Classification automatique Chapitre 2 : Classification hiérarchique

Allou Samé allou same@ifsttar.fr

Plan

- 1 Structures associées à la classification automatique
- 2 Liens entre ultramétrique et hiérarchie indicée
- 3 Démarche suivie par les méthodes de classification
- 4 Classification ascendante hiérarchique (CAH)
 - Algorithme
 - Critères d'agrégation
 - Méthode de Ward
 - Exemples sur des données simulées
 - Mise en œuvre dans R

Données

lacksquare Ensemble de n individus décrits par p variables

$$E = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$$
 avec $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, \dots, x_{ij}, \dots, x_{ip})$

■ Cet ensemble peut également être représenté sous la forme d'un tableau X de n lignes et p colonnes

$$\mathbf{X} = egin{array}{c|cccccc} var 1 & \ldots & var j & \ldots & var p \ \hline indiv 1 & x_{11} & \ldots & x_{1j} & \ldots & x_{1p} \ \hline indiv i & x_{i1} & \ldots & x_{ij} & \ldots & x_{ip} \ \hline indiv n & x_{n1} & \ldots & x_{nj} & \ldots & x_{np} \ \hline \end{array}$$

Partition

L'ensemble $P=(P_1,\ldots,P_K)$, avec $P_k\subset E$, est une partition de E en K classes si :

- (i) $\forall k \neq \ell \quad P_k \cap P_\ell = \emptyset$
- (ii) La réunion des classes P_1, \ldots, P_K est l'ensemble E

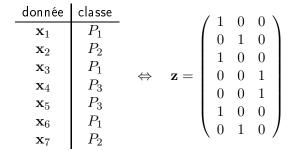
Représentation équivalente

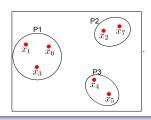
$$\mathbf{z} = \left(\begin{array}{ccc} z_{11} & \cdots & z_{1K} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ z_{n1} & \cdots & z_{nK} \end{array} \right) \quad \text{avec} \quad z_{ik} = \left\{ \begin{array}{ccc} 1 & \text{si } \mathbf{x}_i \in P_k \\ 0 & \text{sinon.} \end{array} \right.$$

La somme des valeurs la $i^{\rm e}$ ligne vaut 1 (un élément appartient à une seule classe)

La somme des valeurs de la $k^{\rm e}$ colonne vaut n_k le nombre d'éléments de la classe P_k

Exemple





Partition floue

Extension de la notion d'appartenance à une classe

Une partition floue est définie par une matrice de classification floue $\mathbf{C} = (c_{ik})_{i,k}$ vérifiant les propriétés suivantes :

- (i) $\forall i, k, c_{ik} \in [0; 1]$
- (ii) $\forall k, \quad \sum_{i=1}^{n} c_{ik} > 0$
- (iii) $\forall i, \quad \sum_{k=1}^{K} c_{ik} = 1$
- Condition (i) : relachement de la contrainte de binarité
- Condition (ii) : aucune classe ne doit être vide
- Condition (iii): appartenance totale

Hiérarchie

Un ensemble H de parties non vides de E est une hiérarchie si :

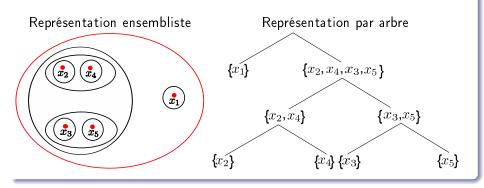
- (i) L'ensemble E appartient à H
- (ii) Toutes les parties formées d'un singleton appartiennent à H : $\forall i \quad \{\mathbf{x}_i\} \in H$
- (iii) Deux éléments de H sont disjoints ou bien l'un contient l'autre

Exemple

$$H = \left\{ \{\mathbf{x}_1\}, \{\mathbf{x}_2\}, \{\mathbf{x}_3\}, \{\mathbf{x}_4\}, \{\mathbf{x}_5\}, \\ \{\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_4\}, \{\mathbf{x}_3, \mathbf{x}_5\}, \{\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \mathbf{x}_5\}, \\ \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \mathbf{x}_5\} \right\}$$

est une hiérarchie définie sur $E = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \mathbf{x}_5\}$

Représentation graphique associée à une hiérarchie



Remarque

- Les représentations précédentes sont rarement utilisées
- On préfère leur adjoindre un indice, pour rendre la représentation plus lisible

Indice sur une hiérarchie H

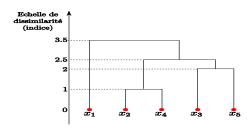
Fonction i de H dans \mathbb{R}^+ vérifiant :

- (i) $h \subset h'$ et $h \neq h' \Rightarrow i(h) < i(h')$ (i est une fonction strictement croissante)
- (ii) $i(\{\mathbf{x}_i\}) = 0 \quad \forall \mathbf{x}_i \in E$

On dit que (H,i) est une hiérarchie indicée sur E.

Représentation graphique d'une hiérarchie indicée

- On représente généralement une hiérarchie à l'aide d'un dendrogramme, arbre qui montre comment les données sont regroupées
- On associe aux différents niveaux de cet arbre une échelle de mesure (indice)
- La coupe de l'arbre à un certain niveau (indice) permet d'obtenir une partition



Ultramétrique et hiérarchie indicée

Proposition

A toute ultramétrique on peut associer une hiérarchie indicée et inversement.

Preuve

Soit δ une ultramétrique sur E.

Notons \mathcal{E}_{δ} l'ensemble des valeurs prises par δ .

Considérons la relation d'équivalence définie par :

$$\mathbf{x} \ \mathcal{R}_{\varepsilon} \ \mathbf{y} \Leftrightarrow \delta(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq \varepsilon \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in E.$$

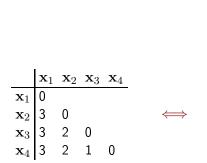
Notons $\mathcal{C}_{arepsilon}$ l'ensemble des classes d'équivalence de $\mathcal{R}_{arepsilon}$

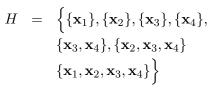
Posons
$$H = \bigcup_{\varepsilon \in \mathcal{E}_{\delta}} \mathcal{C}_{\varepsilon}$$
 et $i(h) = \max_{\mathbf{x}, \mathbf{y} \in h} \delta(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ (diametre de h).

Alors on peut montrer que (H,i) est bien une hiérarchie indicée.

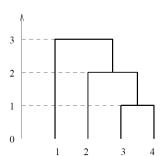
Réciproquement, si (H,i) est une hiérarchie indicée sur E alors on peut montrer que l'application définie par $\delta(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \min_{h \in H} \{i(h) \mid \mathbf{x},\mathbf{y} \in h\}$ est une ultramétrique.

Illustration de la propriété





Indices: 0, 0, 0, 0, 1, 2, 3.



Démarche habituelle des méthodes de classification

- Optimisation d'un critère numérique qui mesure l'homogénéité d'une partition
 - Exemple : minimisation de l'inertie intra-classe

$$I_W = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^K \sum_{\mathbf{x}_i \in P_k} d^2(\mathbf{x}_i, g_k)$$

où g_k est la moyenne empirique de la classe P_k

- Démarche algorithmique : construction itérative d'une « bonne » solution (proche de la solution optimale)
- Deux grandes familles de méthodes :
 - Méthode de classification hiérarchique
 - Méthode par partitionnement

Aspects combinatoires liés à la classification

Nombre total de partitions d'un ensemble de n éléments en K classes (nombre de Stirling de 2^e espèce) :

$$P_{n,K} = \frac{1}{K!} \sum_{k=1}^{K} (-1)^{K-k} C_K^k k^n$$

Quand n devient grand, ce nombre devient trop élevé!

Nombre total de partitions d'un ensemble de n éléments (nombre de Bell) :

$$P_n = \sum_{K=1}^{n} P_{n,K} = \sum_{k=0}^{n-1} C_n^k P_k$$

Aspects combinatoires liés à la classification

Exemple de calcul de $P_{n,K}$ et P_n

	K	1	2	3	4	5	6	7	8	P_n
n										
1		0	0	0	0	0	0	0	0	1
2		1	1	0	0	0	0	0	0	2
3		1	3	1	0	0	0	0	0	5
4		1	7	6	1	0	0	0	0	15
5		1	15	25	10	1	0	0	0	52
6		1	31	90	65	15	1	0	0	203
7		1	63	301	350	140	21	1	0	877
8		1	127	966	1701	1050	266	28	1	4140

$$P_{100,5} \approx 10^{67}$$

Rechercher la meilleure partition en examinant toutes les partitions possibles est une tâche quasiment insurmontable

Aspects combinatoires liés à la classification

n	P_n
1	1
2	2
3	5
4	15
5	52
6	203
7	877
8	4140
9	21147
10	115975
21	474869816156751
22	4506715738447323
23	44152005855084346
24	445958869294805289
25	4638590332229999353
26	49631246523618756274
27	545717047936059989389
28	6160539404599934652455
29	71339801938860275191172
30	846749014511809332450147
40	157450588391204931289324344702531067
41	2351152507740617628200694077243788988
42	35742549198872617291353508656626642567
43	552950118797165484321714693280737767385
44	8701963427387055089023600531855797148876
45	139258505266263669602347053993654079693415
46	2265418219334494002928484444705392276158355
47	37450059502461511196505342096431510120174682
48	628919796303118415420210454071849537746015761
49	10726137154573358400342215518590002633917247281
50	185724268771078270438257767181908917499221852770

Classification hiérarchique

Objectif

Construire une hiérarchie indicée (H,i) à partir d'une matrice de dissimilarités

Types d'approches

Il existe deux types d'approches :

- La classification ascendante : partir de la partition où chaque classe est un singleton puis fusionner successivement les classes qui se ressemblent jusqu'à obtenir une seule classe (l'ensemble E)
- lacktriangle La classification descendante : diviser l'ensemble E en classes puis recommencer sur chacune des classes jusqu'à obtenir des singletons

La plus utilisée en pratique est la classification ascendante qui donne de meilleurs résultats.

Classification Ascendante Hiérarchique (CAH)

Principe

- En partant de la partition la plus élémentaire (1 singleton par classe), fusionner successivement les classes jusqu'à obtenir 1 classe
- Les regroupements successifs sont représentés sur le dendrogramme

Algorithme CAH

- **I** Initialisation
 - lacksquare Former les classes initiales : singletons $\{\mathbf{x}_1\}, \{\mathbf{x}_2\}, \dots, \{\mathbf{x}_n\}$
 - Calculer la matrice des distances entre singletons
 - 2 Tant que le nombre de classes est > 1
 - Regrouper les deux classes les plus proches
 - Mettre à jour le tableau des distances

Hiérarchie indicée issue de la CAH

Hiérarchie

L'ensemble des classes définies au cours de l'algorithme forment une hiérarchie sur ${\cal E}.$

Indice

- Pour les classes du bas de la hiérarchie (singletons), on associe un indice nul.
- Pour toute autre classe, on associe l'indice égal à la distance entre les deux classes fusionnées pour obtenir cette dernière classe.

Agrégation de classes

Distance minimale : D_{min}

$$D_{min}(A, B) = \min_{\mathbf{x}_i \in A : \mathbf{x}_i \in B} d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_{i'})$$



Distance maximale : D_{max}

$$D_{min}(A, B) = \min_{\mathbf{x}_i \in A; \, \mathbf{x}_{i'} \in B} d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_{i'}) \quad D_{max}(A, B) = \max_{\mathbf{x}_i \in A; \, \mathbf{x}_{i'} \in B} d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_{i'})$$



Distance movenne : D_{mov}

$$D_{moy}(A,B) = \frac{\sum_{\mathbf{x}_i \in A} \sum_{\mathbf{x}_{i'} \in B} d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_{i'})}{n_A \cdot n_B}$$



Formules récurrentes de Lance et Williams

Formules récurrentes (calcul plus rapide)

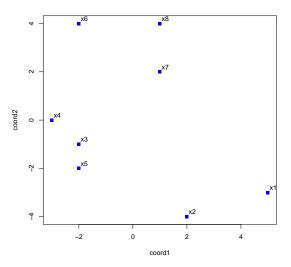
- $D_{min}(A, B \cup C) = \min(D_{min}(A, B), D_{min}(A, C))$
- $D_{max}(A, B \cup C) = \max(D_{max}(A, B), D_{max}(A, C))$
- $D_{moy}(A, B \cup C) = \frac{n_B D_{moy}(A, B) + n_C D_{moy}(A, C)}{n_B + n_C}$

Optimalité de la CAH

On peut montrer que la hiérarchie issue de l'algorithme CAH-Dmin est équivalente à l'ultramétrique δ qui minimise le critère

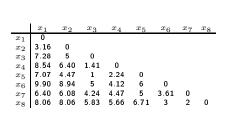
$$C(\delta) = \sum_{\mathbf{x}, \mathbf{y} \in E} \left(d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \delta(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \right)^{2}$$

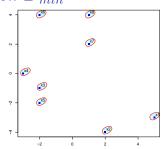
sous la contrainte $\delta < d$.

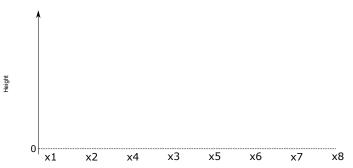


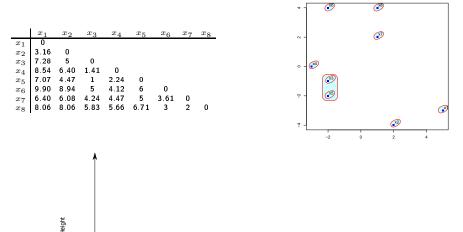
Matrice initiale des distances entre singletons

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8
$\overline{x_1}$	0							
x_2	3.16	0						
x_3	7.28	5	0					
x_4	8.54	6.40	1.41	0				
x_5	7.07	4.47	1	2.24	0			
x_6	9.90	8.94	5	4.12	6	0		
x_7	6.40	6.08	4.24	4.47	5	3.61	0	
x_8	0 3.16 7.28 8.54 7.07 9.90 6.40 8.06	8.06	5.83	5.66	6.71	3	2	0









x3

x1

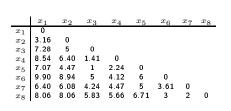
x2

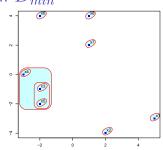
x4

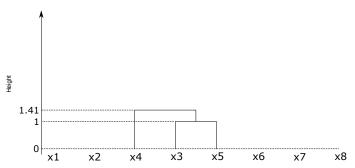
x5

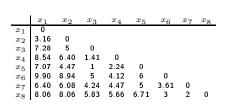
x6

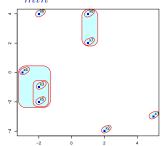
x8

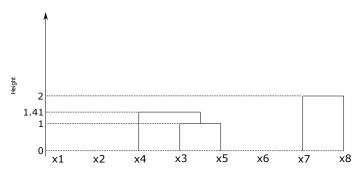


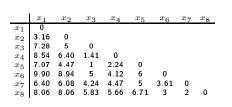


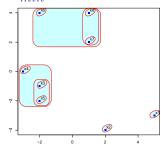


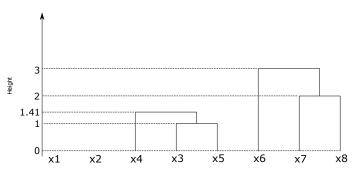


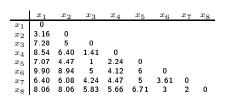


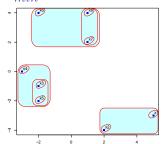


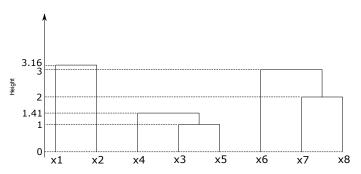




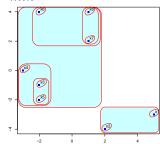


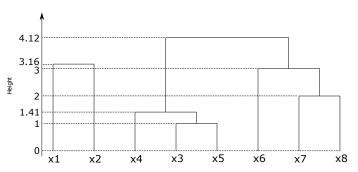




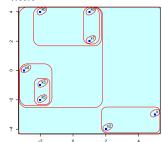


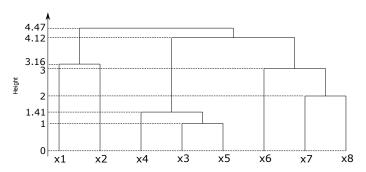
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8
x_1	0							
x_2	3.16	0						
x_3	7.28	5	0					
x_4	8.54	6.40	1.41	0				
x_5	7.07	4.47	1	2.24	0			
x_6	9.90	8.94	5	4.12	6	0		
x_7	6.40	6.08	4.24	4.47	5	3.61	0	
x_8	8.06	0 5 6.40 4.47 8.94 6.08 8.06	5.83	5.66	6.71	3	2	0
	•							





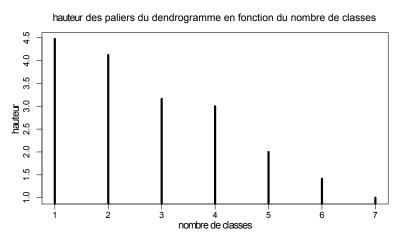
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8
x_1	0							
x_2	3.16	0						
x_3	7.28	5	0					
x_4	8.54	6.40	1.41	0				
x_5	7.07	4.47	1	2.24	0			
x_6	9.90	8.94	5	4.12	6	0		
x_7	6.40	6.08	4.24	4.47	5	3.61	0	
x_8	8.06	8.06	5.83	5.66	0 6 5 6.71	3	2	0





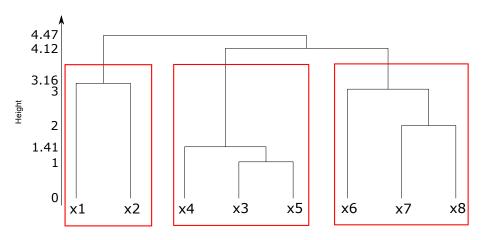
Partition issue d'une hiérarchie

Il est possible de déterminer une partition en effectuant une coupe au niveau du premier saut d'indice jugé significatif (les sous arbres obtenus constituent les classes)



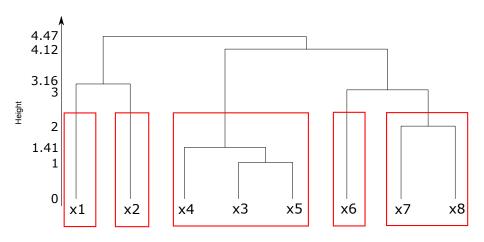
Partition issue d'une hiérarchie

Partition en 3 classes (avec le critère d'agrégation du lien minimum)



Partition issue d'une hiérarchie

Partition en 5 classes (avec critère d'agrégation du lien minimum)



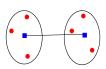
Méthode de Ward

Définition

Algorithme CAH avec le critère d'agrégation

$$D(A,B) = \frac{n_A \cdot n_B}{n_A + n_B} d^2(g_A, g_B)$$

où d est la distance euclidienne, et g_A et g_B sont les centres de gravité respectifs de A et B .

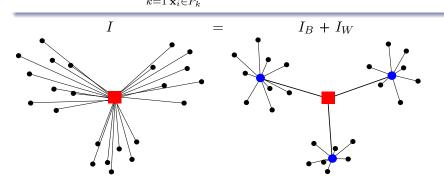


Formule de récurrence

$$D(A, B \cup C) = \frac{(n_A + n_B)D(A, B) + (n_A + n_C)D(A, C) - n_AD(B, C)}{n_A + n_B + n_C}$$

Critère d'inertie

$$I = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{g}\|^2$$
 Inertie totale
$$I_B = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{K} n_k \|\mathbf{g}_k - \mathbf{g}\|^2$$
 Inertie inter-classe
$$I_W = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{K} \sum_{\mathbf{x}_i \in P_k} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{g}_k\|^2$$
 Inertie intra-classe



Méthode de Ward et critère d'inertie

Proposition (optimisation locale): à chaque itération, la fusion de deux classes par le critère de Ward conduit à augmenter « le moins possible » l'inertie intra-classe.

Preuve: soit $P=(P_1,\ldots,P_K)$ une partition et P' la partition obtenue à partir de P en fusionnant les classes P_k et P_ℓ . On peut alors montrer que

$$I_W(P') - I_W(P) = \frac{n_k n_\ell}{n_k + n_\ell} d^2(g_k, g_\ell) = D_{ward}(P_k, P_\ell)$$

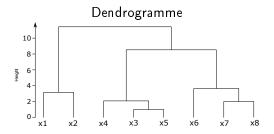
où g_k et g_ℓ sont les moyennes des classes P_k et P_ℓ .

Méthode de Ward et critère d'inertie

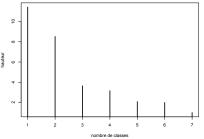
Comportement de l'inertie au cours de l'algorithme

- lacksquare A l'étape initiale, $I_W=0$ et $I_B=I=$ inertie totale.
- lacksquare A l'étape finale, $I_W=I$ et $I_B=0$.
- lacksquare Au fur et à mesure que l'on effectue les regroupements, I_W augmente et I_B diminue.

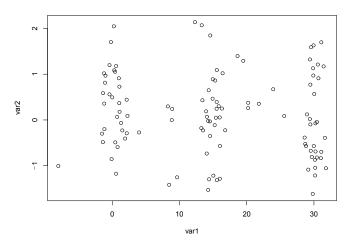
CAH avec le critère d'agrégation de Ward

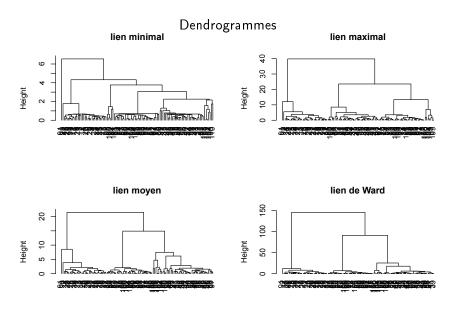


Paliers du dendrogramme rangés par ordre décroissant



Données : trois classes gaussiennes légèrement bruitées





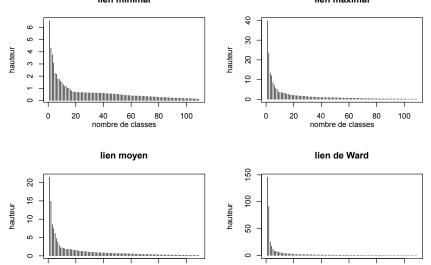
20

80

nombre de classes

100

Paliers des dendrogrammes rangés par ordre décroissant lien minimal lien maximal

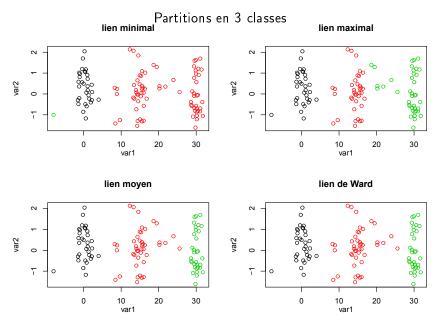


20

80

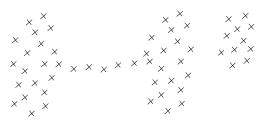
nombre de classes

100



Remarque sur les critères d'agrégation

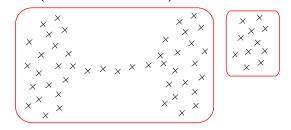
 Lien minimal : classes pouvant être déséquilibrées en volume et sensibles au bruit (« l'effet de chaîne »)



- Lien maximal : classes plus équilibrées en volume mais pouvant être très proches les unes des autres
- Lien moyen : situation intermédiaire entre le lien minimal et le lien maximal
- Ward : optimisation de l'inertie intra-classe à chaque itération

Remarque sur les critères d'agrégation

 Lien minimal : classes pouvant être déséquilibrées en volume et sensibles au bruit (« l'effet de chaîne »)



- Lien maximal : classes plus équilibrées en volume mais pouvant être très proches les unes des autres
- Lien moyen : situation intermédiaire entre le lien minimal et le lien maximal
- Ward : optimisation de l'inertie intra-classe à chaque itération

Récapitulatif sur la CAH

- La CAH nécessite de choisir une distance ou une mesure de dissimilarité et un critère d'agrégation.
- La représentation graphique généralement associée est le dendrogramme.
- Dans le cas de la distance euclidienne, on utilise généralement le critère d'agrégation de Ward qui correspond à une augmentation optimale de l'inertie intra-classe.
- Les différents critères d'agrégation ne conduisent pas toujours au même résultat.
- Il est possible de déterminer une partition en effectuant une coupe au premier saut d'indice jugé significatif
- \blacksquare Il n'est pas toujours facile de lire l'arbre hiérarchique (si n est grand).
- La CAH peut devenir très lente si n est grand.

Utilisation du logiciel R

```
data = iris[.1:4]
# Matrice des distances
D = dist(data, method = "euclidean")
# Mise en oeuvre de l'algorithme
H = hclust(D, method="ward.D2")
# Représentation graphique (dendrogramme)
plot(H, hang=-1)
# Visualisation des paliers décroissants du dendrogramme
plot(rev(H$height), type="h",xlim=c(0,20))
# Coupe de l'arbre pour trouver la meilleure partition en K=2 classes
classes = cutree(H, k=3)
# Graphique dans le premier plan principal (ACP) avec classes colorées
library(FactoMineR)
ACP = PCA(data,graph=F)
plot(ACP$ind$coord[,1],ACP$ind$coord[,2],col=classes,pch=classes)
```

Utilisation du logiciel R

```
# Utilisation de la fonction agnes de la librairie cluster
library(cluster)
# Matrice des distances
D <- dist(data, method = "euclidean")
# Mise en oeuvre de l'algorithme
H <- agnes(D, method="ward")</pre>
# Représentation graphique (dendrogramme)
plot(H,which.plots=2)
# De manière plus lisible
plot(as.hclust(H),hang=-1)
# Dessin de rectangles autour des classes (sur le dendrogramme)
rect.hclust(as.hclust(H).k=2.border="red")
```