Arbres de régression et de classification

# Arbres de régression et de classification

Véronique Tremblay

# Introduction

Arbres de régression et de classification Lintroduction

# Objectifs

- Comprendre le concept de base
- Connaître le vocabulaire

رم Exemple

l		1		
				Ä
age	revenu	etudiant	credit	achat
<=30	eleve	non	bon	non
<=30	eleve	non	excellent	non
<=30	moyen	non	bon	non
>40	moyen	non	excellent	non
>40	moyen	non	bon	oui 😘
31-40	eleve	non	bon	oui ·.
31-40	moyen	non	excellent	oui
<=30	faible	oui	bon	oui .
<=30	moyen	oui	excellent	oui .
>40	faible	oui	excellent	non
>40	faible	oui	bon	oui ·
>40	moyen	oui	bon	oui •
31-40	faible	oui	excellent	oui .
31-40	eleve	oui	bon	oui ,

# Principe

- Diviser l'ensemble des données d'apprentissage successivement en sous-groupes, selon les valeurs prises par les variables explicatives qui, à chaque étape, discrimine le mieux la variable cible.
- On commence par choisir la variable qui sépare le mieux les observations de façon à avoir des sous-groupes, qu'on appelle nœuds, les plus homogènes possibles par rapport à la variable cible.
- On réitère le processus pour chaque nœud *fils* jusqu'à ce qu'il ne soit plus possible de continuer (ex: noeuds purs) ou on a atteint un certain critère d'arrêt.

Le modèle qui en résulte est une longue série de règles simples.

#### Vocabulaire

- Racine
- Noeud
- Noeud terminaux (feuilles)
- Taux d'erreur dans un noeud
- Taux d'erreur global
- Hauteur de l'arbre



Arbres de régression et de classification

# Deux questions

- 1 Comment choisir la bonne variable pour séparer?
- 2 Quand arrêter?

Arbres de régression et de classification
\_Introduction

# Principaux algorithmes

#### CHAID

Chi-Square Automatic Interaction Detection Kass, GV (1980). An Exploratory Technique for Investigating Large Quantities of Categorical Data. Applied Statistics, vol 29, no 2, pp 119-127.

#### CART

Classification And Regression Trees (Breiman et al., 1984)

# **CHAID**

Arbres de régression et de classification L-CHAID

# Objectif

■ Comprendre comment construire un arbre de type CHAID.

# CHAID (approche conditionnelle)

- Variables cible et explicatives nominales ou ordinales
- Les embranchements sont binaires ou non (facilite l'interprétation)

# CHAID (approche conditionnelle)

#### Comment choisir les variables à chaque nœud?

■ Test du  $\chi^2$  1

	p-valeur			
Age	0.33			
Revenu	1.00			
Etudiant	0.26			
Credit	0.56			

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>lci obtenu par simulation parce que l'échantillon est trop petit

### En pratique

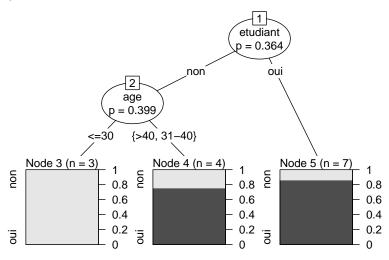
La fonction ctree de la librairie party permet de construire des arbres de type CHAID.<sup>2</sup>

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Lien vers la section sur les arbres dans les notes de cours.

### Exemple

```
##
##
    Conditional inference tree with 3 terminal nodes
##
## Response: achat
## Inputs: age, revenu, etudiant, credit
## Number of observations: 14
##
## 1) etudiant == {non}; criterion = 0.636, statistic = 3.293
##
    2) age == {<=30}; criterion = 0.601, statistic = 4.25
      3)* weights = 3
##
## 2) age == {>40, 31-40}
## 4)* weights = 4
## 1) etudiant == {oui}
## 5)* weights = 7
```

## Exemple



#### Critère d'arrêt

#### Quand arrêter?

- Lorsque p-valeur > seuil
- Effectif minimal dans les noeuds terminaux
- Hauteur maximale

 $\mathsf{CART}^3$ 

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Lire la section 9.2 de ESL

Arbres de régression et de classification LCART

# Objectif

■ Comprendre comment se construit un arbre de type CART

Arbres de régression et de classification LCART

#### CART

#### Comment choisir les variables à chaque noeud?

Considère tous les embranchements *binaires* possibles pour toutes les variables explicatives<sup>4</sup>

On sélectionne généralement sur la base de

- EQM
- Indice de Gini

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Avec m valeurs distinctes, 2m-1 regroupements binaires possibles pour les variables nominales; m-1 points milieux distincts pour les variables continues... c'est long!

#### **CART**

Indice de Gini (indice d'impureté)

$$Gini = \sum_{k=1}^{K} p_k (1 - p_k) = 1 - \sum_{k=1}^{K} p_k^2$$

#### **CART**

#### Quand arrêter?

- Effectif minimal dans les noeuds terminaux
- Hauteur maximale

En général, on doit faire de l'élagage sur la base de la complexité.

#### **CART**

Coût de complexité d'un arbre T (équation 9.16).

$$C_{\alpha}(T) = \sum_{w=1}^{|T|} N_m Q_w + \alpha |T|$$

οù

- $\blacksquare$  |T| est le nombre de noeuds terminaux dans l'arbre T
- **Q** $_w$  est l'impureté ou l'erreur quadratique moyenne  $(E[(y_i-\hat{y}_i)^2])$  dans le noeud w
- lacktriangle  $\alpha$  est le paramètre de pénalisation

### En pratique

Vous pouvez utiliser la librairie rpart pour créer ce type d'arbre.<sup>5</sup>

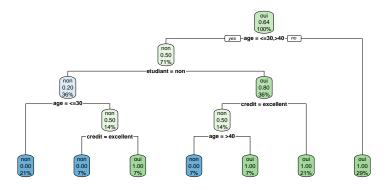
```
library(rpart)
library(rpart.plot)
# Hyperparamètres
hp <- list(split = 'gini')</pre>
controles rpart <- rpart.control(minsplit = 1)</pre>
# Construction de l'arbre
arbre rpart <- rpart(achat~.,don,
                      parms = hp,
                       control = controles rpart)
```

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>Lien vers la section sur les arbres dans les notes de cours.

### Exemple

```
## n = 14
##
## node), split, n, loss, yval, (yprob)
         * denotes terminal node
##
##
    1) root 14 5 oui (0.3571429 0.6428571)
##
##
      2) age=<=30.>40 10 5 non (0.5000000 0.5000000)
##
        4) etudiant=non 5 1 non (0.8000000 0.2000000)
##
          8) age=<=30 3 0 non (1.0000000 0.0000000) *
          9) age=>40 2 1 non (0.5000000 0.5000000)
##
##
           18) credit=excellent 1 0 non (1.0000000 0.0000000) *
           19) credit=bon 1 0 oui (0.0000000 1.0000000) *
##
##
        5) etudiant=oui 5 1 oui (0.2000000 0.8000000)
         10) credit=excellent 2 1 non (0.5000000 0.5000000)
##
           20) age=>40 1 0 non (1.0000000 0.0000000) *
##
           21) age=<=30 1 0 oui (0.0000000 1.0000000) *
##
         11) credit=bon 3 0 oui (0.0000000 1.0000000) *
##
      3) age=31-40 4 0 oui (0.0000000 1.0000000) *
##
```

# Exemple



Lien vers la visualisation interactive

Arbres de régression et de classification L Mathématique

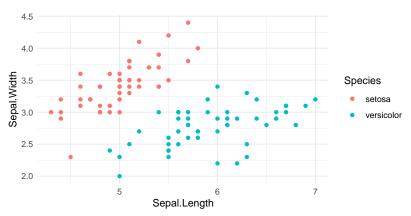
# Math'ematique

Arbres de régression et de classification LMathématique

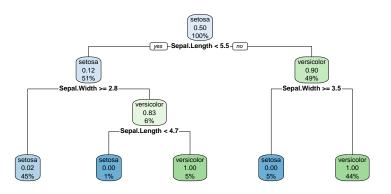
# Objectif

■ Comprendre la formulation mathématique des arbres.

On peut voir les arbres comme un partitionnement de l'espace en M régions  $R_1,R_2,...,R_M.$ 



Le modèle s'écrit  $f(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^{M} c_m \mathbf{I}(x \in R_m)$  (eq. 9.10).



Arbres de régression et de classification  $\sqcup$  Discussion

# Discussion

Arbres de régression et de classification

Discussion

# Objectif

- Comprendre les avantages et inconvénients des arbres
- Comprendre les alternatives possibles

Arbres de régression et de classification L Discussion

# **Avantages**

1 Aucune hypothèse *a priori* n'est faite sur la distribution des données

Arbres de régression et de classification L Discussion

- 1 Aucune hypothèse *a priori* n'est faite sur la distribution des données
- 2 Robuste aux données extrêmes

Arbres de régression et de classification

L Discussion

- 1 Aucune hypothèse *a priori* n'est faite sur la distribution des données
  - Robuste aux données extrêmes
- 3 Facile à interpréter

Arbres de régression et de classification
L Discussion

- 1 Aucune hypothèse *a priori* n'est faite sur la distribution des données
  - Robuste aux données extrêmes
- 3 Facile à interpréter
- 4 Tient implicitement compte des interactions possibles entre les variables

- 1 Aucune hypothèse *a priori* n'est faite sur la distribution des données
  - Robuste aux données extrêmes
- 3 Facile à interpréter
- 4 Tient implicitement compte des interactions possibles entre les variables
- 5 Sélectionne implicitement les variables importantes

- 1 Aucune hypothèse *a priori* n'est faite sur la distribution des données
- 2 Robuste aux données extrêmes
- 3 Facile à interpréter
- 4 Tient implicitement compte des interactions possibles entre les variables
- 5 Sélectionne implicitement les variables importantes
- 6 Permet d'obtenir un modèle non linéaire

- 1 Aucune hypothèse *a priori* n'est faite sur la distribution des données
- 2 Robuste aux données extrêmes
- 3 Facile à interpréter
- 4 Tient implicitement compte des interactions possibles entre les variables
- 5 Sélectionne implicitement les variables importantes
- 6 Permet d'obtenir un modèle non linéaire
- 7 Invariante aux transformation monotones des prédicteurs

- 1 Aucune hypothèse *a priori* n'est faite sur la distribution des données
- 2 Robuste aux données extrêmes
- 3 Facile à interpréter
- 4 Tient implicitement compte des interactions possibles entre les variables
- 5 Sélectionne implicitement les variables importantes
- 6 Permet d'obtenir un modèle non linéaire
- 7 Invariante aux transformation monotones des prédicteurs
- 8 Permet une gestion intéressante des valeurs manquantes.

## Traitement des valeurs manquantes

- Le choix de la variable et de la meilleure séparation se fait, à chaque noeud, uniquement avec les données non manquantes.
- On utilise ensuite des variables substitut pour prédire à quel noeud appartient chaque observation.

Arbres de régression et de classification L Discussion

### Inconvénients

1 L'approche n'est pas particulièrement performante en termes de prédiction

Arbres de régression et de classification L Discussion

### Inconvénients

- 1 L'approche n'est pas particulièrement performante en termes de prédiction
- 2 Les risque de surapprentissage sont élevés

Arbres de régression et de classification

Discussion

#### Inconvénients

- 1 L'approche n'est pas particulièrement performante en termes de prédiction
- Les risque de surapprentissage sont élevés
- 3 Nous ne sommes pas certains d'atteindre la meilleure partition

Arbres de régression et de classification

L Discussion

#### Inconvénients

- 1 L'approche n'est pas particulièrement performante en termes de prédiction
  - 2 Les risque de surapprentissage sont élevés
- 3 Nous ne sommes pas certains d'atteindre la meilleure partition
- 4 Peut être instable dans les résultats qu'elle produit

# Comparaison CART et CHAID

- Performance prédictive similaire
- L'approche de type cart tendent à choisir les variables qui ont le plus de modalité (et les variables continues). Les approches conditionnelles sont moins sensibles à ce problème.

Arbres de régression et de classification

# Adaptation à des problèmes particuliers

On peut facilement modifier le critère de séparation pour tenir compte de situations particulières.

Ex. Les forêts de survie