

Arbres de décision

Joseph Salmon, Nicolas Verzelen

INRA / Université de Montpellier

Plan

Introduction

- Rappels de classification

- Estimateurs/Classifieurs constants par morceaux

Arbres de décision

Détails et variations

Méthodes basées sur des arbres


- ▶ Nécessite de **stratifier** ou **segmenter** l'espace des prédicteurs en un certain nombre de régions simples
- ▶ L'ensemble des règles des partitionnement peuvent être résumées par un arbre : ce type d'approches sont connues comme des méthodes à **arbres de décision**

Pours et contres des arbres

Avantages :

- ▶ Simples et faciles à interpréter (+ faciles à expliquer que les modèles linéaires : représentation graphique)
- ▶ Fonctionnent de manières similaires pour la régression et la classification
- ▶ ne dépend (souvent) que de quelques variables explicatives ; souvent interprétées (à tort) comme une procédure de sélection de variables
- ▶ **instabilité** de la méthode

Limites :

- ▶ Faible en prédiction vs. meilleures approches d'apprentissage
- ▶ Améliorations possibles : mélanger de nombreux arbres pour produire une réponse consensus **bagging** , **forêts aléatoires** ( : *random forests*), XGBoost, etc

Classification supervisée et régression

X : variable **explicative**, vecteur aléatoire dans $\mathcal{X} = \mathbb{R}^p$

Y : variable **à prédire**, aléatoires dans $\mathcal{Y} = \{C_1, \dots, C_K\}$
(classification avec K classes) ou $\mathcal{Y} = \mathbb{R}$ (régression)

$\mathcal{D}_n = \{(\mathbf{x}_i, y_i) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}, i = 1, \dots, n\}$: n -échantillon *i.i.d.* tiré selon la loi P , loi jointe de (X, Y) , **inconnue**

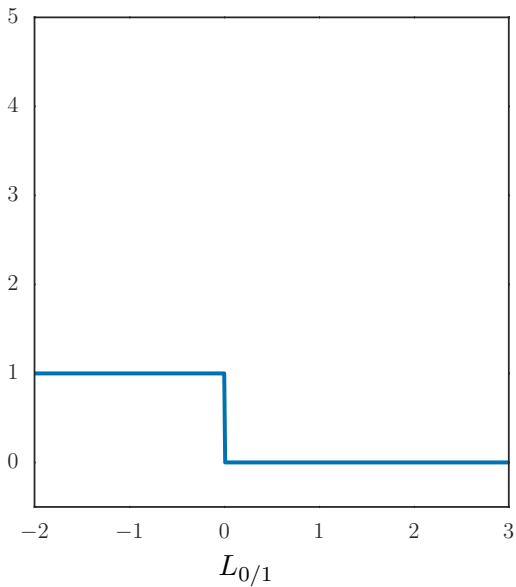
\mathcal{H} : collection de **classifieurs/estimateurs**, $h : \mathcal{X} \mapsto \mathcal{Y}$

L : perte mesurant les erreurs d'un classifieur/estimateur

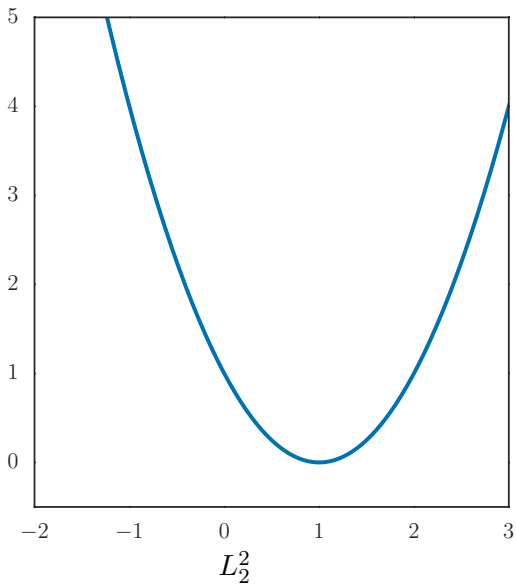
- ▶ Exemple (classification) : $L(\mathbf{x}, y, h(\mathbf{x})) = \begin{cases} 1, & \text{si } h(\mathbf{x}) \neq y, \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases}$
- ▶ Exemple (régression) : $L(\mathbf{x}, y, h(\mathbf{x})) = (y - h(\mathbf{x}))^2$

Objectif : déterminer à partir de \mathcal{D}_n la fonction $h \in \mathcal{H}$ qui minimise le risque $R(h) = \mathbb{E}_P[L(X, Y, h(X))]$

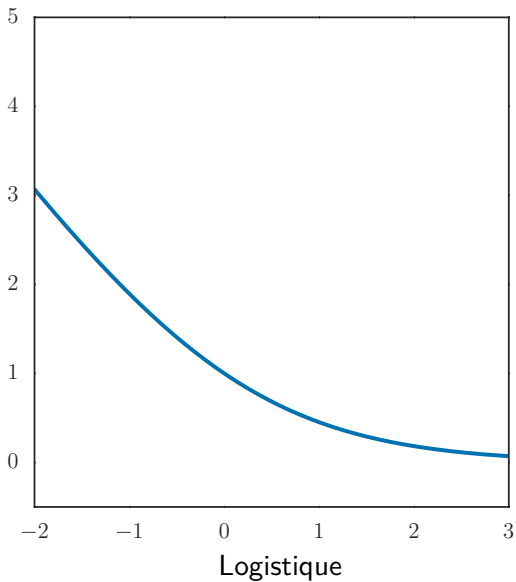
Divers type d'erreurs



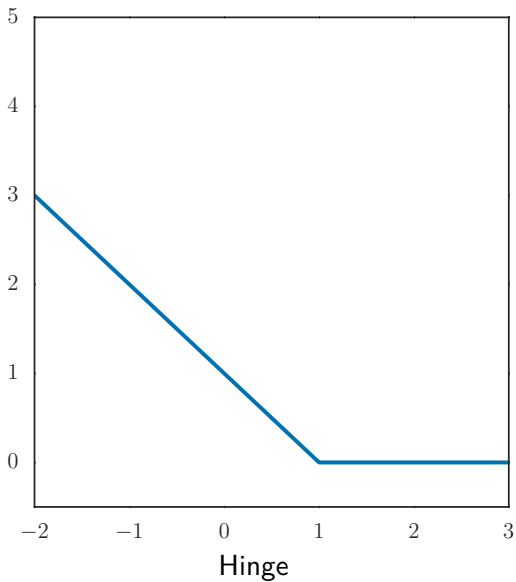
Divers type d'erreurs



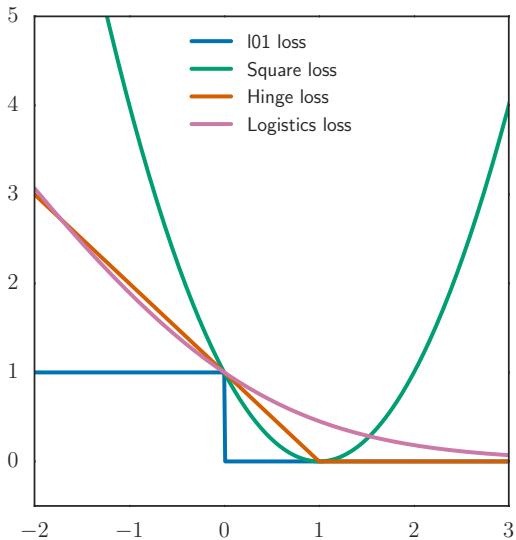
Divers type d'erreurs



Divers type d'erreurs



Divers type d'erreurs



Apprendre un classifieur/prédicteur

Définir :

- ▶ l'**espace de représentation** des données \mathcal{X}
- ▶ la **classe des fonctions** considérées \mathcal{H}

Apprendre un classifieur/prédicteur

Définir :

- ▶ l'**espace de représentation** des données \mathcal{X}
- ▶ la **classe des fonctions** considérées \mathcal{H}
- ▶ la **fonction de coût** L à minimiser pour obtenir la meilleur fonction h

Apprendre un classifieur/prédicteur

Définir :

- ▶ l'**espace de représentation** des données \mathcal{X}
- ▶ la **classe des fonctions** considérées \mathcal{H}
- ▶ la **fonction de coût** L à minimiser pour obtenir la meilleur fonction h
- ▶ l'**algorithme de minimisation** de cette fonction de coût

Apprendre un classifieur/prédicteur

Définir :

- ▶ l'**espace de représentation** des données \mathcal{X}
- ▶ la **classe des fonctions** considérées \mathcal{H}
- ▶ la **fonction de coût** L à minimiser pour obtenir la meilleur fonction h
- ▶ l'**algorithme de minimisation** de cette fonction de coût
- ▶ une **méthode de sélection de modèle** pour calibrer les hyper-paramètres (e.g., validation croisée)

Apprendre un classifieur/prédicteur

Définir :

- ▶ l'**espace de représentation** des données \mathcal{X}
- ▶ la **classe des fonctions** considérées \mathcal{H}
- ▶ la **fonction de coût** L à minimiser pour obtenir la meilleur fonction h
- ▶ l'**algorithme de minimisation** de cette fonction de coût
- ▶ une **méthode de sélection de modèle** pour calibrer les hyper-paramètres (e.g., validation croisée)
- ▶ un protocole **d'évaluation** des performances

Apprendre un classifieur/prédicteur

Définir :

- ▶ l'**espace de représentation** des données \mathcal{X}
- ▶ la **classe des fonctions** considérées \mathcal{H}
- ▶ la **fonction de coût** L à minimiser pour obtenir la meilleur fonction h
- ▶ l'**algorithme de minimisation** de cette fonction de coût
- ▶ une **méthode de sélection de modèle** pour calibrer les hyper-paramètres (e.g., validation croisée)
- ▶ un protocole **d'évaluation** des performances

Classe des fonctions considérées

La collection \mathcal{H} des classifieurs/estimateurs est une sous-partie de l'ensemble des **fonctions constantes par morceaux**.

Simplification : les séparations sont **parallèles** aux axes et donc les composantes constantes sont de la forme

$$\mathcal{C} = \left\{ \mathbf{x} \in \mathcal{X} : \mathbf{x}^{j_1} \in [\underline{\mathbf{x}}^{j_1}, \overline{\mathbf{x}}^{j_1}], \dots, \mathbf{x}^{j_r} \in [\underline{\mathbf{x}}^{j_r}, \overline{\mathbf{x}}^{j_r}] \right\}$$

pour $r \in \llbracket 1, p \rrbracket$ et $(j_1, \dots, j_r) \in \llbracket 1, p \rrbracket^r$

Pour M composantes constantes, l'estimateur s'écrit :

$$\hat{h} = \sum_{m=1}^M \hat{\alpha}_m \mathbb{1}_{\mathcal{C}_m}$$

les \mathcal{C}_m forment une partition de l'espace (pas de chevauchement) :

$$\mathcal{C}_1 \sqcup \dots \sqcup \mathcal{C}_M = \mathcal{X}$$

et les $\hat{\alpha}_m \in \mathbb{R}$

Classifieur/Estimateur associé

Prenons une partition $\mathcal{C}_1 \sqcup \dots \sqcup \mathcal{C}_M = \mathcal{X}$ et un prédicteur associé :

$$\hat{h} = \sum_{m=1}^M \hat{\alpha}_m \mathbb{1}_{\mathcal{C}_m}$$

Choix des coefficients $\hat{\alpha}_m$ (par maximum de vraisemblance) : pour tout $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$, il existe un $m \in \llbracket 1, M \rrbracket$ tel que $\mathbf{x} \in \mathcal{C}_m$, puis

► Pour la classification :

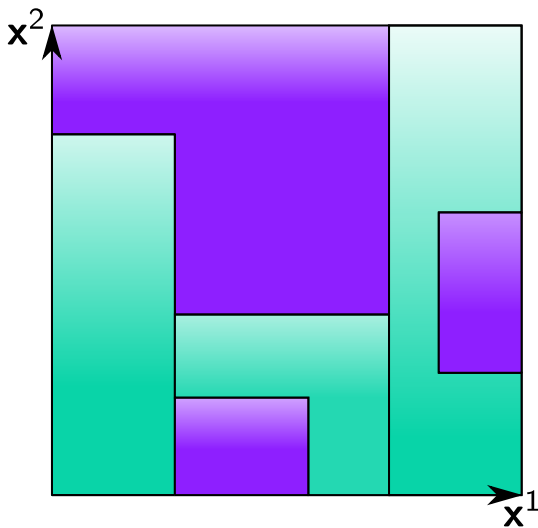
$$\hat{h}(\mathbf{x}) \in \arg \max_{k=1, \dots, K} \sum_{\mathbf{x}_i \in \mathcal{C}_m} \mathbb{1}(y_i = k) \quad (\text{“vote majoritaire”})$$

► Pour la régression :

$$\hat{h}(\mathbf{x}) = \frac{1}{|\{\mathbf{x}_i \in \mathcal{C}_m\}|} \sum_{\mathbf{x}_i \in \mathcal{C}_m} y_i \quad (\text{“moyenne empirique”})$$

Rem: lien avec un estimateur “plug-in”

Exemple de fonction constante par morceaux



Classifieur/Estimateur associé

- ▶ Motivation : interprétation, seuils “interprétables”
- ▶ Limites :
 - ▶ difficile de décrire efficacement toutes ces fonctions
 - ▶ si la partition est fixée avant de voir les données, la plupart des composantes seront vides.

Exercise: quel problème cela pose-t-il en régression ? en classification ?

Alternative : apprendre la partition grâce aux données !

Plan

Introduction

Arbres de décision

- Structure efficace : les arbres

- Séparateurs élémentaires

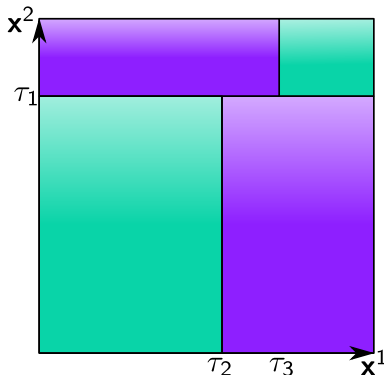
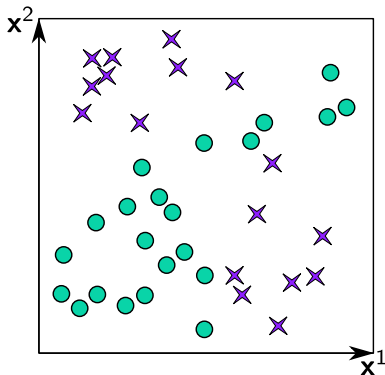
- Algorithme efficace

Détails et variations

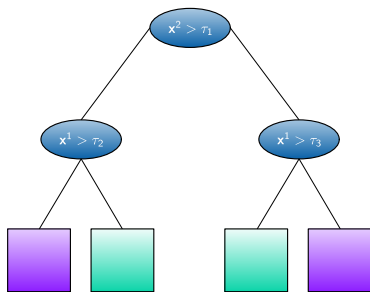
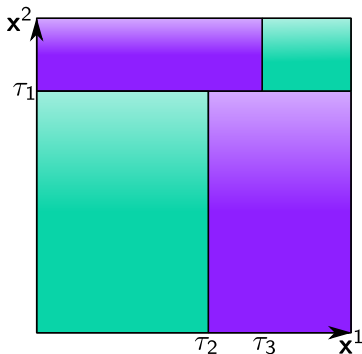
Arbres de décision

Invention quasi simultanée entre 1979 et 1983

- ▶ CART Breiman *et al.* (1984) (Berkeley, USA) ; en statistique
- ▶ ID3 Quinlan (1986) (Sydney, Australie) ; en *machine learning*



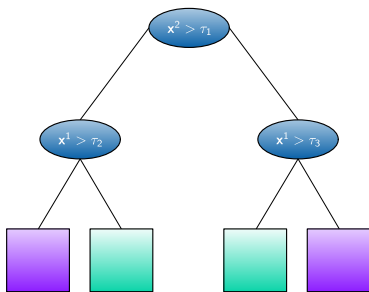
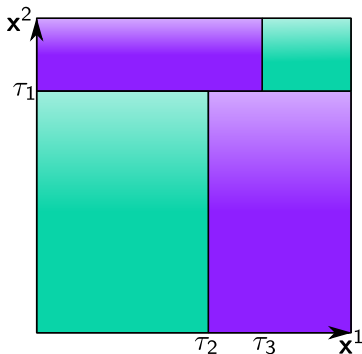
Arbres de décision



Première idée :

Utiliser non pas un mais plusieurs séparateurs linéaires pour construire des frontières de décision non linéaires

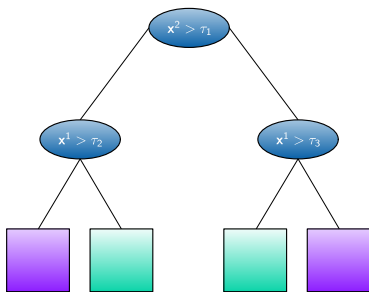
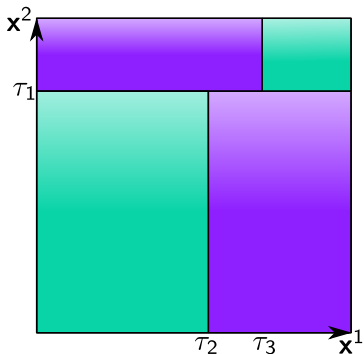
Arbres de décision



Deuxième idée :

Utiliser des séparateurs linéaires parallèles aux axes, *i.e.*, des hyperplans $\{\mathbf{x} \in \mathcal{X} : \mathbf{x}^j = \tau\}$ pour l'interprétabilité.

Arbres de décision



Troisième idée :

Utiliser un prédicteur représenté par un d'arbre : chaque nœud est associé à un hyperplan séparateur $\{\mathbf{x} \in \mathcal{X} : \mathbf{x}^j = \tau\}$; chaque feuille est associée à une fonction constante (donc à une classe)

Règles logiques

Après apprentissage : on connaît les variables explicatives qui interviennent dans la fonction de décision construite

Rem: souvent, une faible partie des variables sont discriminantes, intérêt pour l'**interprétabilité**

L'arbre code pour un ensemble de règles logiques du type :

“si $(\mathbf{x}^{j_1} > \tau_1)$ et $(\mathbf{x}^{j_2} \leq \tau_2)$ et ... alors \mathbf{x} est dans la classe k ”

Efficacité computationnelle : prédiction très **efficace** une fois la règle apprise, le temps de prédiction ne dépend que du nombre de seuils à tester

Coût : $(\text{nombre de nœuds}) \times (\text{coût tester } \mathbf{x}^{j_1} > \tau_1)$

Séparateur linéaire orthogonal aux axes

Rappel : $\mathbf{x} = (\mathbf{x}^1, \dots, \mathbf{x}^p)$, p variables

- ▶ Variable continue (ou binaire) : j^{e} variable \mathbf{x}^j , seuil τ :

$$t_{j,\tau}(\mathbf{x}) = \text{sign}(\mathbf{x}^j - \tau) = \begin{cases} +1, & \text{si } \mathbf{x}^j > \tau \\ -1, & \text{si } \mathbf{x}^j < \tau \end{cases}$$

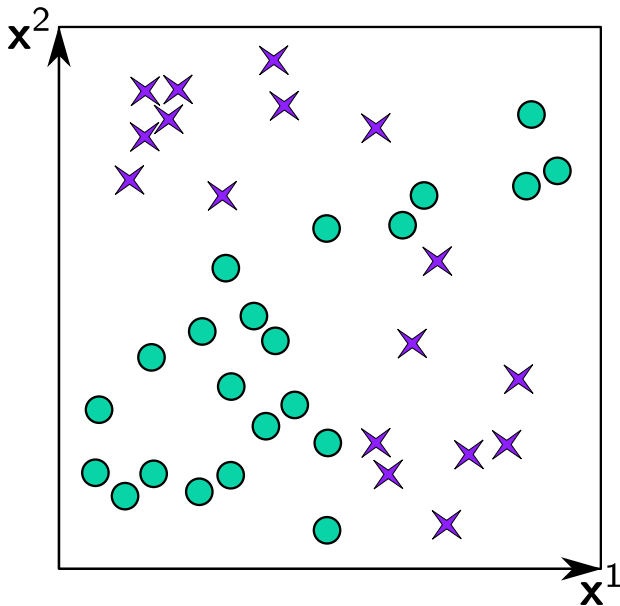
- ▶ Variable catégorielle à M modalités $\{v_1^j, \dots, v_M^j\}$:

$$t_{j,\mathbf{v},m}(\mathbf{x}) = \mathbb{1}(\mathbf{x}^j = v_m^j)$$

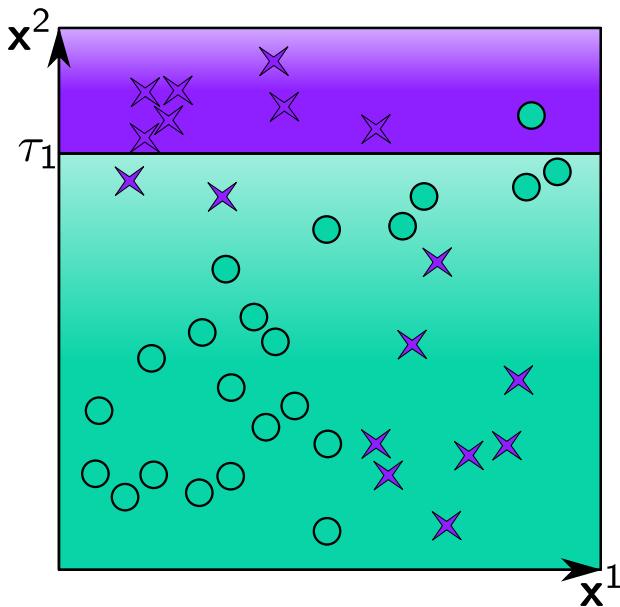
Rem: cette dernière version du traitement des variables catégorielles discrimine simplement : “une modalité” vs. “toutes les autres”

Rem: avec `sklearn` il faut utiliser `OneHotEncoder` pour ce cas

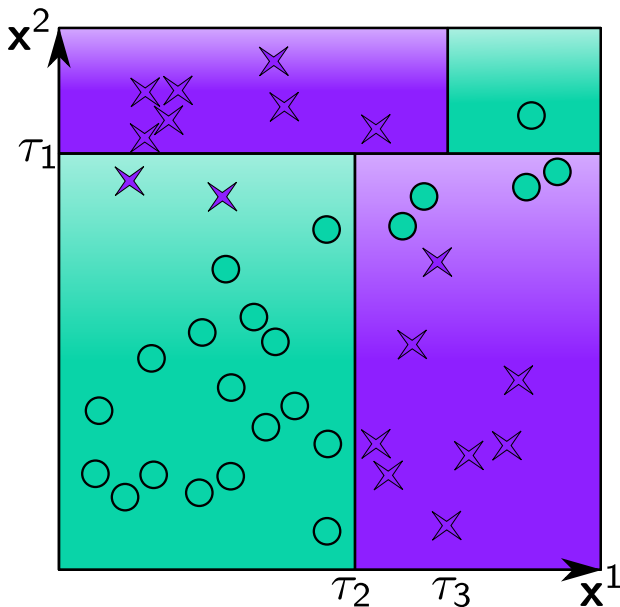
Exemple visuel : cas de deux variables



Exemple visuel : cas de deux variables



Exemple visuel : cas de deux variables



Algorithme récursif de construction

Cas d'un arbre binaire :

1. Soit \mathcal{D}_n l'ensemble d'apprentissage
2. Construire un nœud racine

Algorithme récursif de construction

Cas d'un arbre binaire :

1. Soit \mathcal{D}_n l'ensemble d'apprentissage
2. Construire un nœud racine
3. Chercher la meilleure séparation $t : \mathcal{X} \mapsto \{-1, 1\}$ à appliquer sur \mathcal{D}_n telle que le coût local $L(t, \mathcal{D}_n)$ soit minimal

Algorithme récursif de construction

Cas d'un arbre binaire :

1. Soit \mathcal{D}_n l'ensemble d'apprentissage
2. Construire un nœud racine
3. Chercher la meilleure séparation $t : \mathcal{X} \mapsto \{-1, 1\}$ à appliquer sur \mathcal{D}_n telle que le coût local $L(t, \mathcal{D}_n)$ soit minimal
4. Associer le séparateur choisi au nœud courant et séparer l'ensemble d'apprentissage courant \mathcal{D}_n en \mathcal{D}_n^d et \mathcal{D}_n^g à l'aide de ce séparateur

Algorithme récursif de construction

Cas d'un arbre binaire :

1. Soit \mathcal{D}_n l'ensemble d'apprentissage
2. Construire un nœud racine
3. Chercher la meilleure séparation $t : \mathcal{X} \mapsto \{-1, 1\}$ à appliquer sur \mathcal{D}_n telle que le coût local $L(t, \mathcal{D}_n)$ soit minimal
4. Associer le séparateur choisi au nœud courant et séparer l'ensemble d'apprentissage courant \mathcal{D}_n en \mathcal{D}_n^d et \mathcal{D}_n^g à l'aide de ce séparateur
5. Construire un nœud fils à droite et un nœud fils à gauche

Algorithme récursif de construction

Cas d'un arbre binaire :

1. Soit \mathcal{D}_n l'ensemble d'apprentissage
2. Construire un nœud racine
3. Chercher la meilleure séparation $t : \mathcal{X} \mapsto \{-1, 1\}$ à appliquer sur \mathcal{D}_n telle que le coût local $L(t, \mathcal{D}_n)$ soit minimal
4. Associer le séparateur choisi au nœud courant et séparer l'ensemble d'apprentissage courant \mathcal{D}_n en \mathcal{D}_n^d et \mathcal{D}_n^g à l'aide de ce séparateur
5. Construire un nœud fils à droite et un nœud fils à gauche
6. Mesurer le critère d'arrêt à droite, s'il est vérifié, le nœud droit devient une feuille ; sinon retour en 3 avec $\mathcal{D}_n \leftarrow \mathcal{D}_n^d$

Algorithme récursif de construction

Cas d'un arbre binaire :

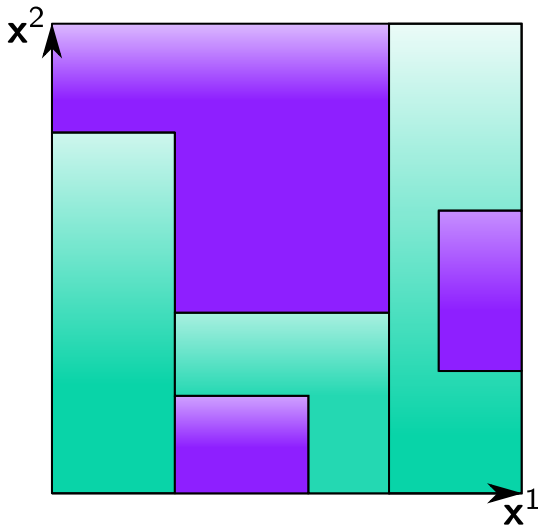
1. Soit \mathcal{D}_n l'ensemble d'apprentissage
2. Construire un nœud racine
3. Chercher la meilleure séparation $t : \mathcal{X} \mapsto \{-1, 1\}$ à appliquer sur \mathcal{D}_n telle que le coût local $L(t, \mathcal{D}_n)$ soit minimal
4. Associer le séparateur choisi au nœud courant et séparer l'ensemble d'apprentissage courant \mathcal{D}_n en \mathcal{D}_n^d et \mathcal{D}_n^g à l'aide de ce séparateur
5. Construire un nœud fils à droite et un nœud fils à gauche
6. Mesurer le critère d'arrêt à droite, s'il est vérifié, le nœud droit devient une feuille ; sinon retour en 3 avec $\mathcal{D}_n \leftarrow \mathcal{D}_n^d$
7. Mesurer le critère d'arrêt à gauche, s'il est vérifié, le nœud gauche devient une feuille ; sinon retour en 3 avec $\mathcal{D}_n \leftarrow \mathcal{D}_n^g$

Algorithme récursif de construction

Cas d'un arbre binaire :

1. Soit \mathcal{D}_n l'ensemble d'apprentissage
2. Construire un nœud racine
3. Chercher la meilleure séparation $t : \mathcal{X} \mapsto \{-1, 1\}$ à appliquer sur \mathcal{D}_n telle que le coût local $L(t, \mathcal{D}_n)$ soit minimal
4. Associer le séparateur choisi au nœud courant et séparer l'ensemble d'apprentissage courant \mathcal{D}_n en \mathcal{D}_n^d et \mathcal{D}_n^g à l'aide de ce séparateur
5. Construire un nœud fils à droite et un nœud fils à gauche
6. Mesurer le critère d'arrêt à droite, s'il est vérifié, le nœud droit devient une feuille ; sinon retour en 3 avec $\mathcal{D}_n \leftarrow \mathcal{D}_n^d$
7. Mesurer le critère d'arrêt à gauche, s'il est vérifié, le nœud gauche devient une feuille ; sinon retour en 3 avec $\mathcal{D}_n \leftarrow \mathcal{D}_n^g$

Contre-exemple : partition non issue d'un arbre



Plan

Introduction

Arbres de décision

Détails et variations


- Fonction de coût

- Fonction d'impureté

- Critères d'arrêt et variantes

- Sélection de modèles

Probabilités / simplexe

Idée principale : définir une notion de pureté/impureté d'une coupure, et faire grandir l'arbre par coupures ( : *splitting*) successives

On définit pour un ensemble \mathcal{D}_n (avec n exemples étiquetés) la distribution de probabilités pour la classe k (avec K classes) par :

$$\hat{p}_k(\mathcal{D}_n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{1}(y_i = k)$$

Rem: on note le simplexe (de dimension K)

$$\Delta_K := \left\{ p \in \mathbb{R}^K : \sum_{k=1}^K p_k = 1 \text{ et } \forall k \in \llbracket 1, K \rrbracket, p_k \geq 0 \right\} \text{ ainsi,}$$

$$\hat{p}(\mathcal{D}_n) = (\hat{p}_1(\mathcal{D}_n), \dots, \hat{p}_K(\mathcal{D}_n))^{\top} \in \Delta_K$$

Rem: Δ_K identifié aux probabilités discrètes ayant K modalités

Coupure

- ▶ \mathcal{D}_n : ensemble d'apprentissage
- ▶ $t_{j,\tau}$: fonction de coupure

$$\mathcal{D}_n^d(j, \tau) = \{(\mathbf{x}, y) \in \mathcal{D}_n, t_{j,\tau}(\mathbf{x}) > 0\} \quad (\text{partie droite})$$

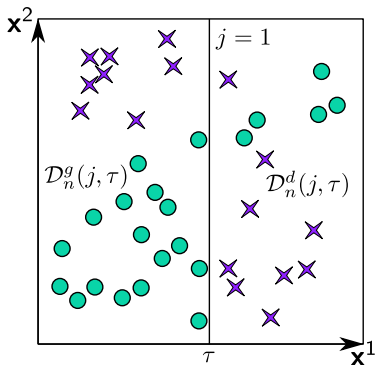
$$\mathcal{D}_n^g(j, \tau) = \{(\mathbf{x}, y) \in \mathcal{D}_n, t_{j,\tau}(\mathbf{x}) \leq 0\} \quad (\text{partie gauche})$$

Coupure

- ▶ \mathcal{D}_n : ensemble d'apprentissage
- ▶ $t_{j,\tau}$: fonction de coupure

$$\mathcal{D}_n^d(j, \tau) = \{(\mathbf{x}, y) \in \mathcal{D}_n, t_{j,\tau}(\mathbf{x}) > 0\} \quad (\text{partie droite})$$

$$\mathcal{D}_n^g(j, \tau) = \{(\mathbf{x}, y) \in \mathcal{D}_n, t_{j,\tau}(\mathbf{x}) \leq 0\} \quad (\text{partie gauche})$$

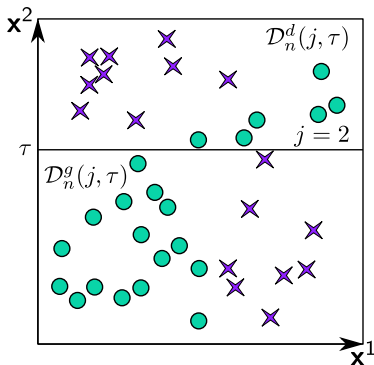
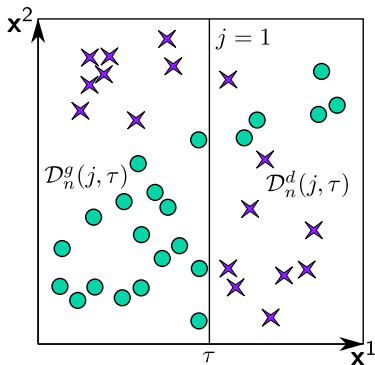


Coupure

- ▶ \mathcal{D}_n : ensemble d'apprentissage
- ▶ $t_{j,\tau}$: fonction de coupure

$$\mathcal{D}_n^d(j, \tau) = \{(\mathbf{x}, y) \in \mathcal{D}_n, t_{j,\tau}(\mathbf{x}) > 0\} \quad (\text{partie droite})$$

$$\mathcal{D}_n^g(j, \tau) = \{(\mathbf{x}, y) \in \mathcal{D}_n, t_{j,\tau}(\mathbf{x}) \leq 0\} \quad (\text{partie gauche})$$



Fonction de coût locale

Parmi tous les paramètres $(j, \tau) \in \{1, \dots, p\} \times \{\tau_1, \dots, \tau_m\}$, on cherche \hat{j} et $\hat{\tau}$ qui minimisent, une fonction de coût :

$$L(t_{j,\tau}, \mathcal{D}_n) = \frac{n_g}{n} H(\hat{p}(\mathcal{D}_n^g(j, \tau))) + \frac{n_d}{n} H(\hat{p}(\mathcal{D}_n^d(j, \tau)))$$

avec $n_g = |\mathcal{D}_n^g(j, \tau)|$ et $n_d = |\mathcal{D}_n^d(j, \tau)|$

H est une fonction mesurant “l'**impureté**” d'une distribution

Propriétés requises :

- ▶ le coût total est la somme de l'impureté de chaque sous parties, pondérée par le nombre d'échantillons
- ▶ un nombre fini de seuils suffit sur l'apprentissage (au plus n)
- ▶ la notion l'impureté d'un échantillon \mathcal{D}_n est une fonction seulement la distribution des probabilités $p(\mathcal{D}_n)$

Fonction d'impureté

Rappel : $\Delta_K := \left\{ p \in \mathbb{R}^K : \sum_{k=1}^K p_k = 1 \text{ et } \forall k \in \llbracket 1, K \rrbracket, p_k \geq 0 \right\}$

Définition : fonction d'impureté (d'une probabilité)

Une fonction d'**impureté**, est une fonction $H : \Delta_K \rightarrow \mathbb{R}$ telle que :

1. H est maximum au point $p_{\text{unif}} = \left(\frac{1}{K}, \dots, \frac{1}{K}\right)^\top$
2. H atteint son minimum seulement au point $(1, 0, \dots, 0)^\top, (0, 1, 0, \dots, 0)^\top, \dots, (0, \dots, 0, 1)^\top$
3. H est une fonction symétrique en p_1, \dots, p_K

Interprétation : cf. Breiman *et al.* (1984, page 32)

1. la distribution la plus impure est l'uniforme
2. les distributions les plus pures sont celles dégénérées
3. toutes les classes ont la même importance

Critères de coût (I) : Erreur de classification

Erreur de classification : $H_{\text{mis}}(\mathcal{D}_n) = 1 - \hat{p}_{\hat{k}(\mathcal{D}_n)},$

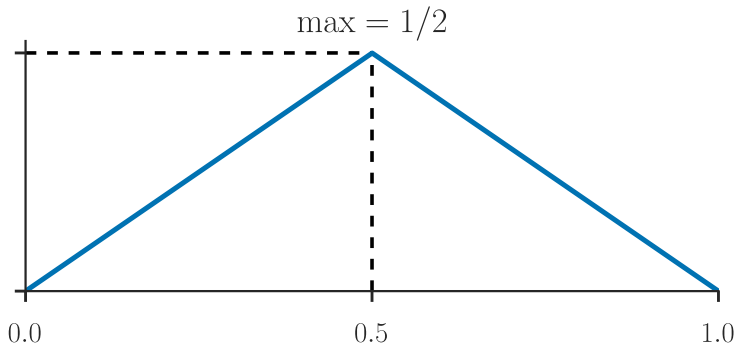
avec $\hat{k}(\mathcal{D}_n)$ défini comme la classe majoritaire dans \mathcal{D}_n :

$$\begin{aligned}\hat{k}(\mathcal{D}_n) &= \arg \max_{k=1,\dots,K} \hat{p}_k(\mathcal{D}_n) \\ &= \arg \max_{k=1,\dots,K} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{1}(y_i = k)\end{aligned}$$

Critères de coût (I) : Erreur de classification

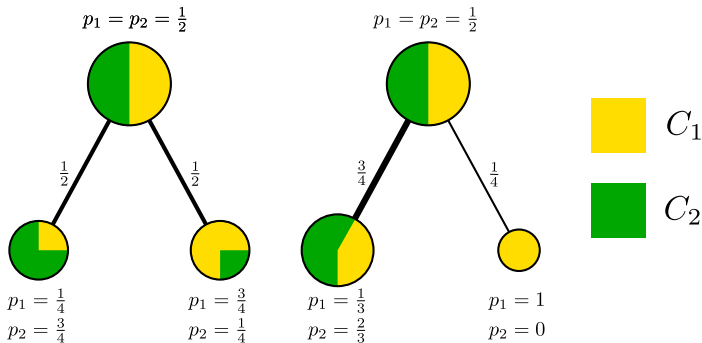
Application dans le cas binaire :

$$H_{\text{mis}}(\mathcal{D}_n) = 1 - \max_{k=1,2} \hat{p}_k(\mathcal{D}_n) = \min(\hat{p}_1(\mathcal{D}_n), 1 - \hat{p}_1(\mathcal{D}_n))$$



Limites du choix : “erreur de classification”

- ▶ fonction non-différentiable (optimisations plus dure)
- ▶ pour une zone avec une classe très majoritaire il se peut qu'aucune coupure ne produise de réduction d'impureté
- ▶ la pureté induite par des nœuds purs est négligée par ce critère :



$$L_{\text{mis}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4} = \frac{1}{4} = \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{3} + \frac{1}{4} \cdot 0 = \frac{1}{4}$$

Impureté stricte

Définition : Impureté stricte

Une fonction d'impureté $H : \Delta_K \rightarrow \mathbb{R}$ est **stricte** si pour toutes distributions p, p' dans Δ_K avec $p \neq p'$ et tout $\alpha \in]0, 1[$ on a :

$$H(\alpha p + (1 - \alpha)p') > \alpha H(p) + (1 - \alpha)H(p')$$

Interprétation : mélanger ne fait qu'augmenter l'impureté

Conséquence : si H est une fonction d'impureté pure

$$L(t_{j,\tau}, \mathcal{D}_n) = \frac{n_g}{n} H(\hat{p}(\mathcal{D}_n^g(j, \tau))) + \frac{n_d}{n} H(\hat{p}(\mathcal{D}_n^d(j, \tau))) > H(\hat{p}(\mathcal{D}_n))$$
$$n_g = |\mathcal{D}_n^g(j, \tau)| \quad \text{et} \quad n_d = |\mathcal{D}_n^d(j, \tau)|$$

et il y a égalité si et seulement si $\hat{p}(\mathcal{D}_n) = \hat{p}(\mathcal{D}_n^g) = \hat{p}(\mathcal{D}_n^d)$, cf.

Breiman *et al.* (1984), page 100

Critères de coût (II) : Entropie

Entropie :
$$H_{\text{ent}}(\mathcal{D}_n) = - \sum_{k=1}^K \hat{p}_k(\mathcal{D}_n) \log \hat{p}_k(\mathcal{D}_n)$$

Pour plus de détails sur l'entropie et ses propriétés caractéristiques, voir [Roman \(1992\), Chapitre 1](#)

Rem: liens étroits entre l'entropie de Shannon et celle de Boltzmann (thermodynamique)

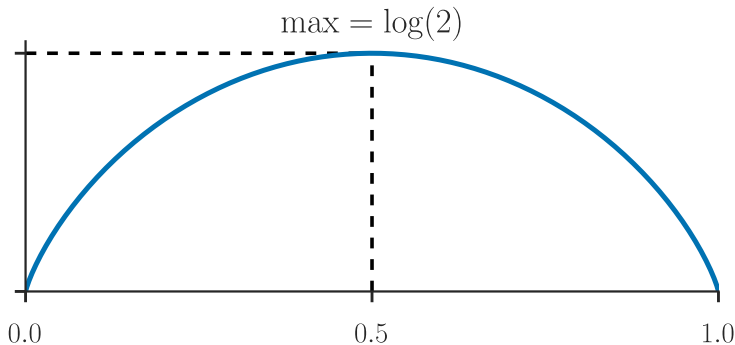
Exercice: entropie et divergence de Kullback-Leibler sont liées par $H_{\text{ent}}(\mathcal{D}_n) = \log(K) - D_{\text{KL}}(\hat{p}(\mathcal{D}_n) \| p_{\text{unif}})$ en définissant pour toutes probabilités $p, p' \in \Delta_K$:

$$D_{\text{KL}}(p \| p') = \sum_{k=1}^K p_k \log \left(\frac{p_k}{p'_k} \right)$$

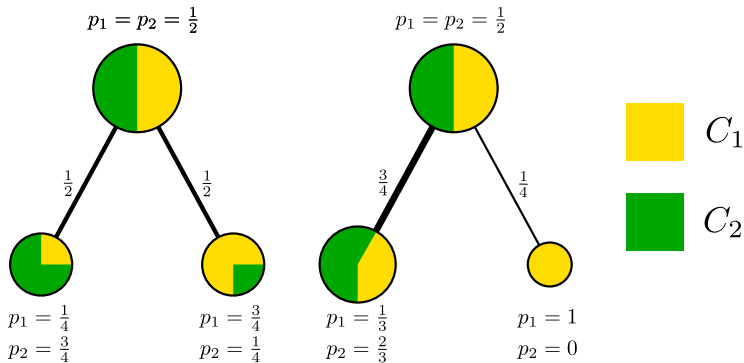
Critères de coût (II) : Entropie

Application dans le cas binaire :

$$H_{\text{ent}}(\mathcal{D}_n) = -\hat{p}_1(\mathcal{D}_n) \log(\hat{p}_1(\mathcal{D}_n)) - (1 - \hat{p}_1(\mathcal{D}_n)) \log(1 - \hat{p}_1(\mathcal{D}_n))$$



Retour sur un exemple



Exercise: Calculer L_{ent} associée à H_{ent} .

Critères de coût (III) : indice de Gini

Indice de Gini :

$$H_{\text{Gini}}(\mathcal{D}_n) = \sum_{k=1}^K \hat{p}_k(\mathcal{D}_n)(1 - \hat{p}_k(\mathcal{D}_n)) = \sum_{k=1}^K \sum_{\substack{k'=1 \\ k' \neq k}}^K \hat{p}_k(\mathcal{D}_n)\hat{p}_{k'}(\mathcal{D}_n)$$

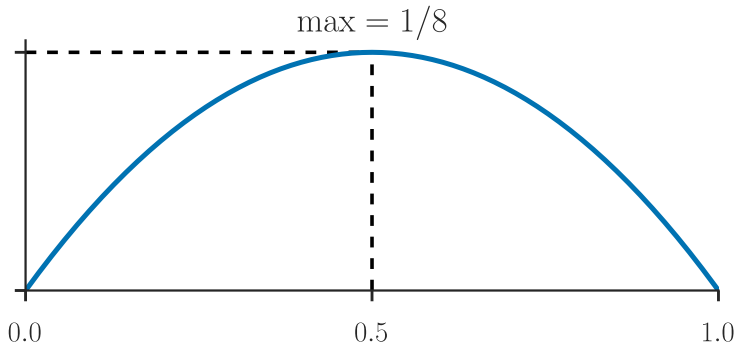
Interprétation des deux formulations :

1. les variables binaires $X_i^k = \mathbb{1}(Y_i = k)$, pour $i = 1, \dots, n$; leur variance vaut $p_k(\mathcal{D}_n)(1 - p_k(\mathcal{D}_n))$, l'indice de Gini mesure donc la somme/moyenne des variances des classes binarisées
2. remplacer le vote majoritaire par la règle “choisir la classe k avec probabilité p_k ” ; l'indice de Gini est alors la probabilité d'erreur pour cette règle Breiman *et al.* (1984), p. 104

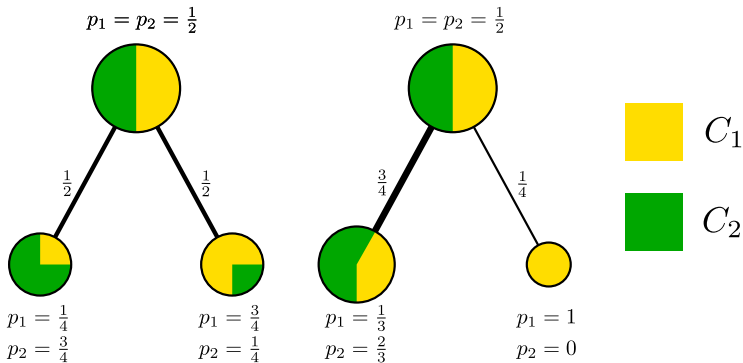
Critères de coût (III) : indice de Gini

Application dans le cas binaire :

$$H_{\text{Gini}}(\mathcal{D}_n) = 2 \cdot \hat{p}_1(\mathcal{D}_n) (1 - \hat{p}_1(\mathcal{D}_n))$$



Retour sur un exemple




Exercise: Calculer L_{Gini} associée à H_{Gini}

Critères d'arrêt

On peut s'arrêter dans une branche dès qu'on atteint :

- ▶ une profondeur maximale
- ▶ un nombre maximale de feuilles
- ▶ un nombre trop faible d'exemples par nœud

Rem: si le nombre minimal d'exemples vaut un, l'ensemble d'apprentissage est appris jusqu'au bout (dans les limites computationnelles et de mémoire) : risque de **sur-apprentissage** !

Rem: le cas de profondeur minimal un est appelé "souche"
( : *stump*)

Variables catégorielles

- ▶ Pour avoir un arbre binaire : si une variable catégorielle est à M valeurs/modalités, on la transforme en M variables binaires
- ▶ L'algorithme d'apprentissage est approprié pour traiter aussi bien des problèmes binaires que multi-classes
- ▶ Les classes avec beaucoup de modalités ont tendance à être favorisées car plus il y a de classes, plus il y a de chance de trouver une bonne coupure

Attention donc au sur-apprentissage !

Arbres de régression

Fonctionnement identique pour la régression, seul le critère de coût change, on minimise :

$$L(t_{j,\tau}, \mathcal{D}_n) = \frac{n_g}{n} H(\mathcal{D}_n^g(j, \tau)) + \frac{n_d}{n} H(\mathcal{D}_n^d(j, \tau))$$

avec la **variance** comme mesure d'**impureté**

$$H(\mathcal{D}_n) = \overline{\text{var}}(\mathcal{D}_n) := \frac{1}{|\mathcal{D}_n|} \sum_{(\mathbf{x}_i, y_i) \in \mathcal{D}_n} (y_i - \bar{y}_n)^2$$

où

$$\bar{y}_n := \frac{1}{|\mathcal{D}_n|} \sum_{(\mathbf{x}_i, y_i) \in \mathcal{D}_n} y_i$$

Rem: on veut maximiser l'homogénéité/pureté des sorties, ce qui revient à trouver la partition minimisant le risque quadratique

Sélection de modèles (I)

(1) déterminer un des hyper-paramètres suivant par **validation croisée**

- ▶ Profondeur maximale
- ▶ nombre de feuilles maximal
- ▶ nombre d'exemples minimal dans une feuille/nœud

Sélection de modèles (II)

(2) **par élagage** ( : *pruning*)

On utilise un ensemble de validation pour re-visiter un arbre appris sans limite sur un ensemble d'apprentissage. On ne garde que les branches qui apportent une amélioration en validation. Plus de détails dans [Hastie et al. \(2009\)](#)

Rem: utile pour l'interprétation, mais coûteux et inutile si l'on combine plusieurs arbres (*cf.* "forêts aléatoires")

Rem: l'élagage n'est pas disponible dans `sklearn` (utiliser si besoin `rpart` de R)

Avantages et inconvénients des arbres de décision

Avantages

- ▶ Construit une fonction de décision non linéaire, interprétable
- ▶ Consistance des arbres (cf. Scott et Nowak (2006) pour une revue détaillée)
- ▶ Fonctionne pour le multi-classe
- ▶ Prise de décision efficace : $O(\log F)$, F : nombre de feuilles
- ▶ Fonctionne pour des variables continues et catégorielles

Plus sur ce thème :

https://brohrer.github.io/how_decision_trees_work.html

et le code

https://github.com/brohrer/brohrer.github.io/blob/master/code/decision_tree.py

Avantages et inconvénients des arbres de décision

Inconvénients

- Estimateur à large variance, instabilité : une petite variation dans l'ensemble d'apprentissage engendre un arbre complètement différent → d'où l'intérêt des combinaisons linéaires d'arbres (*bagging*, forêt, *boosting*)

Bibliographies

- ▶ BREIMAN, L. et al. *Classification and regression trees*. Wadsworth Statistics/Probability Series. Belmont, CA : Wadsworth Advanced Books et Software, 1984, p. x+358.
- ▶ HASTIE, T. J., R. TIBSHIRANI et J. FRIEDMAN. *The Elements of Statistical Learning*. Second. Springer Series in Statistics. New York : Springer, 2009, p. xxii+745.
- ▶ QUINLAN, J. R. "Induction of Decision Trees". In : *Maching Learning* 1 (1986), p. 81-106.
- ▶ ROMAN, S. *Coding and information theory*. T. 134. Graduate Texts in Mathematics. New York : Springer-Verlag, 1992, p. xviii+486.
- ▶ SCOTT, C. et R. D. NOWAK. "Minimax-optimal classification with dyadic decision trees". In : *IEEE Trans. Inf. Theory* 52.4 (2006), p. 1335-1353.