Méthodes de Partionnement et d'apprentissage non supervisé

Classification Hiérarchique et Kmeans

Anne Badel, Frédéric Guyon & Jacques van Helden

2019-02-20

Partitionnement et apprentissage

- On a une **représentation** des données
  - sous forme de valeurs réelles=vecteur de
  - sous forme de catégories
- **Clustering**: on cherche a priori des groupes dans les données
- **Apprentissage**:
  - on connaît le partitionnement sur un jeu de données
  - on cherche le groupe (la classe) de nouvelles données

Partionnement = Clustering

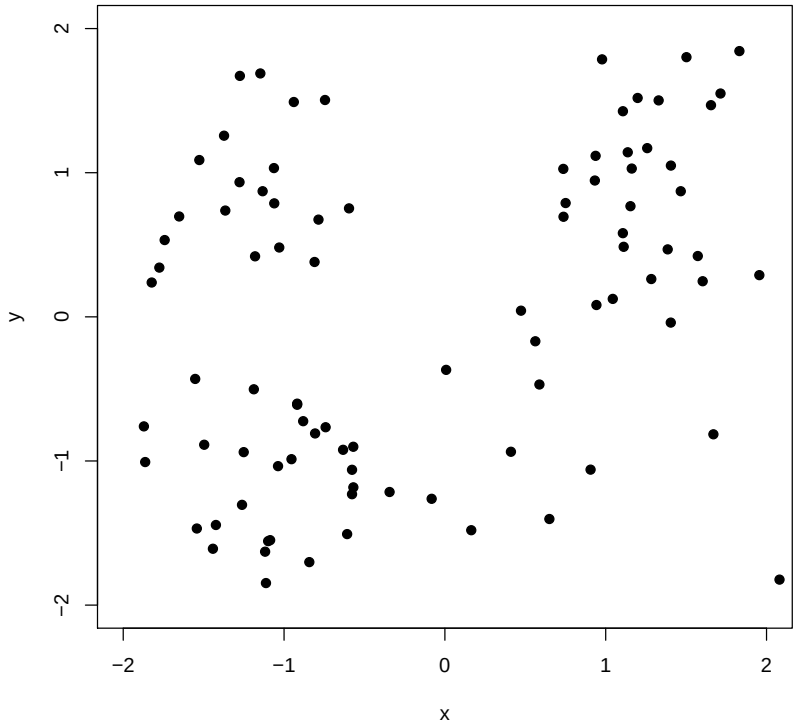


Figure 1: Y a-t-il des groupes ?

Partionnement = Clustering

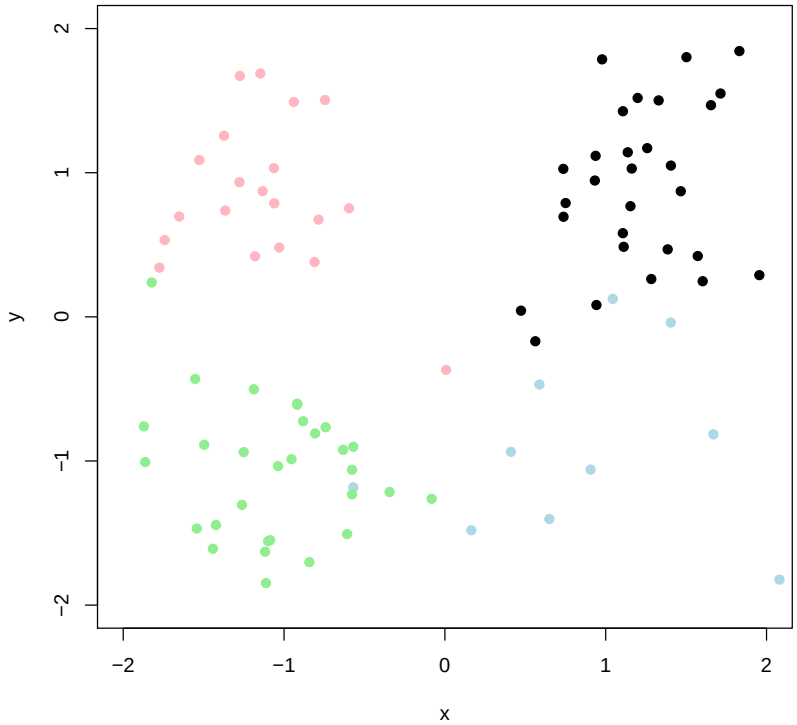


Figure 2: Oui, 4 groupes.

Apprentissage

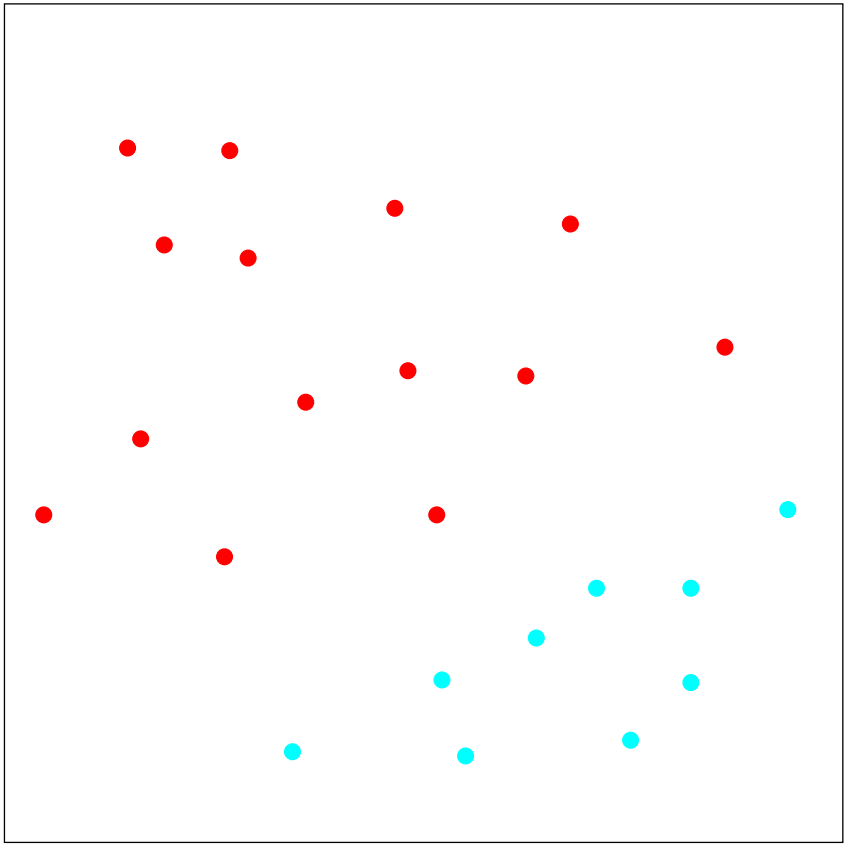


Figure 3: 2 groupes.

Apprentissage: Séparation linéaire

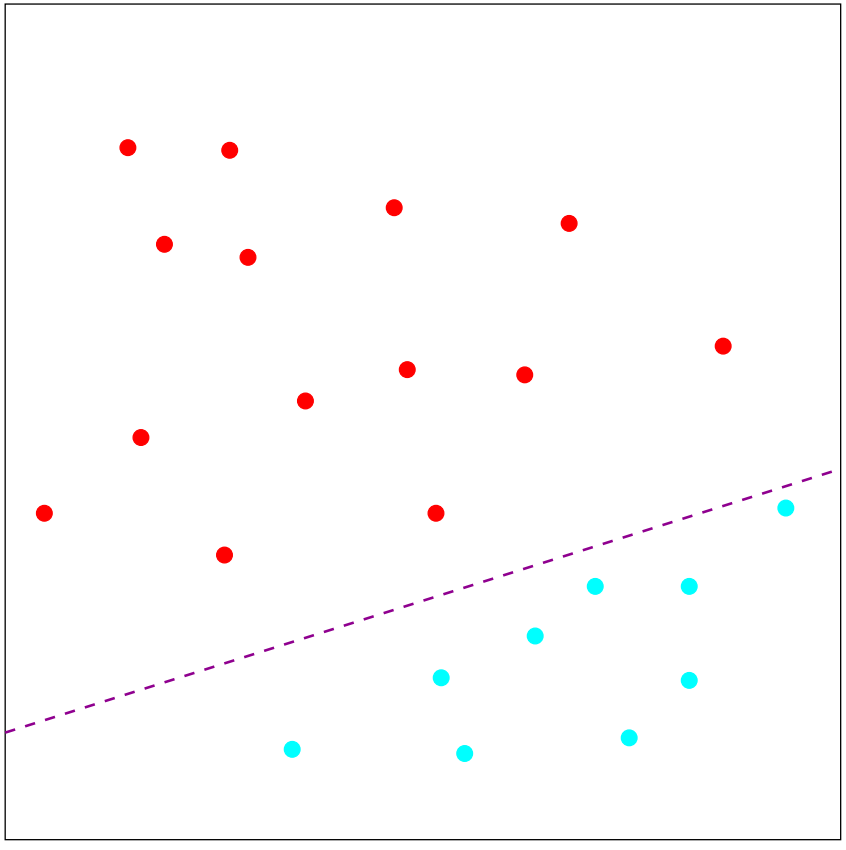


Figure 4: 2 groupes.

Méthodes

Trois grands principes de méthodes basées sur:

- La géométrie
- Les probabilités (statistique)
- Les graphes

En fait, trois façons de voir les mêmes algorithmes

Géométrie et distances

On considère les données comme des points de R^n (*)

- géométrie donnée par distances
- distances = dissimilaritées imposées par le problème
- dissimilarités $\longrightarrow$ permettent visualisation de l'ensemble des points
- Détermination visuelle des groupes

(*) Espace Euclidien à n dimensions, où

- chaque dimension représente une des variables observées;
- un individu est décrit comme un vecteur à n valeurs, qui correspond à un point dans cet espace.

Les données

Ces données sont un classique des méthodes d'apprentissage

Dans un premier temps, regardons les données.

```
dim(mes.iris)
```

```
[1] 150   4
```

```
head(mes.iris)
```

```
  Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
1          5.1         3.5          1.4         0.2
2          4.9         3.0          1.4         0.2
3          4.7         3.2          1.3         0.2
4          4.6         3.1          1.5         0.2
5          5.0         3.6          1.4         0.2
6          5.4         3.9          1.7         0.4
```

Les variables

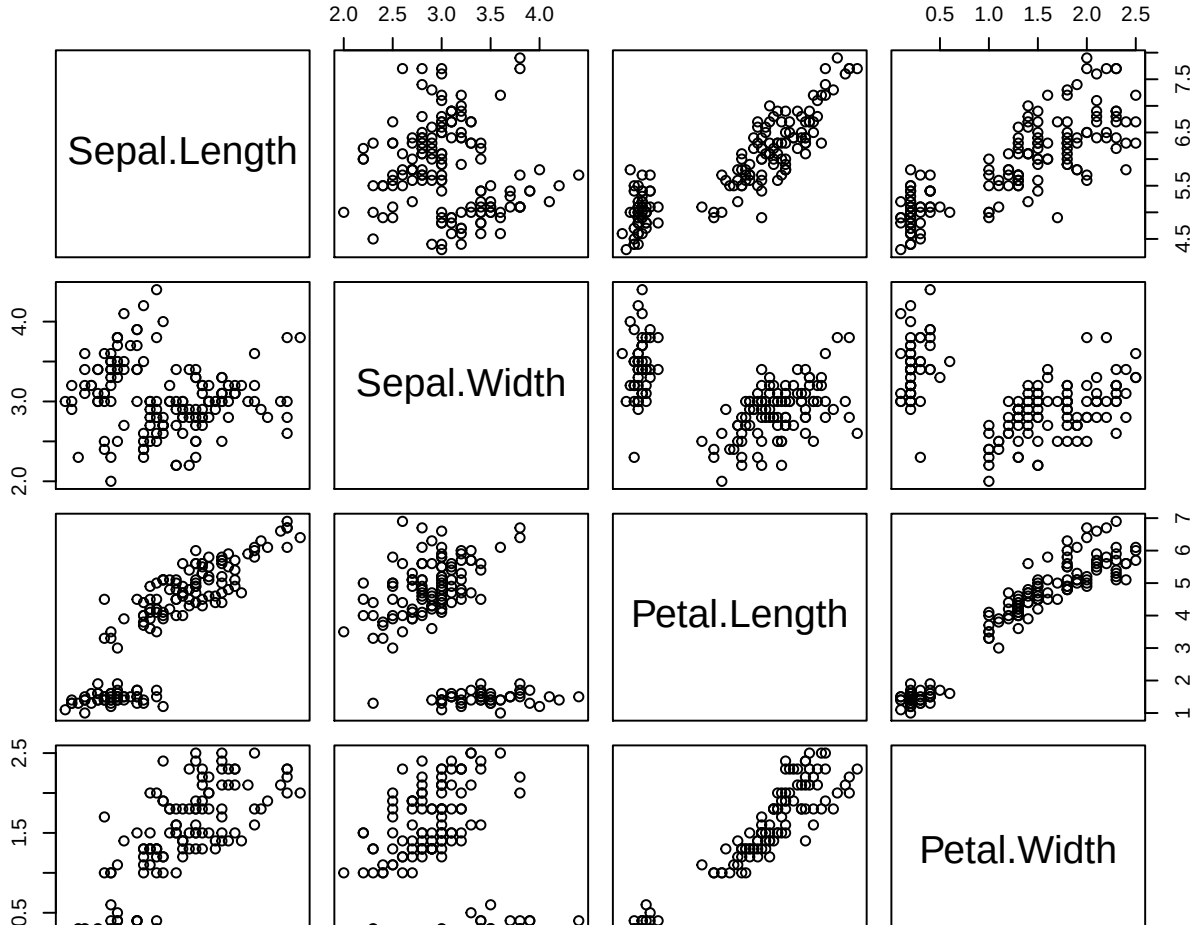
```
summary(mes.iris)
```

```
  Sepal.Length    Sepal.Width     Petal.Length    Petal.Wi
 Min.   :4.300   Min.   :2.000   Min.   :1.000   Min.   :0.
 1st Qu.:5.100   1st Qu.:2.800   1st Qu.:1.600   1st Qu.:0.
 Median :5.800   Median :3.000   Median :4.350   Median :1.
 Mean   :5.843   Mean   :3.057   Mean   :3.758   Mean   :1.
 3rd Qu.:6.400   3rd Qu.:3.300   3rd Qu.:5.100   3rd Qu.:1.
 Max.   :7.900   Max.   :4.400   Max.   :6.900   Max.   :2.
```

Visualisation des données

On peut ensuite essayer de visualiser les données

```
plot(mes.iris)
```



Cas d'étude : TCGA Breast Invasive Cancer (BIC)

- Présentation du cas d'étude (Jacques van Helden A COMPLETER)

TP : analyse de données d'expression

- TP clustering : [html][pdf] [Rmd]
- Première partie : chargement des données

Géométrie et distances

Sur la base d'une distance (souvent euclidienne)

- Partionnement:
  - Moyennes mobiles ou K-means : séparation optimale des groupes connaissant le nombre de groupes
  - Méthode agglomérative ouhierarchical clustering
- Classification:
  - attribution K plus proches voisins (K Nearest Neighbor)
  - séparation linéaire ou non linéaire

Distances

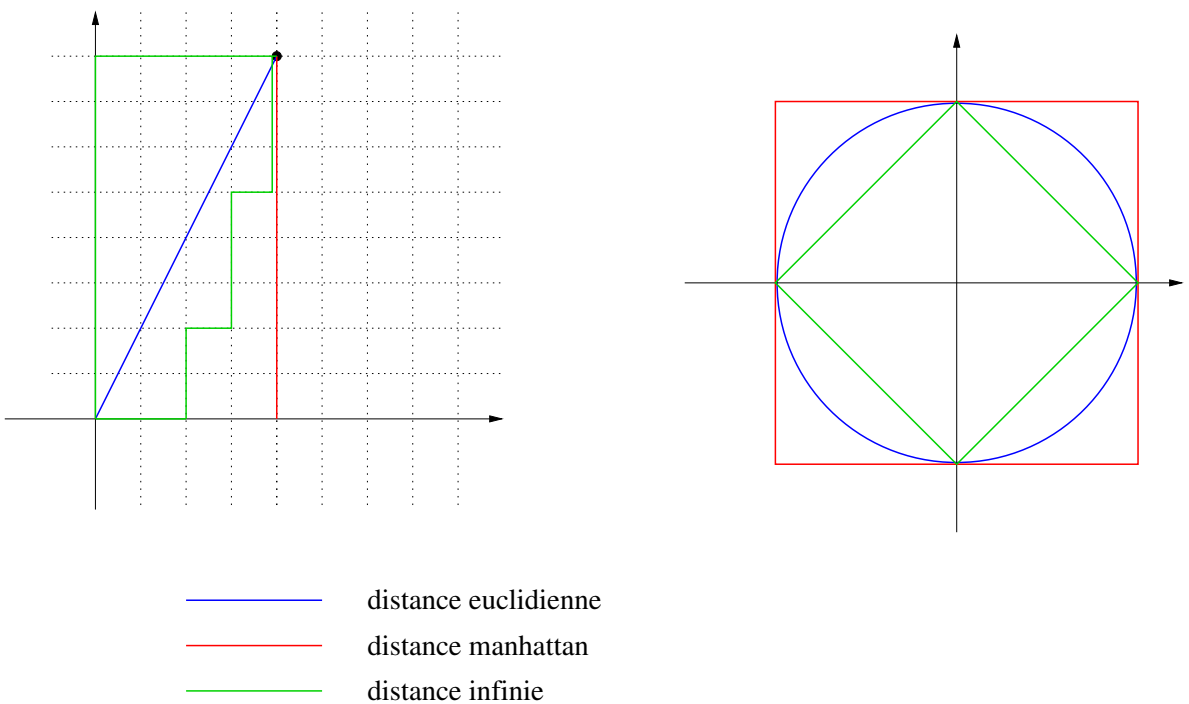
Définition d'une distance : fonction positive de deux variables

1. $d(x, y) \geq 0$
2. $d(x, y) = d(y, x)$
3. $d(x, y) = 0 \Longleftrightarrow x = y$
4. **Inégalité triangulaire :** $d(x, z) \leq$ d(x,y)+d(y,z)

Si 1,2,3 : dissimilarité

Distances utilisées dans R

- distance euclidienne ou distance L_2: $d(x,y) = \sqrt{\sum_i (x_i - y_i)^2}$
- distance de manahattan ou distance L_1: $d(x,y) = \sum_i |x_i - y_i|$
- distance du maximum ou L-infinis, L_∞: $d(x,y) = \max_i |x_i - y_i|$



Distances utilisées dans R

- distance de Minkowski l_p:

$$d(x,y) = \sqrt[p]{\sum_i (|x_i - y_i|^p}$$

- distance de Canberra (x et y valeurs positives):

$$d(x,y) = \sum_i \frac{x_i - y_i}{x_i + y_i}$$

- distance binaire ou distance de Jaccard ou Tanimoto: proportion de propriétés communes

Autres distances non géométriques (pour information)

Utilisées en bio-informatique:

- Distance de **Hamming**: nombre de remplacements de caractères (substitutions)
- Distance de **Levenshtein**: nombre de substitutions, insertions, deletions entre deux chaînes de caractères

$$d(\text{"}BONJOUR\text{"}, \text{"}BONSOIR\text{"}) = 2$$

- Distance d'**alignements**: distances de Levenshtein avec poids (par ex. matrices BLOSSUM)
- Distances d'**arbre** (Neighbor Joining)
- Distances **ultra-métriques** (phylogénie UPGMA)

Distances plus classiques en génomique

Comme vu lors de la séance 3, il existe d'autres mesures de distances :

- **Jaccard** (comparaison d'ensembles): $J_D = \frac{A \cap B}{A \cup B}$
- Distance du χ^2 (comparaison de tableau d'effectifs)

Ne sont pas des distances, mais indices de dissimilarité :

- **Bray-Curtis** (en écologie, comparaison d'abondance d'espèces)
- **Jensen-Shannon** (comparaison de distributions)

Remarque : lors du TP, sur les données d'expression RNA-seq, nous utiliserons le **coefficient de corrélation de Spearman** et la distance dérivée, $d_c = 1 - r$

Distances entre groupes

- **Single linkage** : élements les plus proches des 2 groupes

$$D(C_1, C_2) = \min_{i \in C_1, j \in C_2} D(x_i, x_j)$$

- **Complete linkage** : éléments les plus éloignés des 2 groupes

$$D(C_1, C_2) = \max_{i \in C_1, j \in C_2} D(x_i, x_j)$$

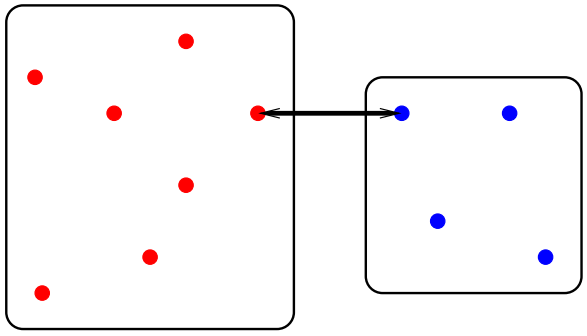
- **Group average** : distance moyenne

$$D(C_1, C_2) = \frac{1}{N_1 N_2} \sum_{i \in C_1, j \in C_2} D(x_i, x_j)$$

- **Ward**

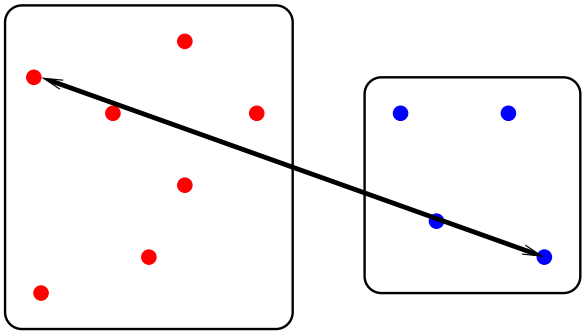
Distances entre groupes

Single



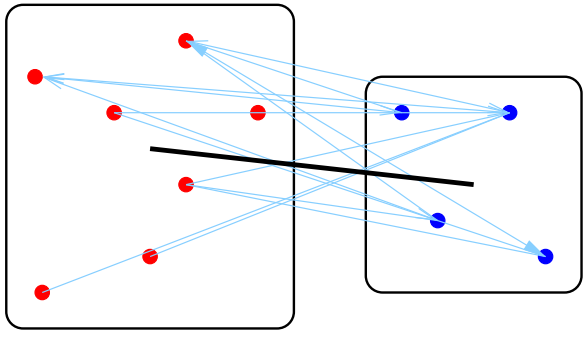
Classe 1 Classe2

Complete



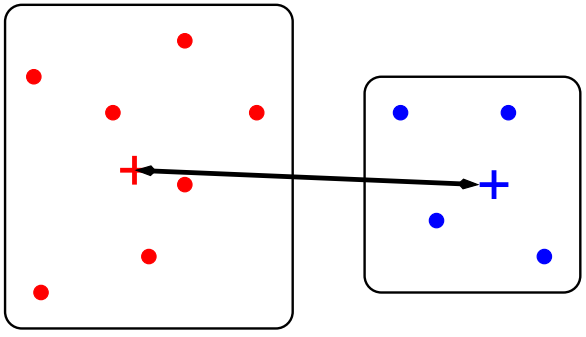
Classe 1 Classe2

Average



Classe 1 Classe2

Ward



Classe 1 Classe2

Les données

Ces données sont un classique des méthodes d'apprentissage

Dans un premier temps, regardons les données

```
dim(mes.iris)
```

```
[1] 150   4
```

```
head(mes.iris)
```

```
  Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
1          5.1         3.5          1.4         0.2
2          4.9         3.0          1.4         0.2
3          4.7         3.2          1.3         0.2
4          4.6         3.1          1.5         0.2
5          5.0         3.6          1.4         0.2
6          5.4         3.9          1.7         0.4
```

```
str(mes.iris)
```

```
'data.frame':   150 obs. of  4 variables:
 $ Sepal.Length: num  5.1 4.9 4.7 4.6 5 5.4 4.6 5 4.4 4.9 
 $ Sepal.Width : num  3.5 3 3.2 3.1 3.6 3.9 3.4 3.4 2.9 3.1
 $ Petal.Length: num  1.4 1.4 1.3 1.5 1.4 1.7 1.4 1.5 1.4 1
 $ Petal.Width : num  0.2 0.2 0.2 0.2 0.2 0.4 0.3 0.2 0.2 0
```

```
summary(mes.iris)
```

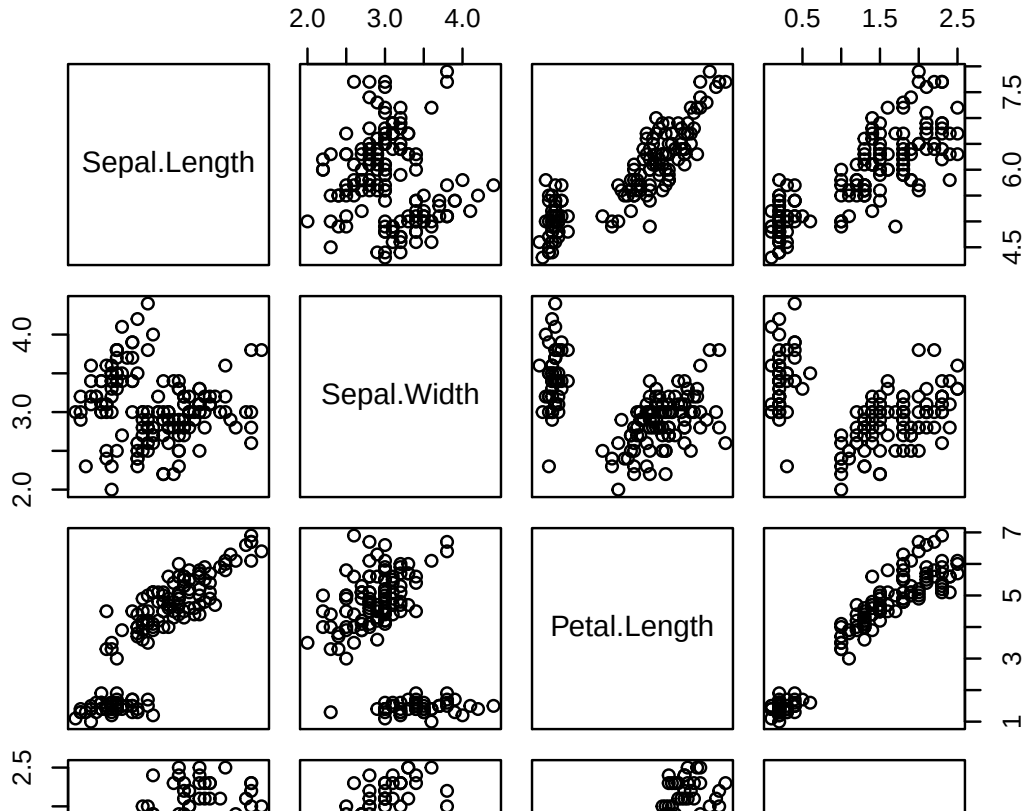
```
  Sepal.Length    Sepal.Width     Petal.Length    Petal.Wid
 Min.   :4.300   Min.   :2.000   Min.   :1.000   Min.   :0.
 1st Qu.:5.100   1st Qu.:2.800   1st Qu.:1.600   1st Qu.:0.
 Median :5.800   Median :3.000   Median :4.350   Median :1.
 Mean   :5.843   Mean   :3.057   Mean   :3.758   Mean   :1.
 3rd Qu.:6.400   3rd Qu.:3.300   3rd Qu.:5.100   3rd Qu.:1.
 Max.   :7.900   Max.   :4.400   Max.   :6.900   Max.   :2.
```

Visualisation des données

On peut ensuite essayer de visualiser les données

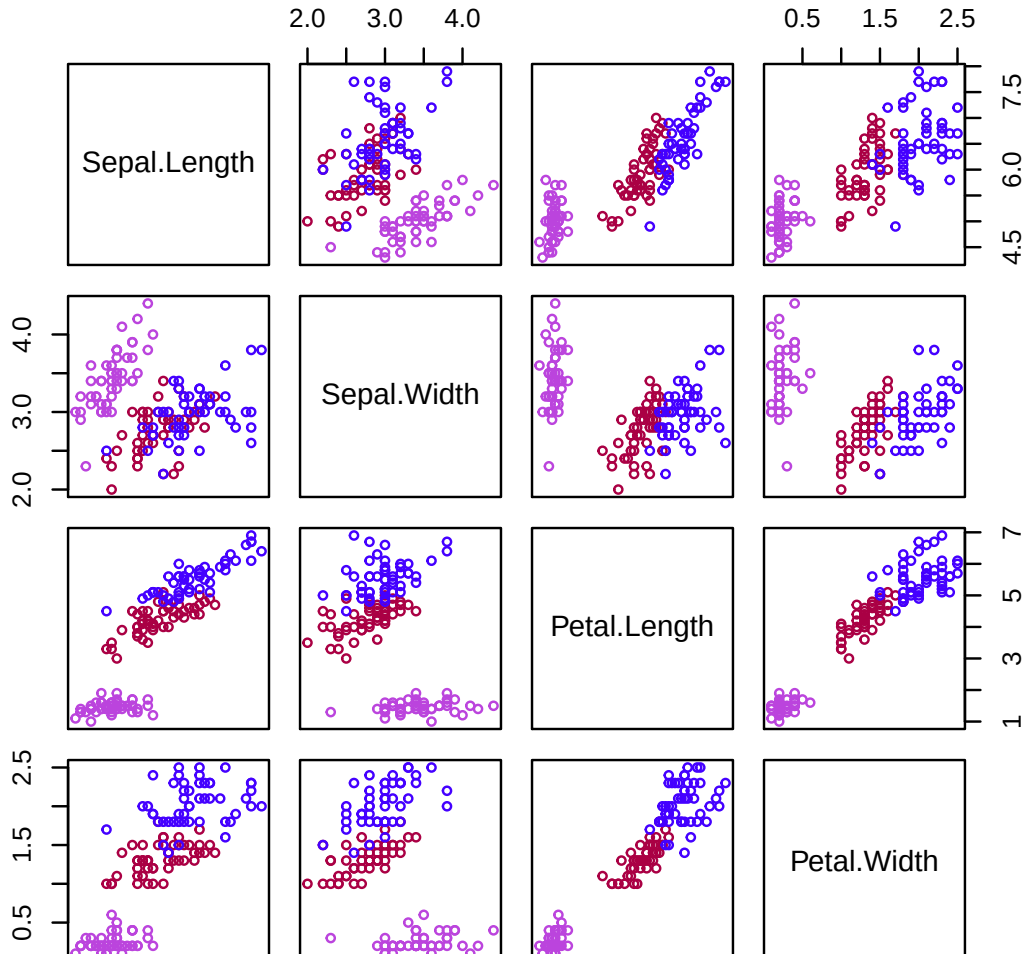
- par un `plot`

```
plot(mes.iris)
```



Visualisation des données - coloration par espèces

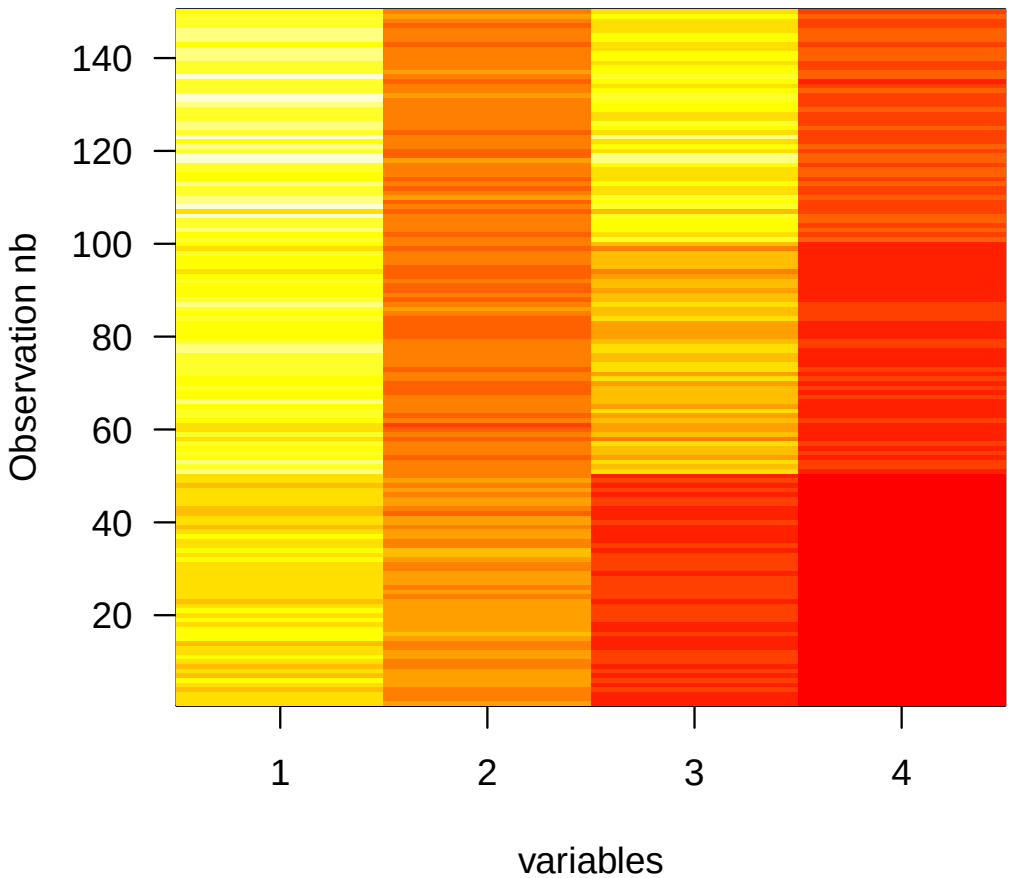
```
species.colors <- c(setosa = "#BB44DD", virginica = "#AA004
plot(mes.iris, col = species.colors[iris$Species], cex = 0.
```



Visualisation des données

- par la fonction `image()`

```
image(1:nb.var, 1:nb.iris ,t(as.matrix(mes.iris)), xlab =
```



Nettoyage des données (1): données manquantes

Avant de commencer à travailler, il est nécessaire de commencer par vérifier que :

- il n'y a pas de données manquantes

```
sum(is.na(mes.iris))
```

```
[1] 0
```

Nettoyage des données (2) : variables constantes

- aucune variable n'est constante (aucune variable n'a une variance nulle)

```
iris.var <- apply(mes.iris, 2, var)
kable(iris.var, digits = 3, col.names = "Variance")
```

	Variance
Sepal.Length	0.686
Sepal.Width	0.190
Petal.Length	3.116
Petal.Width	0.581

```
sum(apply(mes.iris, 2, var) == 0)
```

```
[1] 0
```

Normalisation

Afin de pouvoir considérer que toutes les variables sont à la même échelle, il est parfois nécessaire de normaliser les données.

- soit
  - en centrant (ramener la moyenne de chaque variable à 0)

```
mes.iris.centre <- scale(mes.iris, center=TRUE, scale=FALSE
```

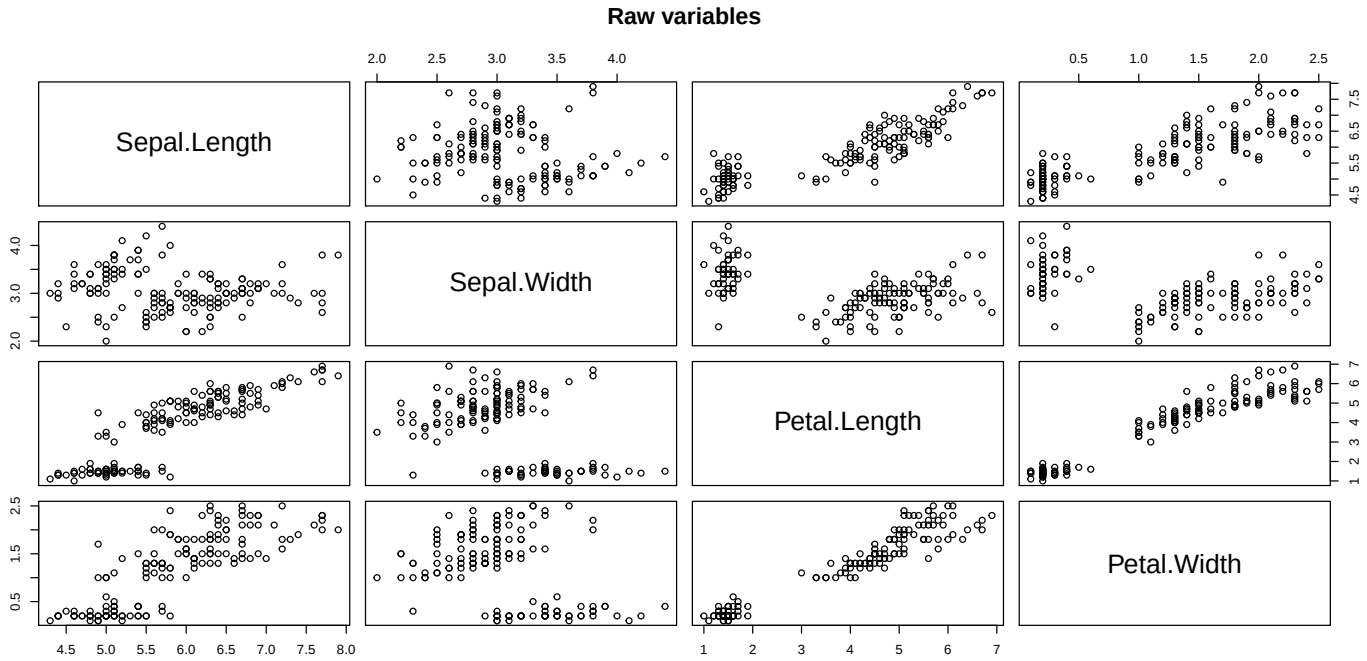
- soit
  - en centrant (ramener la moyenne de chaque variable 0)
  - et mettant à l'échelle (ramener la variance de chaque variable à 1)

```
mes.iris.scaled <- scale(mes.iris, center=TRUE, scale=TRUE)
```

On peut visuellement regarder l'effet de la normalisation :

par un plot des données

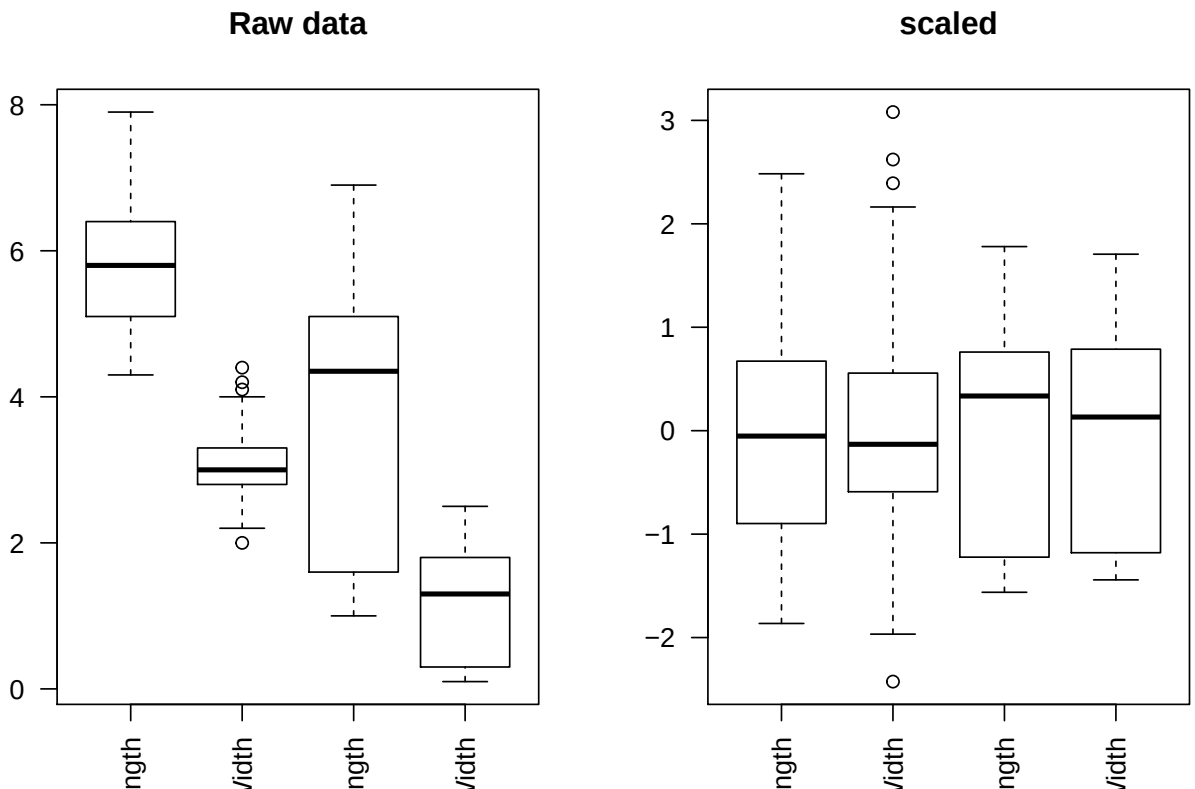
```
plot(mes.iris, main = "Raw variables")
```



! ne pas faire si "grosses" données

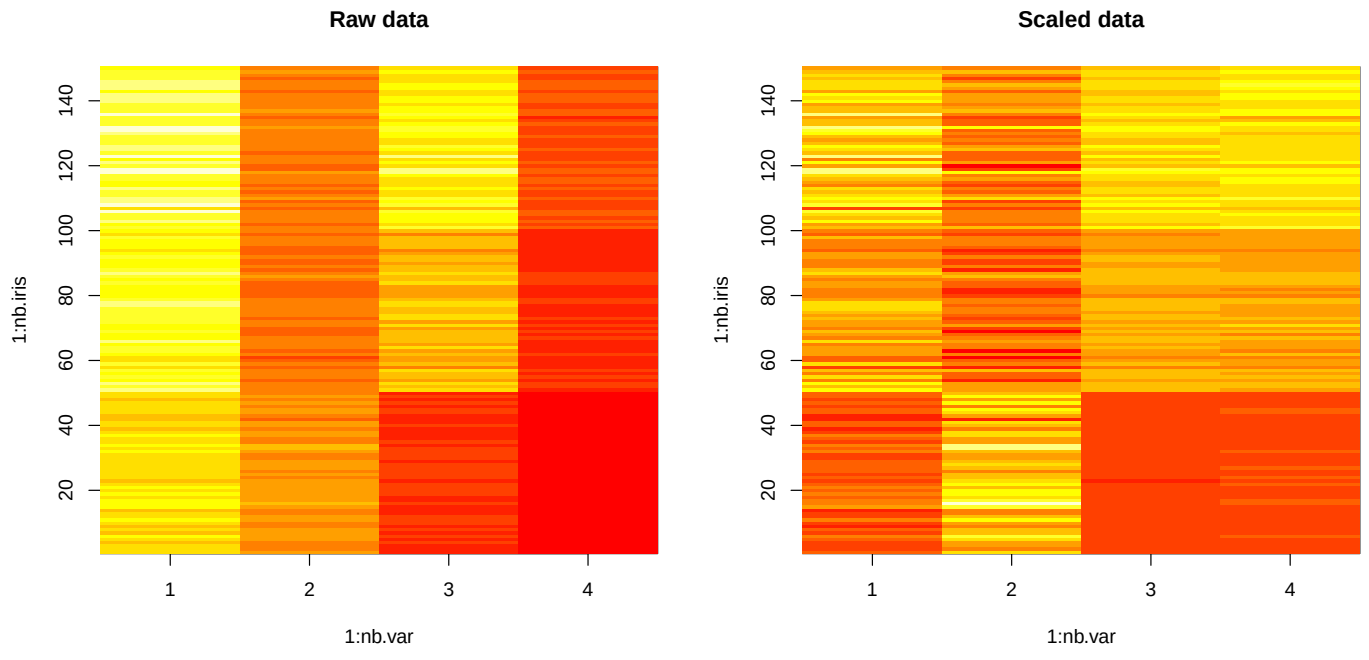
... par une boîte à moustaches (boxplot)

```
par(mfrow = c(1,2))
par(mar = c(7, 4.1, 4.1, 1.1)) # adapt margin sizes for th
boxplot(mes.iris, main = "Raw data", las = 2)
boxplot(mes.iris.scaled, main = "scaled", las = 2)
```



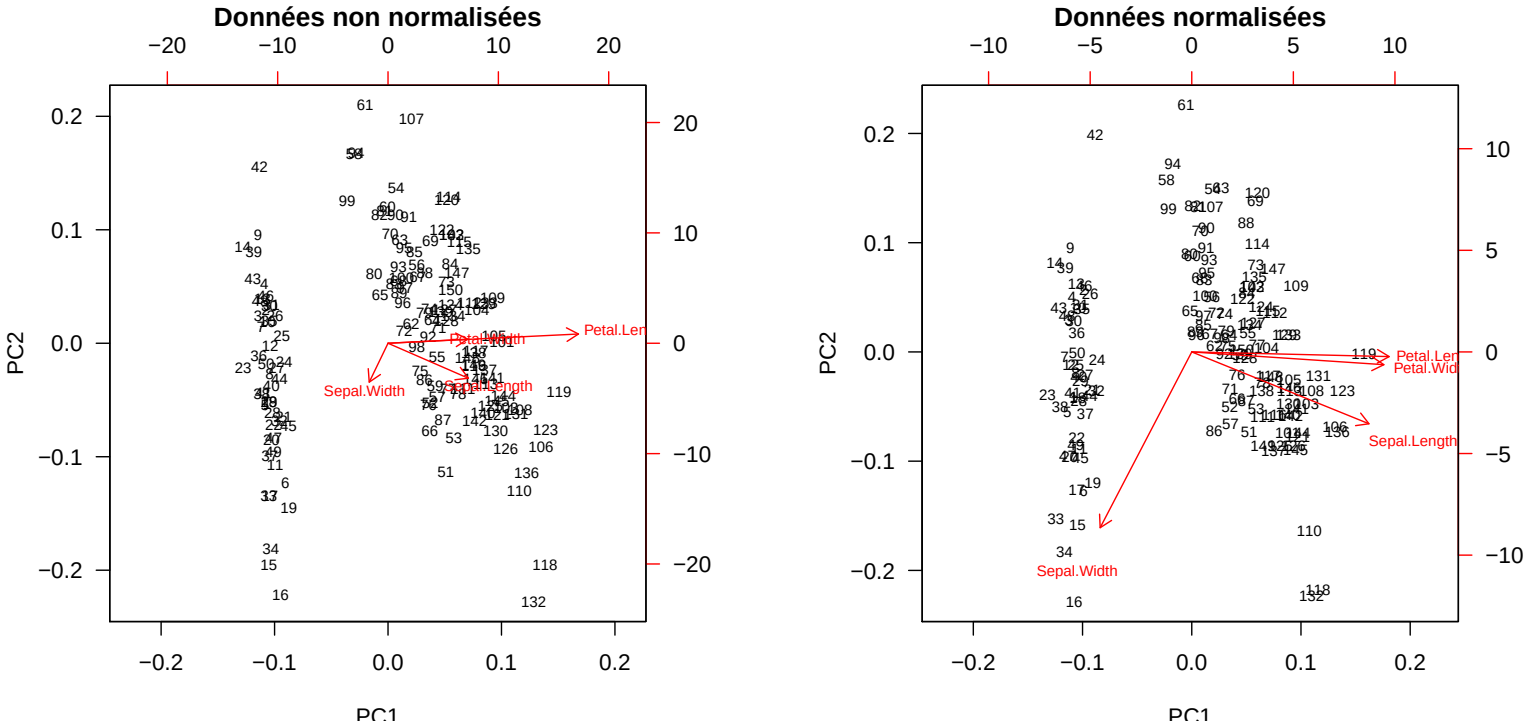
... par une image

```
par(mfrow=c(1,2))
image(1:nb.var, 1:nb.iris, t(as.matrix(mes.iris)), main="Ra
image(1:nb.var, 1:nb.iris, t(as.matrix(mes.iris.scaled)), m
```



... par une projection sur une ACP

```
par(mfrow = c(1,2))
biplot(prcomp(mes.iris), las = 1, cex = 0.7,
       main = "Données non normalisées")
biplot(prcomp(mes.iris, scale = TRUE), las = 1, cex = 0.7,
       main = "Données normalisées")
```

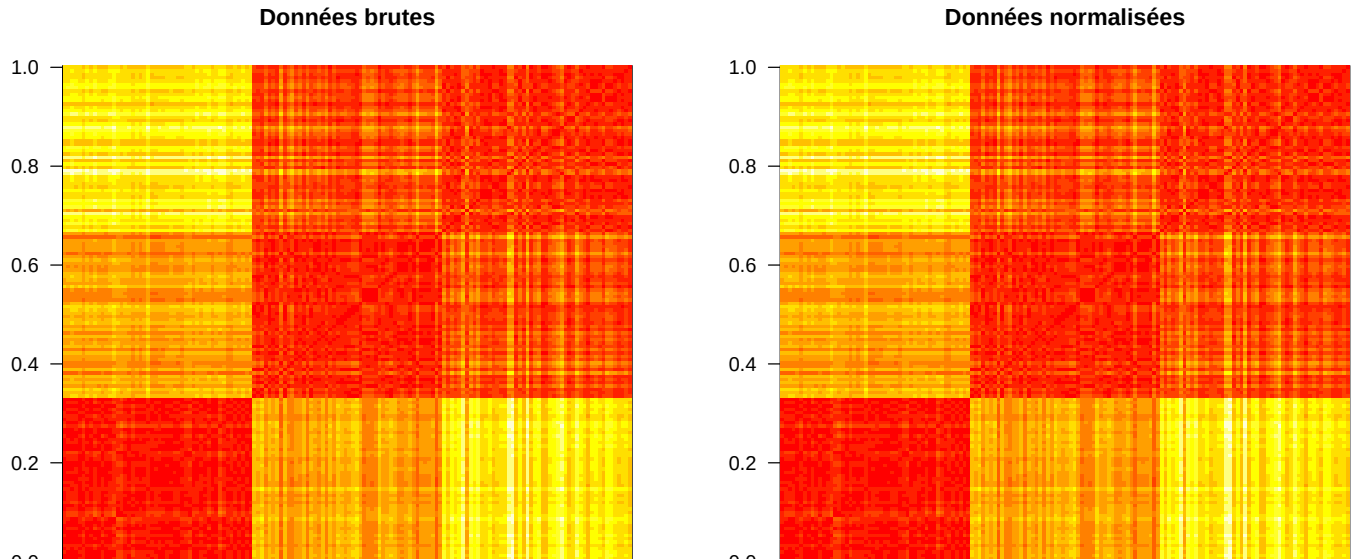


La matrice de distances

Nous utilisons ici la distance euclidienne.

```
iris.euc <- dist(mes.iris)
iris.scale.euc <- dist(mes.iris.scaled)
```

```
par(mfrow = c(1,2))
image(t(as.matrix(iris.euc)), main = "Données brutes", las
image(t(as.matrix(iris.scale.euc)), main = "Données normali
```



La classification hiérarchique

Principe

- **classification hiérarchique** : mettre en évidence des liens hiérachiques entre les individus
  - classification hiérarchique **ascendante** : partir des individus pour arriver à des classes / cluster
  - classification hiérarchique **descendante** : partir d'un groupe qu'on subdivise en sous-groupes /clusters jusqu'à arriver à des individus.

Notion importante, cf distances

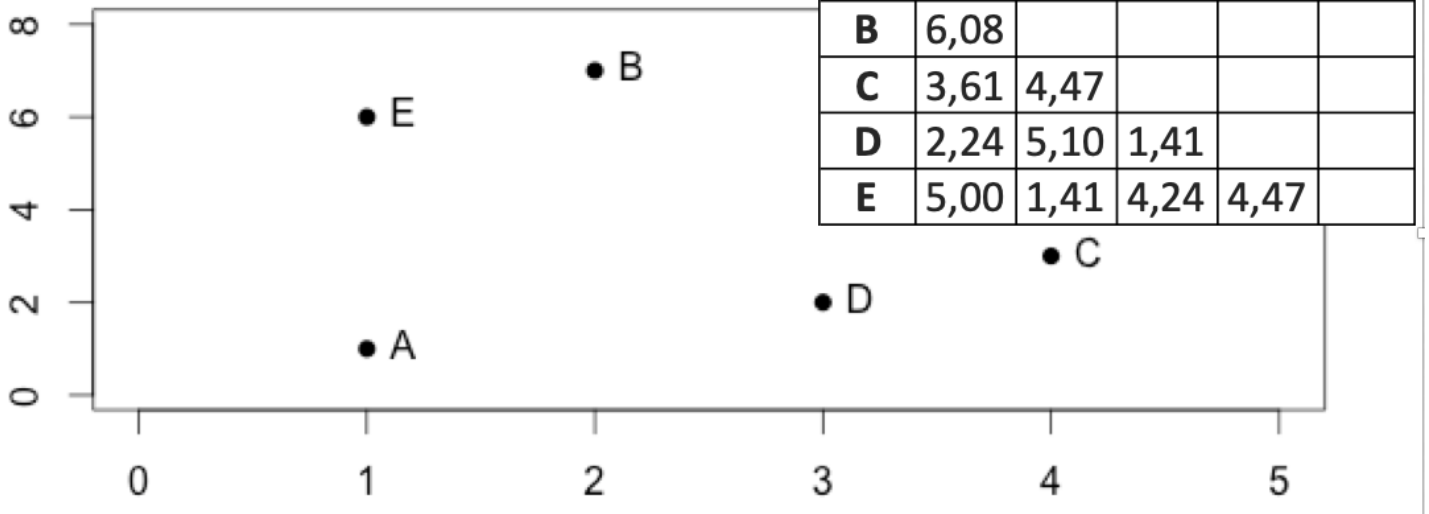
- ressemblance entre individus = distance
- ressemblance entre groupes d'invidus = critère d'aggrégation
  - lien simple
  - lien complet
  - lien moyen
  - critère de Ward

L'algorithme

étape 1 :

- départ : n individus = n clusters distincts
- calcul des distances entre tous les individus
  - choix de la métrique à utiliser en fonction du type de données
- regroupement des 2 individus les plus proches => (n-1) clusters

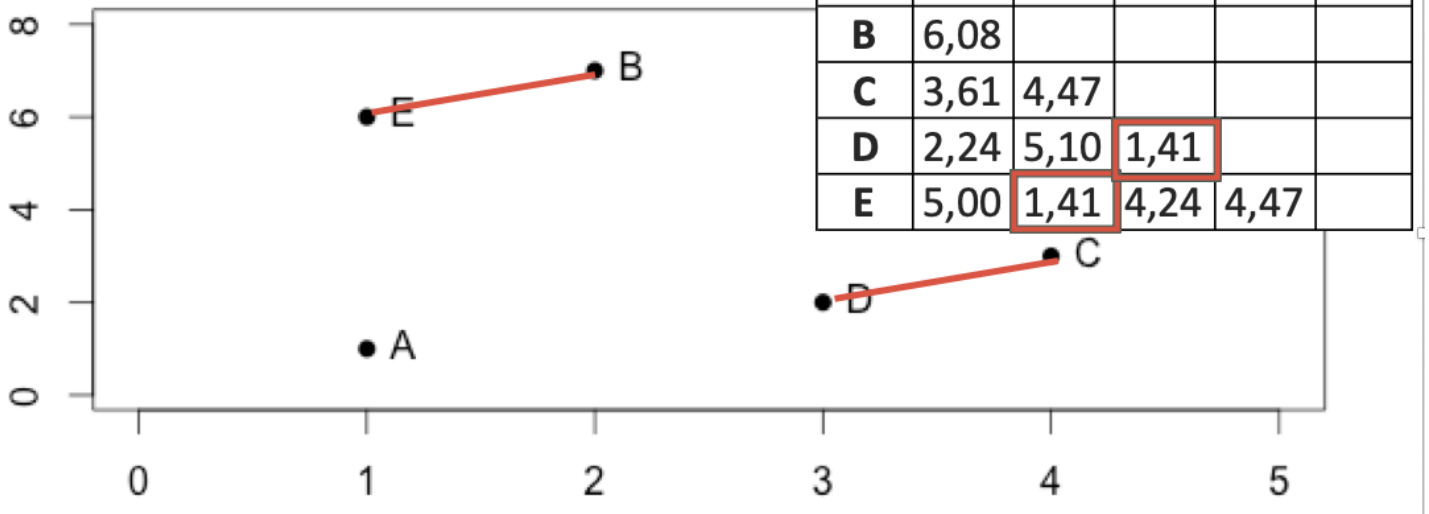
au départ



	A	B	C	D	E
A					
B	6,08				
C	3,61	4,47			
D	2,24	5,10	1,41		
E	5,00	1,41	4,24	4,47	

initialisation : (A), (B), (C), (D), (E)

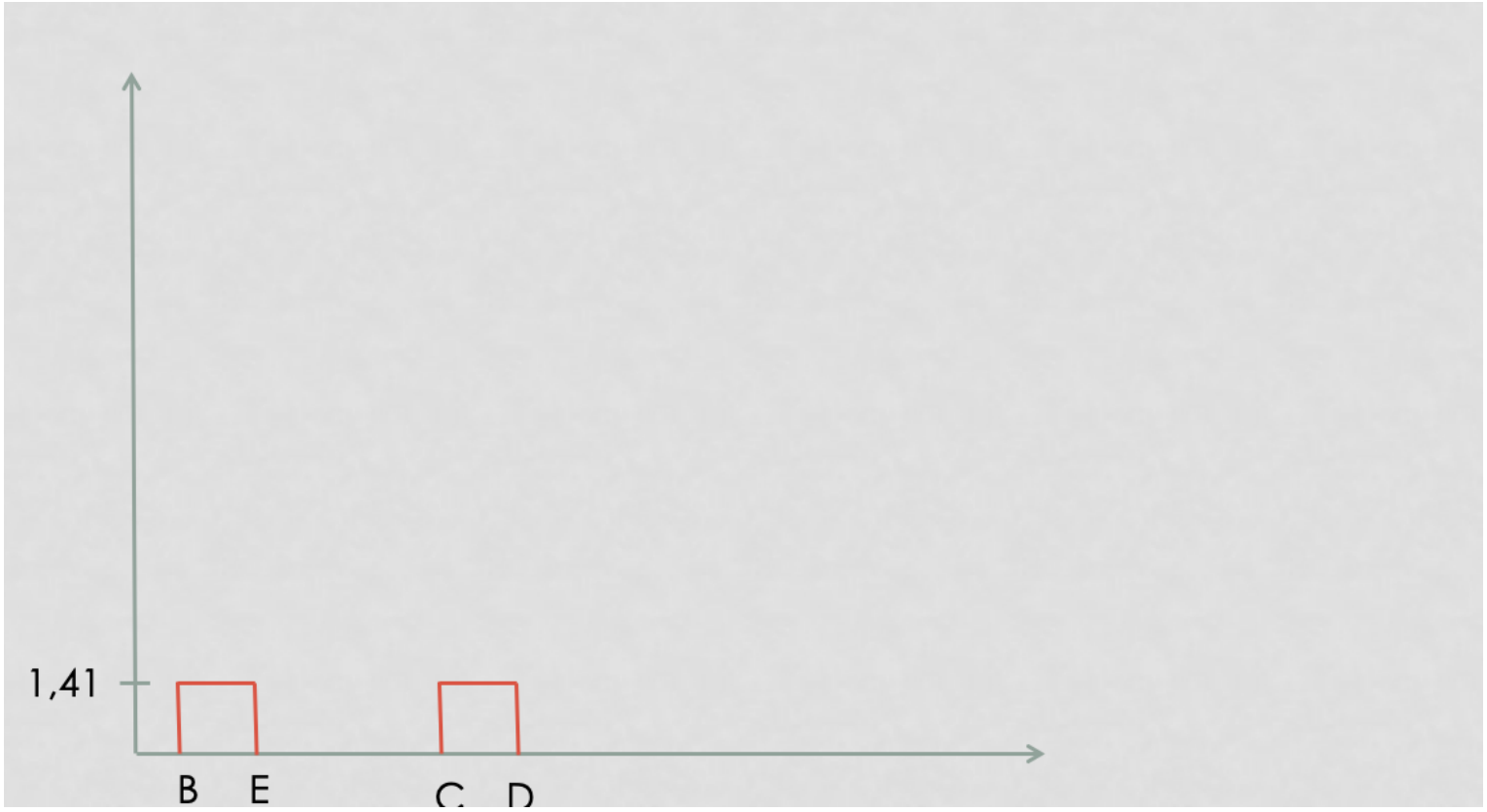
identification des individus les plus proches



	A	B	C	D	E
A					
B	6,08				
C	3,61	4,47			
D	2,24	5,10	1,41		
E	5,00	1,41	4,24	4,47	

première partition : (A), (BE), (CD)

construction du dendrogramme



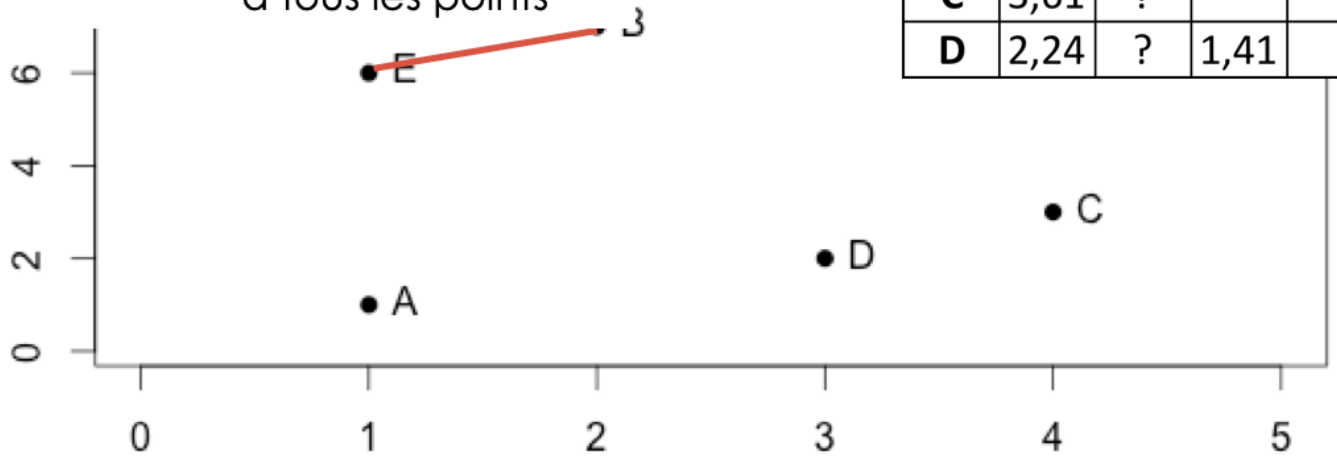
étape j :

- calcul des dissemblances entre chaque groupe obtenu à l'étape $(j-1)$
- regroupement des deux groupes les plus proches $=>$ $(n-j)$ clusters

calcul des nouveaux représentants BE et CD

par le lien moyen,
calcul de BE
calcul de la distance de BE
à tous les points

	A	BE	C	D
A				
BE	?			
C	3,61	?		
D	2,24	?	1,41	



par le lien moyen,
calcul de CD

calcul des distances de l'individu restant A aux points moyens

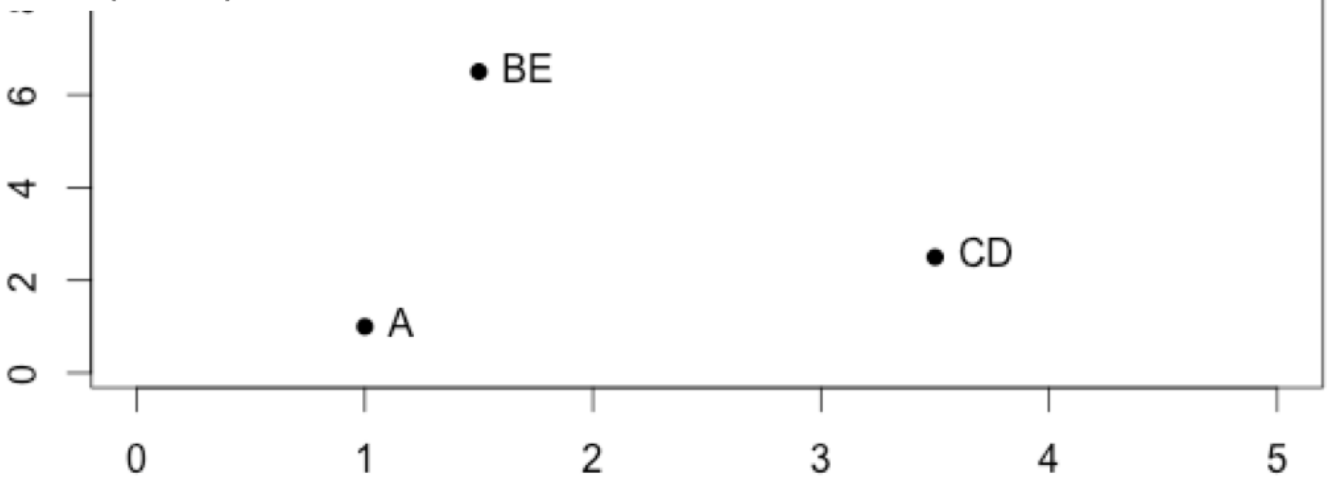
calcul des distances

d(BE, A) =

d(BE, CD) =

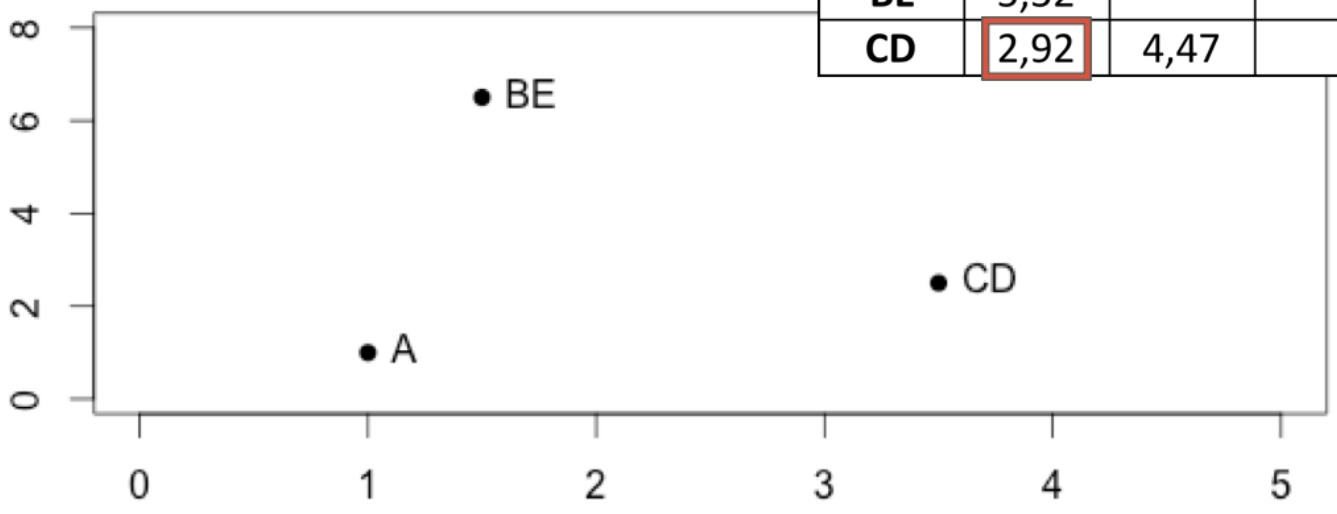
d(CD,A) =

$$d(BE,A) = \frac{d(B,A) + d(E,A)}{2} = \frac{6.08 + 5}{2} = 5.52$$



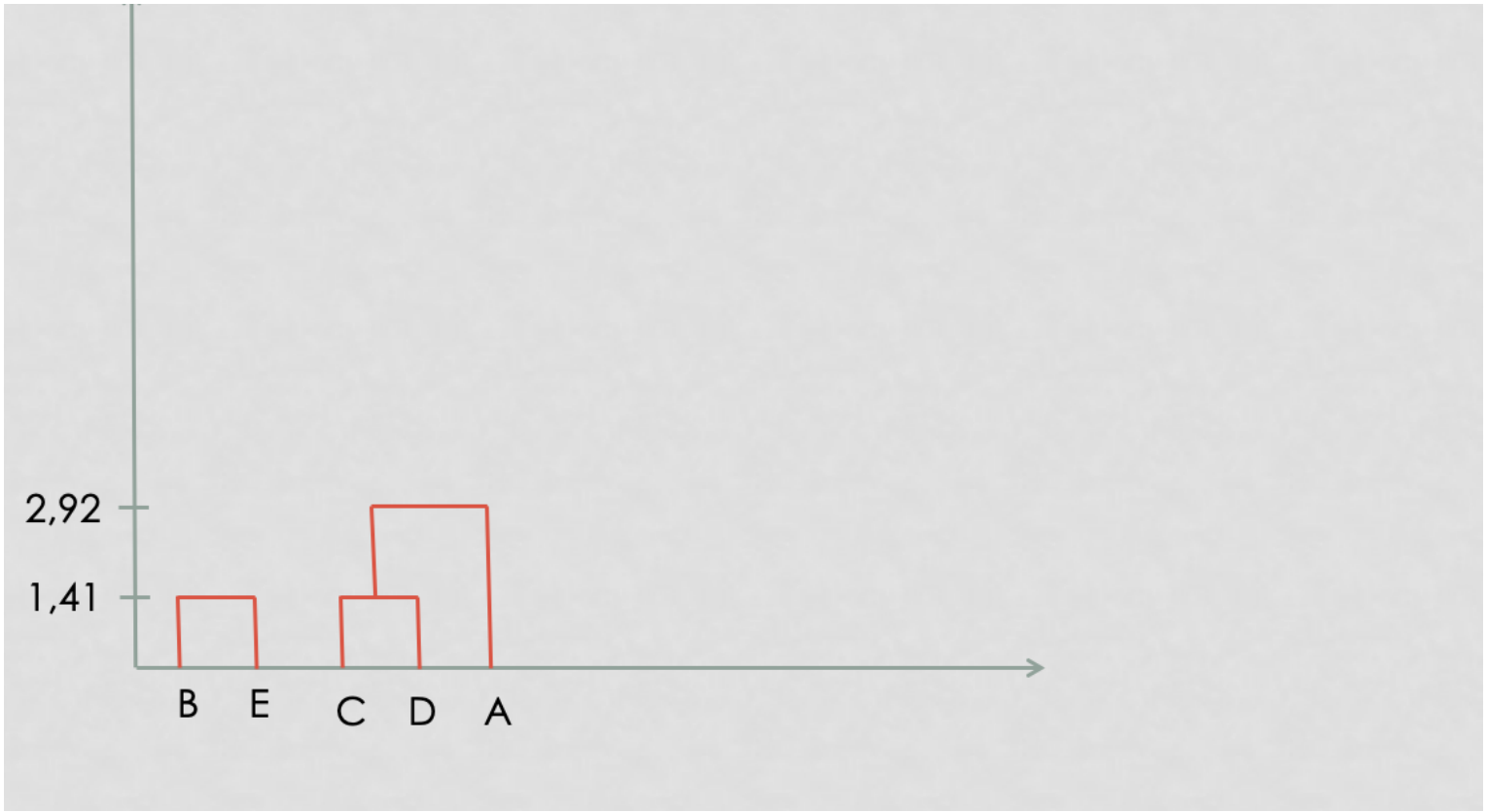
A est plus proche de . . .

	A	BE	CD
A			
BE	5,52		
CD	2,92	4,47	



deuxième partition : (BE), (CDA)

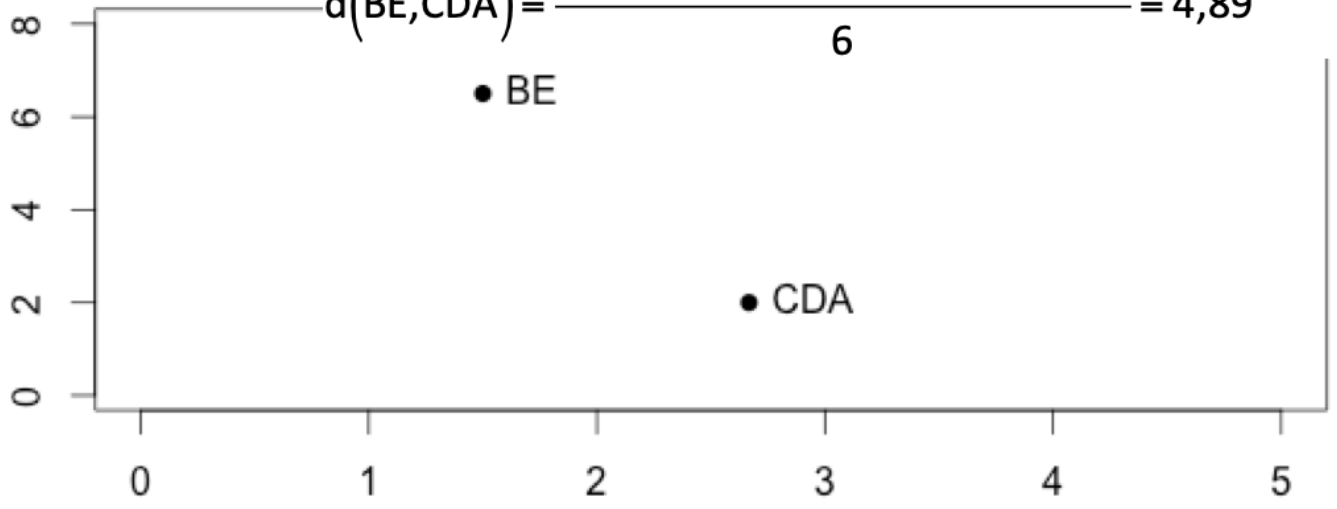
dendrogramme



pour finir

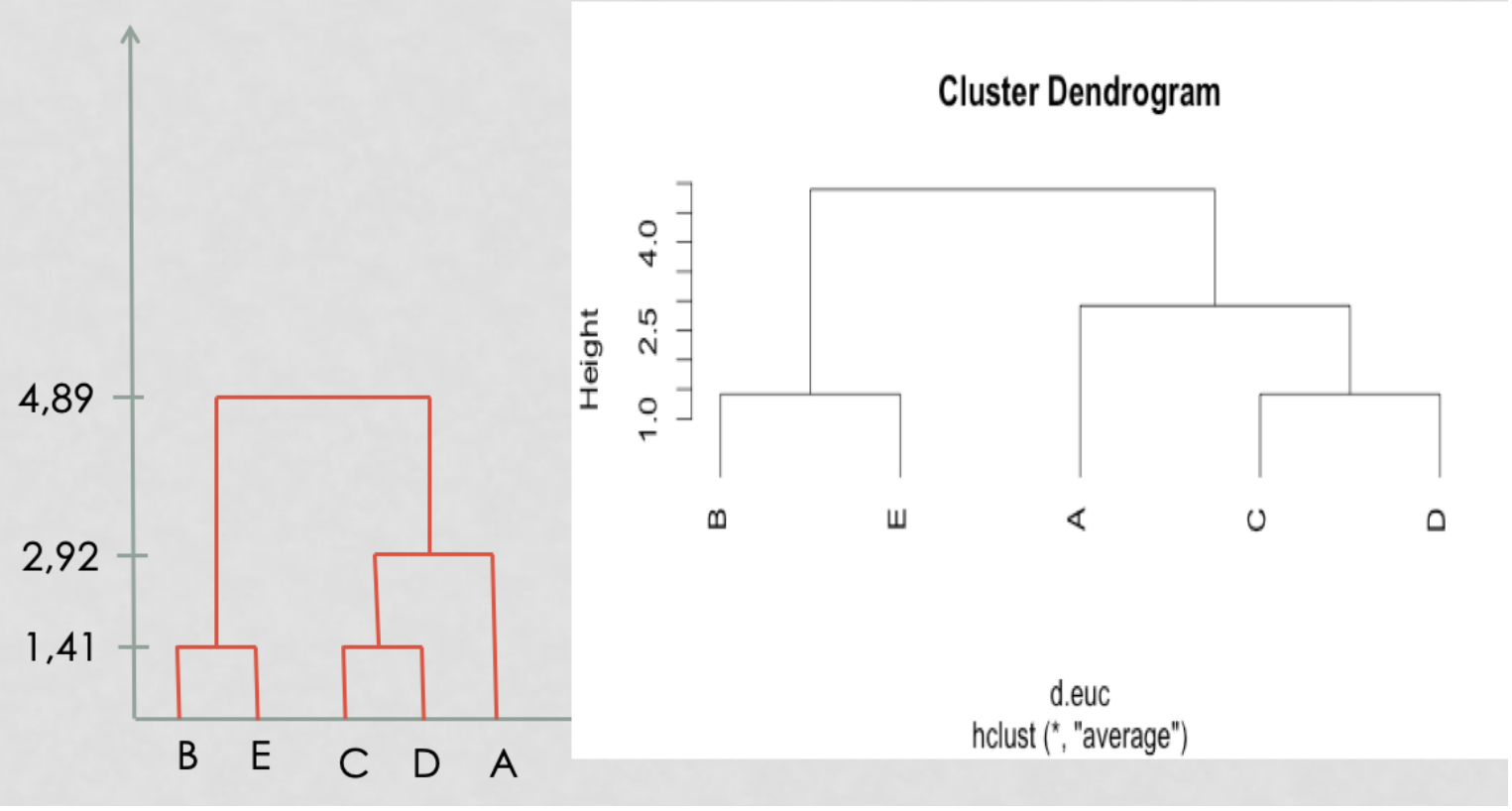
$$d(BE,CDA) = \frac{d(B,C)+d(E,C)+d(B,D)+d(E,D)+d(B,A)+d(E,A)}{6}$$

$$d(BE,CDA) = \frac{6.08+5+4,47+4,24+5,1+4,47}{6} = 4,89$$



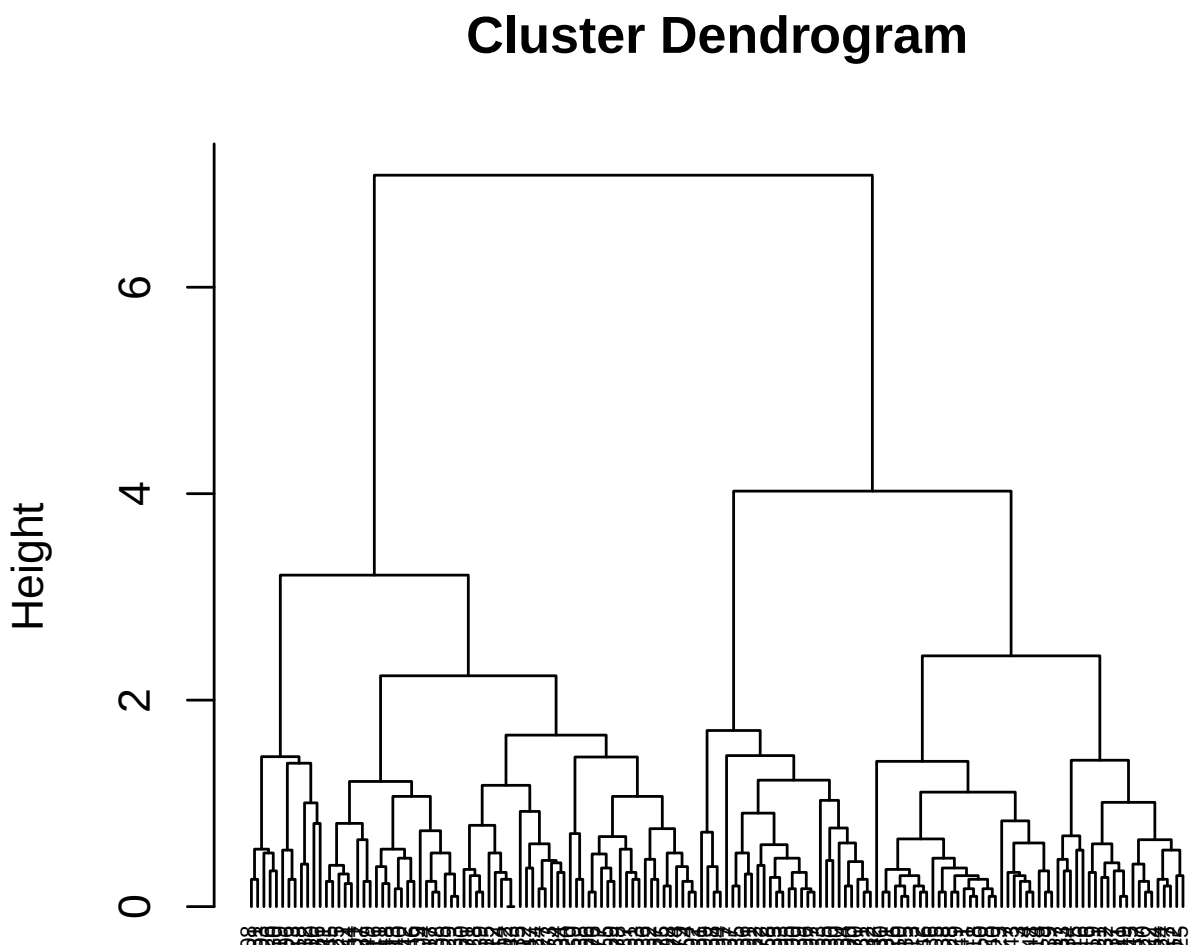
- à l'étape $(n-1)$, tous les individus sont regroupés dans un même cluster

dendrogramme final



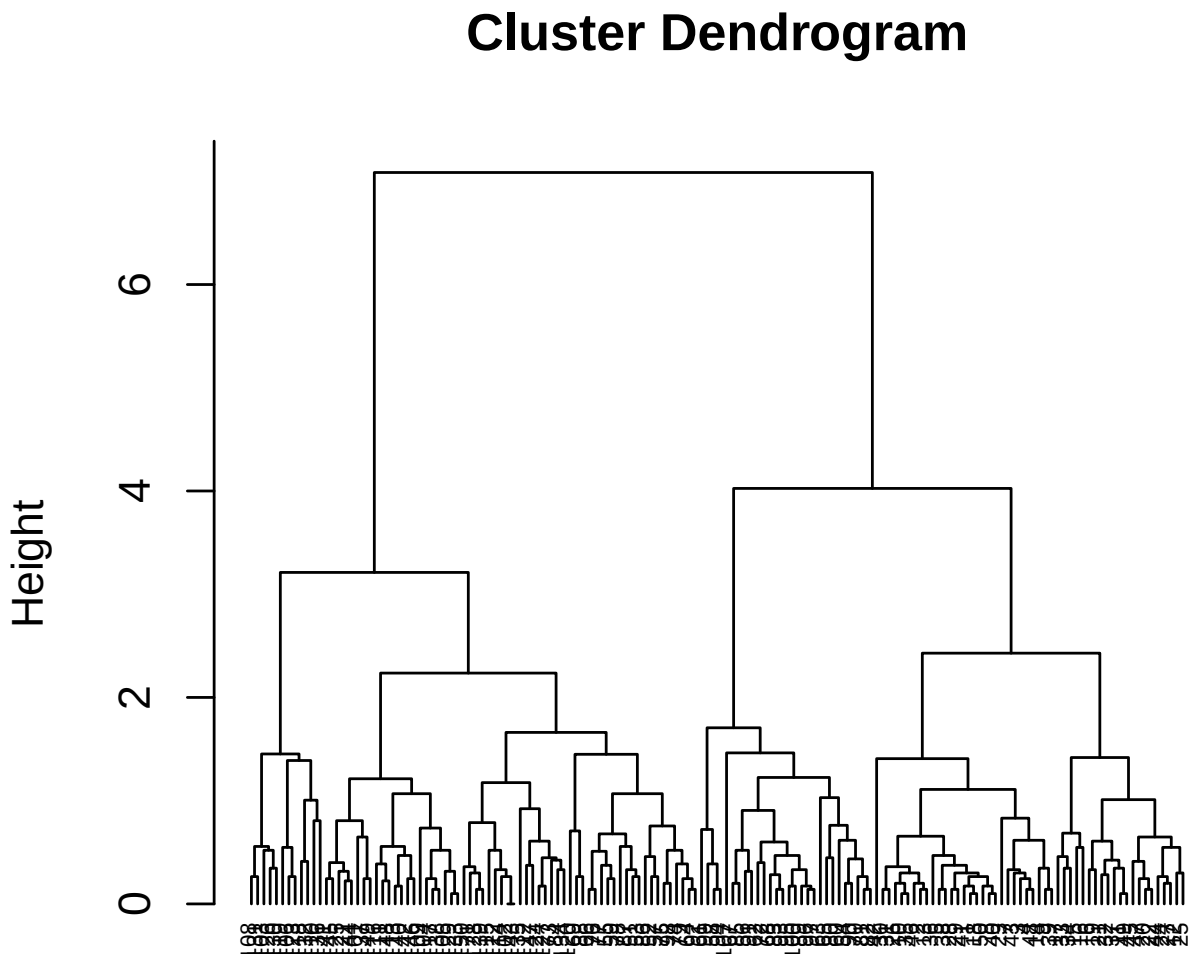
Je ne fais pas attention à ce que je fais . . .

```
iris.hclust <- hclust(iris.euc)
plot(iris.hclust, hang = -1, cex = 0.5)
```

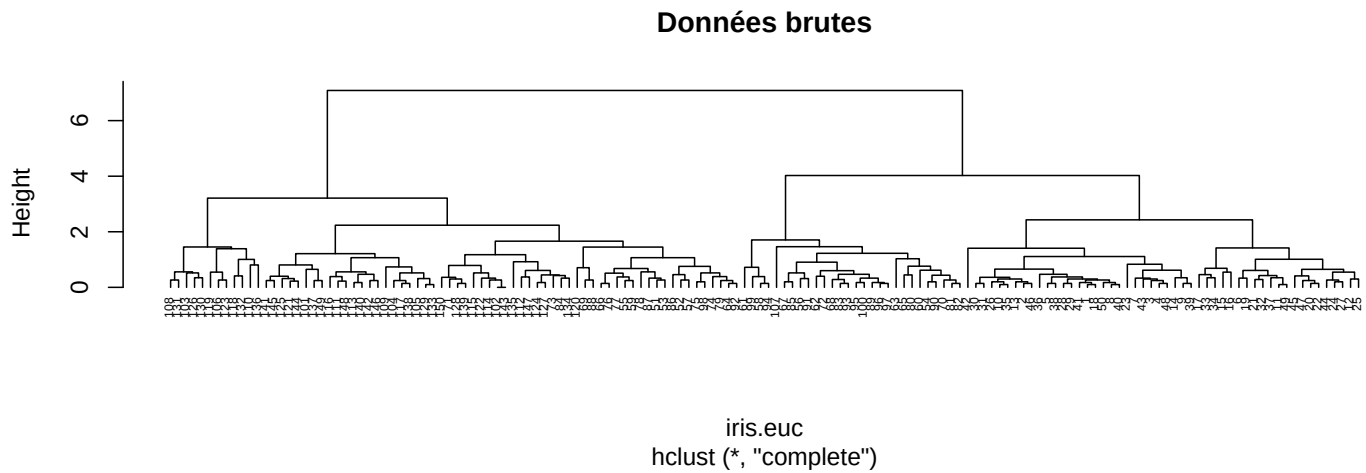


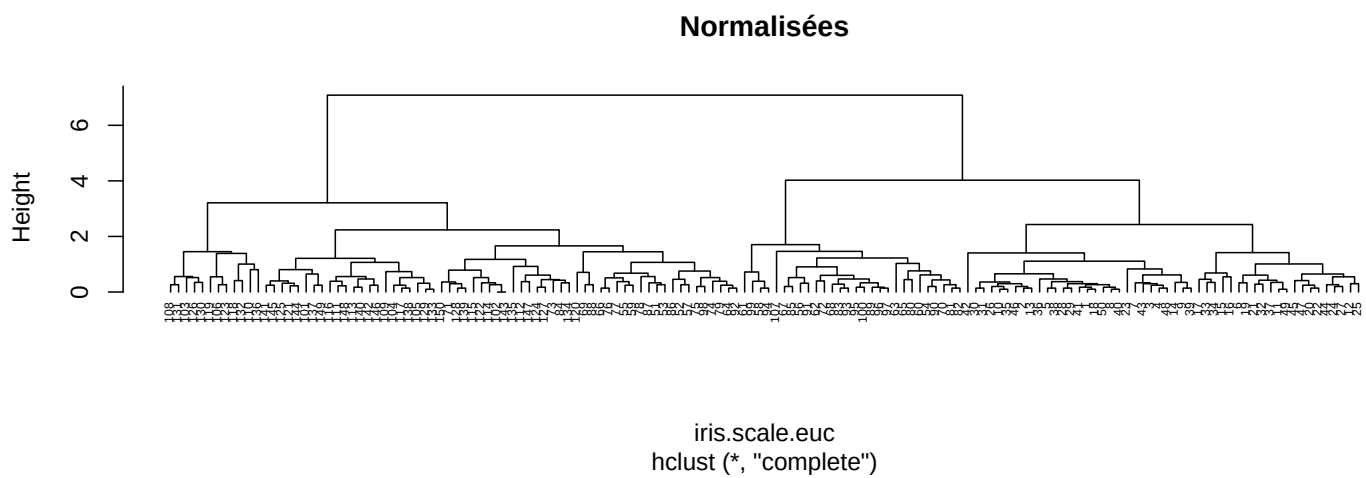
Sur données normalisées

```
iris.scale.hclust <- hclust(iris.scale.euc)
plot(iris.scale.hclust, hang = -1, cex = 0.5)
```



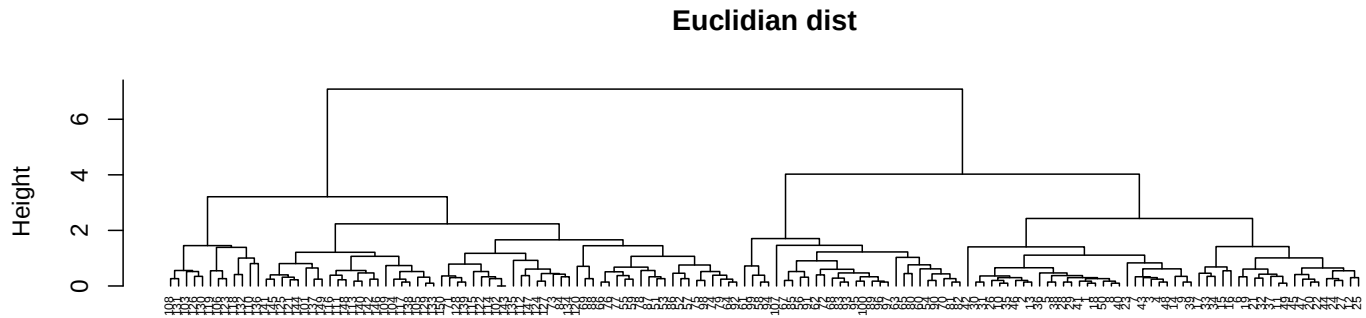
```
par(mfrow = c(2, 1))
plot(iris.hclust, hang = -1, cex = 0.5, main = "Données bru
plot(iris.scale.hclust, hang = -1, cex = 0.5, main = "Norma
```

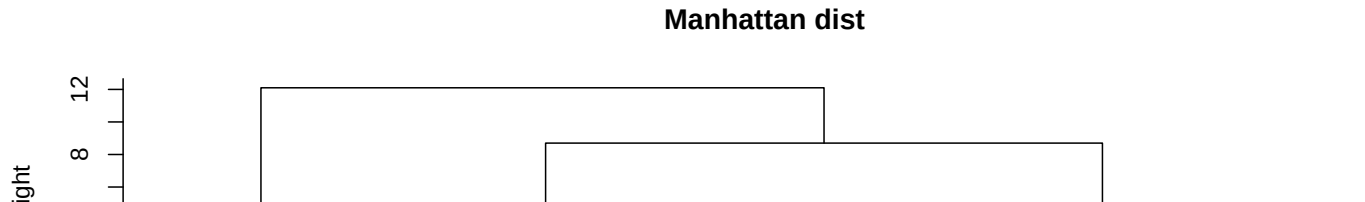




En utilisant une autre métrique

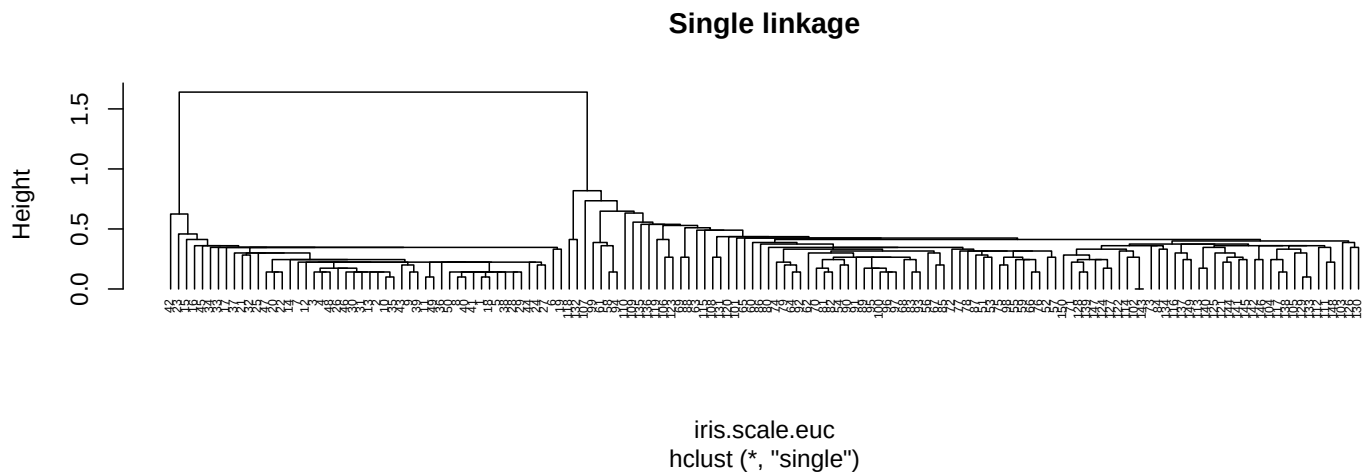
```
iris.scale.max <- dist(mes.iris.scaled, method = "manhattan
iris.scale.hclust.max <- hclust(iris.scale.max)
par(mfrow=c(2,1))
plot(iris.scale.hclust, hang=-1, cex=0.5, main = "Euclidian
plot(iris.scale.hclust.max, hang=-1, cex=0.5, main = "Manha
```





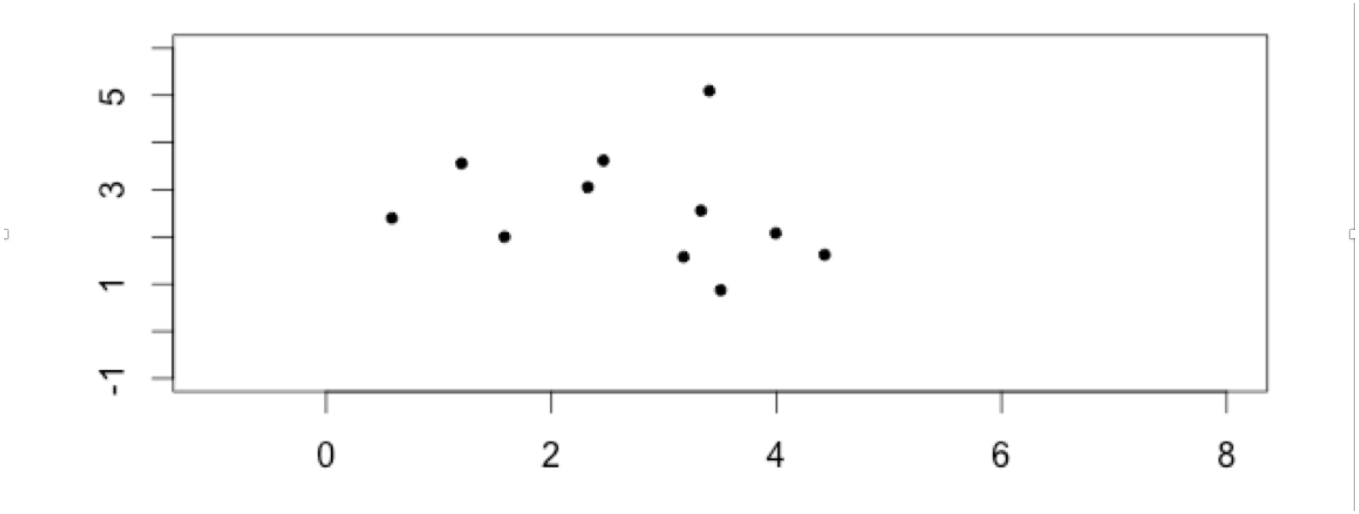
En utilisant un autre critère d'aggrégation

```
iris.scale.hclust.single <- hclust(iris.scale.euc, method="
iris.scale.hclust.ward <- hclust(iris.scale.euc, method="wa
par(mfrow=c(2,1))
plot(iris.scale.hclust.single, hang=-1, cex=0.5, main = "Si
plot(iris.scale.hclust.ward, hang=-1, cex=0.5, main = "Ward
```



Les k-means

Les individus dans le plan



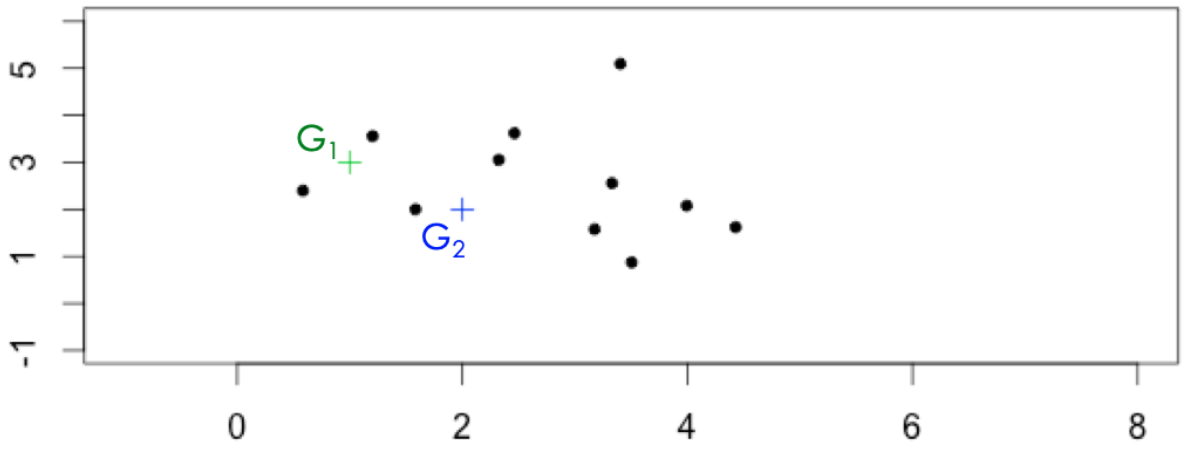
L'algorithme

étape 1 :

- k centres provisoires tirés au hasard
- k clusters créés à partir des centres en regroupant les individus les plus proches de chaque centre
- obtention de la partition P_0

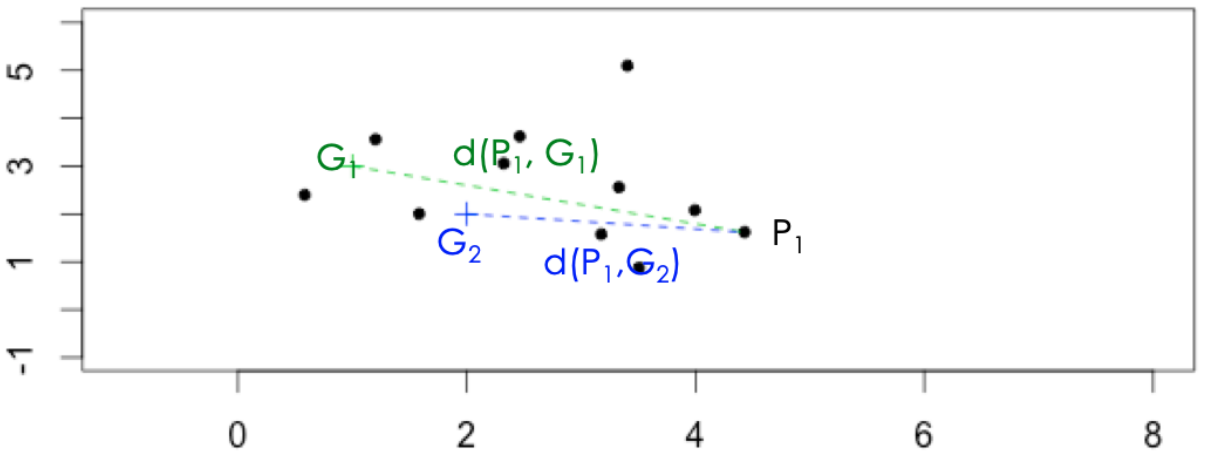
Choix des centres provisoires

combien de cluster ?
les deux centres initiaux (G_1 et G_2) sont choisis au hasard



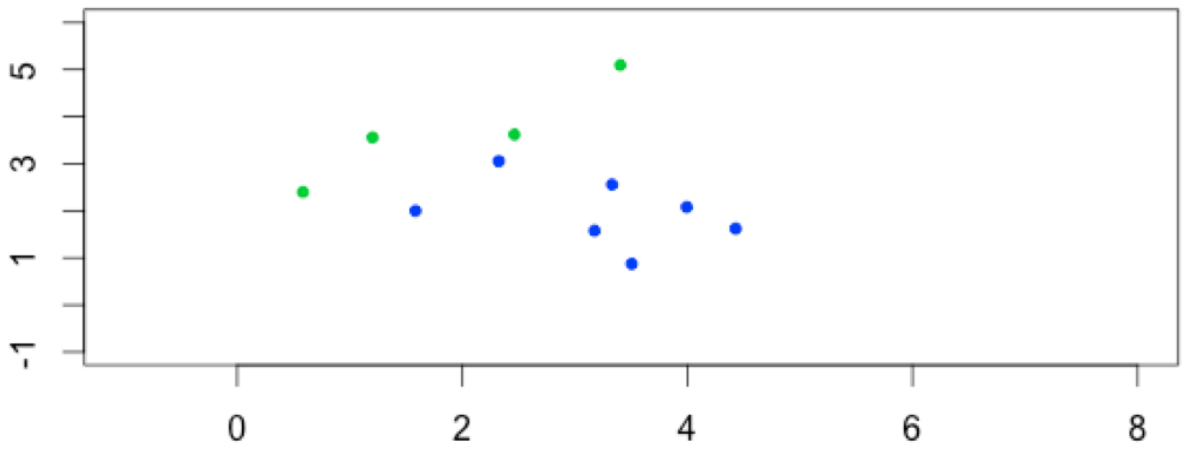
Calcul des distances aux centres provisoires

- calcul des distances de chaque point aux centres G_1 et G_2,



le point P_1 est affecté au groupe 2

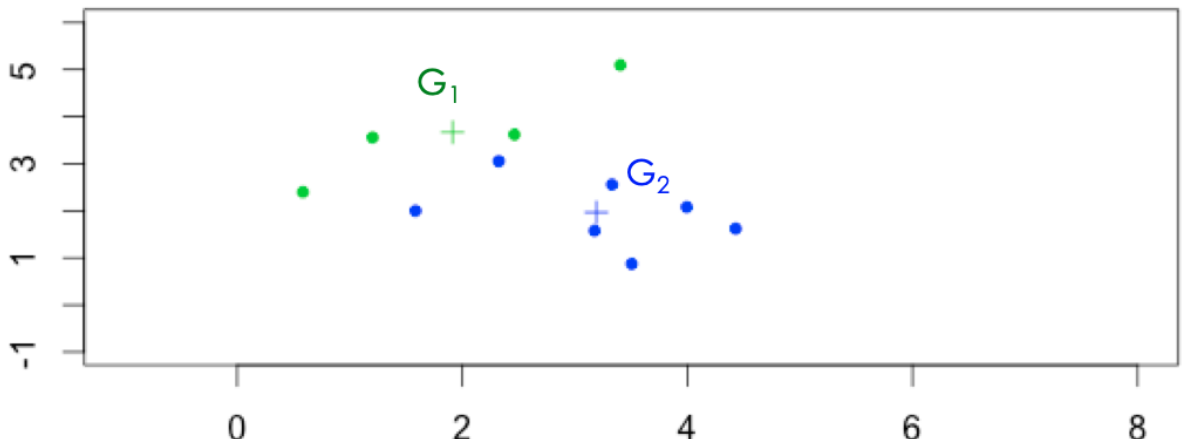
Affectation à un cluster



Calcul des nouveaux centres de classes

Etape j :

- construction des centres de gravité des k clusters construits à l'étape $(j-1)$
- k nouveaux clusters créés à partir des nouveaux centres suivant la même règle qu'à l'étape 0
- obtention de la partition P_j

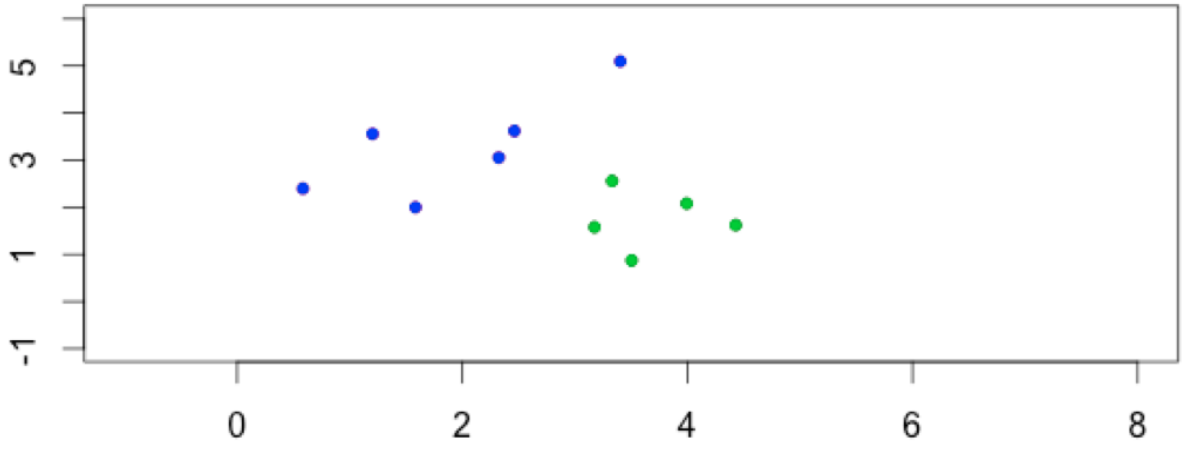


Fin :

- l'algorithme converge vers une partition stable

Arrêt :

- lorsque la partition reste la même, ou lorsque la variance intra-cluster ne décroit plus, ou lorsque le nombre maximal d'itérations est atteint.



Un premier k-means en 5 groupes

```
iris.scale.kmeans5 <- kmeans(mes.iris.scaled, center=5)
iris.scale.kmeans5
```

```
K-means clustering with 5 clusters of sizes 45, 27, 28, 22,

Cluster means:
  Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
1    0.4211111 -0.17288889    1.1286667   0.4673333
2    1.1714815  0.03896296    2.1605185   0.9562222
3   -0.3111905 -0.42161905    0.2027143   0.0292381
4   -1.1387879  0.06539394   -2.3443636  -0.9993333
5   -0.6004762  0.61052381   -2.2580000  -0.9171905

Clustering vector:
  [1] 5 4 4 4 5 5 4 5 4 4 5 4 4 4 5 5 5 5 5 5 5 5 4 5 4 4 5
[148] 1 1 1
```

```
iris.scale.kmeans5$cluster
```

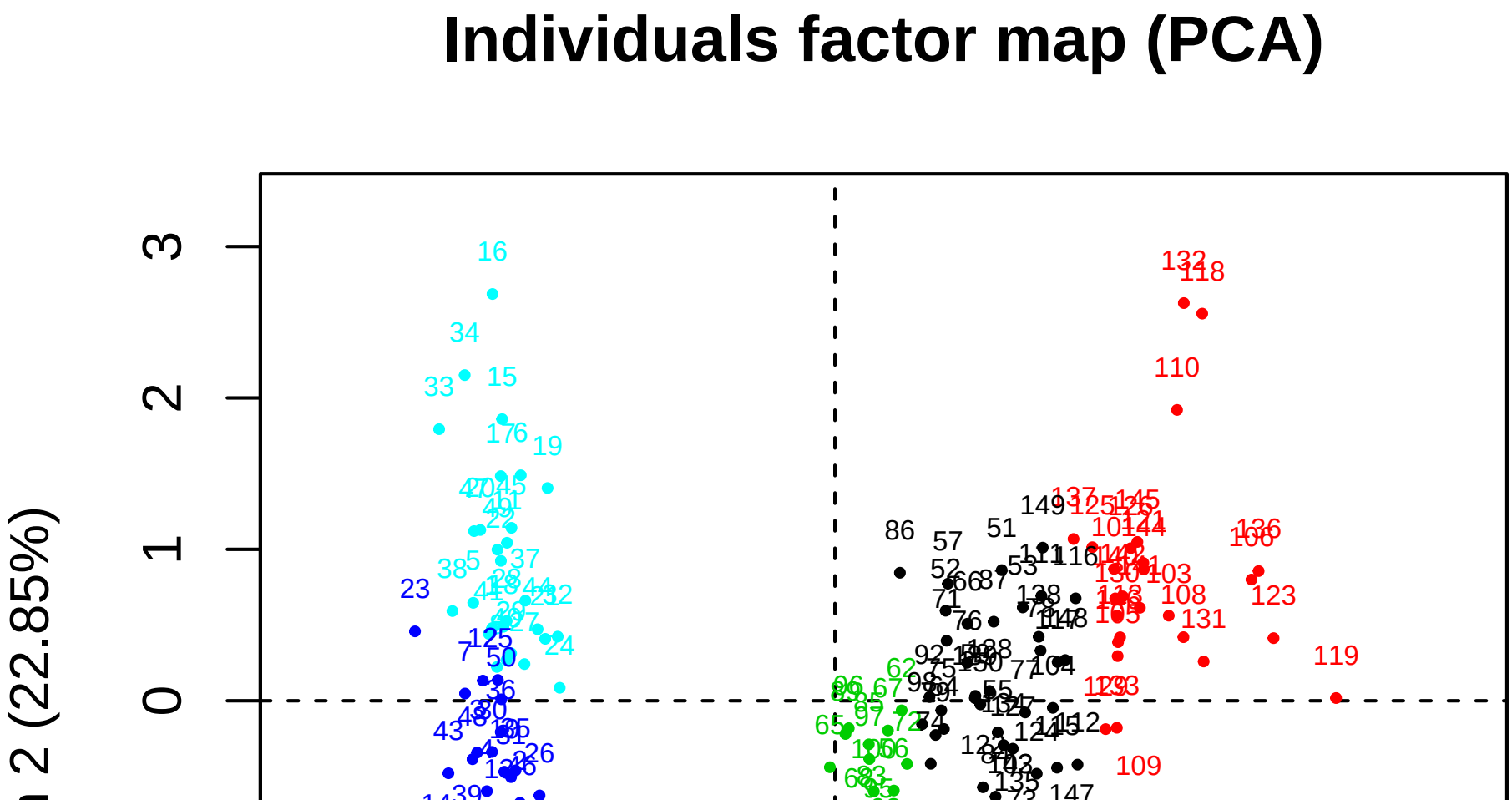
```
  [1] 5 4 4 4 5 5 4 5 4 4 5 4 4 4 5 5 5 5 5 5 5 5 4 5 4 4 5
[148] 1 1 1
```

```
table(iris.scale.kmeans5$cluster)
```

```
 1  2  3  4  5
45 27 28 22 28
```

Visualisation des clusters

```
plot(iris.scaled.acp, col.ind = iris.scale.kmeans5$cluster
```



Combien de clusters ?

Quand une partition est-elle bonne ?

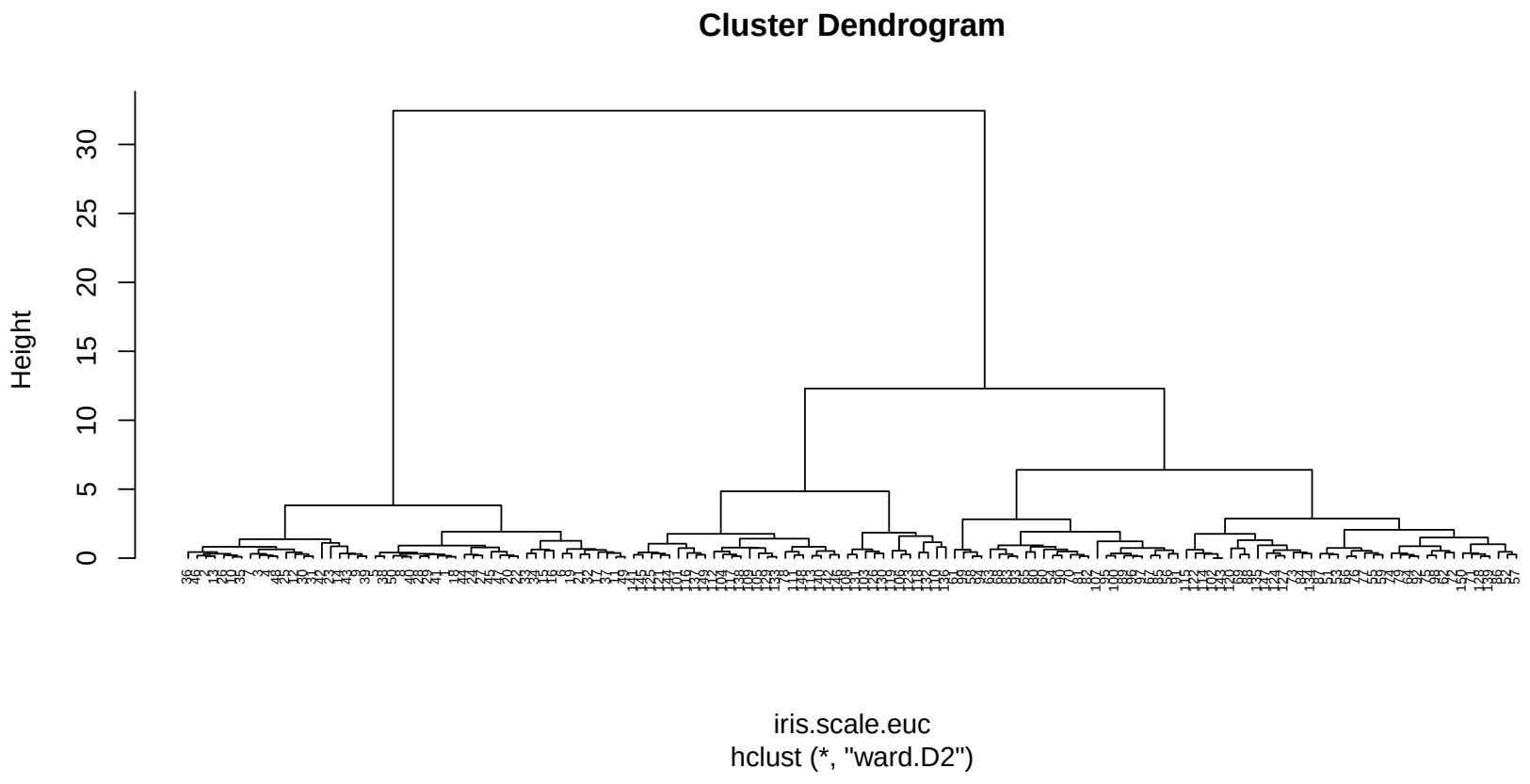
- si les individus d'un même cluster sont proches
  - homogénéité maximale à l'intérieur de chaque cluster
- si les individus de 2 clusters différents sont éloignés
  - hétérogénéité maximale entre chaque cluster

Classification hiérarchique

La coupure de l'arbre à un niveau donné construit une partition. la coupure doit se faire :

- après les agrégations correspondant à des valeurs peu élevées de l'indice
- avant les agrégations correspondant à des niveaux élevés de l'indice, qui dissocient les groupes bien distincts dans la population.

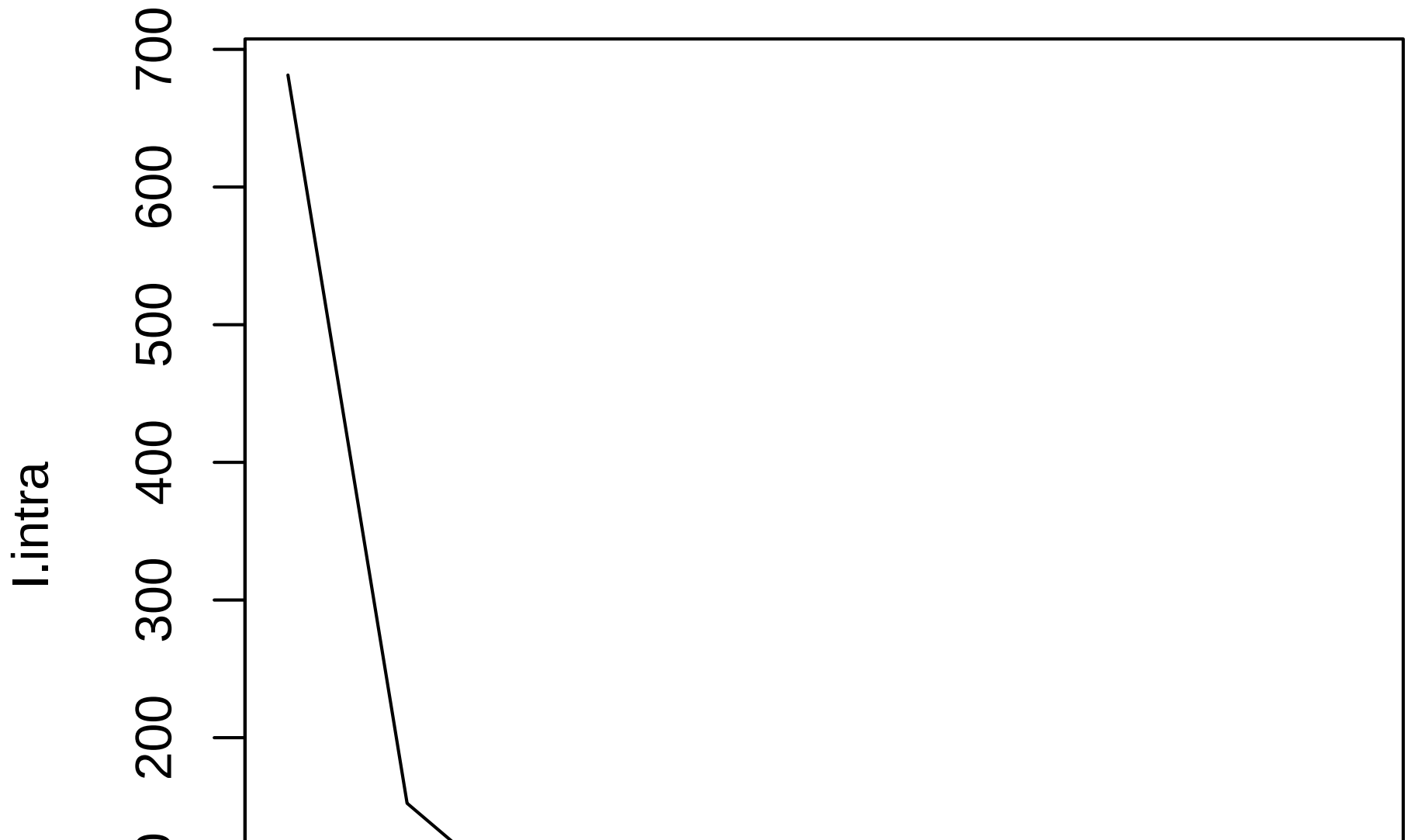
```
plot(iris.scale.hclust.ward, hang=-1, cex=0.5)
```



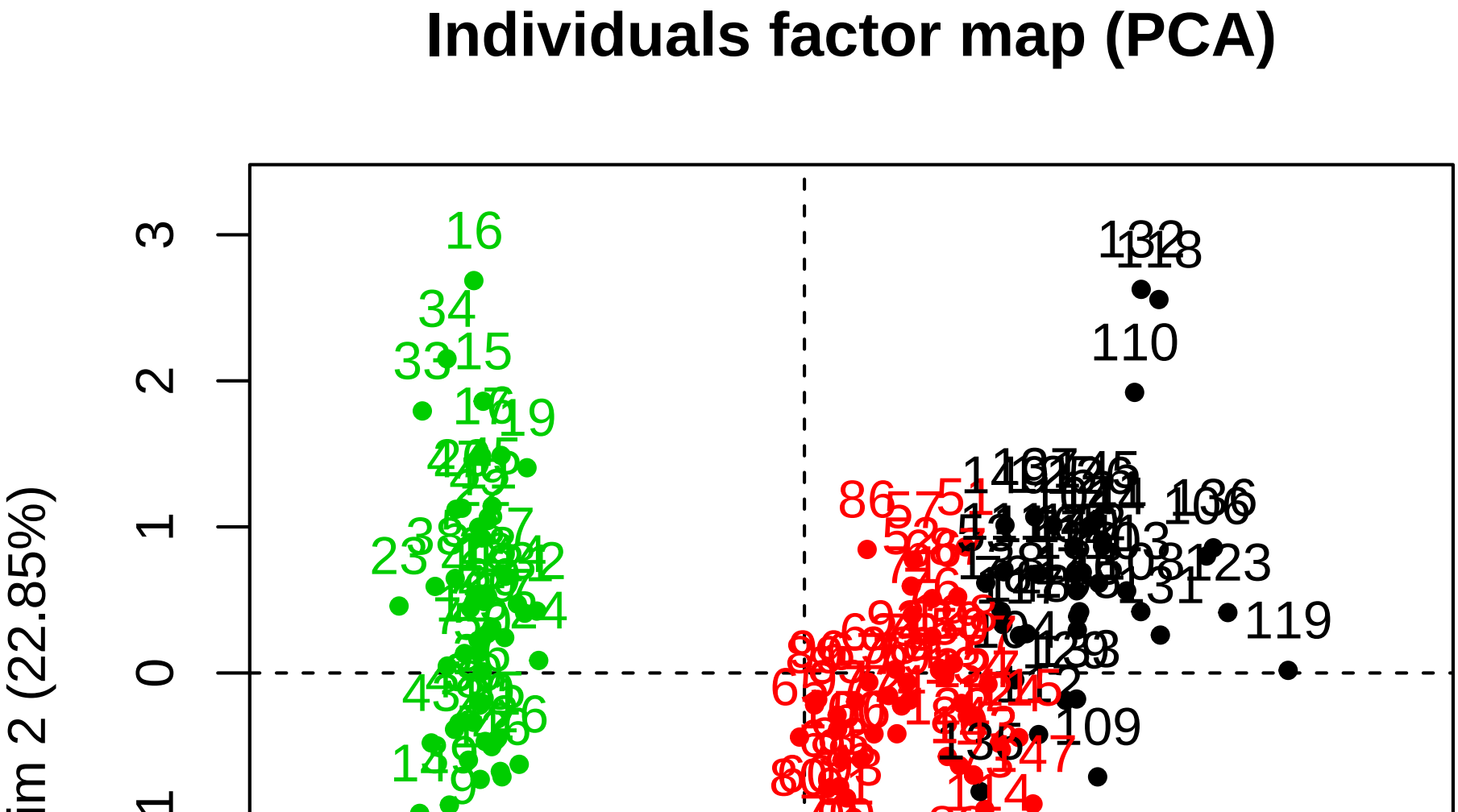
K-means

```
I.intra = numeric(length=10)
I.intra[1] = kmeans(mes.iris.scaled, centers=2)$totss
for (i in 2:10) {
  kmi <- kmeans(mes.iris.scaled, centers=i)
  I.intra[i] <- kmi$tot.withinss
}
```

```
plot(1:10, I.intra, type="l")
```

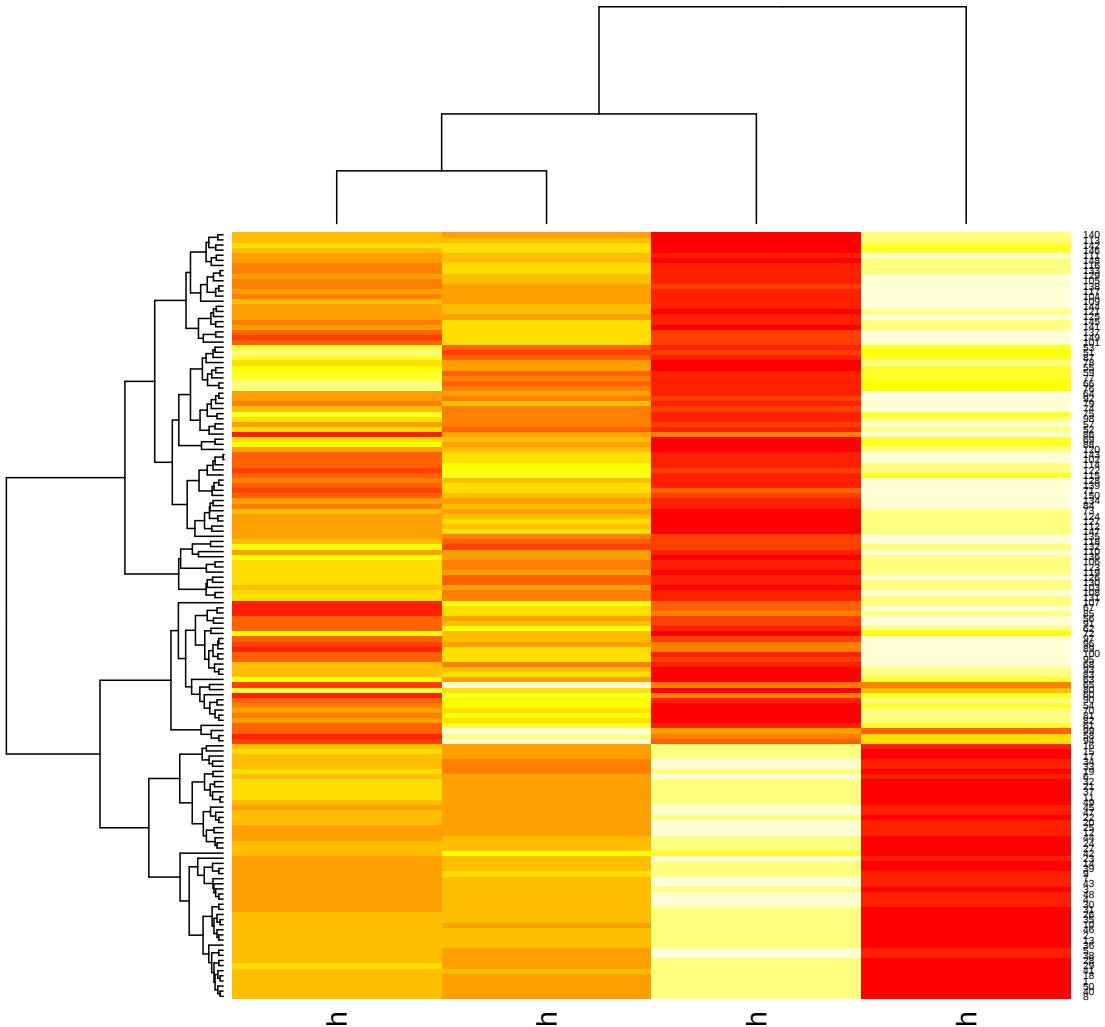


```
iris.scale.kmeans3 <- kmeans(mes.iris.scaled, center=3)
plot(iris.scaled.acp, col.ind=iris.scale.kmeans3$cluster, c
```

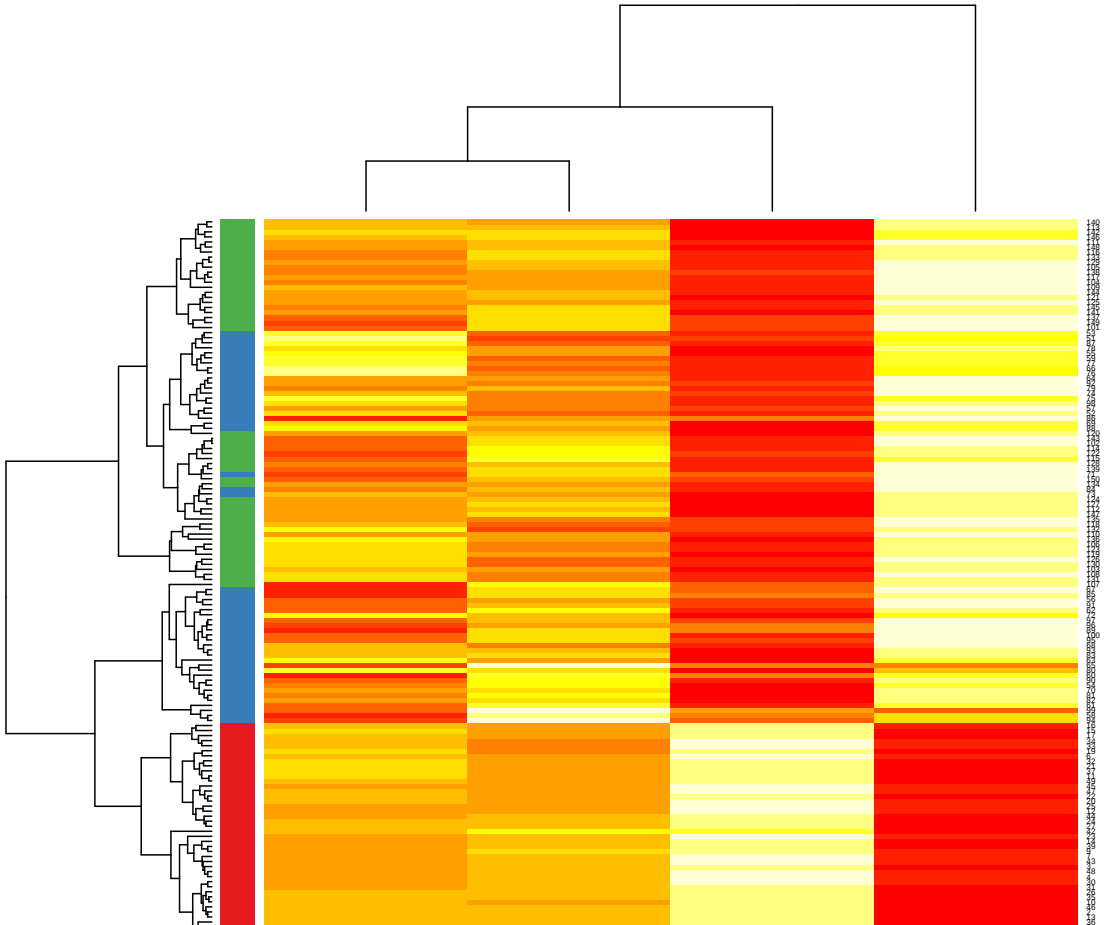


Heatmap

```
heatmap(mes.iris.scaled, margins = c(7,4), cexCol = 1.4, ce
```



```
my_group <- as.numeric(as.factor(substr(variete, 1 , 2)))
my_col <- brewer.pal(3, "Set1")[my_group]
heatmap(mes.iris.scaled, RowSideColors = my_col,
        margins = c(7,4), cexCol = 1.4, cexRow = 0.5)
```



Comparaison de clustering: Rand Index

Mesure de similarité entre deux clustering

à partir du nombre de fois que les classifications sont d'accord

$$R = \frac{m + s}{t}$$

- m=nombre de paires dans la même classe dans les deux classifications
- s=nombre de paires séparées dans les deux classifications
- t=nombre de paires totales

Comparaison de clustering: Adjusted Rand Index

$$ARI = \frac{RI - ExpectedRI}{MaxRI - ExpectedRI}$$

- ARI=RI normalisé
- Prend en compte la taille des classes
- ARI=1 pour classification identique
- ARI $\simeq 0$ pour classification aléatoire (peut être <0)
- Adapté pour nombre de classe différent entre les deux classifications et taille de classe différente

Comparaison des résultats des deux classifications

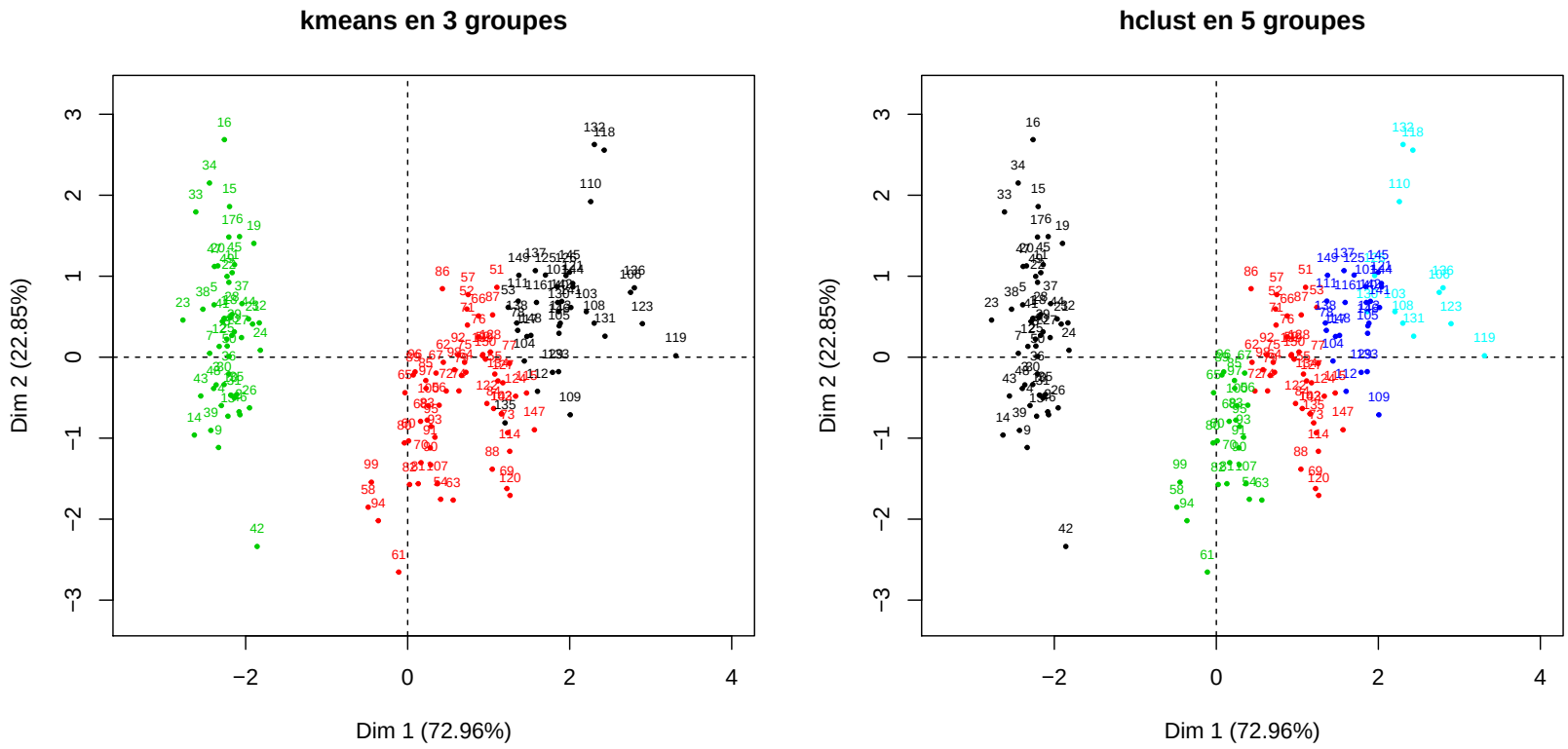
- par une table de confusion

```
cluster.kmeans3 <- iris.scale.kmeans3$cluster
cluster.hclust5 <- cutree(iris.scale.hclust.ward, k=5)
table(cluster.hclust5, cluster.kmeans3)
```

```
                cluster.kmeans3
cluster.hclust5  1  2  3
              1  0  0 50
              2  2 36  0
              3  0 26  0
              4 24  0  0
              5 12  0  0
```

- par une visualisation

```
par(mfrow=c(1,2))
plot(iris.scaled.acp, col.ind=cluster.kmeans3, choix="ind",
plot(iris.scaled.acp, col.ind=cluster.hclust5, choix="ind",
```




```
par(mfrow=c(1,1))
```

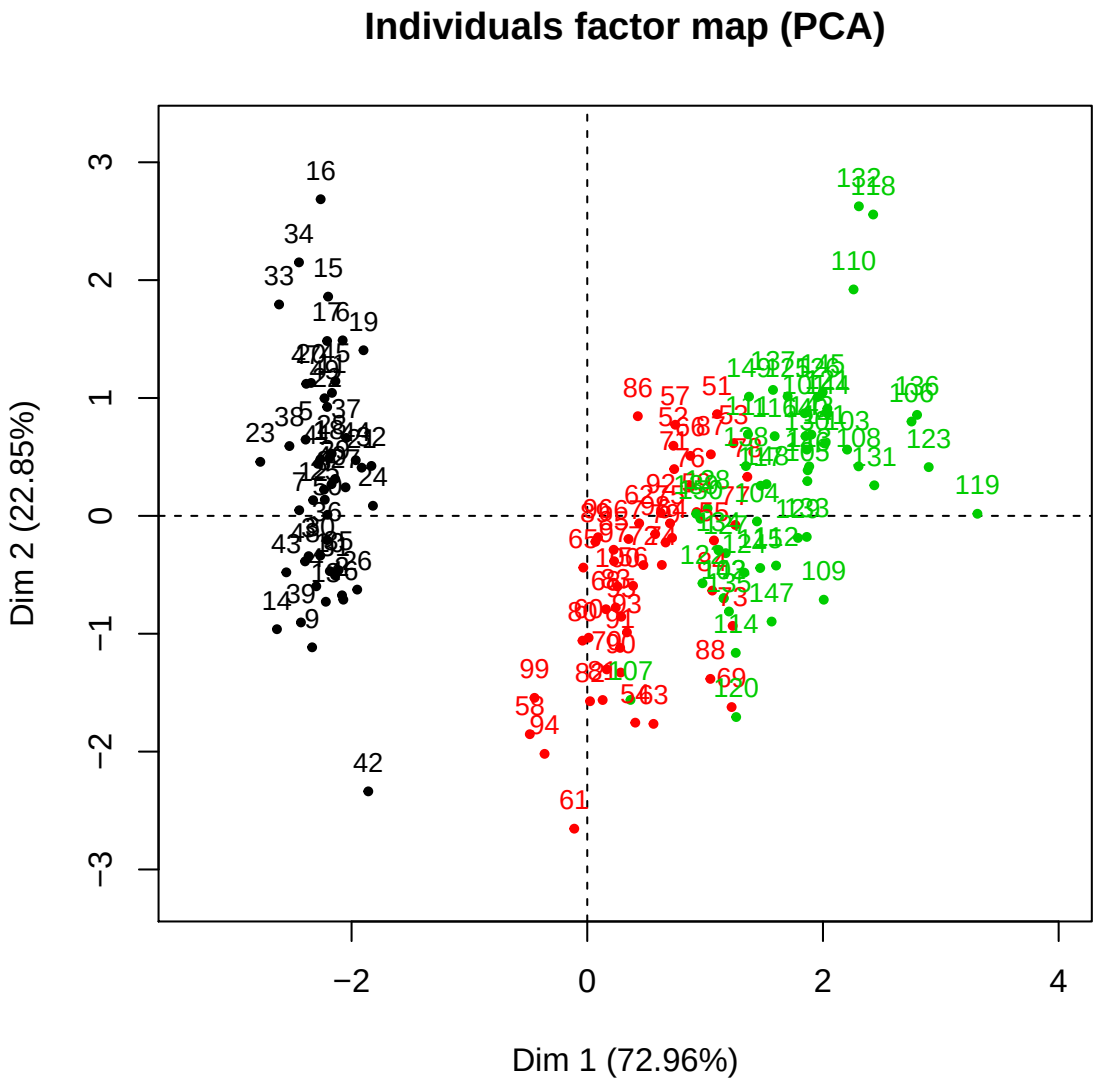
Comparaison avec la réalité

La réalité

```
variete <- iris[,5]
table(variete)
```

```
variete
    setosa versicolor  virginica
        50         50         50
```

```
plot(iris.scaled.acp, col.ind=variete, choix="ind", cex=0.8
```



Comparer k-means avec la réalité

```
conf.kmeans <- table(variete, cluster.kmeans3)
kable(conf.kmeans, caption = "Confusion table: 3-clusters k
```

Table 1: Confusion table: 3-clusters k-means versus actual class

	1	2	3
setosa	0	0	50
versicolor	2	48	0
virginica	36	14	0

Setosa vs others

Visualisation

```
variete2 <- rep("notSetosa", 150)
variete2[variete=="setosa"] <- "setosa"
variete2 = factor(variete2)
table(variete2)
```

```
variete2
notSetosa    setosa
      100        50
```

```
par(mfrow=c(1,2))
plot(iris.scaled.acp, col.ind=variete2, title="variétés obs
cluster.kmeans2 <- kmeans(mes.iris.scaled, center=2)$cluste
plot(iris.scaled.acp, col.ind=cluster.kmeans2, title="kmean
```

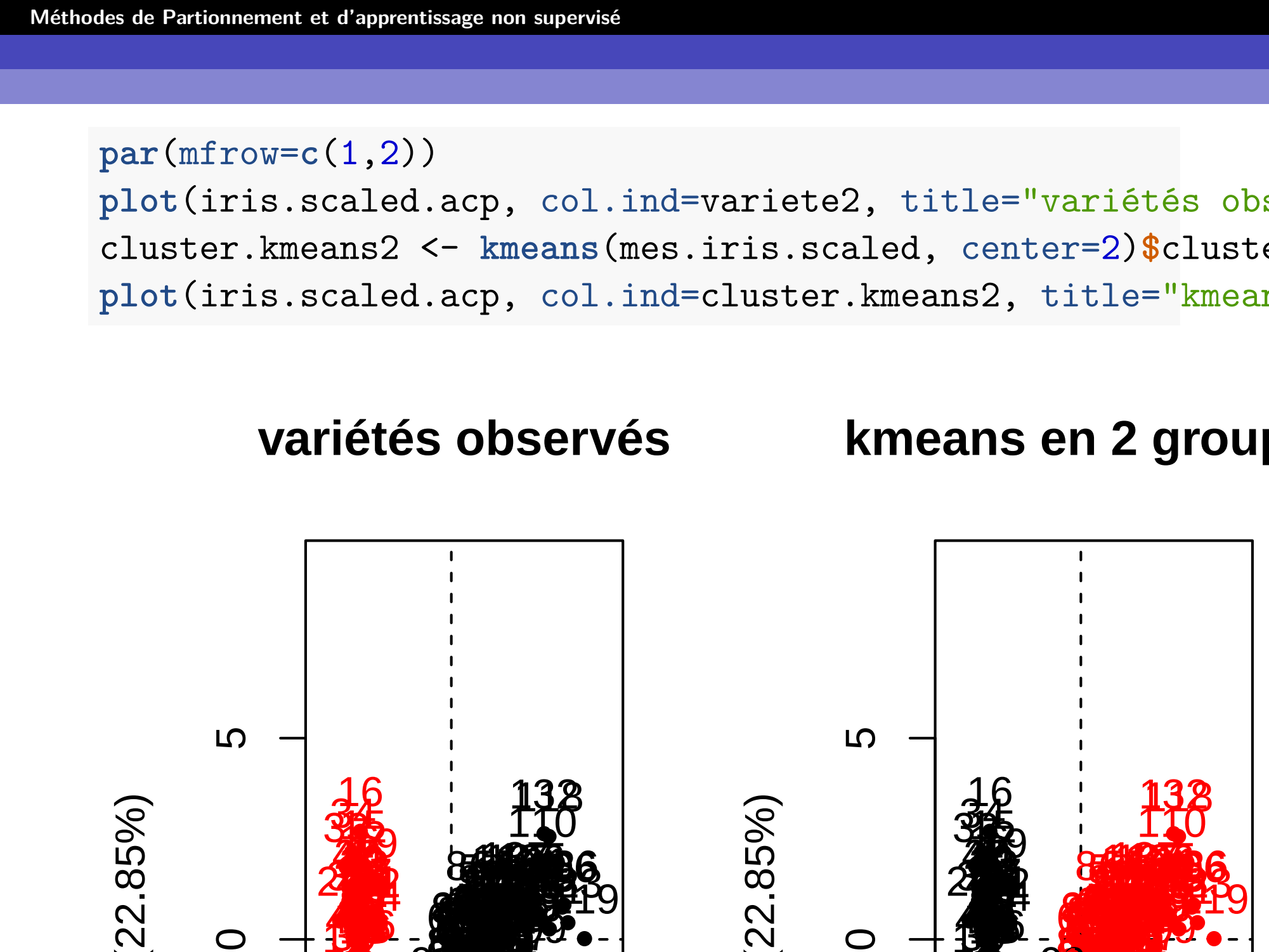


Table de confusion et calcul de performances

```
conf.kmeans <- table(variete2, cluster.kmeans2)
kable(conf.kmeans)
```

	1	2
notSetosa	3	97
setosa	50	0

- table de confusion, taux de bien prédits, spécificité, sensibilité, ...

```
TP <- conf.kmeans[1,1]
FP <- conf.kmeans[1,2]
FN <- conf.kmeans[2,1]
TN <- conf.kmeans[2,2]
P <- TP + FN              # nb positif dans la réalité
N <- TN + FP              # nb négatif dans la réalité
FPrate <- FP / N          # = false alarm rate
Spe <- TN / N         # = spécificité
Sens <- recall <- TPrate <- TP / P        # = hit rate ou re
PPV <- precision <- TP / (TP + FP)
accuracy <- (TP + TN) / (P + N)
F.measure <- 2 / (1/precision + 1/recall)
performance <- c(FPrate, TPrate, precision, recall, accurac
names(performance) <- c("FPrate", "TPrate", "precision", "r
```

```
kable(performance, digits=3)
```

	x
FPrate	1.000
TPrate	0.057
precision	0.030
recall	0.057
accuracy	0.020
F.measure	0.039
Spe	0.000
PPV	0.030

- rand index et adjusted rand index

```
clues::adjustedRand(as.numeric(variete2), cluster.kmeans2)
```

```
     Rand        HA        MA        FM   Jaccard
0.9605369 0.9204051 0.9208432 0.9639434 0.9302767
```

Versicolor vs !Versicolor

Visualisation

```
variete2 <- rep("notVersicolor", 150)
variete2[variete=="versicolor"] <- "versicolor"
variete2 = factor(variete2)
table(variete2)
```

```
variete2
notVersicolor    versicolor
          100            50
```

```
par(mfrow=c(1,2))
plot(iris.scaled.acp, col.ind=variete2)
cluster.kmeans2 <- kmeans(mes.iris.scaled, center=2)$cluste
plot(iris.scaled.acp, col.ind=cluster.kmeans2)
```

Table de confusion et calcul de performances

```
conf.kmeans <- table(variete2, cluster.kmeans2)
kable(conf.kmeans)
```

	1	2
notVersicolor	50	50
versicolor	3	47

```
TP <- conf.kmeans[1,1]
FP <- conf.kmeans[1,2]
FN <- conf.kmeans[2,1]
TN <- conf.kmeans[2,2]
P <- TP + FN              # nb positif dans la réalité
N <- TN + FP              # nb négatif dans la réalité
FPrate <- FP / N          # = false alarm rate
Spe <- TN / N         # = spécificité
Sens <- recall <- TPrate <- TP / P        # = hit rate ou re
```

```
kable(performance, digits=3)
```

	x
FPrate	0.515
TPrate	0.943
precision	0.500
recall	0.943
accuracy	0.647
F.measure	0.654
Spe	0.485
PPV	0.500

```
clues::adjustedRand(as.numeric(variete2), cluster.kmeans2)
```

```
      Rand          HA          MA          FM     Jaccard
0.53995526 0.07211421 0.07722223 0.57895580 0.40737752
```

Contact: anne.badel@univ-paris-diderot.fr