Algorithme des *k*-moyennes

Quentin Fortier

November 28, 2023

Classification supervisée/non supervisée

Définition

Un algorithme de classification est un algorithme qui permet d'associer à chaque donnée une classe (une espèce de fleur, un chiffre...)

Classification supervisée/non supervisée

Définition

Un algorithme de classification est un algorithme qui permet d'associer à chaque donnée une classe (une espèce de fleur, un chiffre...)

Définition

On distingue deux types d'algorithmes de classification :

Classification supervisée : on connaît les classes de certaines données (données d'entraînement) qui permettent de prédire la classe d'une nouvelle donnée.

Exemple: algo. des plus proches voisins

Classification supervisée/non supervisée

Définition

Un algorithme de classification est un algorithme qui permet d'associer à chaque donnée une classe (une espèce de fleur, un chiffre...)

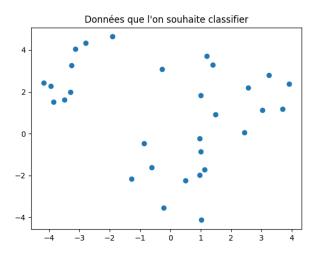
Définition

On distingue deux types d'algorithmes de classification :

- Classification supervisée : on connaît les classes de certaines données (données d'entraînement) qui permettent de prédire la classe d'une nouvelle donnée.
 - Exemple: algo. des plus proches voisins
- Classification non supervisée : aucune classe n'est connue (pas de données d'entraînement).

Exemple: algo. des k-moyennes

Exemple : il semble y avoir k=3 classes de données parmi ces points.



Définition

Le **centre** (ou : **isobarycentre**) d'un ensemble de vecteurs x_1, \ldots, x_n est le vecteur

$$\overline{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$$

<u>Définition</u>

Le **centre** (ou : **isobarycentre**) d'un ensemble de vecteurs x_1, \ldots, x_n est le vecteur

$$\overline{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$$

Question

Écrire une fonction centre(X) renvoyant le centre de la liste de vecteurs X.

Dans tout le cours, on note d la distance euclidienne.

Définition

La variance (ou : moment d'inertie) V(X) d'un ensemble de vecteur X est définie par

$$V(X) = \sum_{x \in X} d(x, \overline{X})^2$$

La variance mesure la variation par rapport à la moyenne : plus V(X) est petit, plus les vecteurs de X sont proches du barycentre \overline{X} .

Soit X un ensemble de données et un entier k.

Objectif

On veut trouver un partitionnement (clustering) de X en k sous-ensembles X_1,\ldots,X_k (classes ou clusters) minimisant l'inertie I:

$$I = \sum_{i=1}^{k} V(X_i)$$

Soit X un ensemble de données et un entier k.

Objectif

On veut trouver un partitionnement (clustering) de X en k sous-ensembles X_1, \ldots, X_k (classes ou clusters) minimisant l'inertie I:

$$I = \sum_{i=1}^{k} V(X_i)$$

Dit autrement : on veut associer à chaque donnée x une classe k telle que l'inertie I soit minimum.

Soit X un ensemble de données et un entier k.

Objectif

On veut trouver un partitionnement (clustering) de X en k sous-ensembles X_1,\ldots,X_k (classes ou clusters) minimisant l'**inertie** I:

$$I = \sum_{i=1}^{k} V(X_i)$$

Dit autrement : on veut associer à chaque donnée x une classe k telle que l'inertie I soit minimum.

Plus l'inertie est petite, plus les données sont proches du centre de leur classe et plus le partitionnement est bon.

Algorithme des k-moyennes (k-means)

Objectif: partitionnner X en classes X_1 , ..., X_k .

• Soit $c_1, ..., c_k$ des vecteurs choisis aléatoirement.

Algorithme des k-moyennes (k-means)

Objectif: partitionnner X en classes X_1 , ..., X_k .

- Soit $c_1, ..., c_k$ des vecteurs choisis aléatoirement.
- ② Associer chaque donnée x à la classe X_i telle que $d(x,c_i)$ soit minimale.

Algorithme des k-moyennes (k-means)

Objectif: partitionnner X en classes X_1 , ..., X_k .

- **①** Soit $c_1, ..., c_k$ des vecteurs choisis aléatoirement.
- ② Associer chaque donnée x à la classe X_i telle que $d(x,c_i)$ soit minimale.
- **3** Recalculer les centres des classes $c_i = \overline{X_i}$.

Algorithme des k-moyennes (k-means)

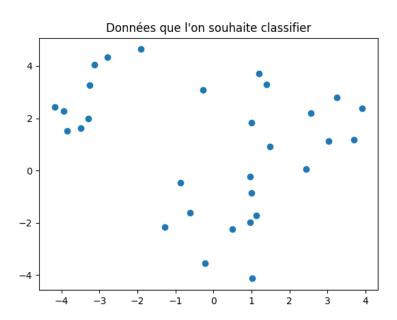
Objectif: partitionnner X en classes X_1 , ..., X_k .

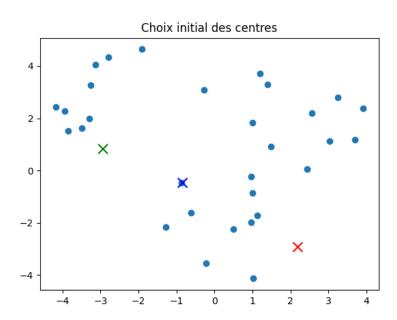
- **9** Soit $c_1, ..., c_k$ des vecteurs choisis aléatoirement.
- ② Associer chaque donnée x à la classe X_i telle que $d(x,c_i)$ soit minimale.
- **3** Recalculer les centres des classes $c_i = \overline{X_i}$.
- Si les centres ont changé, revenir à l'étape 2.

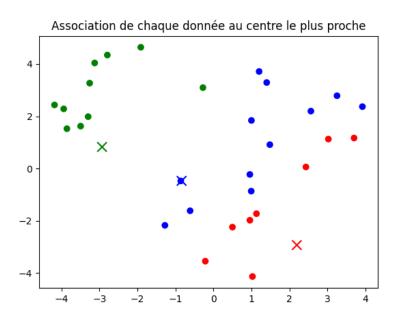
Algorithme des k-moyennes (k-means)

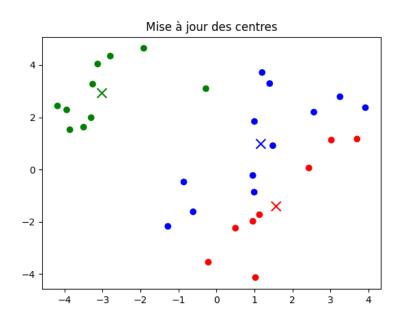
Objectif: partitionnner X en classes X_1 , ..., X_k .

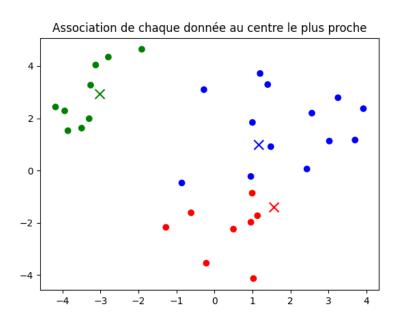
- **9** Soit $c_1, ..., c_k$ des vecteurs choisis aléatoirement.
- ② Associer chaque donnée x à la classe X_i telle que $d(x,c_i)$ soit minimale.
- **3** Recalculer les centres des classes $c_i = \overline{X_i}$.
- Si les centres ont changé, revenir à l'étape 2.

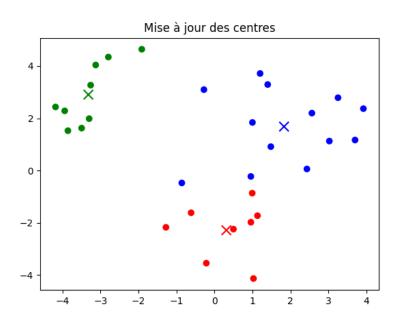


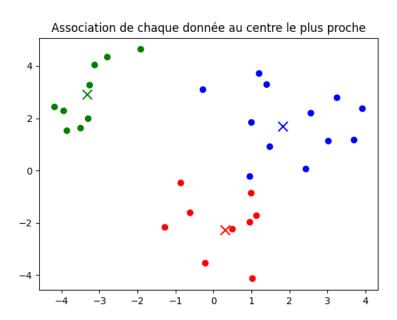


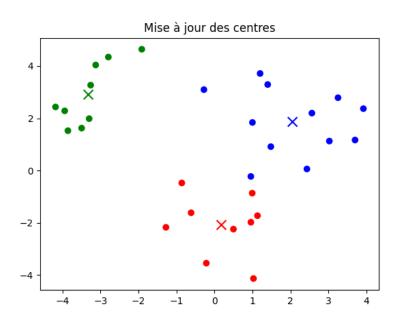


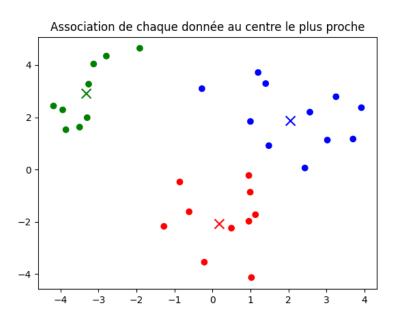


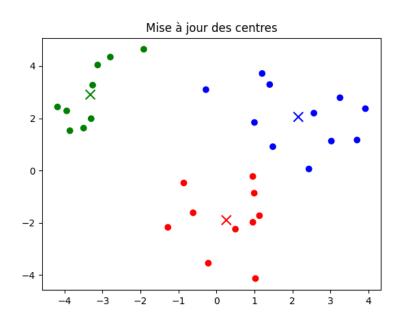


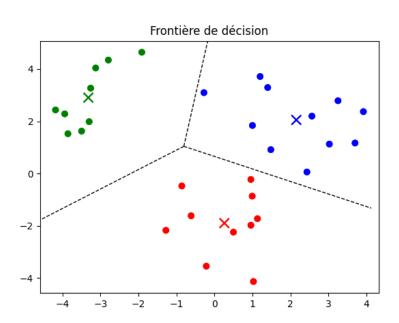












Théorème (HP)

L'algorithme des k-moyennes termine (pas de boucle infinie).

Preuve:

Théorème (HP)

L'algorithme des k-moyennes termine (pas de boucle infinie).

Preuve:

On montre que I est un variant de boucle : I décroît strictement à chaque itération et ne peut prendre qu'un nombre fini de valeurs, donc le nombre d'itérations est fini.

Théorème (HP)

L'algorithme des k-moyennes termine (pas de boucle infinie).

Preuve:

On montre que I est un variant de boucle : I décroît strictement à chaque itération et ne peut prendre qu'un nombre fini de valeurs, donc le nombre d'itérations est fini.

- Il existe un nombre fini de partitions de X en k classes, donc l'inertie I peut prendre qu'un nombre fini de valeurs.
- ullet Il suffit donc de montrer que I décroît strictement à chaque itération.

Preuve (suite):

Il suffit donc de montrer que ${\it I}$ décroît strictement à chaque itération :

• Réassigner x de X_i à X_j si $d(x, c_i) > d(x, c_j)$ fait diminuer I.

Preuve (suite):

Il suffit donc de montrer que I décroît strictement à chaque itération :

- Réassigner x de X_i à X_j si $d(x, c_i) > d(x, c_j)$ fait diminuer I.
- Recalculer les centres des classes fait diminuer I, d'après le lemme suivant :

Lemme

Si X est un ensemble de vecteurs alors $f:y\mapsto \sum_{x\in X}d(x,y)^2$ est minimum pour $y=\overline{X}$.

On utilise une liste classes de taille k telle que classes[i] est la liste des données de X associées à la classe i.

Question

Écrire une fonction calculer_centres(classes) renvoyant la liste des centres de chaque classe.

Question

Écrire une fonction plus_proche(x, centres) renvoyant l'indice i de la classe la plus proche de x parmi centres.

Question

Écrire une fonction calculer_classes(X, centres) renvoyant une liste classes telle que classes[i] soit la liste des données de X dont le centre le plus proche est centres[i].

Question

Écrire une fonction kmeans(X, centres) appliquant l'algorithme des k-moyennes à X en partant des centres et renvoyant la liste des classes obtenues.

Algorithme des k-moyennes : Choix des centres initiaux

L'inertie du clustering obtenu à la fin de l'algorithme dépend des centres initiaux.

Il y a plusieurs façons de les choisir :

- Aléatoirement dans l'espace.
- Aléatoirement parmi les données.
- Lancer l'algorithme plusieurs fois avec des centres initiaux différents et conserver la meilleure solution (celle d'inertie minimum).
- Heuristiques : farthest heuristic, k-means++...

Algorithme des k-moyennes : Choix des centres initiaux

Un choix heuristique (farthest heuristic) pour les centres initiaux :

Exercice

Écrire une fonction heuristique_centres(X, k) renvoyant une liste de k centres tels que :

- Le premier centre est choisi aléatoirement parmi X.
- Chaque autre centre est le point de X le plus éloigné des centres déjà choisis.

Question

Comment choisir le nombre k de classes ?

Question

Comment choisir le nombre k de classes ?

On peut calculer l'inertie obtenue pour différentes valeurs de k.

Question

Comment choisir le nombre k de classes ?

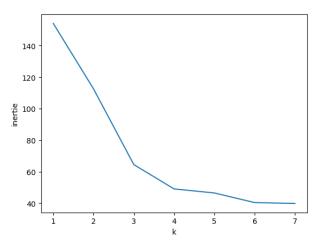
On peut calculer l'inertie obtenue pour différentes valeurs de k. Cependant, plus k est grand, plus l'inertie diminue jusqu'à valoir 0 si k est égal au nombre de données (ce qui n'a aucun intérêt.

Question

Comment choisir le nombre k de classes ?

On peut calculer l'inertie obtenue pour différentes valeurs de k. Cependant, plus k est grand, plus l'inertie diminue jusqu'à valoir 0 si k est égal au nombre de données (ce qui n'a aucun intérêt. On choisit donc la plus grande valeur de k pour laquelle l'inertie diminue de facon significative.

 $\frac{\text{M\'ethode du coude } \textit{(elbow method)}}{\text{de } k \text{ pour laquelle l'inertie diminue de façon significative (ci-dessous : 3 ou 4)}.$



Algorithme des k-moyennes : Non optimalité

L'algorithme des k-moyennes converge toujours, mais pas forcément vers un minimum global de l'inertie (seulement vers un minimum local).

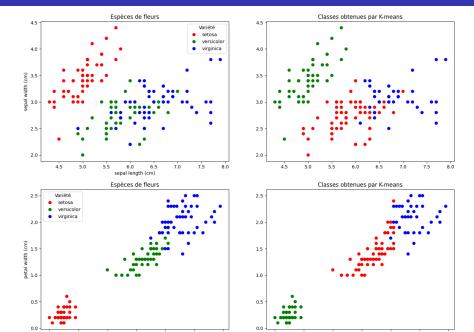
Question

Donner un exemple d'exécution de l'algorithme des k-moyennes qui ne donne pas un clustering d'inertie optimale.

Algorithme des k-moyennes : Classification de nouvelles données

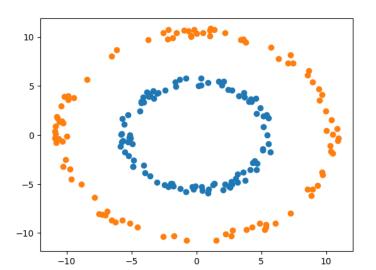
On peut utiliser l'algorithme des k-moyennes pour classifier une nouvelle donnée x : on associe x à la classe dont le centre est le plus proche de x.

Algorithme des k-moyennes : Application aux iris



Algorithme des k-moyennes : Limites

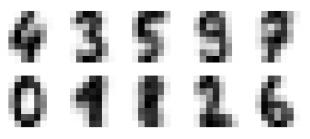
L'algorithme des k-moyennes ne marche que sur des données linéairement séparables (pouvant être séparées par un hyperplan).



Algorithme des k-moyennes : Interprétations

Les centres obtenus à la fin de l'algorithme donnent des informations sur les constituants des classes.

Voici par exemple les centres obtenus avec $k=10\ \mathrm{sur}$ des chiffres manuscrits :



Algorithme des k-moyennes : Interprétations

Il est également intéressant de regarder l'équation des frontières de décision, pour savoir quels sont les attributs qui permettent de discriminer les données.

Si par exemple l'équation de la frontière de décision entre les classes 1 et 2 est ax+by=0 avec $a\gg b$, alors l'attribut x est plus discriminant que y pour pouvoir distinguer les classes 1 et 2.

Une image est souvent représentée par une matrice dont chaque élément (pixel) est un triplet de valeurs entre 0 et 255 (rouge, vert, bleu).

Une image est souvent représentée par une matrice dont chaque élément (pixel) est un triplet de valeurs entre 0 et 255 (rouge, vert, bleu).

Question

Combien y a t-il de couleurs différentes possibles ?

Une image est souvent représentée par une matrice dont chaque élément (pixel) est un triplet de valeurs entre 0 et 255 (rouge, vert, bleu).

Question

Combien y a t-il de couleurs différentes possibles ?

Question

Écrire une fonction nombre_couleurs(img) qui renvoie le nombre de couleurs différentes présentes dans l'image img.

On peut souhaiter limiter le nombre de couleurs différentes :

- Sur un écran avec un nombre plus limité de couleurs (console...)
- Pour diminuer la taille de l'image : si on utilise k couleurs, on peut utiliser stocker un entier entre 1 et k pour chaque pixel au lieu de trois entiers entre 0 et 255.

On applique l'algorithme des k-moyennes sur les pixels pour obtenir k couleurs différentes (ici k=8) et on remplace chaque pixel par la couleur la plus proche.



