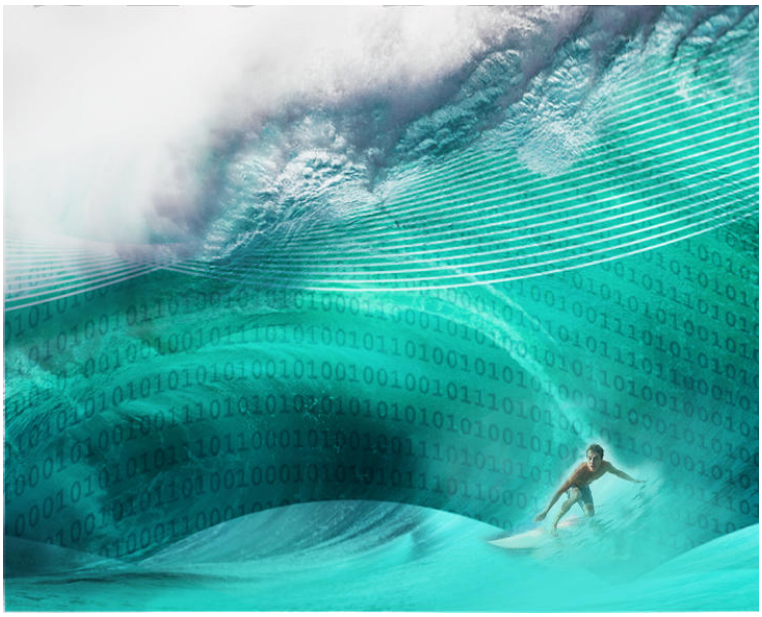
Certificat Science des Données – Module de Sensibilisation

Introduction à la Science des Données

Philippe Besse & Béatrice Laurent

Université de Toulouse -- INSA



Introduction

1 Découvrir la Science des Données

Le terme de *data scientist* à été "inventé" par Dhanurjay "DJ" Patil (LinkedIn) [1] et Jeff Hammerbacher (Facebook) en cherchant comment caractériser les métiers des données pour afficher des offres d'emploi dans leur entreprise : *Analyste, ça fait trop Wall Street ; statisticien, ça agace les économistes ; chercheur scientifique, ça fait trop académique. Pourquoi pas "data scientist" ?*

Une "définition" attribuée à J. Wills (Cloudera) est souvent reprise : *Data scientist (n) : Person who is better at statistics than any software engineer and better at software than any statistician*

La Science des Données n'est pas une nouvelle science créée *ex nihilo* mais l'association de compétences (informatique, mathématiques, métiers) résultat d'une longue évolution parallèle à celle des moyens de calcul et des volumes de données concernés. Cette évolution est passée par l'*analyse des données* en France, l'*Exploratory Data Analysis* ou EDA au USA, le *data mining* ou fouille des données puis la *Bioinformatique*.

En voici un bref résumé nécessairement schématique avec une chronologie linéaire :

1.1 De la Statistique à la *Science des Données*

Avant d'entrer dans le vif du sujet, de savoir ce que peut la Science des Données, il est bon, en introduction, de rappeler d'où elle vient. La Science des Données est une appellation récente, datant de 2008, mais elle n'est pas née de rien. Cette pratique est la conséquence d'une longue évolution associée à la croissance des moyens de stockage des données et à celle de la puissance de calcul. Cette progression tant technologique que méthodologique et algorithmique accompagne une croissance exponentielle des masses de données analysées au sein d'une même étude : de façon indicative, un facteur 10 tous les 10 ans.

1930-70 h-Octets *Statistique inférentielle.* A partir des années 30 c'est le développement, suivant les travaux de Fisher, de la Statistique inférentielle. Une hypothèse est posée, une expérience planifiée, une statistique de test calculée, test de Student, ANOVA ; la statistique est comparée à une valeur seuil. L'hypothèse est acceptée ou rejetée avec un risque α contrôlé. Il s'agit, par exemple, de montrer qu'une molécule est significativement active, qu'une semence est significativement plus productive... De plus, la décision prise sur l'échantillon peut être inférée à la population entière. Ce cours ne s'intéresse pas à cette Statistique inférentielle et aux pratiques de test associées.

1970s kO Analyse des données et *exploratory data analysis.* Les années 70 connaissent une remise en cause de ces modèles statistiques très contraignants car basés sur des hypothèses de nature probabiliste souvent diffi-

1. Entretien publié dans un article de l'Obs.

ciles à vérifier voir même contredites. La plus grande diffusion des ordinateurs a permis une approche exploratoire multidimensionnelle de l'analyse des données, notamment avec l'Analyse en Composantes Principales (ACP), basée sur des considérations géométriques au lieu de probabilistes.

1980s MO *IA, Réseaux de neurones, Statistique fonctionnelle.* Les années 80 connaissent des développements plus méthodologiques avec la possibilité d'estimer des modèles statistiques non plus paramétriques mais fonctionnels, c'est-à-dire de grande dimension, et d'apprendre des réseaux de neurones relativement complexes. C'est l'apparition de l'algorithme de rétropropagation du gradient. L'intelligence artificielle de cette période abandonne alors les systèmes experts, ou approche symbolique, au profit, temporaire, des réseaux de neurones ou approche connexionniste.

1990s GO *Data mining et données pré-acquises.* Dans les années 90, la fouille de données, ou *data mining*, fait son apparition avec principalement des applications en marketing quantitatif dans le tertiaire : banque, assurance, vente par correspondance. Ces grandes entreprises disposent déjà de bases de données clients conséquentes à des fins comptables : des milliers de clients décrits par des dizaines de variables. L'objectif est de valoriser ces données en les utilisant pour améliorer la gestion de la relation client ou GRC ; scores d'appétences pour des campagnes publicitaires, risque de crédit.

Pour ce faire, des suites logicielles associant des requêtes d'extraction dans des bases de données, des outils exploratoires et de classification non supervisée, des modèles statistiques comme la régression logistique ou des arbres de décisions, les premiers algorithmes d'apprentissage supervisé comme les réseaux de neurones...

Toutes ces capacités de gestion, traitement et analyse des données intégrés dans une même suite logicielle devient le *data mining*.

En fait, deux choses sont nouvelles : l'intégration dans une même suite logicielle et surtout le fait que les données ne soient plus issues d'une planification expérimentale comme en Statistique inférentielle. Les données sont *préalables* à l'analyse, acquises pour d'autres finalités, par exemple comptables, et il faut faire avec. C'est, pour le statisticien, devenu un prospecteur de données, un premier *changement de paradigme* : ne plus pouvoir planifier l'expérience.

2000s TO *Apprentissage statistique, bioinformatique :* $p >> n$. Le début du siècle a connu de profondes ruptures dans les biotechnologies à la suite du premier séquençage du génome. Pour chaque échantillon biologique, ce sont maintenant des milliers voire des millions d'informations qui sont observables. Des occurrences de millions de mutations possibles sur le génome, des expressions de dizaines de milliers de gènes, des expressions de protéines, de métabolites... En conséquence, les ensembles de données à étudier présentent beaucoup plus de colonnes, variables ou *features* que de lignes, échantillons ou *instances* ; p le nombre de variables est beau-

coup plus grand que n la taille de l'échantillon. Ceci crée une situation d'indétermination qui a poussé à des développements méthodologiques et algorithmiques originaux : modèles et algorithmes parcimonieux ou *sparse*.

C'est un deuxième *changement de paradigme* pour le statisticien devenu bioinformaticien.

A cette occasion apparaissent de nouveau algorithmes dits d'apprentissage statistique (*statistical learning*) sous-ensemble de l'apprentissage automatique lui même sous-ensemble de l'intelligence artificielle. Ce sont ces algorithmes d'apprentissage statistique : *boosting, support vector machine, random forest, extrem gradient boosting* et maintenant le *deep learning*, qui connaissent un grand succès et provoquent en retour le succès ou plutôt l'énorme battage médiatique de l'intelligence artificielle.

2010s PO *Grosses Data* p et n très grands, *deep learning*. Plus récemment, avec l'avènement des réseaux sociaux, le succès planétaire de Google et des autres GAFAM, le volume des données, c'est-à-dire, le nombre de clients, d'échantillons, et la taille des bases de données explosent. La taille de ces données ainsi que la puissance de calcul autorisent l'entraînement d'algorithmes excessivement complexes avec des millions de paramètres ou poids à estimer. Ceci conduit à des succès retentissants et médiatisés pour la reconnaissance d'images, la traduction automatique ou encore le jeu de go.

Le troisième *changement de paradigme* concerne à la fois statisticiens, informaticiens, et mathématiciens, devenus *data scientists*, car le traitement de ces données massives nécessite, certes de la puissance calcul sur des systèmes de fichiers distribués comme *Hadoop*, mais aussi de nouvelles approches pour la résolution des problèmes d'optimisation afférents.

Cet historique met en exergue trois changements de paradigme méthodologique permis par des disruptions technologiques mais, fondamentalement, les nouvelles appellations *big data, data science, deep learning*, intelligence artificielle, tiennent plus du battage médiatique que de la nécessité d'identifier une *nouvelle science*. La science des données n'est pas une nouvelle science. Un *data scientist* c'est d'abord une équipe pluridisciplinaire associant compétences en Statistique, Informatique et Mathématiques. Mais, mêmes assemblées, toutes

ces compétences ne peuvent rien avec des données pourries.

Méfiez vous du battage médiatique et surtout des faux espoirs qu'il fait miroiter.

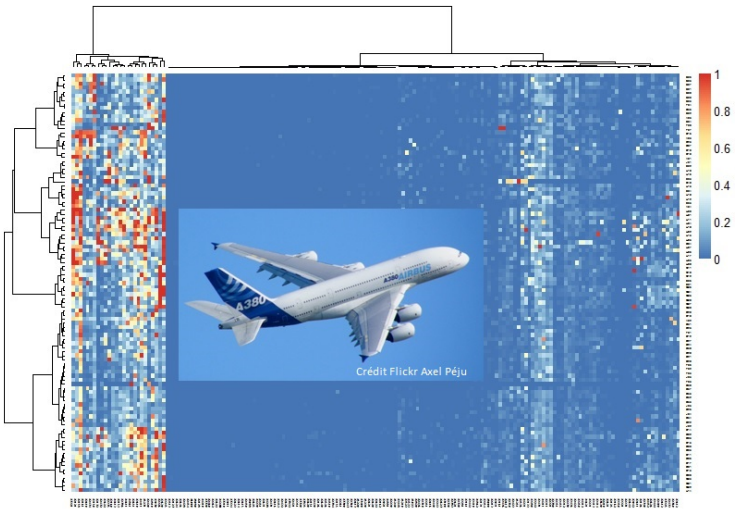
1.2 Algorithme et décision automatique

Voici quelques exemples illustratifs d'applications au quotidien de la science des données ou, plus précisément, d'algorithmes d'apprentissage automatique. Compte tenu de la *datafication* massive de notre environnement, c'est-à-dire de la numérisation et de l'archivage (*big data*) de nos activités sur internet ou de notre géolocatisation, ces algorithmes prennent une place prépondérante dans les circuits automatiques de décision sous l'appellation très médiatisée d'*Intelligence Artificielle*.

— Le choix d'un traitement médical, d'une action commerciale, d'une action de maintenance préventive, d'accorder ou non un crédit, de surveiller un individu... toutes les décisions qui en découlent sont la conséquence d'une prévision.

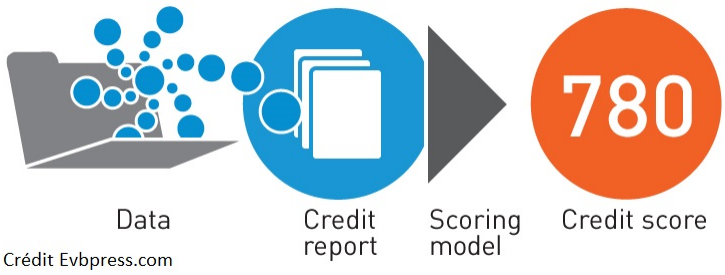
— La prévision du risque ou de la probabilité de diagnostic d'une maladie, le risque de rupture d'un contrat par un client, qui est le score d'attrition ou *churn*, le risque de défaillance d'un système mécanique, de défaut de paiement d'un client ou encore de radicalisation d'un individu... Les

exemples sont très nombreux et envahissent notre quotidien.



Le graphique ci-dessus est une visualisation avant analyse prédictive d'un recueil durant 6 mois de 700 000 messages d'incidents sur une flotte de 139 appareils. En ligne les appareils ordonnés par une classification ascendante hiérarchique, en colonne les types d'incidents également ordonnés. La fausse couleur illustre un taux d'incidents.

— Ces prévisions de risques ou scores, par exemple de crédit, sont produits par des algorithmes d'apprentissage supervisé, après entraînement sur une base de données où sont connus le comportement bancaire des clients et l'observation de bon remboursement ou non d'un emprunt.
Le graphique ci-dessous illustre la démarche d'estimation puis prévision d'un risque de crédit à partir de l'enregistrent de l'historique des comportements des clients d'une banque.



2 Identifier les Étapes de la Science des Données

Pour introduire plus précisément la science des données, décrivons schématiquement, les deux principales phases d'une démarche d'apprentissage automatique supervisé.

2.1 Exploration des données ou *data munging*

La première phase constitue le prétraitement des données ou *data munging*, de l'extraction à l'*exploration* des données.

- Acquérir, archiver, extraire mettre en forme des données sont des tâches de *data management* en lien avec un gestionnaire de base de données incluant un langage de requête comme SQL ou *not only SQL* associé au gestionnaire de données distribuées *Hadoop*.
- Il est important ensuite de s'assurer de l'intégrité des données, de leur cohérence. Cette étape exploratoire avec des outils élémentaires est un préalable important pour détecter des valeurs atypiques, éventuellement des erreurs, gérer les données manquantes par suppression des observations ou imputation de ces valeurs.
  Cette étape permet également d'analyser la structure des données ; leurs sources de variabilité et si possible de la représenter (Analyse en Composantes Principales ou ACP). Ces premiers résultats permettent d'apporter des réponses aux questions : faut-il transformer les données, calculer de nouvelles variables, caractéristiques ou *features* ?
- *Garbage in garbage out*. Même rudimentaires d'un point de vue méthodologique, ces étapes occupent la majeure partie du temps de l'analyse ; environ 80%. Enfin insistons lourdement : la qualité des données recueillies, leur représentativité par rapport à la question posée, sont fondamentales afin d'obtenir des prévisions robustes, généralisables à d'autre données, c'est-à-dire, d'un point de vue statistique, non biaisées et de faible variance. La qualité des données est essentielle ; aussi performants que soient les algorithmes d'apprentissage, ils ne peuvent rien avec des données pourries.
  Cette étape nécessite, pour être efficace et pertinente, des compétences et savoir faire en Statistique exploratoire multidimensionnelle.

2.2 Apprentissage supervisé

Une fois qu'une base de données d'entraînement fiable et représentative a été constituée, la phase d'apprentissage proprement dite est généralement bien définie et suit schématiquement la structure suivante.

1. *Tirage aléatoire des échantillons d'apprentissage et de test.*
   Commencer par construire, de façon aléatoire, deux sous échantillons, le premier d'apprentissage, le second de test. Le premier sert à estimer

les modèles ou faire apprendre les algorithmes, le deuxième n'est utilisé que pour en *prédire la variable cible* Y afin, comme les vraies valeurs ou les vraies classes de Y sont connues, de pouvoir estimer sans biais l'erreur de prévision. Il faut en effet distinguer l'erreur d'ajustement du modèle calculée sur l'échantillon d'apprentissage, erreur généralement biaisée car optimiste, de l'estimation de l'erreur de prévision calculée sur l'échantillon test, pas biaisée car ces observations n'ont pas participé à l'estimation des paramètres du modèle ou à l'entraînement de l'algorithme.

2. **Pour** chaque modèle ou algorithme considéré :
   Itérer ensuite les étapes suivantes pour chaque famille d'algorithme. Citons quelques possibilités : régression, SVM, réseaux de neurones, *boosting, random forest*, des plus utilisés parmi une grande farandole d'algorithmes disponibles.
   (a) Première étape : estimation du modèle en fonction des valeurs de certains hyper-paramètres qui contrôlent la complexité du modèle, à savoir sa flexibilité ou capacité à s'ajuster finement aux données ;
   (b) Deuxième étape : optimiser, généralement en minimisant une estimation de l'erreur de prévision par validation croisée, ce ou ces hyper-paramètres : le nombre de variables dans un modèle, le nombre de feuilles dans un arbre, le nombre de neurones d'un réseau, la pénalisation des SVM...
   (c) Troisième étape : calculer la prévision de l'échantillon test pour le modèle "optimal" courant afin,
   (d) Quatrième étape, d'estimer l'erreur de prévision.
3. On obtient ainsi une erreur par méthode d'apprentissage considérée ; il suffit alors de choisir la meilleure méthode ou le meilleur algorithme : celui qui minimise l'erreur de prévision mais éventuellement en tenant compte de la facilité d'interpréter le modèle. C'est généralement le cas des modèles de régression ou d'arbres de décision, cela ne l'est plus pour les SVM, neurones et autres *boosting* ou *random forest*.
   Attention, ce cours consacré à un cas d'usage ne propose pas une étude exhaustive de l'ensemble des algorithmes d'apprentissage ; seuls ceux nécessaires à la réalisation des objectifs sont brièvement décrits. Une initiation systématique aux autres algorithmes est proposée dans les tutoriels du dépôt `github.com/wikistat`.

3 Contenu du cours

Ce cours de sensibilisation à la Science des (grosses) Données est divisée en deux grandes parties.

3.1 Exploration multidimensionnelle

Cette section introduit la principales méthodes de représentation et réduction de dimension : l'Analyse en Composantes Principales (ACP) ainsi qu'un de ses cas particuliers : l'ananlyse factorielle discriminante (AFD). Ses propriétés géométriques et statistiques sont illustrées sur un exemple jouet avant d'être appliquées à des données réelles complexes et plus volumineuses. Pour compléter ces méthodes de représentation ou réduction de dimension, un algorithme de classification non-supervisée par ré-allocation dynamique (*k-means*) est introduit et appliqué à un problème de segmentation d'images.

3.2 Introduction à l'Apprentissage

Les principes de l'apprentissage automatique sont introduits à l'aide de méthodes statistiques qui ont fait leurs preuves depuis de nombreuses années. Ces modèles relativement rudimentaires, car linéaires, pour la régression d'une variable quantitative ou la classification d'une variable binaire, permettent d'exposer simplement les problèmes d'erreur de prévision et de sélection de modèle afin d'éviter les pièges du sur-apprentissage. Un autre algorithme, non linéaire cette fois, dit des k plus proches voisins est également introduit. Tous ces algorithmes sont illustrés sur des jeux de données complexes.

Référence

Anguita D., Ghio A., Oneto L., Parra X., Reyes-Ortiz J.L. (2013). A Public Domain Dataset for Human Activity Recognition Using Smartphones, *ESANN 2013 proceedings, European Symposium on Artificial Neural Networks, Computational Intelligence and Machine Learning*, 437-442.