noeud...) + aléatoire sur attributs/données/tests

Random Forests



Random Forests

Forêts aléatoires ou *Random forests*

Algorithme :

POUR $k = 1 \dots K$:

- Bagging : tirage de $\tilde{X}_k$ de même taille que X
- Tirage (avec remise) de q attributs A_i parmi les M possibles
- Construction de l'arbre G_k avec des seuils aléatoires
- Construction de f_k la fonction de décision de G_k dont les feuilles sont remplies avec $\tilde{X}_k$

Agrégation :

- $f(x) = \frac{1}{K} \sum f_k(x)$ (régression)
- $f(x) =$ Vote majoritaire$(f_1(x), \dots, f_K(x))$

Biais et variance

Exemple de la régression

$$y = f(\mathrm{x}) + \epsilon$$

Il y a deux sources d'aléatoire :

- Le bruit : ϵ (un même x peut produire différents y)
- L'échantillonnage des données d'apprentissage : D

On définit pour un prédicteur appris $\hat{f}_D(\mathrm{x})$:

Erreur écart quadratique moyen entre prédiction et valeur idéale

Biais erreur de la prédiction moyenne par rapport à la valeur idéale

Variance écart quadratique moyen entre prédiction et prédiction moyenne

Biais et variance

Compromis biais variance

L'erreur pour un x donné peut se décomposer en :

$$\begin{aligned}\mathrm{Err}(\mathrm{x}) &= E_D[(y - \hat{f}_D(\mathrm{x}))^2] \\ &= \underbrace{\epsilon^2}_{\text{bruit}^2} + \underbrace{(E_D[\hat{f}_D(\mathrm{x})] - y)^2}_{\text{biais}^2} + \underbrace{E_D[(E_D[\hat{f}_D(\mathrm{x})] - \hat{f}_D(\mathrm{x}))^2]}_{\text{variance}}\end{aligned}$$

L'origine de l'erreur de généralisation est double, mais les deux termes sont difficiles à contrôler individuellement.
Rem : pour la classification, une telle décomposition est plus difficile à obtenir, mais les comportements sont comparables.

Biais et variance

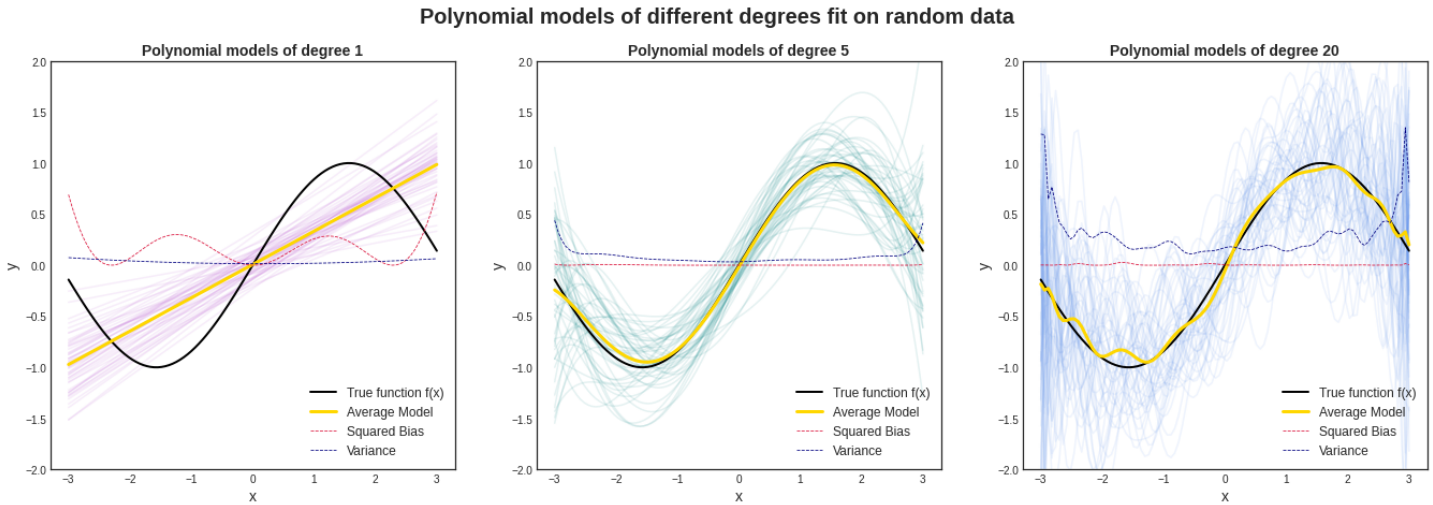


Figure 6 – Simulation d'une régression pour 50 échantillons et polynomes de degrés 1,5,20.

- Degré 1 : variance faible, mais biais important
- Degré 5 : variance et biais faibles
- Degré 20 : variance importante et biais très faible

Intérêt des approches ensemblistes

On introduit une source d'aléatoire supplémentaire : choix des splits, du sous ensemble de variables, etc.
Lorsque les prédicteurs individuels sont sans biais (c'est le cas avec les arbres), la variance du prédicteur ensembliste est :

$$\mathrm{var}\left(\hat{f}_D(\mathrm{x})\right) = \rho\sigma^2 + \frac{1-\rho}{K}\sigma^2$$

σ variance d'un prédicteur individuel et ρ corrélation entre deux prédicteurs.
On voit que l'on a intérêt à construire des prédicteurs individuels indépendants ($\rho \approx 0$), et en grand nombre (K grand).

Random Forests : Résumé

Points clés des forêts aléatoires

+ Bonnes performances
+ Arbres plus décorrélés que par simple bagging
+ Grandes dimensions
+ Robustesse
- Temps d'entraînement (mais aisément parallélisable).

Utilisation

- Choix d'une faible profondeur (2 à 5), autres hyper-paramètres à estimer par validation croisée
- Classification et régression
- Données numériques et symboliques

Boosting

Principe

- $X = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{N}$ un ensemble de données où $y_i \in \{-1, 1\}$
- H un ensemble ou une famille de classifieurs $f \mapsto -1, 1$, pas forcément performants ➞ appelés *weak learners*

Objectif du boosting :

- Construire un classifieur performant $F(x) = \sum_{k=1}^{K} \alpha_k f_k(x)$ ➞ appelé *strong learner*
- Moyenne *pondérée* des *weak learners*

➠ Comment trouver les poids ?

Boosting

AdaBoost

- Adaboost = « Adaptive boosting algorithm », algorithme minimisant l'erreur globale de F de manière itérative
- Principe : à chaque itération k, modifier F^k de manière à *donner plus de poids aux données difficiles* (mal-classées) qui permettent de corriger les erreurs commises par F^{k-1}

Boosting

AdaBoost : algorithme

Initialiser les poids liés aux données :
$d^0 \leftarrow (\frac{1}{K}, \frac{1}{K}, \ldots, \frac{1}{K})$
POUR $t = 1 \ldots K$:

- Entraîner f_k sur les données X pondérées par d^{k-1}
  $(f_k = \arg\min_f \sum_i d_i^{k-1}[y_i \neq f(x_i)])$
- Prédire $\hat{y} = y^i \leftarrow f_k(x_i), \forall i$
- Calculer l'erreur pondérée $\epsilon^k \leftarrow \sum_i d_i^{k-1}[y_i \neq \hat{y}_i]$
- Calculer les paramètres adaptatifs $\alpha^k \leftarrow \frac{1}{2} \log\left(\frac{1-\epsilon^k}{\epsilon^k}\right)$
- Re-pondérer les données $d^k = d_i^k \leftarrow d_i^{k-1} \exp\left(-\alpha^k y_i \hat{y}_i\right)$

Classifieur (pondéré) final : $F(x) = \mathrm{sgn}\left(\sum_{k=1}^K \alpha_k f_k(x)\right)$

Boosting

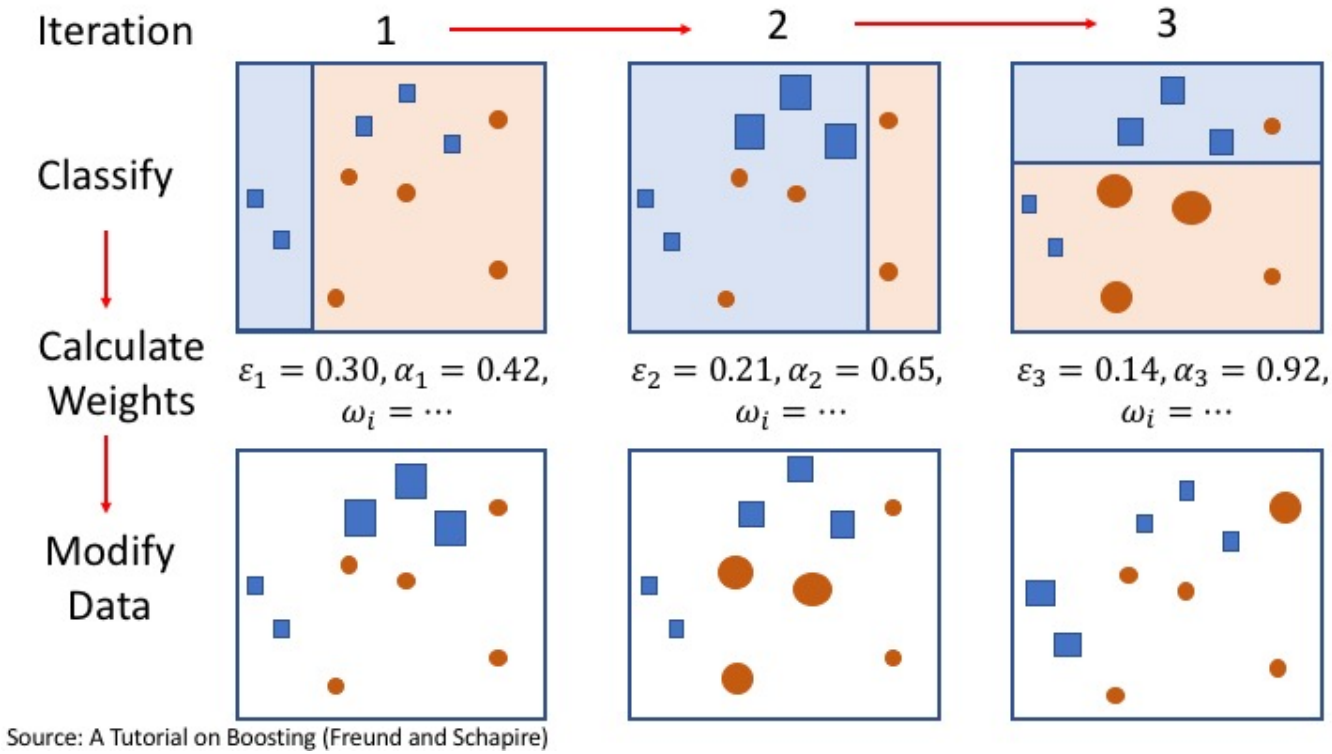
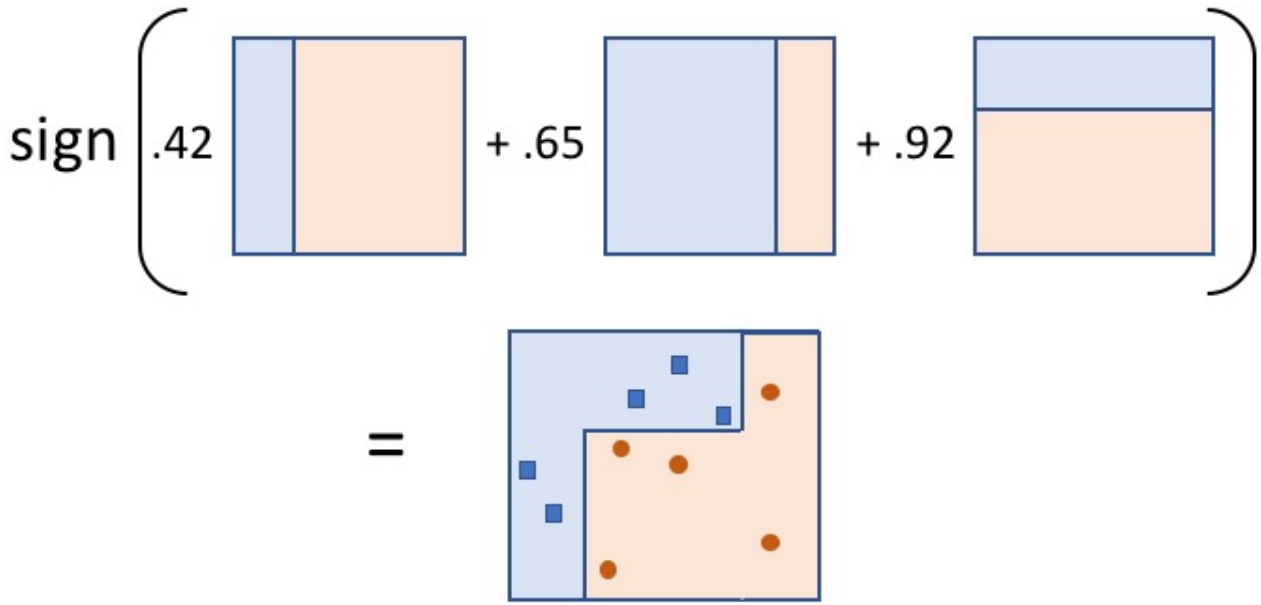


Figure 7 – Apprentissage séquentiel des classifieurs et des pondérations.

Boosting



Source: A Tutorial on Boosting (Freund and Schapire)

Figure 8 – Classifieur final.

Gradient Boosting

Gradient Boosting

Variante : version additive pas-à-pas

- $X = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N$ un ensemble de données où $y_i \in \{-1, 1\}$
- H un ensemble de classifieurs $f \mapsto -1, 1$, pas forcément performants → appelés *weak learners*

Objectif du gradient boosting :

- Construire itérativement un classifieur performant $F_T(x) = \sum_{t=1}^T \alpha_t f_t(x) = F_{T-1}(x) + \alpha_T f_T(x)$ où f_t est l'un des weak learners h.
- Il s'agit à chaque étape de minimiser le risque empirique : $\mathcal{L}(F_T) = \sum_{n=1}^N l(y_n, F_T(x_n))$ où l est un coût (*loss*)

Gradient Boosting

Coûts

- Adaboost → gradient boost avec fonction de coût $l(y, f(x)) = \exp(-y.f(x))$
- Adaboost peut être vu comme la construction itérative d'un classifieur optimal par minimisation du risque empirique à chaque pas.
- Cadre plus général : d'autres pénalités sont possibles :
  - LogitBoost : $l(y, f(x)) = \log_2(1 + \exp[-2y.f(x)])$
  - L_2 Boost : $l(y, f(x)) = (y - f(x))^2/2$
  - DoomII : $l(y, f(x)) = 1 - \tanh(y.f(x))$
  - Savage : $l(y, f(x)) = \frac{1}{(1+\exp(2y.f(x)))^2}$
- DoomII et Savage sont non-convexes → plus robustes aux données bruitées

Gradient Boosting

Pourquoi *Gradient* Boosting ?

- Chaque étape minimise le risque empirique :
  $\mathcal{L}(F_T) = \sum_{n=1}^{N} l(y_n, F_T(x_n))$ où l est un coût (*loss*)
- Lors de la variante additive d'adaboost, $\alpha_T f_T(x)$ peut donc être vu comme le *weak learner* qui approxime le mieux le pas d'une descente de gradient dans l'espaces des fonctions de classification
- Une version exacte de la descente de gradient donne les Gradient Boosting Models :
  $F_T(x) = F_{T-1}(x) + \alpha_T \sum_{i=1}^{N} \nabla_{F_{T-1}} l(y_i, f_{T-1}(x_i))$

Boosting : Résumé

Points clés du boosting

- Agrégation adaptative de classifieurs moyens
- \+ Résultats théoriques sur la convergence et l'optimalité du classifieur final
- \+ Très efficace (améliore n'importe quel ensemble de classifieurs)
- \+ Assez facile à mettre en oeuvre (moins vrai pour Gradient Boosting)
- \- Sensibilité aux données aberrantes, surapprentissage

Utilisations

- Choix du *weak learner* : ne doit pas être trop bon, sinon surapprentissage
- Choix de la pénalité en fonction du bruit des données
- Variantes pour la classification et la régression

Conclusion

Cours n°2 : Arbres de décision et méthodes ensemblistes

Notions phares du jour

- Arbres de décision (vote, homogénéité)
- Aggrégation de classifieurs
- Bagging, Random Forests
- Boosting, GradientBoost

Concepts généraux

- Classification / régression
- Bagging et randomisation (Forêts aléatoires)
- Construction adaptative à partir de *weak learners* et optimisation dans l'espace des classifieurs (Boosting)