Apprentissage Automatique
Arbres de décision & méthodes ensemblistes

A. Larhlimi

Introduction

Rappel du dernier cours

- Principes généraux d'apprentissage : données apprentissage/validation/test, optimisation, évaluation
- Deux algorithmes élémentaires de *classification supervisée* : plus proche voisin, classifieur Bayésien

Objectifs de ce cours

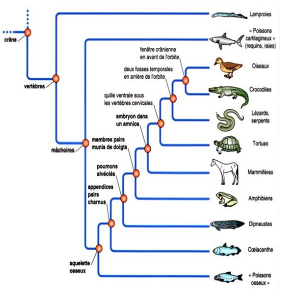
- Un nouveau type de classifieur : l'arbre de décision
- Un principe de conception : les approches ensemblistes
  Intuition : « un groupe prend plus souvent de meilleures décisions qu'un individu »

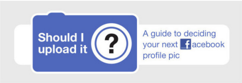
Arbres de décision et méthodes ensemblistes : plan

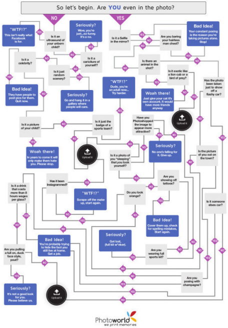
Arbres de décision

Arbres de décision [3, 9]

Un modèle intuitif : décomposer une décision globale en une séquence de décisions locales (questions)







➠ Ou bien encore comme dans le *jeu des 20 questions*

Arbres de décision

Exemple : attendre une table ou partir ?

- Un problème de décision binaire.
- Questions possibles : Autre restaurant à proximité ? Bar dans le restaurant ? Est-on vendredi ? Avons-nous faim ? Le restaurant est-il plein ? Est-il cher ? Quel est le type de restaurant ? Temps d'attente estimé ? Avons-nous une réservation ? Pleut-il ?

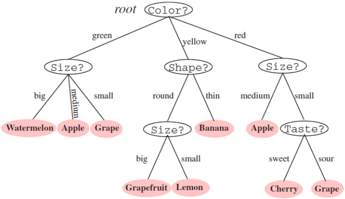
12 exemples d'apprentissage.

Example	Attributes										Target
	Alt	*Bar*	*Fri*	*Hun*	*Pat*	*Price*	*Rain*	*Res*	*Type*	*Est*	*Wait*
X_1	T	F	F	T	Some	$$$	F	T	French	0–10	T
X_2	T	F	F	T	Full	$	F	F	Thai	30–60	F
X_3	F	T	F	F	Some	$	F	F	Burger	0–10	T
X_4	T	F	T	T	Full	$	F	F	Thai	10–30	T
X_5	T	F	T	F	Full	$$$	F	T	French	>60	F
X_6	F	T	F	T	Some	$$	T	T	Italian	0–10	T
X_7	F	T	F	F	None	$	T	F	Burger	0–10	F
X_8	F	F	F	T	Some	$$	T	T	Thai	0–10	T
X_9	F	T	T	F	Full	$	T	F	Burger	>60	F
X_{10}	T	T	T	T	Full	$$$	F	T	Italian	10–30	F
X_{11}	F	F	F	F	None	$	F	F	Thai	0–10	F
X_{12}	T	T	T	T	Full	$	F	F	Burger	30–60	T

Arbres de décision

Principe

- Classification en posant une séquence de questions fermées (= nombre fini de réponses possibles)
- Questions organisées sous forme d'arbre : la question suivante dépend de la réponse à la question précédente
- La réponse à la dernière question définit la prédiction finale



Arbres de décision

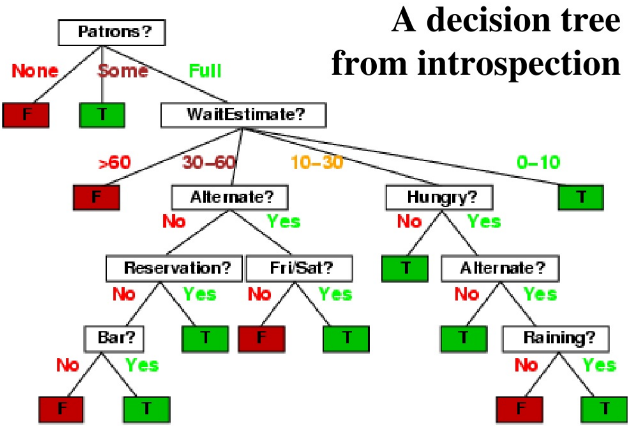


Figure 1 – Un arbre « expert » pour résoudre le problème du restaurant.

Arbres de décision

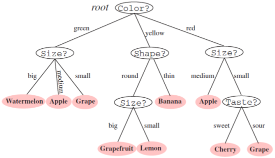
Questions type

- Sur la valeur d'un attribut caractéristique
- Sur la véracité d'une clause logique
- Sur l'appartenance à un intervalle ou un sous-ensemble
- Sur des attributs discrets ou numériques
- ...

Grande flexibilité possible mais les questions doivent être simples (à calculer)

Arbres de décision : structure

- Données codée comme ensemble d'attributs (ex : attributs d'un fruit = couleur, taille forme, goût...)
- Noeud de décision associé à un test ou question sur un des attributs
- Branches qui représentent les valeurs possibles de l'attribut testé ou des réponses aux questions
- Noeud terminal ou feuille, liée à la classe (prédiction)



Arbres de décision : principe de prédiction

- Les questions découpent (partitionnent) l'espace des attributs à chaque étape
- Le noeud terminal code un élément de la partition
- Toutes les données codées par le noeud terminal ont la même prédiction

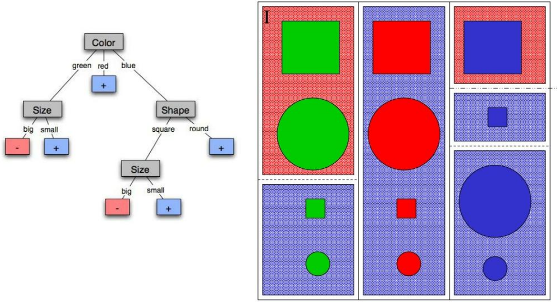


Figure 2 – Partition sur des données symboliques. Les questions portent sur la valeur d'un attribut discret.

Arbres de décision

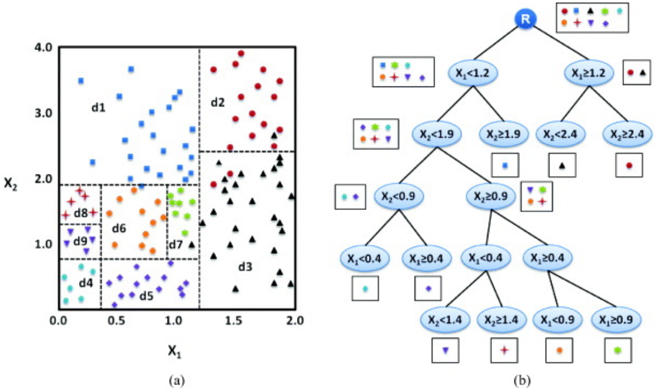
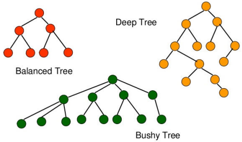


Figure 3 – Partition sur des données numériques. Les questions sont des tests comparant la valeur d'une dimension à un seuil.

Arbres de décision

Quelles questions se poser pour construire un arbre ?



Questions globales :

- Quelle structure choisir ? (profond, équilibré,...) ?
- Combien de découpages par noeud ? (binaire, plus)
- Quand s'arrêter de découper ?

Questions locales :

- Quel attribut choisir, et quel test lui appliquer ?
- Si l'arbre est trop grand, comment l'élaguer ?
- Si une feuille n'est pas pure, quelle classe attribuer ?

Arbres de décision : position du problème d'apprentissage

Soit $X = \{(x_j, y_j)\}_{j \leq N}$ des données décrites chacune par un ensemble d'attributs $x_j = \{A_i^j\}_{1 \leq j \leq M}$, avec A_i^j à valeurs numériques ou symboliques, et y_i la prédiction (vérité terrain).

Recherche du plus petit arbre de décision compatible avec X :

- Principe du rasoir d'Occam : trouver l'hypothèse la plus simple possible compatible avec les données
- Principe « Minimum Description Length » : trouver l'hypothèse qui produit le plus petit nombre d'opérations

Mais... recherche optimale impossible (problème NP-complet) [10]
➟ Heuristique assurant un arbre cohérent sur les données d'apprentissage.

Arbres de décision : algorithme élémentaire

Principe général

Construction incrémentale d'un arbre.

Trois étapes

1. Décider si un noeud est **terminal**
2. Si un noeud n'est pas terminal, choisir un attribut, un test et des **branches** possibles
3. Si un noeud est terminal, lui associer une **prédiction** (une classe, une valeur, etc.)

Remarque : il existe des formulations plus globales [8].

Arbres de décision : algorithme élémentaire

Choisir un attribut et un test

➟ Algorithmes récursifs (par exemple ID3, C4.5, CART...)

Fonction Construire-arbre(X)
SI tous les points de X sont de même classe,
créer une feuille associée à cette classe
SINON

- choisir la meilleure paire (A_i,test) pour créer un noeud
- ce test sépare X en 2 parties X_g et X_d
- Construire-arbre(X_g)
- Construire-arbre(X_d)

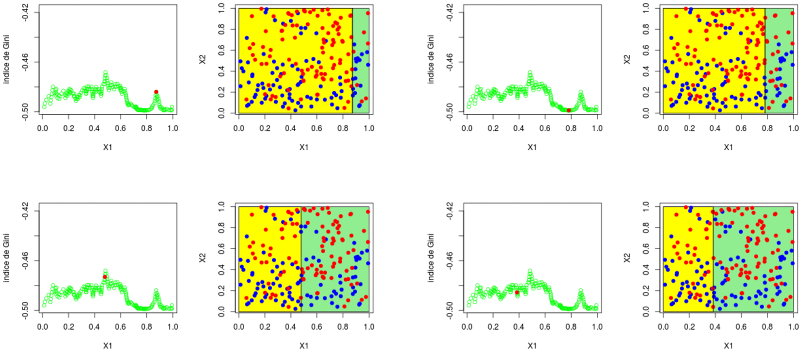
Arbres de décision : algorithmes

Critères de sélection d'un noeud

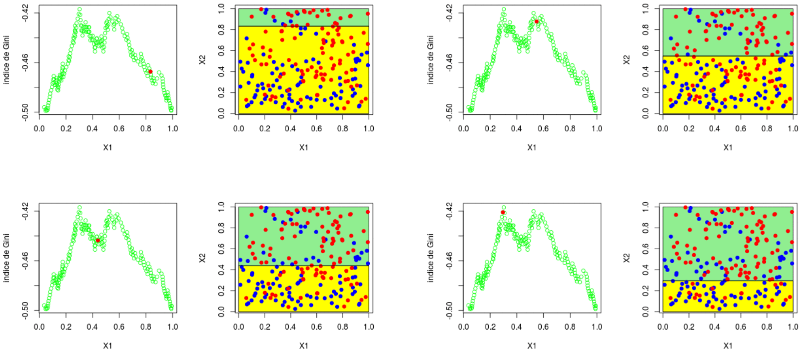
➟ Mesure de l'hétérogénéité (ou de la pureté).

- Entropie : $H = -\sum p(c_k)log_2(p(c_k))$ avec $p(c_k) = N_k/N$ probabilité de la classe c_k dans l'ensemble courant
  → ID3, C4.5, mesure l'information
- Indice de Gini : $I = \sum p(c_k)(1 - p(c_k)) = 1 - \sum p(c_k)^2$
  → CART, mesure les inégalités
- Indice d'erreur : $I = 1 - max(p(c_k))$

Arbres de décision : algorithmes



Arbres de décision : algorithmes



Arbres de décision : algorithmes

Choix attribut et test

➟ Gain d'homogénéité apporté par un test T pour séparer un noeud V en noeuds V_j.

- À chaque noeud, choix de T maximisant $Gain(V, T) = I(V) - \sum_j p(V_j) I(V_j)$
- En pratique, approche empirique pour tout A_i tri des valeurs par ordre croissant et tests tirés selon une approche dichotomique (médiane, etc...)

Arbres de décision : espace continu

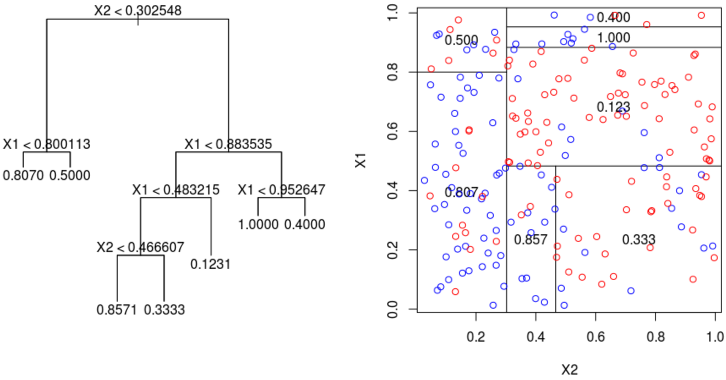


Figure 4 – Arbre et partition obtenu en utilisant un critère de type Gini.

Arbres de décision : espace discret

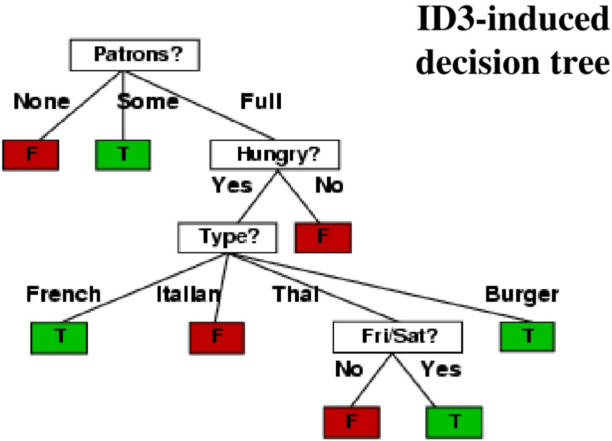
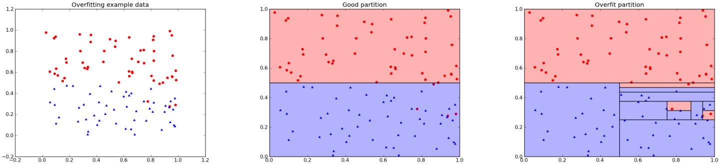


Figure 5 – Un arbre « appris » pour résoudre le problème du restaurant.

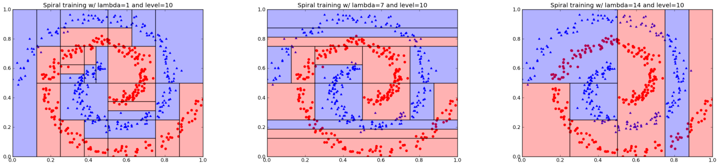
Arbres de décision : comportement



Sur-apprentissage

- Un arbre trop précis risque de mal généraliser (cf. k-NN)
- Les arbres peuvent être mal équilibrés
- On peut utiliser des techniques d'élagage (« pruning ») pour améliorer a posteriori la qualité des arbres

Arbres de décision : comportement



La complexité peut être contrôlée

- en limitant la profondeur
- en minorant le gain en homogénéité
- en ajoutant une pénalisation de complexité dans le coût
- en garantissant une bonne estimation des coûts (par ex. un nombre minimal d'échantillons par noeud)

Arbres de décision : Résumé

Points clés des arbres de décision

+ Interprétabilité
+ Apprentissage et classification rapides et efficaces, y compris en grande dimension.
- Tendance au surapprentissage (mais moyen de contrôle de la complexité)
- Sensibilité au bruit et aux points aberrants, instabilité

Utilisations

+ Classification ou régression...
+ Capable de traiter des données numériques, mais aussi symboliques

Méthodes ensemblistes

Méthodes ensemblistes

Définition

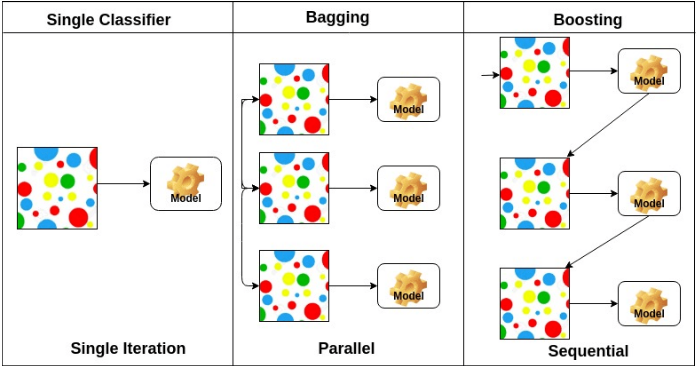
- Méthodes agrégeant des *ensembles* de classifieurs ;
- Produire une variété de classifieurs : en échantillonnant différemment les données, en modifiant les structures de classifieurs ;
- Classe finale = fusion des prédictions.

Principe

- *L'union fait la force* : tirer parti de plusieurs classifieurs peu performants (« faibles ») pour construire un classifieur performant (« fort »)
  ➟ *Réduit la variance* d'apprentissage et moyenne les erreurs

Méthodes ensemblistes

Deux grandes approches : bagging et boosting



Bagging [1]

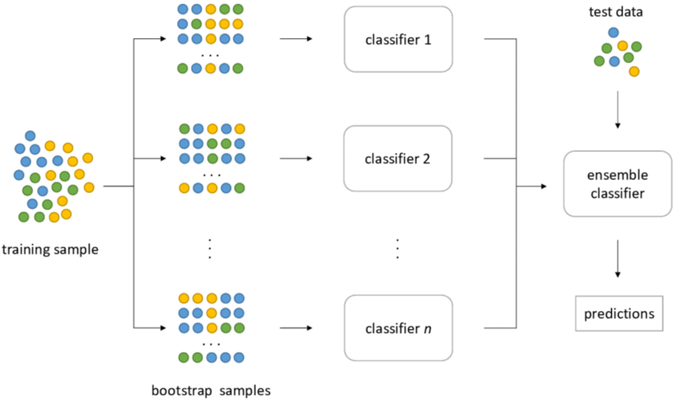
Génération de jeux de données multiples

- Construction de $\tilde{X}_1, ..., \tilde{X}_K$ par tirage avec remise sur X.
- $\tilde{X}_k$ similaires, mais pas trop (proba d'un exemple de ne pas être sélectionné $p = (1 - 1/N)^N$. Quand $N \to \infty$, $p \to 0.3679$.)
- Entraîner K fois le même algorithme f_k (arbre, réseau de neurones, SVM..) sur chaque $\tilde{X}_k$ et agréger par vote majoritaire ou moyenne $f(x) = \frac{1}{K} \sum f_k(x)$

Conséquence

- Chaque classifieur commet des erreurs différentes, liées à $\tilde{X}_k$ → l'agrégat a une plus faible variance d'apprentissage
- Méthode pour *régulariser* le processus de prédiction.

Bagging



training sample
bootstrap samples
classifier 1
classifier 2
classifier n
test data
ensemble classifier
predictions

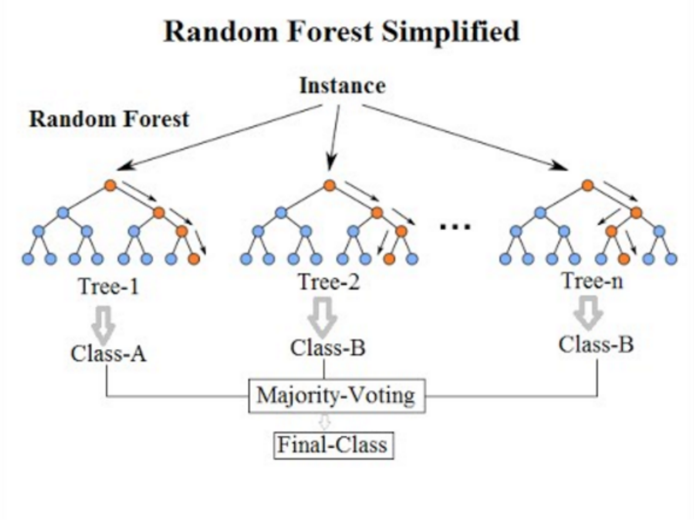
Random Forests [2]

Forêts aléatoires ou *Random forests*

➟ Combiner hasard et bagging pour construire un ensemble d'arbres de décision encore plus varié (=forêt)

- La partie calculatoire des arbres de décision est la construction incrémentale de leur structure (meilleure paire attribut & test)
- Structure = paramètre de contrôle des arbres (profondeur max, critère de pureté des noeuds, nombre d'échantillons par noeud...) + aléatoire sur attributs/données/tests

Random Forests



Random Forests

Forêts aléatoires ou *Random forests*

Algorithme :

POUR $k = 1 \dots K$:

- Bagging : tirage de $\tilde{X}_k$ de même taille que X
- Tirage (avec remise) de q attributs A_i parmi les M possibles
- Construction de l'arbre G_k avec des seuils aléatoires
- Construction de f_k la fonction de décision de G_k dont les feuilles sont remplies avec $\tilde{X}_k$

Agrégation :

- $f(x) = \frac{1}{K} \sum f_k(x)$ (régression)
- $f(x) =$ Vote majoritaire$(f_1(x), \dots, f_K(x))$

Biais et variance

Exemple de la régression

$$y = f(\mathrm{x}) + \epsilon$$

Il y a deux sources d'aléatoire :

- Le bruit : ϵ (un même x peut produire différents y)
- L'échantillonnage des données d'apprentissage : D

On définit pour un prédicteur appris $\hat{f}_D(\mathrm{x})$:

Erreur écart quadratique moyen entre prédiction et valeur idéale

Biais erreur de la prédiction moyenne par rapport à la valeur idéale

Variance écart quadratique moyen entre prédiction et prédiction moyenne

Biais et variance

Compromis biais variance

L'erreur pour un x donné peut se décomposer en :

$$\begin{aligned}\mathrm{Err}(\mathsf{x}) &= E_D[(y - \hat{f}_D(\mathsf{x}))^2] \\ &= \underbrace{\epsilon^2}_{\text{bruit}^2} + \underbrace{(E_D[\hat{f}_D(\mathsf{x})] - y)^2}_{\text{biais}^2} + \underbrace{E_D[(E_D[\hat{f}_D(\mathsf{x})] - \hat{f}_D(\mathsf{x}))^2]}_{\text{variance}}\end{aligned}$$

L'origine de l'erreur de généralisation est double, mais les deux termes sont difficiles à contrôler individuellement.
Rem : pour la classification, une telle décomposition est plus difficile à obtenir, mais les comportements sont comparables.

Biais et variance

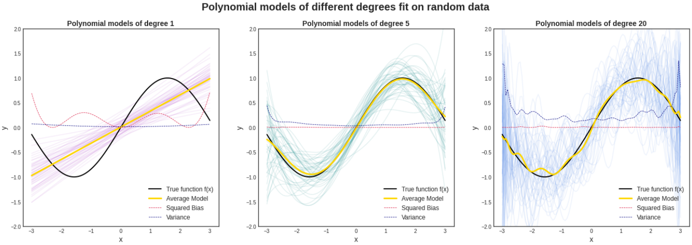


Figure 6 – Simulation d'une régression pour 50 échantillons et polynomes de degrés 1,5,20.

- Degré 1 : variance faible, mais biais important
- Degré 5 : variance et biais faibles
- Degré 20 : variance importante et biais très faible

Intérêt des approches ensemblistes

On introduit une source d'aléatoire supplémentaire : choix des splits, du sous ensemble de variables, etc.
Lorsque les prédicteurs individuels sont sans biais (c'est le cas avec les arbres), la variance du prédicteur ensembliste est :

$$\operatorname{var}\left(\hat{f}_D(\mathrm{x})\right) = \rho\sigma^2 + \frac{1-\rho}{K}\sigma^2$$

σ variance d'un prédicteur individuel et ρ corrélation entre deux prédicteurs.
On voit que l'on a intérêt à construire des prédicteurs individuels indépendants ($\rho \approx 0$), et en grand nombre (K grand).

Random Forests : Résumé

Points clés des forêts aléatoires

- \+ Bonnes performances
- \+ Arbres plus décorrélés que par simple bagging
- \+ Grandes dimensions
- \+ Robustesse
- \- Temps d'entraînement (mais aisément parallélisable).

Utilisation

- Choix d'une faible profondeur (2 à 5), autres hyper-paramètres à estimer par validation croisée
- Classification et régression
- Données numériques et symboliques

Boosting [5]

Principe

- $X = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N$ un ensemble de données où $y_i \in \{-1, 1\}$
- H un ensemble ou une famille de classifieurs $f \mapsto -1, 1$, pas forcément performants → appelés *weak learners*

Objectif du boosting :

- Construire un classifieur performant $F(x) = \sum_{k=1}^K \alpha_k f_k(x)$ → appelé *strong learner*
- Moyenne *pondérée* des *weak learners*

➠ Comment trouver les poids ?

Boosting

AdaBoost

- Adaboost = « Adaptive boosting algorithm », algorithme minimisant l'erreur globale de F de manière itérative
- Principe : à chaque itération k, modifier F^k de manière à *donner plus de poids aux données difficiles* (mal-classées) qui permettent de corriger les erreurs commises par F^{k-1}

Boosting

AdaBoost : algorithme

Initialiser les poids liés aux données :
$d^0 \leftarrow (\frac{1}{K}, \frac{1}{K}, \ldots, \frac{1}{K})$
POUR $t = 1 \ldots K$:

- Entraîner f_k sur les données X pondérées par d^{k-1} $(f_k = \arg\min_f \sum_i d_i^{k-1}[y_i \neq f(x_i)])$
- Prédire $\hat{y} = y^i \leftarrow f_k(x_i), \forall i$
- Calculer l'erreur pondérée $\epsilon^k \leftarrow \sum_i d_i^{k-1}[y_i \neq \hat{y}_i]$
- Calculer les paramètres adaptatifs $\alpha^k \leftarrow \frac{1}{2} \log \left(\frac{1-\epsilon^k}{\epsilon^k} \right)$
- Re-pondérer les données $d^k = d_i^k \leftarrow d_i^{k-1} \exp\left(-\alpha^k y_i \hat{y}_i\right)$

Classifieur (pondéré) final : $F(x) = \mathrm{sgn}\left(\sum_{k=1}^{K} \alpha_k f_k(x)\right)$

Boosting

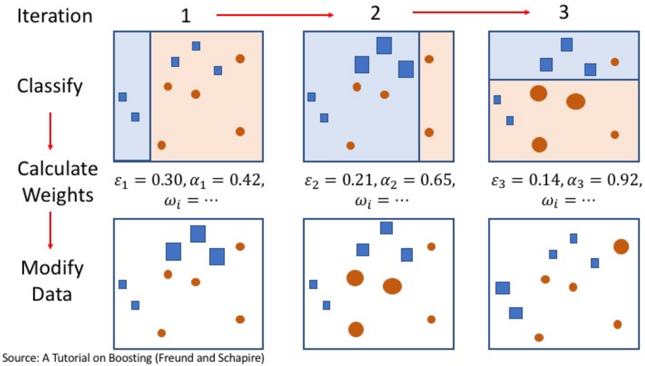


Figure 7 – Apprentissage séquentiel des classifieurs et des pondérations.

Boosting

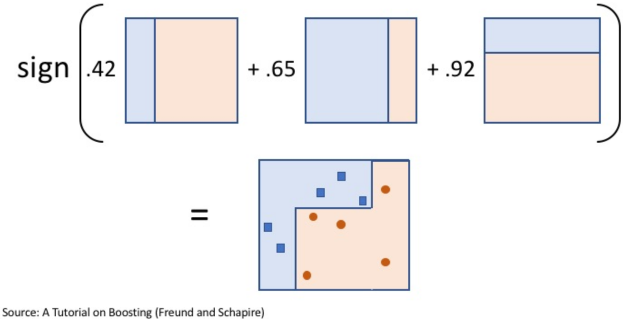


Figure 8 – Classifieur final.

Gradient Boosting [6, 7]

Gradient Boosting

Variante : version additive pas-à-pas

- $X = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{N}$ un ensemble de données où $y_i \in \{-1, 1\}$
- H un ensemble de classifieurs $f \mapsto -1, 1$, pas forcément performants → appelés *weak learners*

Objectif du gradient boosting :

- Construire itérativement un classifieur performant $F_T(x) = \sum_{t=1}^{T} \alpha_t f_t(x) = F_{T-1}(x) + \alpha_T f_T(x)$ où f_t est l'un des weak learners h.
- Il s'agit à chaque étape de minimiser le risque empirique : $\mathcal{L}(F_T) = \sum_{n=1}^{N} l(y_n, F_T(x_n))$ où l est un coût (*loss*)

Gradient Boosting

Coûts

- Adaboost → gradient boost avec fonction de coût $l(y, f(x)) = \exp(-y.f(x))$
- Adaboost peut être vu comme la construction itérative d'un classifieur optimal par minimisation du risque empirique à chaque pas.
- Cadre plus général : d'autres pénalités sont possibles :
  - LogitBoost : $l(y, f(x)) = \log_2(1 + \exp[-2y.f(x)])$
  - L_2 Boost : $l(y, f(x)) = (y - f(x))^2/2$
  - DoomII : $l(y, f(x)) = 1 - \tanh(y.f(x))$
  - Savage : $l(y, f(x)) = \frac{1}{(1+\exp(2y.f(x)))^2}$
- DoomII et Savage sont non-convexes → plus robustes aux données bruitées

Gradient Boosting

Pourquoi *Gradient* Boosting ?

- Chaque étape minimise le risque empirique : $\mathcal{L}(F_T) = \sum_{n=1}^{N} l(y_n, F_T(x_n))$ où l est un coût (*loss*)
- Lors de la variante additive d'adaboost, $\alpha_T f_T(x)$ peut donc être vu comme le *weak learner* qui approxime le mieux le pas d'une descente de gradient dans l'espaces des fonctions de classification
- Une version exacte de la descente de gradient donne les Gradient Boosting Models : $F_T(x) = F_{T-1}(x) + \alpha_T \sum_{i=1}^{N} \nabla_{F_{T-1}} l(y_i, f_{T-1}(x_i))$

Boosting : Résumé

Points clés du boosting

- Agrégation adaptative de classifieurs moyens
- \+ Résultats théoriques sur la convergence et l'optimalité du classifieur final
- \+ Très efficace (améliore n'importe quel ensemble de classifieurs)
- \+ Assez facile à mettre en oeuvre (moins vrai pour Gradient Boosting)
- \- Sensibilité aux données aberrantes, surapprentissage

Utilisations

- Choix du *weak learner* : ne doit pas être trop bon, sinon surapprentissage
- Choix de la pénalité en fonction du bruit des données
- Variantes pour la classification et la régression

Conclusion

Cours n°2 : Arbres de décision et méthodes ensemblistes

Notions phares du jour

- Arbres de décision (vote, homogénéité)
- Aggrégation de classifieurs
- Bagging, Random Forests
- Boosting, GradientBoost

Concepts généraux

- Classification / régression
- Bagging et randomisation (Forêts aléatoires)
- Construction adaptative à partir de *weak learners* et optimisation dans l'espace des classifieurs (Boosting)

Références I

[1] Leo Breiman.
Bagging predictors.
Machine learning, 24(2) :123–140, 1996.

[2] Leo Breiman.
Random forests.
Machine learning, 45(1) :5–32, 2001.

[3] Leo Breiman, Jerome H Friedman, Richard A Olshen, and Charles J Stone.
Classification and regression trees.
Routledge, 2017.

[4] Tianqi Chen and Carlos Guestrin.
Xgboost : A scalable tree boosting system.
In *Proceedings of the 22nd acm sigkdd international conference on knowledge discovery and data mining*, pages 785–794, 2016.

[5] Yoav Freund and Robert E Schapire.
A decision-theoretic generalization of on-line learning and an application to boosting.
Journal of computer and system sciences, 55(1) :119–139, 1997.

[6] Jerome H Friedman.
Greedy function approximation : a gradient boosting machine.
Annals of statistics, pages 1189–1232, 2001.

[7] Jerome H Friedman.
Stochastic gradient boosting.
Computational statistics & data analysis, 38(4) :367–378, 2002.

[8] Donald Geman and Bruno Jedynak.
Model-based classification trees.
IEEE Transactions on Information Theory, 47(3) :1075–1082, 2001.

Références II

[9] Trevor Hastie, Robert Tibshirani, and Jerome Friedman.
The elements of statistical learning.
Springer, 2009.

[10] Hyafil Laurent and Ronald L Rivest.
Constructing optimal binary decision trees is np-complete.
Information processing letters, 5(1) :15–17, 1976.