

# MACHINE LEARNING & VISUALISATION DE DONNÉES

Vincent Guigue  
[vincent.guigue@agroparistech.fr](mailto:vincent.guigue@agroparistech.fr)

# VISUALISATION

# InfoVis vs DataVis

## ■ InfoVis = Information Visualization

The use of computer-supported interactive, visual representation of abstract data to amplify cognition  
Card, Mackinlay & Shneiderman

## ■ DataVis = Data Visualization

- Deux problèmes extrêmement importants dans la data science
- Deux problèmes peu abordés...

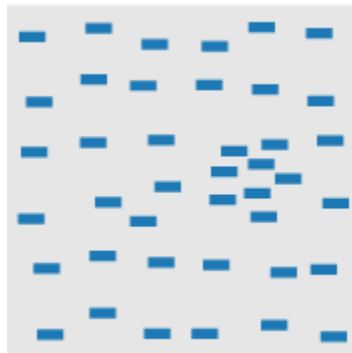
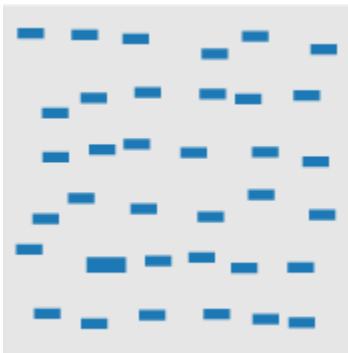
Référence utile : Cours de F. Rossi

<http://apiacoa.org/teaching/visualization/index.fr.html>

⇒ Lien avec l'apprentissage statistique : Quelles méthodes permettent de trouver automatiquement de bonnes visualisations des données ?

# Humain = machine visuelle très perfectionnée

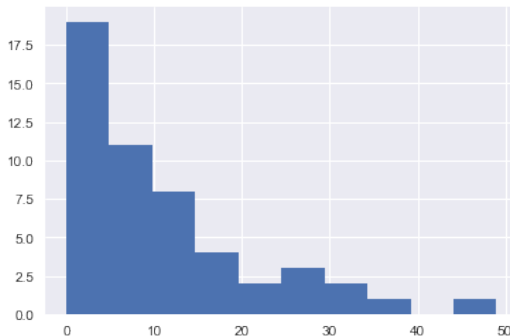
- Extraction de caractéristiques de base en 200ms
- Possibilités d'analyse de densité / détection d'anomalie très rapide



<https://www.csc2.ncsu.edu/faculty/healey/PP/index.html>

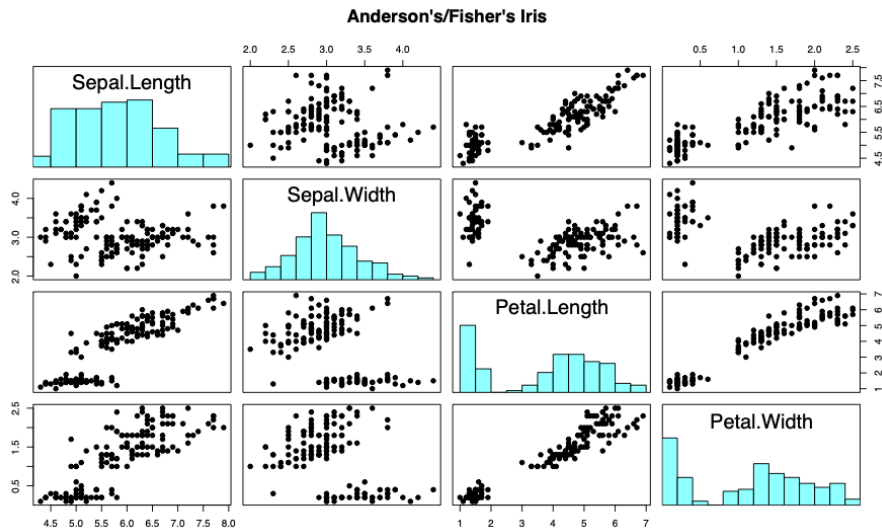
# Visualiser une population (1D)

- Focus sur une dimension  $X_j$ 
  - $N$  Observations  $x_{ij}$
- Solution pour la visualisation du contenu : l'histogramme



# Visualiser une population (2D)

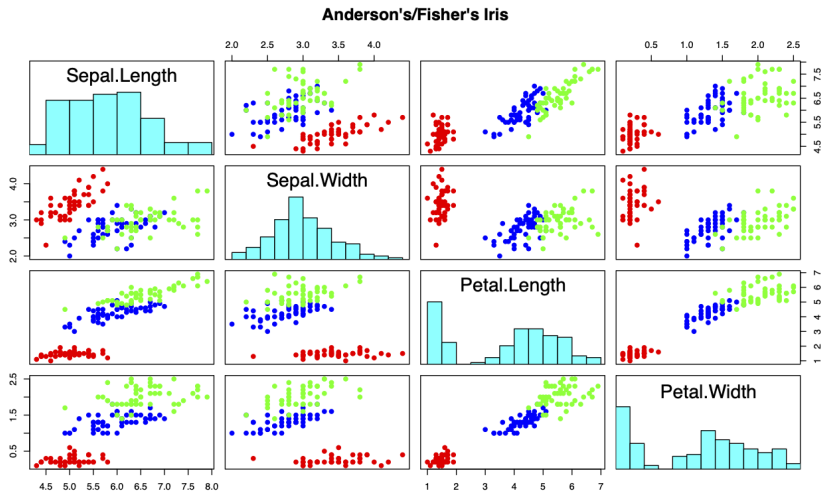
Données originales = Iris, 4D : comment visualiser ?  $\Rightarrow$  Scatter plot





# Visualiser une population (2D)

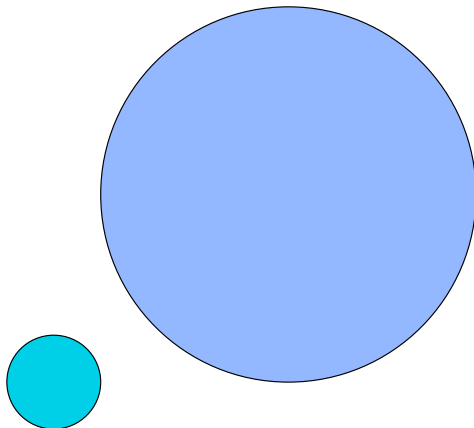
Données originales = Iris, 4D : comment visualiser ?  $\Rightarrow$  Scatter plot



Avec les informations de classes



# Limites humaines

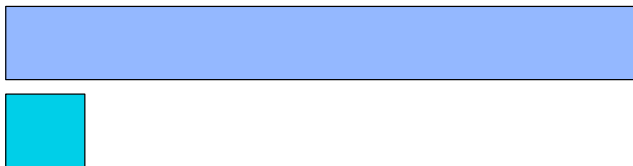


Please write down your estimation of the ratio of the areas of those disks.





# Limites humaines



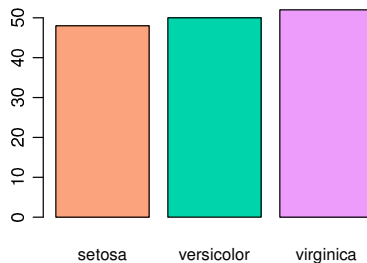
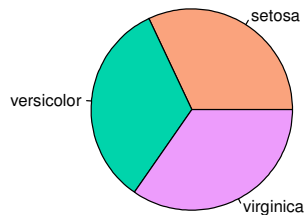
Please write down your estimation of the ratio of the lengths of those bars.

# Limites humaines

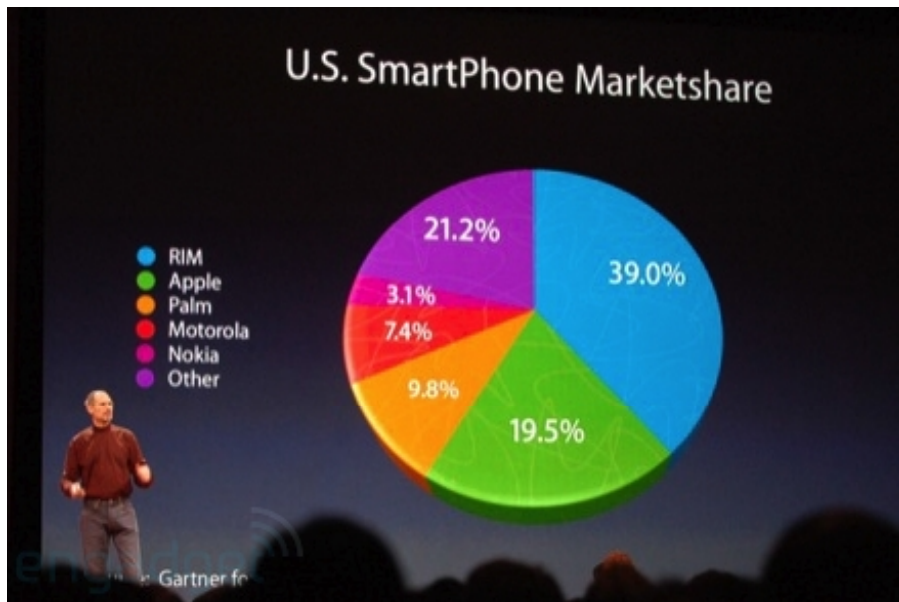
## Another visual abstraction

Using the same counting data, replace the  $Q$  pie slices by  $Q$  bars with length/height proportional to  $N_q$

And the views are

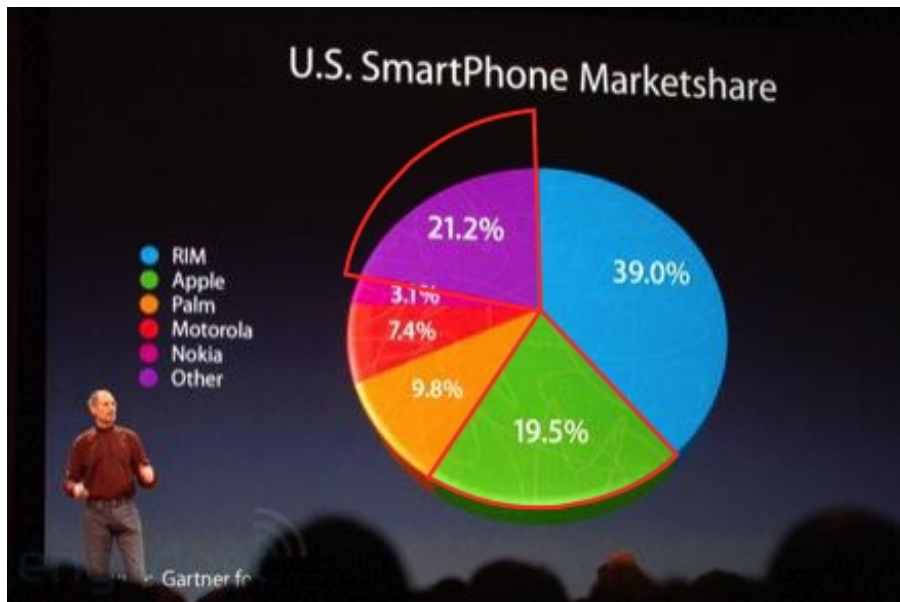


# Limites humaines



Steve Jobs' keynote at Macworld 2008, source:

# Limites humaines



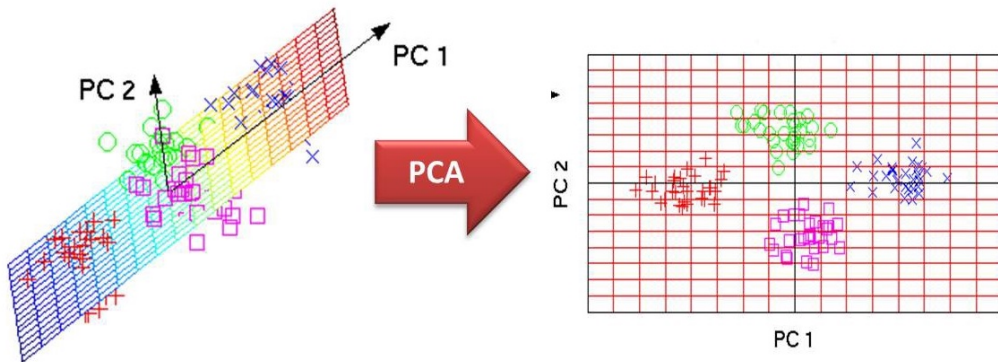
Steve Jobs' keynote at Macworld 2008, source:

# TRANSFORMATIONS AVANCÉES

# ACP : analyse en composantes principales

ACP (PCA) = outil de base pour

- 1 La visualisation de données en grande dimension
- 2 La réduction de la dimension et du bruit



# ACP : analyse en composantes principales

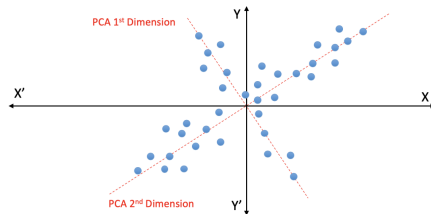
ACP (PCA) = outil de base pour

Idée : trouver des axes qui maximise la variance  
⇒ projeter sur ces axes

- Transformation non supervisée
- Transformation applicable sur de nouveaux points

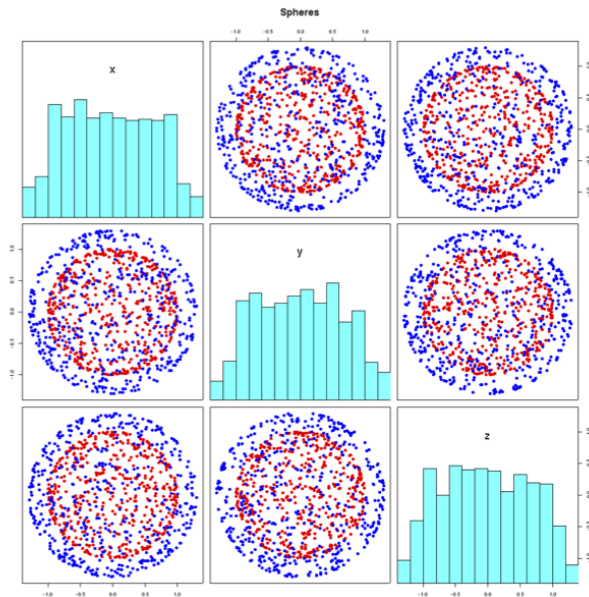
- 1  $X \in \mathbb{R}^{N \times d}$
- 2 ACP sur  $X^T X \in \mathbb{R}^{d \times d}$
- 3 Récupération de  $\{V_i \in \mathbb{R}^d, \lambda_i \in \mathbb{R}_+\}_{i=1,\dots,d}$
- 4  $d$  Axes de projection  $V_i \dots$  associés à leur force d'explication  $\lambda_i$
- 5 Utilisation des  $V_i$  sur les données de test

- 1 La visualisation de données en grande dimension
- 2 La réduction de la dimension et du bruit





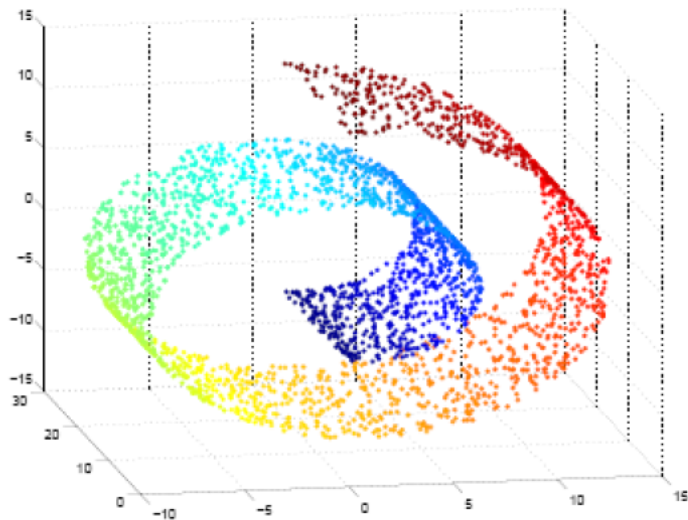
# Limite de la sélection de variables





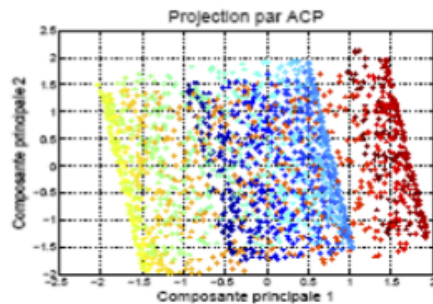
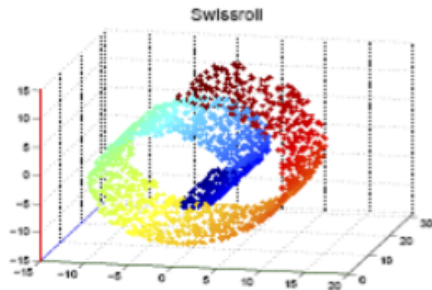


# Limite de la sélection de variables



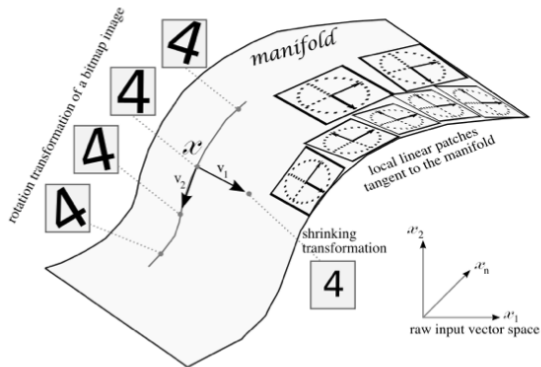


# LLE : local linear embedding



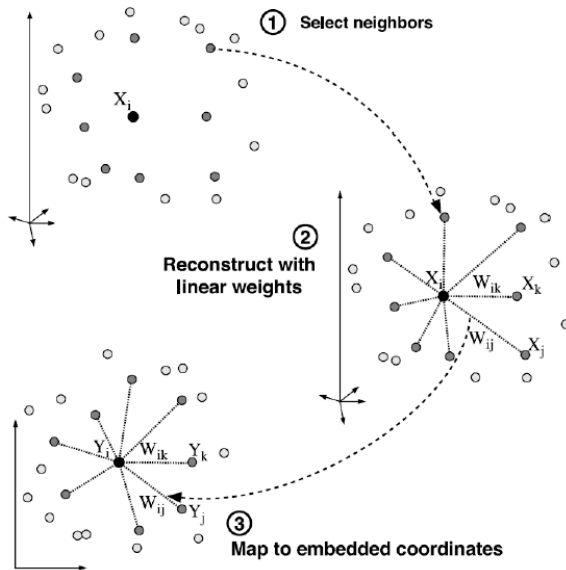
# LLE : local linear embedding

**Idée :** Les données sont organisées selon une variété





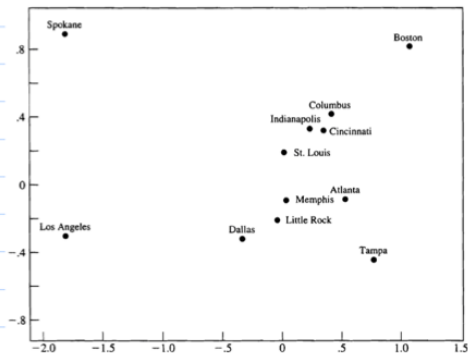
# LLE : local linear embedding





# MDS : multi-dimensional scaling

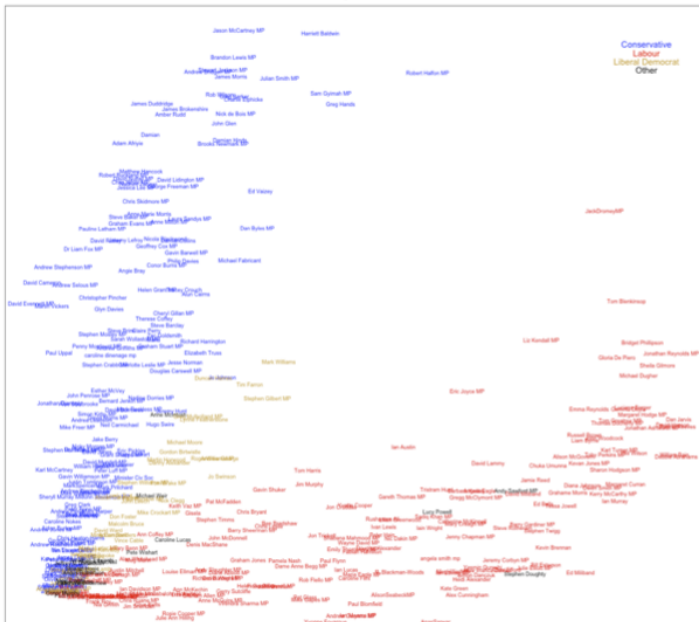
	Atlanta (1)	Boston (2)	Cincinnati (3)	Columbus (4)	Dallas (5)	Indianapolis (6)	Little Rock (7)	Los Angeles (8)	Memphis (9)	St. Louis (10)	Spokane (11)	Tampa (12)
(1)	0											
(2)	1068	0										
(3)	461	867	0									
(4)	549	769	107	0								
(5)	805	1819	943	1050	0							
(6)	508	941	108	172	882	0						
(7)	505	1494	618	725	325	562	0					
(8)	2197	3052	2186	2245	1403	2080	1701	0				
(9)	366	1355	502	586	464	436	137	1831	0			
(10)	558	1178	338	409	645	234	353	1848	294	0		
(11)	2467	2747	2067	2131	1891	1959	1988	1227	2042	1820	0	
(12)	467	1379	928	985	1077	975	912	2480	779	1016	2821	0



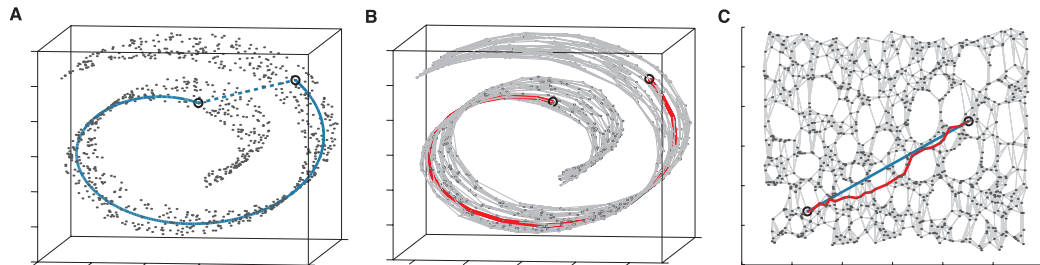


# MDS : multi-dimensional scaling

Two dimensional clustering of UK Members of Parliament



## ISOMAP



- Se déplacer dans le graphe des plus proches voisins
- Reconstruire les distances dans le graphe (plutôt que dans l'espace d'origine)



# ISOMAP

## Step

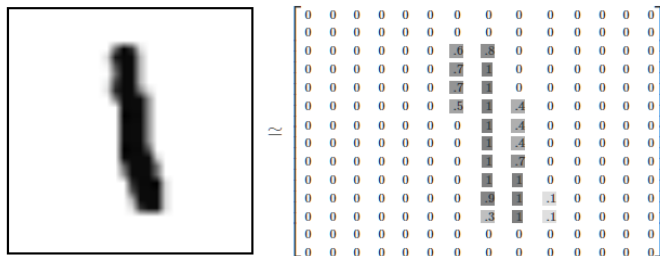
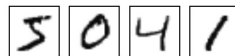
- |   |                                      |  |
|---|--------------------------------------|--|
| 1 | Construct neighborhood graph         | Define the graph $G$ over all data points by connecting points $i$ and $j$ if [as measured by $d_x(i,j)$ ] they are closer than $\epsilon$ ( $\epsilon$ -Isomap), or if $i$ is one of the $K$ nearest neighbors of $j$ ( $K$ -Isomap). Set edge lengths equal to $d_x(i,j)$ .  |
| 2 | Compute shortest paths               | Initialize $d_G(i,j) = d_x(i,j)$ if $i,j$ are linked by an edge; $d_G(i,j) = \infty$ otherwise. Then for each value of $k = 1, 2, \dots, N$ in turn, replace all entries $d_G(i,j)$ by $\min\{d_G(i,j), d_G(i,k) + d_G(k,j)\}$ . The matrix of final values $D_G = \{d_G(i,j)\}$ will contain the shortest path distances between all pairs of points in $G$ (16, 19). |
| 3 | Construct $d$ -dimensional embedding | Let $\lambda_p$ be the $p$ -th eigenvalue (in decreasing order) of the matrix $\tau(D_G)$ (17), and $v_p^i$ be the $i$ -th component of the $p$ -th eigenvector. Then set the $p$ -th component of the $d$ -dimensional coordinate vector $\mathbf{y}_i$ equal to $\sqrt{\lambda_p} v_p^i$ .   |



# Sur USPS

## Que se passe-t-il sur des données USPS ou MNIST ?

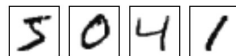
256/384 dimensions  $\Rightarrow$  2D !



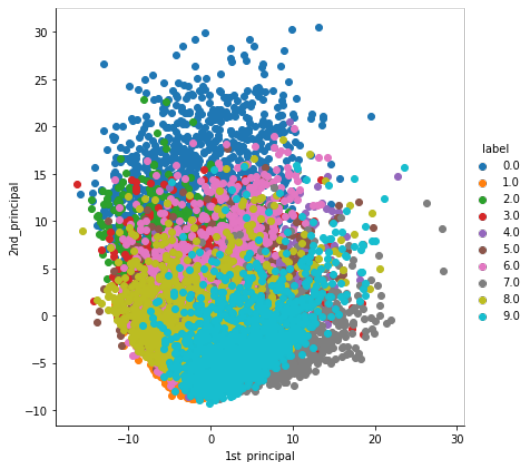
# Sur USPS

Que se passe-t-il sur des données USPS ou MNIST ?

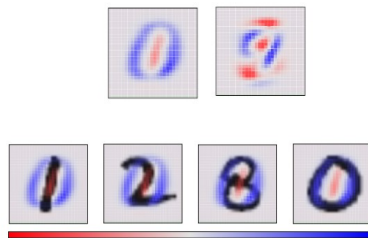
256/384 dimensions  $\Rightarrow$  2D !



ACP/PCA



$\Rightarrow$  Pas de miracle... Mais pas si mal !

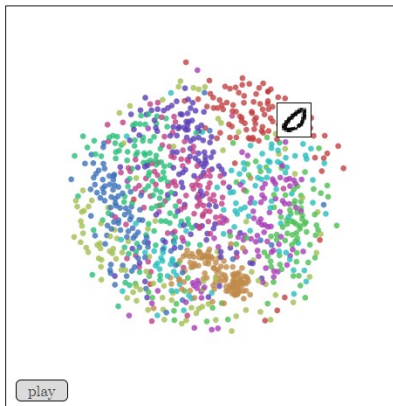
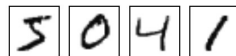


# Sur USPS

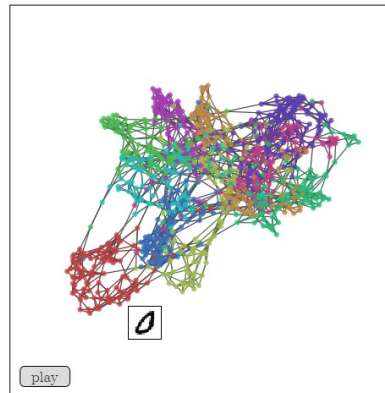
Que se passe-t-il sur des données USPS ou MNIST ?

256/384 dimensions  $\Rightarrow$  2D !

Projection non linéaire



Visualizing MNIST with MDS



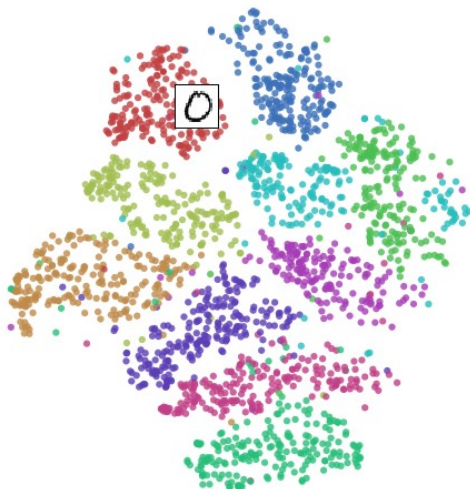
Visualizing MNIST as a Graph

# Sur USPS

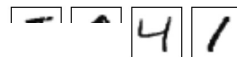
Que se passe-t-il sur des données USPS ou MNIST ?

256/384 dim

T-SNE



A t-SNE plot of MNIST



USAGES



# Comprendre les données

## Comment rentrer en contact avec les données ?

- Ce qui semble isolé,
- Ce qui semble mélangé

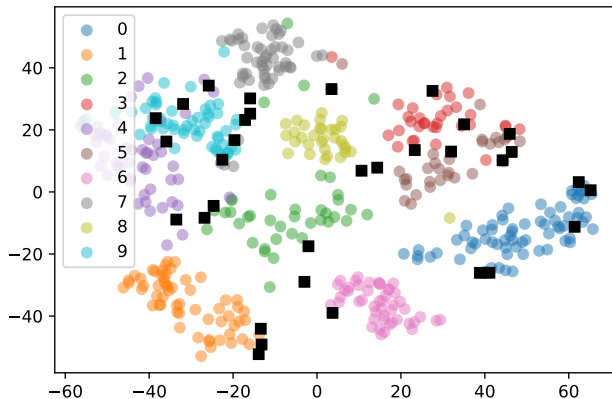
En complément des analyses de co-variance des différentes variables descriptives...

En prenant des précautions (diminution de la dimension = perte d'information)

# Analyser les erreurs

Faire évoluer un modèle = corriger des typologies d'erreur

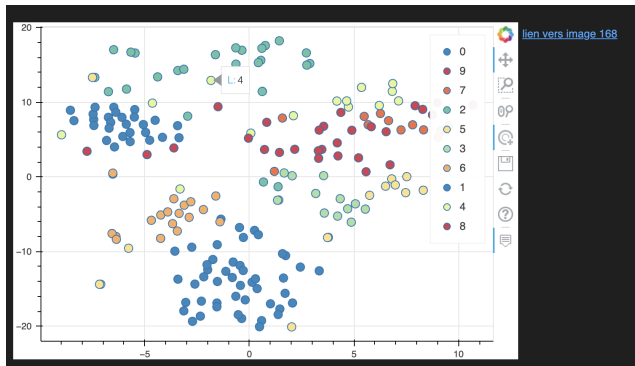
- Construction + validation des métriques classiques
- Hypothèse sur les erreurs, visualisation d'individu
- Visualisation des données = analyse de la position des erreurs  
⇒ nouvelles hypothèses sur typologies d'erreur



# Analyser les erreurs

Faire évoluer un modèle = corriger des typologies d'erreur

- Construction + validation des métriques classiques
- Hypothèse sur les erreurs, visualisation d'individu
- Visualisation des données = analyse de la position des erreurs  
⇒ nouvelles hypothèses sur typologies d'erreur
- Il y a souvent besoin d'un outil supplémentaire pour faire le lien avec les données d'origine





# CONCLUSION

# Conclusion

- Un outil pour **comprendre les données**
  - Identifier les classes avec plusieurs modes
  - Les points aberrants
  - Anticiper les difficultés (ou les facilités)
- Un outil pour **analyser les erreurs des modèles...** Puis améliorer les modèles
  - Présenter les résultats
  - Comprendre les erreurs

## ATTENTION :

en 2D, beaucoup d'informations sont perdues, TSNE (entre autres) est un algorithme stochastique, etc...

⇒ Il faut se méfier de ce que l'on voit et bien vérifier avant de tirer des conclusions !