Data Science for Actuaries (ACT6100)

Arthur Charpentier

Supervisé # 4 (Arbres)

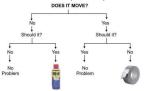
automne 2020



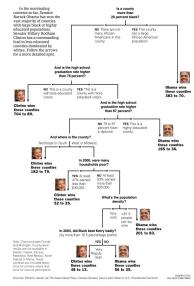
Terminologie

- Les régions finales obtenues sont nommées noeuds terminaux ou, plus souvent, feuilles de l'arbre.
- Les autres points où se font les divisions sont des noeuds internes de l'arbre.
- Les segments de l'arbre qui connectent les noeuds sont des branches.

via New York Times (2008)



Decision Tree: The Obama-Clinton Divide



Procédure cadre

Pour réaliser des prédictions à partir d'un arbre il faut

- 1. diviser l'espace des variables explicatives en J régions, R_1, \ldots, R_I , telles que
 - $ightharpoonup R_i \cap R_i = \emptyset, i \neq i \text{ et}$
 - $ightharpoonup R_1 \cup R_2 \cup \ldots \cup R_4 = \mathcal{X}_1 \times \mathcal{X}_2 \times \ldots \times \mathcal{X}_4$
- 2. Pour chaque observation qui tombe dans la région R_j , une prédiction identique sera faite en utilisant, par exemple, la **moyenne** des observations de cette classe:

$$\widehat{Y}_{R_j} = \frac{1}{|R_j|} \sum_{i: \mathbf{X}_i \in R_j} Y_i$$

ou la majorité pour un classifieur



Comment diviser l'espace des variables explicatives?

- La procédure cadre ne donne aucune indication sur la forme des régions: toutes les possibilités peuvent être tentées
- On limite la forme des régions à des (hyper-)rectangles (des rectangles dans \mathbb{R}^p) afin de simplifier la construction de l'arbre et de permettre une interprétation des résultats (sous la forme d'un graphique).
- On procède de manière itérative (arbre de décision)
- Chacun des noeuds se construit en optimisant une fonction objectif.

Pour une problématique de régression, on travaillera souvent avec la somme des erreurs au carré (SSE) ou l'erreur quadratique moyenne (MSE)

$$MSE = \sum_{j=1}^{J} \sum_{i: \mathbf{X}_i \in R_j} (y_i - \widehat{y}_{R_j})^2,$$

où \hat{y}_{R_i} est la valeur prédite dans la région R_i . On cherche alors une partition R_1, \ldots, R_J qui minimise le SSE.

Pour une problématique de classification, notons que

$$\mathsf{MSE}_{j} = \sum_{i: \mathbf{X}_{i} \in R_{j}} (y_{i} - \widehat{y}_{R_{j}})^{2} = n_{0,j} (0 - \widehat{y}_{R_{j}})^{2} + n_{1,j} (1 - \widehat{y}_{R_{j}})^{2}$$



$$\max\{\mathsf{MSE}_j\} = n_{0,j} \left(\frac{n_{0,j}}{n_{0,j} + n_{1,j}}\right)^2 + n_{1,j} \left(\frac{n_{0,j}}{n_{1,j} + n_{1,j}}\right)^2 = \frac{n_{0,j} n_{1,j}}{n_{0,j} + n_{1,j}}$$

de telle sorte que

$$MSE = \sum_{i=1}^{J} \frac{n_{0,j} n_{1,j}}{n_{0,j} + n_{1,j}} = \sum_{i=1}^{J} n_j \cdot \frac{p_{1,j}}{1 - p_{i,j}}$$

On parle d'impureté de Gini

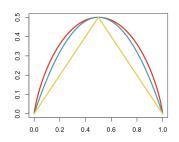


Formellement, l'impureté est une fonction $\psi(p_{1,j})$ avec ψ positive, symmétrique $(\psi(p) = \psi(1-p))$, minimale en 0 (et 1).

Example: Missclassification $\psi(p) = 1 - \max\{p, 1-p\}$

Example: Gini, $\psi(p) = p(1-p)$

Example: (cross) entropy, $\psi(p) = -plogp - (1-p)\log(1-p)$



- À nouveau, si on considère toutes les partitions possibles de l'espace des variables explicatives, on devra considérer un trop grand nombre de possibilités.
- On va plutôt utiliser un algorithme glouton descendant (top-down greedy approach) par division binaire récursive (recursive binary splitting).
- ▶ Algorithme **descendant**: on commence avec toutes les observations dans une même classe (racine de l'arbre) et on divise l'espace en régions de plus en plus petites.
- Algorithme glouton: l'optimisation se fait à chaque étape sans regard vers le passé ou vers l'avenir.

Division binaire récursive

Première étape: on sélectionne la variable explicative X_i et le point c tels que la division en deux régions

$$R_1(j,c) = \{X_1, \dots, X_J | X_j < c\}$$

$$R_2(j,c) = \{X_1, \dots, X_J | X_j \ge c\}$$

conduise à la plus grande réduction possible de la fonction objectif. Si la somme des erreurs au carré a été choisie, on cherche alors à minimiser

$$\sum_{i:\mathbf{X}_i\in R_1(j,c)} \left(Y_i - \widehat{Y}_{R_1(j,c)}\right)^2 + \sum_{i:\mathbf{X}_i\in R_2(j,c)} \left(Y_i - \widehat{Y}_{R_2(j,c)}\right)^2.$$

(ou n'importe quelle fonction d'impureté)

Division binaire récursive

Étapes suivantes: à l'étape k, on répète la procédure décrite à la première étape pour chacune des régions créées à l'étape k-1, c'est-à-dire que pour chacune des régions r, on doit identifier la variable explicative X_i et le point c qui vont minimiser la fonction objectif après la division donnée par

$$\{ \mathbf{X} \in r | X_j < c \} \text{ et } \{ \mathbf{X} \in r | X_j \ge c \}.$$

La procédure est arrêtée lorsqu'un certain critère est atteint. En l'absence de critère d'arrêt, l'arbre obtenu aura n feuilles (n n'étant pas nécessairement le nombre d'observations dans la base de données) \rightarrow surapprentissage.



Construction Hiérarchique d'Arbres de Classification

Classification = regrouper les individus en un nombre limité de classes

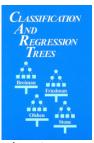
Ces classes sont construites au fur et à mesure

→ regrouper des des individus similaires, séparer des individus ayant des caractéristiques proches.

Histoire: date des années 1960,

puis Breiman et al. (1984).

outils devenu populaire en apprentissage automatique (machine learning)



Construction Hiérarchique d'Arbres de Classification

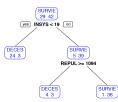
classification descendante :

on sélectionne par les variables explicatives la plus liée

- à la variable à expliquer Y,
- → donne une première division de léchantillon on réitère dans chaque classe
- \rightarrow chaque classe doit être la plus homogène possible, $\frac{\text{DECES}}{24.3}$ en Y

Différence par rapport à la régression logistique utilisation séquentielle des variables explicatives présentation des sorties sous forme d'arbre de décision

i.e. une séquence de noeuds





 $Y \in \{0,1\}$ et $X \in \mathbb{R}$: on découpe suivant un seuil s,

$$\begin{cases} \tilde{X} = L \text{ si } X \leq s \\ \tilde{X} = R \text{ si } X > s \end{cases}$$

Gini gini
$$(Y|\tilde{X}) = \sum_{\mathbf{x} \in \{1,R\}} \frac{n_{\mathbf{x},\cdot}}{n} \sum_{\mathbf{x} \in \{0,1\}} \frac{n_{\mathbf{x},\mathbf{y}}}{n_{\mathbf{x},\cdot}} \left(1 - \frac{n_{\mathbf{x},\mathbf{y}}}{n_{\mathbf{x},\cdot}}\right)$$



 $Y \in \{0,1\}$ et $X \in \mathbb{R}$: on découpe suivant un seuil s,

$$\begin{cases} \tilde{X} = L \text{ si } X \leq s \\ \tilde{X} = R \text{ si } X > s \end{cases}$$
$$\begin{vmatrix} \tilde{X} = L & \tilde{X} = R \\ Y \leq s & Y > s \end{vmatrix}$$

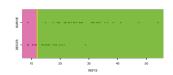
Entropie entropie
$$(Y|X) = -\sum_{x \in \{I,R\}} \frac{n_{x,\cdot}}{n} \sum_{y \in \{0,1\}} \frac{n_{x,y}}{n_{x,\cdot}} \log \left(\frac{n_{x,y}}{n_{x,\cdot}}\right)$$

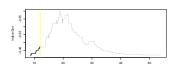


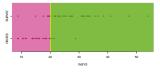


Découpage et indice de Gini

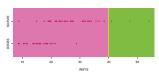
$$\sum_{x \in \{A,B\}} \frac{n_{x,\cdot}}{n} \sum_{y \in \{0,1\}} \frac{n_{x,y}}{n_{x,\cdot}} \left(1 - \frac{n_{x,y}}{n_{x,\cdot}}\right)$$

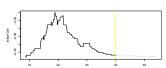








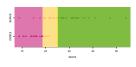




On fixe s, on cherche un second découpage,

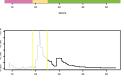
$$A = (-\infty, s_2]$$
 $B = (s_2, s]$ $C = (s, \infty)$

	$\tilde{X} = A$	$\tilde{X} = B$	$\tilde{X} = C$	
	$X \leq s_2$	$\tilde{X} = B$ $X \in (s_2, s]$	<i>X</i> > <i>s</i>	
Y=0	$n_{A,0}$	$n_{B,0}$	$n_{C,0}$	n.,0
Y = 1	$n_{A,1}$	$n_{B,1}$	$n_{C,1}$	n.,1
	$n_{A,\cdot}$	$n_{B,\cdot}$	$n_{C,\cdot}$	n



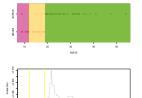
Découpage et indice de Gini

$$\sum_{x \in \{A,B,C\}} \frac{n_{x,\cdot}}{n} \sum_{y \in \{0,1\}} \frac{n_{x,y}}{n_{x,\cdot}} \left(1 - \frac{n_{x,y}}{n_{x,\cdot}}\right)$$



On fixe s, on cherche un second découpage,

$$A = (-\infty, s]$$
 $B = (s, s_2]$ $C = (s_2, \infty)$



Découpage et indice de Gini

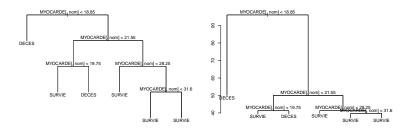
$$\sum_{x \in \{A,B,C\}} \frac{n_{x,\cdot}}{n} \sum_{y \in \{0,1\}} \frac{n_{x,y}}{n_{x,\cdot}} \left(1 - \frac{n_{x,y}}{n_{x,\cdot}}\right)$$



Élagage de l'arbre

Étape 1 Construction de l'arbre par un processus récursif de divisions binaires

Étape 2 Élagage de l'arbre (pruning), en supprimant les branches trop vides, ou peu représentatives → besoin d'un critère d'élagage (gain en entropie)

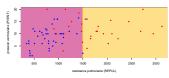


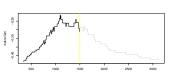
Cas de plusieurs variables quantitatives

$$Y \in \{0,1\}$$
 et $X_1, X_2 \in \mathbb{R}$: on découpe X_1 suivant un seuil s ,
$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{X} = A \text{ si } X_1 \leq s \\ \tilde{X} = B \text{ si } X_1 > s \end{array} \right.$$

	$\begin{array}{c c} \tilde{X} = A \\ X_1 \le s \end{array}$	$\tilde{X} = B$	
	$X_1 \leq s$	$X_{1} > s$	
Y=0	$n_{A,0}$	$n_{B,0}$	n.,0
Y=1	$n_{A,1}$	$n_{B,1}$	<i>n</i> .,1
	$n_{A,\cdot}$	$n_{B,\cdot}$	n

$$\sum_{x \in \{A,B\}} \frac{n_{x,\cdot}}{n} \sum_{y \in \{0,1\}} \frac{n_{x,y}}{n_{x,\cdot}} \left(1 - \frac{n_{x,y}}{n_{x,\cdot}}\right)$$



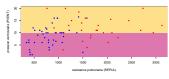


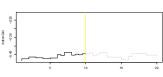
Cas de plusieurs variables quantitatives

$$Y \in \{0,1\}$$
 et $X_1, X_2 \in \mathbb{R}$: on découpe X_2 suivant un seuil s ,
$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{X} = A \text{ si } X_2 \leq s \\ \tilde{X} = B \text{ si } X_2 > s \end{array} \right.$$

	$\tilde{X} = A$	$\tilde{X} = B$	
	$X_2 \leq s$	$X_2 > s$	
Y=0	$n_{A,0}$	$n_{B,0}$	n.,0
Y = 1	$n_{A,1}$	$n_{B,1}$	$n_{\cdot,1}$
	$n_{A,.}$	$n_{B,\cdot}$	n

$$\sum_{x \in \{A,B\}} \frac{n_{x,\cdot}}{n} \sum_{y \in \{0,1\}} \frac{n_{x,y}}{n_{x,\cdot}} \left(1 - \frac{n_{x,y}}{n_{x,\cdot}}\right)$$





Cas de variables qualitatives

X prend des valeurs $\{a, b, c, d\}$.

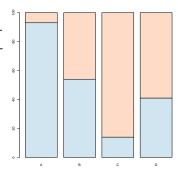
Au lieu de faire un arbre par découpages successifs, on peut faire un arbre par regroupement successifs.

$$\{a, b, c, d\}$$

$$\{(a, b), c, d\} \{(a, d), b, c\} \{(a, d), b, c\}$$

$$\{(b, c), a, d\} \{(b, d), a, c\} \{(c, d), a, b\}$$

$$\{(b, c, a), d\} \{(b, c, d), a\} \{(b, c), (a, d)\}$$



Cas de variables qualitatives

X prend des valeurs $\{a, b, c, d\}$.

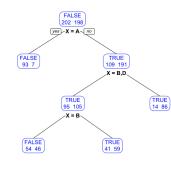
Au lieu de faire un arbre par découpages successifs, on peut faire un arbre par regroupement successifs.

$$\{a, b, c, d\}$$

$$\{(a, b), c, d\} \{(a, d), b, c\} \{(a, d), b, c\}$$

$$\{(b, c), a, d\} \{(b, d), a, c\} \{(c, d), a, b\}$$

$$\{(b, c, a), d\} \{(b, c, d), a\} \{(b, c), (a, d)\}$$



Cas de variables qualitatives

X prend des valeurs $\{a, b, c, d\}$.

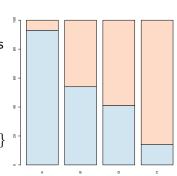
Mais classiquement, on va ordonner modalités

$$\{a,b,d,c\}$$

puis trouver le découpage optimale

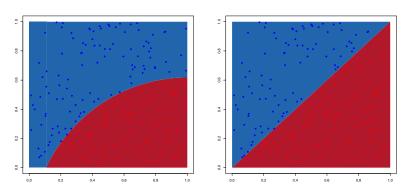
$$\{(a),(b,d,c)\}\ \{(a,b),(d,c)\}\ \{(a,b,d),(c)\}$$

$$\{(a),(b,d),(c)\}\ \{(a),(b),(d,c)\}$$



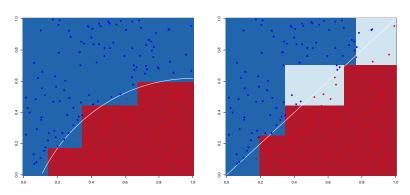
Méthode CART et extensions

On se contente de faire des coupes suivant X_1 ou X_2 .



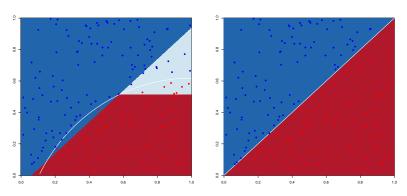
Méthode CART et extensions

mais ne marche pas bien en présence de non linéarités, ou de rotations

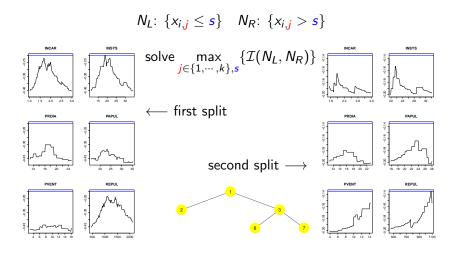


Méthode CART et extensions

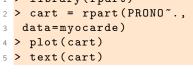
on peut aussi tenter des arbres sur $X_1 + X_2$

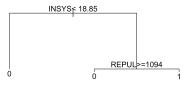


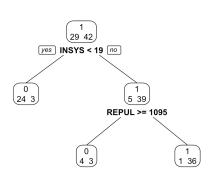
Mise en oeuvre



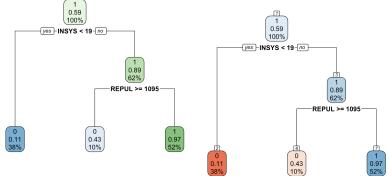








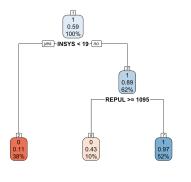
```
1 > print(cart, digits = 2)
2 1) root 71 29 1 (0.408 0.592)
3 2) INSYS < 19 27 3 0 (0.889 0.111) *
4 3) INSYS >= 19 44 5 1 (0.114 0.886)
5 6) REPUL >= 1094.5 7 3 0 (0.571 0.429) *
7) REPUL < 1094.5 37 1 1 (0.027 0.973) *
```

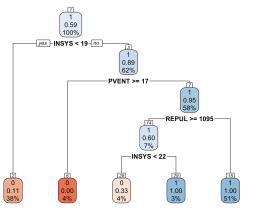


```
> rpart.rules(cart, extra = 4, cover = TRUE)
 PRONO
                                                                 cover
    0 [.89 .11] when INSYS <
                                                                   38%
3
    0 [.57 .43] when
                          INSYS >= 19
                                                                   10%
                                         & REPUL >= 1095
4
    1 [.03 .97] when
                         INSYS >= 19 & REPUL <
                                                                   52%
                                                        1095
5
   rpart.plot(cart, box.
                                    > rpart.plot(cart, box.
      palette="RdBu", type
                                         palette="RdBu", type=4)
      =5)
                                               0.59
            INSYS
                                               100%
   < 19
                                     INSYS < 19
                       >= 19
                                                        >= 19
                      REPUL
                                                        0.89
                                                        62%
                >= 1095
                             < 1095
                                                REPUL >= 1095
                                                              < 1095
                 0
                              0.97
   0.11
                0.43
                              52%
                 10%
                                      0.11
                                                  0.43
                                                              0.97
                                                  10%
```

```
> library(plotmo)
                                > plotmo(cart, type = "prob
2 > plotmo(cart, type
                                     ", nresponse = "1",
     prob", nresponse =
                                     type2 = "image", ngrid2
      "1")
                                     = 200)
                   1 INSYS: REPUL
                                      1 INSYS
                                                     2 REPUL
      1 INSYS: REPUL
                                                0.0
        INSYS
 > path2root = function(node){
    if(node == 1) node
2
    else c(node, path.to.root(node %/% 2))}
```

```
> cart = rpart(PRONO~.,data=
    myocarde, minsplit = 5,
    cp = 0.01)
rpart.plot(cart, box.palette="
    RdBu", nn=TRUE)
```





```
_1 > node = 15
                                2 > nodes = as.numeric(row.
 > boxcols =c("red", "blue
                                      names(cart$frame))
      ") [cart$frame$yval]
                                3 > cols = ifelse(nodes %in%
2 > prp(cart, faclen = 0,
                                4 path2root(node), "red", "blue")
      node.fun=only_count,
                                5 prp(cart, nn = TRUE, col =
      box.col = boxcols)
                                      cols, branch.col = cols,
                                      split.col = cols)
        INSYS < 19 no
     yes
                                    yes INSYS < 19 no
              PVENT >= 17
                                             PVENT >= 17
                   REPUL >= 1095
                                                   REPUL >= 1095
              INSYS < 22
     died
                                              INSYS < 22
     survived
```

Critère d'arrêt

- On utilise souvent comme critère d'arrêt le fait d'avoir un nombre minimal d'observations dans chacune des régions.
- Utiliser comme critère d'arrêt le fait d'avoir une diminution de la fonction objectif qui dépasse un certail seuil n'est généralement pas une bonne idée.
- Même si un critère d'arrêt approprié est sélectionné, il y a fort à parier que l'arbre conduise à du surajustement, c'est-à-dire qu'il performera (trop) bien sur une base de données d'entrainement mais sera mauvais sur une base de données d'évaluation.

Critère d'arrêt

Formellement, pour savoir si on coupe une feuille $\{N\}$ en deux branches $\{N_L, N_R\}$, on mesure la variation d'impureté

$$\Delta \mathcal{I}(N_L, N_R) = \mathcal{I}(N) - \mathcal{I}(N_L, N_R) = \mathcal{I}(N) - \left(\frac{n_L}{n} \mathcal{I}(N_L) + \frac{n_R}{n} \mathcal{I}(N_R)\right)$$

On coupe si $\Delta \mathcal{I}(N_L, N_R)/\mathcal{I}(N)$ dépasse cp (complexity parameter, par défaut 1%).

```
1 > cart = rpart(PRONO ~ ., data =
         myocarde, minsplit=3)
2 > plotcp(cart)
```

```
1 > prune(cart, cp=0.06)
2 node), split, n, loss, yval, (yprob) *= terminal node
3
4 1) root 71 29 SURVIE (0.40845070 0.59154930)
5 2) INSYS < 18.85 27 3 DECES (0.888889 0.1111111) *
6 3) INSYS >= 18.85 44 5 SURVIE (0.113636 0.886363)
7 6) PVENT >= 17.25 3 0 DECES (1.000000 0.000000) *
7) PVENT < 17.25 41 2 SURVIE (0.048780 0.951219) *</pre>
```

Élagage de l'arbre (pruning)

- ▶ Une meilleure stratégie consiste en (1) construire un très gros arbre de départ \mathcal{T}_0 et (2) couper certaines branches de l'arbre.
- ightharpoonup On cherchera à identifier le sous-arbre $\mathcal{T} \subset \mathcal{T}_0$ qui minimise

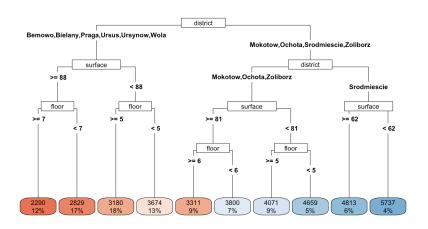
$$\sum_{m=1}^{|\mathcal{T}|} \sum_{i: \mathbf{X}_i \in R_m} \left(Y_i - \widehat{Y}_{R_m} \right)^2 + \alpha |\mathcal{T}|,$$

où α est un (hyper-)paramètre de complexité et $|\mathcal{T}|$ représente le nombre de feuilles du sous-arbre \mathcal{T} .

- Similaire à la régression Ridge/Lasso: compromis entre le biais et la variance, entre la précision et la parcimonie.
- Le paramètre de complexité peut être estimé par validation croisée.

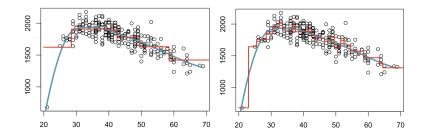
Arbres de régression, $y \in \mathbb{R}$

1 > library(DALEX)
2 > arbre=rpart(m2.price~., data=apartments)
3 > rpart.plot(arbre, box.palette="RdBu", type=5)



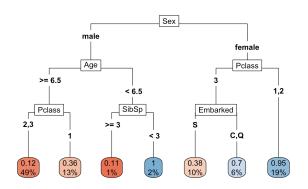
Arbres de régression, $y \in \mathbb{R}$

```
> arbre=rpart(y~x, data=base)
> predict(arbre,newdata = data.frame(x=x))
```



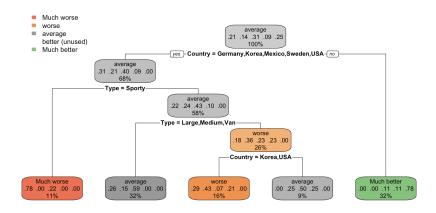
Arbres de classification, $y \in \{0, 1\}$

```
1 > loc_fichier = "http://freakonometrics.free.fr/
        titanic.RData"
2 > download.file(loc_fichier, "titanic.RData")
3 > load("titanic.RData")
4 > cart = rpart(Survived~.,data=base[,1:7])
5 > rpart.plot(cart, box.palette="RdBu", type=5)
```



Arbres de classification, $y \in \{A, B, C, D\}$

- 2 > rpart.plot(multi.class.model)

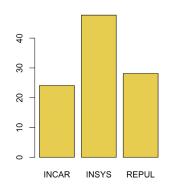


Instabilité des arbres

Considérons ici plusieurs bases d'apprentissage

La variable utilisée au premier noeud est

- ► INSYS (47.7%)
- ► REPUL (28.2%)
- ► INCAR (24.1%)

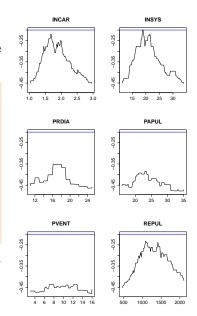


Importance des variables

On avait déjà intuité l'importance de ces trois variables sur le graphique

```
> cart = rpart(PRONO~.,
   myocarde)
> split = summary(cart)
   $splits
> split
      count ncat
                   improve
INSYS
         71
             -1 0.58621312
REPUL
     71 1 0.55440034
INCAR 71 -1 0.54257020
      71 1 0.27284114
PRDIA
PAPUL
         71
              1 0.20466714
```

et on peut calculer les mêmes quantités à chaque noeud

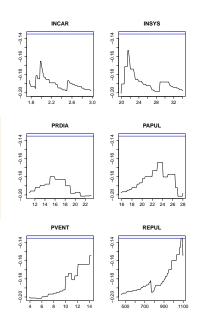


Importance des variables

pour le second noeud

е
8
1
1
1
2

etc



Importance des variables

```
> cart$variable.importance
  INSYS
         REPUL
               INCAR PAPUL
                             PRDIA
                                    FRCAR
                                           PVENT
3 20.113 19.132 15.895 5.959
                             5.214 3.725
                                           0.498
```