UMONS
Université de Mons

Faculté
des Sciences

Résumé de Datamining et Datawarehousing

Résumé realisé par: Anthony Rouneau
Section: 1^{er} Bloc Master en Sciences Informatiques

Contents

I Classification **5**

1 Approche générale **5**

2 Arbre de décision (DTI) **6**
2.1 Algorithme de Hunt . . . 6
2.2 Choisir la condition de test . . . 7
2.3 Qualité d'un partitionnement . . . 8
2.4 Algorithme . . . 11
2.5 Caractéristiques . . . 12

3 Overfitting **13**
3.1 Bruit . . . 14
3.2 Manque de représentativité . . . 14
3.3 Procédure de comparaison multiple . . . 14
3.4 Estimation des erreurs de généralisation . . . 15
3.4.1 Estimation par resubstitution . . . 15
3.4.2 Incorporation de la complexité du modèle . . . 15
3.4.3 Estimer les bornes statistiques . . . 17
3.4.4 Utiliser des données de validation . . . 17
3.5 Overfitting des arbres de décision . . . 17
3.6 Évaluer les performances d'un classificateur . . . 18
3.6.1 Les métriques . . . 18
3.6.2 Méthode *Holdout* . . . 20
3.6.3 Random subsampling . . . 20
3.6.4 Cross-validation . . . 20
3.6.5 Bootstrap . . . 20
3.7 Méthode de comparaison de classificateurs . . . 21

4 Types d'algorithmes **24**
4.1 Nearest Neighbours (IBk, Lazy) . . . 24
4.2 Règles de classification . . . 24
4.3 Arbres IBk . . . 26
4.4 Naive Bayes . . . 26

II Analyse par association **27**

1 Découverte de règles **28**

2 Génération de *frequent itemsets* 29
2.1 Le principe *Apriori* . . . 29
2.2 Génération d'itemsets fréquents avec *Apriori* . . . 30
2.3 Génération de candidats et élagage . . . 31
2.3.1 Force brute . . . 31
2.3.2 $\mathbf{F_{k-1} \times F_1}$ . . . 31
2.3.3 $\mathbf{F_{k-1} \times F_{k-1}}$ . . . 32
2.4 Compter le *support count* . . . 32

3 Génération de règles d'associations 35
3.1 Élagage basé sur la *confidence* . . . 35
3.2 Génération de règle dans l'algorithme Apriori . . . 35

4 Représentations compactes des itemsets fréquents 37
4.1 Maximal Frequent Itemset . . . 37
4.2 Closed Frequent Itemsets . . . 38

5 Optimiser Apriori 40
5.1 Traverser un treillis . . . 40
5.1.1 General-To-Specific . . . 40
5.1.2 Specific-To-General . . . 40
5.1.3 Bidirectionnel . . . 41
5.1.4 Classes d'équivalence . . . 41
5.1.5 Profondeur / Largeur . . . 42
5.2 Représentation des transactions . . . 43

6 Algorithme FP-Growth 45
6.1 FP-Tree . . . 45
6.2 Génération d'itemsets fréquents . . . 45

III Analyse de clusters 47

1 Approche générale 47
1.1 Types de clustering . . . 47
1.1.1 Clustering à partitions . . . 48
1.1.2 Clustering hiérarchique . . . 48
1.1.3 Clustering imbriqués (overlapping) . . . 48
1.1.4 Clustering flou (fuzzy, probabilistic) . . . 48
1.1.5 Clustering complet . . . 48
1.1.6 Clustering partiel . . . 48
1.2 Types de clusters . . . 49
1.2.1 Bien séparés . . . 50
1.2.2 Basés sur un protoype (centre) . . . 50
1.2.3 Basés sur un graphe . . . 50

1.2.4 Basés sur la densité . . . 50
1.2.5 Partageant une propriété (clusters conceptuels) . . . 50

2 K-Means **51**
2.1 K-Means basique . . . 51
2.1.1 Assigner des points à un cluster . . . 51
2.1.2 Choisir le nouveau centroid . . . 51
2.1.3 Choisir les centroids initiaux . . . 52
2.2 Autres problèmes . . . 53
2.2.1 Bruit . . . 53
2.2.2 Réduire la SSE en postprocessing . . . 53
2.2.3 Mettre à jour les centroids . . . 54
2.3 Bisecting K-Means . . . 54
2.4 Types de cluster problématiques . . . 55
2.5 K-Means comme problème d'optimisation . . . 56

3 Clustering hiérarchique agglomératif **56**
3.1 Algorithme basique . . . 57
3.2 La formule de Lance-Williams . . . 57
3.3 Lacunes majeures . . . 58
3.3.1 Gérer les clusters de tailles différentes . . . 58
3.3.2 Les fusions sont finales . . . 58
3.3.3 Forces et faiblesses . . . 58

4 DBSCAN **59**
4.1 Densité . . . 59
4.2 Algorithme . . . 60
4.2.1 Valeur des paramètres . . . 60
4.2.2 Problème de densités variables . . . 60

5 Évaluation des clusters **61**
5.1 Non-supervisée avec cohésion et séparation . . . 61
5.1.1 Cluster basés sur des graphes . . . 62
5.1.2 Cluster basés sur les prototypes . . . 62
5.1.3 Mesures globales . . . 62
5.1.4 Graphe vs prototypes . . . 63
5.1.5 Lien entre Cohésion et Séparation . . . 63
5.1.6 Coefficient de silhouette . . . 63
5.2 Non-supervisée avec matrice de proximité . . . 64
5.3 Non-supervisée pour clustering hiérarchique . . . 65
5.4 Déterminer le nombre idéal de clusters . . . 65
5.5 Tendance au clustering . . . 66
5.6 Mesures supervisées . . . 66
5.6.1 Mesures orientées classification . . . 66

5.6.2 Mesures orientée similarités 67
5.6.3 Mesure supervisée pour clustering hiérarchique 67
5.7 Interpréter les mesures 67

Part I
Classification

Le rôle d'une classification est d'assigner des objets (instances) à une classe selon une suite d'attributs. Chaque objet peut donc être représenté par un tuple (x, y), où x est une séquence d'attributs et y le nom de sa classe.

Un **attribut** peut être discret ou continu, contrairement au **label de classe** , qui lui doit être discret. Ce qui veut dire que le nombre de classes dans lesquelles les instances seront classé est fini, et que toutes les classes sont à priori connues. C'est ce qui différencie une classification d'une régression

Classification – Tâche de construire/d'apprendre une fonction f qui fera correspondre un ensemble d'attributs, un objet, x à une des classes prédéfinies, y.

• **Buts d'une classification**

Modélisation descriptive Utilisation d'une classification dans le but de lister les attributs qui définissent une certaine classe. (e.g. attributs d'animaux → famille d'animaux.

Modélisation prédictive Utilisation d'une classification pour prédire la classe d'objets inconnus. Notons qu'une classification n'est pas performante pour des classes ordonnées (avec une hiérarchie ou un ordre définie).

1 Approche générale

Une technique de classification consiste à construire un modèle de classification depuis un **ensemble de données d'entraînement** . Ce modèle peut ensuite être évalué en y faisant passer un **ensemble de données de test** , idéalement différent de l'ensemble d'entraînement pour éviter l'*overfiting* (voir plus loin).

Un modèle est évalué selon plusieurs métriques, dont par exemple la *Précision* et le *Taux d'erreur*.

Confusion matrix for a 2-class problem.

		Predicted Class	
		$Class = 1$	$Class = 0$
Actual Class	$Class = 1$	f_{11}	f_{10}
	$Class = 0$	f_{01}	f_{00}

$$\text{Précision} = \frac{\text{Nombre de prédictions correctes}}{\text{Nombre total de prédiction}} = \frac{f_{11} + f_{00}}{f_{11} + f_{10} + f_{01} + f_{00}}$$

$$\text{Taux d'erreur} = \frac{\text{Nombre de prédictions fausses}}{\text{Nombre total de prédiction}} = \frac{f_{10} + f_{01}}{f_{11} + f_{10} + f_{01} + f_{00}}$$

2 Arbre de décision (DTI)

DTI = Decision Tree Induction.

Le nombre d'arbres de décision pouvant découler d'un ensemble d'attributs est exponentiel. Il est donc impossible de trouver l'arbre optimal pour un problème de classification donné. C'est pourquoi la plupart des techniques de construction utilisent un algorithme glouton (greedy).

2.1 Algorithme de Hunt

Les méthodes de construction `ID3`, `C4.5`, `CART` découlent toutes du même algorithme : l'algorithme de Hunt. L'algorithme consiste à partitionner récursivement les données d'entraînement dans de sous-ensembles plus "purs". Celui-ci est décrit ci-dessous.

Soit D_t le sous-ensemble des données d'entraînement qui est associés au noeud t de l'arbre, et $y = \{y_1, y_2, \dots, y_c\}$ les labels de classe.

Étape 1 Si tous les objets de D_t appartiennent à la même classe y_t, alors, le noeud t est une feuille avec le label y_t.

Étape 2 Si D_t contient des instances qui appartiennent à plus qu'à une classe, une **condition de test d'attribut** est sélectionnée pour partitionner les objets dans de plus petits sous-ensembles. Un noeud fils est créé pour chaque sortie de la condition de test et les objets de D_t sont répartis dans les noeuds fils selon la condition sélectionnée. Pour bien partitionner, il faut tenir compte du type d'attribut (cf. 2.2) et savoir évaluer la qualité d'une partition (cf. 2.3).

Étape 3 Recommencer jusqu'à ce qu'on ne doive plus diviser aucun noeud. Il y a plusieurs méthodes pour déterminer cela. Soit on peut attendre qu'il n'y ait plus que des feuilles parfaites, ne contenant qu'une seule classe chacune, soit on peut arrêter le processus plus tôt.

Pour que cet algorithme fonctionne, il faudrait que chaque combinaison des valeurs d'attributs soit présente dans les données d'entraînement et que chaque combinaison ait une classe unique (classification parfaite car on aurait géré tous les cas possibles). Ce n'est évidemment pas possible, c'est pourquoi les deux conditions ci-dessous sont nécessaires en pratique.

1. Il est possible qu'un des noeuds fils créés à l'étape 2 soit vide (aucune des instances ne correspond à la condition). Dans ce cas, le noeud fils vide en question devient une feuille et aura comme label la classe majoritaire présent dans son parent.

2. Si dans l'étape 2, tous les objets sont les même, mais qu'ils n'appartiennent pas à la même classe (contradictions, bruits), il n'est dés lors plus possible de diviser le noeud. Il deviendra donc une feuille et aura comme label la classe majoritairement représentée par ses objets.

2.2 Choisir la condition de test

Il faut pouvoir diviser les différents attributs en fonction de leur type.

Attributs binaire La condition de test génère deux noeuds fils, un par valeur possible.

Attributs nominaux Les deux manières de division sont illustrées par la figure 1. À savoir que des algo. de construction d'arbres, comme `CART` ne produise que des sorties binaires, en choisissant la meilleure découpe binaire parmi les $2^{k-1} - 1$ possibilités.

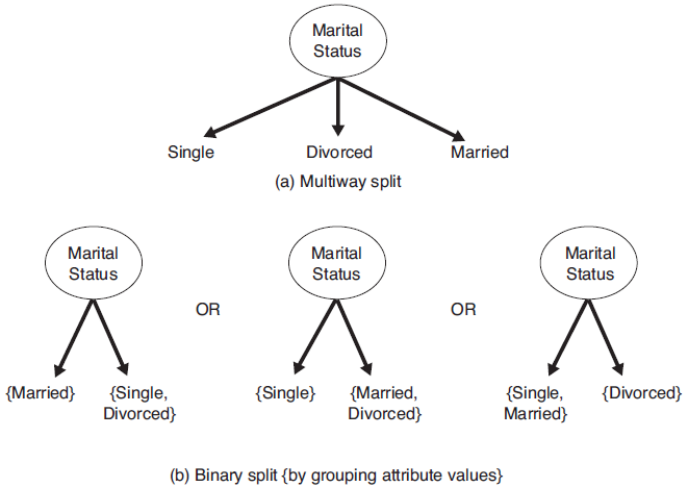


Figure 1: Division d'attributs binaires

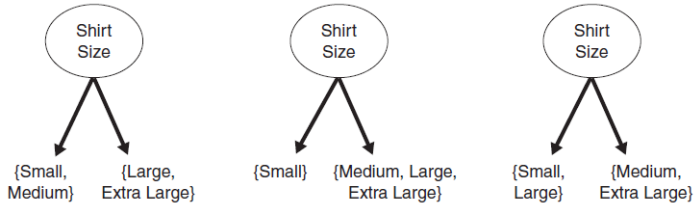


Figure 2: Division d'attributs ordonnés

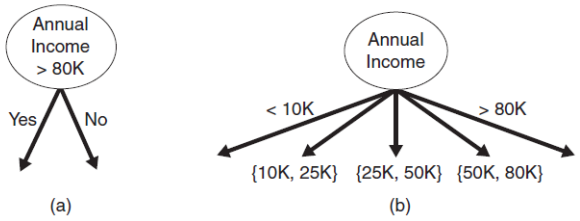


Figure 3: Division d'attributs continus

Attributs ordonnés De la même manière que les nominaux, tant que l'ordre des attributs n'est pas cassé par les partitions, voir la figure 2.

Attributs continus Même chose que les deux derniers, même si cette fois, on a une condition sur la valeur continue, comme représenté sur la figure 3. L'algorithme va évaluer les différents splits possibles et choisir le meilleur. Pour une division *multiway*, une discrétisation est généralement opérée sur les valeurs des attributs.

2.3 Qualité d'un partitionnement

Pour évaluer la qualité d'un partitionnement, définissons $p(i|t)$ comme étant le **pourcentage** (entre 0 et 1) d'objets appartenant à la classe i, pour un noeud d'arbre t. Quand le noeud n'est pas utile, la notation peut se réduire à p_i. Pour une classe binaire, (p_0, p_1) peut-être utilisé avec $p_1 = 1 - p_0$.

• Impureté d'un noeud

Plus une classe majoritairement représentée par les objets du noeud, au plus ce noeud, cette partition, sera considérée comme *pure*. En pratique, c'est le degré d'impureté qui sera mesuré. un noeud $(0, 1)$ n'a aucune impureté, tandis qu'un noeud $(0.5, 0.5)$ est le plus impur possible (aucune classe n'est majoritairement représentée).

Quelques exemples de mesures d'impuretés (c = le nombre de classes différentes, et $0log_20 = 0$ pour le calcul de l'*Entropy*) :

$$\text{Entropy}(t) = -\sum_{i=0}^{c-1} p(i|t) \cdot log_2 \cdot (p(i|t))$$

$$\text{Gini}(t) = 1 - \sum_{i=0}^{c-1} [p(i|t)]^2$$

$$\text{Classification error}(t) = 1 - \max_i [p(i|t)]$$

Les trois mesures, bien que différentes, respecte toutes la mesure "d'impureté" et ont donc le même pire cas et le même meilleur cas. Cependant, la mesure choisie peut influencer le résultat du partitionnement.

• Impureté d'un split

Pour évaluer l'impureté d'un partitionnement, on va utiliser une moyenne pondérée par rapport au nombre d'objet par partition.

$$I(\text{split}) = \sum_{j=1}^{k} \frac{N(v_j)}{N} I(v_j)$$

Avec I la mesure d'impureté, k le nombre de partitions, N le nombre total d'objets, et $N(v_j)$ le nombre d'objets présents dans la partition (noeud fils) v_j.

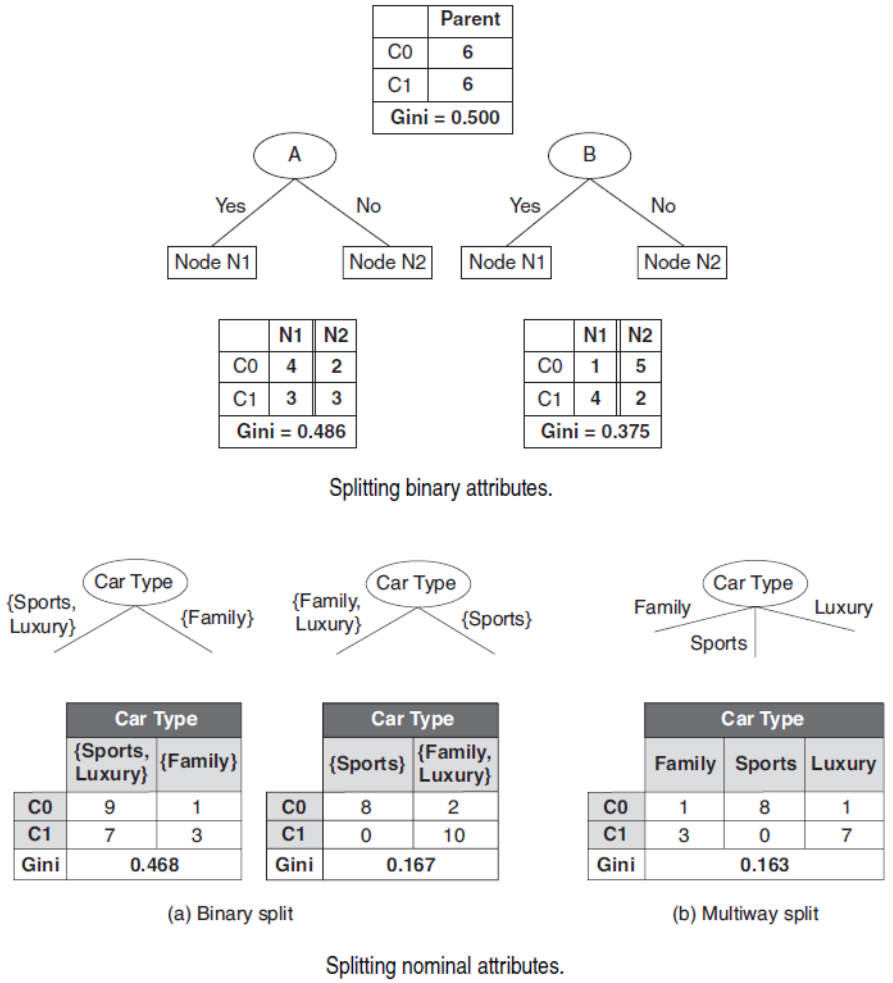


Figure 4: Exemple de Gini(split) de partitionnements d'attributs binaires et nominaux

Par exemple, prenons la figure 4, le tableau `Car Type` ((b), split *multiway*). Le calcul se fait comme suit ($\{value\}$ représentant un noeud fils, une partition) :

$$\text{Gini(split)} = \frac{4}{20} \cdot \text{Gini}(\{\text{Family}\}) + \frac{8}{20} \cdot \text{Gini}(\{\text{Sports}\}) + \frac{8}{20} \cdot \text{Gini}(\{\text{Luxury}\})$$

$$\text{Gini(split)} = \frac{4}{20} \cdot [1 - (\sum_{i=0}^{1} [p(C_i|\{\text{Family}\})]^2] + \frac{8}{20} \cdot [1 - (\sum_{i=0}^{1} [p(C_i|\{\text{Sports}\})]^2]$$

$$+ \frac{8}{20} \cdot [1 - (\sum_{i=0}^{1} [p(C_i|\{\text{Luxury}\})]^2])$$

$$\text{Gini(split)} = \frac{4}{20} \cdot 0.375 + \frac{8}{20} \cdot 0 + \frac{8}{20} \cdot 0.163 = 0.163$$

C'est normal que le *multiway* ait de meilleurs résultats que les binaires, car faire du binaire, c'est en quelques sorte fusionner des résultats de *multiway*

Class	No	No	No	Yes	Yes	Yes	No	No	No	No
	Annual Income									
Sorted Values →	60	70	75	85	90	95	100	120	125	220
Split Positions →	55	65	72	80	87	92	97	110	122	172	230
	<= >	<= >	<= >	<= >	<= >	<= >	<= >	<= >	<= >	<= >	<= >
Yes	0 3	0 3	0 3	0 3	1 2	2 1	3 0	3 0	3 0	3 0	3 0
No	0 7	1 6	2 5	3 4	3 4	3 4	3 4	4 3	5 2	6 1	7 0
Gini	0.420	0.400	0.375	0.343	0.417	0.400	0.300	0.343	0.375	0.400	0.420

* *

Splitting continuous attributes.

Figure 5: Exemple de Gini(split) d'un partitionnement d'attribut continu

En ce qui concerne les attributs continus, il faut réduire le nombre de calculs pour décider du meilleur split. Regardons la figure 5. Pour réduire les calculs, on va classer les objets par leur valeur d'attribut (Sorted Values). Ensuite, on choisit des positions de split en prenant des points à égales distances de deux valeurs ordonnées (Split Positions, $\lfloor \frac{70+75}{2} \rfloor = 72$). On calcule ensuite comme précédemment la valeur de Gini pour chaque split possible, et le split en 97 est le meilleur par sa moyenne pondérée d'impureté de 0.300.

On pourrait encore améliorer ceci en ne calculant l'impureté que des positions de split se trouvant à la frontière de deux classe. On ne garderait alors que les position marqués par des $*$, ce qui réduit considérablement les calculs.

• Gain

Les algorithmes de construction d'arbres choisissent généralement une fonction qui maximise le gain (Δ), c'est-à-dire qui choisisse le partitionnement qui améliore le plus la pureté du split comparé à la pureté du parent.

$$\Delta = I(\text{parent}) - I(\text{split})$$

Avec I la mesure d'impureté. Lorsque I correspond à l'*Entropy*, le gain est appelé gain d'information (Δ_{info}). On remarque que maximiser Δ revient à minimiser la moyenne pondérée de l'impureté des noeuds fils.

• **Ratio de gain**

Il peut arriver qu'un attribut soit inapproprié à la classification. Typiquement, on retrouve souvent un attribut "ID" dans les tables. Chaque objet ayant un ID unique, l'attribut ne peut en aucun cas aider à la classification. De manière générale, on voudrait éviter qu'un attribut ne divise l'arbre en trop de branches.

Pour éviter ceci, il y a deux manières de faire :

1. Se restreindre à des splits binaires
2. Prendre en compte dans le score d'un split le nombre de partitions, comme le fait par exemple le **Gain ratio**.

$$\text{Gain ratio} = \frac{\Delta_{\text{info}}}{\text{Entropy}(split)}$$

Ou Entropy$(split)$ est l'impureté du split, calculé avec l'*Entropy*. L'idée est que si le split a beaucoup de branches, alors Entropy$(split)$ sera grand, réduisant ainsi son *Gain ratio*.

2.4 Algorithme

Algorithm A skeleton decision tree induction algorithm.

```
TreeGrowth (E, F)
 1: if stopping_cond(E,F) = true then
 2:    leaf = createNode().
 3:    leaf.label = Classify(E).
 4:    return leaf.
 5: else
 6:    root = createNode().
 7:    root.test_cond = find_best_split(E, F).
 8:    let V = {v|v is a possible outcome of root.test_cond }.
 9:    for each v ∈ V do
10:       E_v = {e | root.test_cond(e) = v and e ∈ E}.
11:       child = TreeGrowth(E_v, F).
12:       add child as descendent of root and label the edge (root → child) as v.
13:    end for
14: end if
15: return root.
```

Figure 6

`Classify()` consiste à chercher un label à la feuille. Dans la plupart des cas, cela consiste à faire:

$$leaf.label = \underset{i}{\text{argmax}}\, p(i|t)$$

$p(i|t)$ peut dés lors être utilisé comme la probabilité qu'à un objet du noeud t d'appartenir à la classe i.

Après être passé dans l'algorithme, la taille de l'arbre peut-être réduite grâce à une étape d'élagage (pruning), car les arbres trop larges font souvent l'objet d'*overfitting*.

2.5 Caractéristiques

Les caractéristiques principales d'une classification par arbre de décision sont les suivantes:

1. Technique non-paramétrique. Aucune hypothèse sur le jeu de donnée n'est nécessaire.
2. La recherche de l'arbre optimale $\in NP - Complet$, les méthodes utilisées sont des heuristiques.
3. Les techniques développées sont très rapides d'exécution.
4. Un arbre est facile à interpréter et à comparer à d'autres modèles.
5. Donne une représentation expressive pour l'apprentissage de fonctions à valeurs discrètes. Même s'il y a quelques exceptions avec des problèmes Booléens, comme la fonction de parité, dont la valeur est 0 (*resp.* 1) quand il y a un nombre impair (*resp.* pair) d'attribut Booléen. Il faut un arbre complet avec 2^d noeud (d = nbre d'attribut Booléen) pour avoir un arbre permettant de répondre.
6. Les arbres sont robustes au bruit.
7. Les **attributs redondants** ne posent pas de problèmes. Un attribut est redondant lorsqu'il y a une forte corrélation entre cet attribut et un autre. En pratique, quand l'un des deux attributs redondants sera utilisé pour un split, l'autre ne sera pas utilisé. Si l'arbre est trop grand, il se peut qu'il y ait tout de même des splits redondant, qui seront coupé à l'élagage.
8. Si une feuille contient trop peu d'objets, on parle de **fragmentation des données**. On peut l'éviter en refusant de split lorsqu'on a plus assez d'objets.
9. Des sous-arbres peuvent être dupliqué dans l'arbre de décision. Ceux-ci seront fusionnés dans l'élagage.
10. Les frontières, formées par les attributs (cf. figure 7), entre les classes sont rectilignes pour les arbres car l'étape de division se fait pour un attribut à la fois, ce qui empêche de trouver les relations complexes qu'il peut y avoir entre les attributs. Des **arbres de décision obliques** peuvent être utilisés pour résoudre ce problème, ils prennent plus qu'un attribut pour diviser leurs attributs, ce qui multiplie les calculs... Il existe aussi la **construction inductive**, qui va créer de nouveaux attributs à partir des attributs de base qui sont liés entre eux. Ceci demande moins de calcul car les relations entre attributs se calculent une seule fois.
11. Le choix de l'impureté n'a pas beaucoup d'influence sur la qualité de l'arbre final. La stratégie d'élagage, par contre, peut l'influencer.

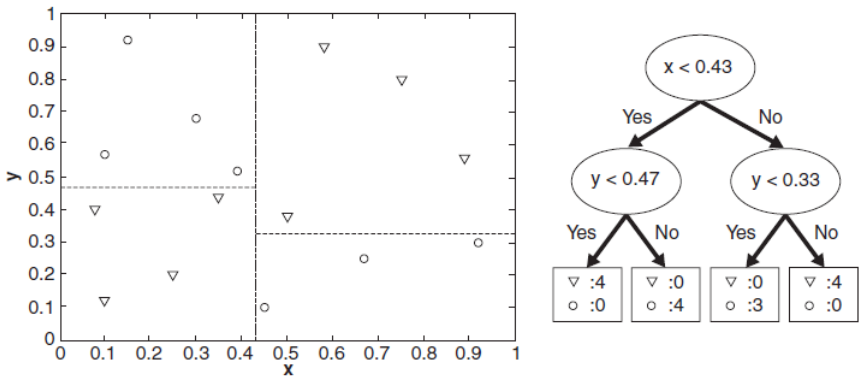


Figure 7: Exemple de frontières séparant les classes

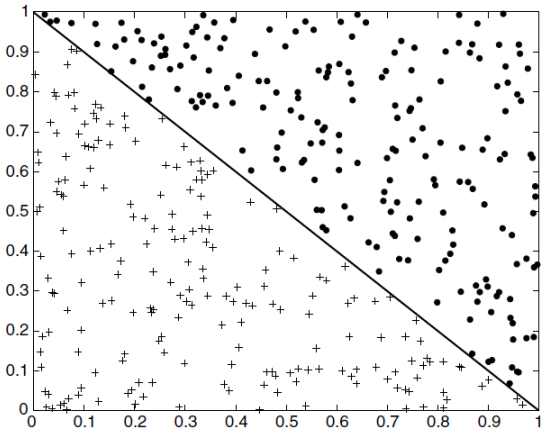


Figure 8: Exemple de jeu de donnée ne pouvant pas être classé en n'utilisant que des conditions sur des attributs simple (il faudrait utiliser plusieurs attributs)

3 Overfitting

On divise les erreur de classification en deux types d'erreur :

1. **Les erreurs d'entraînement, ou erreurs de resubstitution** – Erreurs commises sur les données d'entraînement.
2. **Les erreurs de généralisation** – Erreurs commises sur des données données extérieures, ne venant pas du jeu d'entraînement.

Dans les deux cas, l'erreur représente le nombre d'objets mal classifiés sur le nombre total d'objet du jeu de données.

Un modèle présentant plus d'erreur de généralisation que d'erreur d'entraînement est ce qu'on appel un modèle qui fait de l'*overfitting*, c'est-à-dire qu'il colle trop à ses données d'entraînement et qu'il n'est pas très bon pour classer d'autres objets, même s'il esst peut-être bon pour les données d'entraînement.

Lorsqu'un modèle est trop restreint, il peut y avoir le phénomène d'*underfitting* qui apparaît. Ceci veut dire que le modèle n'a pas saisi les caractéristiques qui permettent de classifier correctement et est donc mauvais à la fois pour classer les données d'entraînement, mais aussi pour classer les données extérieures.

3.1 Bruit

Le bruit est une des causes dee l'*overfitting*. Si par exemple des objets sont mal classifiés dans le jeu de données d'entraînement, cela va induire en erreur le modèle et peut donc commettre cette erreur en essayant de classifier des données extérieures.

On peut parfois identifier la partie du modèle qui pose problème, et la supprimer.

3.2 Manque de représentativité

Si il y a un petit nombre d'objets, ou du moins, qu'une classe compte un petit nombre d'objets dans le jeu de données d'entraînement, le modèle va avoir du mal à identifier ce qui caractérise cette classe mal représentée (e.g. 5 no, 1 yes).

3.3 Procédure de comparaison multiple

Pour illustrer ce qu'est la comparaison multiple, imaginons qu'on doive prédire s'il va pleuvoir demain. Si on tire au hasard, la probabilité qu'on ait raison est de 0.5. Par contre, si on doit prédire pour les dix prochains jour, la probabilité qu'on ait raison au moins 8 fois sur 10 est de :

$$\frac{\binom{10}{8} + \binom{10}{9} + \binom{10}{10}}{2^{10}} = 0.0547$$

Ce n'est pas très élevé, mais si on demande à 50 personnes de faire le même travail pour les 10 jours à venir, $Nobody$ étant la probabilité que personne n'ait raison au moins pour 8 jours, et $AtLeastOne$ la probabilité qu'au moins une des 50 personnes ait raison 8 fois sur 10 :

$$Nobody = (1 - 0.0547)^{50}$$

$$AtLeastOne = 1 - Nobody = 0.9399$$

Mais même si l'on trouve la personne qui a trouvé, rien ne garanti que cette même personne est douée dans ce qu'elle fait. Peut-être qu'elle a juste deviné au hasard, huit jours de suite.

On peut faire l'analogie avec la construction d'un arbre de décision. Si l'on dit qu'on a un arbre T_0 et qu'on cherche, parmi k splits différents du noeud courant, $T_{x_{max}}$, l'arbre résultant de l'ajout du split, de gain maximum. Et si l'on dit que l'on choisit $T_{x_{max}}$ pour continuer plutôt que

T_0 si ce gain dépasse un seuil α ($\Delta(T_0, T_{x_{max}}) > \alpha$). Et bien plus k augmente, plus on a de chance de trouver le split qui va donner un gain assez élevé. Mais si le nombre de donnée est réduit, la variance de ce gain est plus grand, et il y a de grandes chances qu'un gain "hasardeux" soit choisi car il dépassait α (à l'image du météorologiste chanceux, on a aucune garantie que cet ajout au modèle restera performant pour les données extérieures).

3.4 Estimation des erreurs de généralisation

La complexité d'un modèle influence l'*overfitting*. La question est donc quelle est la complexité idéale pour un modèle ? Il faudrait minimiser le taux d'erreur de généralisation, mais lors de la création du modèle, l'algorithme n'a accès qu'aux données d'entraînement.

3.4.1 Estimation par resubstitution

On suppose ici que le jeu de données d'entraînement représente bien les données globales du problème. Il suffit donc de minimiser l'erreur d'entraînement pour minimiser, par hypothèse, l'erreur de généralisation. Pas bon en pratique.

3.4.2 Incorporation de la complexité du modèle

Comme l'*overfitting* peut venir d'un modèle trop complexe, préférer des modèles plus simples permettrait de limiter l'*overfitting*, c'est le principe du **Rasoir d'Occam**.

Rasoir d'Occam – Parmi deux modèles avec la même erreur de généralisation, le modèle le plus simple des deux est préféré au plus complexe.

Comme disait Einstein, "Tout devrait être fait le plus simple possible, mais pas plus simple". Il ne faudrait donc pas prendre un modèle trop simple, au risque d'*underfitting*.

Ci-dessous sont présenté deux méthodes d'intégration de la complexité dans l'évaluation des modèles.

• Estimation pessimiste de l'erreur

On additionne l'erreur d'entraînement et la complexité du modèle. Appelons $n(t)$ le nombre d'objets d'entraînement classifié par le noeud t et $e(t)$ le nombre d'objet mal classifiés. l'estimation pessimiste de l'erreur d'un arbre T, $e_g(T)$ est la suivante :

$$e_g(T) = \frac{\sum_{i=1}^{k}[e(t_i) + \Omega(t_i)]}{\sum_{i=1}^{k} n(t_i)} = \frac{e(T) + \Omega(T)}{N_t}$$

Avec k le nombre de feuilles, $e(T)$ l'erreur globale d'entraînement, N_t le nombre d'objets d'entraînement, et $\Omega(T)$ la pénalité associée à chaque noeud t_i. La valeur de cette pénalité décidera de l'importance que l'on accorde à la complexité dans l'estimation.

Pour un arbre binaire, une pénalité de 0.5 indique qu'un noeud doit toujours se diviser en deux

si la division permet de mieux classer au moins un objet d'entraînement, en effet, ajouter une pénalité de 0.5 à l'erreur en créant une nouvelle feuille (on en crée deux, mais on ajoute qu'une seule feuille, étant donné que le parent était précédemment une feuille, et qu'il n'en est plus une) est moins couteux que de commettre une erreur d'entraînement. Et une pénalité valant 1 indique que pour diviser un noeud, il faut que la division permette d'améliorer la classification d'au moins deux objets d'entraînement.

• **Description de longueur minimal (MDL)**

Approche venant de la théorie de l'information. En prenant la figure 9 comme exemple, où A et B partage un jeu de donnée X, mais où il n'y a que A qui connait y. A voudrait donc transmettre les labels (y) à B, ce qui représente $O(n)$ bits d'information. Si A arrive à créer un modèle permettant de déduire y_i de X_i, alors si la taille de l'encodage du modèle est inférieur à la taille de l'encodage des y, il est plus intéressant d'envoyer le modèle plutôt que y en entier.

Il se peut cependant que le modèle ne permettent pas une classification sans faute. Il faudra alors envoyer à B ces objets, mal classifiés, individuellement.

$$Cost(model, data) = enc(model) + enc(misclassified)$$

$enc(model)$ étant le coût de l'envoi de l'encodage du modèle et $enc(misclassified)$ le coût de l'envoi de l'encodage des objets mal classifiés par le modèle. On devrait donc chercher un modèle qui minimise se coût.

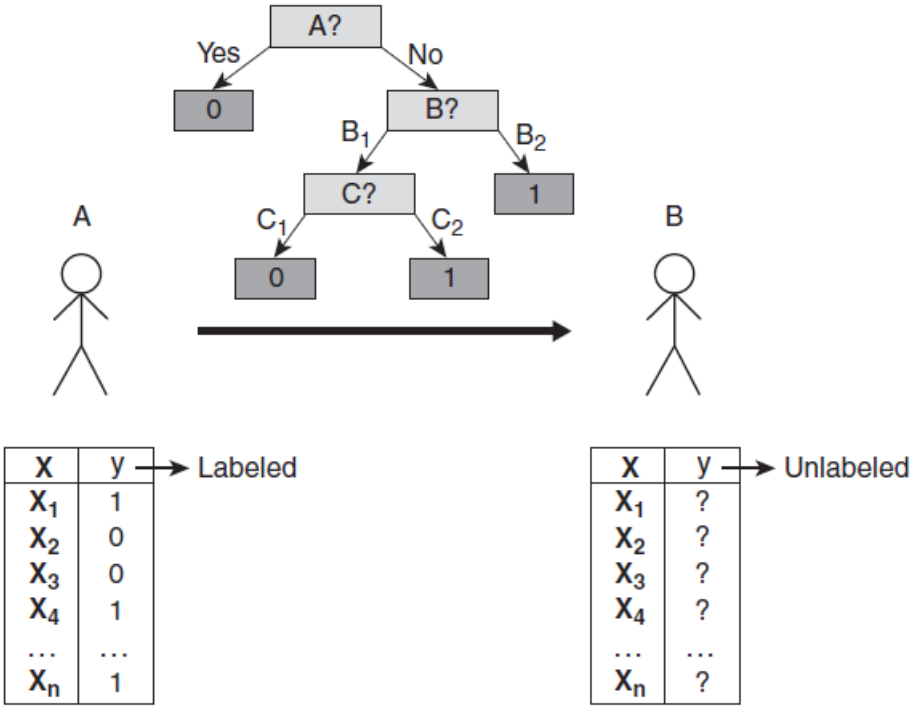


Figure 9: Minimum Description Length (MDL) Principle

3.4.3 Estimer les bornes statistiques

L'erreur de généralisation peut aussi être estimée comme une correction statistique de l'erreur d'entraînement. On calculera la correction statistique comme une borne supérieure de l'erreur d'entraînement, en prenant en compte le nombre d'objet qui atteignent une feuille en particulier. Par exemple, l'algorithme `C4.5` suppose que le nombre d'erreurs commises par chaque feuille suit une distribution binomiale. Il faut donc déterminer la borne limite supérieure à l'erreur d'entraînement observée.

3.4.4 Utiliser des données de validation

Dans cette méthode, on coupe le jeu de donnée d'entraînement en deux. Une partie (généralement $\frac{2}{3}$) du jeu d'entraînement original est gardé pour l'entraînement du modèle et le reste des données est utilisé pour estimer l'erreur de généralisation (comme si cette partie des données était composée de données extérieures). Le point faible de cette méthode est que l'on retire des données du jeu d'entraînement, ce qui peut causer des lacunes dans le modèle (classe trop peu représentée, ...).

3.5 Overfitting des arbres de décision

Avoir une estimation fiable de l'erreur de généralisation permet à l'algorithme de classification de chercher un modèle précis sans *overfitter* les données d'entraînement. Ci-dessous sont présentées deux stratégies qui permettent d'éviter l'*overfitting* dans les arbres de décision.

• Prepruning (Early Sotpping Rule)

Le pré-élagage consiste à arrêter la croissance de l'arbre avant d'atteindre un arbre qui *overfit* les données d'entraînement. Il faut pour cela choisir une condition d'arrêt . Celle-ci peut se baser sur l'impureté ou le gain. La **principale difficulté** est alors de choisir le bon seuil qui arrêtera la croissance de l'arbre pour la mesure choisie. Un seuil trop restrictif implique de l'*underfitting* et un seuil trop large implique l'*overfitting*.

• Post-pruning

On applique le post-élagage sur un arbre qui n'a pas subi de *prepruning*. On élague cette fois-ci des feuilles vers la racine. Les deux manière d'élaguer sont les suivante :

(1) Remplacer un sous-arbre par une feuille avec le label présent majoritairement dans ce sous-arbre.
(2) Remplacer un sous-arbre par se branche la plus utilisée.

L'élagage s'arrête quand il n'y a plus d'améliorations possibles.

On obtient souvent de meilleurs résultats avec le *post-pruning* car on part d'un arbre complet, et on évite donc l'*underfitting*. Le point faible pouvant être que les calculs fait pendant la création de l'arbre peuvent être "gaspillés" quand on fini par couper une partie de l'arbre.

3.6 Évaluer les performances d'un classificateur

Maintenant qu'on peut trouver un modèle qui évite l'*overfitting*, on va vouloir le tester sur des données extérieures, des données de test. Ceci va permettre d'obtenir une estimation non-biaisée de l'erreur de généralisation (par la définition de ce type d'erreur).

3.6.1 Les métriques

Différentes métriques existent pour évaluer les performances d'un modèle sur un jeu de test. Soit TP le nombre de vrai positifs, TN le nombre de vrais négatifs, FP le nombre de faux positifs et FN le nombre de faux négatifs.

$$P = TP + FN$$
$$N = FP + TN$$

$$True - Positive - Rate = \frac{TP}{P} (= TPR)$$
$$False - Positive - Rate = \frac{FP}{N} (= FPR)$$
$$Recall = \frac{TP}{P}$$
$$Precision = \frac{TP}{TP + FP}$$
$$Accuracy = \frac{TP + TN}{P + N}$$

$$F - Measure = 2 \cdot \frac{Recall \cdot Precision}{Recall + Precision} = \frac{2 \cdot TP}{2 \cdot TP + FP + FN}$$

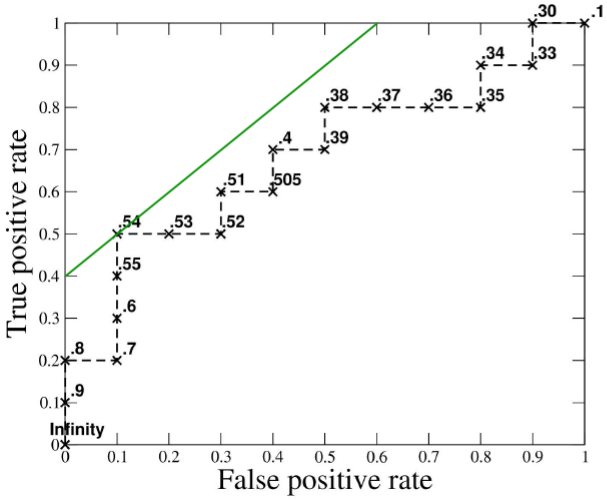
Il existe une autre mesure, plus complexe, appelée ROC. Pour l'expliquer, prenons les figures 10 à 12. Le but est d'évaluer la capacité d'un attribut (pour l'exemple : $Score$) à classer les instances. En effet, certains attributs permettent de mieux distinguer les classes grâce à une conditions sur ses valeurs.

En prenant l'exemple de la figure 10, la valeur la plus haute (au niveau des diagonales), est celle de l'instance 6. Au plus cette diagonale tend vers le haut-gauche du graphe, au mieux l'attribut coupe bien les instances en classes.

On sait que l'instance 6 est p (le point le plus haut est d'office dans la classe testée, ici p), et que l'instance d'après est n (car sinon, le point le plus haut aurait été celui-ci), donc, la condition sera :

$$\text{Classe } p \text{ si } Score \geq \frac{0.54 + 0.53}{2}; \text{ Classe } n \text{ sinon}$$

Se faisant, on sait que 0.54 sera de la classe p, et que 0.53 sera dans la class n.



Inst#	Class	Score	Inst#	Class	Score
1	p	.9	11	p	.4
2	p	.8	12	n	.39
3	n	.7	13	p	.38
4	p	.6	14	n	.37
5	p	.55	15	n	.36
6	p	.54	16	n	.35
7	n	.53	17	p	.34
8	n	.52	18	n	.33
9	p	.51	19	p	.30
10	n	.505	20	n	.1

Figure 10: Pour une instance de p, on monte, et pour une instance de n, on va à droite

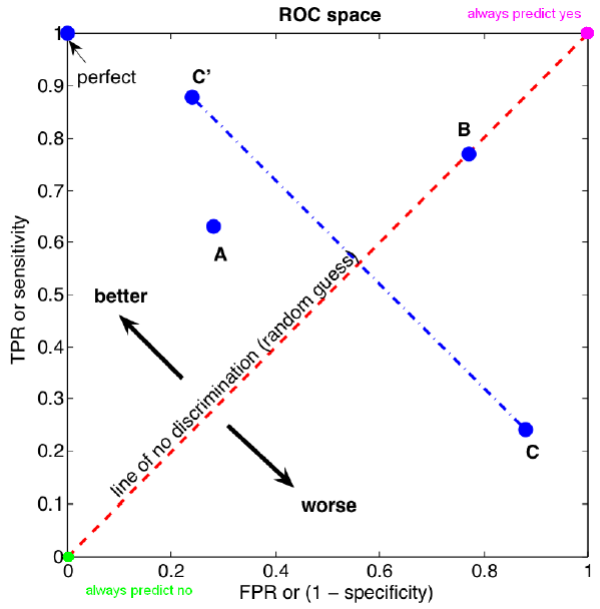


Figure 11: On prend la plus haute diagonale, parallèle à la ligne de discrimination, qui passe par un des points

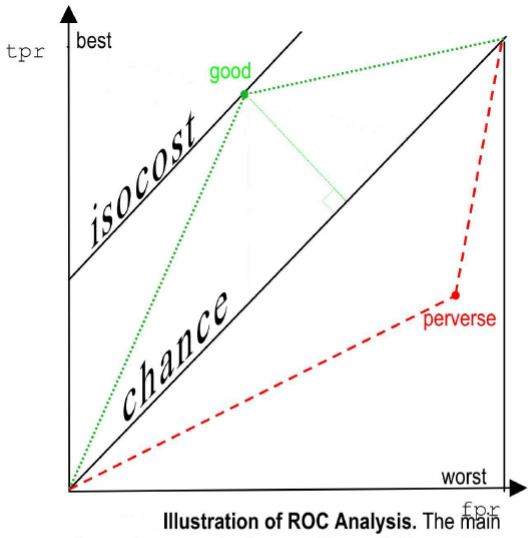


Illustration of ROC Analysis. The main diagonal represents chance with parallel isocost lines representing equal cost-performance. Points above the diagonal represent performance better than chance, those below worse than chance. For a single good (dotted=green) system, AUC is area under curve (trapezoid between green line and x=[0,1]). The perverse (dashed=red) system shown is the same (good) system with class labels reversed.

Figure 12: Au plus la diagonale est haute, au plus la classification est bonne

3.6.2 Méthode *Holdout*

Très semblable à l'usage de données de validation. On va diviser les données initiales en deux ensembles de même taille. Un des ensemble qui sert de données de test et l'autre de données d'entraînement.

Les deux ensembles sont donc liés, il peut y avoir un déséquilibre dans les labels. On pourrait donc avoir une classe moins représentée dans un ensemble, ce qui implique (si les classes sont bien réparties dans les données de base) que cette classe est représentée trop fort dans l'autre ensemble. Ceci peut impliquer un modèle biaisé de par le déséquilibre dans les données d'entraînement.

3.6.3 Random subsampling

Dans cette méthode, on va répéter la méthode *holdout* k fois, la découpe en deux ensemble étant aléatoire, chaque découpe sera différente.

On initialise un compteur i. Tant que $i < k$, on divise en deux les données, on améliore le modèle et on teste le modèle.

La précision du modèle obtenu est la suivante, avec acc_i la précision du modèle obtenu à l'itération i.

$$\sum_{i=1}^{k} \frac{acc_i}{k}$$

3.6.4 Cross-validation

Cette fois-ci, chaque objet est utilisé le même nombre de fois pour entraîner le modèle, et une seul et unique fois pour le tester. Cette méthode se divise en deux techniques principales.

k-fold On divise les données initiales en k sous-ensemble de même taille. On itère k fois, et pour l'itération i, on choisit l'ensemble i comme ensemble de test et les $k-1$ autres comme ensemble d'entraînement.

leave-one-out Cas particulier du k-fold où $k = N$, N étant le nombre d'objets présents dans les données. On a donc un seul objet par sous-ensemble. Cette approche utilise donc $N-1$ données d'entraînement à chaque itération (peu de chance d'*underfitting*) et un seul objet de test (si l'objet ne passe pas le test, le modèle sera considéré comme très mauvais). On a donc énormément de calculs à faire (N modélisations) mais en moyenne le modèle résultant est bon (même si la variance de la qualité du modèle est haute dû aux tests à un seul objet).

3.6.5 Bootstrap

Contrairement aux méthodes précédentes, les objets de cette méthode peuvent être réutilisés plusieurs fois pour entraîner le modèle. En effet, la construction d'un extrait de *bootstrap*, qui sera utilisé comme ensemble d'entraînement se fait comme suit :

1. On tire au hasard un objet et on l'ajoute à l'extrait de *bootstrap*.
2. L'objet tiré est replacé afin qu'il puisse peut-être être de nouveau tiré dans une prochaine itération.
3. Recommencer jusqu'à obtenir un ensemble de taille voulue (paramètre).

Une fois l'extrait construit, on l'utilise comme ensemble d'entraînement, les objets non présents dans l'extrait sont utilisés comme données de test. On itère b fois, ce qui implique que b extraits de *bootstrap* sont créés au cours de l'opération.

On estime que dans un extrait de taille N, N étant le nombre d'objet dans le jeu de données de base, 63,2% des données de base y sont présent (et donc que 36,8% des données sont des doublons).

La précision d'un modèle construit peut se calculer de plusieurs manières, la plus connue est le **.632 bootstrap**, définie comme suit avec ϵ_i la précision du modèle créé avec l'extrait de *bootstrap* de l'itération i, et acc_s la précision d'un modèle créé avec tous les objets des données de base en entraînement.

$$acc_{boot} = \frac{1}{b}\sum_{i=1}^{b}(0.632 \cdot \epsilon_i + 0.368 \cdot acc_s)$$

3.7 Méthode de comparaison de classificateurs

Pour comparer des résultats de classificateurs, surtout sur des jeux de test différents, il faut passer par des tests statistiques. Par exemple, prenons deux modèles : M_a et M_b. M_a a une meilleure précision que M_b, mais la précision de M_a a été calculé sur un jeu de test moins grand que celui de M_b. Il faut donc pouvoir mesurer la confiance que l'on peut accorder à la précision de M_a par rapport à la grandeur de son ensemble de test.

Pour connaître l'intervalle de confiance, il faut déterminer la distribution de probabilité qui domine la mesure de précision. Pour ce faire, on peut modéliser le problème de classification en une expérience binomiale:

1. Expérience de N essais indépendants donnant soit un succès , soit un échec .
2. La probabilité p d'obtenir un succès à chaque essai est constante.

Soit X le nombre de succès sur N essais, la probabilité d'en avoir v est la suivante:

$$P(X = v) = \binom{N}{v} p^v (1-p)^{N-v}$$

Pour la classification, p est la vrai précision du modèle, X est le nombre d'instances bien classifiées, N le nombre total d'objets. Si on prends la précision empirique, normalisée par rapport à la taille du jeu de données de test, $\frac{X}{N}$ (moyenne = p, variance = $\frac{p(1-p)}{N}$), c'est aussi une distribution normale. Son intervalle de confiance est souvent approximé par une distribution normale pour N suffisamment grand :

$$P\left(-Z_{\alpha/2} \leq \frac{acc - p}{\sqrt{p(i-p)/N}} \leq Z_{1-\alpha/2}\right) = 1 - \alpha$$

Avec $-Z_{\alpha/2}$ et $Z_{1-\alpha/2}$ les bords supérieurs et inférieurs obtenus par distribution normale avec une confiance de $1 - \alpha$.

Les formules suivantes permettent alors de conclure sur la différence entre les précisions comparées/

$$I(= d_t) = d \pm z_{\alpha/2} \cdot \hat{\sigma} = [d - z_{\alpha/2} \cdot \hat{\sigma},\ d + z_{\alpha/2} \cdot \hat{\sigma}]$$

$$d = e - f$$

$$1 - \alpha = 90\%\ (Certitude) \Leftrightarrow \alpha = 10\%$$

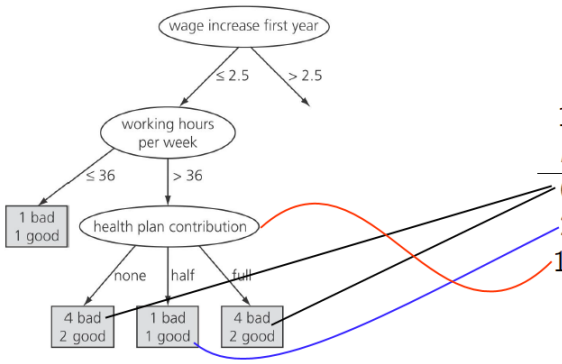
$$z_{\alpha/2} = 1.65\ (Confiance)$$

$$\hat{\sigma} = \sqrt{\frac{e(1-e)}{n} + \frac{f(1-f)}{m}}$$

Avec e (*resp.* f) représente le pourcentage d'instances mal classifiées dans le modèle 1 (*resp.* 2) et n (*resp.* m) représente le nombre total d'instances classées par le modèle 1 (*resp.* 2).

Les précisions des deux modèles sont alors considérées comme significativement différentes si 0 n'est pas couvert par I.

Remarque – On peut aussi utilise l'intervalle de confiance pour évaluer un élagage d'arbre. Comme le montre la figure 13. On y voit qu'on regarde à élaguer le noeud qui a été divisé selon l'attribut "health plan contribution". On calcule alors l'intervalle de confiance pour chacun des fils de ce noeud, en prenant en compte la précision du fils concernant la classe "bad".
On a donc n le nombre d'objet total, X le nombre d'objet libellé "bad", et p_1 et p_2 les bornes, inférieure et supérieures, de l'intervalle de confiance.



$1 - \alpha = 0.5, z = 0.68$

n	X	p_1	p_2
6	4	0.528	0.781
2	1	0.283	0.717
14	9	0.552	0.724

Figure 6.2 Pruning the labor negotiations decision tree.

Pessimistic precision estimate of "health plan contribution" is:

$$\frac{6}{14} \times 0.528 + \frac{2}{14} \times 0.283 + \frac{6}{14} \times 0.528 = 0.493$$

Since $0.493 < 0.552$, we prune away "health plan contribution".

Source: Ian H. Witten and Eibe Frank: *Data Mining. Practical Machine Learning Tools and Techniques* (2nd Edition). Morgan Kaufmann, 2005

Figure 13: L'élagage est dans ce cas utile devrait être fait, car le split n'apporte pas d'informations utiles.

On compare donc ensuite la somme pondérée de la borne inférieure des fils (estimation pessimiste) avec la borne inférieur du parent. Si cette dernière est plus élevée (comme dans l'exemple), cela veut dire que la division n'était pas utile et fait perdre en confiance, on peut donc élaguer.

4 Types d'algorithmes

Il existe plusieurs type d'algorithmes construisant des modèles de classification. En voici quelques-uns.

4.1 Nearest Neighbours (IBk, Lazy)

Cette technique s'appuie sur la notion de distance entre les instances. Plusieurs distances peuvent être considérées (Euclidienne, Manhattan, ...). Voici quelques définitions de distances en fonction des types d'attributs.

- Un attribut numérique uniquement : différence.
- Plusieurs attributs numériques : normalisation des valeurs + distance Euclidienne, ou Manhattan.
- Attributs nominaux : 0 si valeur identique, 1 sinon.

Il reste ensuite à regrouper les objets en groupe en fonction de la distance qu'il y a entre chaque objets et leur k plus proches voisins.

4.2 Règles de classification

Classificateur qui consiste en une série de k règles, liées entre-elles par des "ET".
Exemple :

Si $a < 5$ et $b < 4$: classe = oui
Si $a > 2$ et $c > 3$: classe = non
Si $b > 3$ et $d > 2$: classe = oui
...

Pour le classificateur `OneR`, le but est de tester pleins de règles concernant chacune un seul attribut, chaque règle testées prenant les meilleurs valeurs "limites" de l'attribut pour classifier, et seule la meilleure règle est gardée.

Pour `Prism` par contre, on se concentre sur les classes. Prenons comme exemple la figure 14 comme exemple. Dans cet exemple, il y a deux classes : "oui", et "non", avec 5 objets dans chaque classe. On va ici s'intéresser à classer "non" au mieux. On va donc énumérer des règles simples (cf. figure 14), et regarder la précision de classification des instances correspondant à ces conditions.

Condition	Accuracy
outlook = sunny	3/5
outlook = overcast	0/4
outlook = rainy	2/5
temperature = hot	2/4
temperature = mild	2/6
temperature = cool	1/4

Condition	Accuracy
humidity = high	4/7
humidity = normal	1/7
windy = false	2/8
windy = true	3/6

Figure 14: Règle et précision de classification pour la classe "non"

La précision la plus élevée est 3/5. Nous choisissons donc la condition `outlook = sunny`. On va ensuite regarder s'il faut continuer à chercher des règles ou pas. La figure 15 montre les 5 instances correspondant à la condition `outlook = sunny` que l'on vient de choisir.

outlook	temperature	humidity	windy	play
sunny	hot	high	false	no
sunny	hot	high	true	no
sunny	mild	high	false	no
sunny	cool	normal	false	yes
sunny	mild	normal	true	yes

Figure 15: On peut encore raffiner la condition en rajouter des conditions

Si on recommence à regarder pour quelle règle on classe le mieux les "non" pour les cinq instances restantes, on obtient le tableau de la figure 16.

Condition	Accuracy
`temperature = hot`	2/2
`temperature = mild`	1/2
`temperature = cool`	0/1
`humidity = high`	3/3
`humidity = normal`	0/2
`windy = false`	2/3
`windy = true`	1/2

Figure 16: L'égalité entre deux règles se brise par le le nombre d'instances couvertes

On remarque une égalité entre `temperature = hot` et `humidity = high`. Nous prendrons la deuxième condition car c'est elle des deux qui couvre le plus d'objets. Seulement, la règle entière `si outlook = sunny et humidity = high` ne couvre que 3 ces 5 instances "non". On recommence depuis le début, mais cette fois-ci en retirant les objets répondant à la règle déjà trouvée, etc... jusqu'à obtenir le maximum d'instances "non" bien classées. Puis, on peut recommencer le travail avec les classes "yes".

Remarque – Les règles trouvées par `Prism` sont *sound* mais pas *complete*. En effet, on est sur que les règles sont vraies pour le jeu de données d'entraînement (*sound*) mais elles ne sont pas vraies pour n'importe quel jeu de données (non *complete*)

4.3 Arbres IBk

Arbres de décisions avec des règles sur les attributs. On peut noter que ces arbres sont parfois trop complexes pour rien (problème du sous arbres dupliqué), et que les règles s'y trouvant ne sont pas garantie *sound* ni *complete*.

On peut noter qu'il y a deux types de règles de manière générale (pas que pour les arbres). Ceux-ci sont expliqués sur la figure 17.

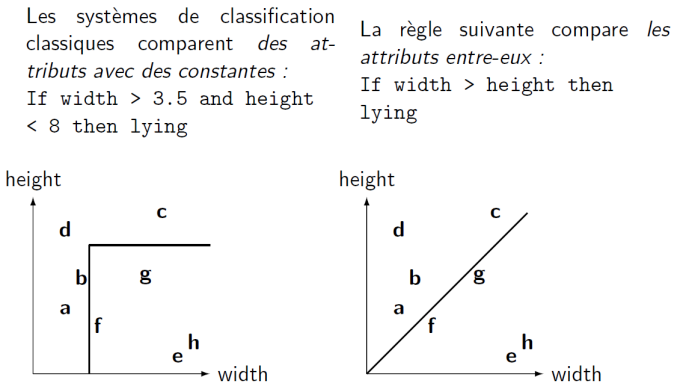


Figure 17: Il y a deux types de règles

4.4 Naive Bayes

Ce classificateur utilise la règle de Bayes. C'est une règle de probabilité qui dit :

$$Pr(H|E) = \frac{Pr(E|H) \cdot Pr(H)}{Pr(E)}$$

Avec $Pr(x|y)$ voulant dire la probabilité de x, sachant que y.

Pour classifier, on utilisera cette règle afin de trouver la probabilité pour l'objet k d'appartenir à une classe i, en sachant les attributs de cet objet (=Pr$(Class_i|Attributes_k)$). Normalement, un tel calcul est très couteux et parfois infaisable quand on a pas toutes les informations, car :

$$\Pr(Class_i|Attributes_k) = \frac{\Pr(Att_{1_k} \& Att_{2_k} \& \ldots \& Att_{j_k}|Class_i) \cdot \Pr(Class_i)}{\Pr(Attributes_k)}$$

Mais on admet une certaine naïveté, en pensant que tous les attributs sont indépendants l'un de l'autre, et donc que :

$$\Pr(Class_i|Attributes_k) = \frac{\Pr(Att_{1_k}|Class_i) \cdot \Pr(Att_{2_k}|Class_i) \cdot \ldots \cdot \Pr(Att_{j_k}|Class_i) \cdot \Pr(Class_i)}{\Pr(Attributes_k)}$$

Avec Att_{l_k} l'attribut l de l'objet k.

Part II
Analyse par association

Le but de ce chapitre est de développer des techniques permettant de déduire des liens entre des entrées de jeu de données. Un exemple répandu est celui du panier d'achat d'un client de magasin, on pourrait trouver des liens entre l'achat de certaines marchandises avec l'achat d'autres. On appel ces liens des **règles d'association**. Exemple :

$$\{Langes\} \longrightarrow \{Bieres\}$$

Ce qui impliquerait qu'il y a une forte corrélation entre la vente de langes et la vente de bières, ce qui veut dire que les gens qui achètent des langes ont de grandes chance d'acheter de la bière en même temps.

• Domaines d'application

En plus de ces paniers de marchandises, on trouve l'utilité dans la bio-informatique, les diagnostiques médicaux, le Web mining et l'analyse de données scientifiques. Par exemple, en géologie, des modèles d'associations peuvent révéler d'intéressantes relations entre les océan, les continents, et les processus atmosphériques.

• Définition du problème

Nous allons définir ci dessous les différents termes et hypothèses que nous utiliserons.

Représentation binaire Les jeux de données traitées seront supposé représentable de manière binaire. Dans l'exemple du panier d'achat, on aura une variable par type de produit, cette variable vaudra 1 si l'objet a été acheté, et 0 sinon. Nous pouvons noter que dans ce cas, la variable est asymétrique de par le fait que si la variable est à 0, elle ne sera pas utilisée, en effet, il n'est pas très utile de savoir que nous n'avons pas acheté un certain objet ....

Itemsets Soit $I = \{i_1, i_2, \ldots, i_d\}$ être l'ensemble de tous les objets (*itemset*) considérés et $T = \{t_1, t_2, \ldots, t_N\}$ être l'ensemble des transactions effectuées. Chaque transaction de t_i est un sous-ensemble de I. Si un *itemset* comporte k objets, il est appelé k-*itemset*. L'*itemset* vide est accepté.

Support Count Soir la largeur de la transaction (*transaction width*) étant le nombre d'objets présent dans la transaction. Le *support count* ($\sigma(X)$) est défini comme suit :

$$\sigma(X) = |\{t_i | X \subseteq t_i, \ \ t_i \in T\}|$$

On a donc le nombre de transactions dans T dans lesquels apparaît l'ensemble X d'objets.

Règles d'association Implication écrite sous la forme $X \longrightarrow Y$ dans laquelle X et Y sont disjoints ($X \cap Y = \emptyset$). La solidité d'une règle est mesurée en terme de son *Support* et de sa *Confidence*. Soit N le nombre total de transaction ($= |T|$), on a

$$\text{Support,} \quad s(X \longrightarrow Y) = \frac{\sigma(X \cup Y)}{N}$$
$$\text{Confidence,} \quad c(X \longrightarrow Y) = \frac{\sigma(X \cup Y)}{\sigma(X)}$$

On peut noter qu'une règle ayant un faible *Support* peut être dû à la chance, et que la *Confidence* défini la confiance que l'on peut avoir dans la règle. La *Confidence* donne aussi une estimation de $\Pr(Y|X)$. De plus, le *support* d'une règle $X \longrightarrow Y$ ne dépend que de l'ensemble $X \cup Y$. Donc, les six règles suivantes ont le même *support* :

$$\{\texttt{Beer, Diapers}\} \longrightarrow \{\texttt{Milk}\}, \quad \{\texttt{Beer, Milk}\} \longrightarrow \{\texttt{Diapers}\},$$
$$\{\texttt{Diapers, Milk}\} \longrightarrow \{\texttt{Beer}\}, \quad \{\texttt{Beer}\} \longrightarrow \{\texttt{Diapers, Milk}\},$$
$$\{\texttt{Milk}\} \longrightarrow \{\texttt{Beer,Diapers}\}, \quad \{\texttt{Diapers}\} \longrightarrow \{\texttt{Beer,Milk}\}.$$

Il faut noter que l'inférence faite par une règle d'association ne donne pas de causalité. L'achat des langes n'est pas la cause de l'achat de bières.

1 Découverte de règles

Découverte de règles d'association Étant donné un ensemble de transaction T, trouver toutes les règles règles ayant un *support* $\geq minsup$ et une *confidence* $\geq minconf$, où $minsup$ et $minconf$ sont deux seuils à définir.

Un ensemble de transaction qui contient d objets peut générer R règles au total.

$$R = 3^d - 2^{d+1} + 1$$

On peut le prouver de la manière suivante. Soit le tableau $[L, R, L, X, X, ..., X]$ représentant une règle. Les indices du tableau sont les différents objets, L veut dire "l'objet se trouve dans la partie gauche de la règle", R veut dire "l'objet se trouve dans la partie droite de la règle" et X veut dire "ne fait pas partie de la règle". Le tableau donné donnerait donc la règle $\{obj_0, obj_2\} \longrightarrow \{obj_1\}$.

On a donc 3 possibilités par case, donc 3^d. Mais on ne peut pas avoir que des X et des R, ni que des X et des L, on doit donc retirer des 3^d possibilité 2 fois 2^d (X et L ou X et R = 2 possibilités par case), et $2 \cdot 2^d = 2^{d+1}$. Et enfin, on se rend compte que dans ce qu'on a retiré, il y avait deux fois l'ensemble de contenant que des X, on doit donc rajouter 1 pour compenser. On a donc bien $3^d - 2^{d+1} + 1$.

On peut conclure qu'il est impossible de toutes les générer par force brute, il faut donc trouver des astuces pour générer de bonnes règles en un temps raisonnable. On a donc deux tâches principales à remplir :

(1) **Génération de *Frequent Itemsets*** — Trouver tous les itemsets dont le *support* satisfait $minsup$.

(2) **Génération de règle** — Extraire les règles à haute *confidence*, qui seront appelées les règles "fortes". Généralement moins couteux que (1).

2 Génération de *frequent itemsets*

Un ensemble de k objets peut potentiellement générer $2^k - 1$ itemsets fréquents, étant donné que dans un itemset candidat, un objet peut soit être présent, soit ne pas l'être. Un algorithme de force brute devrait donc effectuer $O((2^k - 1)Nw)$ opérations pour calculer les *support* de tous les itemsets possibles, car il faut comparer les itemsets possibles avec les N transaction qui ont une largeur de maximum w. Il y a deux manières de réduire le nombre de calculs.

1. Réduire le nombre d'itemset à comparer (cf. la section 2.1).
2. Réduire le nombre de comparaisons en utilisant des structures de données avancées.

2.1 Le principe *Apriori*

Ce principe permet de réduire le nombre d'itemsets à comparer aux transactions. Ce principe dit qu'un itemset fréquent ne contient que des sous-ensembles fréquents. Et donc, ce qui nous intéresse, que si un itemset est non-fréquent, tous ses super-ensembles sont non-fréquents.

Ceci est rendu possible grâce à l'anti-monotonicité de la mesure *support*.

Propriété de Monotonicité — Soit I un ensemble d'objets, et $J = 2^I$ l'ensemble des parties de I. Une mesure f est monotone (ou bornée supérieurement) si:

$$\forall X, Y \in J : (X \subseteq Y) \longrightarrow f(X) \leq f(Y)$$

Par analogie, une propriété f est non-monotone si:

$$\forall X, Y \in J : (X \subseteq Y) \longrightarrow f(X) \geq f(Y)$$

Le principe *Apriori* peut être appliqué à n'importe quelle mesure non-monotone incorporée à l'algorithme.

2.2 Génération d'itemsets fréquents avec *Apriori*

La figure 18 illustre la génération d'éléments.

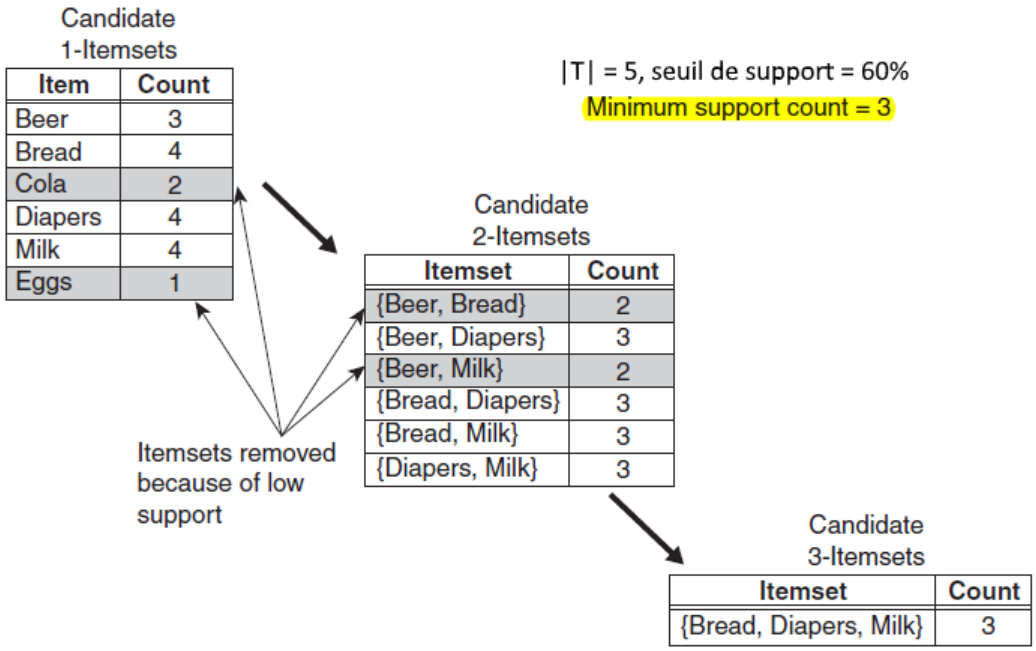


Figure 18

Algorithm Frequent itemset generation of the *Apriori* algorithm.

1: $k = 1$.
2: $F_k = \{ i \mid i \in I \wedge \sigma(\{i\}) \geq N \times minsup\}$. {Find all frequent 1-itemsets}
3: **repeat**
4: $k = k + 1$.
5: $C_k = \text{apriori-gen}(F_{k-1})$. {Generate candidate itemsets}
6: **for each** transaction $t \in T$ **do**
7: $C_t = \text{subset}(C_k, t)$. {Identify all candidates that belong to t}
8: **for each** candidate itemset $c \in C_t$ **do**
9: $\sigma(c) = \sigma(c) + 1$. {Increment support count}
10: **end for**
11: **end for**
12: $F_k = \{ c \mid c \in C_k \wedge \sigma(c) \geq N \times minsup\}$. {Extract the frequent k-itemsets}
13: **until** $F_k = \emptyset$
14: Result $= \bigcup F_k$.

Figure 19: L'algorithme permettant d'extraire les itemsets fréquents

L'implémentation de la fonction `apriori-gen` est couvert dans la partie 2.3 et la fonction `subset` est expliquée dans la section 2.4. L'algorithme prend $k_{max} + 1$ itération, où k_{max} est la taille du plus grand itemset fréquent.

2.3 Génération de candidats et élagage

La fonction `apriori-gen` de l'algorithme Apriori génère des candidats suivants deux opérations:

(1) **Génération de candidat** Génère des candidats de taille k à partir des itemsets de taille $k-1$ déjà générés.
(2) **Élagage des candidats** Supprime les candidats n'ayant pas assez de *support*.

L'étape (2) doit en fait regarder tous les itemsets de taille k générés n (1), et supprimer ceux qui contiennent des sous-itemsets (pas besoin de regarder ceux de taille 1) non-fréquents, par le principe d'*Apriori*. Ceci représente $O(k)$ opérations pour chaque itemset de taille k, cependant, ce nombre sera réduit plus tard.

Une bonne méthode pour générer des itemsets candidats doit suivre les directives suivantes:

(a) Elle devrait éviter de générer trop de candidats inutiles (avec sous-ensemble non-fréquent).
(b) Elle doit être certaine de ne pas retirer de candidats valides
(c) Elle ne devrait pas générer plus d'une fois le même candidat. En effet, il est possible de créer $\{a, b, c\}$ en fusionnant $\{a, b\}$ et $\{c\}$ mais aussi en fusionnant $\{a, c\}$ et $\{b\}$, il faut donc éviter les doublons.

2.3.1 Force brute

Le principe est de considérer tous les itemsets de taille k comme candidat potentiel. On a donc $\binom{d}{k}$ itemsets générés à chaque étape, et vu que $O(k)$ opérations doivent être effectuées par itemset, il y a $O(d \cdot 2^{d-1})$ opérations.

2.3.2 $\mathbf{F_{k-1} \times F_1}$

une autre méthode de génération est de créer des itemsets de taille k en prenant les itemsets de taille $k-1$ et d'y rajouter un par un les objets fréquents (itemset de taille 1).

La méthode respecte (b), mais pas (c). Une manière de respecter (c) serait de s'assurer de respecter l'ordre lexicographique lors de la création de nouveaux itemsets.

Exemple : $\{a, b\}$ peut être augmenté avec $\{c\}$ pour former $\{a, b, c\}$, mais pas $\{a, c\}$ et $\{b\}$ car b vient se rajouter après c, qui est plus grand d'un point de vue lexicographique.

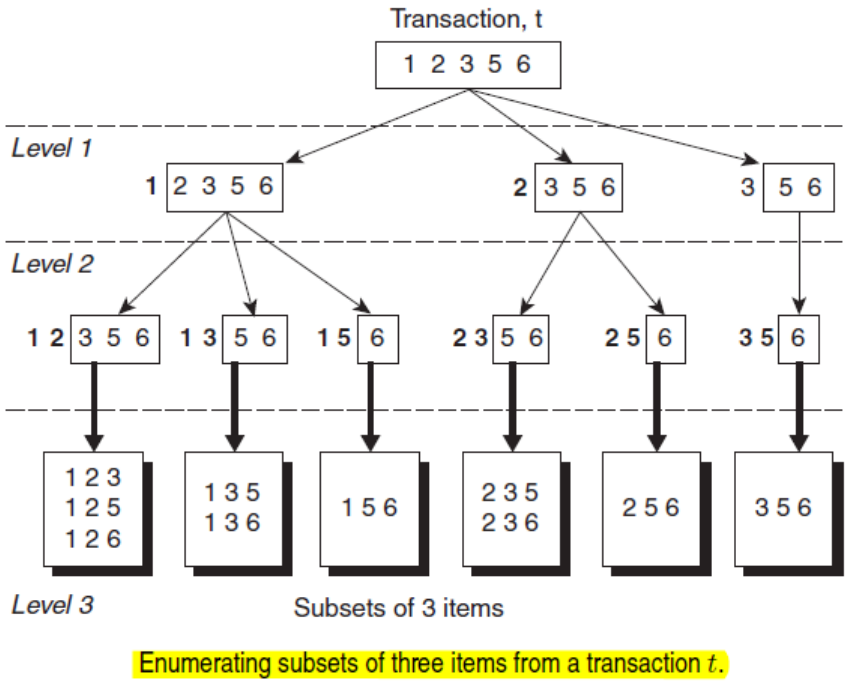
La méthode génère cependant pas mal d'itemsets inutiles. En effet, admettons que l'on sache que $\{a, c\}$ est non-fréquent, la méthode va tout de même créer $\{a, b, c\}$ en fusionnant $\{a, b\}$ et $\{c\}$.

2.3.3 $\mathbf{F_{k-1} \times F_{k-1}}$

C'est la méthode utilisée en pratique, elle consiste à fusionner deux itemsets de taille $k-1$ qui ont chacun $k-2$ éléments en commun, tout en gardant l'ordre lexicographique discuté au point précédent.
Exemple : on fusionnerait $\{a, b, c\}$ avec $\{a, b, d\}$ pour obtenir $\{a, b, c, d\}$ car ils ont a et b en commun. Mais pour ce faire, il faut bien vérifier que le sous-ensemble commun de taille $k-2$ est fréquent.

2.4 Compter le *support count*

Le principe de cette étape est de compter dans combien de transaction se retrouve un itemset candidat. Les étapes d'avant vont générer un ensemble itemsets de taille fixe k. On va donc préférer énumérer tous les sous-ensemble de taille k contenu dans chaque transaction et incrémenter les itemsets s'y retrouvant. Ce faisant, on ne va parcourir qu'une seul fois toutes les transactions. La figure 20 illustre la technique utilisée.



Enumerating subsets of three items from a transaction t.

Figure 20: Chaque noeud du niveau j va se fixer un préfixe qui lui est propre de taille j

Il reste alors à retrouver les itemsets candidats à incrémenter. Une méthode pour faire ça est de "pousser" les sous-ensemble générés par l'énumération (e.g. ensembles de taille 3 de la figure 20) dans un arbre de hachage Dans lequel les candidats sont divisés selon une table de hachage.. Ceci est illustré sur la figure 21.

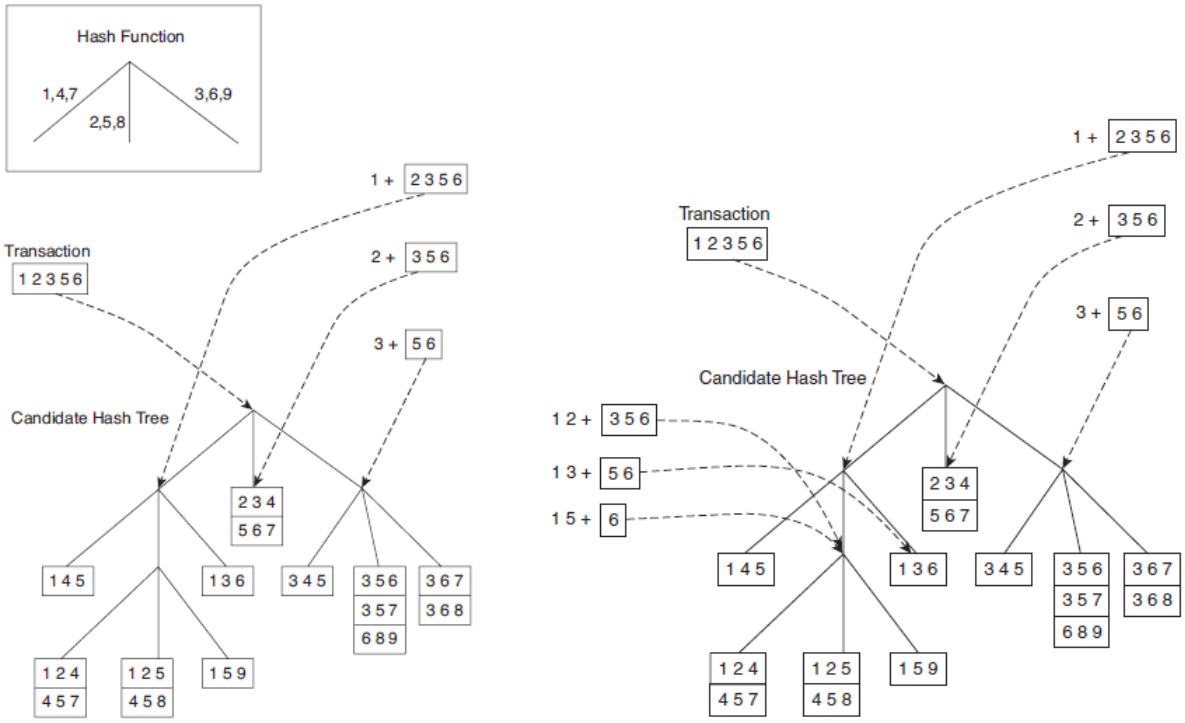
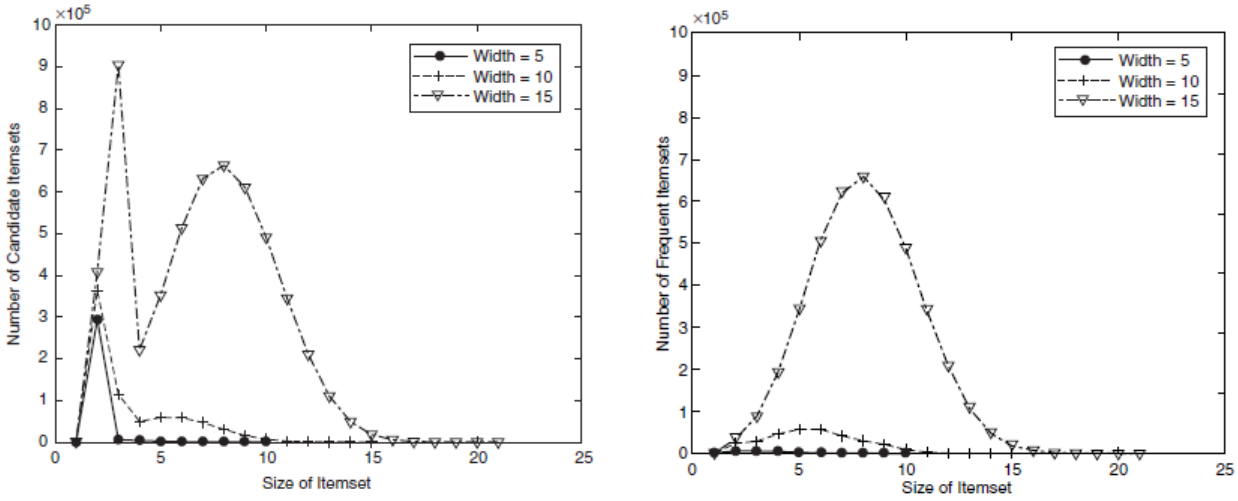


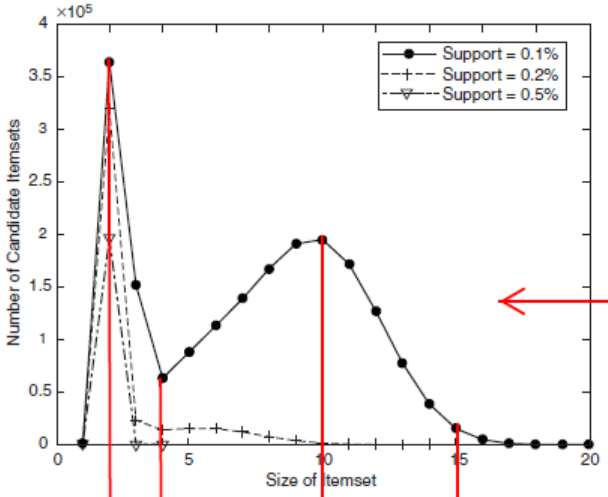
Figure 21: Dés lors, pas besoin de comparer tous les candidats, mais juste ceux présents dans la partie de l'arbre où le sous-ensemble a été "poussé"



(a) Number of candidate itemsets.

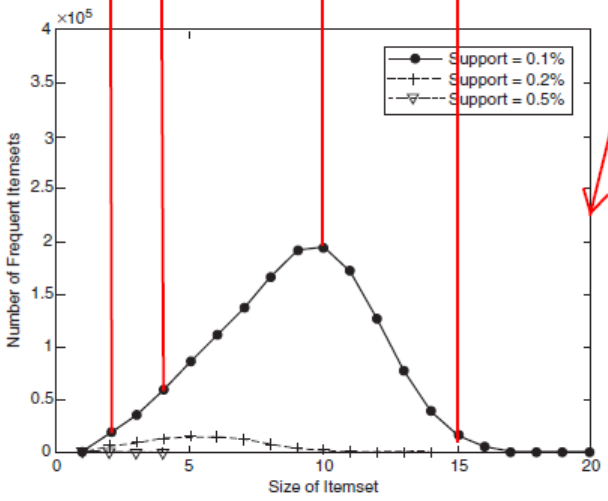
(b) Number of Frequent Itemsets.

Figure 22: Si la largeur moyenne d'une transaction est de 10, les itemsets fréquents de taille bien plus grande que 10 sont peu probables



(a) Number of candidate itemsets.

La courbe représente l'évolution de la sélection des candidats par l'algorithme à sélection de préfixe commun Fk-1 x Fk-1. Donc, l'étape de taille 2 ne peut pas sélectionner selon les préfixes de l'étape k-2 car ils n'existent pas encore. On ne peut donc pas encore filtrer par itemsets de taille k-2 fréquents. A partir de la taille 3, le filtre par préfixe fréquent s'applique.



(b) Number of frequent itemsets.

Effect of support threshold on the number of candidate and frequent itemsets.

En réalité, beaucoup d'ensembles sont fréquents. Donc la courbe représente la croissance du nombre de sous ensemble selon la taille de celui-ci.

Figure 23: Important

3 Génération de règles d'associations

Cette partie est moins importante à optimiser car on a plus besoin d'accéder à la base de donnée, ce qui prenait du temps. En effet, on connaît, les itemsets fréquents, grâce à l'étape précédente, et pour calculer la *confidence*, on a juste besoin du support count des règles, ce qui est déjà calculé.

Chaque itemset candidat Y peut générer $2^k - 2$ règle. **On peut le prouver** . En effet, Chaque objets d'Y doit se retrouver dans la règle, chaque objet peut donc être soit à gauche, soit à droite de la règle. on a donc 2^k possibilités de combinaisons, mais on ne doit pas considérer les règle $\{\} \longrightarrow Y$ et $Y \longrightarrow \{\}$, on doit donc en retirer 2.

On peut donc générer des règles avec Y en découpant Y en deux sous-ensembles : X et $Y \setminus X$ afin de créer la règle $X \longrightarrow Y \setminus X$.

3.1 Élagage basé sur la *confidence*

On ne peut plus se baser sur le principe d'*Apriori*, car la mesure de *confidence* n'est pas anti-monotone. Néanmoins, en comparant les règles générées par le même itemset fréquent Y, le théorème suivant s'applique:

Si une règle $X \longrightarrow Y \setminus X$ ne satisfait pas le seuil $minconf$,
Alors, $\forall X' \subseteq X, X' \longrightarrow Y \setminus X'$ ne satisfait pas non plus le seuil $minconf$

3.2 Génération de règle dans l'algorithme Apriori

L'idée est de fusionner les parties droites de règles avec une *confidence* élevée pour en former des nouvelles, qui seront elles-mêmes de confiance de par le théorème précédent.

Algorithm 6.2 Rule generation of the *Apriori* algorithm.

1: **for** each frequent k-itemset f_k, $k \geq 2$ **do**
2: $H_1 = \{i \mid i \in f_k\}$ {1-item consequents of the rule.}
3: call `ap-genrules`$(f_k, H_1.)$
4: **end for**

Figure 24: Génération de règles à partir de tous les itemsets fréquents générés à l'étape précédente.

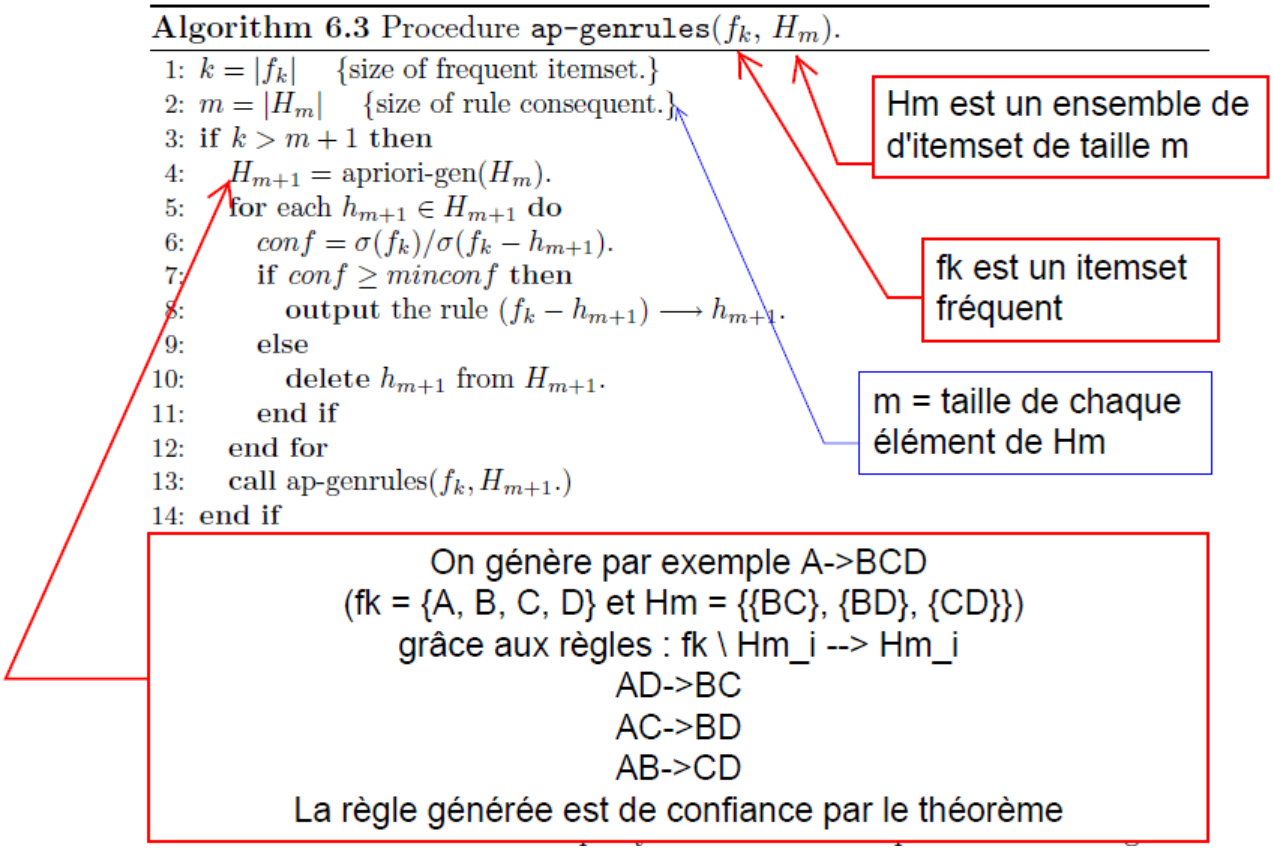


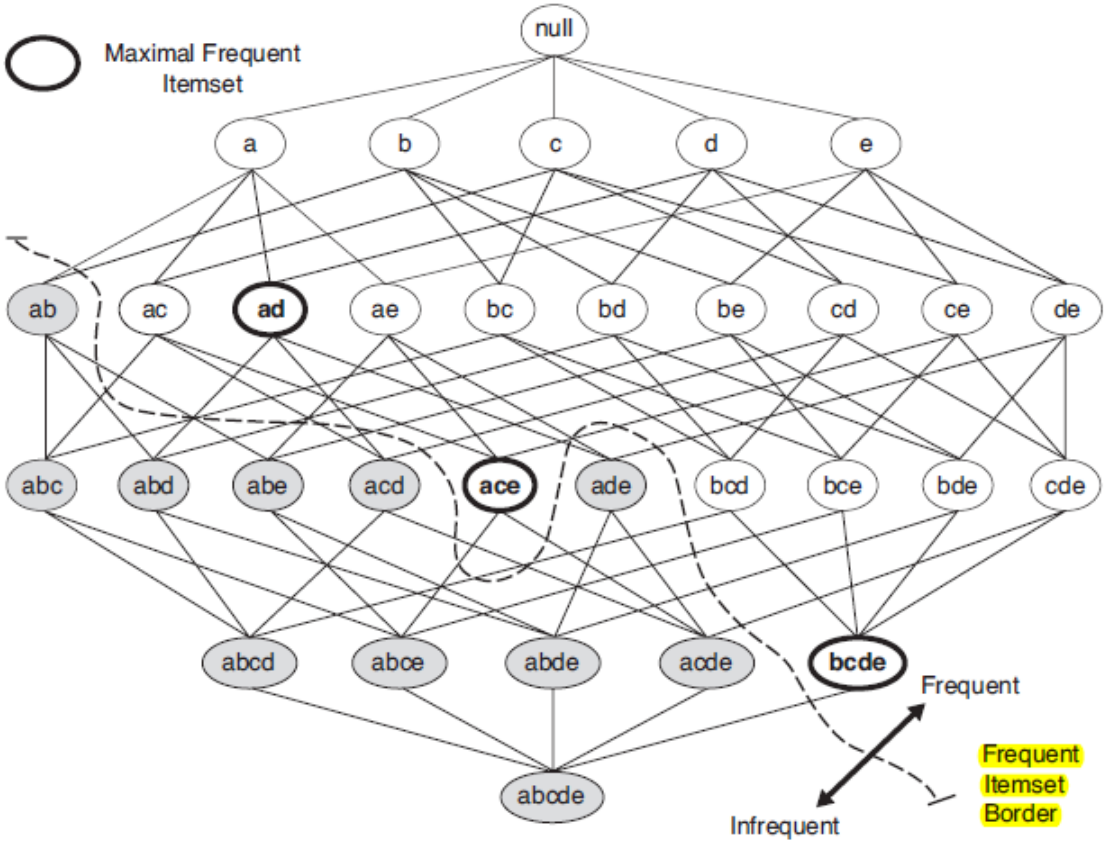
Figure 25: Génération de règles de confiance à partir de règles de confiance plus petites.

4 Représentations compactes des itemsets fréquents

Le nombre de transaction en pratique peut être très élevé. C'est pourquoi il est utile de rendre compact l'ensemble des itemsets fréquents.

4.1 Maximal Frequent Itemset

Maximal Frequent Itemset Itemset fréquent pour lequel aucun de ses super-ensembles immédiat ne sont fréquents.



Maximal frequent itemset.

Figure 26

On voit ici qu'on peut se limiter à donner les itemset en gras sur la figure 26, car en prenant tous leurs sous-ensemble, on obtient tous les itemsets fréquents. La **limitation** de cette représentation est qu'on abandonne le support count des sous-ensembles, ce qui est embêtant pour calculer la *confidence* des règles générées par ces premiers.

4.2 Closed Frequent Itemsets

Cette représentation propose un ensemble compact sans abandonner le support count des itemset.

Closed Itemset Un itemset X est fermé si aucun des super-ensembles immédiats de X n'a exactement le même support count que X.

On peut donc noter que si $\{A\}$ est non-fermé, alors, il existe un objet C t.q. la règle $A \longrightarrow C$ a une confiance de 100%. En effet, si $\{A\}$ n'est pas fermé, ça veut dire qu'il y a un autre objet (C) t.q. A n'apparaît jamais sans C.

En effet, le fait d'avoir le même support count pour un super-ensemble veut dire que ce super-ensemble revient autant de fois dans les transactions que l'ensemble.

Exemple : Si on a $\sigma(\{X, Y\}) = 9$ et qu'on a $\sigma(\{X, Y, Z\}) = 9$, ça veut dire qu'à chaque fois qu'on a $\{X, Y\}$ dans une transaction, Z est également présent. On peut donc déduire que la confiance (*confidence*) de la règle $\{X, Y\} \longrightarrow Z$ est de 100%.

Closed Frequent Itemset Un itemset est fermé et fréquent s'il est fermé et que son support dépasse $minsup$.

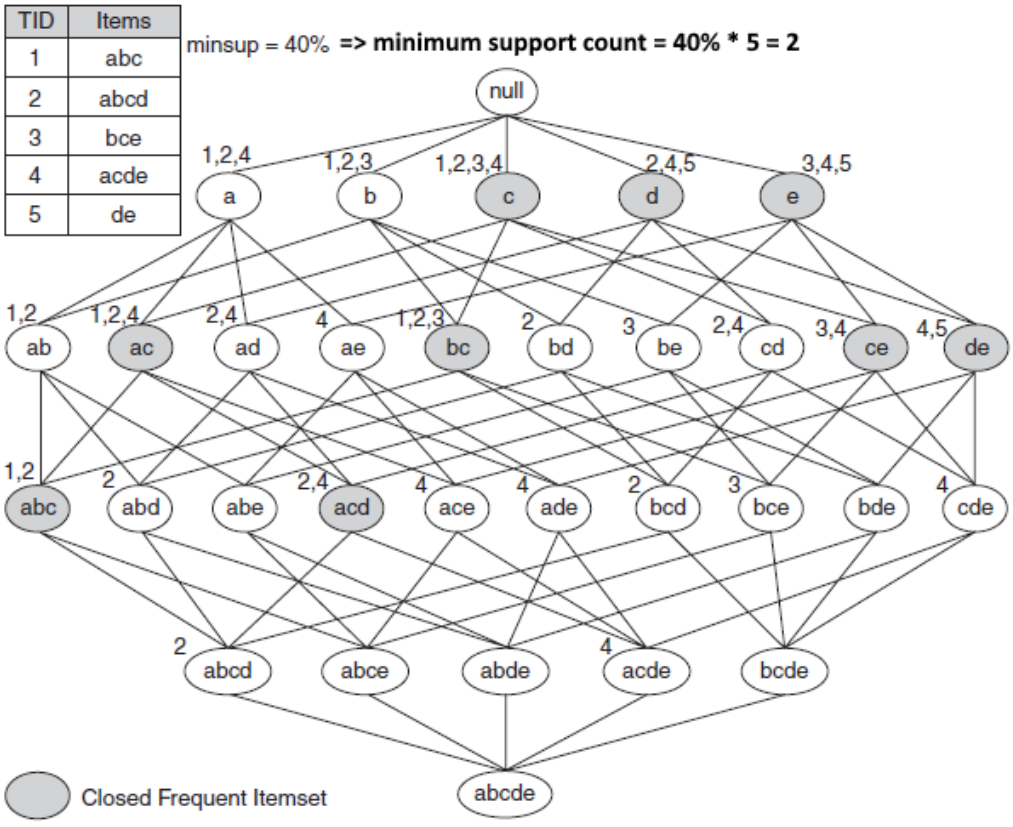


Figure 27

.

Le support count des itemsets fréquents fermés est sauvegardé dans la représentation.

Le support count de n'importe quel itemset fréquent non-fermé peut être obtenu en prenant le **max** des support count de ses super-sensembles direct. L'algorithme retrouvant le support count de tous les itemsets fréquents démarre donc de la plus grande taille de d'itemsets fréquents. En effet, l'algorithme a besoin de connaitre le support count des super-ensembles avant de passer aux sous-ensembles.

Preuve : si $\{a, b\}$ est ouvert, on sait qu'il y a un de ces super-ensembles immédiats qui a exactement le même support count que lui (par la définition de non-fermé). La question serait alors de savoir duquel il s'agit. Mais on sait que le support count d'un super ensemble ne peut pas être plus grand que le support count de l'ensemble lui-même (anti-monotonicité). Donc, le max des support count de ses super-ensembles immédiats sera son propre support count.

On peut noter que des règles peuvent être détectées comme redondantes grâce à cette notions d'itemsets fréquents fermés. En effet, si $\{b\}$ n'est pas fermé, mais que $\{b, c\}$ l'est, la règle $\{b\} \longrightarrow X$ est redondante car elle a le même *support* et la même *confidence* que la règle $\{b, c\} \longrightarrow X$. Ces règles redondantes ne sont donc pas générées.

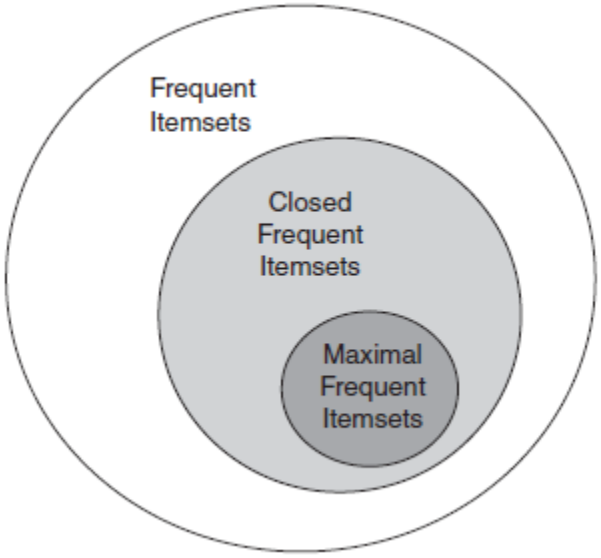


Figure 28: Si un ensemble est maximal, il est forcément fermé
car sinon, il aurait un ensemble maximal comme super-ensemble (contradiciton).

5 Optimiser Apriori

Bien que déjà pas mal, l'algorithme Apriori fait beaucoup d'accès à la base de données quand il compte les support count. De plus, lorsque les largeurs de transaction augmentent, le temps de calcul augmente aussi de manière significative. Nous allons donc voir quelles sont les améliorations que nous pouvons apporté à l'ordre dans lequel les itemsets sont parcourus lors de la sélection des itemsets fréquents..

5.1 Traverser un treillis

Le treillis formé par les itemsets de l'ensemble des transactions peut être traversé afin d'y trouver les itemsets fréquents. Tout repose alors sur la technique de recherche utilisée. Quelques unes de ces stratégies sont expliquées ci-dessous.

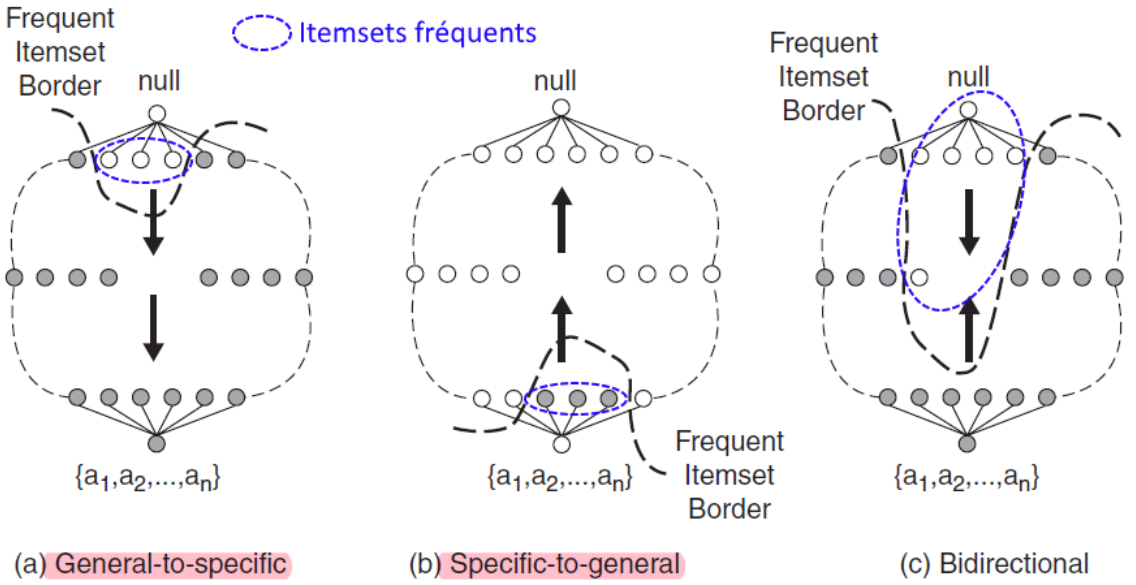


Figure 29

5.1.1 General-To-Specific

On démarre de petits itemsets (1 éléments, puis 2, ...) pour terminer dans les grands itemsets. Cette méthode est efficace lorsque les itemsets fréquents sont petits. Dés lors, la frontière fréquents/non-fréquents se trouve en haut du treillis (cf. figure 29).

5.1.2 Specific-To-General

À l'inverse de la recherche précédente, on démarre cette fois des grand itemsets pour terminer dans les plus petits. Cette méthode est efficace lorsque les itemsets fréquents sont grands,

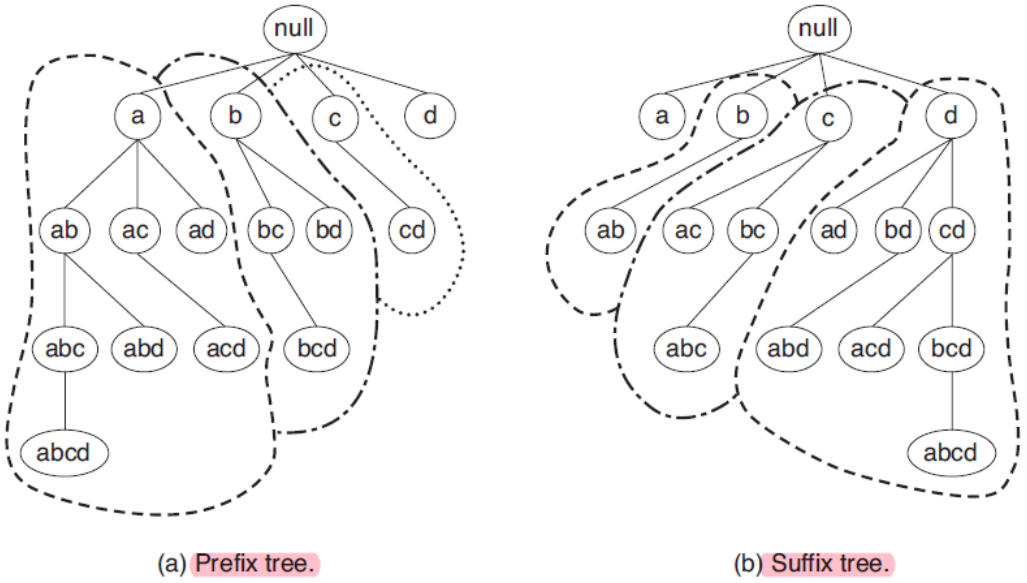
et donc généralement quand on a de grandes transactions. Dés lors, la frontière fréquents/non-fréquents se trouve en bas du treillis (cf. figure 29).

5.1.3 Bidirectionnel

On peut combiner les deux techniques précédentes, mais ça demande plus d'espace mémoire pour l'exécuter. Utile pour les transactions de tailles très variantes (beaucoup de grandes transaction et beaucoup de petites).

5.1.4 Classes d'équivalence

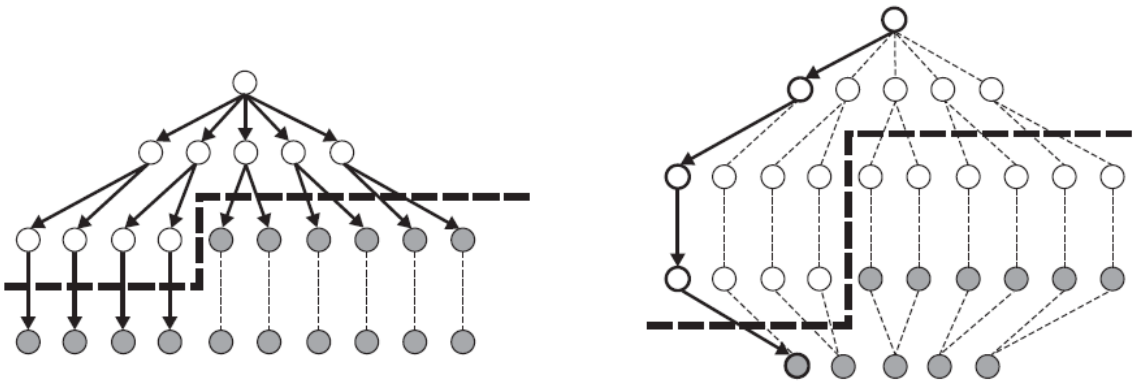
Pour parcourir le treillis plus efficacement, les objets peuvent y être regroupé par classes d'équivalence, c'est-à-dire par une propriété que tout le groupe a en commun, comme un préfixe ou un suffixe. On peut noter que l'algorithme *Apriori* considérait les classes d'équivalence de taille. On y prenait donc d'abord tous les itemsets de taille 1, puis on passait à ceux de taille 2, ...



Equivalence classes based on the prefix and suffix labels of itemsets.

Figure 30

5.1.5 Profondeur / Largeur



Breadth-first and depth-first traversals.

Figure 31

L'algorithme *Apriori* traverse les itemsets en largeur, considérant les tailles inférieurs et finissant dans les grandes tailles.

L'exploration en profondeur quand à elle est souvent utilisée en pratique car elle permet un grand élagage. On peut élaguer de deux manières, nous prendrons comme exemple la figure 32.

1. Si un itemsets X est trouvé fréquent, alors, tous les sous-arbres ne contenant que des sous-ensembles de X peuvent être ignorés pour la suite de l'exploration. Cet élagage utilise l'ordre lexicographique utilisé dans l'arbre. C'est l'exemple avec $\{b, c, d, e\}$. Par contre si $\{a, b, c\}$ est trouvé fréquent, on ne peut pas élaguer le sous-arbre $\{a, c\}$ car celui-ci contient des ensembles, comme $\{a, c, d, e\}$ par exemple, qui ne sont pas des sous-ensembles de $\{a, b, c\}$.
2. Si le support de $\{a, b, c\}$ est le même que le support de $\{a, b\}$, on peut ignorer les sous-arbres qui ont abd et abe comme racine car on est certains qu'ils ne contiendront pas d'itemsets fréquents maximaux.
   On peut le prouver . En effet, si $\{a, b, c\}$ et $\{a, b\}$ ont le même support count, ça veut dire que dans une transaction, $\{a, b\}$ n'apparaît jamais sans c. On a dés lors qu'$\{a, b, d\}$ a le même support que $\{a, b, c, d\}$ qui aura été exploré dans le sous-arbre de racine $\{a, b, c\}$ de par l'ordre lexicographique respecté.

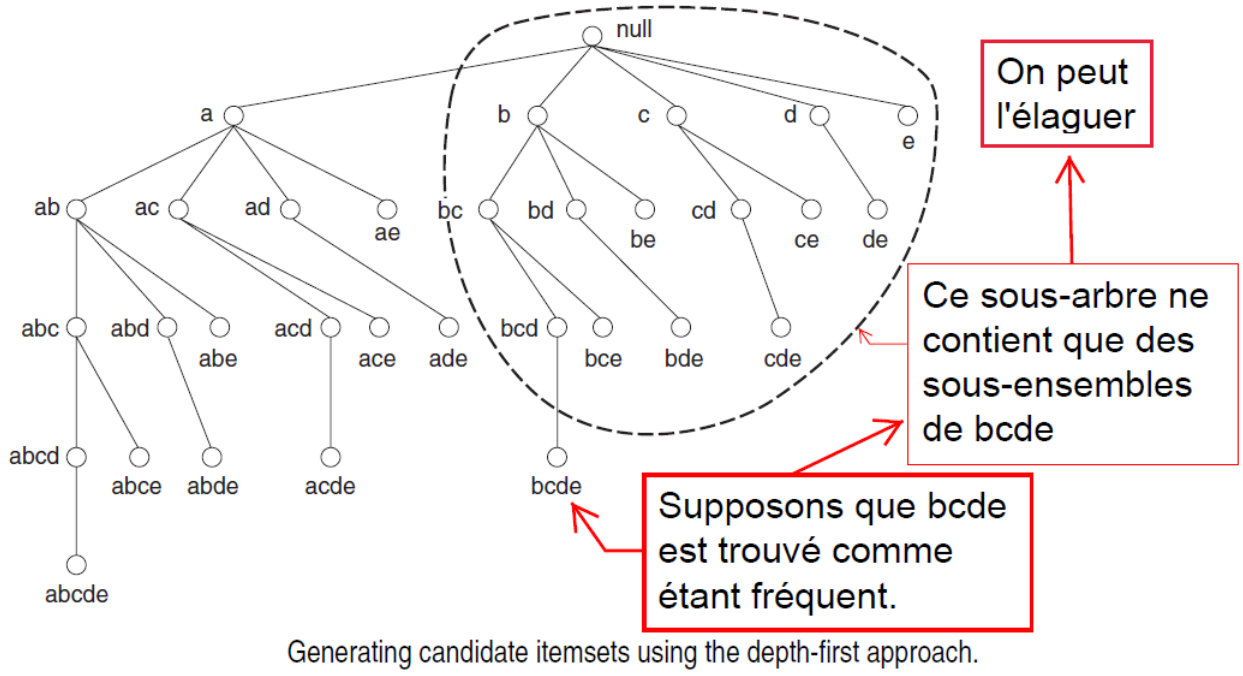


Figure 32

5.2 Représentation des transactions

On peut aussi chercher à optimiser la structure de données contenant les transactions. On distingue deux types principaux. Ils sont représentés sur la figure 33. La structure de gauche est généralement utilisée mais celle de droite a quelques avantages. En effet, la **structure verticale** stocke, pour chaque objet, la liste des transactions dans lesquels l'objet est présent. Cependant, la liste des ID de transactions est parfois trop grandes que pour être stockée de cette manière.

Horizontal Data Layout

TID	Items
1	a,b,e
2	b,c,d
3	c,e
4	a,c,d
5	a,b,c,d
6	a,e
7	a,b
8	a,b,c
9	a,c,d
10	b

Vertical Data Layout

a	b	c	d	e
1	1	2	2	1
4	2	3	4	3
5	5	4	5	6
6	7	5	9	
7	8	8		
8	10	9		
9				

Horizontal and vertical data format.

Figure 33

En partant d'une telle structure, il est aisé de définir des relations entre les objets et les itemsets dans lesquels ils sont contenus.

cover(i) Soit un item i, $cover(i)$ = l'ensemble des transaction qui contiennent l'objet i. Exemple, dans la figure 33, $cover(e) = \{1, 3, 6\}$.

conditional cover, cocov($[s]$) Soit un itemset s, et l'ensemble des objets I;

$$cocov[s] = \{(i, T) | i \in I, \textbf{et}$$
$$i \text{ précède tous les él. de } s \text{ dans l'ordre lex., } \textbf{et}$$
$$T = cover(i \cup s)\}$$

Exemple, dans la figure 33,
$cocov[c] = \{(a, \{4, 8, 9\}), (b, \{2, 5, 8, 9\})\}$
$cocov[be] = \{(a, \{1\})\}$

On peut noter que pour $j \cup s$ un itemset, $j \in I$, alors $\forall i \in I,\ i \prec j$, on a

$$cocov[j \cup s](i) = cocov[s](j) \cap cocov[s](i)$$

6 Algorithme FP-Growth

Cet algorithme utilise une structure de donnée un peu qui s'appelle le FP-Tree.

6.1 FP-Tree

Construire un FP-Tree comporte plusieurs étapes

1. On compte tout d'abord les support count des itemsets de taille 1, afin de trier les objets par ordre décroissant de support et pour écarte les non-fréquents.
2. On passe ensuite une deuxième fois sur les transactions pour construire les branches du FP-Tree, c'est ce qui est montré sur la figure 34. Cette étape trie les transactions par préfixe commun, en coupant dans l'ordre des objets de l'étape 1..

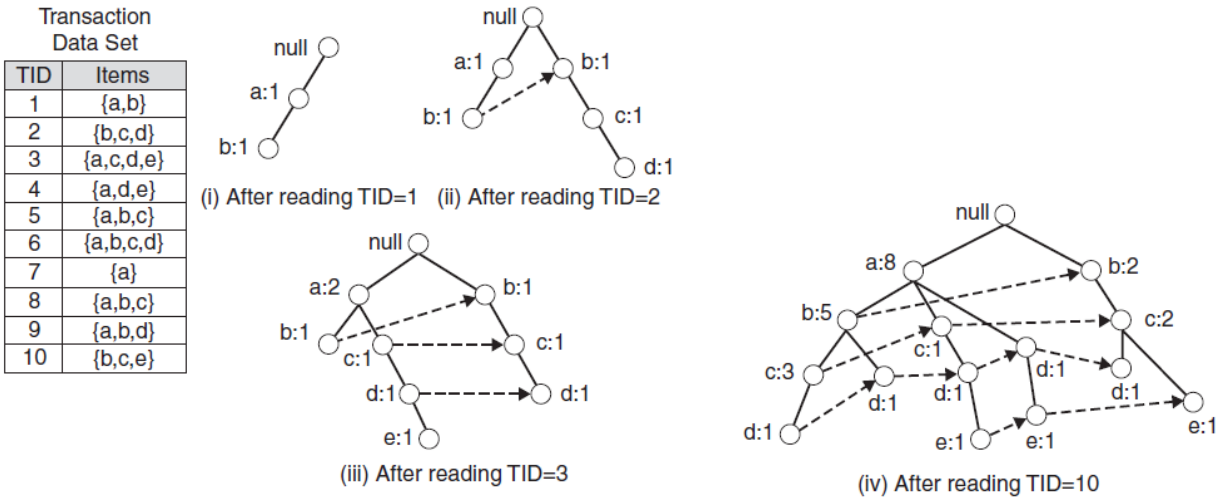


Figure 34

On peut noter que l'ordre décroissant des objets de l'étape 1. ne garanti pas une taille minimum de l'arbre. De plus, dans le pire des cas, cette représentation prend plus de place que le dataset non compressé (pointeurs, compteurs, ...), mais en général, il le compresse tout de même.

6.2 Génération d'itemsets fréquents

L'avantage de cette algorithme est de pouvoir déduire les itemsets fréquents directement depuis la structure de donnée.

Décomposition en sous-problème On commence par explorer le FP-Tree de manière "bottom-up", donc, dans l'exemple, de e à a, et on le divise en sous-problème, comme l'illustre la figure 35. C'est ici que les pointeurs entre objets vont être utiles. En effet, dés qu'on tombe sur un e dans l'arbre, on peut suivre les pointeurs pour trouver tous les autres e.

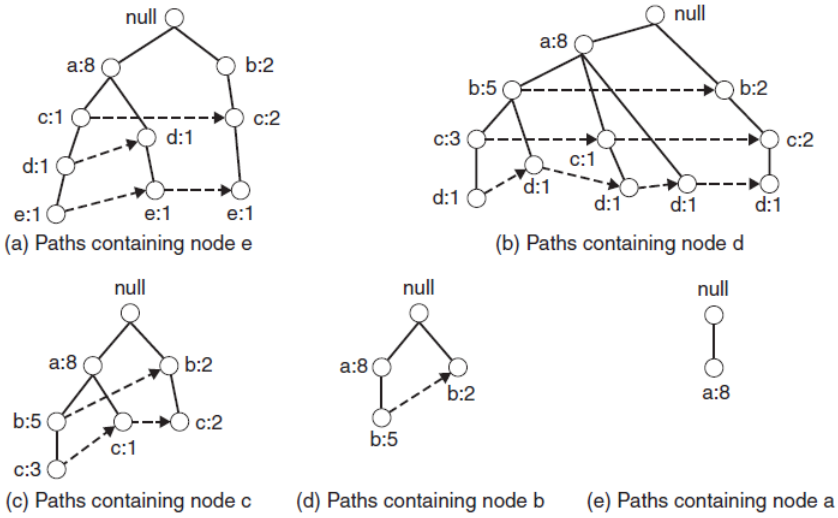


Figure 35

Division en FP-Tree conditionnel On va ensuite regarder, suffixe par suffixe, quel itemsets sont fréquents pour chaque sous-problème. L'obtention d'un FP-Tree conditionnel se fait par $cocov$, défini précédemment, les ID de transaction étant remplacés par des chemins de l'arbre. Ceci est illustré à la figure 36. On peut y remarquer que b est supprimé de l'arbre (b). Ceci s'explique par le fait que b ne se retrouve qu'une seule fois dans l'arbre (a) et le seul chemin partant de lui arrivant en e a un support count de 1, on en conclut donc que tout chemin partant de b vers e est non fréquent. Comme chaque sous-problème est disjoint, on ne génère pas d'itemsets dupliqués.

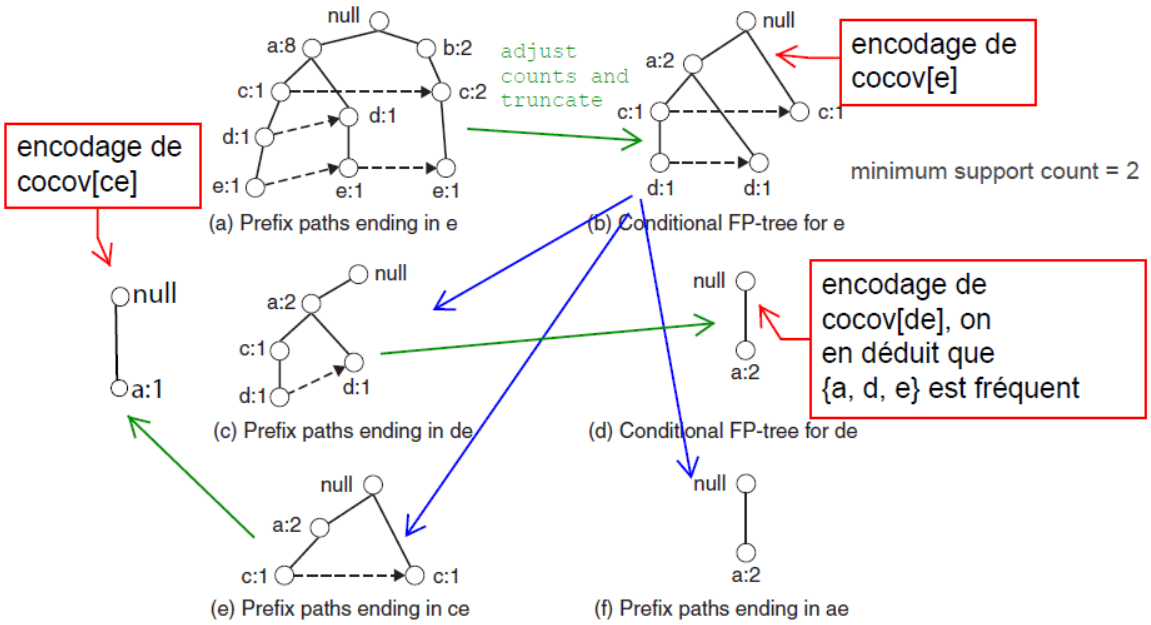


Figure 36

Part III
Analyse de clusters

Cette analyse divise les données en groupes (clusters), qui ont du sens, qui sont utiles, ou les deux.

• **Buts du clustering**

Clustering pour la Compréhension Le clustering peut être utilisé pour classifier des objets, les clusters représentant les classes et le clustering étant la manière dont les objets sont classés. Ceci peut être utilisé en biologie (hiérarchie, taxonomie, classer de l'ADN, ...), en récupération d'information (recherche web, classement de données récupérées automatiquement, ...), dans la prévision climatique, en psychologie et en médecine (diagnostic, analyse de la distribution de pathogènes, ...) ou enfin le monde des affaires (informations sur les clients, comprendre les intérêts de groupes de personnes, ...).

Clustering pour l'Utilité Le clustering peut être utilisé pour trouver l'"individu type" (prototype) d'un groupe de donnée. En effet, on peut trouver, pour chaque cluster formé, l'individu qui représente le mieux le cluster. Cette approche est utilisée pour réduire un jeu de donnée (pour l'analyser, on se concentre sur l'individu le plus représentatif du jeu), pour la compression des données (prendre l'image la plus représentative d'un ensemble d'image pour la compression vidéo, ...), ou encore pour trouver efficacement les plus proches voisins d'une donnée (si deux prototypes sont très éloignés, alors, les objets du premier cluster ne peuvent pas être plus proches voisins des objets du deuxième).

1 Approche générale

Un clustering se base sur la notion de distances entre individus d'un jeu de données. Au plus des objets du sein d'un cluster sont proches, et au plus les clusters sont éloignés les uns des autres, au mieux on pourra distinguer les groupes de données.

De par la diversité des données que l'on peut traiter, on ne peut donner une définition claire d'un cluster qu'au cas par cas. On peut néanmoins différencier une analyse de clusters d'une classification par le fait qu'une classification se base sur des labels connus à l'avance, tandis que l'analyse par cluster tire des groupes à partir des données uniquement, c'est donc de la classification non-supervisée (Ch. 4 = classification supervisée car on donne des labels connus à l'avance).

1.1 Types de clustering

Un clustering est un groupe de clusters. Il y a plusieurs types de clustering.

1.1.1 Clustering à partitions

Les clusters sont simplement des partitions disjointes du jeu de données, où chaque objet peut être rangé dans un et un seul cluster (partition). On parle alors de clustering exclusif, car on n'a jamais qu'un objets appartient à deux clusters différents.

1.1.2 Clustering hiérarchique

Si on permet à un cluster d'avoir des sous-clusters, on peut les organiser en arbre et avoir un clustering dit "hiérarchique". On peut voir ce type comme séquence de clustering à partitions.

1.1.3 Clustering imbriqués (overlapping)

Si on permet à un objet d'appartenir à plusieurs clusters en même temps, on parle de clustering "overlapping". On place alors les objets dans des clusters de "qualité égale" pour chaque objet.

1.1.4 Clustering flou (fuzzy, probabilistic)

Ce type de clustering donne une probabilité par cluster pour un objet d'appartenir à chacun des cluster. On a donc un poids entre 0 et 1 pour chaque cluster pour chaque objet, mais la somme des poids d'un objet fait toujours 1. On peut noter qu'on n'autorise pas un objet à appartenir à plusieurs classes en même temps. En effet, on va généralement réduire un tel clustering à un clustering à partitions, où on place chaque objet dans le cluster pour lequel il a le poids le plus élevé.

1.1.5 Clustering complet

Chaque objet est répertorié dans un cluster, même si ce premier est assez éloigné du centre du cluster.

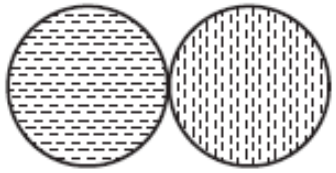
1.1.6 Clustering partiel

Un objet n'est pas obligé d'être répertorié dans un cluster. En effet, un objet pourrait être du bruit et n'appartenir en fait à aucune des classes formées par les clusters.

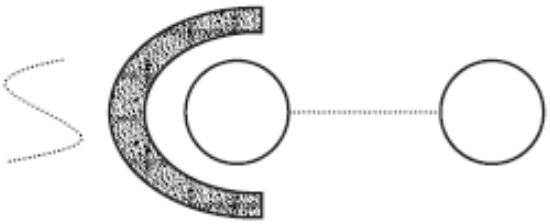
1.2 Types de clusters

Il existe plusieurs types de clusters, illustrés sur la figure 37.

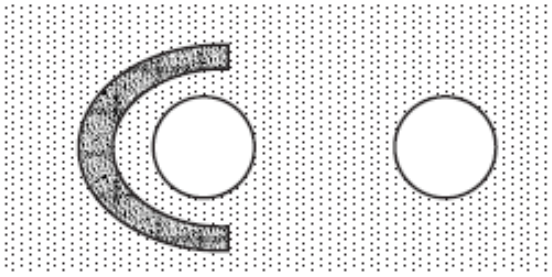
(a) Well-separated clusters. Each point is closer to all of the points in its cluster than to any point in another cluster.



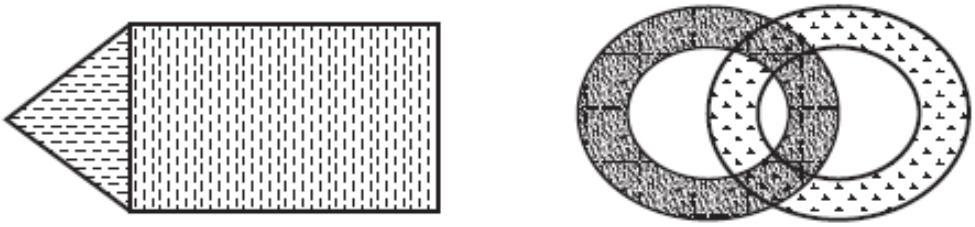
(b) Center-based clusters. Each point is closer to the center of its cluster than to the center of any other cluster.



(c) Contiguity-based clusters. Each point is closer to at least one point in its cluster than to any point in another cluster.



(d) Density-based clusters. Clusters are regions of high density separated by regions of low density.



(e) Conceptual clusters. Points in a cluster share some general property that derives from the entire set of points. (Points in the intersection of the circles belong to both.)

Figure 37

1.2.1 Bien séparés

Cluster dans lequel chaque objet est plus proches de chacun des autres objets du cluster que de n'importe quel autre objet d'un autre cluster. Définition satisfaite uniquement si le jeu de données contient des classes naturelles qui seront révélées par le clustering.

1.2.2 Basés sur un protoype (centre)

Cluster dans lequel chaque objet est plus proches du protoype qui défini le cluster cluster que de n'importe quel autre protoype. Un prototype peut être défini comme :

medoid Centre calculé sur la moyenne de tous les membres du cluster
centroid Membre du cluster (donnée réelle), le plus proche du centre, de la moyenne.

1.2.3 Basés sur un graphe

Chaque objet est un noeud, et les clusters sont des composantes connexes, il n'y a pas de lien entre deux clusters, mais tous les objets d'un même cluster sont connectés entre-eux. On parle de "contiguity-based" cluster quand il n'y a un lien que si les deux objets connectés sont situés dans une intervalle de distance défini.

1.2.4 Basés sur la densité

Chaque cluster est une région dense d'objet, qui est entourée de régions moins denses.

1.2.5 Partageant une propriété (clusters conceptuels)

Cette définition englobe toute les autres, étant donné que deux objets appartiennent au même cluster s'ils partagent une propriété. Il reste à définir cette propriété (distance d'un centre, distance entre eux, stackés, ...). Une définition trop complexe de cette propriété nous emmènerait dans le domaine du *pattern recognition*.

2 K-Means

Il s'agit d'un algorithme donnant des clusters basés sur des prototypes, formant un clustering à partitions, et utilisant des centroids comme prototype de cluster. L'algorithme peut être utilisé sur n'importe quel type de données permettant la définition d'une mesure de distance. K est le nombre de cluster voulu. K-medoids correspond à K-means dans lequel on a remplacé les centroids par des medoids.

Les notations utilisées sont les suivantes :

Symbole	Description
x	Un objet.
C_i	Le $i^{\text{ème}}$ cluster.
c_i	Le centroid du cluster C_i.
c	Le centroid de tous les points.
m_i	Le nombre d'objets dans le $i^{\text{ème}}$ cluster.
m	Le nombre d'objets dans le jeu de données.
K	Le nombre de cluster.

2.1 K-Means basique

Algorithm Basic K-means algorithm.

1: Select K points as initial centroids.
2: **repeat**
3: Form K clusters by assigning each point to its closest centroid.
4: Recompute the centroid of each cluster.
5: **until** Centroids do not change.

Figure 38: L'algorithme basique pour K-Means

En choisissant les bonnes combinaisons de mesures de proximités et les types de centroids, K-Means converge toujours à une solution. L'étape 5 est souvent remplacée par une condition plus souple (e.g. ne change plus à 1% près). L'algorithme est linéaire en m, et est efficace si K est significativement plus petit que m.

2.1.1 Assigner des points à un cluster

On a besoin d'une notion de distance pour trouver le centroid le plus "proche". Cette notion doit être la plus simple possible car on va faire beaucoup de comparaisons.

2.1.2 Choisir le nouveau centroid

Chaque notion de distance vient avec sa fonction objectif. Le centroid choisi sera le résultat de la fonction objectif de la distance sélectionnée.

Données Euclidiennes La fonction objectif de la **distance Euclidienne** est la minimisation de la somme des erreurs carrées (SSE).

$$\text{SSE} = \sum_{i=1}^{K} \sum_{x \in C_i} dist(c_i, x)^2$$

On peut alors montrer que le centroid qui minimise cette erreur est la moyenne (mean).

$$\text{mean} = c_i = \frac{1}{m_i} \sum_{x \in C_i} x$$

On peut noter que cette minimisation n'est pas optimale pour tout le jeu de données. C'est un optimal local pour les clusters et centroids choisi jusqu'à présent.
La distance de Manhattan[1] quand à elle va minimiser le médian des points du cluster.

Documents écrits On suppose que les données sont placées dans des "document-term matrix". On cherchera ici a maximiser la cohésion des documents

$$\text{Total Cohesion} = \sum_{i=1}^{K} \sum_{x \in C_i} dist(c_i, x)^2$$

Example of document-term matrix

	team	coach	play	ball	...	season
docA	3	0	5	0		2
docB	0	7	0	2		0
docC	0	1	0	0		0

Figure 39

2.1.3 Choisir les centroids initiaux

Centroids aléatoires Une **première technique** est de faire plusieurs itérations en choisissant les centroids au hasard, et on garde l'itération qui minimise la SSE. Si on commence avec deux centroids initiaux par pair de cluster, alors ces centroids convergeront vers les vrais clusters. En pratique, la probabilité que ca arrive avec des grands jeux de données est faible.

Clustering hiérarchique Une autre technique est de commencer avec un clustering hiérarchique, et, prendre le clustering à k centres, et commencer avec ces k centres. En pratique, c'est couteux en calcul, et il faut que K soit petit par rapport à la taille du jeu de données.

[1] Distance en escalier, somme de la longueur de chaque marche

Farthest-first-traversal Sélectionner le premier point au hasard (ou prendre la moyenne générale) et pour chaque centroid initial suivant, prendre le point le plus éloignés des centroids déja choisis. Le problème est que l'on pourrait sélectionner du bruit comme centroid, et s'éloigner des vrais clusters. On préfèrera donc prendre des groupes de points plutôt que des points, un groupe aura moins de chance d'être du bruit.

2.2 Autres problèmes

Ci-dessous seront listés quelques problèmes qu'il reste à résoudre pour rendre l'algorithme robuste.

2.2.1 Bruit

Pour éviter que le clustering soit influencé par le bruit, il peut être utile de le détecter et de le supprimer. Il est à noter que pour certaines techniques de clustering, le bruit **n'est pas** à supprimer. Une technique serait de faire une première passe sur les données et de noter la contribution de chaque point à la SSE, et de supprimer les points induisant la plus grande erreur.

2.2.2 Réduire la SSE en postprocessing

Une manière simple de réduire la SSE est d'augmenter K afin de réduire la distance entre les points et leur centroid, mais en pratique on ne veut pas augmenter le nombre de clusters.

On peut noter que la SSE total est la somme de la SSE apportée par chaque cluster. On a donc deux techniques permettant de réduire la SSE en augmentant le nombre de clusters.

Diviser un cluster Le cluster amenant la plus grande erreur.

Placer un nouveau centroid On ajoute un nouveau cluster, dont le centroid sera le point le plus éloigné de tout les autres.

Deux techniques réduisant la SSE en réduisant le nombre de cluster sont les suivantes.

Disperser un cluster On dissout le cluster amenant le plus d'erreur et on réparti ses éléments dans les autres clusters.

Fusionner deux clusters Les clusters dont les centroids sont les plus proches l'un de l'autre sont fusionnés.

2.2.3 Mettre à jour les centroids

Mettre à jour les centroids après chaque ajout d'un élément à un cluster implique de vérifier aussi si ses éléments proches ne doivent pas changer de cluster (est-ce que le centroid mis à jour est plus proche que le centroid actuel de l'objet ? Si oui, il faut le changer de cluster). Une mise à jour incrémentale évite d'avoir des clusters vides.

Le point négatif est que cela induit une dépendance sur l'ordre dans lequel les objets sont placés dans les clusters. Pour y remédier, on va rendre cet ordre aléatoire.

2.3 Bisecting K-Means

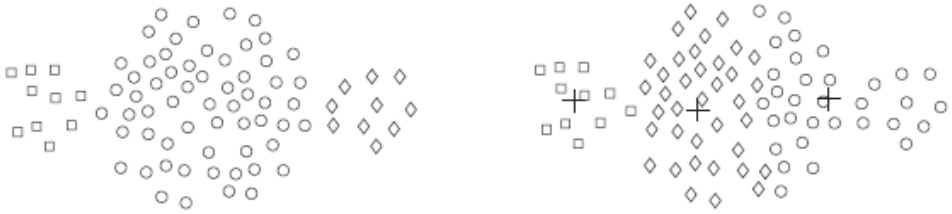
Algorithm Bisecting K-means algorithm.

1: Initialize the list of clusters to contain the cluster consisting of all points.
2: **repeat**
3: Remove a cluster from the list of clusters.
4: {Perform several "trial" bisections of the chosen cluster.}
5: **for** $i = 1$ to *number of trials* **do**
6: Bisect the selected cluster using basic K-means.
7: **end for**
8: Select the two clusters from the bisection with the lowest total SSE.
9: Add these two clusters to the list of clusters.
10: **until** Until the list of clusters contains K clusters.

Figure 40

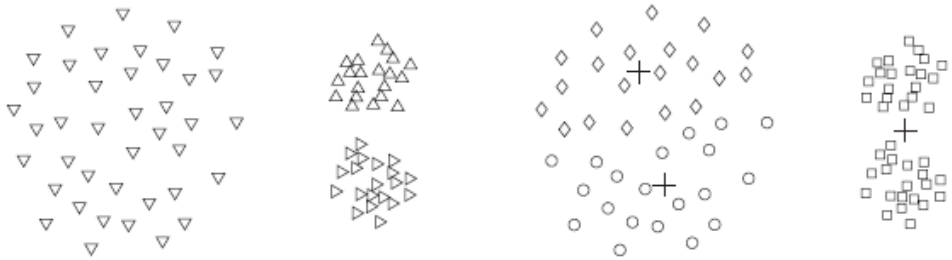
Entre l'étape 8 et 9, on va raffiner le clustering choisi, en réappliquant le K-Means basique avec les centroids du clustering choisi à l'étape 8. Ceci permettra d'avoir un optimum local. On peut utiliser cet algorithme pour faire un clustering hiérarchique, en sauvegardant chaque étape.

2.4 Types de cluster problématiques



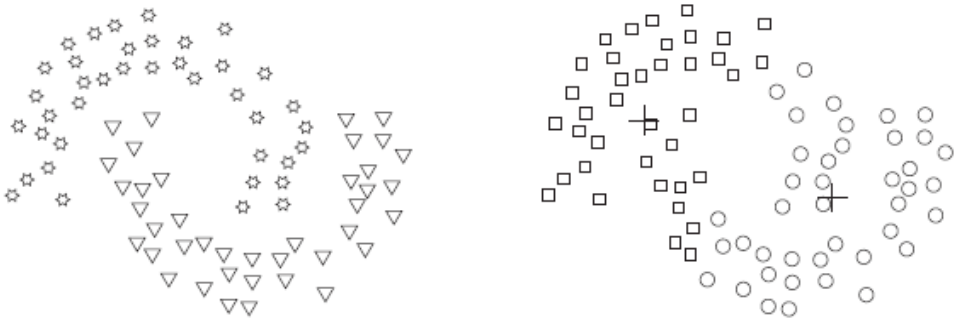
(a) Original points. (b) Three K-means clusters.

K-means with clusters of different size.



(a) Original points. (b) Three K-means clusters.

K-means with clusters of different density.



(a) Original points. (b) Two K-means clusters.

K-means with non-globular clusters.

Figure 41

Le problème avec les types de clusters ci-dessus est que la fonction objectif ne colle pas avec la définition des clusters qui ne sont pas bien séparés. De plus, pour les données ne permettant pas vraiment de définir un centroid, il faut préférer le K-Medoid.

2.5 K-Means comme problème d'optimisation

On pourrait chercher, parmi toutes les possibilités de clustering, celle qui satisfait le mieux la fonction objectif. Le problème étant que c'est infaisable à cause du nombre de calcul à faire. Une méthode d'approximation est la méthode gloutonne, qui choisit à chaque étape le choix qui a le meilleur score.

On peut de cette manière vérifier que c'est bien le centroid à la moyenne qui permet de minimiser la SSE.

On peut également changer de distance et de fonction objectif. Si on prend la distance de Manhattan (L_1) et la somme des erreurs absolues (SAE).

$$\text{SAE} = \sum_{i=1}^{K} \sum_{x \in C_i} dist_{L_1}(c_i, x)$$

Et en résolvant l'équation de minimisation pour c_i, on trouve bien que le centroid qui minimise la fonction est le médian des donnée du cluster.

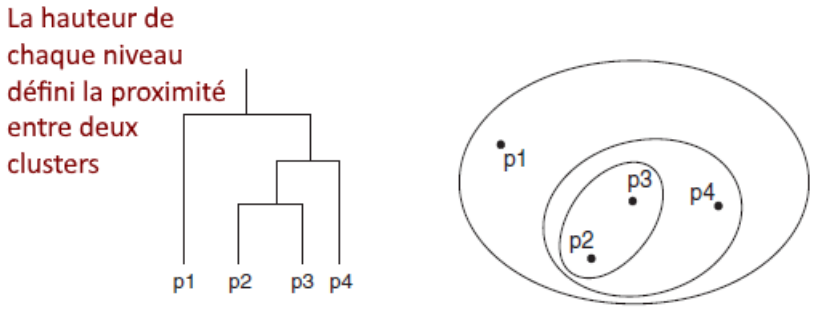
3 Clustering hiérarchique agglomératif

Il y a deux manière de considérer un clustering hiérarchique.

Agglomératif Commence le clustering en considérant chaque point comme un cluster. Il y a donc m clusters au départ, et à chaque étape, on fusionne les clusters les plus proches. Nécessite la notion de proximité de entre clusters.

Divisif Commence avec un seul cluster comprenant tous les points et divise un cluster à chaque étape.

On va donc discuter ici de la méthode agglomérative. On peut représenter le résultat d'un clustering hiérarchique avec un dendrogramme (cf. figure 42). La complexité est de $O(m^2 logm)$ en temps et $O(m^2)$ en espace, ce qui est très couteux pour m grand.



(a) Dendrogram. (b) Nested cluster diagram.

Figure 42

3.1 Algorithme basique

En démarrant avec un cluster par objet, on a l'algorithme suivant.

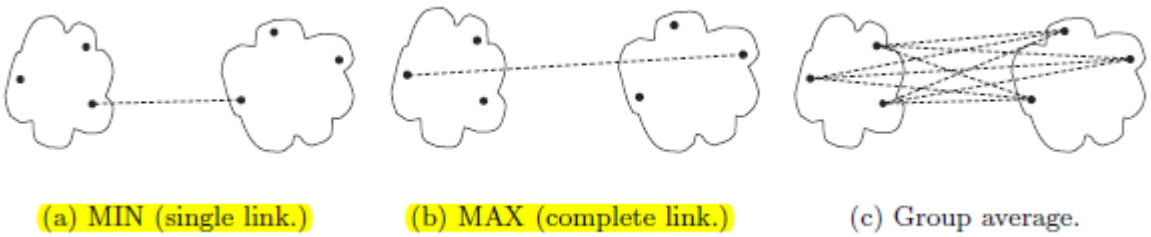
Algorithm Basic agglomerative hierarchical clustering algorithm.

1: Compute the proximity matrix, if necessary.
2: **repeat**
3: Merge the closest two clusters.
4: Update the proximity matrix to reflect the proximity between the new cluster and the original clusters.
5: **until** Only one cluster remains.

Figure 43

Il faut maintenant définir la notion de procimité entre clusters.

Distances entre les objets On peut définir la proximité entre deux cluster, par la distance maximale (MAX), minimale (MIN) ou moyenne (group average = UPGMA) qui existe entre les différents points des deux clusters. Ceci est représenté sur la figure 44. On peut noter que MAX essaie de minimiser le diamètre des clusters, pour qu'ils soient le plus groupés possible.



(a) MIN (single link.) (b) MAX (complete link.) (c) Group average.

Figure 44

Distances entre prototypes On peut aussi définir la proximité entre deux clusters comme la proximité entre leur prototype respectif.

Méthode de Ward Un cluster est ici représenté par son centroid, elle mesure l'augmentation de SSE que résulte de la fusion de deux clusters. Cette méthode est la seule parmi celle présentées qui peut réduire la métrique de distance lorsqu'on fusionne deux clusters. C'est en réalité ce qui est utilisé en général dans le K-Means.

3.2 La formule de Lance-Williams

Cette formule permet de généraliser toutes les définitions de proximité en une seule. Il suffit de modifier les paramètre de la formule pour passer d'une définition à l'autre. De plus, des algorithmes performants utilisant cette formule existent.

3.3 Lacunes majeures

La principale lacune du clustering hiérarchique est qu'il est très gourmand en ressources, même si on utilise déjà des techniques d'approximation.

3.3.1 Gérer les clusters de tailles différentes

Il peut être intéressant de considérer la taille des clusters que l'on souhaite fusionner. Les méthodes vues jusqu'à présent considèrent tous les clusters comme égaux, on a utilisé la méthode dite **unweighted**, on a pas mis de poids sur les points. L'autre méthode, **weighted**, peut être utilisé dans le cas où les classes sont inégalement représentées. La distance "group average" a été adaptée aux deux méthodes. La unweighted est juste la moyenne des distances et est appelée UPGMA. La méthode weighted est quant à elle appelée WPGMA. Soit deux clusters R et Q, où R a été formé en fusionnant A et B.

$$\text{UPGMA} : \ prox(R, Q) = \frac{\sum_{x \in R, y \in Q} dist(x, y)}{m_R \cdot m_Q}$$

$$\text{WPGMA} : \ prox(R, Q) = \frac{prox(A, Q) + prox(B, Q)}{2}$$

3.3.2 Les fusions sont finales

Une fois que deux clusters sont fusionnés, on ne peut plus en modifier les éléments. En effet, Avec la méthode de Ward et en minimisant la SSE, la fusion de deux clusters ne représente pas un minima local si l'on regarde à la SSE totale. En effet, il se peut qu'un élément d'un cluster soit plus proche d'un centroid d'un autre cluster que le sien.

3.3.3 Forces et faiblesses

La raison principale de l'utilisation des algorithmes de clustering hiérarchiques est le besoin d'une hiérarchie, d'une taxonomie dans les donnée.

4 DBSCAN

Cette technique produit un clustering basé sur la densité. Technique très efficace, sauf quand les clusters ont des densités très différentes entre eux, et quand les données ont un grand nombre de dimensions (attributs).

4.1 Densité

Pour définir la densité autour d'un point, on utilise la méthode center-based. Cette méthode consiste à compter le nombre de points contenu dans un rayon, Eps, autour de ce point, le point se compte lui-même. Sa complexité en temps est
$O(m \times$ temps pour trouver les voisins dans le rayon $Eps)$, ce qui veut dire qu'avec la bonne structure de donnée (KD-Tree, ...), on peut avoir une complexité en $O(m \log m)$.

En utilisant cette technique on peut alors classifier un point comme étant un :

(1) **Core Point** : à l'intérieur d'une région dense. Un point est considéré comme tel si il y a au moins $MinPts$ dans un rayon de Eps autour de lui, lui y comprit.
(2) **Border Point** : sur le bord d'une région dense, il a un ou des Core Points dans un rayon de Eps autour de lui. Un border point peut avoir beaucoup de Core Point dans son voisinage.
(3) **Noise/Background Point** : dans une région peu occupée. Il n'est ni un Core Point, ni un Border Point.

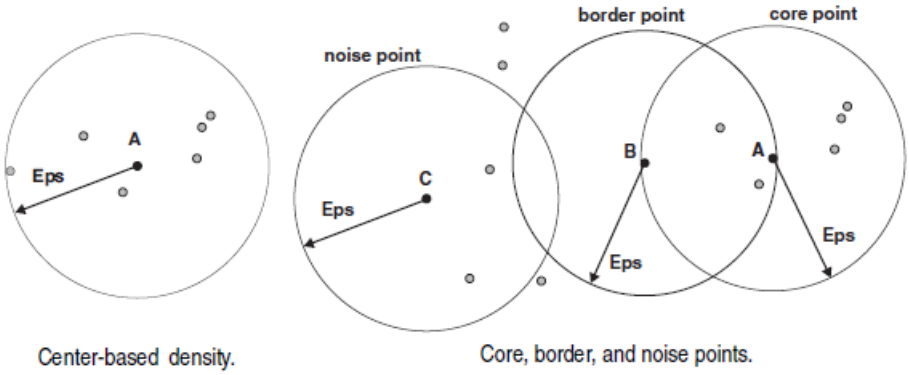


Figure 45

4.2 Algorithme

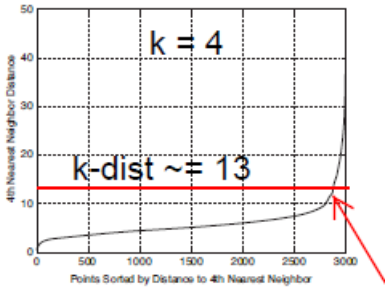
Algorithm DBSCAN algorithm.

1: Label all points as core, border, or noise points.
2: Eliminate noise points.
3: Put an edge between all core points that are within Eps of each other.
4: Make each group of connected core points into a separate cluster.
5: Assign each border point to one of the clusters of its associated core points.

Figure 46

4.2.1 Valeur des paramètres

Il faut maintenant fixer $MinPts$ et Eps. Supposons qu'un nombre k soit fixé (en pratique, DBSCAN prend k=4), alors, on appelle $k-dist$ la distance entre un point et son $k^{\text{ème}}$ voisin le plus proche. Si on trie les points par ordre croissant pour leur valeur de $k-dist$, on pourra normalement observer un changement brusque dans la courbe, ce changement brusque représente normalement la limite entre le non-bruit et le bruit. On prendra donc la valeur de $k-dist$ à ce changement brusque comme Eps et $MinPts = k$. Ceci est illustré à la figure 47.



K-dist plot for sample data.

Figure 47

Four clusters embedded in noise.

Figure 48

4.2.2 Problème de densités variables

Si des clusters ont des densités très différentes, on ne pourra pas les détecter tous en même temps. En effet, comme on le voit sur la figure 48, A et B sont beaucoup plus dense que C et D. Si on arrive à distinguer A et, B, alors C et D sont considérés comme du bruit, et si on arrive à discerner C et D, A, B, et le bruit dans leurs alentours risquent d'être confondu en un seul cluster.

5 Évaluation des clusters

Appelée aussi la **validation de cluster**, l'évaluation d'un cluster est importante car les algorithmes de clustering trouveront des clusters, même dans des données à priori non classifiables. On pourrait comparer le résultat des trois algorithmes vus et, si les clusters ne se ressemble pas entre les trois, alors on en conclut que ce sont des données aléatoire, mais ça ne marche pas pour un grand nombre d'attributs.

Voici les cinq problématiques de la validation de cluster.

1. Déterminer si les données sont "clusterisables" ou si, au contraire, elles ont un caractère aléatoire.
2. Déterminer le nombre correct de clusters.
3. Évaluer la qualité du clustering sans se baser sur des informations externes.
4. Évaluer la qualité du clustering en se basant sur des informations externes, comme des labels connus pour chaque objet ou autre.
5. Comparer deux clustering pour déterminer lequel est le meilleur.

On y distingue trois types de problèmes :

Non-supervisé Mesure la qualité sans faire appel à des ressources externes. Ces mesures sont aussi appelées **internal indices**. La SSE est une mesure non-supervisée. On distingue deux types principaux de mesures non-supervisées : **cluster cohesion** et **cluster separation**. Les problèmes 1 à 3 sont non-supervisés.

Supervisé Mesure qui teste le clustering avec un ensemble d'informations externes (labels, ...). Elles sont aussi appelées **external indices**. L'*entropy* est une mesure supervisée car elle compare la correspondance avec les labels connus des objets. Le problème 4. est supervisé.

Relatif Mesure visant à comparer différents clustering ou clusters, elle peut être supervisée ou non-supervisée. Comparer deux cluster avec leur SSE respective est une mesure relative. Le problème 5. est relatif.

5.1 Non-supervisée avec cohésion et séparation

De manière générale, on définit la validité d'un clustering (totale) par rapport à une somme pondérée reprenant la validité de chaque cluster.

$$\text{validité totale} = \sum_{i=1}^{K} w_i \cdot validity(C_i)$$

où $validity$ peut être la cohésion, la séparation, ou une combinaison des deux.
Il reste donc à définir les mesures de cohésion et de séparation pour différents types de clustering. De manière générale, la **cohésion** est la mesure qui indique à quel point les éléments d'un cluster sont proches les uns des autres, tandis que la **séparation** indique à quel point les différents clusters sont isolés les uns des autres.

Ces mesures peuvent être utilisées pour évaluer un clustering entier ou un seul cluster. Un cluster avec une grande cohésion est à préférer, et une faible séparation indique le besoin de fusionner des clusters.

5.1.1 Cluster basés sur des graphes

La cohésion est définie comme la somme des poids sur les liens entre les objets du cluster. La séparation est définie comme la somme des proximités entre les objets des deux clusters. $proximity$ peut être une mesure de similitude ou de dissimilitude. Cette mesure est reportée sur un graphe de proximité, dans lequel les noeud sont les objets et les liens ont comme poids la proximité entre les deux objets qu'ils relient.

$$cohesion(C_i) = \sum_{x \in C_i, y \in C_i} proximity(x, y)$$
$$separation(C_i, C_j) = \sum_{x \in C_i, y \in C_j} proximity(x, y)$$

5.1.2 Cluster basés sur les prototypes

Pour ce type, la cohésion est définie comme la somme des distances entre les objets du cluster et le prototype du cluster. La séparation est la proximités entre les prototypes des deux clusters. (c est le prototype global). Si on prend le carré de la distance Euclidienne comme mesure de proximité, la cohésion devient alors la mesure de la SSE.

$$cohesion(C_i) = \sum_{x \in C_i} proximity(x, c_i)$$
$$separation(C_i, C_j) = proximity(c_i, c_j)$$
$$separation(C_i) = proximity(c_i, c)$$

Lorsque la distance Euclidienne est choisie pour mesurer la proximité, la mesure de séparation entre clusters se fait généralement par la SSB (somme des carrés entre les groupes).

$$\text{SSB Totale} = \sum_{i=1}^{K} m_i \cdot dist(c_i, c)^2$$

On peut dériver cette formule pour l'exprimer en fonction de c_i et c_j, d'où les deux définitions de séparations données plus haut.

5.1.3 Mesures globales

On peut noter que n'importe quelle mesure non-supervisée de validité de cluster peut être utilisée comme fonction objective d'un algorithme de clustering.

5.1.4 Graphe vs prototypes

Les mesures de cohésions et de séparations des cluster basés sur des graphes et des clusters basées sur des prototypes paraissent fort différentes, mais pour certaines valeurs, elles sont équivalente.

5.1.5 Lien entre Cohésion et Séparation

Il y a parfois un lien fort entre ces deux mesures. En plus, la somme entre la SSE et la SSB donne une constante appelée TSS (somme totale des carrés), qui est la même pour tous les clusterings possible au sein d'un jeu de données.

$$\text{TSS} = \sum_{i=1}^{K} \sum_{x \in C_i} (x - c)^2 = \text{SSE} + \text{SSB}$$

Pour rappel, **SSE** est la sommes des erreurs carrées et mesure la séparation à l'intérieur d'un cluster. **SSB** est la somme des carrés entre cluster et mesure la séparation inter cluster. Enfin, **TSS** est la somme totale des carrés et ne dépend pas de la manière dont les objets sont répartis dans les clusters.

5.1.6 Coefficient de silhouette

Le coefficient de silhouette combine la cohésion et la séparation. $sil_i = \frac{b_i - a_i}{\max(a_i, b_i)}$ .Le coefficient a donc deux composantes; a_i et b_i, a_i étant la distance moyenne entre le point i et les points de son cluster, et b_i étant la distance moyenne minimale entre le point et les points d'un autre cluster. Minimiser a_i c'est augmenter la cohésion, et maximiser b_i c'est augmenter la séparation.

Ce coefficient varie entre -1 et 1. S'il est négatif, cela veut dire que a_i est plus grand que b_i. Ce la dénoterait donc que l'objet devrait se trouver dans l'autre cluster ayant servi au calcul de b_i.

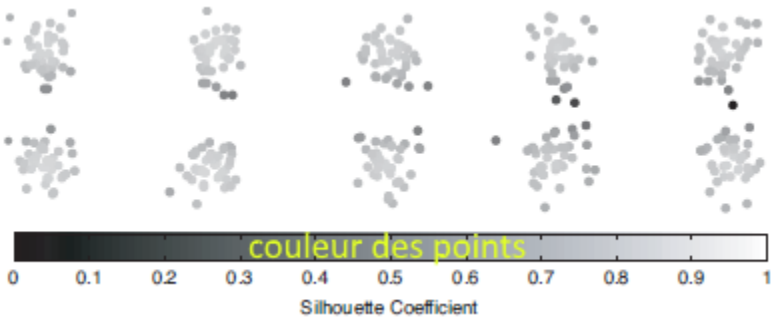


Figure 49

La silhouette d'un clustering peut être obtenu en faisant la moyenne de la silhouette de tous les points.

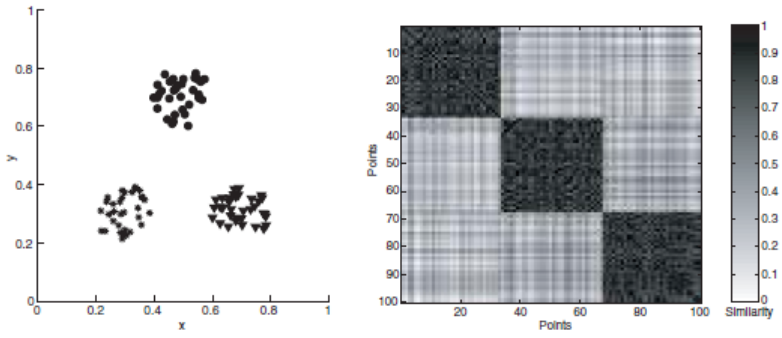
5.2 Non-supervisée avec matrice de proximité

Le principe est de calculer la corrélation entre une matrice de proximité dite "idéale" et la vrai matrice. Pour chaque objet i, la case i, j de la matrice **idéale** vaudra 1 si i et j sont dans le même cluster et 0 sinon. Corrélation calculée au dessous ou en dessous de la diagonale de la matrice, étant donné qu'elle est symétrique. Au plus la corrélation est élevée, au mieux c'est. Pas très bon en pratique pour des clusters basés sur la densité ou "contiguity-based.

Il es généralement plus simple de travailler avec une mesure de similarité plutôt que de distance. On peut calculer la similarité s entre deux objets i, j de la manière suivante :

$$s(i,j) = 1 - \frac{dist(i,j) - dist_{min}}{distmax - dist_{min}}$$

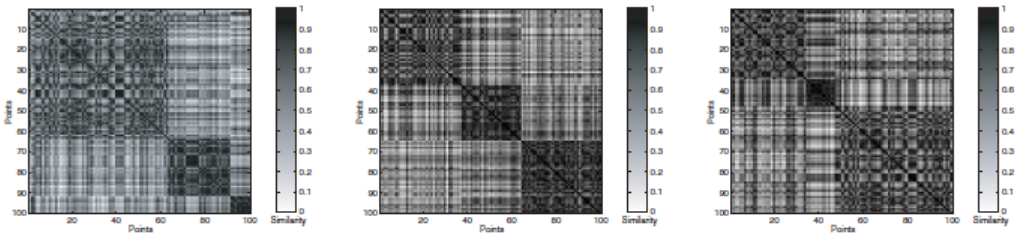
On peut aussi visualiser la corrélation pour déterminer si il y bien des clusters clairs qui se dessine (cf. figure **??**) qui indiquent que les données sont classifiables, ou qui sont plus diffus (cf. figure 51) et donc qui reflètent un caractère aléatoire.



(a) Well-separated clusters.

(b) Similarity matrix sorted by K-means cluster labels.

Figure 50: Clusters clairs, facilement distinguable



(a) Similarity matrix sorted by DBSCAN cluster labels.

(b) Similarity matrix sorted by K-means cluster labels.

(c) Similarity matrix sorted by complete link cluster labels.

Similarity matrices for clusters from random data.

Figure 51: Clusters diffus, données aléatoires

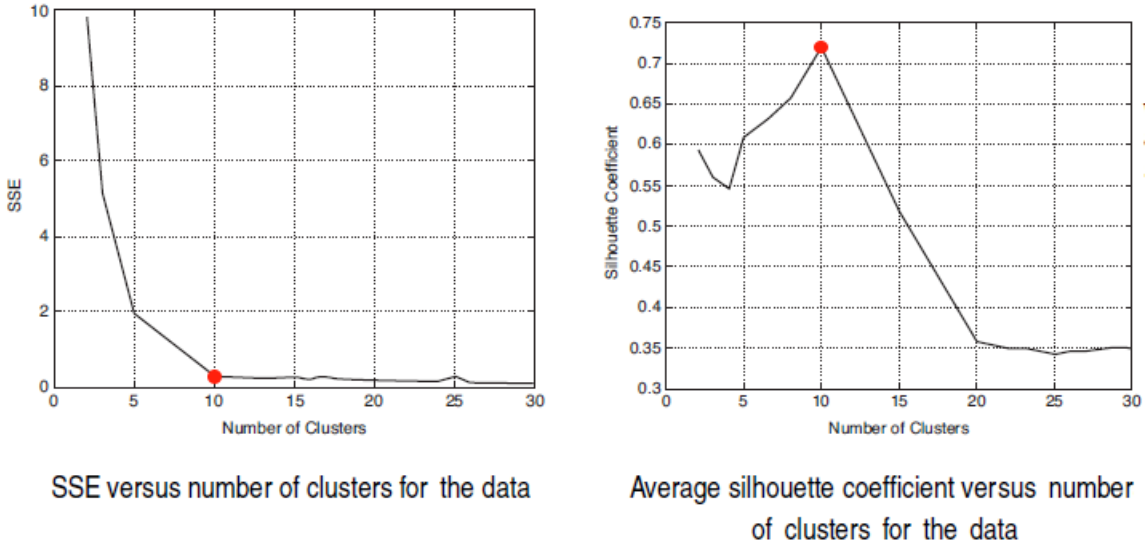
5.3 Non-supervisée pour clustering hiérarchique

Cophenetic distance Distance entre deux objets défini par la proximité à laquelle une technique de clustering hiérarchique agglomératif met les deux objets dans le même cluster pour la première fois. Autrement dit, si deux clusters éloignés d'une distance d l'un de l'autre sont choisis pour être fusionnés, alors, la distance cohpenetic entre les objets des deux cluster sera de d.

CPCC **CoPhenetic Correlation Coefficient**, corrélation entre les entrées de la matrice de distance cophenetic et les entrées de la matrice de dissimilarités originale. On l'utilise pour comparer des techniques hiérarchiques entre elles pour un même jeu de données. Le score le plus haut est le mieux.

5.4 Déterminer le nombre idéal de clusters

Observer la variation de la SSE ou du coefficient de silhouette en fonction du nombre de clusters permet d'avoir une idée sur le nombre idéal. En pratique, c'est parfois pas très clair...



SSE versus number of clusters for the data

Average silhouette coefficient versus number of clusters for the data

Figure 52: En reprenant l'exemple de la figure 49
10 est le nombre idéal car il minimise SSE et maximise silhouette.

5.5 Tendance au clustering

On peut évaluer la tendance qu'à un jeu de données à avoir des clusters naturels sans y appliquer de techniques de clustering. On va pour cela appliquer des tests statistiques, comme la méthode de **Hopkins**.

Pour un nombre p fixé, on va générer p nombres aléatoire dans le jeu de données et sélectionner p données du jeu de données initial. Si u_i représente le distance entre le point i du jeu aléatoire et son plus proche voisin dans le jeu donnée initial, et w_i la distance entre le point i du jeu de donnée initial et son plus proche voisin dans le jeu de donnée initial,

$$H = \frac{\sum_{i=1}^{p} w_i}{\sum_{i=1}^{p} u_i + \sum_{i=1}^{p} w_i}$$

Un jeu de donnée aura donc tendance au clustering pour un H proche de 0. En effet, il faudrait que la plus proche distance à l'intérieur de jeu de données initial (w_i) soit plus petite (plus proche) que la plus proche distance entre les données aléatoire et le jeu de donnée initial (u_i), qui est sensée être élevée (éloignée). Au contraire si u_i tend vers 0 (distance proche avec les données aléatoire), H tendra vers 1.

5.6 Mesures supervisées

On distingue deux types principaux de techniques : les **orientées classification** et les **orientées similarités**.

5.6.1 Mesures orientées classification

On y retrouve l'entropy, la pureté, la precision, le recall et la F-mesure. On vérifie donc que les objets d'un même cluster ont le même label de classe.

Entropy On commence par calculer la distribution des classes, i.e. p_{ij} la probabilité que l'objet i qu'un membre du cluster i appartiennent à la classe j. On a $p_{ij} = \frac{m_{ij}}{m_i}$, avec m_{ij} le nombre d'objets du cluster i qui appartiennent à la classe j et m_i le nombre total d'objets du cluster i. L'entropie est ensuite calculée de manière classique : $e_i = -\sum_{j=1}^{L} p_{ij} log_2 p_{ij}$, où L est le nombre total de classe. L'entropy totale se calcule alors en une somme pondérée par la taille des clusters : $e = -\sum_{i=1}^{K} \frac{m_i}{m} e_i$

5.6.2 Mesures orientée similarités

On y compare **(1)** la matrice des similarités idéales vue auparavant, où la case i, j vaudra 1 si i et j sont dans le même cluster et 0 sinon avec (2) la **matrice idéale de similarité de classe** où la case i, j vaut 1 si les objet i et j ont le même label de classe. On mesure donc la corrélation entre (1) et (2), qui est appelée la statistique Γ.

On classe chaque paire d'objets selon quatre catégories. (f_{11} étant par exemple le nombre de paires d'objets ayant le même label de classe et appartenant au même cluster).

	Même cluster	Différents clusters
Même classe	f_{11}	f_{10}
Différentes classes	f_{01}	f_{00}

Les deux mesures de corrélation les plus répandues sont:

$$\text{Rand tatistic} = \frac{f_{00} + f_{11}}{f_{00} + f_{01} + f_{10} + f_{11}}$$

$$\text{Jaccard coefficient} = \frac{f_{11}}{f_{01} + f_{10} + f_{11}}$$

5.6.3 Mesure supervisée pour clustering hiérarchique

On utilise une F-mesure pondérée.

$$F = \sum_j \frac{m_j}{m} \max_i F(i, j)$$

5.7 Interpréter les mesures

Une fois qu'on a une valeur de "qualité" d'un clustering, on peut se demander si cette valeur est significative ou pas (clustering vraiment bon, vraiment mauvais, ou moyen ?). Pour ce faire, on peut se baser sur les valeurs max/min de la mesure et savoir si on en est proche, mais certaines mesures n'ont pas de min/max.

On peut comparer la valeur d'une mesure avec la probabilité qu'avait cette mesure d'obtenir cette valeur afin de conclure si oui ou non le clustering est aléatoire.

On va donc, pour la mesure choisie, faire des clustering sur des données aléatoires et approcher les valeurs obetnues par une distribution de probabilité. On effectue ensuite le clustering sur le jeu de données qui nous intéresse et on compare sa valeur pour la mesure avec la distribution de probabilité. Si elle est éloignée (peu probable), alors le jeu de données n'est pas à caractère aléatoire, mais si au contraire on obtient une valeur probable (comme la moyenne de la Gaussienne de la figure 53), alors on a un clustering qui ressemble à un clustering de données aléatoire, les données ne sont donc pas clusterisables.

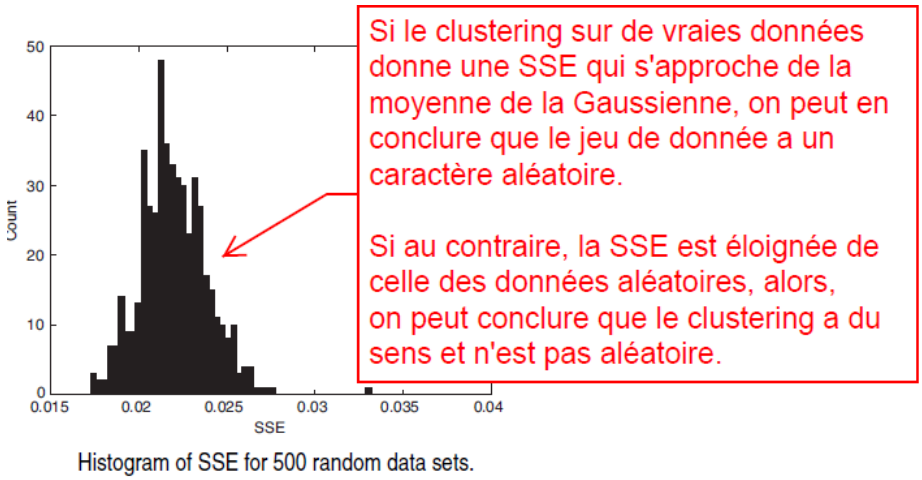

Si le clustering sur de vraies données donne une SSE qui s'approche de la moyenne de la Gaussienne, on peut en conclure que le jeu de donnée a un caractère aléatoire.
Si au contraire, la SSE est éloignée de celle des données aléatoires, alors, on peut conclure que le clustering a du sens et n'est pas aléatoire.
Count
SSE
0
10
20
30
40
50
0.015
0.02
0.025
0.03
0.035
0.04
Histogram of SSE for 500 random data sets.

Figure 53