Méthodes non paramétriques

Introduction à l'apprentissage automatique – GIF-4101 / GIF-7005

Professeur: Christian Gagné

Semaine 4

4.1 Estimation par histogramme

Méthodes non paramétriques

- Méthodes paramétriques (incluant densité-mélange)
  - Densités de probabilité ($p(\mathbf{x})$) posées à l'avance (typiquement, $\mathbf{x} \sim \mathcal{N}_D(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$)
  - Recherche de la paramétrisation de ces densités
- Méthodes non paramétriques
  - Estimer la densité de probabilité directement à partir des données
  - Aucune hypothèse *a priori* sur la distribution des données
- Approches principales
  - Estimation par histogramme
  - Estimation par noyau
  - k-plus proches voisins (k-PPV)

Estimation non paramétrique de densités

- Probabilité que valeur x inférieure ou égale à a
  - $P(x \leq a) = \int_{x=-\infty}^{a} p(x)\ dx$
  - Estimation avec échantillonnage $\{x^t\}_{t=1}^{N}$: $\hat{P}(x \leq a) = \frac{\#\{x^t \leq a\}}{N}$
- Estimation de valeur x dans l'intervalle $[a,a+h]$

$$\hat{P}(a \leq x \leq (a+h)) = \frac{\#\{x^t \leq (a+h)\} - \#\{x^t \leq a\}}{N}$$

- Approximation de densité $p(x)$ dans $[a,a+h]$ par valeur constante $\hat{p}(x|x \in [a,(a+h)]) \approx \hat{p}(a)$

$$\begin{aligned} \hat{P}(a \leq x \leq (a+h)) &= \int_{x=a}^{a+h} \hat{p}(x)\ dx \approx \hat{p}(a)(a+h-a) = h\hat{p}(a) \\ \hat{p}(x|x \in [a,(a+h)]) &\approx \frac{1}{h}\left[\frac{\#\{x^t \leq (a+h)\} - \#\{x^t \leq a\}}{N}\right] \end{aligned}$$

Estimation par histogramme

- Estimation par histogramme (1D)
  - Diviser l'espace d'entrée en compartiments de tailles égales (*bins*)
  - Chaque compartiment est de largeur h et positionné par rapport à une origine x_0

$$]x_0 + mh, x_0 + (m+1)h], \text{ avec } m \text{ un nombre naturel}$$

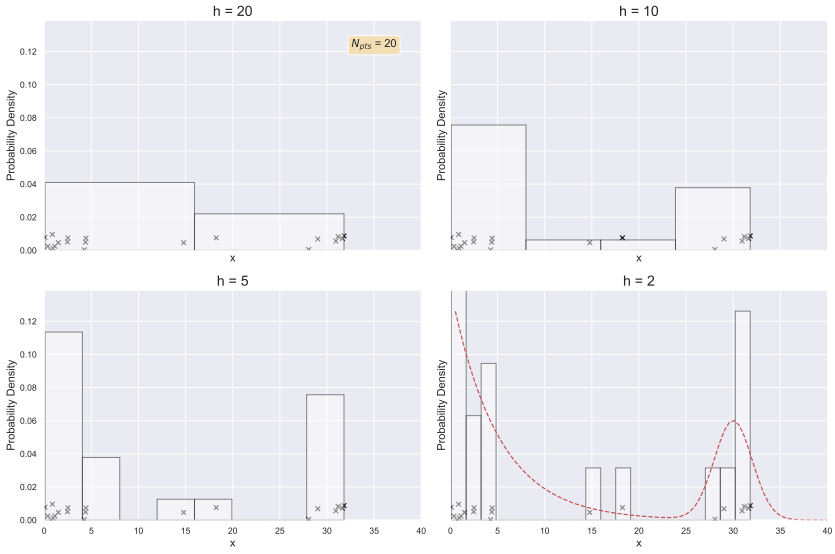
  - Estimation en 1D, à partir d'un jeu $\{x^t\}_{t=1}^N$

$$\hat{p}(x) = \frac{\#\{x^t \text{ dans même compartiment que } x\}}{Nh}$$

- Choix de l'origine x_0 peut affecter légèrement l'estimateur (discontinuités aux frontières)
- Choix de la largeur h affecte significativement l'estimateur
  - Valeur de h faible, de nombreux pics dans l'estimation
  - Valeur de h grande, estimation plus douce (moins précise)

Densité d'estimation par histogramme

Densité d'estimation par histogramme



Estimation selon plusieurs dimensions

- Estimation en plusieurs dimensions par histogramme
  - Compartiments correspondant à des hypercubes d'hypervolumes égaux
  - Souffre gravement de la malédiction de la dimensionnalité
- Conditions générales pour estimations convergent vers véritables densités de probabilité, $\hat{p}(\mathbf{x}) \to p(\mathbf{x})$
  - Volume V_n de chaque compartiment réduit

$$\lim_{n \to \infty} V_n = 0$$

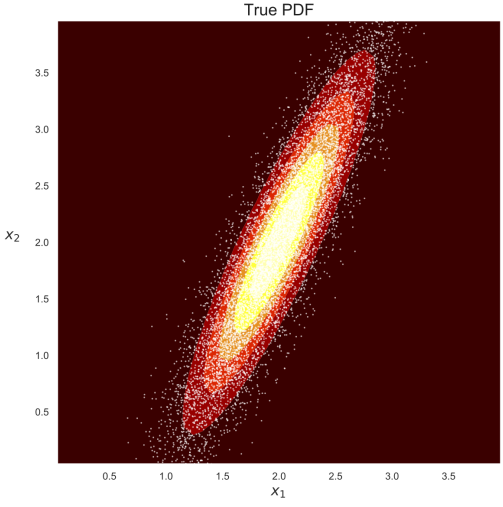
  - Nombre d'observations k_n par compartiment très grand

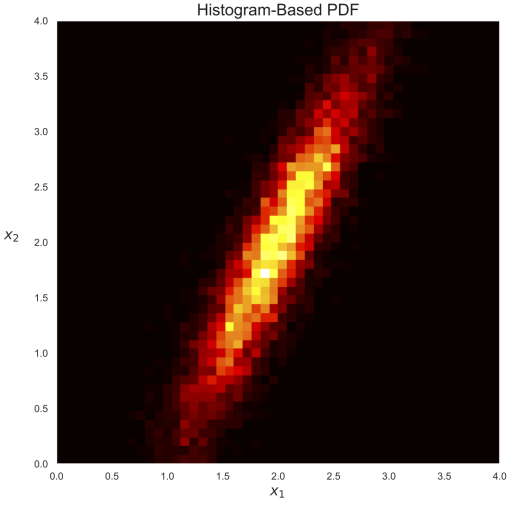
$$\lim_{n \to \infty} k_n = \infty$$

  - Ratio du nombre d'observations par compartiment avec le nombre d'observations total élevé

$$\lim_{n \to \infty} \frac{k_n}{n} = 0$$

Densités d'estimation en 2D





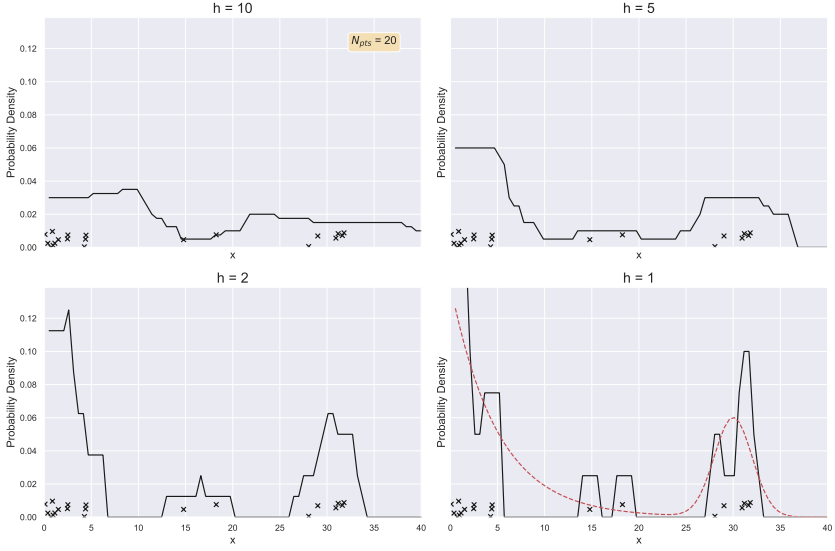
Densités par estimation naïve d'histogramme

- Estimateur naïf d'histogramme (aussi connu comme une *fenêtre de Parzen*)
  - Estimer la densité autour de x dans un hypercube de largeur $2h$
  - Formulation en 1D

$$\begin{aligned} \hat{p}(x) &= \frac{\#\{(x-h) < x^t \leq (x+h)\}}{2Nh} \\ &= \frac{1}{2Nh} \sum_{t=1}^{N} \mathrm{w}\left(\frac{x - x^t}{h}\right) \\ \text{où } \mathrm{w}(u) &= \begin{cases} 1 & \text{si } |u| < 1 \\ 0 & \text{autrement} \end{cases} \end{aligned}$$

  - Évite de devoir poser une origine x_0
  - L'estimation n'est pas continue et comporte des marches à $x^t \pm h$

Densités par estimation naïve d'histogramme



4.2 Estimation par noyau

Estimation par noyau

- Estimation par noyau : estimation plus douce que l'estimateur naïf d'histogramme
  - Utiliser un *noyau adoucissant*, typiquement un noyau gaussien

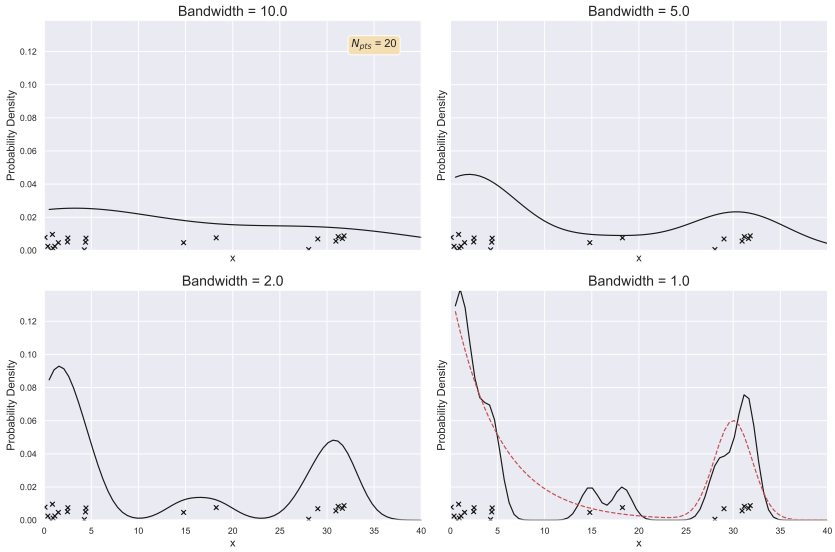
$$K(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{u^2}{2}\right]$$

  - Convolution du noyau adoucissant avec les données $\{x^t\}_{t=1}^N$

$$\hat{p}(x) = \frac{1}{Nh} \sum_{t=1}^{N} K\left(\frac{x - x^t}{h}\right)$$

  - Noyau $K(\cdot)$ détermine la forme de l'influence des données
  - Largeur de fenêtre h détermine la largeur de l'influence des données
  - Généralise l'estimation naïve, qui utilise une boîte rectangulaire comme noyau

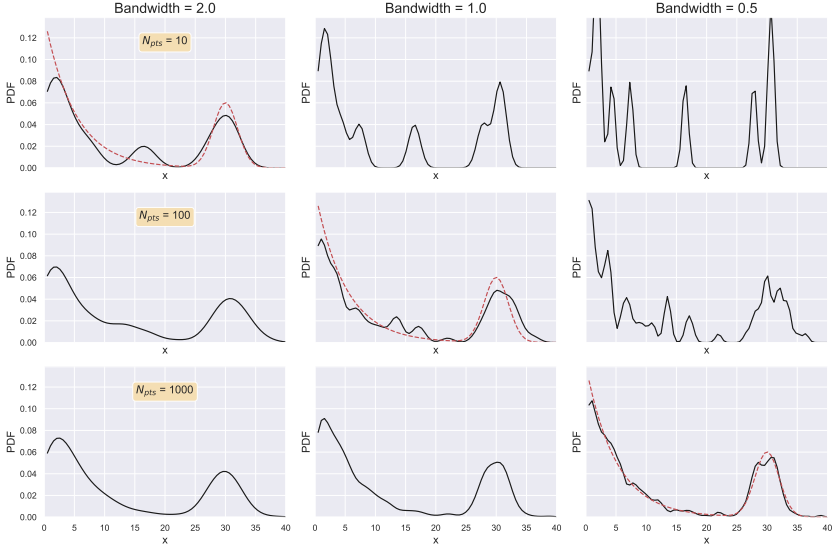
Densités d'estimation par noyau



Qualité de l'estimation par noyau

- Largeur de la fenêtre influence grandement l'estimation
  - h petit : chaque donnée a un effet local important
  - h grand : estimation plus douce, avec du recoupement entre les noyaux
- Estimation $\hat{p}(x) \to p(x)$ lorsque $N \to \infty$
  - Il faut que $h \to 0$, mais plus lentement que N (c'est-à-dire $Nh \to \infty$)
  - Typiquement, on pose que $h_N = h_1/\sqrt{N}$, utilisant une fenêtre de h_N pour un jeu de taille N

Variation du nombre d'observations



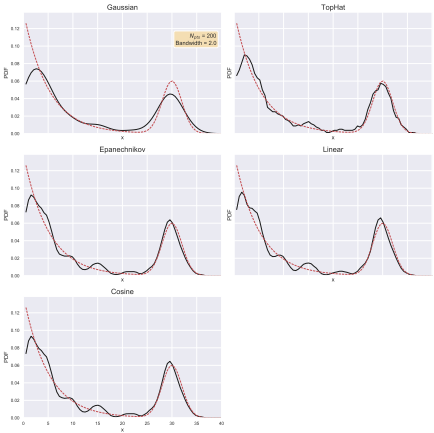
Propriétés des noyaux adoucissants

- Propriétés désirables d'un noyau adoucissant
  1. Valeurs positives ou nulles
  $$K(x) \geq 0, \forall x$$
  2. Aire sous la courbe unitaire
  $$\int_{-\infty}^{\infty} K(x)\ dx = 1$$
  3. Centré sur l'origine
  $$\int_{-\infty}^{\infty} x\,K(x)\ dx = 0$$

- Si propriétés 1 et 2 sont respectées, $K(u)$ correspond à une fonction de densité valide et donc $\hat{p}(x)$ l'est également
- De plus, si $K(u)$ est continue et différentiable, $\hat{p}(x)$ l'est également
- Support : étalement des valeurs de u pour lequel $K(u)$ est non-nul

Exemples de noyaux adoucissants

- Gaussien
  - Dérivable, mais support n'est pas borné
- Boxcar / TopHat : Estimation naive d'histogramme
  - Support borné, mais fonction non dérivable
- Epanechnikov : $K(u) = (3/4)(1 - u^2)$ pour $u \in [-1,1]$
  - Support borné, fonction non dérivable
- Linéaire / triangle : $K(u) = 1 - |u|$ pour $u \in [-1,1]$
  - Support borné, fonction non dérivable
- Cosinus : $K(u) = \cos(u\,\pi/2)$ pour $u \in [-1,1]$
  - Support borné, fonction non dérivable



Estimation par noyau, cas multidimensionnel

- Équation générale de l'estimation par noyau en D dimensions

$$\hat{p}(\mathbf{x}) = \frac{1}{Nh^D} \sum_{t=1}^{N} K\left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}^t}{h}\right)$$

  - Contrainte sur le noyau : $\int_{\mathbb{R}^D} K(\mathbf{x})\, d\mathbf{x} = 1$
- Noyau gaussien multivarié

$$K(\mathbf{u}) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)^D \exp\left[-\frac{\|\mathbf{u}\|^2}{2}\right]$$

- Sensible à la dimensionnalité et à la normalisation des valeurs selon les différentes dimensions
- Noyau incluant une normalisation selon l'estimation de la covariance $\mathbf{\Sigma}$

$$K(\mathbf{u}) = \frac{1}{(2\pi)^{0,5D} |\mathbf{\Sigma}|^{0,5}} \exp\left[-0{,}5\mathbf{u}^\top \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{u}\right]$$

Estimation par noyau pour le classement

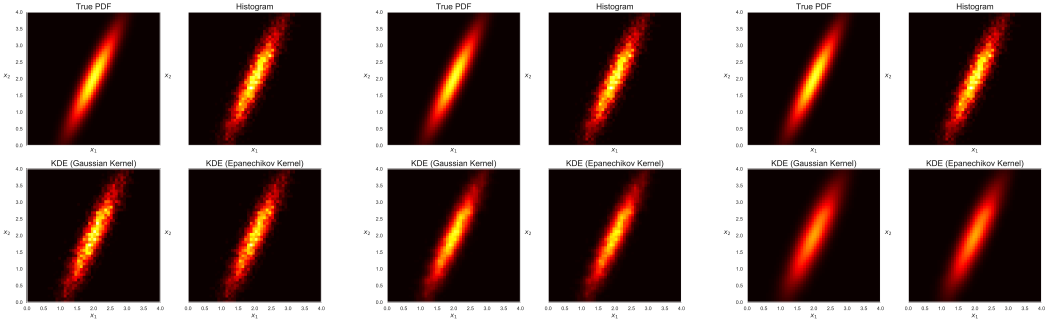
- Estimation de $\hat{p}(\mathbf{x}|C_i)$ par noyau

$$\hat{p}(\mathbf{x}|C_i) = \frac{1}{N_i h^D} \sum_{t=1}^{N} K\left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}^t}{h}\right) r_i^t$$

  - Fonction discriminante correspondante

$$\begin{aligned} \hat{P}(C_i) &= \frac{N_i}{N} \\ \mathrm{h}_i(\mathrm{x}) &= \hat{p}(\mathbf{x}|C_i)\hat{P}(C_i) \\ &= \frac{1}{Nh^D} \sum_{t=1}^{N} K\left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}^t}{h}\right) r_i^t \end{aligned}$$

Effet de largeur du noyau pour classement



Étroit Moyen Large

4.3 k-plus proches voisins

Estimation de densité par k-PPV

- k-plus proches voisins (k-PPV)
  - Ensemble de référence $\mathcal{X} = \{x^t\}_{t=1}^N$
  - Adapter la largeur de la fenêtre selon la densité locale des données (k données les plus proches)

$$\hat{p}(x) = \frac{k}{2Nd_k(x,\mathcal{X})}$$

  - $h = d_k(x,\mathcal{X})$: distance du k-ième voisin à la donnée x dans $\mathcal{X}$
  - Estimateur non continu, similaire à l'estimateur naïf par histogramme, avec largeur h adaptative

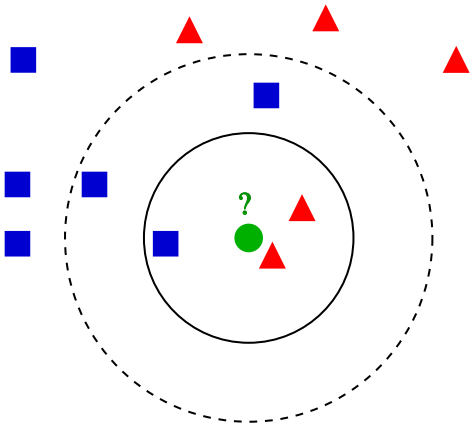
Paramètres de k-PPV

- Les k-PPV définis par trois paramètres principaux
  - Nombre de voisins k
    - k faible : découpage de l'espace fin selon l'ensemble de référence
    - k élevé : découpage plus doux, moyennage selon le voisinage
  - Mesure de distance $D(\mathbf{x},\mathbf{y})$
    - Définit la relation de voisinage entre les données
  - Ensemble de données de référence $\mathcal{X}$
    - Taille de l'ensemble de données
    - Densité de la répartition dans l'espace des données
    - Représentativité des données (filtrage)

Classement par k-PPV

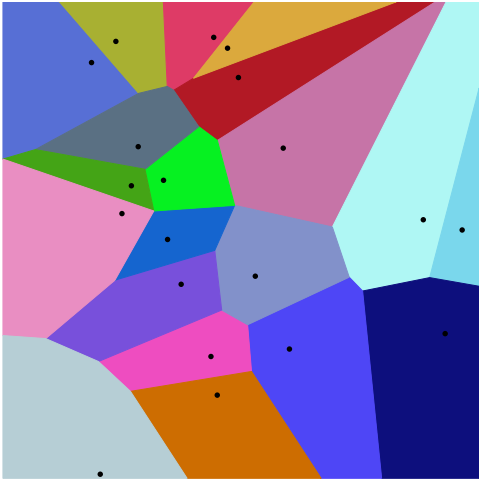
- Classement par k-plus proches voisins (k-PPV)
  - Ensemble de référence (d'entraînement) $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}^t, r^t\}_{t=1}^N$
  - Pour classer une donnée inconnue $\mathbf{x}$, calculer les k-plus proches voisins dans $\mathcal{X}$ en utilisant une mesure de distance (ex. distance euclidienne)
  - Assigner à $\mathbf{x}$ l'étiquette la plus fréquente parmi celles des k-plus proches voisins
- Méthode très simple et directe pour le classement
- Avec $k = 1$, divise l'espace d'entrée selon un diagramme de Voronoï basé sur $\mathcal{X}$

Classement par les k-PPV



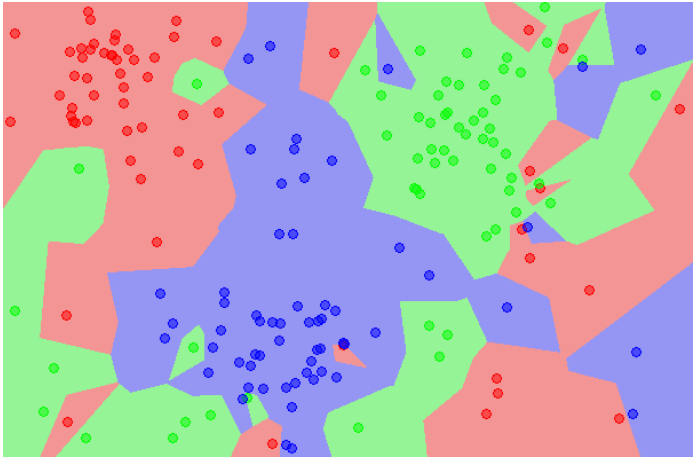
Par Antti Ajanki, CC-BY-SA 3.0, https://en.wikipedia.org/wiki/File:KnnClassification.svg

Diagramme de Voronoï (1-PPV)



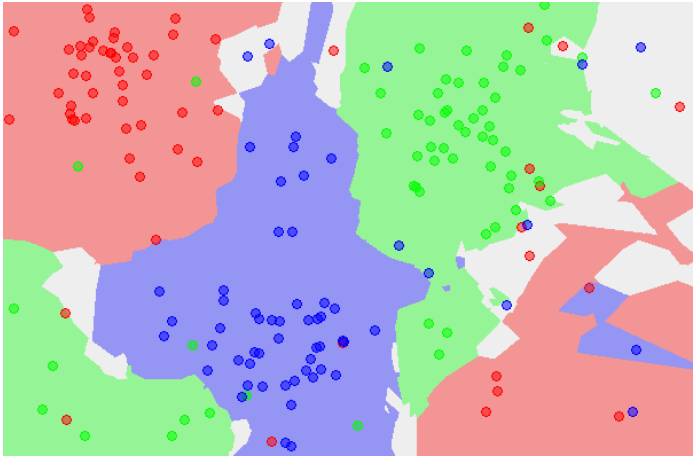
Par Balu.ertl, CC-BY-SA 4.0, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Euclidean_Voronoi_diagram.svg

Régions et frontière pour 1-PPV



Par Agor153, CC-BY-SA 3.0, https://en.wikipedia.org/wiki/File:Map1NN.png

Régions et frontière pour 5-PPV

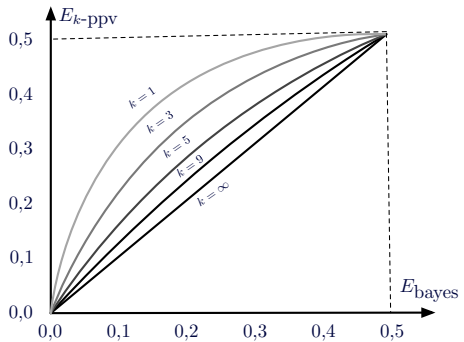


Par Agor153, CC-BY-SA 3.0, https://en.wikipedia.org/wiki/File:Map5NN.png

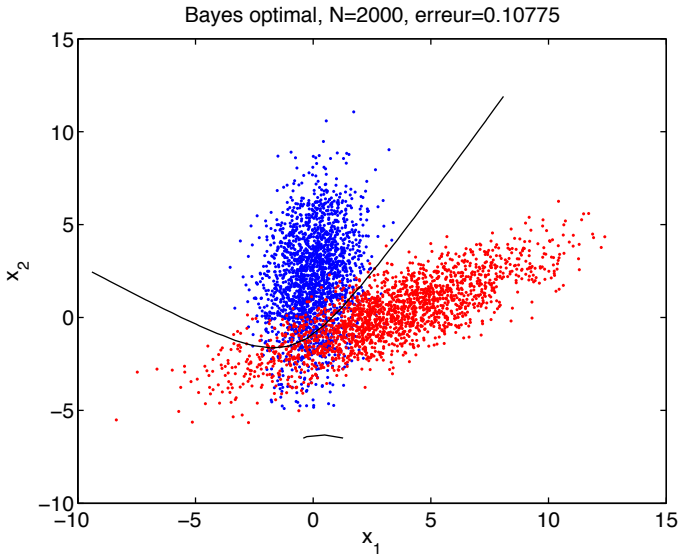
4.4 Notions sur les k-PPV

Bornes du classifieur k-PPV

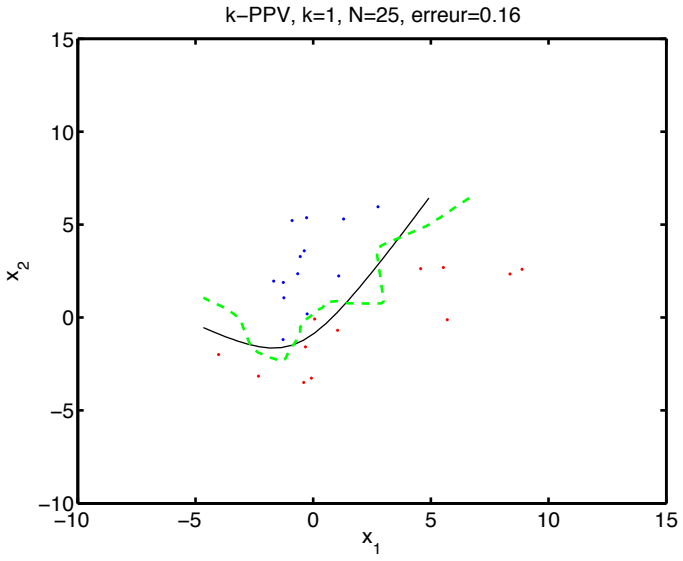
- Taux d'erreur bayésien optimal (E_{bayes})
  - Taux d'erreur lorsqu'on connaît les véritables densités de probabilité par classe
  - Optimal, impossible de faire mieux en généralisation
- Deux bornes sur le taux d'erreur du k-PPV
  - Avec $k = 1$ et $N \to \infty$ alors $E_{1\text{-ppv}} \leq 2E_{\text{bayes}}$
  - Avec $k \to \infty$ et $N \to \infty$ alors $E_{k\text{-ppv}} \to E_{\text{bayes}}$



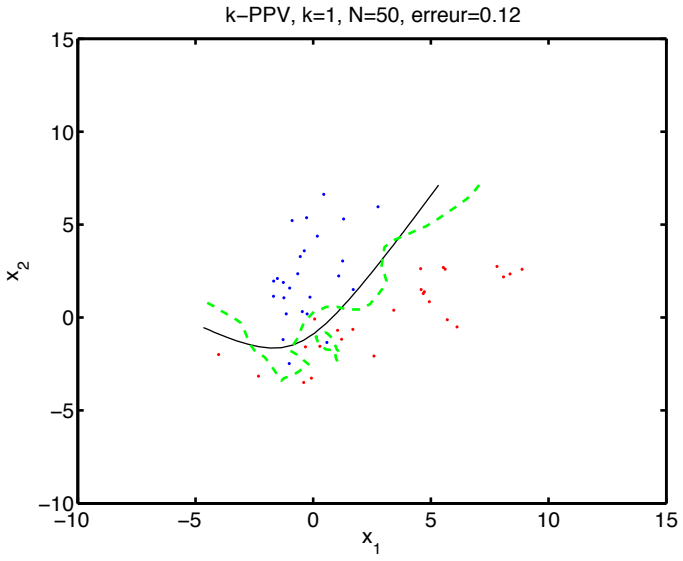
Classement bayésien optimal ($N = 2000$)



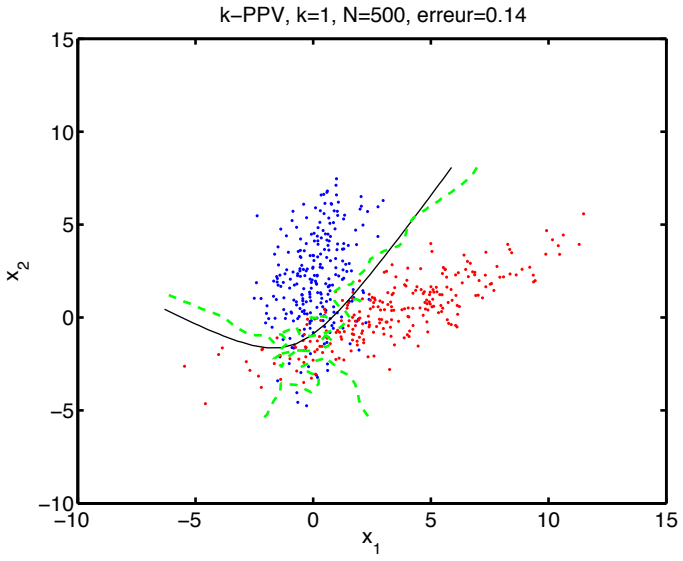
Variation du nombre d'observations, $k = 1$, $N = 25$



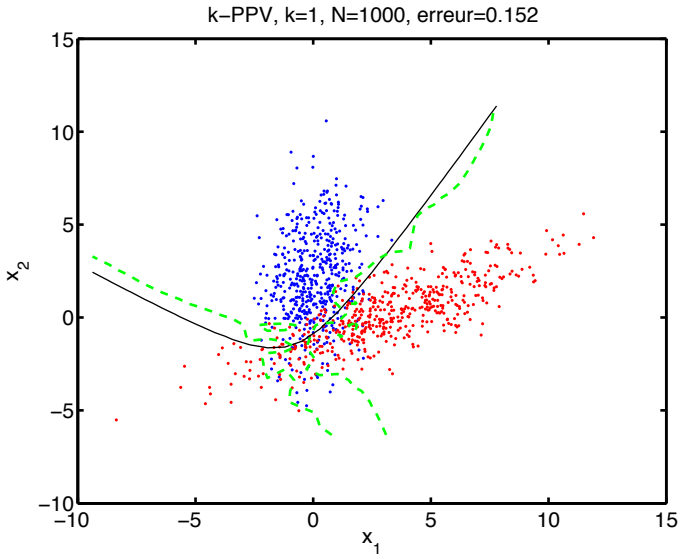
Variation du nombre d'observations, $k = 1$, $N = 50$



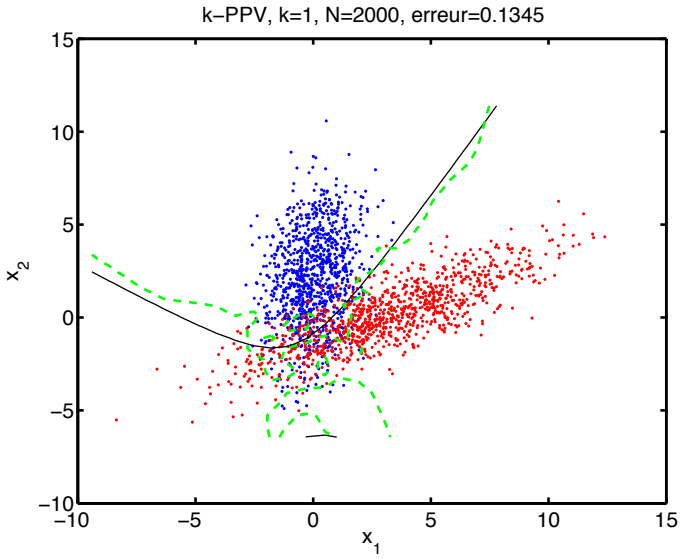
Variation du nombre d'observations, $k = 1$, $N = 500$



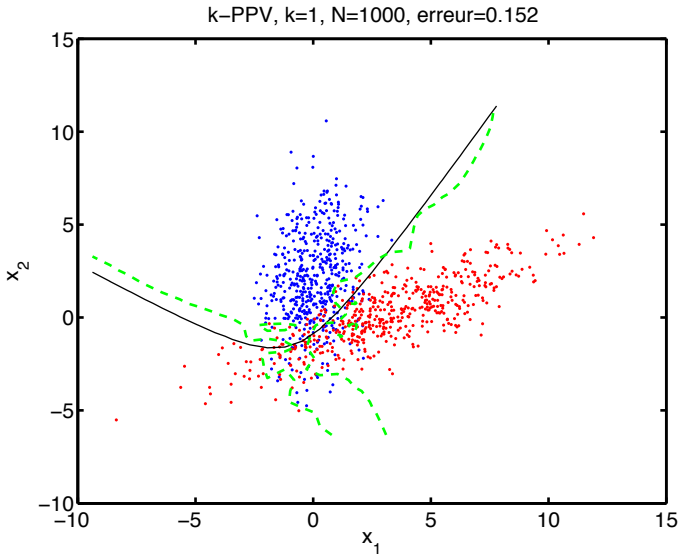
Variation du nombre d'observations, $k = 1$, $N = 1000$



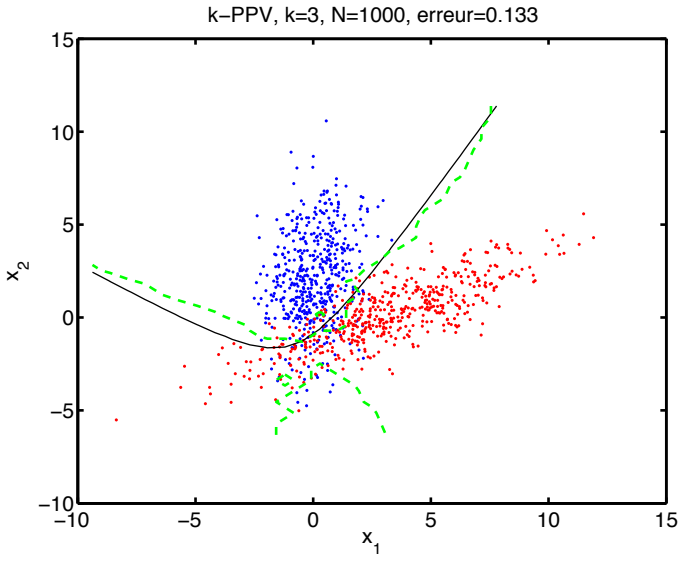
Variation du nombre d'observations, $k = 1$, $N = 2000$



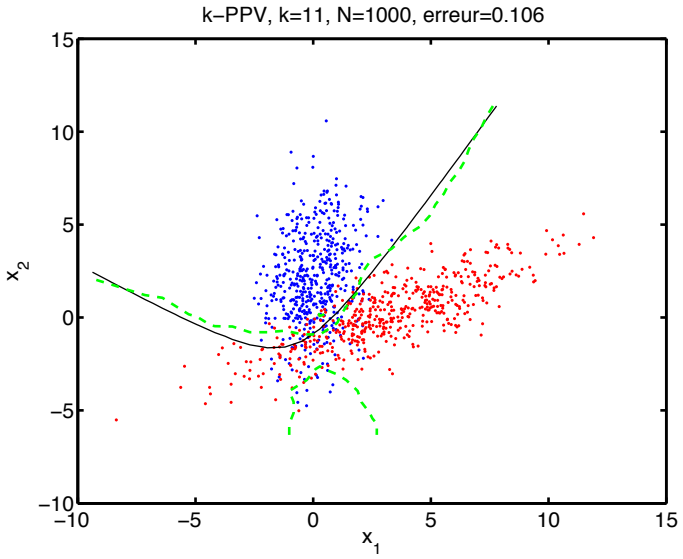
Variation du nombre de voisins, $k = 1$, $N = 1000$



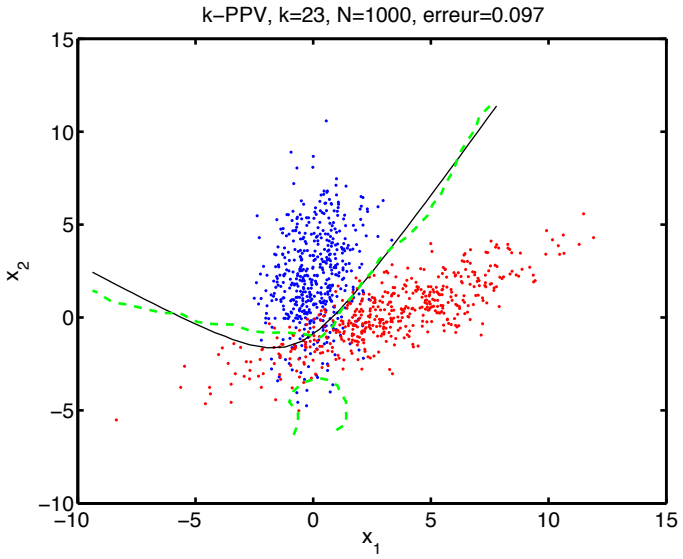
Variation du nombre de voisins, $k = 3$, $N = 1000$



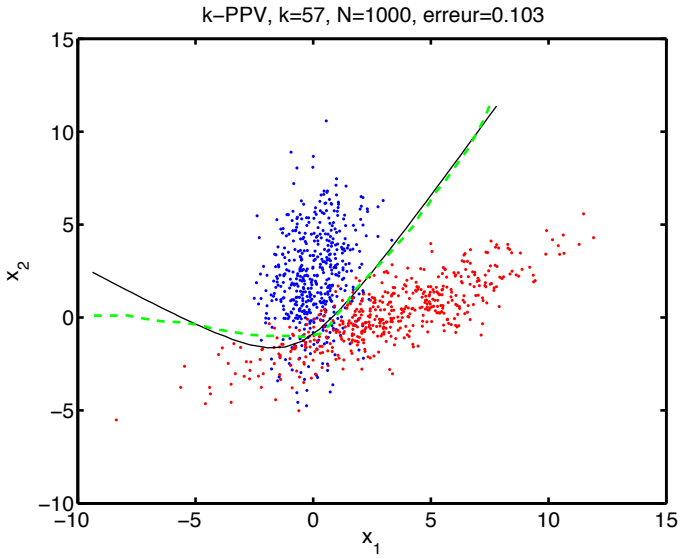
Variation du nombre de voisins, $k = 11$, $N = 1000$



Variation du nombre de voisins, $k = 23$, $N = 1000$



Variation du nombre de voisins, $k = 57$, $N = 1000$



Distances

- La mesure de distance donne la relation de voisinage entre les données
- Définition mathématique d'une métrique $\mathrm{D} : X \times X \mapsto \mathbb{R}$
  - Non-négativité : $\mathrm{D}(\mathbf{x},\mathbf{y}) \geq 0$
  - Réflexivité : $\mathrm{D}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 0$ ssi $\mathbf{x} = \mathbf{y}$
  - Symétrie : $\mathrm{D}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \mathrm{D}(\mathbf{y},\mathbf{x})$
  - Inégalité du triangle : $\mathrm{D}(\mathbf{x},\mathbf{z}) \leq \mathrm{D}(\mathbf{x},\mathbf{y}) + \mathrm{D}(\mathbf{y},\mathbf{z})$
- Différentes mesures de distance possibles
  - Distance euclidienne
  - Distance de Minkowsky
  - Distance de Tanimoto (distance entre ensembles)
  - Distance tangente

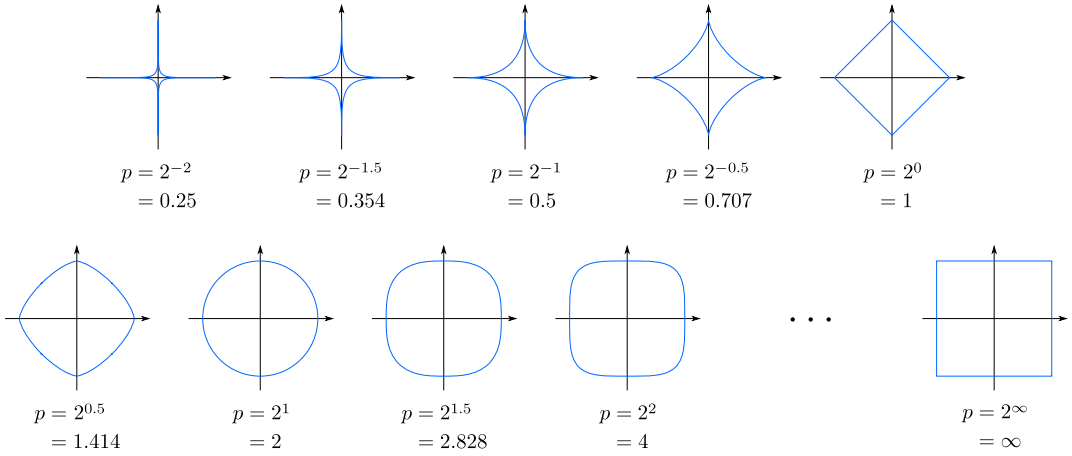
Distance de Minkowsky

- Distance de Minkowsky

$$\mathrm{D}_p(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \left(\sum_{i=1}^{D} |x_i - y_i|^p \right)^{1/p}$$

  - Paramètre p contrôle l'accent sur les dimensions où la magnitude est la plus grande
- Distance de Manhattan ($p = 1$), pondération égale de toutes les dimensions : $\mathrm{D}_1(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{D} |x_i - y_i|$
- Distance D_∞, uniquement la dimension où la différence est de magnitude maximale : $\mathrm{D}_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \max_{i=1}^{D} |x_i - y_i|$
- Distance euclidienne ($p = 2$), compromise dans ces extrêmes : $\mathrm{D}_2(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{D} (x_i - y_i)^2}$

Illustration de la distance de Minkowsky



Par Waldir, CC-BY-SA 3.0, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:2D_unit_balls.svg

Normalisation des données

- Mesure de distance sensible à l'échelle des données selon les différentes dimensions
  - Valeurs selon une dimension où l'échelle est grande relativement aux autres dimensions vont $\ll$ absorber $\gg$ la valeur selon ces dimensions

$$|x_j - y_j| \gg |x_i - y_i|, \forall i \neq j \quad \Rightarrow \quad \mathrm{D}(\mathbf{x},\mathbf{y}) \approx |x_j - y_j|$$

- Normalisation des données nécessaire si les échelles sont différentes selon les dimensions
  - Normalisation selon le sens des données (unités physiques)
  - Normalisation selon valeur max-min de chaque dimension
  - Transformation blanchissante

Évaluation des performances leave-one-out

- Pas d'entraînement nécessaire avec k-PPV
  - Entraînement correspondant à stocker le jeu de données $\mathcal{X}$
- Évaluation des performances de type *leave-one-out*
  - Tirer avantage du coût d'entraînement nul
  - Correspond à la validation croisée à K plis, avec $K = N$

1. Pour chaque donnée $\mathbf{x}^t \in \mathcal{X}$:
   1.1 Calculer les k-PPV de $\mathbf{x}^t$ parmi l'ensemble $\mathcal{X} \backslash \{\mathbf{x}^t\}$
   1.2 Déterminer l'étiquette majoritaire de ces k plus proches voisins comme étiquette de classement de $\mathbf{x}^t$
2. Retourner comme taux d'erreur le ratio entre le nombre de données mal classées dans $\mathcal{X}$ et la taille de $\mathcal{X}$

4.5 Efficacité computationnelle de k-PPV

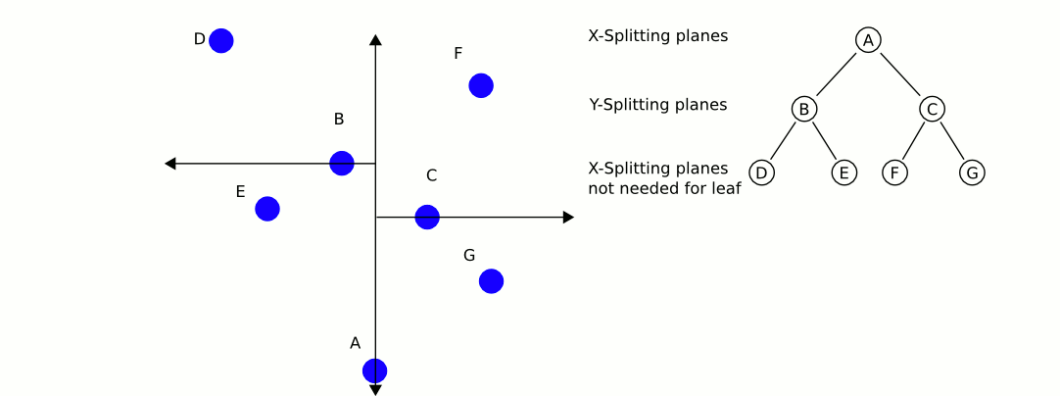
Complexité algorithmique de k-PPV

- Entraînement : stockage des données en mémoire
  - Complexité en temps et en mémoire : $O(N)$
- Traitement des données (test/validation) : obtenir les k voisins
  - Obtenir les k plus proches voisins de $\mathbf{x}$ dans $\mathcal{X}$: complexité en temps $O(N \log N)$ (algorithme naïf)
  - Classer M données : complexité en temps $O(MN \log N)$
- Optimisation des calculs possibles par méthodes plus sophistiquées

KD-Tree

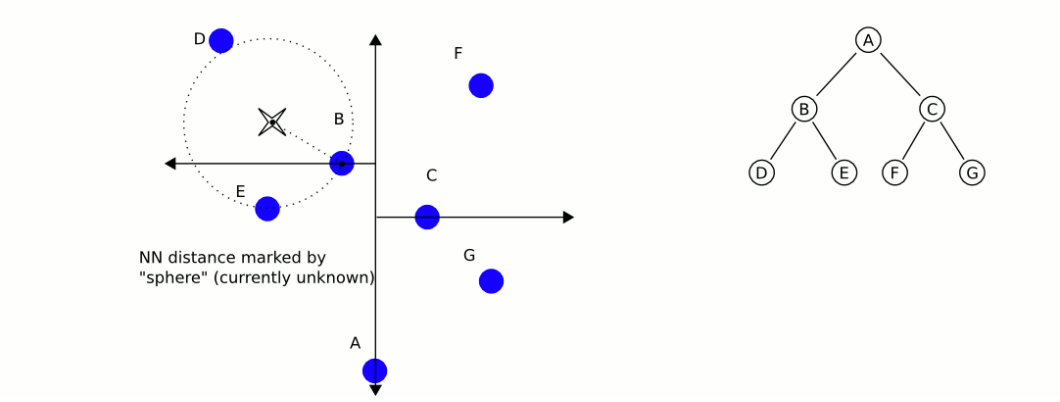
- Structure/topologie des données dans l'espace peut être exploitée pour la recherche des k-PPV
  - Éviter de calculer la distance avec certaines données, qui sont de toute façon trop loin de la donnée à tester
- KD-tree : structure de données en arbre capturant la topologie des données dans un espace euclidien
  - Construction du KD-Tree pour N données : $O(N \log N)$
  - Espace de stockage nécessaire du KD-Tree : $O(N)$
  - Requête des k-PPV d'une donnée dans un KD-Tree
    - $O(N^{\frac{D-1}{D}} + k)$ en D dimensions
    - $O(\sqrt{N} + k)$ en 2D
    - $O(\log N)$ avec $k = 1$
  - Traitement de M données : $O(M(N^{\frac{D-1}{D}} + k))$
- Implémentations efficaces de KD-tree disponibles (ex. CGAL en C++, `scipy.spatial.KDTree` en Python)

Illustration du KD-tree



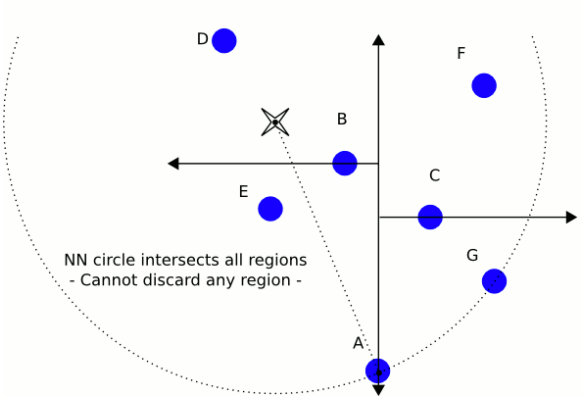
Par User_A1, CC-BY-SA 3.0, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:KDTree-animation.gif

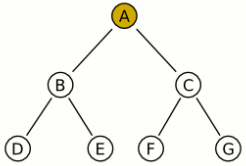
Illustration du KD-tree



Par User_A1, CC-BY-SA 3.0, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:KDTree-animation.gif

Illustration du KD-tree

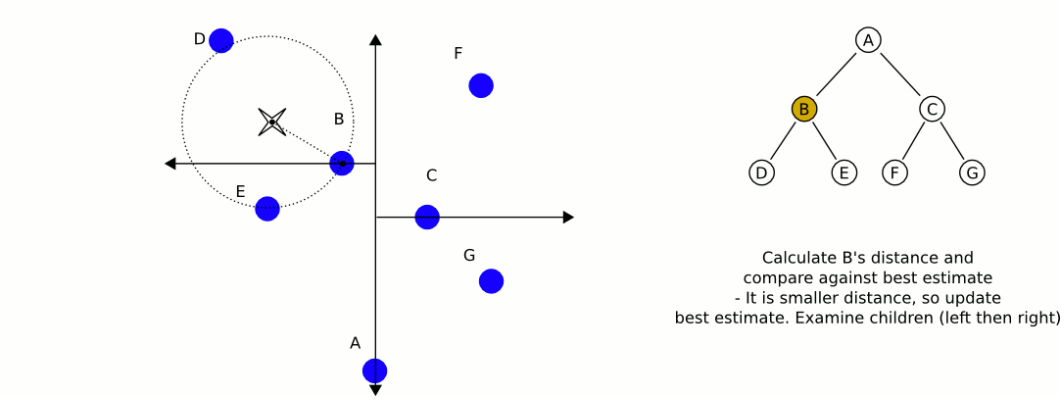




Start at A, then proceed in
depth-first search (maintain
a stack of parent-nodes if using a singly-
linked tree). Set best estimate to A's distance
Then examine left child node

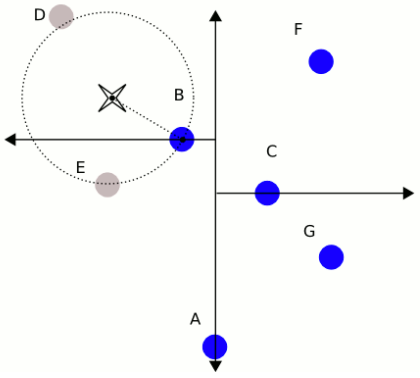
Par User_A1, CC-BY-SA 3.0, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:KDTree-animation.gif

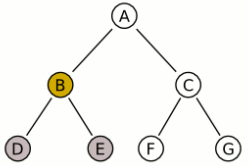
Illustration du KD-tree



Par User_A1, CC-BY-SA 3.0, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:KDTree-animation.gif

Illustration du KD-tree

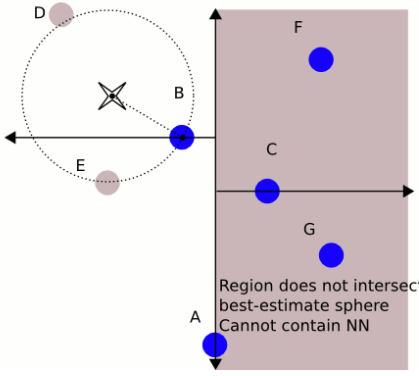


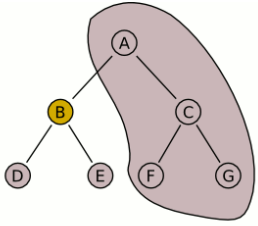


D & E Discarded as B
(already visited) is closer.
B is the best estimate for B's sub-branch
Proceed back to parent node

Par User_A1, CC-BY-SA 3.0, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:KDTree-animation.gif

Illustration du KD-tree





Par User_A1, CC-BY-SA 3.0, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:KDTree-animation.gif

4.6 Sélection de prototypes

Taille de la banque d'entraînement

- Compromis à faire sur la taille de la banque d'entraînement
  - Avec $N \to \infty$, algorithme tend vers des performances optimales
  - Mais avec $N \to \infty$, temps de traitement et besoins en stockage faramineux
- Selon la position, la densité des données peut varier
  - Loin des frontières de décision, la densité des points peut être réduite
  - Données aberrantes ou bruitées dans une région de classe différente pourraient être retirées
- Approximation des frontières de décision par la sélection de quelques *prototypes* représentatifs des données

Condensation de Hart

- Condensation de Hart
  - Objectif : sélectionner seulement des données de $\mathcal{X}$ contribuant au classement
  - Heuristique faisant une construction incrémentale de l'ensemble de prototypes
- Approche suivie
  - Démarrer avec un ensemble quasi vide de prototypes (une donnée choisie au hasard)
  - Ajouter les données seulement si elles sont mal classées selon le PPV
  - Répéter tant qu'il y a des données non sélectionnées mal classées

Condensation de Hart

1. Créer un ensemble de prototypes sélectionnés à partir d'une donnée $\mathbf{x}$ choisie aléatoirement dans $\mathcal{X}$, $\mathcal{Z} = \{\mathbf{x}\}$
2. Tant que l'ensemble $\mathcal{Z}$ est modifié relativement à l'itération précédente :
   2.1 Pour chaque donnée $\mathbf{x}^t \in \mathcal{X}$, traitée dans un ordre aléatoire :
      2.1.1 Déterminer le plus proche voisin de $\mathbf{x}^t$ dans $\mathcal{Z}$

$$\mathbf{x}' = \underset{\mathbf{x} \in \mathcal{Z}}{\operatorname{argmin}} \|\mathbf{x}^t - \mathbf{x}\|$$

      2.1.2 Si l'étiquette de classe de $\mathbf{x}'$ ne correspond pas à celle de $\mathbf{x}^t$ ($r' \neq r^t$), alors sélectionner la donnée comme prototype, $\mathcal{Z} = \mathcal{Z} + \{\mathbf{x}^t\}$
3. Retourner l'ensemble $\mathcal{Z}$ comme les prototypes sélectionnés dans $\mathcal{X}$

Édition de Wilson

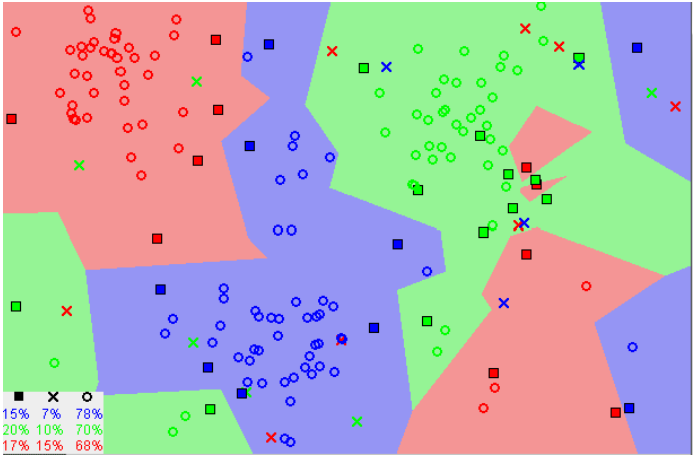
- Édition de Wilson
  - Heuristique pour retirer les données mal classées de $\mathcal{X}$ selon *leave-one-out*
  - Permet d'éliminer les données que l'on croit aberrantes ou bruitées

1. Créer l'ensemble de prototypes $\mathcal{Z}$ à partir de toutes les données, $\mathcal{Z} = \mathcal{X}$
2. Pour chaque donnée $\mathbf{x}^t \in \mathcal{Z}$, traitée dans un ordre aléatoire :
   2.1 Déterminer $\mathcal{V}$, soit les k-PPV de $\mathbf{x}^t$ dans $\mathcal{Z} \backslash \{\mathbf{x}^t\}$
   2.2 Établir l'étiquette de classement $r^t_{\mathcal{V}}$ de $\mathbf{x}^t$ selon l'étiquette majoritaire des données dans $\mathcal{V}$
   2.3 Si l'étiquette $r^t_{\mathcal{V}}$ est différent de l'étiquette r^t de $\mathbf{x}^t$, alors retirer la donnée de $\mathcal{Z}$, $\mathcal{Z} = \mathcal{Z} \backslash \{\mathbf{x}^t\}$
3. Retourner l'ensemble $\mathcal{Z}$ comme les prototypes sélectionnés dans $\mathcal{X}$

Autres approches pour générer des prototypes

- Sélection agressive de prototypes : édition de Wilson suivie d'une condensation de Hart
  - Filtrer $\mathcal{X}$ en éliminant d'abord les données aberrantes ou bruitées (édition de Wilson)
  - Sélectionner seulement les données contribuant au classement (condensation de Hart)
- Construction de prototypes
  - Déterminer des prototypes qui ne sont pas des données dans $\mathcal{X}$
  - Approche possible (non supervisé) : K-means de $\mathcal{X}$ avec valeur de K élevée

Illustration de Wilson + Hart



Par Agor153, CC-BY-SA 3.0, https://en.wikipedia.org/wiki/File:Map1NNReducedDataSet.png

× : données retirée par Wilson ($k = 3$) □ : prototypes sélectionné par Hart ; ○ : données retirées par Hart

4.7 Méthodes non paramétriques dans scikit-learn

Scikit-learn : estimation de densités

- `neighbors.KernelDensity` : estimation par noyau de densités
  - Paramètres
    - `bandwidth` (float) : largeur du noyau
    - `algorithm` (string) : algorithme de voisinage à utiliser, peut être `'kd_tree'`, `'ball_tree'` ou `'auto'` (défaut : `'auto'`)
    - `kernel` (string) : noyau utilisé, peut être `'gaussian'`, `'tophat'`, `'epanechnikov'`, `'exponential'`, `'linear'` ou `'cosine'` (défaut : `'gaussian'`)
  - Méthodes
    - `fit(X)` : apprendre la densité sur les données
    - `sample(n_samples=1)` : génère des échantillons de la distribution (seulement pour noyaux gaussien et tophat)
    - `score(X)` : retourne la log-vraisemblance des données
    - `score_samples(X)` : retourne la densité des données

Scikit-learn : k-plus proches voisins

- `neighbors.KNeighborsClassifier` : classement par les k-plus proches voisins
  - Paramètres
    - `n_neighbors` (int) : nombre de voisins utilisés (défaut : 5)
    - `algorithm` (string) : algorithme de voisinage à utiliser, peut être `'kd_tree'`, `'ball_tree'`, `'brute'` ou `'auto'` (défaut : `'auto'`)
    - `metric` (string ou objet `neighbors.DistanceMetric`) : métrique de distance utilisée. Par défaut `'minkowski'` avec $p = 2$, qui revient à une distance euclidienne. Pour autres métriques, voir documentation de `neighbors.DistanceMetric`.
    - `p` (int) : valeur de p pour la distance de Minkowski (défaut : 2)
  - Méthodes
    - `fit(X,y)` : apprendre modèle de classement sur les données
    - `kneighbors(X, n_neighbors)` : retourne les k-plus proches voisins aux données
    - `predict(X)` : fait le classement des données
- `neighbors.KNeighborsRegressor` : régression par les k-plus proches voisins