Iris_sciences_des_donn?es

September 24, 2019

1 IFT 599/799 – Science des données

1.1 TP1: Visualisation

Ce TP porte sur l'analyse des données pour comprendre et visualiser la répartition des données. Iris est un ensemble de données très connu du domaine de la science des données. Il contient 150 observations (ou objets) réparties en 3 classes (appelées respectivement setosa, versicolor, virginica) de 50 observations chacun. Iris contient 4 variables (sepal_length, sepal_width, petal_length, petal_width).

2 Introduction : compréhension des données et visualisation de leur dispersion

```
In [1]: ## Dans un premier temps, il est nécessaire d'importer les différente librairies utili
    ## telles que numpy, panda ou matplotlib.

import pandas as pd
import numpy as np
import plotly
import plotly.plotly as py
import plotly.graph_objs as go
import matplotlib.pyplot as plt

In [24]: ## On lit ensuite les données qui sont sous un format csv, séparées par une virgule.
    ## On s'assure également qu'il n'existe aucun objet possédant une caractéristique vid
    ## grâce à la fonction dropna().

data = pd.read_csv("iris.csv", sep=',', na_values='', encoding='latin-1')
    data.dropna(how="all", inplace=True)

print("Forme du jeu de données iris.csv : ",data.shape)
Forme du jeu de données iris.csv : (150, 5)
```

La forme de notre jeu de données nous montre qu'il possède 150 objets chacun composé de 5 attributs.

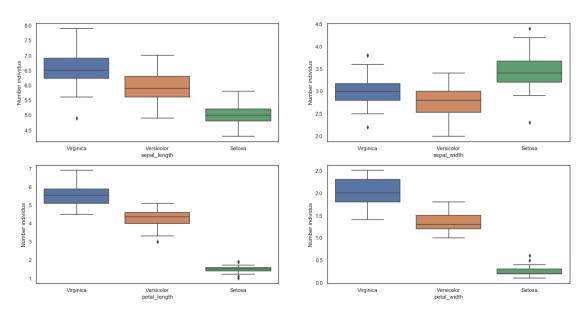
```
In [25]: ## Nous souhaitons désormais visualiser le contenu de notre jeu de données.
         ## Pour cela on va regarder les 5 premiers objets et leurs attributs
         ## après avoir mélangé ces objets grâce à la fonction sample()
         data.sample(frac=0.7).head()
Out [25]:
             sepal_length sepal_width petal_length petal_width
                                                                        species
                      5.1
                                    3.7
                                                  1.5
         21
                                                                0.4
                                                                         setosa
                      5.0
                                                                0.2
         35
                                    3.2
                                                  1.2
                                                                         setosa
         48
                      5.3
                                    3.7
                                                  1.5
                                                                0.2
                                                                         setosa
         34
                      4.9
                                    3.1
                                                  1.5
                                                                0.2
                                                                         setosa
         94
                      5.6
                                    2.7
                                                  4.2
                                                                1.3 versicolor
```

Chaque ligne correspond ainsi à un objet de notre jeu de données, et chaque colonne un attribut. On peut observer que ces attributs correspondent à "sepal_length", "sepal_width", "petal_length", "petal_width" et "species". On remarque que le dernier attribut possèdent des valeurs nominales, tandis que les autres attributs correspondent à des ratios : ce sont des longueurs ou des largeurs.

Le but du TP est de savoir s'il est possible de séparer distinctement les trois classes représentant des fleurs différentes dans l'attribut "species". Pour cela, il est intéressant de séparer les objets par espèce et de les visualiser dans un "boxplot", afin d'obtenir des premières informations concernant les attributs entre chaque espèce.

```
In [4]: sepal_length = [data['sepal_length'].loc[data['species'] == "virginica"], data['sepal_i
        sepal_width = [data['sepal_width'].loc[data['species'] == "virginica"], data['sepal_width']
        petal_length = [data['petal_length'].loc[data['species'] == "virginica"], data['petal_i
        petal_width = [data['petal_width'].loc[data['species'] == "virginica"], data['petal_width']
In [6]: import seaborn as sns
        labels = ['Virginica', 'Versicolor', 'Setosa']
        sns.set(style="white")
        fig, axes = plt.subplots(2, 2, figsize=(20, 10))
        dict1 = {'0':(sepal_length, axes[0, 0], "sepal_length"),
                 '1': (sepal_width, axes[0, 1], "sepal_width"),
                 '2':(petal_length,axes[1, 0],"petal_length"),
                 '3':(petal_width,axes[1, 1],"petal_width")
        for i in range(4):
            sns.boxplot(
                x=labels,
                y=dict1[str(i)][0],
                ax=dict1[str(i)][1],
                ).set(
                xlabel=dict1[str(i)][2],
                ylabel='Number individus',
                )
```

plt.show()



La figure précédente représente les boxplots pour chaque caractéristique séparée par espèce. D'après ce graphique, on peut voir l'étendue de nos données : Concernant la longueur des sépales, les fleurs setosas semblent avoir des sepals moins longues, tandis que les virginicas semblent avoir des sepals plus longues, de même pour la longueur des petales et leur largeur. Néanmoins cela s'inverse sur la largeur des sepales : les setosas semblent avoir des sepales plus larges tandis que virginica et versicolos moins larges.

On peut remarquer des "points" se différenciant des boxplots sur nos graphiques : ils correspondent à des valeurs extrêmes selon la distance interquartile. Néanmoins, nous prenons la décision de ne pas les supprimer car nous n'avons pas plus d'informations concernant la façon dont les données ont été relevées. Ces points correspondent-ils à des erreurs lorsque les données ont été relevées, ou a des données "aberrantes"? Des questions dont les réponses sont nécessaires pour pouvoir traiter correctement les valeurs aberrantes.

3 I - Méthode sans visualisation : comparaisons de distances

Durant ce TP, nous allons effectuer deux méthodes différentes : une uniquement calculatoire en comparant différentes distances entre classes et objets, et l'autre se reposant sur la visualisation avec et sans transformation des données.

Les deux calculs consistent à "comparer la distance maximale entre un objet quelconque d'une classe, e.g. ń setosa ż, et le centre de cette classe, avec la distance minimale entre un objet quelconque d'une autre classe, e.g. ń versicolor ż, et le centre de la classe ń setosa ż." Deux différentes distances peuvent être utilisées : la distance euclidienne et la distance de Mahalinobis. La distance euclidienne correspond à la distance géométrique normale entre deux objets dans un espace multidimensionnel. Elle de définit comme suit :

$$euclidienne(p,q) = \sqrt{\sum_{n} (q_i - pi)^2}$$

La distance euclidienne possède néanmoins quelques limitations dans les jeux de données réels car elle ne prend pas en compte la dispersion des variables au sein d'une classe. C'est pourquoi, dans la seconde métrique que nous allons utiliser est la distance de Mahalanobis. Cette dernière se définit comme suit :

$$mahalanobis(p,q) = (p-q)^T \sum -1(p-q)$$

où

$$\sum -1$$

correspond à la matrice de covariance. La distance de Mahalanobis permet ainsi de calculer la distance entre deux points dans un espace multidimensionnel en redimensionnant les données de telle sorte à ce qu'elles n'aient plus de covariance.

```
## on souhaite le comparer et ressort un vecteur constitué de l'ensemble des distances
        ## objet de référence et l'ensemble des objets de la classe. La distance euclidienne e
        ## de la bibliothèque numpy linalg.norm().
        def distance_euclidienne(vec_ref, classe_compare):
            vec_dist = []
            for row in classe_compare.values:
                dist = np.linalg.norm(vec_ref-row)
                vec_dist.append(dist)
            return vec_dist
In [8]: ## La fonction distance_mahalanobis() prend en attributs un objet de référence, la cla
        ## on souhaite le comparer et la matrice de covariance de la classe de référence.
        ## Elle ressort un vecteur constitué de l'ensemble des distances de mahalanobis entre
        ## des objets de la classe. La formule appliquée est celle décrite plus haut dans le r
        from scipy.spatial import distance
        def distance_mahalinobis(vec_ref, classe_compare, covar_matrix):
            vec_dist_mahal = []
            inverse_covar_mat = np.linalg.inv(covar_matrix)
            for row in classe_compare.values:
                mahal_dist =(row - vec_ref.T).dot(inverse_covar_mat).dot((row - vec_ref.T).T)
                vec_dist_mahal.append(mahal_dist)
            return vec_dist_mahal
```

In [30]: ## La fonction tab_distances_comparaison() prend en entrée un booleen permettant de s

quelconque d'une autre classe et la moyenne de la classe de référence.

l'on souhaite utiliser lors des calculs. Elle permet de calculer la distance maxim ## un objet quelconque d'une classe et la moyenne de cette même classe, et la distanc

In [7]: ## La fonction distance_euclidienne() prend en attributs un objet de référence et la c

```
## premier calcul de distance et le second pour chacune des classes.
def tab_distances_comparaison(euclidienne=True):
    virginica = data.loc[data['species'] == "virginica"]
    virginica = virginica.drop(["species"], axis=1)
    setosa = data.loc[data['species'] == "setosa"]
    setosa = setosa.drop(["species"], axis=1)
    versicolor = data.loc[data['species'] == "versicolor"]
    versicolor = versicolor.drop(["species"], axis=1)
    virginica_mean = virginica.mean()
    setosa_mean = setosa.mean()
    versicolor_mean = versicolor.mean()
    if euclidienne:
        ## Nous avons pris la décision de ne pas standardiser ( centrer, réduire ) le
        ## effectuer la distance euclidienne, car nous souhaitons uniquement comparer
        ## entre elles.
        max_setosa = np.max(distance_euclidienne(setosa_mean, setosa))
        max_versicolor = np.max(distance_euclidienne(versicolor_mean, versicolor))
        max virginica = np.max(distance euclidienne(virginica mean, virginica))
        mean_setosa = np.mean(distance_euclidienne(setosa_mean, setosa))
        mean_versicolor = np.mean(distance_euclidienne(versicolor_mean, versicolor))
        mean_virginica = np.mean(distance_euclidienne(virginica_mean, virginica))
        min_setosa_versi = np.min(distance_euclidienne(setosa_mean, versicolor))
        min_setosa_virgi = np.min(distance_euclidienne(setosa_mean, virginica))
        min_versi_setosa = np.min(distance_euclidienne(versicolor_mean, setosa))
        min_versi_virgi = np.min(distance_euclidienne(versicolor_mean, virginica))
        min_virgi_setosa = np.min(distance_euclidienne(virginica_mean, setosa))
        min_virgi_versi = np.min(distance_euclidienne(virginica_mean, versicolor))
    else:
        ## Le cacul des matrices de covariance s'est effectué grâce à la fonction cov
        ## numpy
        setosa_covar_matrix = np.cov(setosa.values.T)
        versicolor_covar_matrix = np.cov(versicolor.values.T)
        virginica_covar_matrix = np.cov(virginica.values.T)
        max_setosa = np.max(distance_mahalinobis(setosa_mean, setosa,setosa_covar_mat
```

Cette fonction retourne un tableau de type DataFrame contenant la différence obten

```
max_versicolor = np.max(distance_mahalinobis(versicolor_mean, versicolor,vers
    max_virginica = np.max(distance_mahalinobis(virginica_mean, virginica,virginica)
    mean_setosa = np.mean(distance_mahalinobis(setosa_mean, setosa,setosa_covar_mean)
    mean_versicolor = np.mean(distance_mahalinobis(versicolor_mean, versicolor, versicolor)
    mean_virginica = np.mean(distance_mahalinobis(virginica_mean, virginica, virginica)
    min_setosa_versi = np.min(distance_mahalinobis(setosa_mean, versicolor,setosa_
    min_setosa_virgi = np.min(distance_mahalinobis(setosa_mean, virginica,setosa_
    min_versi_setosa = np.min(distance_mahalinobis(versicolor_mean, setosa, versicolor_mean)
    min_versi_virgi = np.min(distance_mahalinobis(versicolor_mean, virginica,vers
    min_virgi_setosa = np.min(distance_mahalinobis(virginica_mean, setosa, virginica_mean)
    min_virgi_versi = np.min(distance_mahalinobis(virginica_mean, versicolor,virg)
dif_seto_versi = max_setosa - min_setosa_versi
dif_seto_virgi = max_setosa - min_setosa_virgi
dif_versi_seto = max_versicolor - min_versi_setosa
dif_versi_virgi = max_versicolor - min_versi_virgi
dif_virgi_seto = max_virginica - min_virgi_setosa
dif_virgi_versi = max_virginica - min_virgi_versi
ref = ['setosa','virginica','versicolor']
distances = {'référence': ref, 'setosa': ['0',dif_seto_virgi, dif_seto_versi], 'v
distances_df = pd.DataFrame(distances)
return distances_df
```

3.1 Résultats concernant la distance Euclidienne

Ainsi, une valeur négative signifie que les classes sont bien séparées, c'est à dire que la distance minimale entre la moyenne d'une classe et l'objet d'une autre classe et supérieure à la distance maximale entre la moyenne de la classe et un objet quelconque de cette même classe. Ainsi, d'après les résultats présents dans le DataFrame, on peut conclure que la classe Setosa est bien séparée des classes Virginica et Versicolor. Par ailleurs, on peut également voir que les classes Virginica et Versicolor possèdent du recouvrement : on ne peut donc pas conclure sur la séparation de ces deux classes.

Comme présenté plus haut, ces résultats sont à considérer avec du recul. Effectivement, la distance euclidienne ne prend pas en considération la dispersion des variables dans une classe.

3.2 Résultats concernant la distance de Mahalanobis

Concernant la distance de Mahalanobis, on retrouve les mêmes résultats que précédemment. On peut donc conclure que, malgré la dispersion des variables, la classe Setosa est bien séparée des classes Virginica et Versicolor, tandis que l'on ne peut pas émettre de conclusion sur la séparation des classes Virginica et Versicolor.

4 II - Méthode avec visualisations : distributions des classes, agencement dans l'espace, et transformation des variables

La deuxième méthode utilisée dans ce document nous permettant de rendre compte de la séparation des classes se base sur différentes visualisations. Dans un premier temps on souhaitera afficher les histogrammes de chaque classe pour représenter leur distribution et ainsi visualiser l'état de séparation entre chacune des classes. Une deuxième visualisation consistera à afficher le nuage de points de chaque caractéristique par rapport à chacune autre. Par cette façon, en affichant chaque classe de couleur différente, on pourra voir l'état de séparation des classes, mais on pourrait également conclure sur la corrélation des caractéristiques entre elles. Finalement, afin de garder un maximum d'informations des données mais dans un espace réduit, nous appliquerons la méthode d'Analyse en Composantes Principales (ACP), et nous effectuerons une nouvelle fois chacune des différentes visualisations.

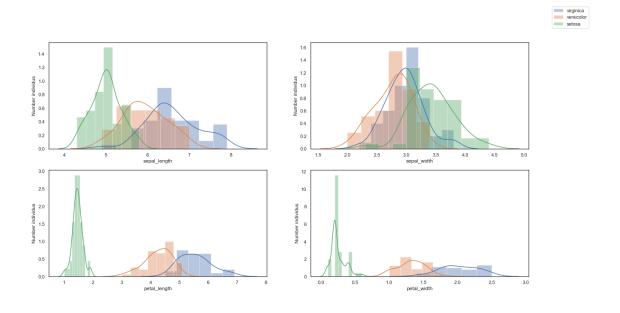
4.1 Histogrammes sur les variables non transformées

```
for i in range(4):
    for j in range(0,3):
        sns.distplot(
        pd.to_numeric(dict1[str(i)][0][j]),
        ax=dict1[str(i)][1],
        ).set(
        xlabel=dict1[str(i)][2],
        ylabel='Number individus',
        )

fig.legend(labels)
plt.show()
```

/anaconda3/lib/python3.7/site-packages/scipy/stats/stats.py:1713: FutureWarning:

Using a non-tuple sequence for multidimensional indexing is deprecated; use `arr[tuple(seq)]`



D'après les figures ci dessus, on peut observer que sur les caractéristiques des sépales ("sepal_length", "sepal_width"), l'ensemble des trois espèces ne peuvent pas être séparées. Néanmoins, concernant les pétales, l'espèce Setosa se démarque distinctement des deux autres, à la fois sur la longueur que sur la largeur. On remarque également que les fleurs de type Versicolor possèdent des longueurs et des largeurs de pétales légèrement inférieures aux espèces Virginica, néanmoins les deux caractéristiques se recoucrent tout de même.

4.2 Nuage de point sur les variables non transformées

Parmis l'ensemble de ces projections, on remarque que l'on peut séparer distinctement les fleurs provenant de l'espèce Setosa des deux autres espèces, ce qui correspond bien aux observations que nous avons effectuée lors de nos analyses de distances. Par ailleurs on remarque toujours du recouvrement entre les deux autres variables. Néanmoins, ce recouvrement est bien plus important si l'on considère uniquement les projections sur les plans : "sepal_length" par rapport à "sepal_width" et inversement.

4.3 Analyse en Composantes Principales (ACP)

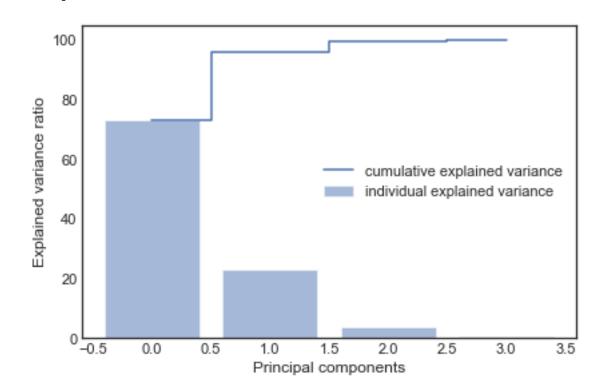
(Afin d'effectuer notre ACP en Python, nous nous sommes basés sur le code de l'article : " USING PRINCIPAL COMPONENT ANALYSIS (PCA) FOR DATA EXPLORER. STEP BY STEP ", datant du 21 juin 2017, rédigé par Juan Carlos González, trouvé à l'adresse suivante: https://www.apsl.net/blog/2017/06/21/using-principal-component-analysis-pac-data-explore-step-step/.

```
tot = sum(eig_vals)
         var_exp = [(i / tot)*100 for i in sorted(eig_vals, reverse=True)]
         cum_var_exp = np.cumsum(var_exp)
In [14]: ## Afin de savoir le nombre d'axes que l'on peut garder sans perdre trop d'informatio
         ## le but de ne pas biaiser nos résultats après une ACP, il est pertinent de conserve
         ## que 80% de la variance de notre jeu de données de base soit conservée. Ainsi, le c
         ## d'afficher sur un barplot la variance conservée pour chaque axe, mais également de
         ## variance conservée en fonction des axes.
         with plt.style.context('seaborn-white'):
             plt.figure(figsize=(6, 4))
             plt.bar(range(4), var_exp, alpha=0.5, align='center',
                     label='individual explained variance')
             plt.step(range(4), cum_var_exp, where='mid',
                      label='cumulative explained variance')
             plt.ylabel('Explained variance ratio')
             plt.xlabel('Principal components')
```

eig_pairs.reverse()

plt.legend(loc='best')
plt.tight_layout()

plt.show()



Ainsi, sur le graphique, on remarque que le premier axe permet de conserver environ 75% de la variance, le deuxième 25%, le troisième environ 2% et le dernier presque rien. Ainsi, si l'on

se base sur une conservation de 80% de la variance présente dans les données de départ, il est pertinent de conserver les deux premiers axes.

```
In [37]: ## D'après le graphique ci-dessus, on a conclu qu'il était pertinent de garder seulem
                       ## Néanmoins, dans la suite de notre rapport, nous souhaitons projeter les données da
                       ## trois-dimensions. Ainsi nous allons conserver les trois premiers axes.
                       ## La matrice de projection matrix_w permet de transformer les données de base vers l
                       ## de l'espace. On l'a ainsi créée avec nos trois premiers vecteurs propres.
                       matrix_w = np.hstack((eig_pairs[0][1].reshape(4,1),
                                                                                eig_pairs[1][1].reshape(4,1),
                                                                                eig_pairs[2][1].reshape(4,1)))
                       ## On obtient finalement nos données traansformées en effectuant le produit des vecte
                       ## et chacun des vecteurs propres contenus dans notre matrice de projection.
                       X_pca = X_std.dot(matrix_w)
In [17]: y = pd.DataFrame(y)
                       X_pca = pd.DataFrame(X_pca, columns={'first_component', 'second_component', 'third_component', 'third_c
                       final_pca = np.concatenate((X_pca,y),axis=1)
                       final_pca = pd.DataFrame(final_pca, columns=["first_component","second_component","th
                       final_pca.sample(frac=0.7).head()
Out[17]:
                                 first_component second_component third_component
                                                                                                                                                                          species
                       56
                                                                                          -0.773019
                                                     0.74653
                                                                                                                                       0.148969 versicolor
                                                                                                                                        0.270658 virginica
                       128
                                                      1.78835
                                                                                              0.187361
                       103
                                                      1.44015
                                                                                            0.0469876
                                                                                                                                           0.16363
                                                                                                                                                                     virginica
                       6
                                                   -2.44403
                                                                                          -0.0476442
                                                                                                                                           0.33547
                                                                                                                                                                            setosa
                                                   -2.18433
                                                                                               0.469014
                                                                                                                                      -0.253766
                                                                                                                                                                            setosa
```

Le tableau résultant de l'ACP permet de montrer les nouvelles projections des anciens objets sur chacun des trois axes.

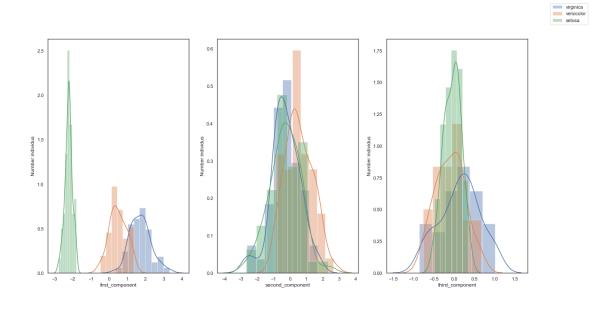
4.4 Histogramme sur les variables transformées

```
In [18]: first_component = [final_pca[final_pca['species'] == 'virginica']['first_component'], first_second_component = [final_pca[final_pca['species'] == 'virginica']['second_component'], first_third_component = [final_pca[final_pca['species'] == 'virginica']['third_component'], first_second_component'], first_second_compo
```

```
np.seterr(divide='ignore', invalid='ignore')
labels = ["virginica", "versicolor", "setosa"]
fig, axes = plt.subplots(1, 3, figsize=(20, 10))
dict2 = {'0':(first_component, axes[0],"first_component"),
         '1':(second_component,axes[1],"second_component"),
         '2':(third_component,axes[2],"third_component"),
for i in range(3):
    for j in range(0,3):
        sns.distplot(
            pd.to_numeric(dict2[str(i)][0][j]),
            ax=dict2[str(i)][1],
            ).set(
            xlabel=dict2[str(i)][2],
            ylabel='Number individus',
fig.legend(labels)
plt.show()
```

/anaconda3/lib/python3.7/site-packages/scipy/stats/stats.py:1713: FutureWarning:

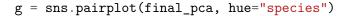
Using a non-tuple sequence for multidimensional indexing is deprecated; use `arr[tuple(seq)]`

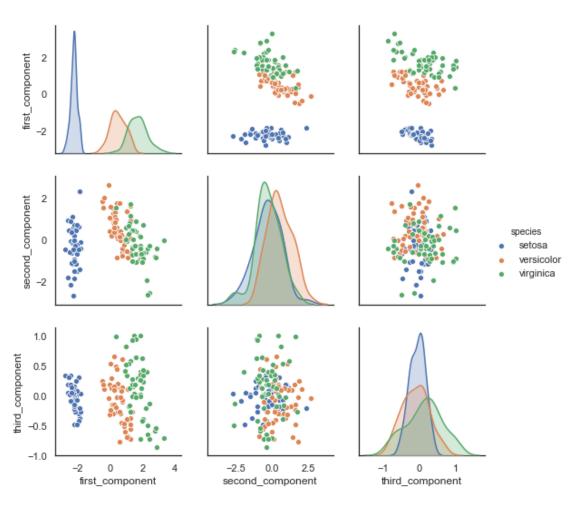


D'après les graphiques ci-dessus, on peut remarquer que sur le premier axe, la distribution des nouveaux composantes des fleurs dont l'espèce est Setosa se démarque toujours des deux autres espèces. Néanmoins, sur ce même axe, on observe toujours du recouvrement concernant les espèces Virginica et Versicolor. Concernant les deux autres axes, le recouvrement est très important quelle que soit l'espèce, on ne peut donc faire aucune séparation.

4.5 Nuage de point sur les variables transformées (en 2 dimensions)

In [21]: ## Afin d'afficher les nuages de points de chacune des caractéristiques transformées ;
nous avons effectué la même manipulation que lors de la visualisation des nuages d
document. Chaque couleur correspond à une classe différente.





D'après les projections ci-dessus, on remarque que toujours la classe Setosa est remarquablement bien séparée des deux autres classes. De même, les espèces de Versicolor et Virginica ne semblent pas plus être mieux séparées une fois les variables transformées. Enfin, il ne semble pas pertinent de conserver les projections du deuxième axe sur le troisième axe (ou inversement).

Effectivement, d'après la courbe nous permettant de visualiser la conservation de la variance, ces axes à eux deux ne conservent que 22% de l'information de base, et ne sont donc pas pertinentes seuls.

4.6 Nuage de point sur les variables transformées (en 3 dimensions)

```
In [35]: ## Finalement nous avons souhaité projeter les données sur les trois axes conservés a
         ## Ainsi, pour créer une figure 3D nous avons utilisé la fonction Axes3D de la biblio
         cm = plt.get_cmap("ocean")
         col = np.arange(150)
         from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
         with plt.style.context('seaborn-white'):
             fig = plt.figure(figsize=(8, 6))
             ax = Axes3D(fig)
             xs = pd.to_numeric(final_pca['first_component'])
             ys = pd.to_numeric(final_pca['second_component'])
             zs = pd.to_numeric(final_pca['third_component'])
             colors={'setosa':'b','virginica':'r','versicolor':'g'}
             for i in range(0,150):
                 ax.scatter(xs[i], ys[i], zs[i], s=50, alpha=1, c=colors[final_pca['species'][
             ax.set_xlabel('first_component')
             ax.set_ylabel('second_component')
             ax.set_zlabel('third_component')
         plt.show()
<IPython.core.display.Javascript object>
```

En nous déplaçant dans l'environnement 3D, nous avons constaté que les objets provenant de la classe SETOSA étaient suffisamment bien séparés pour être linéairement séparés des deux autres espèces. Néanmoins, bien que leur dispersion soit légèrement différentes, il est beaucoup plus compliqué voir impossible de séparer linéairement les deux autres classes entre elles, même après avoir effectué une Analyse en Composantes Principales.

5 Conclusion

<IPython.core.display.HTML object>

D'après l'ensemble de ces analyses, on peut en conclure que les trois classes ne sont pas toutes relativement bien séparées. Seule la classe Setosa peut être différenciée des deux autres. De plus,

l'ACP n'apporte rien dans la séparation des données, car les nouvelles composantes ne permettent toujours pas une séparation totalement distincte.