Quelques notions d'apprentissage non supervisé

M1 MA

2020

Plan du chapitre

Plan

Références pour ce chapitre

- James, G., Witten, D. Hastie, T. et Tibshirani, R. (2013). *An introduction to Statistical Learning*, Springer Texts in Statistics, Chapitre 10.
- Husson, F., Lê, S. et Pages, J. (2016). *Analyse de données avec R*, Presses Universitaires de Rennes, Chapitre 4.
- Voir aussi la page web de François Husson : `http://math.agrocampus-ouest.fr/infoglueDeliverLive/membres/Francois.Husson/enseignement`.

Apprentissage supervisé/non supervisé (I)

Rappels du premier cours

Apprentissage supervisé : on observe $\{(X_i, Y_i), i = 1, ..., n\}$ où Y_i est la variable d'intérêt et X_i est un vecteur de covariables. On cherche à comprendre la relation entre X_i et Y_i de façon (par exemple) à prédire la variable d'intérêt connaissant la covariable. Cela regroupe (entre autres) les problèmes de

Régression : $Y_i \in \mathbb{R}$ pour tout i.

Classification binaire : $Y_i \in \{0, 1\}$ pour tout i.

Classification multi-label : $Y_i \in \{1, ..., K\}$ pour tout i avec $K \geq 3$.

Apprentissage supervisé/non supervisé (II)

Rappels du premier cours

Apprentissage non supervisé : on observe seulement $X_1, ..., X_n$.

Objectif

Explorer les données : chercher à comprendre leur répartition/ leur loi.

Apprentissage supervisé/non supervisé (II)

Rappels du premier cours

Apprentissage non supervisé : on observe seulement $X_1, ..., X_n$.

Objectif

Explorer les données : chercher à comprendre leur répartition/ leur loi.

Difficultés

- Pas de critère pour vérifier la validité d'une méthode.
- Pas de validation croisée pour calibrer les paramètres d'une méthodes ou comparer les méthodes entre elles.

Apprentissage non supervisé : exemple de méthodes

Estimation de la densité f des X_i : $X_i \sim_{i.i.d} f$

- sans hypothèse sur f (cours de statistique non-paramétrique)
- avec hypothèse sur f, par exemple densité de la loi gaussienne ou densité mélange.

Apprentissage non supervisé : exemple de méthodes

Estimation de la densité f des X_i : $X_i \sim_{i.i.d} f$

- sans hypothèse sur f (cours de statistique non-paramétrique)
- avec hypothèse sur f, par exemple densité de la loi gaussienne ou densité mélange.

Analyse en composantes principales (cours de traitement des données)

Apprentissage non supervisé : exemple de méthodes

Estimation de la densité f des X_i : $X_i \sim_{i.i.d} f$

- sans hypothèse sur f (cours de statistique non-paramétrique)
- avec hypothèse sur f, par exemple densité de la loi gaussienne ou densité mélange.

Analyse en composantes principales (cours de traitement des données)

Classification non supervisée (*clustering* en anglais) : k-moyennes, classification hiérarchique,...

Apprentissage non supervisé : exemple de méthodes

Estimation de la densité f des X_i : $X_i \sim_{i.i.d} f$

- sans hypothèse sur f (cours de statistique non-paramétrique)
- avec hypothèse sur f, par exemple densité de la loi gaussienne ou densité mélange.

Analyse en composantes principales (cours de traitement des données)

Classification non supervisée (*clustering* en anglais) : k-moyennes, classification hiérarchique,...

Classification non supervisée

Objectif

Effectuer un regroupement en k ($k << n$) groupes de manière à rassembler dans chaque groupe les individus "les plus semblables" selon un critère à définir (en général assimilé à une distance).

Exemples d'application

Marketing : création de profils clients permettant de cibler les offres promotionnelles suivant certains critères.

Médias : création de profils utilisateurs permettant de personnaliser une page web.

Economie : création de profils pays suivant différents critères tels que

- les échanges économiques,
- le taux d'armement,
- le niveau d'éducation,
- ...

...

Classification automatique : objectifs et méthodes

- **Méthode générale** : Classification des n individus en k classes telles que :
  - l'homogénéité soit maximale à l'intérieur de chaque classe,
  - l'hétérogénéité soit maximale d'une classe a l'autre.

- **Remarque** : les classes et le nombre k de classes sont inconnus.

Classification = partition ?

- On construit des classes disjointes.
- Si tout individu est classé, on aboutit à la notion de partition : tout individu appartient à une classe et une seule.
- Les éléments d'une même classe sont équivalents et donc indiscernables. Il suffit alors d'utiliser un représentant pour chaque classe (par exemple le point moyen) dans la suite des traitements.

Qualité d'une partition : inertie inter et inertie intra

- n individus dans k groupes $I_1, \ldots, I_k$,
- $\bar{x}$: isobarycentre des n individus, $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$,
- n_j : effectif du groupe I_j,
- C_j : isobarycentre du groupe I_j, $C_j = \frac{1}{n_j} \sum_{i \in I_j} x_i$.
- **Inertie intra-classe** : Somme des inerties des points du groupe I_j au barycentre C_j.

$$\mathcal{I}_{intra} = \mathcal{I}_{intra}(I_1, ..., I_k) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{k} \sum_{i \in I_j} \|x_i - C_j\|^2.$$

- **Inertie inter-classe** : Inertie des barycentres C_j au barycentre $\bar{x}$.

$$\mathcal{I}_{inter} = \mathcal{I}_{inter}(I_1, ..., I_k) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{k} n_j \|C_j - \bar{x}\|^2.$$

Qualité d'une partition : inertie totale

- **Inertie totale** : Inertie des n points au barycentre $\bar{x}$.

$$\mathcal{I}_G = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \|x_i - \bar{x}\|^2.$$

- **Relation de Huygens** : L'inertie totale est la somme des inerties intra et inter classes.

$$\mathcal{I}_G = \mathcal{I}_{intra} + \mathcal{I}_{inter}.$$

Qualité d'une partition : mesure

- Qualité d'une partition :

$$\frac{\mathcal{I}_{inter}}{\mathcal{I}_G}.$$

- Dépend du nombre d'individus et du nombre de classes.
- 2 cas extrêmes :
  - $k = n$: $\mathcal{I}_{intra}(\{1\}, ..., \{n\}) = 0$ et $\mathcal{I}_{inter}(\{1\}, ..., \{n\}) = \mathcal{I}_G$.
  - $k = 1$: $\mathcal{I}_{intra}(\{1, ..., n\}) = \mathcal{I}_G$ et $\mathcal{I}_{inter}(\{1, ..., n\}) = 0$.

Qualité d'une partition [1]

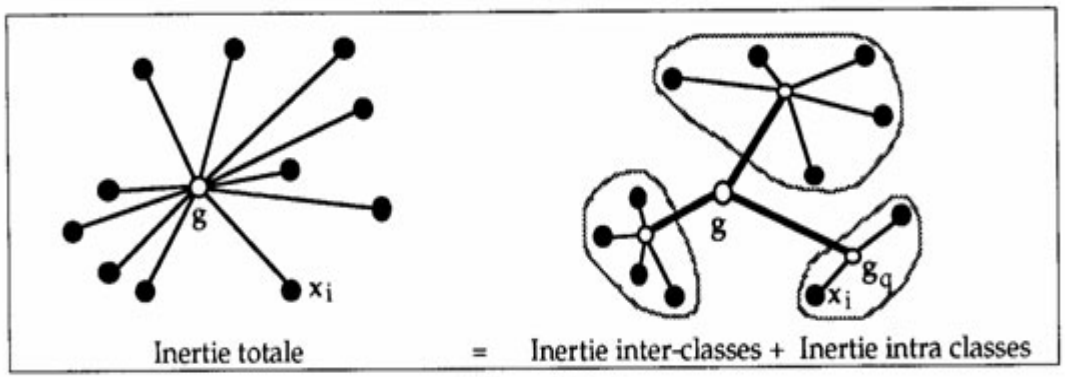


Figure 2.2 - 9
Décomposition de l'inertie selon la relation de Huygens

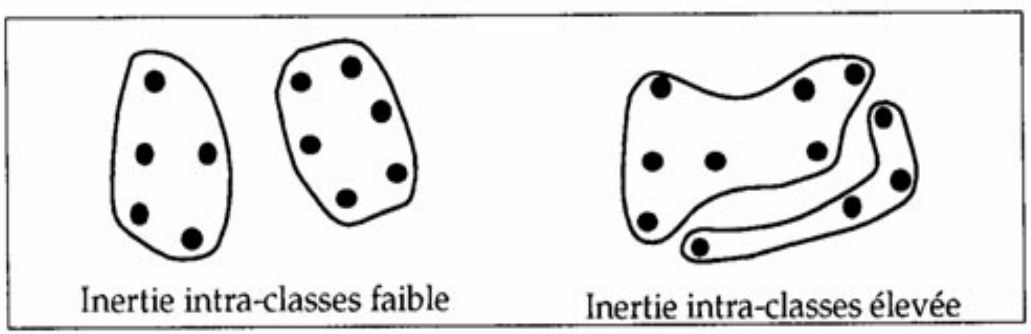
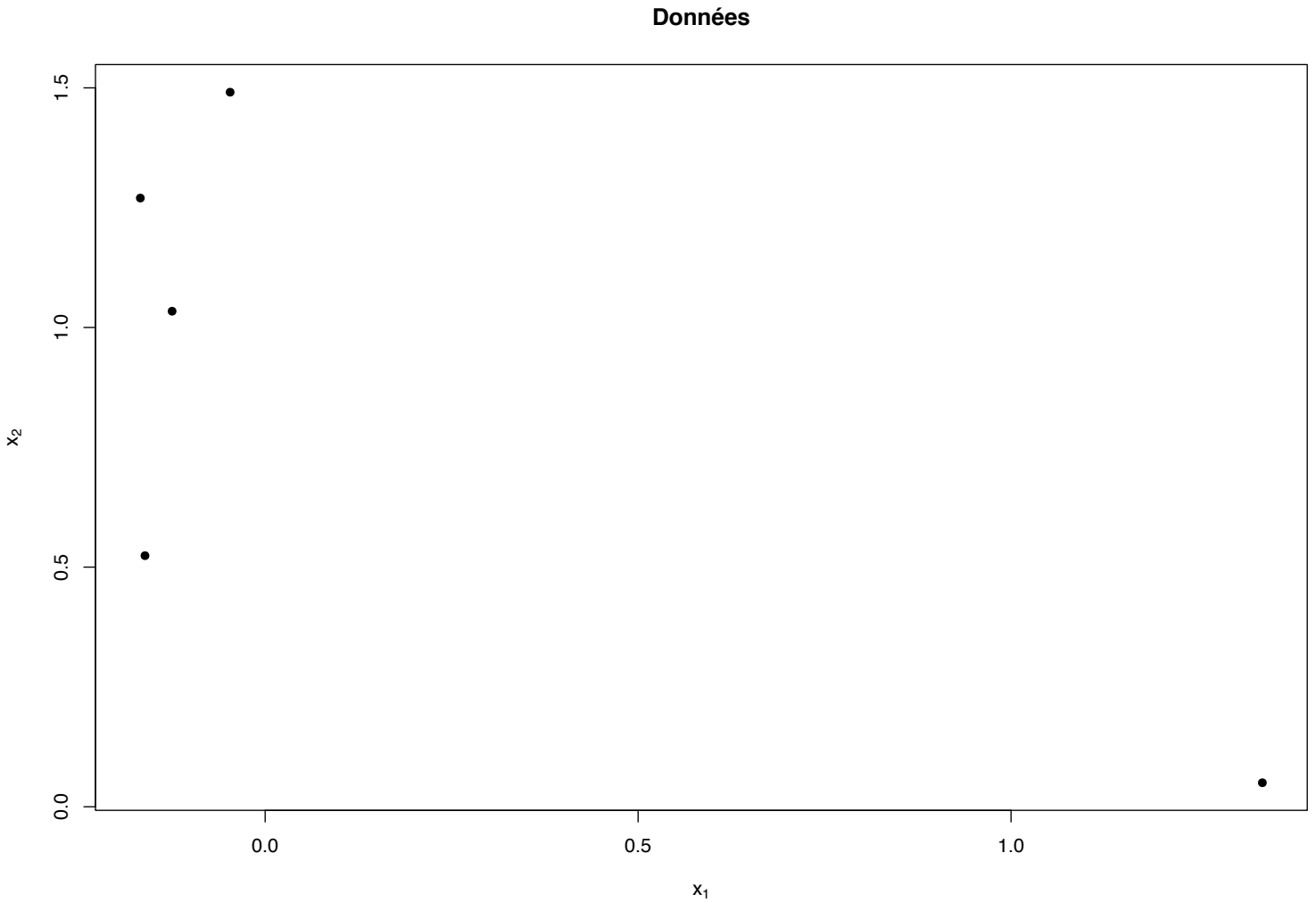


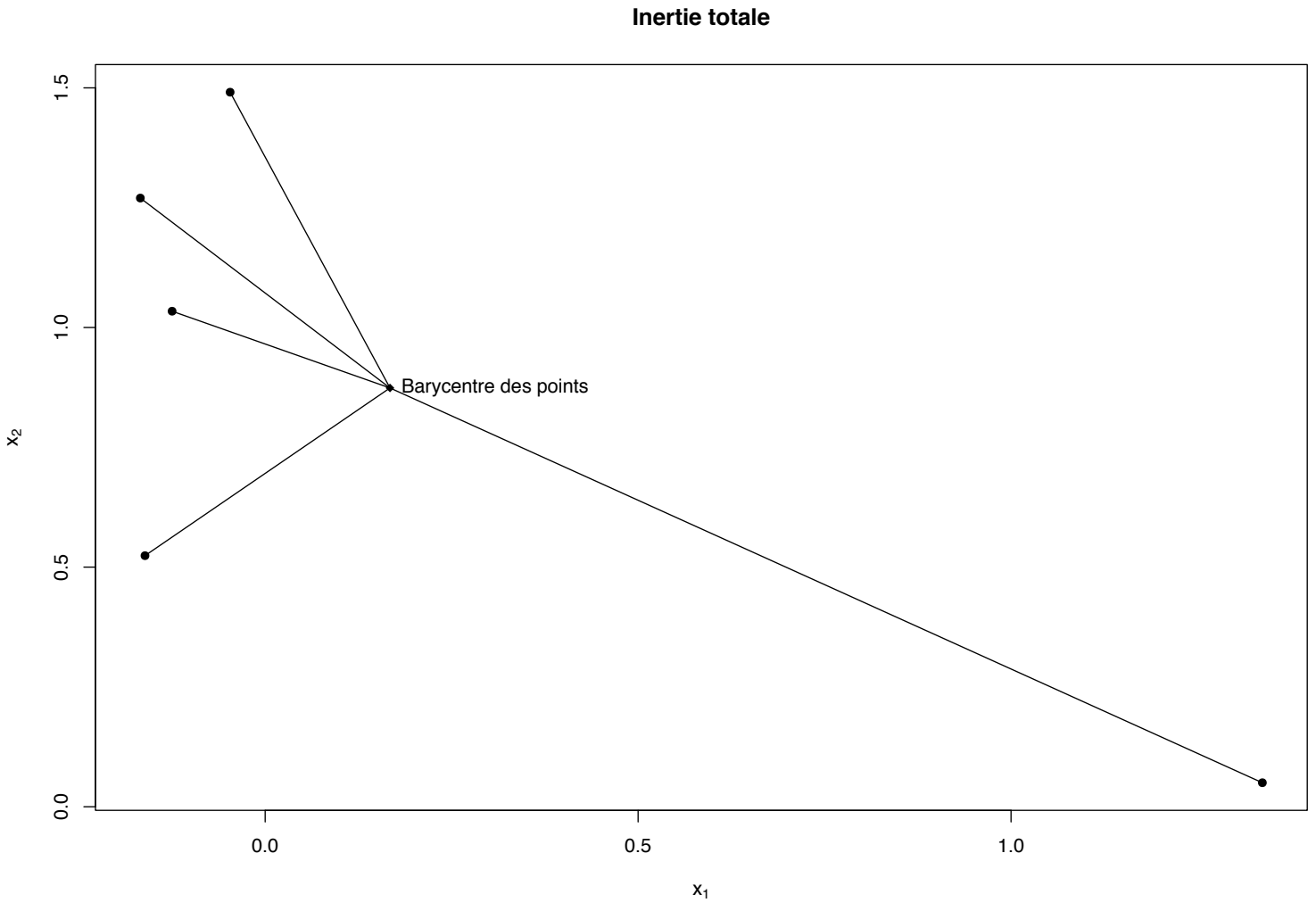
Figure 2.2 - 10
Qualité globale d'une partition

1. Illustrations du livre de Lebart, Morineau et Piron, *Statistique exploratoire multidimensionnelle*

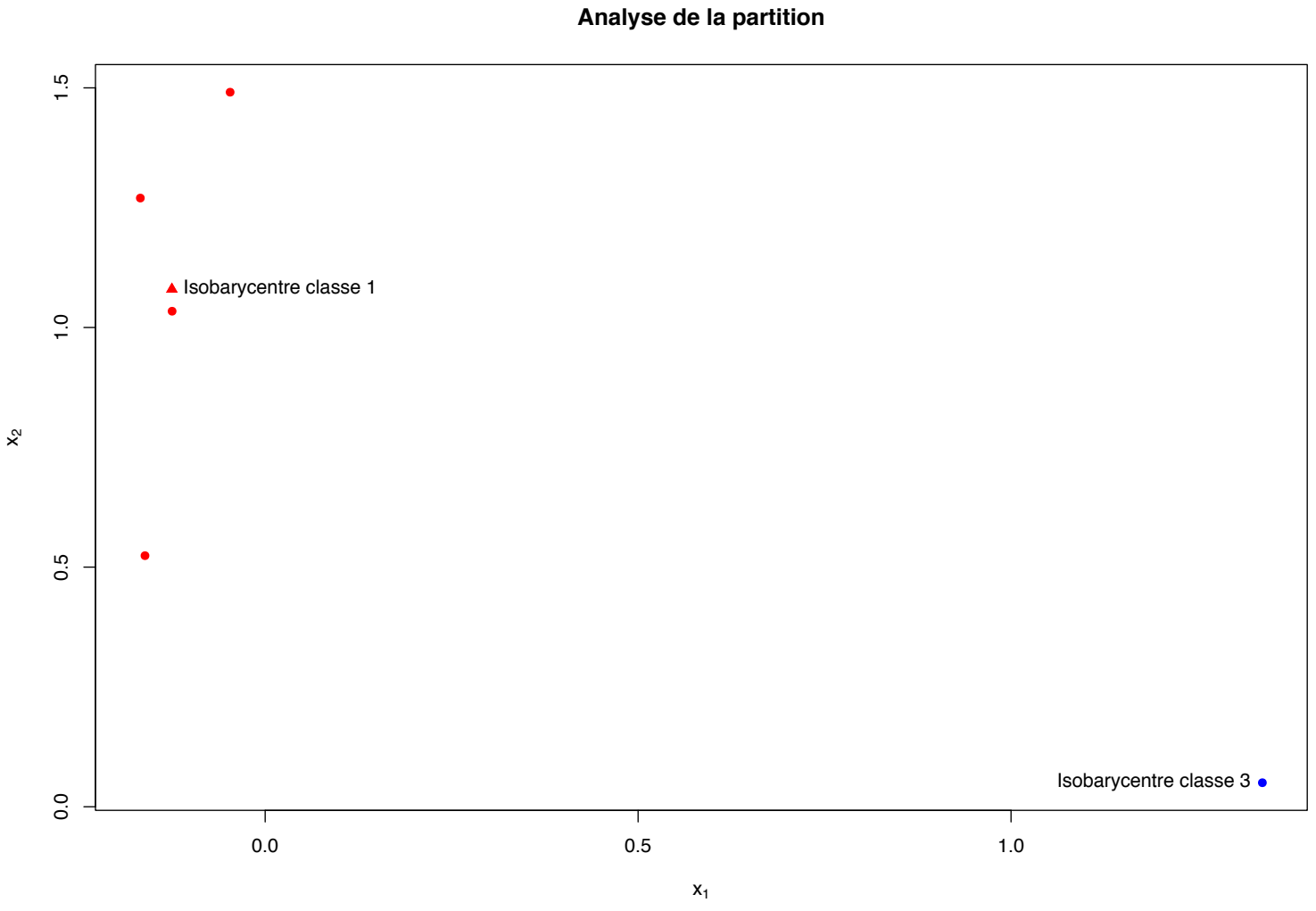
Exemple $n = 5$



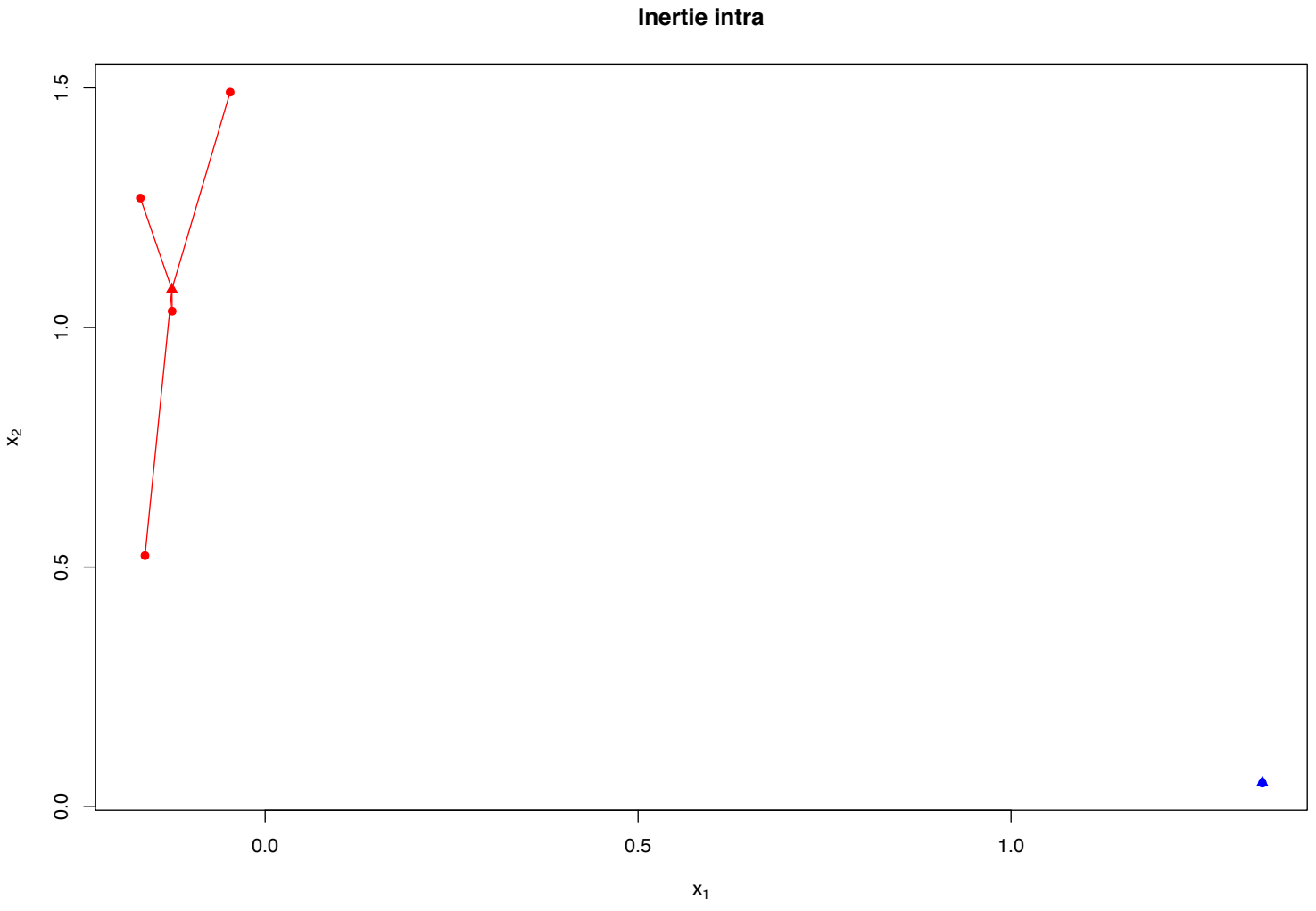
Exemple $n = 5$


Inertie totale
Barycentre des points
1.5
1.0
0.5
0.0
x_2
0.0
0.5
1.0
x_1

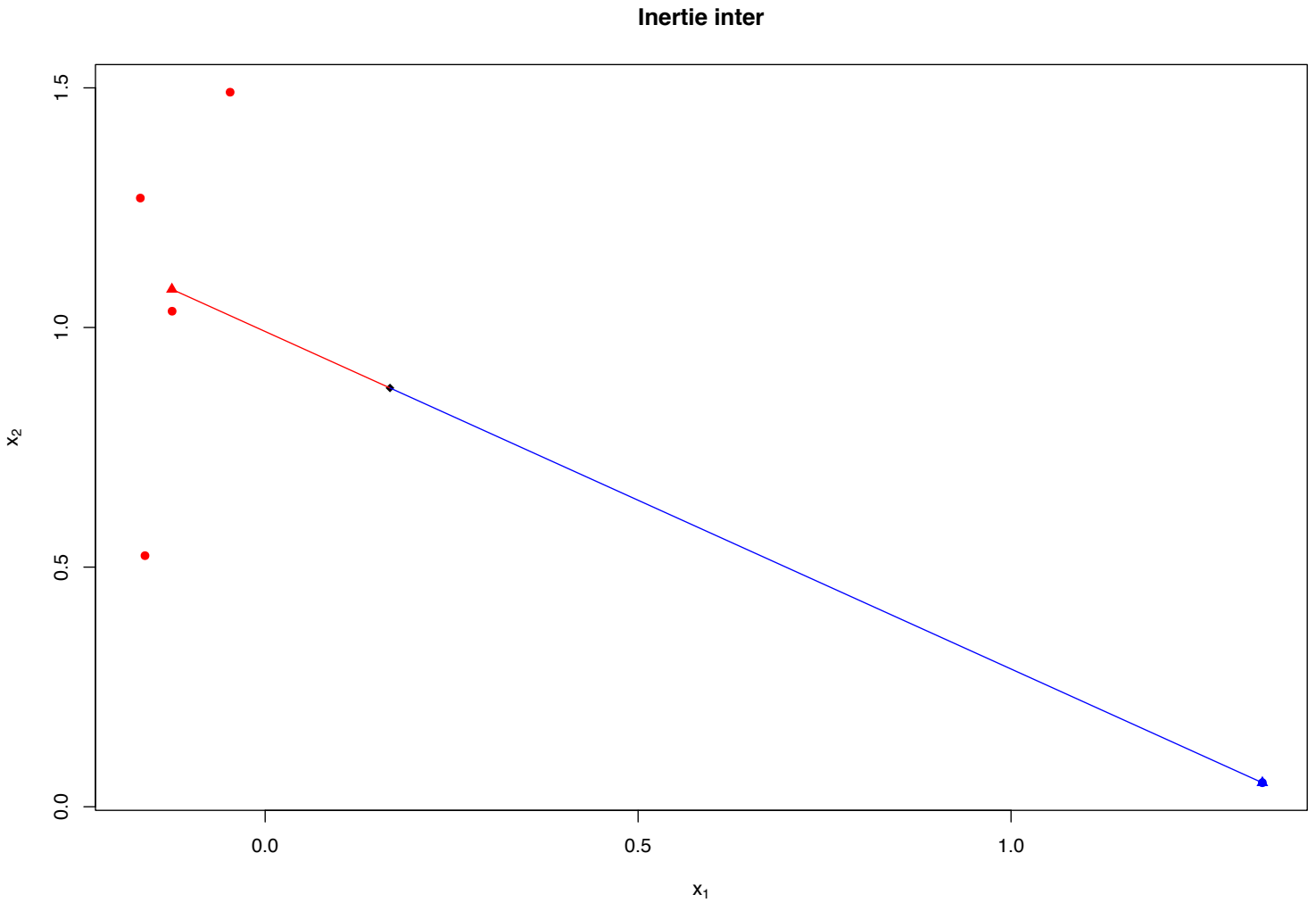
Exemple $n = 5$


Analyse de la partition
Isobarycentre classe 1
Isobarycentre classe 3
1.5
1.0
0.5
0.0
0.0
0.5
1.0
x_2
x_1

Exemple $n = 5$



Exemple $n = 5$



Partitions optimales

Idée naïve : Rechercher la (ou une partition) maximisant l'inertie inter-classes $\mathcal{I}_{inter}$.
Problème : examen de toutes les partitions possibles en k classes d'un ensemble à n éléments.

Nombre de partitions possible (nombre de Stirling)

$$S(n,k) = \frac{1}{k!}\sum_{j=0}^{k}(-1)^{k-j}\binom{k}{j}j^n \quad \text{(résultat admis).}$$

Cas $k = 2$:

$$S(n,2) = 2^{n-1} - 1.$$

n	2	3	4	5	200	300	400	500
$S(n,2)$	1	3	7	15	$8{,}03.10^{59}$	$1{,}02.10^{90}$	$1{,}29.10^{120}$	$1{,}64.10^{150}$

Il faudrait donc au moins 10^{42} ans à un ordinateur de bureau pour calculer toutes les partitions à 2 éléments d'un ensemble à 200 éléments.

Plan

Références

- Algorithme dû principalement à Forgy (1965) : E. Forgy, *Cluster analysis of multivariate data : Efficiency versus interpretability of classification*, Biometrics, 21 :768 :780, 1965
- Prémisses ou variantes : Thorndike (1953), *k-means* MacQueen (1967), Ball & Hall (1967)
- Généralisation marquante : *Algorithme des nuées dynamiques* proposé par Diday (1971)
- Adapté aux **grands ensembles de données** :
  - traitement séquentiel possible
  - ne requiert pas le calcul d'une matrice $n \times n$ de distances entre individus

Algorithme

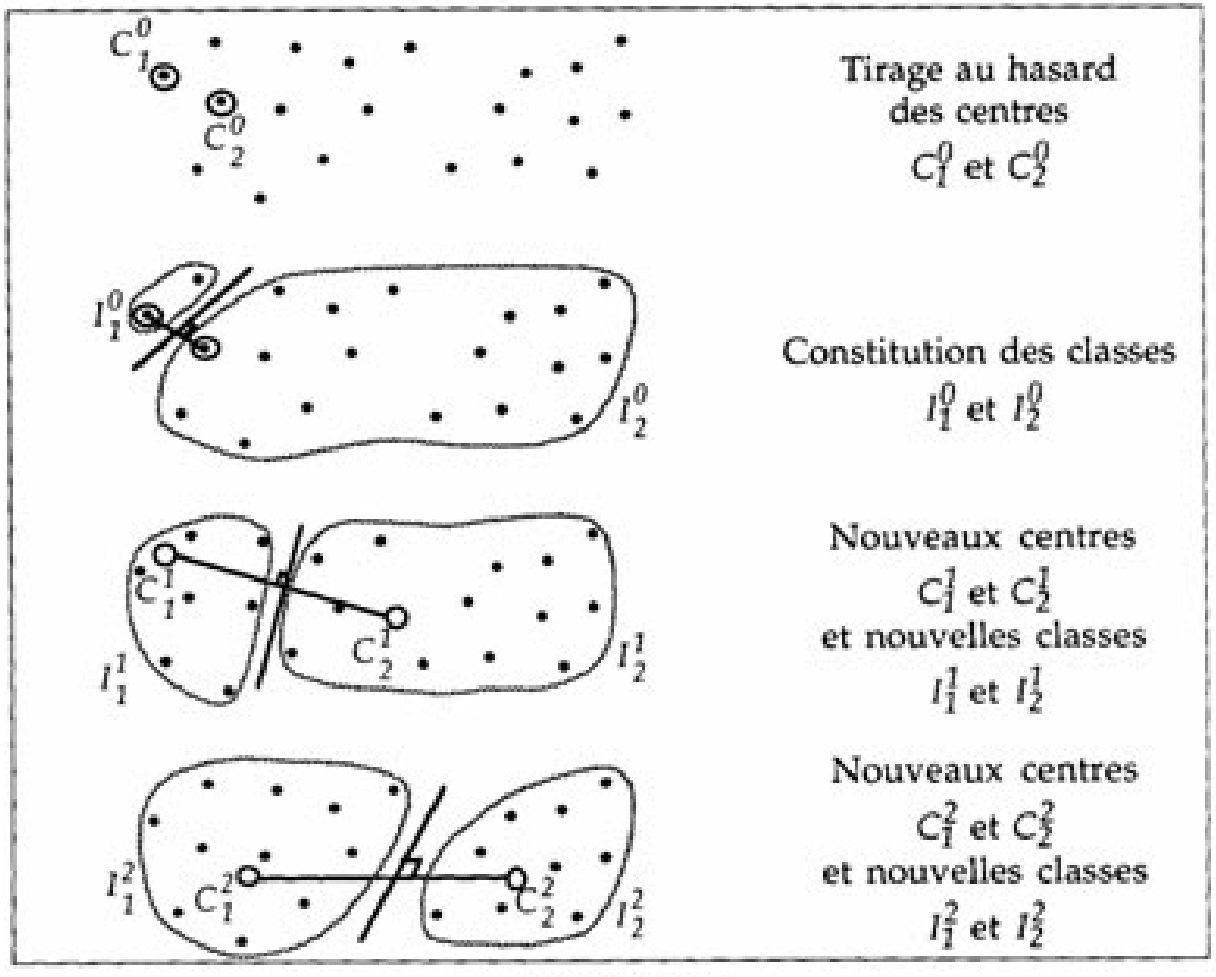


Figure 2.1 - 1
Etapes de l'algorithme

Description de l'algorithme

- On souhaite regrouper $X_1, ..., X_n$ en k classes (k choisi au préalable par l'utilisateur).
- **Etape** ℓ :
  - $\left\{C_1^{(\ell)}, \ldots, C_k^{(\ell)}\right\}$ isobarycentres des k classes $\left\{I_1^{(\ell-1)}, \ldots, I_k^{(\ell-1)}\right\}$ construites à l'étape $\ell - 1$ (à l'étape 1 les centres sont tirés aléatoirement sans remise parmi $\{X_1, ..., X_n\}$) .
  - k nouvelles classes $\{I_1^{(\ell)}, \ldots, I_k^{(\ell)}\}$ créees en regroupant les données les plus proches de chaque centre.
- **Fin de l'algorithme** : l'algorithme converge vers une partition stable. Arrêt lorsque la partition reste la même, ou lorsque la variance intra-classes ne décroît plus, ou encore lorsque le nombre maximal d'itérations est atteint.

Décroissance de l'inertie intra-classe

Théorème

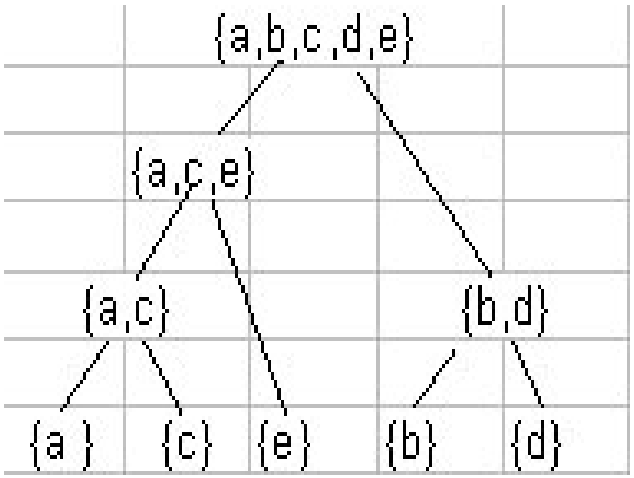
L'inertie intra-classe décroît ou reste stable à chaque itération de l'algorithme des k-moyennes :

$$\mathcal{I}_{intra}(I_1^{(\ell)}, \ldots, I_k^{(\ell)}) \geq \mathcal{I}_{intra}(I_1^{(\ell+1)}, \ldots, I_k^{(\ell+1)}).$$

Plan

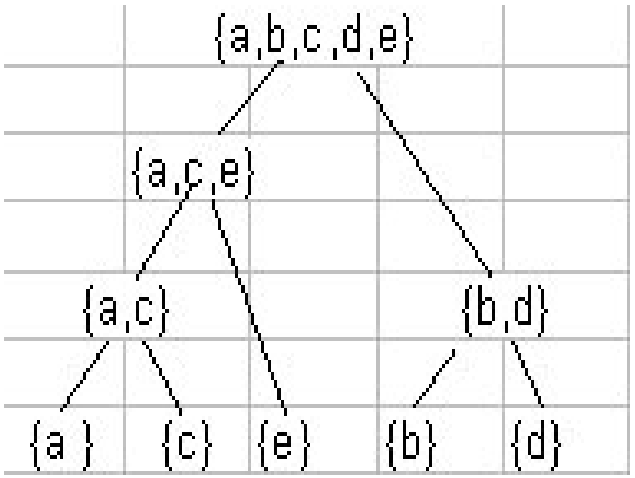
Hiérarchie de Parties

- Une *hiérarchie* de parties est un ensemble de parties "emboîtées".
- Cette représentation traduit la façon dont elles sont construites :
  - soit par réunion successive de parties (*ascendante*),
  - soit par division successive (*descendante*).
- La relation d'inclusion conduit à une représentation graphique du type :



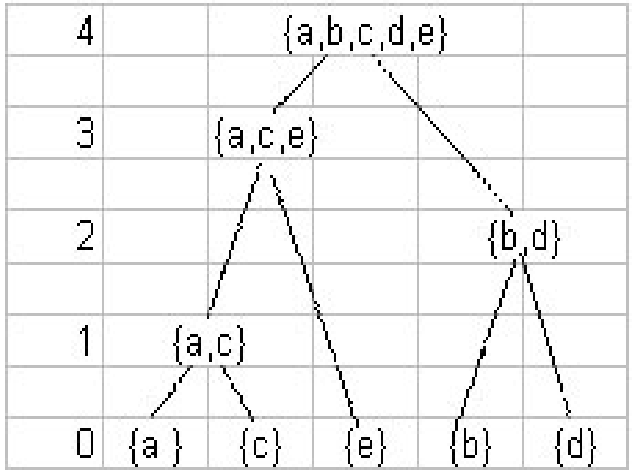
Représentation graphique

- L'ordre de formation traduit les différents niveaux de ressemblance entre les parties. On utilise donc cet ordre pour ordonner le graphique suivant l'axe vertical :



Représentation graphique (2)

- On peut aussi utiliser une quantification de la variabilité entre les parties, appelée souvent *indice de diamètre* :



- $\Longrightarrow$ *hiérarchie indicée*.
- Représentation graphique = *dendrogramme*.

Algorithme d'agrégation par critère de Ward

- **Principe général** : Au départ de l'algorithme, l'inertie inter classes est maximale (n classes). A la fin, celle-ci est nulle (1 classe).
  $\Rightarrow$ On cherche a minimiser à chaque étape la perte d'inertie inter-classes (ou à minimiser le gain d'inertie intra-classe).

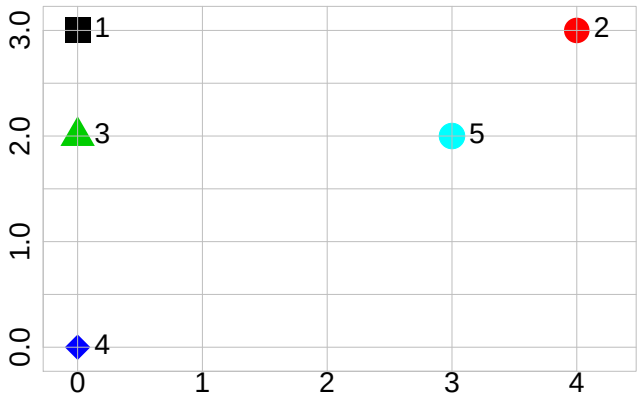
- **A chaque étape** : On regroupe les 2 classes pour lesquelles la perte d'inertie inter-classes est minimale. Cela revient à regrouper les classes j et j' pour lesquelles la perte

$$\Delta_{jj'} = \frac{n_j n_{j'}}{n_j + n_{j'}} \| C_j - C_{j'} \|^2$$

  est minimale.

Un exemple simple

- Cinq points dans un plan = 5 classes au départ de l'algorithme



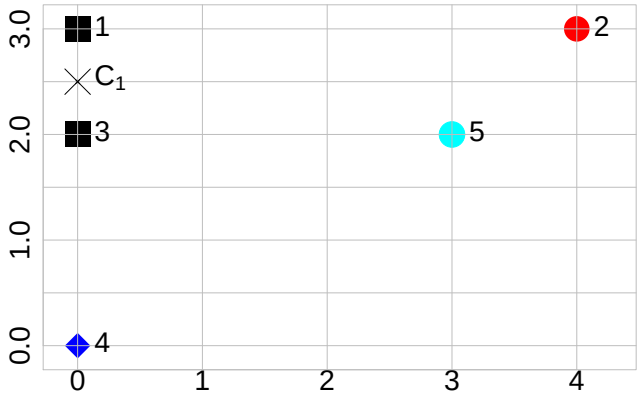
$$I_{intra} = 0$$

- Perte d'inertie inter-classes $(\times n) = \Delta_{j,j'}$:

Classes	{1}	{2}	{3}	{4}	{5}
{1}	0	8	**0.5**	4.5	5
{2}		0	8.5	12.5	1
{3}			0	2	4.5
{4}				0	6.5

- Regroupement 1 et 3 $\Rightarrow$ nouvelle classe $\{1, 3\}$.

Un exemple simple (2)



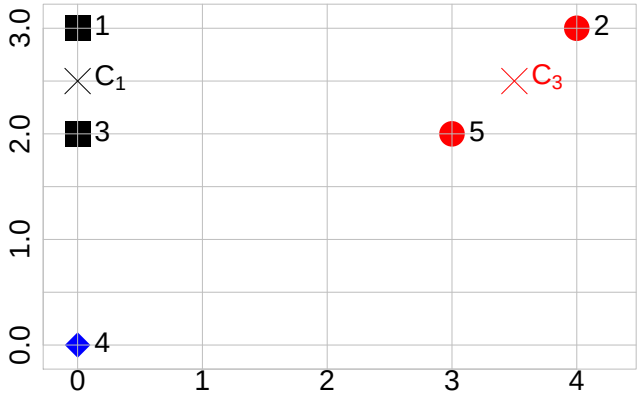
$$I_{intra} = n \times 0.5 = 2.5$$

- Perte d'inertie inter-classes $(\times n) = \Delta_{j,j'}$ (arrondi à 0.1) :

Classes	$\{1,3\}$	$\{2\}$	$\{4\}$	$\{5\}$
n° de classe (j)	1	2	3	4
$\{1,3\}$	0	10.8	4.2	6.3
$\{2\}$		0	12.5	**1**
$\{4\}$			0	6.5

- Regroupement 2 et 5 $\Rightarrow$ nouvelle classe $\{2,5\}$.

Un exemple simple (3)



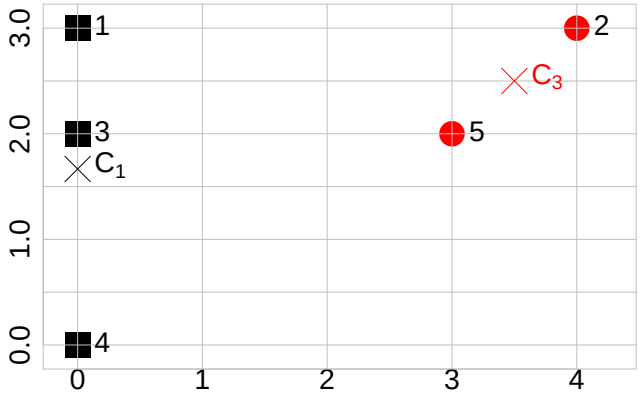
$$I_{intra} = 2.5 + 5 \times 1 = 7.5$$

- Perte d'inertie inter-classes $(\times n) = \Delta_{j,j'}$ (arrondi à 0.1) :

Classes	$\{1,3\}$	$\{2,5\}$	$\{4\}$
n° de classe (j)	1	2	3
$\{1,3\}$	0	12.3	**4.2**
$\{2,5\}$		0	21.7

- Regroupement $\{1,3\}$ et 4 $\Rightarrow$ nouvelle classe $\{1,3,4\}$.

Un exemple simple (4)



$$I_{intra} = 7.5 + 5 \times 4.2 = 28.5$$

- Dendrogramme

Choix du nombre de classes

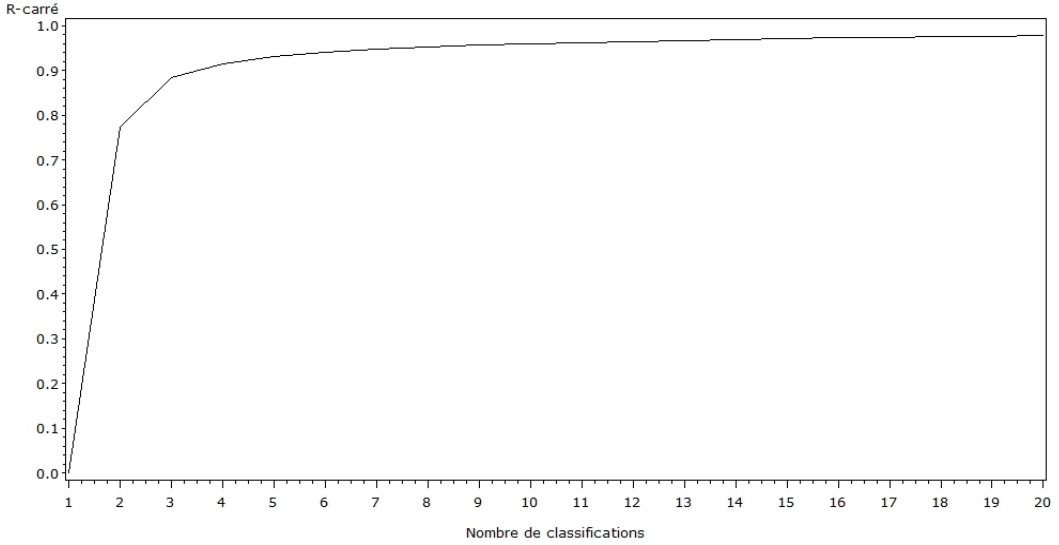
- *Coupure* de l'arbre à un niveau donné de l'indice $\Longrightarrow$ *partition*.
- La coupure doit se faire :
  - **après** les agrégations correspondant à des valeurs **peu élevées** de l'indice,
  - **avant** les agrégations correpondant à des niveaux **élevés** de l'indice, qui dissocient les groupes bien distincts dans la population.
- *Règle empirique* : sélection d'une coupure lors d'un saut important de l'indice par *inspection visuelle* de l'arbre.
- Ce saut traduit le passage brutal entre des classes d'une certaine homogénéité de l'ensemble à des classes beaucoup moins homogènes.
- Dans la plupart des cas, il y a *plusieurs paliers* et donc *plusieurs choix de partitions* possibles.

Choix du nombre de classes : R^2

Souvent, plusieurs choix de partitions possibles
$\Longrightarrow$ utilisation d'un critère numérique :

$$R^2(I_1, ..., I_k) \quad = \quad \frac{\mathcal{I}_{inter}(I_1, ..., I_k)}{\mathcal{I}_G}$$

Repérage du point k où il y a rupture de pente dans le R^2 :



Atouts et limites des méthodes

- **Atouts et limites de la CAH**
  - **Atout** :
    - Fournit à la fois les classes et leur nombre
  - **Limites** :
    - Souvent malaisé de choisir la coupure significative sur le dendrogramme
    - Partition non-optimale en raison de sa structure hiérarchique
    - Fort coût algorithmique lorsque n devient grand
- **Atouts et limites des centres mobiles**
  - **Atouts** :
    - Coût algorithmique faible
    - Traitement séquentiel
  - **Limites** :
    - Nombre de classes fixé a priori
    - Partition obtenue fortement dépendante des centres provisoires des classes
- **Idée** : Mixer les 2 méthodes (CAH et centres mobiles)

Classification mixte

- **Etape 1 : Partitionnement préliminaire (si n grand)**
  Partitionnement en q classes, avec $n >> q >> k$ le nombre de classes final désiré, en utilisant la méthode des centres mobiles ($q \simeq 10$ ou 100)
- **Etape 2 : Classification ascendante hiérarchique**
  CAH sur les q éléments (centres) obtenus à l'étape 1
- **Etape 3 : Optimisation**
  - Partition finale obtenue par coupure de l'arbre de la CAH
  - Homogénéité des classes optimisée par réaffectation par la technique des centres mobiles (consolidation)
- **Remarque** : Méthode qui peut être instable sur les échantillons de petite taille.

Plan

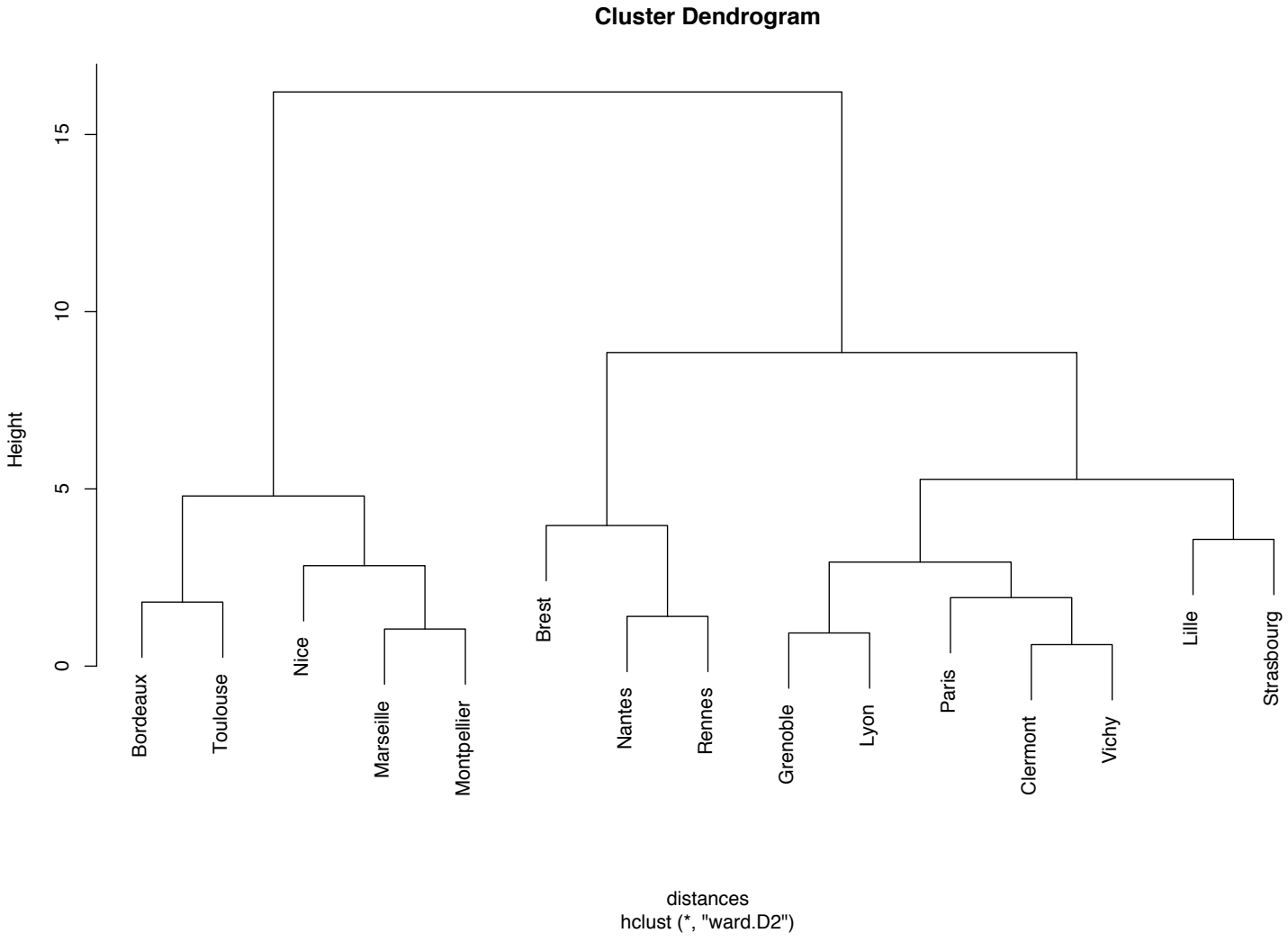
Présentation des données

	Janv	Fevr	Mars	Avril	Mai	Juin	Juil	Aout	...
Bordeaux	5.60	6.60	10.30	12.80	15.80	19.30	20.90	21.00	...
Brest	6.10	5.80	7.80	9.20	11.60	14.40	15.60	16.00	...
Clermont	2.60	3.70	7.50	10.30	13.80	17.30	19.40	19.10	...
Grenoble	1.50	3.20	7.70	10.60	14.50	17.80	20.10	19.50	...
Lille	2.40	2.90	6.00	8.90	12.40	15.30	17.10	17.10	...
Lyon	2.10	3.30	7.70	10.90	14.90	18.50	20.70	20.10	...
Marseille	5.50	6.60	10.00	13.00	16.80	20.80	23.30	22.80	...
Montpellier	5.60	6.70	9.90	12.80	16.20	20.10	22.70	22.30	...
Nantes	5.00	5.30	8.40	10.80	13.90	17.20	18.80	18.60	...
Nice	7.50	8.50	10.80	13.30	16.70	20.10	22.70	22.50	...
Paris	3.40	4.10	7.60	10.70	14.30	17.50	19.10	18.70	...
Rennes	4.80	5.30	7.90	10.10	13.10	16.20	17.90	17.80	...
Strasbourg	0.40	1.50	5.60	9.80	14.00	17.20	19.00	18.30	...
Toulouse	4.70	5.60	9.20	11.60	14.90	18.70	20.90	20.90	...
Vichy	2.40	3.40	7.10	9.90	13.60	17.10	19.30	18.80	...

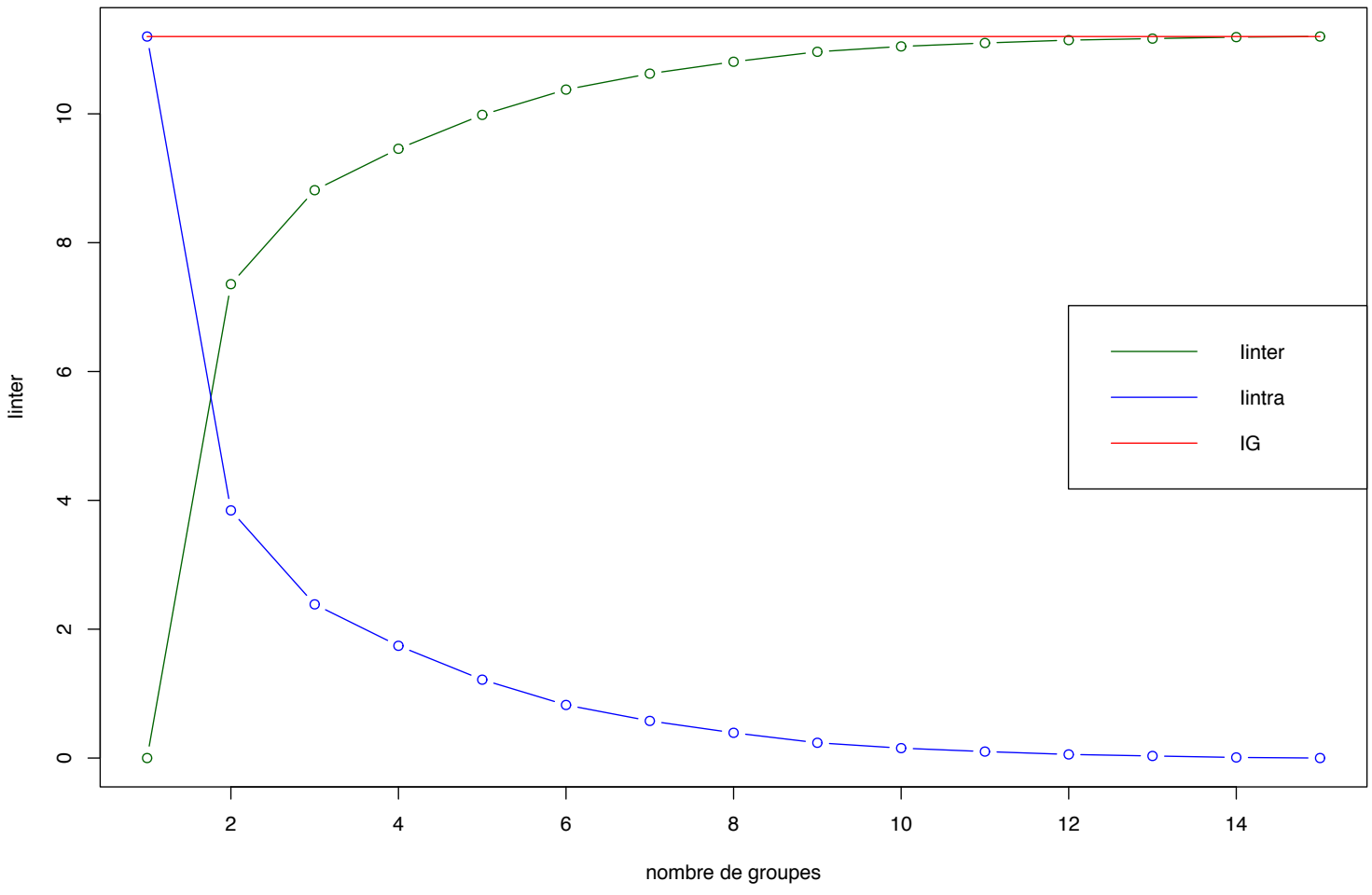
Températures mensuelles moyennes de 15 villes françaises.

CAH

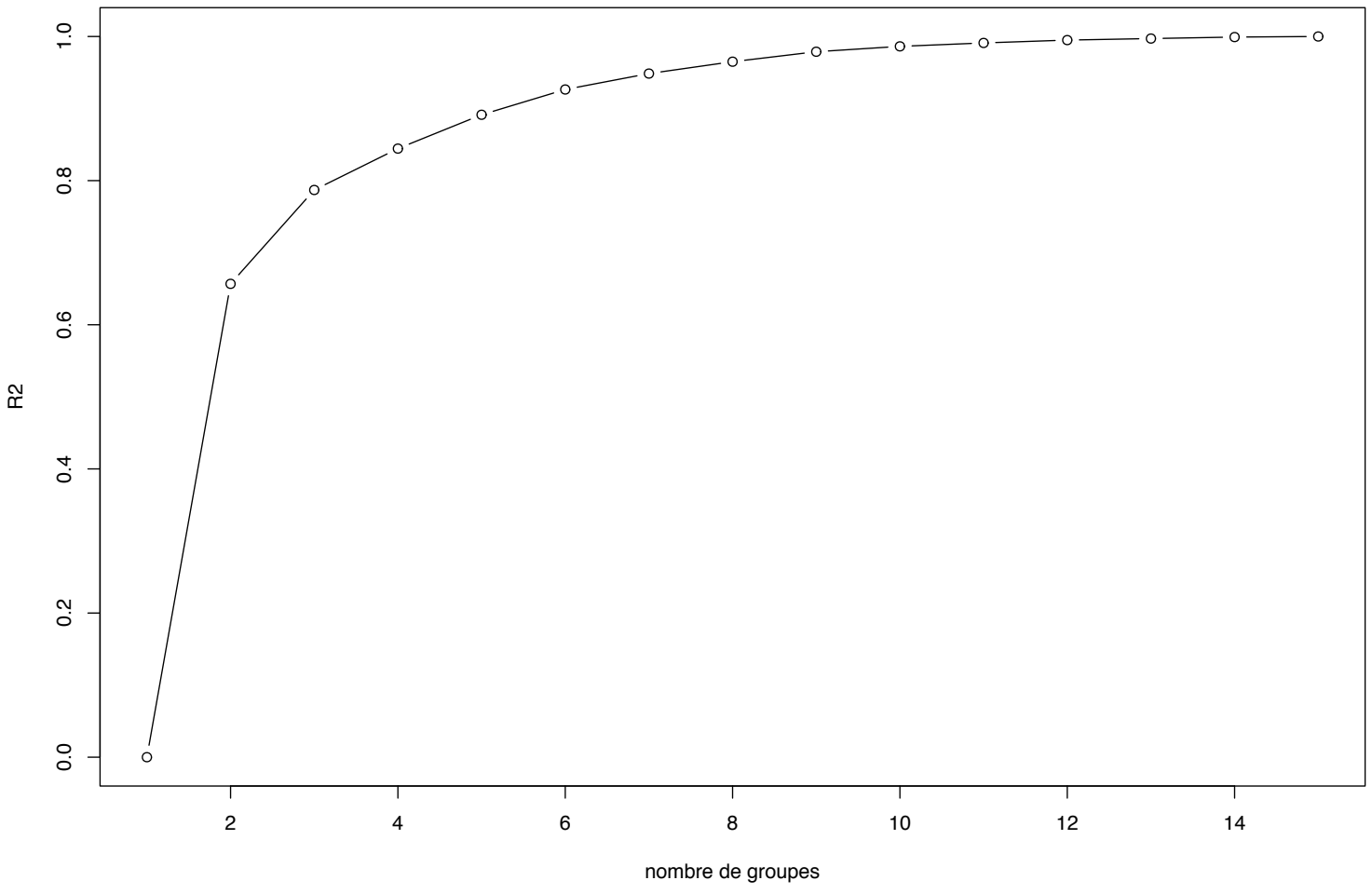
Dendrogramme obtenu par la CAH



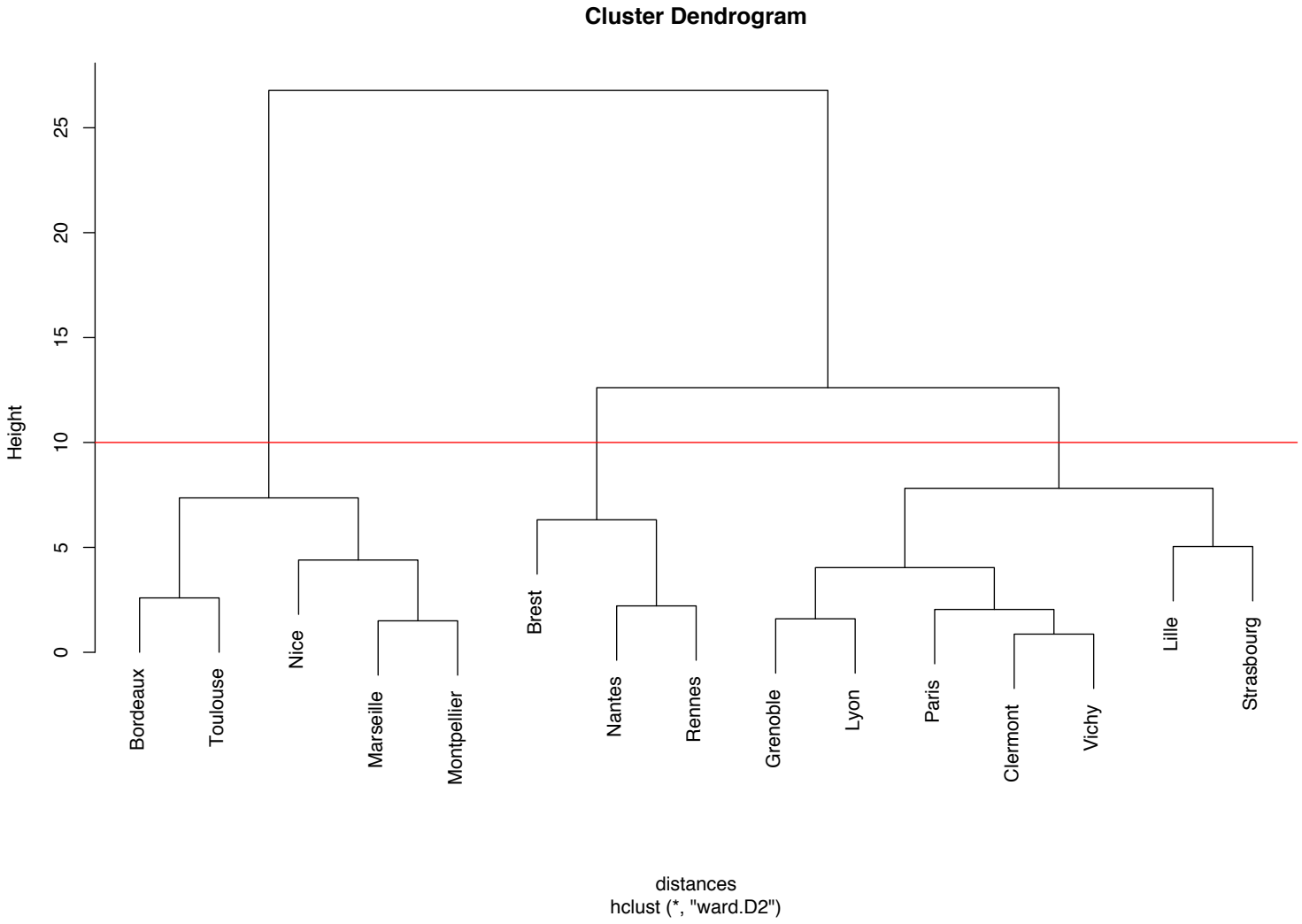
Evolution de l'inertie en fonction du nombre de groupes



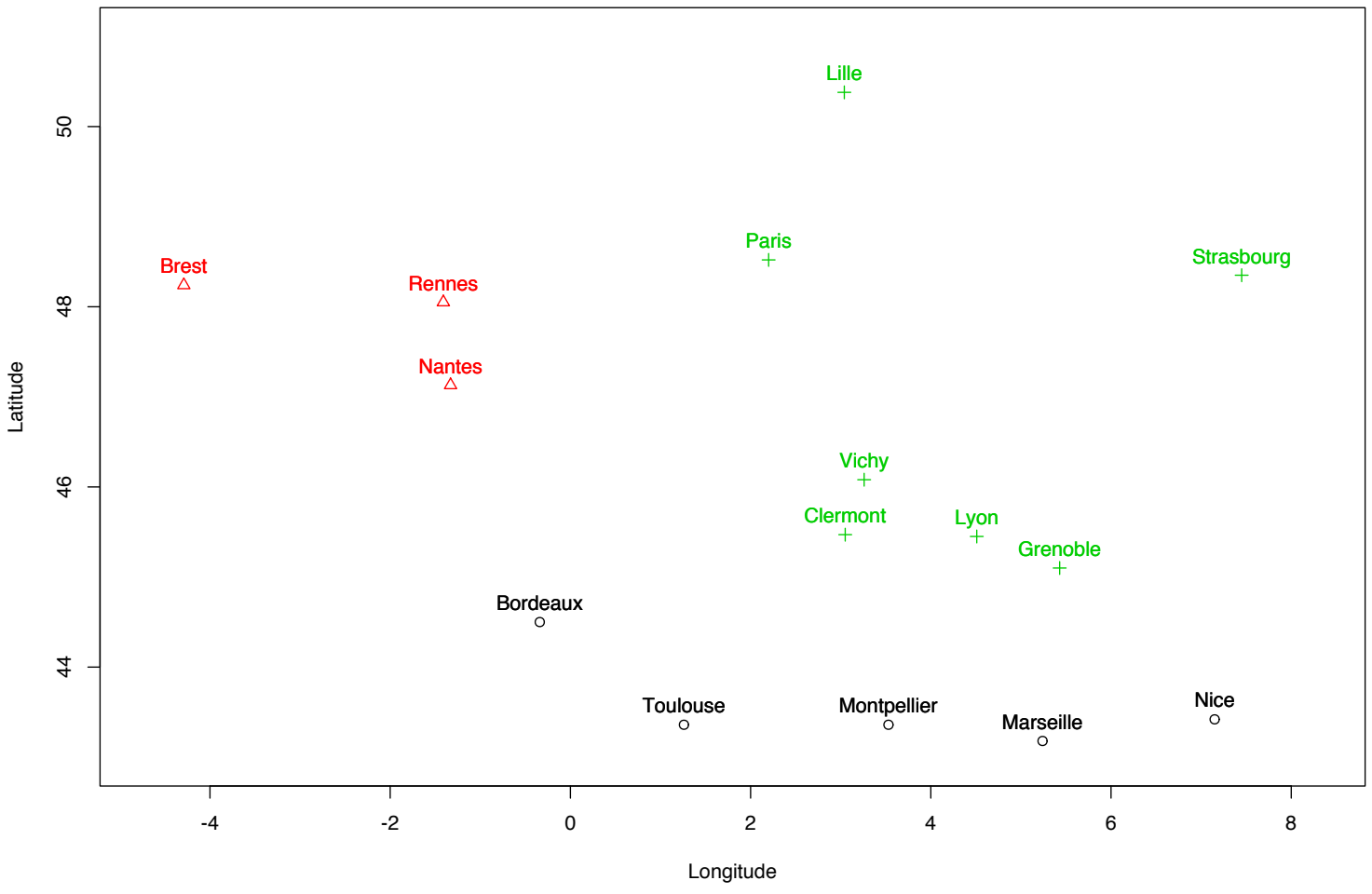
Evolution du critère $R^2(k)$



Dendrogramme

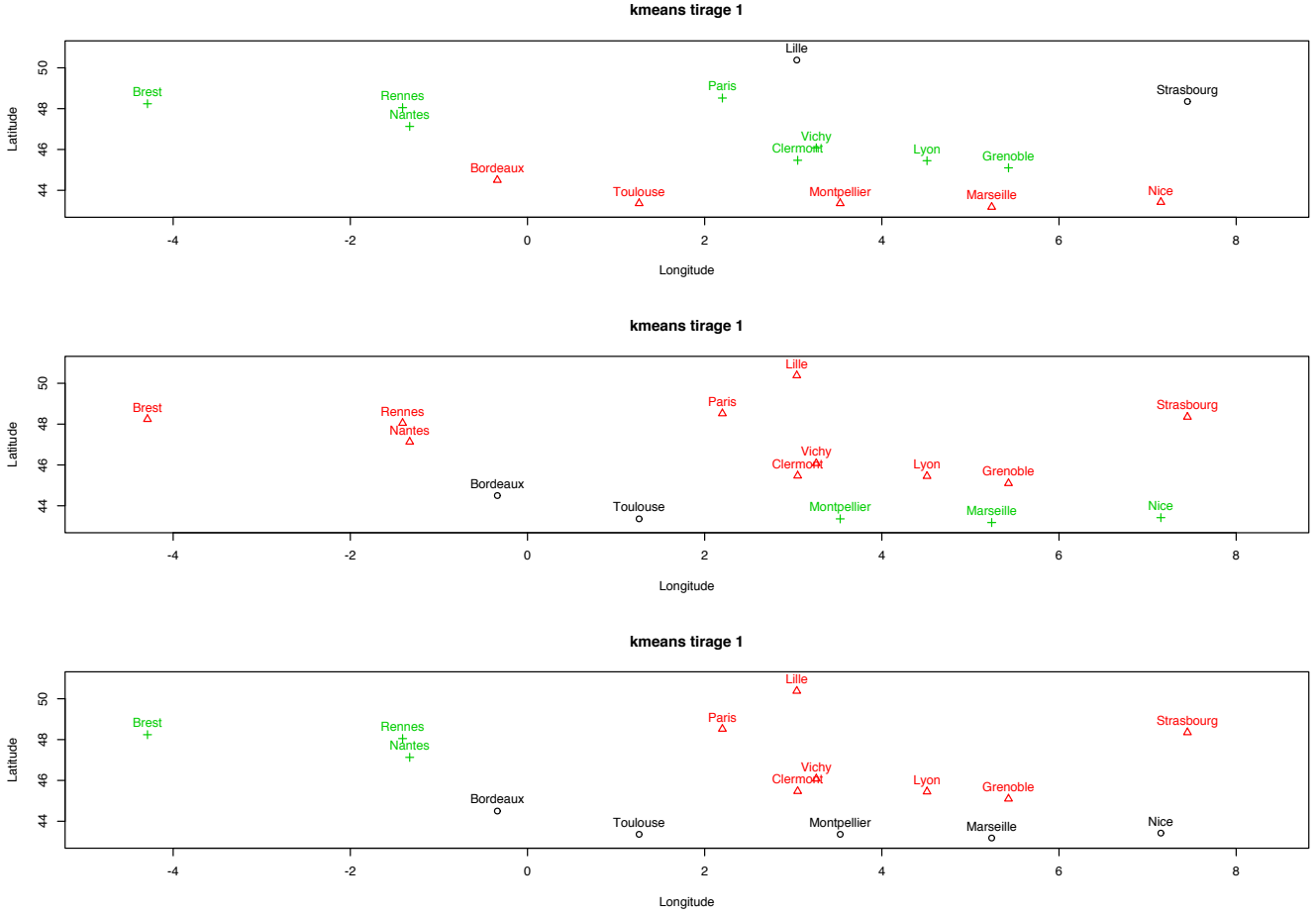


Représentation des clusters

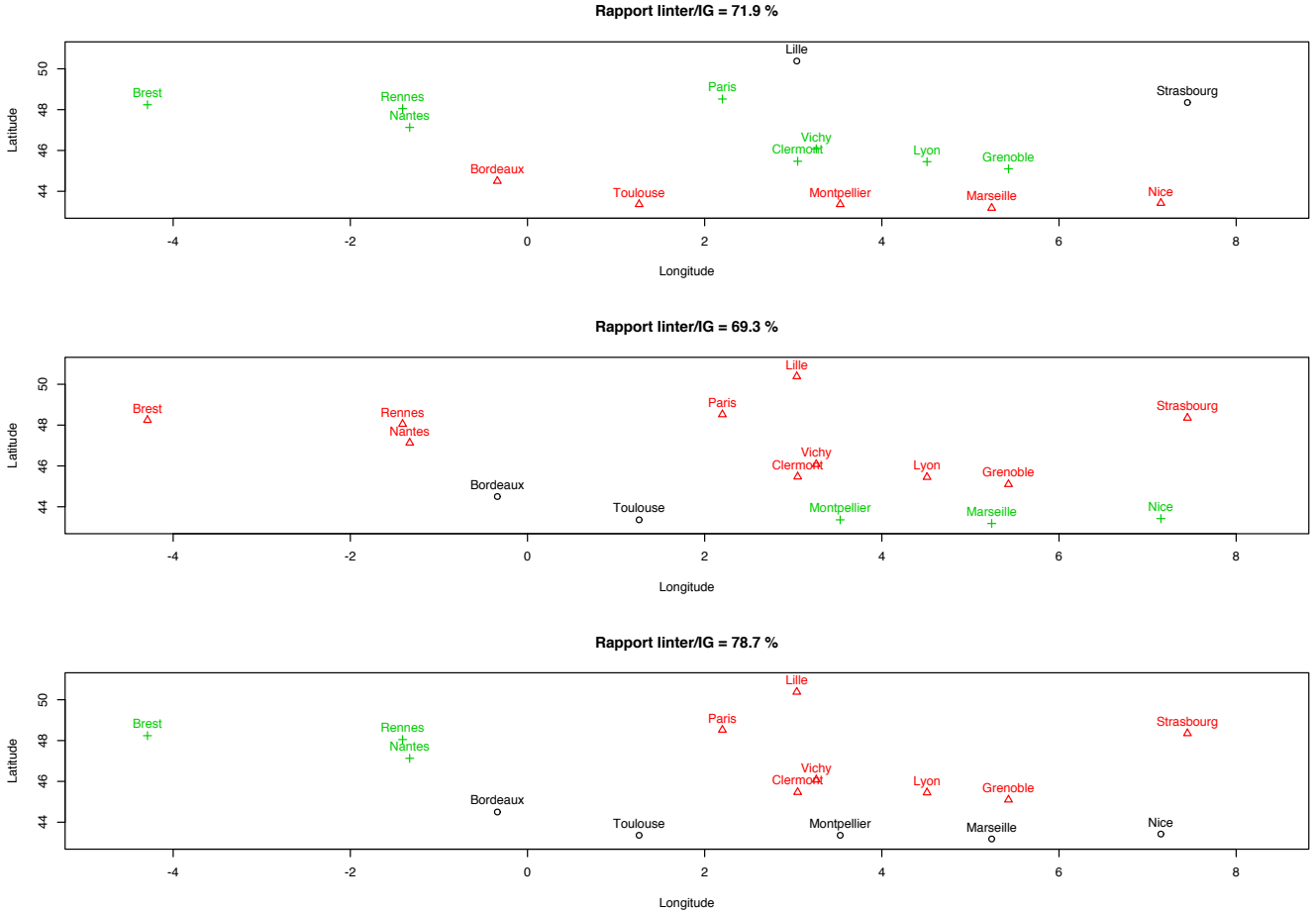


k-means

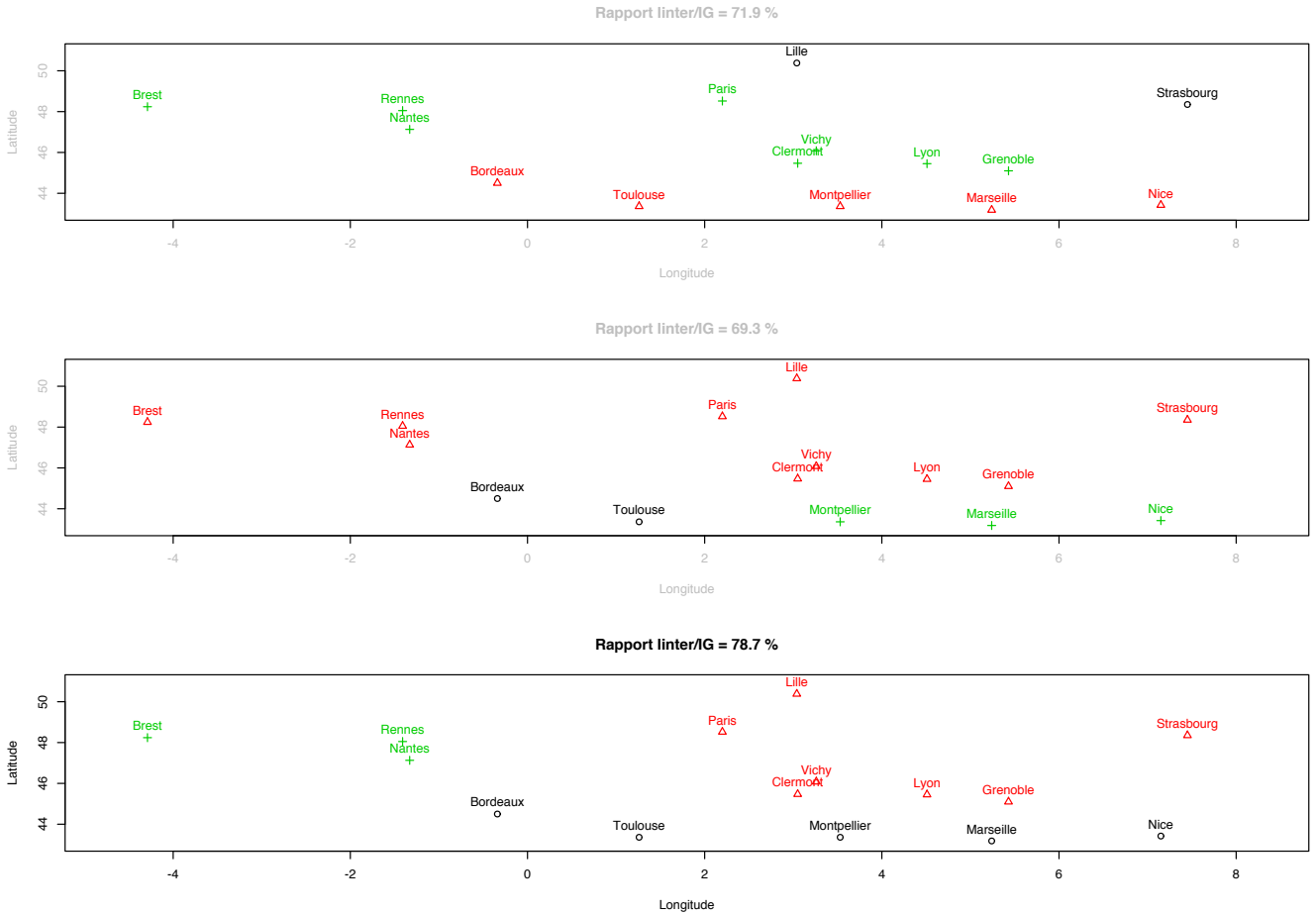
Classes obtenues par la méthode des k-moyennes avec $k = 3$



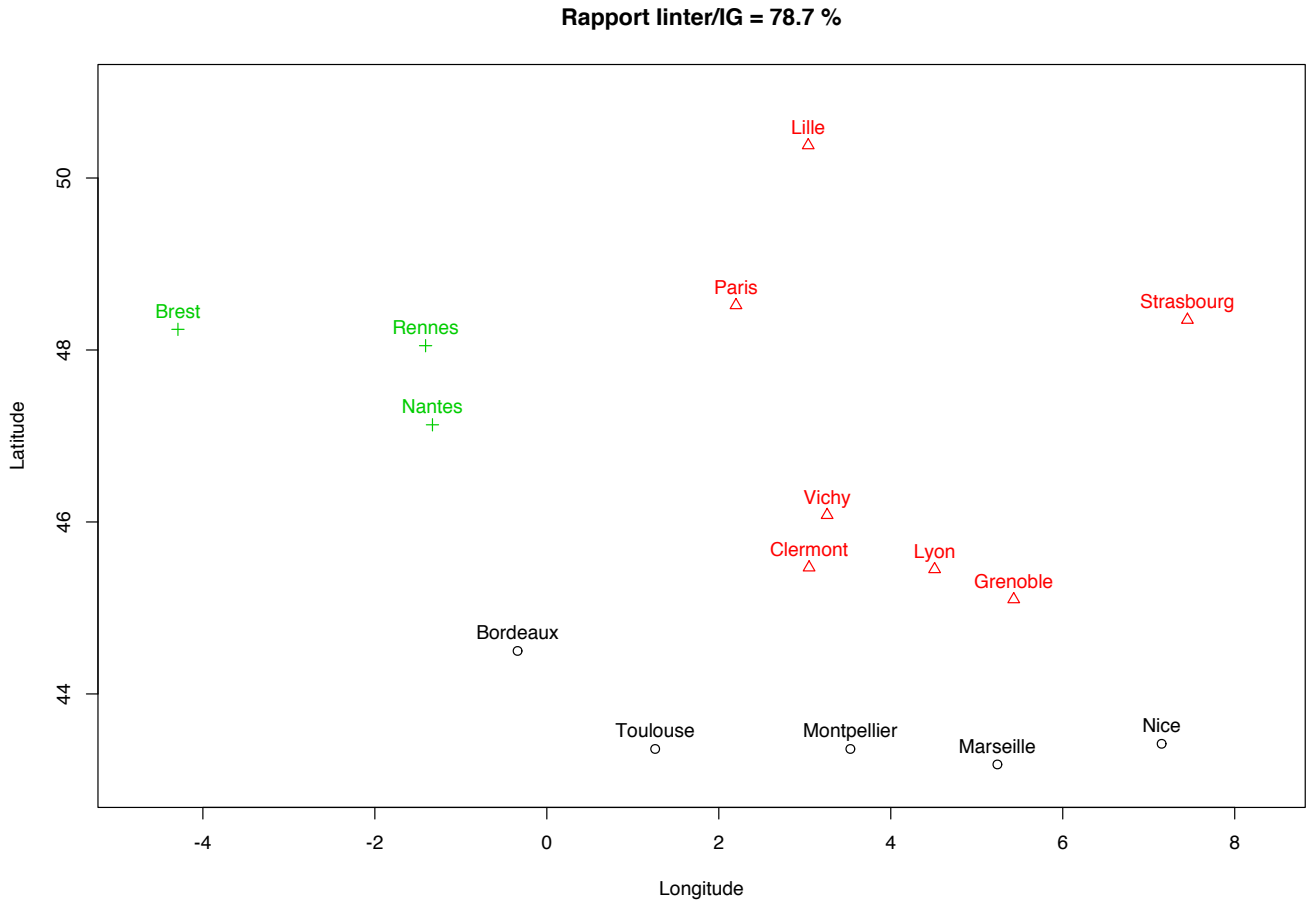
Classes obtenues par la méthode des k-moyennes avec $k = 3$



Classes obtenues par la méthode des k-moyennes avec $k = 3$



Partition finale



Analyse de la classification obtenue

Détection des variables liées à la classification (I)

On travaille variable par variable.

Test du rapport de corrélation

Liaison entre une variable quantitative (ici la température moyenne mensuelle, la longitude,...) x et une variable qualitative (la classe).
Soit

$$\hat{\eta}^2 = \frac{\text{Variance inter-groupe}}{\text{Variance totale}} = \frac{\sum_{j=1}^{k} n_j (C_j - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}$$

avec n_j effectif de la classe j, C_j moyenne de la variable dans la classe j.
On teste :
H_0 : les deux variables sont indépendantes contre H_1 : les deux variables sont dépendantes.
Sous H_0, $K = (n-k)\hat{\eta}^2/((k-1)(1-\hat{\eta}^2)) \sim \text{Fisher}(k-1, n-k)$.

Analyse de la classification obtenue

Détection des variables liées à la classification (II)

	Eta2	P-value
Moye	0.84	1.91e-05
Oct	0.84	1.93e-05
Sept	0.83	2.41e-05
Fevr	0.82	3.10e-05
Mars	0.81	4.33e-05
Janv	0.81	4.44e-05
Nov	0.81	4.96e-05
Avril	0.79	7.89e-05
Dec	0.79	9.32e-05
Aout	0.79	9.50e-05
Juin	0.72	4.41e-04
Mai	0.72	5.21e-04
Juil	0.72	5.29e-04
Ampl	0.65	1.95e-03
Lati	0.64	2.19e-03
Long	0.60	4.00e-03

Analyse de la classification obtenue

Moyenne des variables dans chaque classe

Classe 1 : Bordeaux, Marseille, Montpellier, Nice, Toulouse.

Classe 2 : Brest, Nantes, Rennes.

Classe 3 : Clermont, Grenoble, Lille, Lyon, Paris, Strasbourg, Vichy.

	Janv	Fevr	Mars	Avril	Mai	Juin	Juil	Aout	Sept	Oct	Nov	Dec
1	5.78	6.80	10.04	12.70	16.08	19.80	22.10	21.90	19.28	14.54	9.88	6.66
2	5.30	5.47	8.03	10.03	12.87	15.93	17.43	17.47	15.60	11.93	8.33	5.97
3	2.11	3.16	7.03	10.16	13.93	17.24	19.24	18.80	15.94	10.90	6.36	3.07

	Lati	Long	Moye	Ampl
1	43.56	3.37	13.79	16.34
2	47.81	-2.34	11.20	12.37
3	47.05	4.13	10.66	17.13

Quelques fonctions R

- Pour la CAH : fonction `hclust()` (voir `help(hclust)`).
- Pour les *k*-moyennes : fonction `kmeans()`.
- Pour l'analyse de la classification : fonction `catdes()` du package *FactoMineR* (voir `https://www.youtube.com/watch?v=N7GkrUYP1LM`).