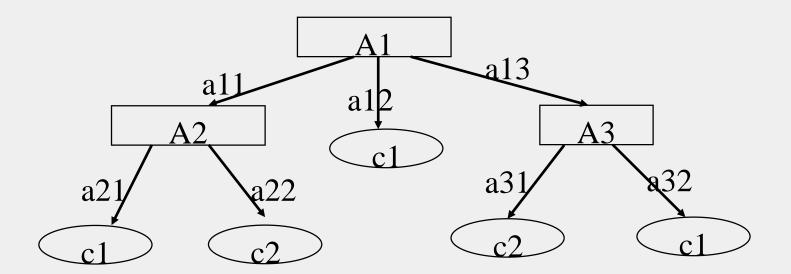
Arbres de décision

- Algorithme d'apprentissage supervisé :
 - ✓ Problèmes de classification (binaire ou multivaluée)
 - ✓ Les attributs peuvent être discrets (binaires ou multi-valués) ou continus.
- Arbres de classification inventés 2 fois :
 - ✓ Par des statisticiens: CART (Breiman et al. 1982
 - ✓ Par la communauté d'IA : ID3, C4.5 (Quinlan et al. 1984)

- Un arbre de décision est un arbre où :
 - Chaque nœud intermédiaires teste un attribut
 - Chaque branche correspond à une valeur d'attribut
 - Chaque feuille est étiquetée par une classe



Premier exemple : le diagnostic médical

Patient	Rythme cardiaque	Pression artérielle	Classe
1	irrégulier	normale	Malade
2	régulier	normale	En forme
3	irrégulier	anormale	Malade
4	irrégulier	normale	Malade
5	régulier	normale	En forme
6	régulier	anormale	Malade
7	régulier	normale	En forme
8	régulier	normale	En forme

Base d'apprentissage de 8 données

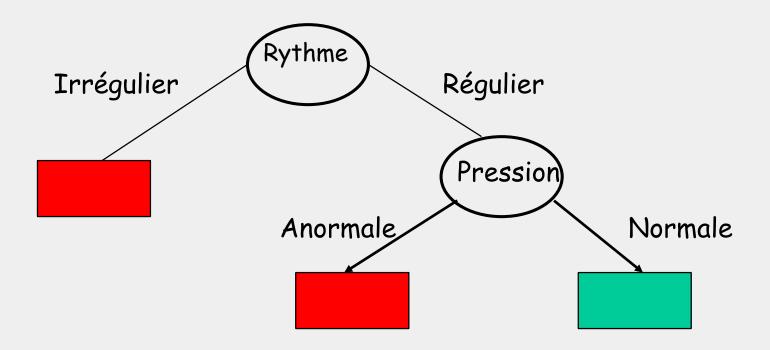
Objectif

A partir des 8 exemples, apprendre un classifieur capable de fournir une classe à partir de la description du patient

Remarque:

Dans cet exemple, les valeurs des attributs sont symboliques (pas d'ordre sur les valeurs)

Un arbre de décision définit une fonction de classification dans l'espace (l'ensemble) d'entrée



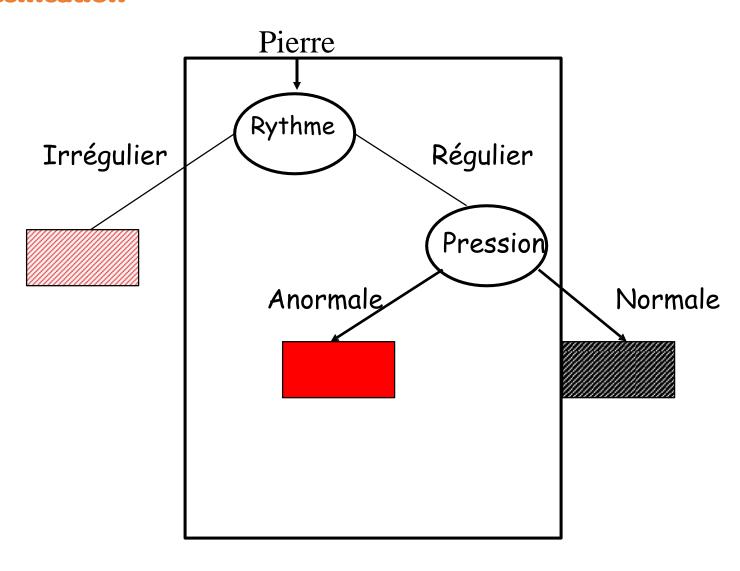
Utiliser un arbre de décision en classification

Une fois appris, l'arbre sert à prendre des décision sur de nouvelles données.

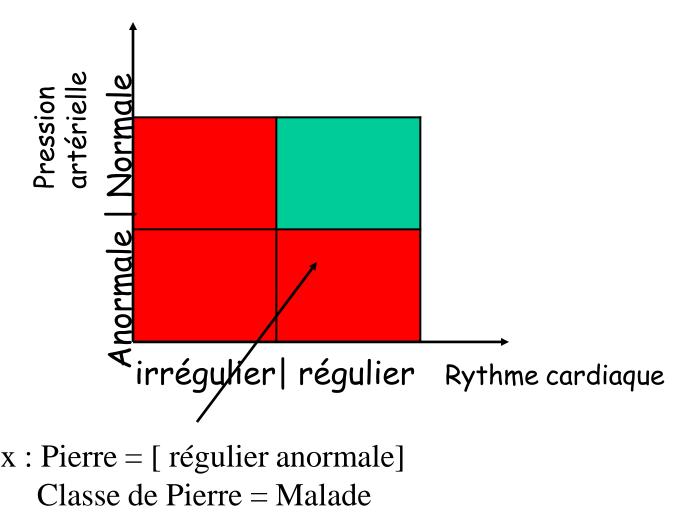
Pierre se rend chez le médecin Il a un rythme cardiaque régulier mais une pression artérielle anormale Est-il malade?

Pour donner la réponse : parcourir l'arbre en répondant aux questions.

Utilisation en classification



Classes selon l'état du patient

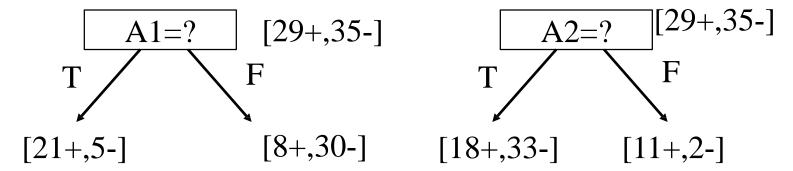


Ex : Pierre = [régulier anormale]

Algorithme de construction d'un arbre de décision

- 1) Choisir le "meilleur" attribut
- 2) Diviser l'ensemble d'apprentissage suivant les valeurs de l'attribut choisi
- 3) Répéter les étapes 1 et 2 de manière récursive jusqu'à ce que tous les objets soient correctement classés.

Comment choisir le meilleur attribut ?



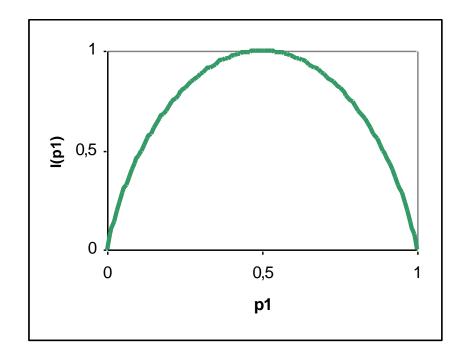
- Obtenir un petit arbre :
 - Maximiser la séparation des classes à chaque étape,
 i.e. rendre les ensembles "successeurs" aussi pures que possible
 - ⇒ Ceci favorise les chemins courts dans l'arbre

Mesure d'impureté

• Entropie de Shannon:

$$\checkmark H(S) = \sum_{ci \in C} -P(ci)log2P(ci)$$

- ✓ Pour 2 classes, $p_1=1-p_2$
- \checkmark P(ci) = $\frac{|ci|}{|S|}$



- · L'entropie mesure l'impureté, l'incertitude, la surprise...
- · La réduction de l'entropie s'appelle : gain d'informations

Impureté

- Soit S un ensemble d'objets, p_j les proportions d'objets de classe j (j=1,...,J) dans S,
- On définit une mesure d'impureté H(S) qui satisfait les conditions suivantes :
 - H(S) est minimum seulement quand p_i =1 et p_j =0 pour $j\neq i$ (tous les objets sont dans la même classe)
 - H(S) est maximum seulement quand p_j =1/J (il y a exactement le même nombre d'objets de toutes les classes)
 - H(S) est symétrique par rapport à $p_1,...,p_J$

Réduction de l'impureté

Etant donnée un vecteur de caractéristiques \overrightarrow{f} , en utilisant les valuers d'une caractéristique f_i , on peut diviser l'ensemble de donnée S en plusieurs sous ensembles groupés dans un ensemble S_i . Le gain d'information est mesuré en se basant sur la différence entre l'entropie originale de S et celle après sa division en se basant sur une caractéristique f_i .

$$IG(S, f_j) = H(S) - \sum_{S_{jk} \in S_j} P(S_{jk})H(S_{jk})$$

Où:

$$P(S_{jk}) = \frac{|S_{jk}|}{|S|}$$

Exemple

<u> </u>					
temps	température	humidité	vent	jouer	
ensoleilé	chaude	haute	non	non	
ensoleilé	chaude	haute	oui	non	
nuageux	chaude	haute	non	oui	
pluvieux	douce	haute	non	oui	
pluvieux	fraîche	normale	non	oui	
pluvieux	fraîche	normale	oui	non	
nuageux	fraîche	normale	oui	oui	
ensoleilé	douce	haute	non	non	
ensoleilé	fraîche	normale	non	oui	
pluvieux	douce	normale	non	oui	
ensoleilé	douce	normale	oui	oui	
nuageux	douce	haute	oui	oui	
nuageux	chaude	normale	non	oui	
pluvieux	douce	haute	oui	non	
piuvieux	douce	naute	oui	non	

On calcule la probabilité de chaque classe:

P(jouer=oui) = 9/14

P(jouer=non) = 5/14

On calcule, ensuite, l'entropie de l'ensemble des données:

H(S) = - P(jouer=oui) * log2(P(jouer=oui)) - P(jouer=non) * log2(P(jouer=non))

H(S) = -9/14 * log2(9/14) - 5/14 * log2(9/14)

H(S) = 0.41 + 0.53 = 0.94

Exemple

Pour chaque caractéristique, on calcule le gain d'information.

temps:

Le caractéristique "temps" divise les données sur 3 sous ensembles. Voici le nombre des occurrences de chaque classe dans

chaque sous-ensemble:

temps	jouer (oui)	jouer (non)
ensoleilé	2	3
nuageux	4	0
pluvieux	3	2

On calcule la probabilité de chaque ensemble:

$$P(S_nuageux) = 4/14$$

$$P(S_pluvieux) = 5/14$$

On calcule l'entropie de chaque ensemble:

$$P(S_nuageux) = -4/4 * log2(4/4) - 0/4 * log2(0/4) = 0$$

$$P(S_pluvieux) = -3/5 * log2(3/5) - 2/5 * log2(2/5) = 0.971$$

Le gain d'information de la caractéristique "temps":

$$IG(S, temps) = 0.94 - 5/14 * 0.971 - 4/14 * 0 - 5/14 * 0.971$$

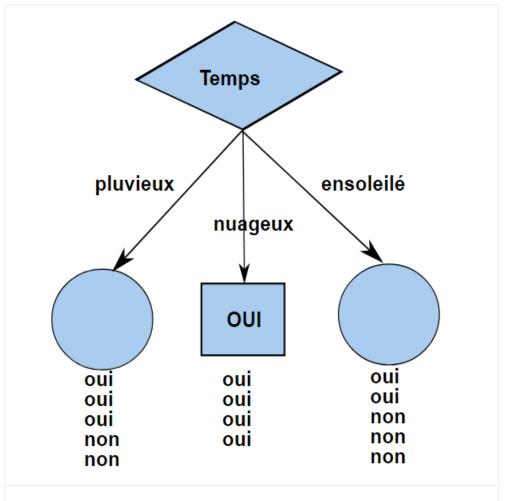
$$IG(S, temps) = 0.247$$

Exemple

En calculant le gain d'information des autres caractéristiques

	temps	température	humidité	vent
IG	0.247	0.029	0.152	0.048

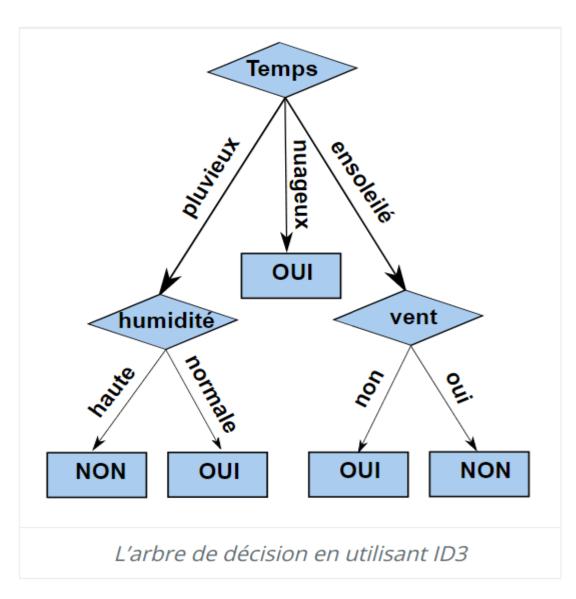
Donc, la première caractéristique à vérifier dans l'arbre sera "temps". Comme l'entropie du temps étant "nuageux" est 0, cet ensemble contient des échantillons de la même classe. Donc, cet ensemble forme une feuille.



Division des données selon la caractéristique "temps"

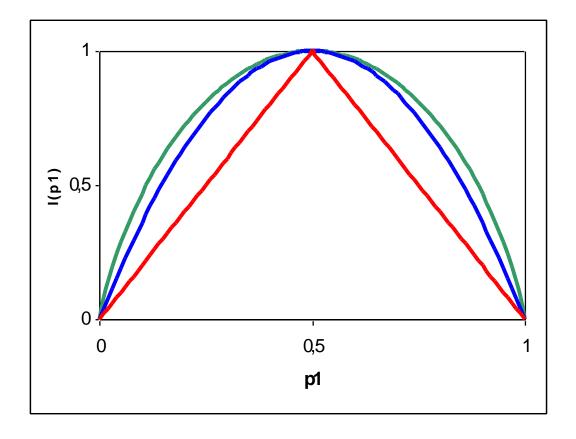
Exemple

On fait la même chose sur les sous ensembles.



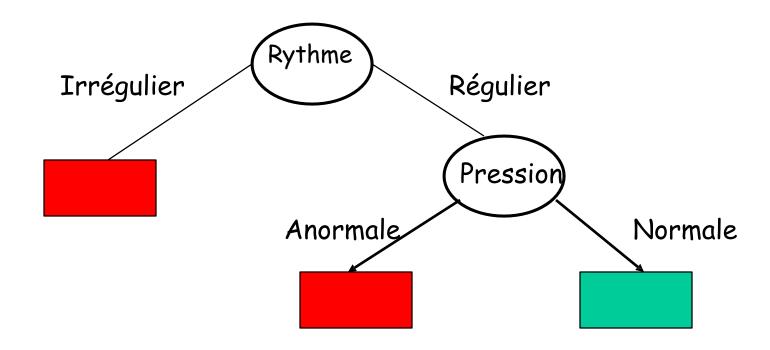
Autres mesures d'impureté

- · Index de Gini:
 - $I(S)=\sum_j p_j (1-p_j)$
- · Taux d'erreurs de classification :
 - $I(S)=1-\max_j p_j$
- Cas de deux classes (après normalisation)



Arbre de décision

Un arbre de décision définit une fonction de classification dans l'espace (l'ensemble) d'entrée



Algorithme de construction d'un arbre binaire (récursif)

- 1. Soit S l'ensemble de données courant Calculer les gains d'informations pour chaque attribut Choisir l'attribut qui apporte le plus d'information Construire le nœud avec cet attribut
- 2. Partager les données S en 2 sous-ensembles : S(gauche) et S(droit) Tels que les données qui vérifient le test sur l'attribut vont à gauche Les données qui ne vérifient pas le test vont à droite
- 3. Si S(gauche) contient uniquement des exemples d'une classe alors arrêter la construction à gauche sinon aller en 1
- 4 idem du côté droit

Attributs numériques : comment les traiter ?

Exemple: température, pression, longueurs,...

Solution: poser une question du type x > a avec a valeur à déterminer

On définit l'information mutuelle par :

$$\Delta I(S, X:a) = I(S) - I(S,X:a)$$

Avec:

$$I(S,X:a) = P(X < a) I(S,X= a)I(S,x >= a)$$

$$\Delta I(S, X) = \max_{a} \{I(S, X; a)\}$$

Attributs numériques

Comment choisir a?

On prend par exemples toutes les valeurs entre MinX et MaxX avec un pas de (MaxX-MinX)/m. m définit la granularité avec laquelle On veut étudier les données

Valeurs de l'attribut X



MinX et MaxX

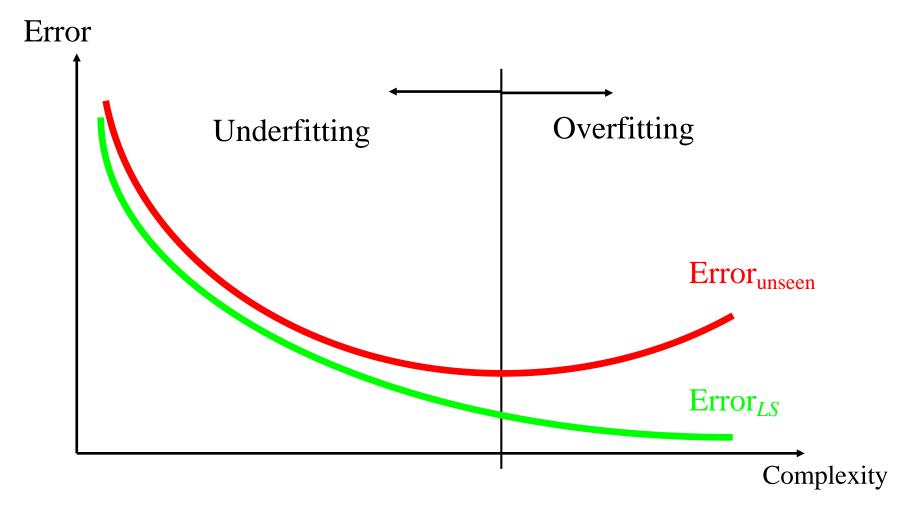
Compromis profondeur de l'arbre/généralisation

Arbre complet: feuilles "pures" -> risque d'overfitting

Solution: arrêter l'arbre suivant un nb minimal d'exemples dans une feuille

Autre solution: construire complètement puis élaguer suivant un ensemble de validation (distinct de l'ensemble d'apprentissage)

Overfitting



En pratique, Error_{unseen}(T) est estimée à partir d'un ensemble de test.

Comment élaguer ?

- La méthode la plus simple est d'utiliser un ensemble de test, distinct de l'ensemble d'apprentissage.
- On parcourt l'arbre construit en comparant à chaque nœud intermédiaire l'erreur effectuée sur les données présentes
- si on s'arrêtait à ce nœud et la somme des erreurs effectuées sur les deux nœuds fils.
- Si l'adjonction des deux nœuds fils n'apporte pas d'amélioration, on les supprime.

Elagage d'un arbre de décision

L'arbre maximal construit selon la méthode que nous avons décrite risque de sur-apprendre les données d'apprentissage.

Un algorithme de post-élagage consiste à remettre en cause chaque nœud de l'arbre en utilisant :

- soit un ensemble de validation
- soit la validation croisée.

Exemple d'algorithme d'élagage

Notations:

 T_k arbre à k feuilles en moins

 T_{max} : arbre construit à partir de S (maximal).

Idée de l'élagage :

On construit un ensemble d'arbres à partir de T_{max} avec de moins en moins de feuilles.

Elagage d'un arbre de décision

On utilise un ensemble de validation différent de l'ensemble d'apprentissage.

```
Elaguer(T_{max}):
K←0
T_k \leftarrow T_{max}
TANT QUE T, a plus d'un nœud FAIRE
  POUR chaque nœud v de T, FAIRE
   calculer w(T_k, v) sur exemples appr. ou valid.
  FIN POUR
  choisir v_m = \text{tel que } w(T_k, v) \text{ soit minimum}
  T_{k+1}: T_k où v_m a été remplacé par une feuille
  k \leftarrow k+1
FIN_TANT_QUE
   Pour finir, on choisit parmi {Tmax, T1, ... Tn} l'arbre qui a
  la plus petite erreur de classification sur l'ensemble de <u>validation</u>
```

Critère en chaque nœud

Soit l'arbre T, et v un de ses nœuds, et :

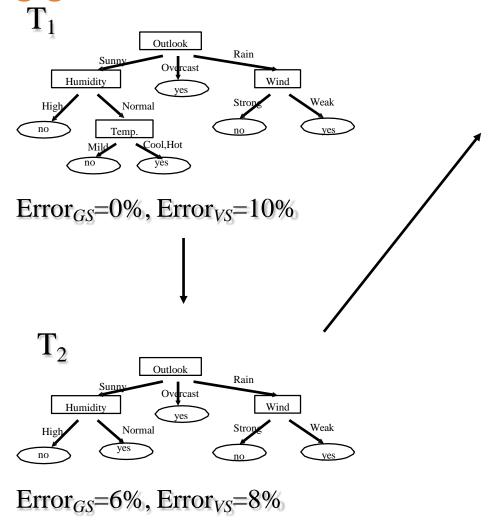
- MC(T,v) = nb d'exemples Mal Classés par v dans T
- MC_{ela}(T,v) = nb d'exemples Mal Classés par v dans l'arbre T <u>élagué à v</u>
- n(T) = nb de feuilles de T
- nt(T,v) = nb de feuilles du sous-arbre de T sous nœud v

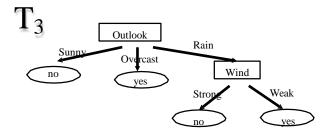
ALORS on prend comme critère à minimiser :

$$w(T,v) = (MC_{ela}(T,v)-MC(T,v))/(n(T)*(nt(T,v)-1))$$

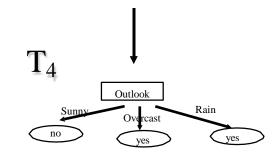
→ Prise en compte simultanée de l'erreur et de la complexité de l'arbre

Exemple d'élagage

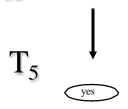




 $Error_{GS}=13\%$, $Error_{VS}=15\%$



 $Error_{GS}=27\%$, $Error_{VS}=25\%$



 $Error_{GS}=33\%$, $Error_{VS}=35\%$

Comment évaluer un classifieur ?

- mesurer à quel point un classifieur est "performant"
- comparer/choisir entre deux classifieurs

Evaluation des classifieurs Méthode 1

Erreur de classification en apprentissage :

 Err_{app} = (nb d'ex d'app mal classes)/(nb total de données d'apprentissage)

Erreur de classification en test :

Err_{test} = (nb d'ex de test mal classes)/(nb total de données de test)

Validation croisée Méthode 2

On divise l'échantillon d'apprentissage en B sous-ensembles D_b de même taille

On applique la méthode d'estimation ou d'apprentissage sur chaque sous-ensemble $D - D_b$: on mesure le risque empirique pour chaque ensemble D_b restant.

$$Err_{cv}(h) = (1/B) \sum_{b} Err_{b}(h)$$

Estimation par validation croisée

 $Err_b(h)$: erreur moyenne de h sur D_b

Lorsque B= n, la méthode s'appelle : leave-one-out (on n'en laisse qu'un de côté)

valuation par mesure de Receiver Operator Characteristics (ROC)

Origine: Théorie de la détection de signaux Egan 1975

Utilisé dans le domaine de la prévision de risque dans le domaine Médical depuis 35 ans

Comportements des systèmes de diagnostic Swets 1988

Visualisation dans le domaine médical Beck et Schultz 1986

Diverses applications à l'évaluation de classifieurs pour le data-mining :

Provost et Fawcett 1996-97 (KDD et ICML)

Notations pour un classifieur bi-classes

Pour un exemple x la réponse du classifieur est : Y ou N Sa « vraie » classe est Pos ou Neg

Terminologie des courbes ROC

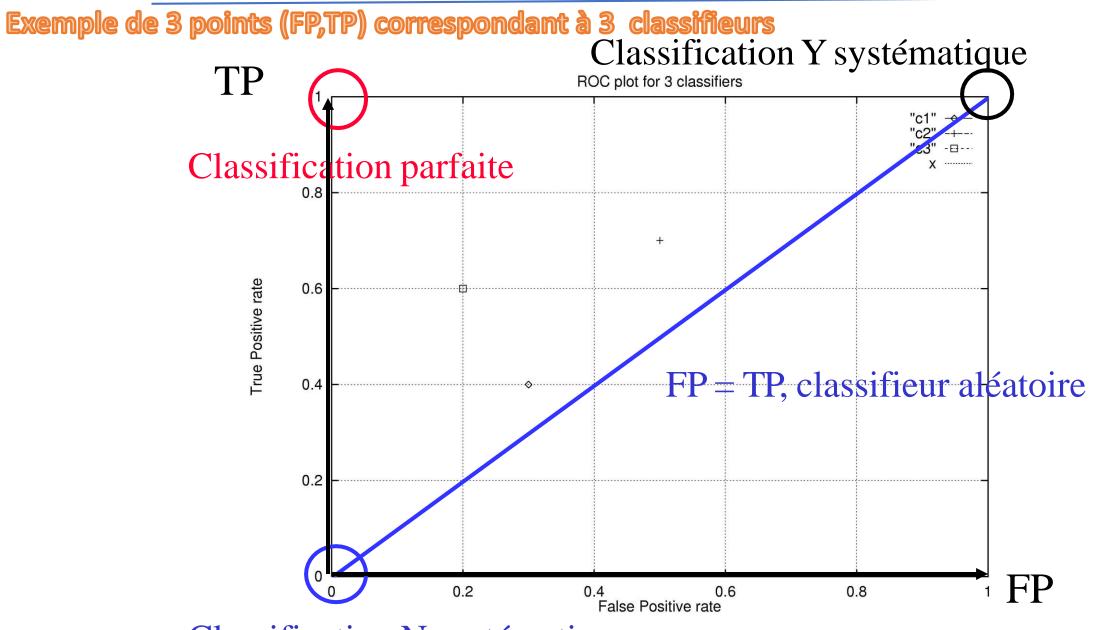
Taux de vrais positifs True Positive rate (TP): en ordonnée

 $TP = p(Y \mid Pos) \gg positifs correctement classés / nbre total de positifs$

Taux de faux positifs, False Positive (FP): en abscisse

FP = p(Y|Neg) » négatifs incorrectement classés / nbre total de négatifs

Remarque: ces quantités sont indépendantes des distributions des classes!



Classification N systématique

R. Holte (Ualberta,CA)

Courbe ROC

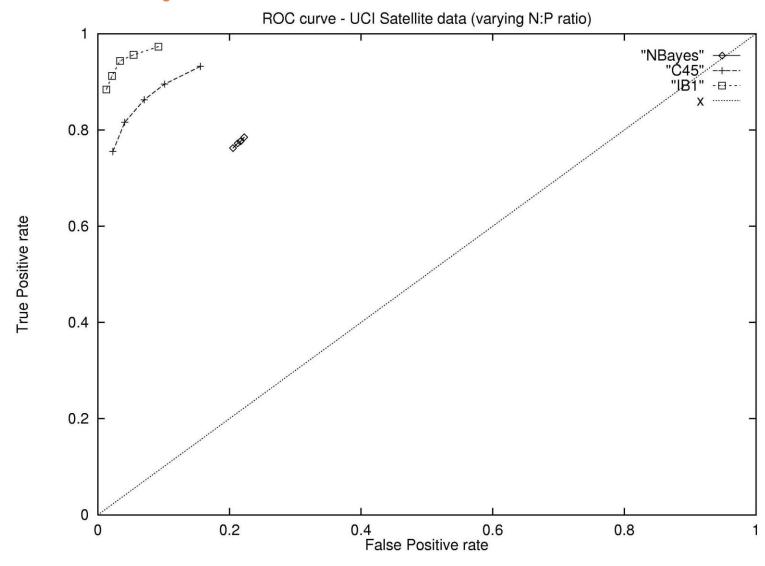
en abscisse les Faux positifs FP, en ordonnée les Vrais positifs TP

tracer les points (FP,TP) correspondants à différents paramétrages d'un système d'apprentissage

ex:

déplacer le seuil d'acceptation d'un classifieur à sortie continue (si P(Y|x) > seuil alors classe Pos)

Exemple de 3 classifieurs comparés selon leur courbe



Evaluation de classifieurs par courbes précision/rappel

```
Origine: recherche d'information, Salton et McGill 83

La classe 1 est la classe pertinente pour la requête

Rappel: R = TP

largeur du résultat de la recherche
```

Précision: Pr = tp/(tp+fp)
qualité du résultat de la recherche

```
AVEC TP = tp/p
p: positifs (tous ceux de classe 1)
tp: true positive (prédits 1 et de classe 1)
fp: false positive (predits 1 mais de classe 0)
```

Un critère unique?

- On voudrait que R et P soient maximaux
- Comment avoir une mesure unique ?
 - - fixer des valeurs de rappels, mesurer la précision
 - - moyenne
 - - F-mesure :

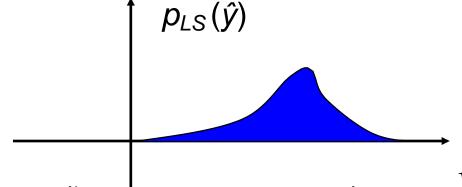
•
$$(b^2 + 1) PR F_b(R,P) =$$
• $b^2 P + R$

• en modifiant b on favorise l'un ou l'autre des critères

Combiner pour améliorer les performances et diminuer la sensibilité aux données

Métodes d'ensembles

Bon algorithme d'apprentissage



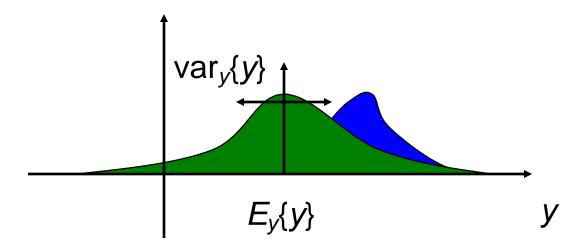
Un bon algorithme d'apprentissage ne doit pas seulement être bon sur un ensemble d'apprentissage mais aussi sur tous les ensembles d'apprentissage (de taille N).

 \Rightarrow on veut minimiser:

$$E = E_{LS}\{E_y\{(y - \hat{y})^2\}\}\$$

Analysons cette erreur en détail

Décomposition Biais/variance (2)

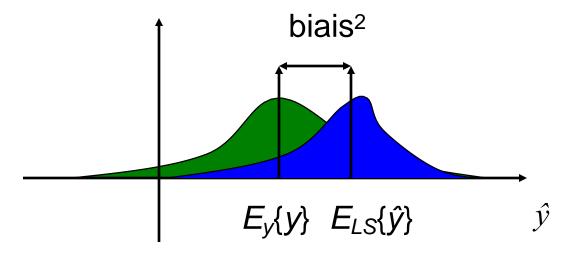


$$E = E_{y}\{(y - E_{y}\{y\})^{2}\} + E_{LS}\{(E_{y}\{y\} - \hat{y})^{2}\}$$

= erreur residuelle = minimal attainable error

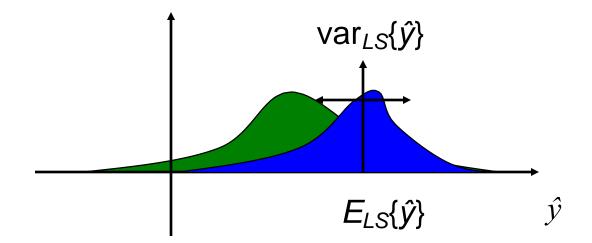
= $var_y(y)$

Décomposition Biais/variance (4)



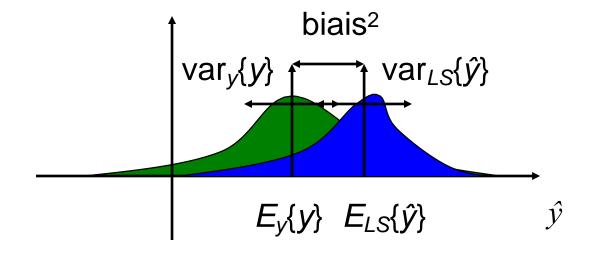
 $E= \text{var}_y\{y\} + (E_y\{y\}-E_{LS}\{\hat{y}\})^2 + ...$ $E_{LS}\{\hat{y}\} = \text{modèle "moyenne "(sur tous les LS)}$ biais² = Erreur entre Bayes et le modèle
"moyenne"

Décomposition Biais/variance (5)



 $E= \text{var}_y\{y\} + \text{biais}^2 + E_{LS}\{(\hat{y}-E_{LS}\{\hat{y}\})^2\}$ $\text{var}_{LS}\{\hat{y}\} = \text{estimation de la variance} =$ conséquence du surapprentissage

Biais/variance decomposition (6)



$$E= \text{var}_y\{y\} + \text{biais}^2 + \text{var}_{LS}\{\hat{y}\}$$

Les méthodes d'ensembles

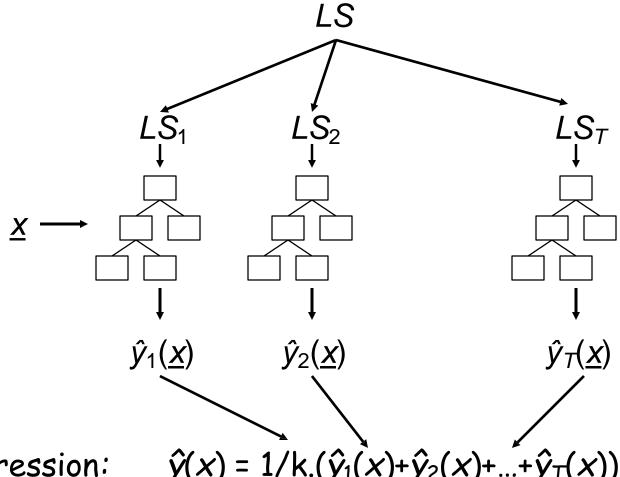
- Combinent les prédictions (ou solutions) de plusieurs modèles construits avec un algorithme d'apprentissage pour améliorer les résultats.
- Deux familles importantes :
 - Techniques qui effectuent des moyennes
 - · Construisent plusieurs modèles de façon indépendante et effectuent simplement la moyenne des résultats.
 - Ex: bagging, random forests (forêts aléatoires)
 - · Décroissance de la variance des modèles
 - Algorithmes de type
 - · Construisent plusieurs modèles de façon séquentielle
 - Ex: Adaboost, MART
 - · Décroissance du biais

Bagging (1)

$$E_{LS}\{Err(\underline{x})\}=E_{y|\underline{x}}\{(y-h_B(\underline{x}))^2\}+(h_B(\underline{x})-E_{LS}\{\hat{y}(\underline{x})\})^2+E_{LS}\{(\hat{y}(\underline{x})-E_{LS}\{\hat{y}(\underline{x}))^2\}$$

- Idée : le modèle "moyenne" $E_{LS}\{\hat{y}(\underline{x})\}$ possède le même biais que la méthode d'origine mais une variance nulle.
- Bagging (Bootstrap AGGregatING):
 - Pour calculer $E_{LS}(\hat{y}(x))$, générer un nombre infini d'ensembles LS (de taille N)
 - Comme on a généralement un seul ensemble LS, on effctue un echantillonnage de type bootstrap à partir de LS
 - Bootstrap sampling = echantillonnage avec remplacement de Nobjects dans LS (Nest la taille de LS)

Bagging (2)



 $\hat{y}(\underline{x}) = 1/k.(\hat{y}_1(\underline{x}) + \hat{y}_2(\underline{x}) + ... + \hat{y}_T(\underline{x}))$ En regression:

en classification: $\hat{y}(x)$ = la classe majoritaire dans

 $\{\hat{y}_1(\underline{x}),...,\hat{y}_T(\underline{x})\}$

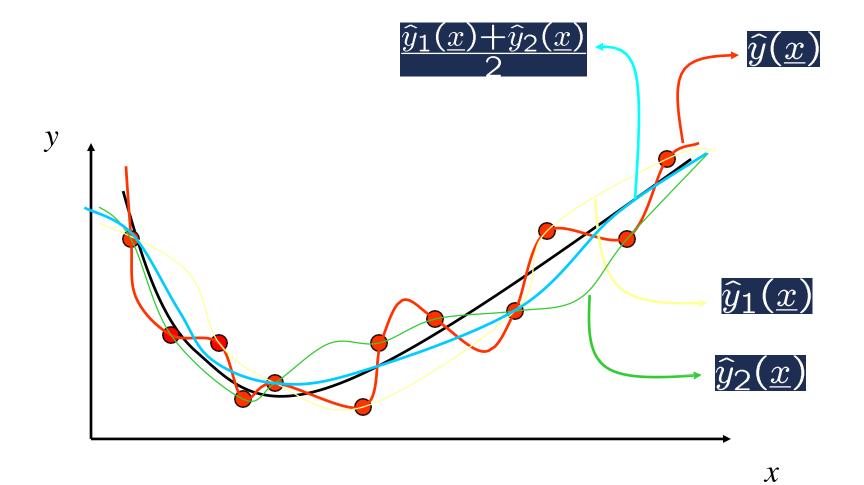
Bagging (3)

- Le bagging réduit beaucoup la variance sans augmenter beaucoup le biais.
- Application aux arbre de régression

Method	Е	Bias	Variance
3 Test regr. Tree	14.8	11.1	3.7
Bagged (T=25)	11.7	10.7	1.0
Full regr. Tree	10.2	3.5	6.7
Bagged (T=25)	5.3	3.8	1.5

 Réduction importante de la variance sans augmenter le biais (le modèle est bien sur beaucoup plus complexe qu'un simple arbre de décision)

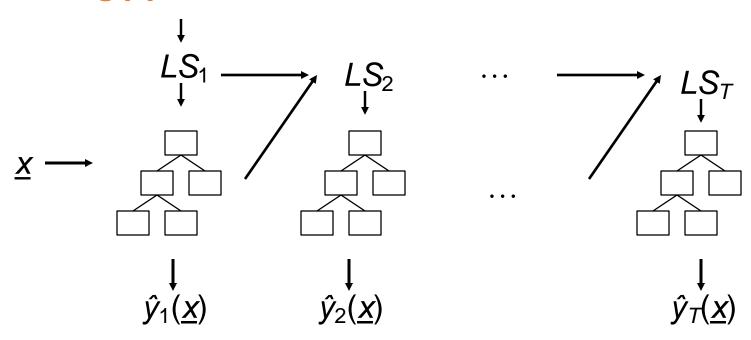




Méthodes de Boosting (1)

- La motivation du boosting est de combiner les sorties de plusieurs modèles « faibles » pour produire un modèle performant.
- Modèle faible = un modèle qui a un biais important (par exp, en classification, le modèle est légèrement meilleur qu' un classement aléatoire)
- Différences avec les méthodes d'ensembles précédentes :
 - Les modèles sont construits séquentiellement sur des versions modifiées des données.
 - Les prédictions des modèles sont combinées en utilisant des sommes/votes pondérés.

Méthodes de Boosting (2) LS



En régression: $\hat{y}(\underline{x}) = \beta_1.\hat{y}_1(\underline{x}) + \beta_2.\hat{y}_2(\underline{x}) + ... + \beta_T.\hat{y}_T(\underline{x})$

En classification: $\hat{y}(\underline{x}) = \text{la classe majoritaire dans}$ $\{\hat{y}_1(\underline{x}),...,\hat{y}_T(\underline{x})\}$ pondérées par les poids $\{\beta_1,\beta_2,...,\beta_T\}$

Adaboost (1)

- Supposons que l'algorithme d'apprentissage permet l'association des poids aux objets
- C'est le cas de plusieurs algorithmes d'apprentissage
 :
 - Pour les arbres, simplement prendre en compte les poids associés aux objets.
- A chaque étape, adaboost augmente les poids des exemples mal classés par le dernier modèle.
- Donc, l'algorithme se focalise sur les cas difficiles de l'ensemble d'apprentissage.
- Dans le vote majoritaire pondéré, adaboost donne une plus grande influence pour les modèles les plus précis.

Adaboost (2)

- Entrées : un algorithme d'apprentissage et un ensemble d'apprentissage $\{(x_i,y_i): i=1,...,N\}$
- Initialiser les poids $w_i=1/N$, i=1,...,N
- Pour t=1 à T
 - Construire un modèle $\hat{y}_t(\underline{x})$ avec l'algorithme d'apprentissage en utilisant les poids w_i
 - Calculer l'erreur pondérée : $\sum_{i} w_i I(y_i \neq \hat{y}_t(x_i))$ $err_t = \frac{i}{\sum_{i} w_i}$
 - Calculer $b_t = \log((1 err_t)/err_t)$
 - Changer les poids: $\underbrace{w_i \leftarrow w_i}_{} \text{ $\forall xp[\beta_m $ $x(y_i \neq \hat{y}_t(x_i))] $}$

Exemple d'application (Golub's microarray data)

- 72 objects, 7129 numerical attributes (gene expressions), 2 classes (ALL and AL)
- Leave-one-out error with several variants

Method	Error
1 decision tree	22.2% (16/72)
Random forests (k=85,T=500)	9.7% (7/72)
Extra-trees (s_{th} =0.5, T=500)	5.5% (4/72)
Adaboost (1 test node, T=500)	1.4% (1/72)

Variable importance with boosting

