

Document de travail

Laura Nguyen

27 juillet 2018

1 Introduction

Dans beaucoup de problèmes de classification, les valeurs des attributs et de la classe sont ordinaux. De plus, il peut exister une contrainte de monotonie : la classe d'un objet doit croître/décroître en fonction de la valeur de tout ou partie de ses attributs. A savoir, étant donné deux objets x, x' , si $x \leq x'$ alors $f(x) \leq f(x')$. Les variables dépendantes, $f(x)$ et $f(x')$, sont des fonctions monotones des variables indépendantes, x et x' . On parle alors de problèmes de classification monotone, ou problèmes de classification avec contrainte de monotonie. Cette contrainte indique que les objets ayant de meilleures valeurs d'attributs ne doivent pas être assignés à de moins bonnes valeurs de classe.

L'ajout de cette contrainte de monotonie permet d'introduire des concepts sémantiques tels la préférence, la priorité, l'importance, qui nécessitent une relation d'ordre.

Il existe de nombreux domaines se prêtant à ce type de tâches, tels la prédiction du risque de faillite [6], l'analyse de la satisfaction des clients [7], le diagnostic médical [10]. L'importance de la prise en compte d'une relation graduelle entre les valeurs d'attributs et la classe a été démontrée [12] : les classifieurs auxquels sont imposés la contrainte de monotonie sont au moins aussi performants que leurs homologues classiques, et les experts sont plus enclins à utiliser les règles générées par les modèles monotones.

Afin d'extraire des règles à partir de données monotones, on décide d'utiliser les arbres de décision, dont l'efficacité et l'interprétabilité en classification a été prouvée [15]. Cependant, les algorithmes de construction d'arbres de décision standards (générés par CART [9]) ne produisent pas de classifieurs sensibles à la monotonie, même si la base utilisée est complètement monotone. En revanche, il est montré dans [3] que les classifieurs purement monotones ([2], [1], [5]) sont, en terme de taux de bonne classification, statistiquement indiscernables de leurs homologues non-monotones. Dans le même article, il est expliqué que ce phénomène est dû à la sensibilité de ces classifieurs au bruit non-monotone présent dans les données réelles.

Ce stage a pour but d'étudier la construction et l'évaluation d'arbres de décision prenant en compte une relation graduelle susceptible d'exister entre les valeurs d'attributs et la classe, tout en étant suffisamment robuste au bruit non-monotone. On reprend, en particulier, [11] pour la construction d'arbres de décision monotones paramétrés par une mesure de discrimination à rang. Une étude théorique des propriétés des mesures présentées dans le même article est également effectuée.

2 Etat de l'art

Dans cette partie, on étudie et compare les méthodes proposées par Hu et al. [8], Marsala et Petturiti [11], Qian et al. [14] et Pei et Hu [13].

Notations

On considère un ensemble $\Omega = \{\omega_1, \dots, \omega_n\}$ d'éléments définis par un ensemble d'attributs $A = \{a_1, \dots, a_m\}$, où pour tout $j = 1, \dots, m$, a_j est une fonction de Ω vers $X_j = \{x_{j_1}, \dots, x_{j_t}\}$. On note aussi $\lambda : \Omega \rightarrow C$ la fonction d'étiquetage, où $C = \{c_1, \dots, c_k\}$ est un ensemble de classes totalement ordonné.

Pour $\omega_i \in \Omega$, l'ensemble dominant de ω_i généré par a_j est défini de la façon suivante :

$$[\omega_i]_{a_j}^{\leq} = \{w_h \in \Omega : a_j(\omega_i) \leq a_j(\omega_h)\}$$

De même, l'ensemble dominant de ω_i généré par λ s'écrit :

$$[\omega_i]_{\lambda}^{\leq} = \{w_h \in \Omega : \lambda(\omega_i) \leq \lambda(\omega_h)\}$$

Les notions de *dominance rough sets* sont également utilisées. On cherche à approximer l'ensemble c_q^{\geq} , ie l'ensemble des éléments de Ω dont la valeur de classe est inférieure à c_q .

Soit $B \subseteq A$ et c_q une valeur de classe. Les approximations inférieure et supérieure de c_q^{\geq} sont définis de la façon suivante :

$$\underline{R}_B^{\geq}(c_q^{\geq}) = \{\omega \in \Omega : [\omega]_B^{\geq} \subseteq c_q^{\geq}\}$$

$$\overline{R}_B^{\geq}(c_q^{\geq}) = \{\omega \in \Omega : [\omega]_B^{\leq} \cap c_q^{\geq} \neq \emptyset\}$$

2.1 Arbre de décision basé sur l'entropie d'ordre

Il est montré dans [3] que les classifieurs purement monotones ne procurent pas de meilleurs résultats que leurs homologues classiques lorsque les données contiennent un taux élevé de bruit non-monotone.

Afin de résoudre ce problème, les auteurs de [8] proposent un algorithme robuste pour la classification monotone.

Pour cela, ils définissent une mesure de degré de monotonie entre deux attributs, qu'ils nomment information mutuelle d'ordre, ou *rank mutual information* (RMI) :

$$RMI^{\leq}(a_j, a_{j'}) = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log \frac{|[\omega_i]_{a_j}^{\leq}| \times |[\omega_i]_{a_{j'}}^{\leq}|}{n \times |[\omega_i]_{a_j}^{\leq} \cap [\omega_i]_{a_{j'}}^{\leq}|}$$

RMI, sensible à la monotonie et robuste face aux données bruitées, est utilisé comme mesure de sélection d'attribut dans leur algorithme de construction d'arbres de décision monotones, REMT (*Rank Entropy Based Decision Tree*).

Dans cet article, on considère seulement les arbres binaires dans lesquels est affecté à chaque noeud un seul attribut. Concernant les données, les attributs doivent être numériques et la classe, ordinale.

A chaque étape de l'induction :

- si $|\Omega_\alpha| = 1$ ou tous les éléments de Ω_α partagent la même classe, une feuille est créée.
- Sinon, pour chaque attribut a_j , pour chaque valeur d'attribut x_{j_s} , l'ensemble des éléments est divisé en deux sous-ensembles à partir desquels on calcule $RMI_{x_{j_s}} = RMI(a_j^{x_{j_s}}, \lambda)$. On récupère, pour chaque a_j , le seuil de coupure x_j^* maximisant l'information mutuelle d'ordre : $x_{j_s}^* = \arg \max RMI_{x_{j_s}}$. L'attribut a^* utilisé pour le partitionnement est celui dont le seuil x^* maximise $RMI(a_j^{x_{j_s}}, \lambda)$, pour $j = 1, \dots, m, s = 1, \dots, t_j - 1$.
- Si $RMI(a^*, \lambda) < \epsilon$, une feuille est créée.
- Sinon, un noeud est construit et la procédure est répétée sur les sous-ensembles induits par a^* et x^* .

Concernant le critère d'étiquetage, si tous les exemples de la feuille possèdent la même classe, on lui assigne cette dernière. Sinon, si les exemples proviennent de classes différentes, on assigne la classe médiane. Dans le cas où deux classes possèdent le même nombre d'exemples et la feuille courante provient de la branche gauche de son noeud parent, on lui assigne la pire classe. Sinon, on lui affecte la meilleure.

L'approche de construction gloutonne du classifieur ne permet pas d'obtenir un arbre globalement monotone, même si les données utilisées sont monotones. En revanche, cette méthode garantit une monotonie plus faible : il est montré que si la base de données utilisée lors de la construction de l'arbre est monotone-consistante, alors les règles générées par REMT sont monotones.

Afin d'évaluer la performance de leur algorithme, Hu et al. utilisent l'erreur absolue moyenne, ou *Mean Absolute Error* (MAE) :

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |f(\omega_i) - \lambda(\omega_i)|$$

où $f(\omega_i)$ est la classe prédite par REMT.

L'algorithme est testé sur des bases de données artificielles et réelles.

Les bases de données artificielles générées sont monotones. Elles contiennent 1000 exemples à deux attributs, et un nombre de classes variant de 2 à 30.

REMT est ici comparé à CART, Rank Tree [16], OLM [2] et OSDL [4]. Les expériences montrent que REMT produit le moins d'erreurs parmi ces algorithmes, hormis dans le cas à deux classes. Les auteurs soulignent aussi que REMT est le plus précis des quatre algorithmes, peu importe le nombre d'éléments utilisés lors de la construction de l'arbre.

Sur des bases de données réelles, Hu et al. comparent leur modèle à CART et Rank Tree [16]. Les expériences menées montrent que REMT donne de meilleurs résultats en termes de MAE sur 10 bases sur les 12 collectées. De plus, les auteurs montrent également que plus la taille de la base d'apprentissage diminue, plus l'écart de performance se creuse entre REMT et les autres modèles. Enfin, dans le but de comparer les performances des algorithmes lorsque les données sont monotones, les mêmes bases sont modifiées à l'aide d'un algorithme de monotonisation. Les résultats des expérimentations montrent que REMT est plus performant que les autres modèles. De plus, les valeurs de MAE produites par tous les modèles diminuent lorsque les données sont monotonisées.

2.2 Arbre de décision paramétré par une mesure de discrimination d'ordre

Dans [11], Marsala et Petturiti étudient l'influence de la mesure de discrimination utilisée lors de la construction du classifieur, en termes de taux de bonne prédiction et de monotonie.

Comme les mesures étudiées dans l'article partagent toutes la même structure fonctionnelle, les auteurs définissent un modèle de construction hiérarchique permettant d'isoler les propriétés d'une mesure de discrimination d'ordre et d'en créer de nouvelles.

Soit H^* une mesure de discrimination d'ordre. Le pouvoir de discrimination de l'attribut a_j envers λ selon H^* peut donc s'écrire de la façon suivante :

$$H^*(\lambda|a_j) = h^*(g^*(f^*(\omega_1)), \dots, g^*(f^*(\omega_n)))$$

Marsala et Petturiti proposent un algorithme de construction d'arbre de décision nommé RDMT (*Rank Discrimination Measure Tree*) essentiellement basé sur REMT mais qui utilise, à la place de RMI, une mesure de discrimination passée en paramètre.

Comme précédemment, seuls les arbres binaires à un attribut par noeud sont considérés. Ce classifieur gère à la fois les attributs numériques et ordinaux, mais la classe doit être ordinale.

Notons H la mesure de discrimination utilisée, ϵ le seuil minimal pour H , Ω_α l'ensemble des exemples considérés à l'étape courante de construction, α la taille minimale pour Ω_α , δ la profondeur courante de la branche, et Δ la profondeur maximale que peut avoir une branche de l'arbre.

A chaque étape de l'induction :

- si $|\Omega_\alpha| < \alpha$ ou tous les éléments de Ω_α partagent la même classe ou $\delta > \Delta$, une feuille est créée.
- Sinon, pour chaque attribut a_j , pour chaque valeur d'attribut x_{j_s} , l'ensemble des éléments est divisé en deux sous-ensembles à partir desquels on calcule $H(\lambda|a_j^{x_{j_s}})$. On récupère, pour chaque a_j , le seuil de coupure x_j^* maximisant la valeur de H : $x_j^* = \arg \min H(\lambda|a_j^{x_{j_s}})$. L'attribut a^* utilisé pour le partitionnement est celui dont le seuil x^* minimise $H(\lambda|a_j^{x_{j_s}})$, pour $j = 1, \dots, m, s = 1, \dots, t_j - 1$.
- Si $H(\lambda|a^*) < \epsilon$, une feuille est créée.
- Sinon, un noeud est construit et la procédure est répétée sur les sous-ensembles induits par a^* et x^* .

Comme REMT, RDMT ne garantit pas un classifieur globalement monotone, mais un arbre générant des règles monotones.

Les auteurs évaluent les modèles construits sur trois critères : le taux de bonne classification (mesuré par le pourcentage d'exemples correctement étiquetés, le test du K, et MAE), la monotonie et la taille des arbres (en termes de nombre de feuilles). La monotonie d'un arbre est évaluée par deux mesures :

- L'index I de non-monotonie d'un arbre \mathcal{T} :

$$I(\mathcal{T}) = \frac{\sum_{u=1}^q \sum_{v=1}^q m_{u,v}}{q^2 - q}$$

où q est le nombre de feuilles de Γ et $m_{u,v}$ vaut 1 si les feuilles l_u, l_v ne sont pas monotones, 0 sinon.

- L'index NMI1 des exemples dans chaque base de test \mathcal{D} :

$$NMI1(\mathcal{D}) = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{h=1}^n NMP(\omega_i, \omega_h)}{n^2 - n}$$

où $NMP(\omega_i, \omega_h)$ vaut 1 si la paire ω_i, ω_h n'est pas monotone, 0 sinon.

Les expérimentations menées dans l'article visent à comparer les arbres obtenus par différentes mesures ($H_S^*, H_S, H_G^*, H_G, H_P^*, H_{MID}^{10}, H_{ICT}$).

11 bases artificielles sont générées, dont le taux de NMI augmente de 0 à 10% avec un pas de 1%. Chaque base contient 500 exemples à 5 attributs et 5 classes.

Les tests menés sur ces bases montrent qu'il n'existe aucune différence significative entre les mesures en ce qui concerne les indices de taux de bonne classification. De plus, les mesures de discrimination d'ordre produisent des arbres plus monotones, en particulier lorsque le taux de bruit non-monotone de la base augmente. Enfin, il est également montré que ces mesures de discrimination produisent des arbres contenant plus de feuilles que les mesures classiques.

15 bases de données réelles sont sélectionnées pour évaluer les mesures sur des cas d'applications concrets. Comme précédemment, il n'y a pas de différence de taux de bonne classification significative entre les mesures. Cependant, H_S^*, H_G^* , et H_P^* génèrent des arbres plus monotones et comportant davantage de feuilles.

Les arbres produits par des mesures de discrimination d'ordre ne sont pas destinés à être directement utilisés pour la classification monotone. En revanche, étant donné leur degré de monotonie plus élevé, il est avantageux de les passer en entrée d'algorithmes de post-traitement afin renforcer la monotonie globale.

2.3 Fusion d'arbres de décision monotones

Afin d'améliorer la capacité de généralisation du modèle de classification, Qian et al. dans [14] proposent une méthode d'ensemble par fusion d'arbres de décision monotones.

Les auteurs couplent une méthode de réduction d'attributs préservant l'ordre avec REMT, utilisé pour générer les classifieurs de base.

Pour réduire l'ensemble des attributs, ils se basent sur les *dominant rough sets* et mettent à jour leur définition. Ils introduisent un paramètre β qui permet de paramétrer la sensibilité du *rough set* au bruit non-monotone. L'ensemble à approximer est :

$$c_q^{\geq} = \bigcup_{u \leq q} C_u$$

où $C_u \in \Omega/\lambda = \{C_1, C_2, \dots, C_r\}$ tel que, pour tout $q, u \leq r$, si $q \geq u$ alors les éléments de C_q sont préférés à ceux de C_u .

Soit $B \subseteq A$ et c_q une valeur de classe. Les approximations inférieure et supérieure de c_q^{\geq} sont définis de la façon suivante :

$$\underline{R}_B^{\geq}(c_q^{\geq}) = \{\omega \in \Omega : \frac{|[\omega]_B^{\geq} \cap c_q^{\geq}|}{|[\omega]_B^{\geq}|} \geq 1 - \beta\}$$

$$\overline{R_B^\beta}(c_q^\geq) = \{\omega \in \Omega : \frac{|[\omega]_B^\geq \cap c_q^\geq|}{|[\omega]_B^\geq|} \geq \beta\}$$

où $0 \leq \beta \leq 0.5$

La frontière ascendante de c_q liée à l'ensemble d'attributs B s'écrit :

$$BND_B^\beta(c_q^\geq) = \overline{R_B^\beta}(c_q^\geq) - \underline{R_B^\beta}(c_q^\geq)$$

La dépendance monotone de λ selon B est donc exprimée de la façon suivante :

$$\gamma_B^\beta(\lambda) = \frac{|\Omega - \bigcup_{q=1}^k BND_B^\beta(c_q^\geq)|}{|\Omega|}$$

A partir de cette définition, il est possible d'établir un coefficient de pertinence d'un attribut a dans B, relativement à λ . La pertinence interne de a dans B relativement à λ est définie de la manière suivante :

$$Sig_{inner}^\beta(a, B, \lambda) = \gamma_B^\beta(\lambda) - \gamma_{B-\{a\}}^\beta(\lambda)$$

De la même façon, $\forall a \in A - B$, la pertinence externe de a selon B correspond à :

$$Sig_{outer}^\beta(a, B, \lambda) = \gamma_{B \cup \{a\}}^\beta(\lambda) - \gamma_B^\beta(\lambda)$$

A l'aide de ces mesures de pertinence d'attributs, Qian et al. proposent un algorithme de réduction d'attributs, paramétré par β , qui génère des *reducts* d'attributs monotones. Cette méthode sert à produire des arbres les plus diversifiés possibles : plusieurs sous-ensembles d'attributs sont sélectionnés, et chaque sous-ensemble est une réduction d'attributs qui préserve la monotonie des données originelles. Les auteurs définissent une méthode de recherche de multiples *reducts* d'attributs monotones, paramétrée par β . Chaque sous-ensemble d'attributs produit sert de base d'apprentissage pour un arbre construit par REMT.

3 Etude théorique des propriétés des mesures de discrimination d'ordre

Marsala et Petturiti définissent dans [11] un modèle de construction hiérarchique de mesures de discrimination d'ordre. Ce modèle a pour but d'isoler les propriétés qu'une fonction doit avoir pour être une telle mesure. Il sert aussi de base pour en créer de nouvelles.

Soit H^* une mesure de discrimination d'ordre. On rappelle que le pouvoir de discrimination de l'attribut a_j envers la classe λ peut se décomposer de la façon suivante :

$$H^*(\lambda|a_j) = h^*(g^*(f^*(\omega_1), \dots, g^*(f^*(\omega_n))))$$

où f^* est une mesure de la monotonie locale de l'objet, g^* une mesure de non-monotonie de l'objet, et h^* une agrégation des mesures g^* .

Pour que H^* soit une mesure de discrimination d'ordre, chaque couche doit satisfaire certaines conditions.

Soient $\omega_i \in \Omega$ et f^*, g^*, h^* les trois couches de H^* . Les propriétés suivantes sont démontrées en annexe :

4 Implémentation et expérimentation de l'algorithme de construction d'arbres monotones

Dans cette partie, on se base essentiellement sur RDMT(H), l'algorithme de construction d'arbres monotones donné dans [11], pour construire des arbres de décision monotones, que l'on évalue sur des données artificielles et réelles.

4.1 Mesures de discrimination d'ordre

D'après [11], les mesures de discrimination d'ordre possèdent la même structure fonctionnelle : elles se décomposent en trois fonctions f^* , g^* , et h^* . Dans le même article, un modèle de construction hiérarchique de mesures de discrimination à rang est proposé. Il permet d'isoler leurs propriétés et d'en créer de nouvelles.

Références

- [1] A. BEN-DAVID. “Monotonicity maintenance in information-theoretic machine learning algorithms”. In : *Machine Learning* 19.1 (1995), p. 29-43.
- [2] A. BEN-DAVID, L. STERLING et Y.-H. PAO. “Learning and classification of monotonic ordinal concepts”. In : *Computational Intelligence* 5.1 (1989), p. 45-49.
- [3] A. BEN-DAVID, L. STERLING et T. TRAN. “Adding monotonicity to learning algorithms may impair their accuracy”. In : *Expert Systems with Applications* 36.3 (2009), p. 6627-6634.
- [4] K. CAO-VAN. “Supervised ranking : from semantics to algorithms”. Thèse de doct. Ghent University, 2003.
- [5] K. CAO-VAN et B. DE BAETS. “Consistent representation of rankings”. In : *Theory and Applications of Relational Structures as Knowledge Instruments*. Springer, 2003, p. 107-123.
- [6] S. GRECO, B. MATARAZZO et R. SLOWINSKI. “A new rough set approach to evaluation of bankruptcy risk”. In : *Operational tools in the management of financial risks*. Springer, 1998, p. 121-136.
- [7] S. GRECO, B. MATARAZZO et R. SLOWINSKI. “Customer satisfaction analysis based on rough set approach”. In : *Zeitschrift für Betriebswirtschaft* 77.3 (2007), p. 325-339.
- [8] Q. HU, X. CHE, L. ZHANG, D. ZHANG, M. GUO et D. YU. “Rank entropy-based decision trees for monotonic classification”. In : *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering* 24.11 (2012), p. 2052-2064.
- [9] B. LEO, J. H. FRIEDMAN, R. A. OLSHEN et C. J. STONE. “Classification and regression trees”. In : *Wadsworth International Group* (1984).
- [10] C. MARSALA. “Gradual fuzzy decision trees to help medical diagnosis”. In : *Fuzzy Systems (FUZZ-IEEE), 2012 IEEE International Conference on*. IEEE. 2012, p. 1-6.
- [11] C. MARSALA et D. PETTURITI. “Rank discrimination measures for enforcing monotonicity in decision tree induction”. In : *Information Sciences* 291 (2015), p. 143-171.
- [12] M. J. PAZZANI, S. MANI et W. R. SHANKLE. “Acceptance of rules generated by machine learning among medical experts”. In : *Methods of information in medicine* 40.05 (2001), p. 380-385.
- [13] S. PEI et Q. HU. “Partially monotonic decision trees”. In : *Information Sciences* 424 (2018), p. 104-117.
- [14] Y. QIAN, H. XU, J. LIANG, B. LIU et J. WANG. “Fusing monotonic decision trees”. In : *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering* 27.10 (2015), p. 2717-2728.
- [15] J. R. QUINLAN. “Induction of decision trees”. In : *Machine learning* 1.1 (1986), p. 81-106.
- [16] F. XIA, W. ZHANG, F. LI et Y. YANG. “Ranking with decision tree”. In : *Knowledge and information systems* 17.3 (2008), p. 381-395.