Licence d'Informatique 2
Analyse de Données Utilisateur (C5–160412)
TD 4 – Apprentissage Non Supervisé (*Clustering*)

Carl FRÉLICOT – Dpt Info / Lab MIA

Un tableau de données consiste en n individus pour lesquels on a observé p variables ; si elles sont quantitatives, il correspond à un nuage de n points dans un espace de dimension p. À la notion de *proximité* entre deux individus du tableau correspond naturellement la notion de *distance* entre deux points dans l'espace. Alors, on peut facilement obtenir un tableau de distances entre individus, symétrique, de taille $n \times n$, dont les valeurs sur la diagonale sont nulles. Parfois, les données ne sont pas directement accessibles et seul un tableau de distances (ou de *similarités*) est à disposition de l'analyste.
L'objectif des méthodes d'apprentissage non supervisé (*clustering*), appelée aussi *classification automatique*, est de déterminer si les données possèdent une structure de *groupes* (ou *clusters*) de sorte qu'on puisse leur associer une variable indicatrice[1]. On cherche donc une partition des données telle que deux points d'un même groupe sont plus *proches* que deux points de groupes différents. Certaines méthodes nécessitent une mesure de distance D entre groupes en plus d'une distance d entre individus.

1. Distances entre individus

(a) Considérons deux points en dimension deux $x = (1, 4)$ et $y = (3, 5)$. Que vaut la distance $d(x, y)$ que vous connaissez ?
(b) À votre avis, pourquoi utilise-t-on plutôt $d^2(x, y)$?
(c) L'extension à plus de deux dimensions est immédiate. Calculez la distance entre $x = (0, 1, 4, 5)$ et $y = (1, 3, 5, 0)$ par produit scalaire. Cette distance est appelée *distance euclidienne usuelle* ; il en existe beaucoup d'autres...
(d) Dans le cas de données binaires, plusieurs distances usuelles existent :
- distance de *Jaccard* $d_J = 1 - \frac{b_{11}}{b - b_{00}}$ où b est le nombre de bits, b_{11} (b_{00}) est le nombre de 1 (0) en commun
- distance de *Hamming* $d_H = \frac{b_{10}+b_{01}}{b}$, c'est à dire le % de 0 et de 1 qui différent

Calculez ces distances entre $x = 0111000010$ et $y = 0101100011$.
(e) L'extension aux données qualitatives est naturelle. Soient par ex. deux séquences d'ADN dont on a extrait des morceaux $x = CTTAGGATAG$ et $y = GTATGGATTG$, où chaque lettre symbolise une *base* (A,C,G,T). Calculez la distance de Hamming entre x et y.

2. Méthodes de Partitionnement

La recherche de la meilleure (au sens d'un critère J) partition en m groupes d'un ensemble de n objets ne peut pas se faire de manière exhaustive car le nombre de possibilités est hautement combinatoire. Ci-contre sont donnés des exemples du nombre S[a] de partitions différentes en m groupes que l'on peut former à partir d'un ensemble de n objets.

m	n	$S(m,n)$
2	4	7
2	10	511
5	10	42 535
2	30	536 870 911
3	150	$> 6 \times 10^{70}$

(a) Calculez ce nombre pour $m = 2$ et $n = 4$.

[a] $S(m,n) = \frac{1}{m!}\sum_{i=1}^{m}(-1)^{m-i}\binom{i}{m} i^n$; si m et n sont grands, on peut l'approximer par $S(m,n) \simeq \frac{m^n}{m!}$

Notations :
- un tableau de données X de taille (n, p)
- une indicatrice de groupe Y de taille $(n, 1)$ telle que $Y_i = j$ si x_i est associé au groupe j, $j \in \{1, 2, ..., m\}$
- un tableau de m représentants V, par exemple $V = [\overline{x}_1; \overline{x}_2; ...; \overline{x}_m]$ de taille (m, p)

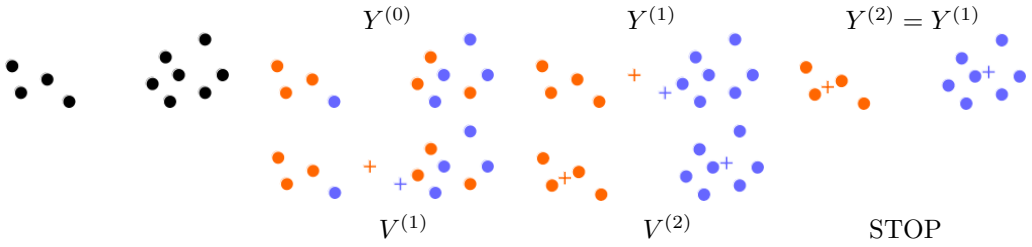
Le problème de *clustering* consiste donc, à partir de X, à déterminer (Y, V) qui optimisent un critère $J_m(Y, V)$. L'algorithme le plus basique est l'algorithme des *centres mobiles* (*k-means*) qui minimise l'*inertie intra-groupes* de la partition : $J_m(Y, V) = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{m}\sum_{x_i:Y_i=j} d^2(x_i, \overline{x}_j)$. Étant donné un tableau de données X, une distance d choisie et un nombre de groupe m fixé par l'utilisateur, il consiste à alterner deux phases :

(0) initialiser $V^{(0)} = \{\overline{x}_1, \overline{x}_2, ..., \overline{x}_m\}$ ou bien la partition $Y^{(0)}$,
(1) à l'itération t et alors intervertir les deux phases
- $Y^{(t)} = argmin_Y J_m(Y, V^{(t-1)})$
- $V^{(t)} = argmin_V J_m(Y^{(t)}, V)$

jusqu'à stabilité convergence vers un minimum local

[1] l'indicatrice résultat pourra ensuite être utilisée comme une variable catégorielle dont les modalités sont l'appartenance aux groupes obtenus par apprentissage automatique, et pourra se substituer à celle donnée par un expert du domaine, à des fins de prédiction (*apprentissage supervisé*)

Exemple d'exécution :



Exercice 1

Soit le tableau de données X ci-contre au sein duquel on souhaite découvrir $m = 2$ groupes. On vous propose plusieurs exécutions de l'algorithme *k-means* dont les résultats sont à compléter. Vous pourrez vider les tableaux ci-dessous et faire les calculs permettant de réaliser les exécutions complètes.

	Ind. / Var.	X1	X2
1	x	0.0	1.0
2	y	1.0	4.0
3	z	4.0	5.0
4	t	5.0	0.0

(a) $Y^{(0)} = [1, 2, 1, 2] \quad \rightarrow \quad V^{(1)} = [\overline{x}_1 = (2, 3), \overline{x}_2 = (\quad , \quad)] \quad \rightarrow$

$d^2(\overline{x}_j, x_i)$	x	y	z	t
$\overline{x}_1$	8		8	18
$\overline{x}_2$	10		10	8
$Y^{(1)}$	1		1	2

$\rightarrow$

$V^{(2)} = [\overline{x}_1 = (\quad , \quad), \overline{x}_2 = (5, 0)] \quad \rightarrow$

$d^2(\overline{x}_j, x_i)$	x	y	z	t
$\overline{x}_1$	8.22	0.89	8.22	22.22
$\overline{x}_2$	26	32	26	
$Y^{(2)}$	1	1	1	

$\rightarrow$ STOP

(a') $Y^{(0)} = [1, 2, 1, 1] \quad \rightarrow \quad V^{(1)} = [\overline{x}_1 = (3, 2), \overline{x}_2 = (\quad , \quad)] \quad \rightarrow$

$d^2(\overline{x}_j, x_i)$	x	y	z	t
$\overline{x}_1$	10	8	10	
$\overline{x}_2$	10	0	10	
$Y^{(1)}$ *[tie]*	2	2	1	

$\rightarrow$

$V^{(2)} = [\overline{x}_1 = (4.5, 2.5), \overline{x}_2 = (0.5, 2.5)] \quad \rightarrow$

$d^2(\overline{x}_j, x_i)$	x	y	z	t
$\overline{x}_1$	22.5	14.5	6.5	
$\overline{x}_2$	2.5	2.5	18.5	26.5
$Y^{(1)}$	2	2	1	

$\rightarrow$ STOP

1-1) Les partitions finales obtenues à partir de (a) et (a') sont différentes. Qu'en pensez-vous ? Vous pourrez dessiner le nuage de points...

1-2) Le tableau ci-contre décrit toutes les partitions possibles en termes de leur inertie :
- intra-groupes $I_W = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{m} \sum_{x_i : Y_i = j} d^2(x_i, \overline{x}_j)$
- inter-groupes $I_B = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{m} n_j d^2(\overline{x}, \overline{x}_j)$
- totale $I_T = I_W + I_B = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} d^2(x_i, \overline{x})$

Complétez-le, par déduction.

Partition	*intra*	*inter*	*totale*
$Y_1 = [1, 2, 2, 2]$	5.67	2.83	8.5
$Y_2 = [2, 1, 2, 2]$	7		
$Y_3 = [2, 2, 1, 2]$	5.67	2.83	
$Y_4 = [2, 2, 2, 1]$	4.33	4.17	
$Y_5 = [1, 1, 2, 2]$		4	
$Y_6 = [1, 2, 1, 2]$		0.5	
$Y_7 = [1, 2, 2, 1]$	4.5		

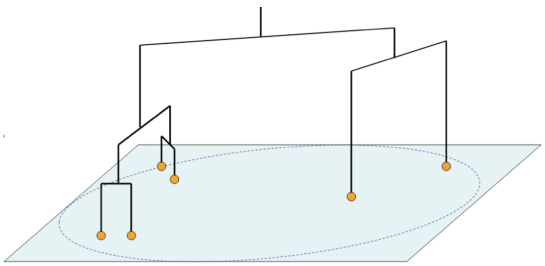
1-3) Calculez le plus simplement possible les inerties intra-groupes et inter-groupes des partitions finales obtenues en (a) et (a'), à savoir Y_4 et Y_5.

1-4) Calculez la distance *cosinus* entre les deux variables.

HW) Chez vous, vous calculerez leur distance *corrélation*.

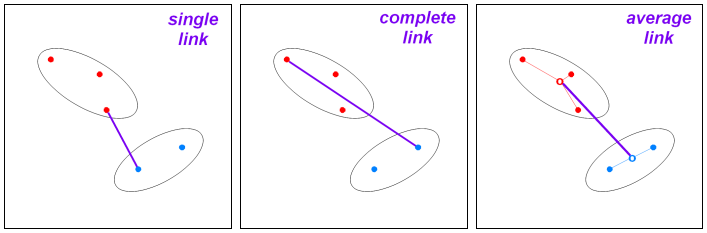
3. Méthodes Hiérarchiques

Il s'agit de faire émerger une structure hiérarchique de groupes de points, généralement de manière ascendante (*Hierarchical Agglomerative Clustering*) : au niveau 0, les n groupes-singletons, et au niveau $n-1$ un seul groupe. À chaque niveau, on regroupe les deux groupes les plus proches, au sens d'une distance $\mathcal{D}$ entre groupes choisie par l'utilisateur qui indexe la hiérarchie. Par ex., si on note C_i et C_j deux groupes :



- $\mathcal{D}_{min}(C_i, C_j) = \min_{x \in C_i, y \in C_j} d(x, y)$ *(single)*
- $\mathcal{D}_{max}(C_i, C_j) = \max_{x \in C_i, y \in C_j} d(x, y)$ *(complete)*
- $\mathcal{D}_{moy}(C_i, C_j) = \frac{\sum_{x \in C_i} \sum_{y \in C_j} d(x,y)}{n_i \times n_j}$ *(average)*

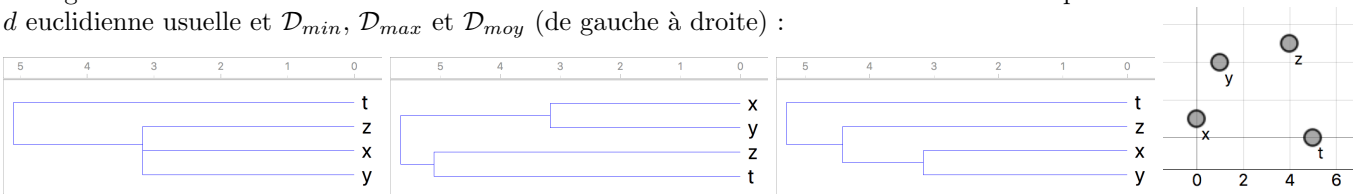
où d est une distance entre individus, elle aussi choisie.



(a) Qu'obtient-on en coupant la hiérarchie à un niveau particulier ?
(b) Si on souhaite obtenir une partition, à quel niveau semble-t-il judicieux de couper la hiérarchie ?
(c) Comment évolue l'inertie intra-groupes lorsqu'on passe d'un niveau à une niveau plus élevé ?
(d) À quoi se réduisent $\mathcal{D}_{min}$, $\mathcal{D}_{max}$ et $\mathcal{D}_{moy}$ pour des groupes-singletons ?

Exercice 2

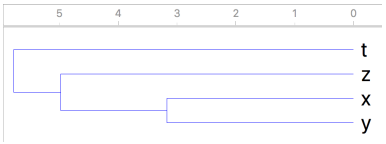
Les figures ci-dessous montrent différentes hiérarchies obtenues sur les données de l'exercice précédent avec la distance d euclidienne usuelle et $\mathcal{D}_{min}$, $\mathcal{D}_{max}$ et $\mathcal{D}_{moy}$ (de gauche à droite) :



2-1) Quel(s) commentaire(s) ces hiérarchies vous inspirent ?
2-2) À quel niveau couper ces hiérarchies pour obtenir la meilleure partition ?
2-3) Si on souhaite obtenir une partition en deux groupes, retrouve-t-on les bonnes ?

La méthode de *Ward* est très populaire car on peut lui attacher un critère familier : à chaque niveau, les deux groupes les plus proches au de $\mathcal{D}_W$ sont ceux qui minimisent l'accroissement d'inertie intra-groupes si d est la euclidienne usuelle. On obtient alors : $\mathcal{D}_W(C_i, C_j) = \frac{p_i \times p_j}{p_i + p_j} d^2(\overline{x}_i, \overline{x}_j)$, où p_i et p_j représentent les poids des groupes.

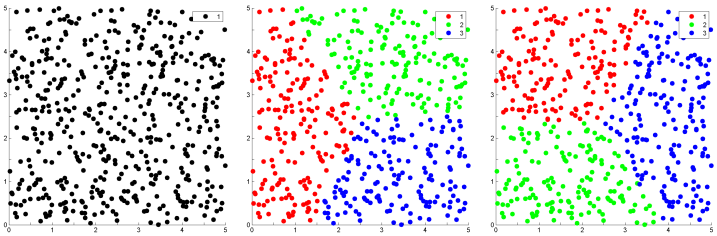
(a) À quoi se réduit $\mathcal{D}_W$ pour des groupes-singletons ?
(b) Calculez $\mathcal{D}_W(\{x\}, \{y\})$
(c) **Alerte** :
La hiérarchie de Ward donnée par Orange$^{\text{TM}}$ est visualisée ci-contre. La valeur calculée pour le regroupement des singletons $\{x\}$ et $\{y\}$ est : 3.1623
Quelle erreur a été commise ?



(d) La hiérarchie est-elle cependant intéressante ?

Outre le choix des méthodes ou leur paramétrage, celui de la distance, d'autres problématiques existent.

4. Problèmes Connexes



(a) Si on cherche une structure, un algorithme en trouve une.. mais les données ont-elles a priori une structure ?
(b) Pour les méthodes de partitionnement, comment choisir le nombre k de groupes ?
(c) Comment valider a posteriori un résultat ?
(d) Comment comparer plusieurs résultats ?
(e) Est-il possible de chercher non pas des groupes de points-individu mais des groupes de points-variable ? Dans quel but ?
(f) Ne serait-il pas plus judicieux d'utiliser, à chaque itération, une assignation non stricte aux groupes ?
...