Statistique en grande dimension - partie non supervisée

Laurent Rouvière

30 novembre 2022

Table des matières

Présentation

Définition

Action de *répartir en classes*, en catégories, des choses, des objets, ayant des caractères communs afin notamment d'en faciliter l'étude.

Nombreuses applications

- Astronomie : classification d'étoiles
- Médecine : diagnostic de maladies à partir d'observation cliniques
- Géographie : délimitation de zones homogènes

- Marketing : détermination de segments de marchés (groupes de consommateurs ayant les mêmes habitudes)
- Réseaux sociaux : extraction de communautés
- ...

Documents/supports

MOOC de François Husson

- disponible ici https://husson.github.io/MOOC_AnaDo/classif.html
- vidéos - Quiz - Supports

Objectifs divers

- Beaucoup de groupes avec peu d'individus à l'intérieur (réduire n)
- Peu de groupes avec beaucoup d'individus à l'intérieur (extraire des profils que l'on interprète par la suite).

Conséquence

Les algorithmes seront proches mais pas calibrés de la même façon.

Modélisation statistique

- n observations $x_1, \ldots, x_n$ à valeurs dans $\mathbb{R}^d$.

Le problème

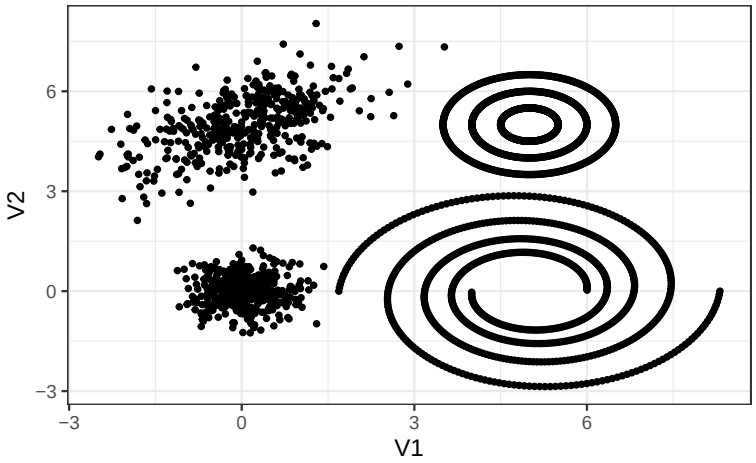
Trouver une partition de $\{x_1, \ldots, x_n\}$: on cherche donc $\mathcal{C}_1, \ldots, \mathcal{C}_K$ tels que

$$\bigcup_{k=1}^{K} \mathcal{C}_k = \{x_1, \ldots, x_n\} \quad \text{et} \quad \mathcal{C}_k \cap \mathcal{C}_{k'} = \emptyset \quad \text{si} \quad k \neq k'.$$

Chaque élément de la partition $\mathcal{C}_k$ est appelé cluster.

- Notions de ressemblance, *similarité*, *hiérarchie*.
- Choix du *nombre de classes* K.

Un exemple jouet



4 types d'algorithmes

1. Méthodes de *partitionnement* (k-means)
2. Méthodes *hiérarchiques* (CAH)
3. Algorithmes basés sur les *densités* (DBSCAN)
4. Approches basées sur les *graphes* (clustering spectral)

1 Partitionnement : les k-means

Le critère des k-means

- *Idée* : Définir les clusters $\mathcal{C}_k$ à partir de représentants c_k.
- Nombre de groupes K *fixé*.

Le critère des k-means

On cherche la partition $\mathcal{C}$ et les représentants c qui minimise le critère

$$g(\mathcal{C}, c) = \sum_{k=1}^{K} \sum_{i \in \mathcal{C}_k} \|x_i - c_k\|^2.$$

- **Impossible** de trouver $(\mathcal{C}^\star, c^\star)$ qui minimise $g(\mathcal{C}, c)$.

Équivalences

1. Quand on *fixe une partition* $\mathcal{C}^*$, les meilleurs représentants [2] sont les moyennes $\widehat{c} = (\bar{x}_{\mathcal{C}_1}, \ldots, \bar{x}_{\mathcal{C}_K})$

$$\forall c \quad g(\mathcal{C}^*, c) \geq g(\mathcal{C}^*, \widehat{c})$$

2. Quand on *fixe des représentants* c, la meilleure partition $\widehat{\mathcal{C}} = \{\widehat{\mathcal{C}}_1, \ldots, \widehat{\mathcal{C}}_K\}$ est celle de la distance minimale (partition de Voronoi) définie par

$$\widehat{\mathcal{C}}_k = \{i \in \{1, \ldots, n\} \text{ tels que } \|x_i - c_k\|^2 = \min_j \|x_i - c_j\|^2\}$$

Elle réalise le minimum à représentants fixés:

$$\forall \mathcal{C} \quad g(\mathcal{C}, c) \geq g(\widehat{\mathcal{C}}, c)$$

Idée

Construire les centres et la partition de manière *récursive*.

Comment ?

En utilisant un algorithme :

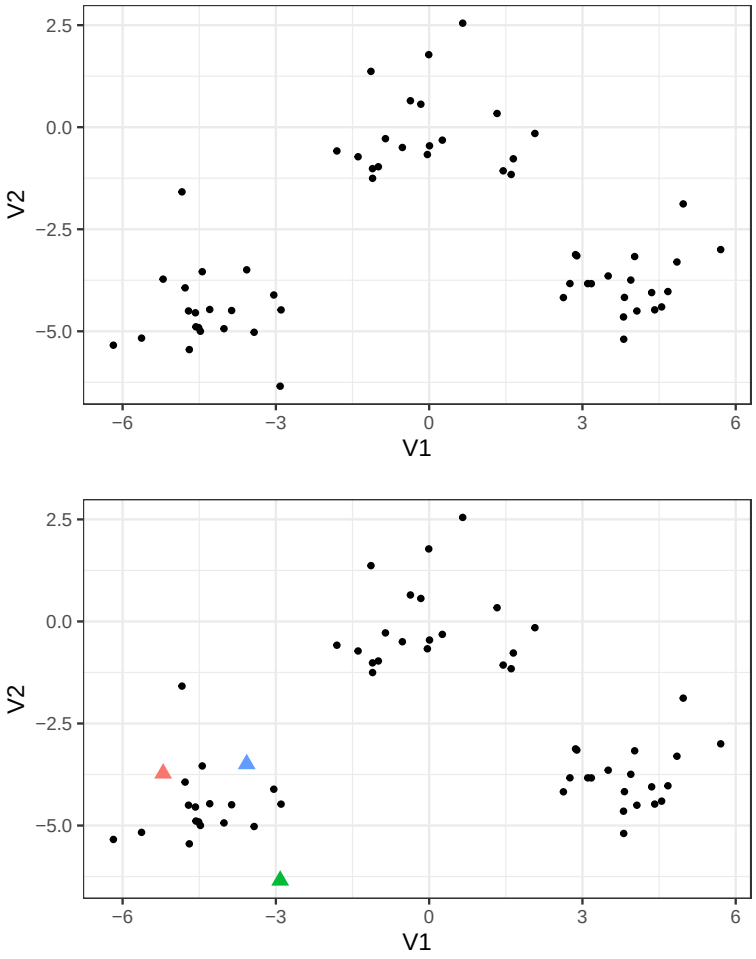
- Lloyd [7]
- Forgy [4]
- MacQueen [9]
- Hartigan et Wong [5]

on pourra consulter https://towardsdatascience.com/three-versions-of-k-means-cf939b65f4ea.

Lloyd [7]

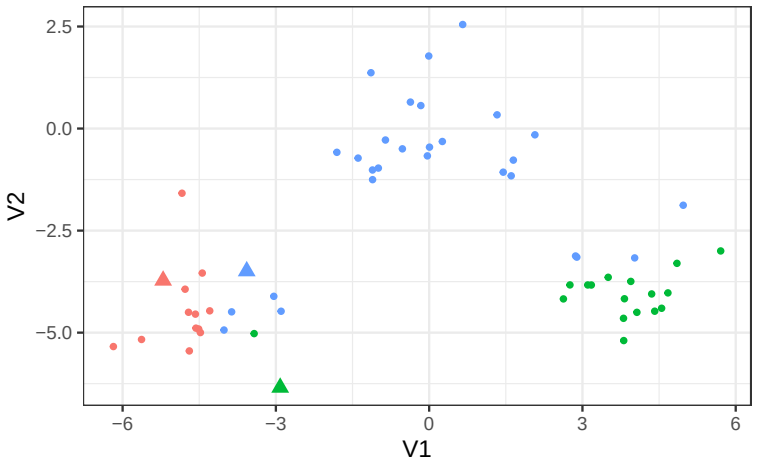
1. **Initialisation** : choix de k points au hasard comme centroïde.
2. **Affectation** de chaque observation au centroïde le plus proche.
3. **Mise à jour** des centroïdes.

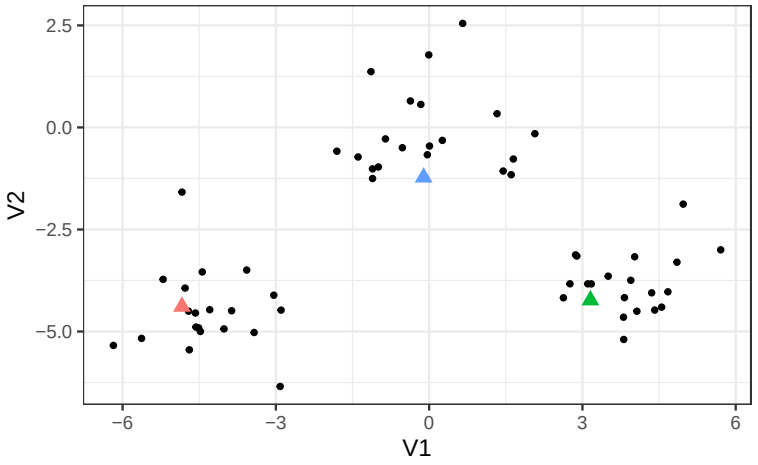
Exemple

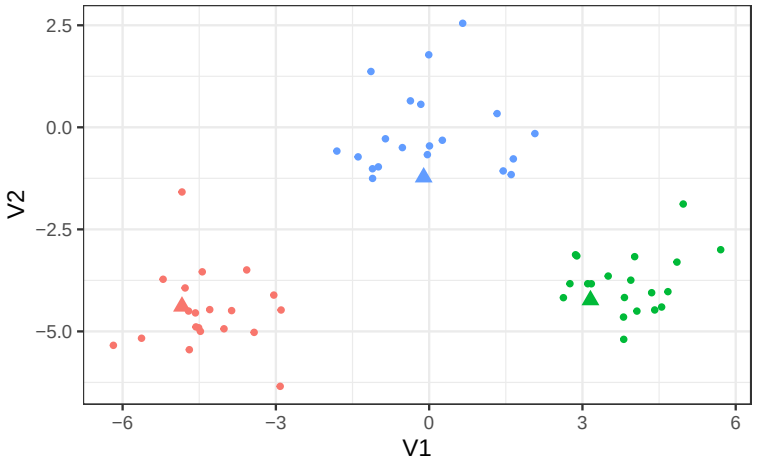


Hartigan et Wong [5]

1. **Initialisation** : choix de K points au hasard comme centroïde


2.5
0.0
−2.5
−5.0
V2
−6
−3
0
3
6
V1


2.5
0.0
−2.5
−5.0
V2
−6
−3
0
3
6
V1


2.5
0.0
−2.5
−5.0
V2
−6
−3
0
3
6
V1

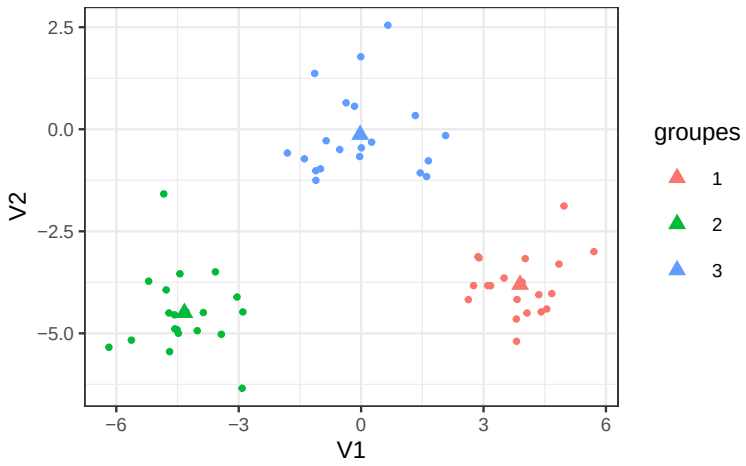
2. Pour $i = 1, \ldots, n$
    a. Pour $k = 1, \ldots, K$
        - Affecter x_i à c_k
        - calculer $\alpha_k = \sum_{i=1}^{n} \|x_i - c_{k,i}\|^2$
    b. Affecter x_i au centroïde qui minimise α_k
    c. Mettre à jour les centroïdes
3. Répéter 2 jusqu'à convergence

Remarque

Généralement recommandé avec *plusieurs initialisations*.

Le coin R

```
> res <- kmeans(tbl[,2:3],centers = 3,
+               algorithm = "Hartigan-Wong",nstart=100)
> centres <- res$centers |> as_tibble() |> mutate(groupes=as.factor(1:3))
> tbl |> mutate(groupes=as.factor(res$cluster)) |> ggplot()+
+   aes(x=V1,y=V2,color=groupes)+geom_point() +
+   geom_point(data=centres,shape=17,size=2)
```



Bilan

Avantages

- Facile à mettre en œuvre
- Faible complexité $O(n)$

Inconvénients

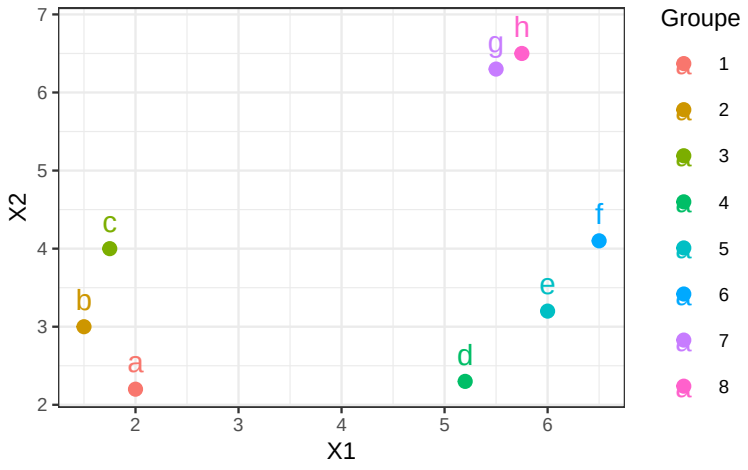
- Clusters “sphériques”.
- Choix de k.
- Choix de la distance (grande dimension ?).

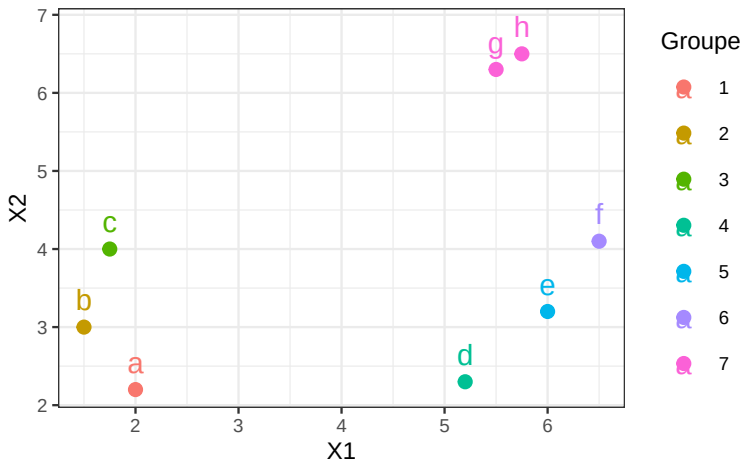
2 Méthodes hiérarchiques

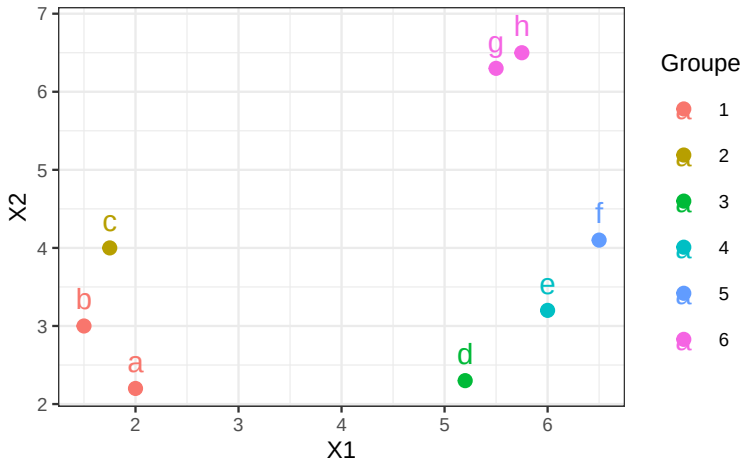
Objectif

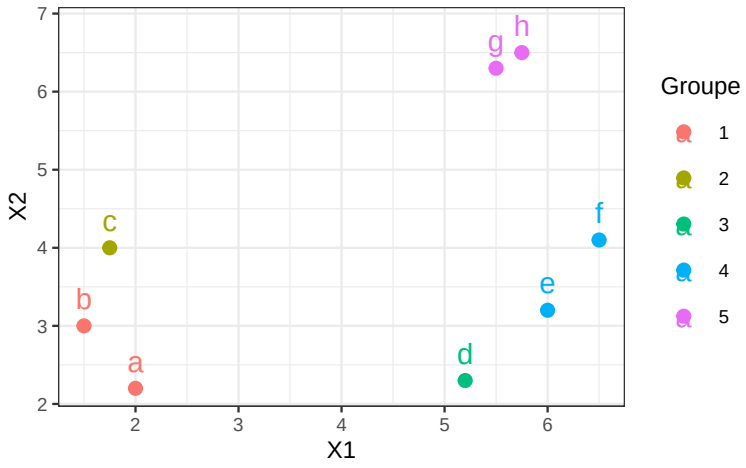
Créer une suite de partitions emboitées en partant de la partition la plus fine (n classes) jusqu'à obtenir une seule classe.

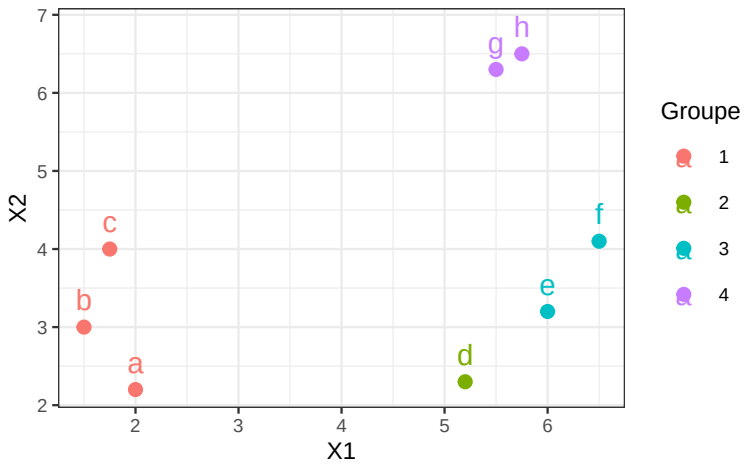
Le processus hiérarchique

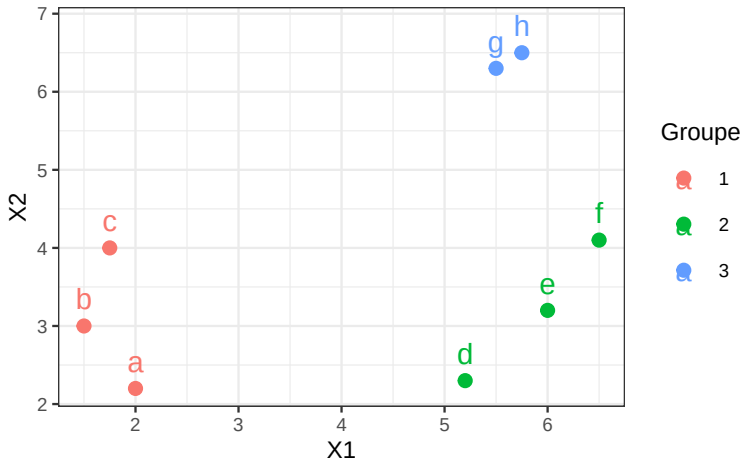


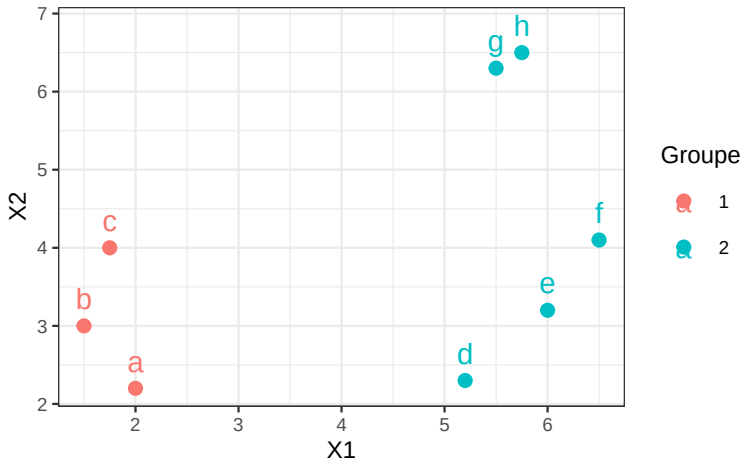

X2
X1
Groupe
1
2
3
4
5
6
7
a
b
c
d
e
f
g
h

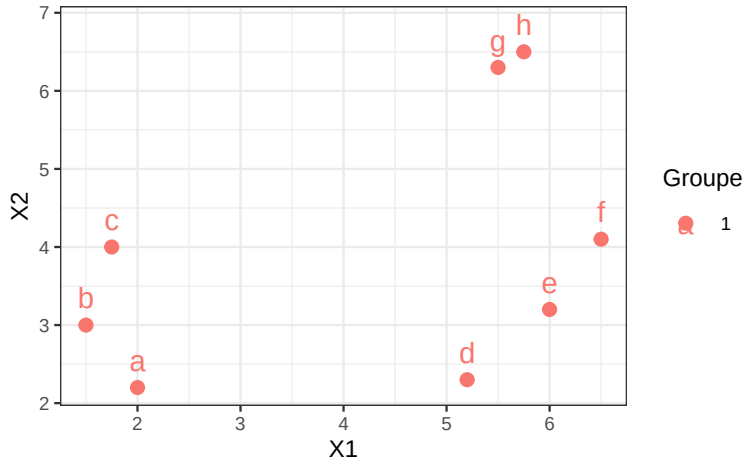

X2
X1
Groupe
1
2
3
4
5
6
a
b
c
d
e
f
g
h

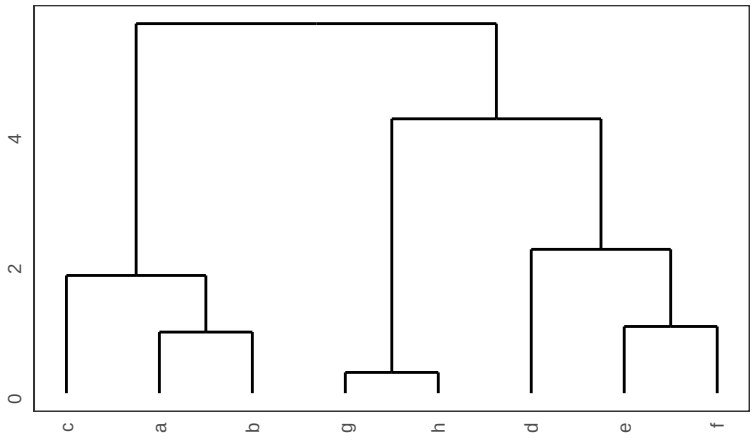

X2
X1
Groupe
1
2
3
4
5
a
b
c
d
e
f
g
h


X2
X1
Groupe
1
2
3
4
a
b
c
d
e
f
g
h


X2
X1
Groupe
1
2
3
a
b
c
d
e
f
g
h


X2
X1
Groupe
1
2
a
b
c
d
e
f
g
h


X2
X1
Groupe
1
a
b
c
d
e
f
g
h


c
a
b
g
h
d
e
f

Visualisation

2.1 La Classification Ascendante Hiérarchique

L'algorithme CAH

Algorithme

Entrées : données, distance (entre individus et clusters d'individus)

1. Calculer une matrice de *distances entre individus*.
2. Chaque observation forme 1 singleton.
3. *Agréger* les deux objets les plus proches.
4. Mettre à *jour la matrice de distances*.
5. Itérer jusqu'à obtenir *un seul groupe*.

Sorties : une suite de partitions emboîtées.

De quoi a t-on besoin ?

Pas grand chose... il suffit de savoir calculer des *distances* et/ou *indicateurs de similarités* entre

- des observations. On notera d une telle distance
- des groupes d'observations, *i.e.* entre clusters. On notera Δ une telle distance.

2.2 Mesures de dissemblances

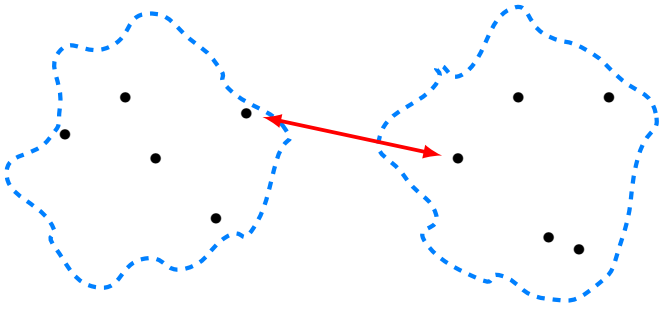
Saut minimum

- Également appelé *minimu linkage* ou *single linkage*.

$$\Delta(\mathcal{C}_i, \mathcal{C}_j) = \min_{x_i \in \mathcal{C}_i, x_j \in \mathcal{C}_j} d(x_i, x_j)$$

Commentaires

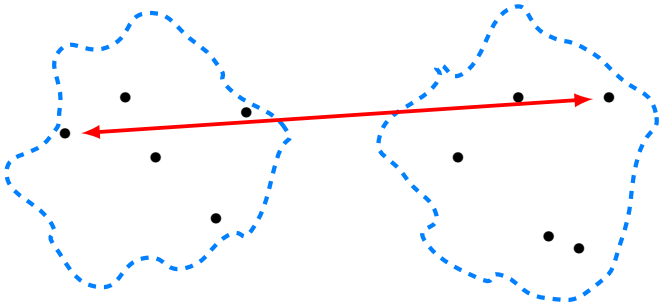
- Groupes généralement "étirés".
- "Le voisin de mon voisin est mon voisin".



Saut maximum

- Également appelé *complete linkage*.

$$\Delta(\mathcal{C}_i, \mathcal{C}_j) = \max_{x_i \in \mathcal{C}_i, x_j \in \mathcal{C}_j} d(x_i, x_j)$$



Commentaires

Groupes généralement "compacts".

Saut moyen (average linkage)

Moyenne de toutes les distances entre deux objets des deux groupes :

$$\Delta(\mathcal{C}_i, \mathcal{C}_j) = \frac{1}{|\mathcal{C}_i||\mathcal{C}_j|} \sum_{x_i \in \mathcal{C}_i, x_j \in \mathcal{C}_j} d(x_i, x_j)$$

Commentaires

Intermédiaires entre le min et le max...

Lien de Ward

Idée

Se baser sur l'inertie :

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_{\text{tot}} =& \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} d^2(x_i - \bar{x}) \\ =& \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{K}\sum_{i\in\mathcal{C}_k} d^2(x_i, \bar{x}_{\mathcal{C}_k}) + \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{K} n_k d^2(\bar{x}_{\mathcal{C}_k}, \bar{x}) \\ =& \mathcal{I}_{\text{intra}} + \mathcal{I}_{\text{inter}}\end{aligned}$$

en minimisant $\mathcal{I}_{\text{intra}}$ et/ou maximisant $\mathcal{I}_{\text{inter}}$.

Cas extrêmes

- $K = n \Longrightarrow \mathcal{I}_{\text{intra}} = 0$ et $\mathcal{I}_{\text{inter}} = \mathcal{I}_{\text{tot}}$.
- $K = 1 \Longrightarrow \mathcal{I}_{\text{intra}} = \mathcal{I}_{\text{tot}}$ et $\mathcal{I}_{\text{inter}} = 0$.

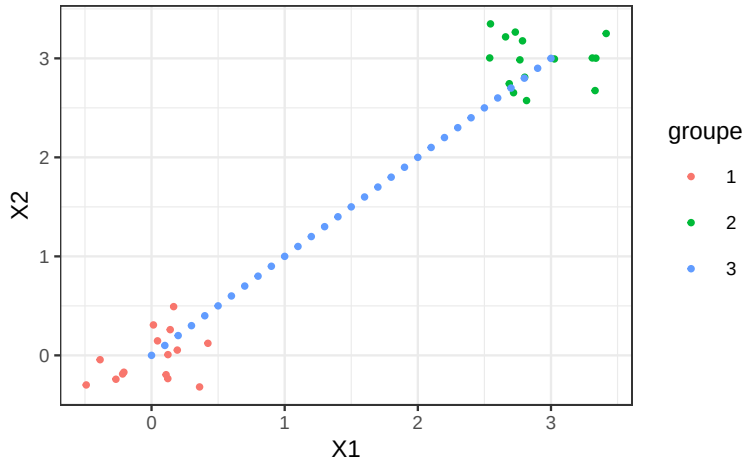
Lien de Ward

Assembler les clusters de manière à minimiser la perte de $\mathcal{I}_{\text{inter}}$ $\iff$ minimiser le lien de Ward :

$$\Delta(\mathcal{C}_i, \mathcal{C}_j) = \frac{|\mathcal{C}_i|\,|\mathcal{C}_j|}{|\mathcal{C}_i| + |\mathcal{C}_j|} d^2(\bar{x}_{\mathcal{C}_i}, \bar{x}_{\mathcal{C}_j})$$

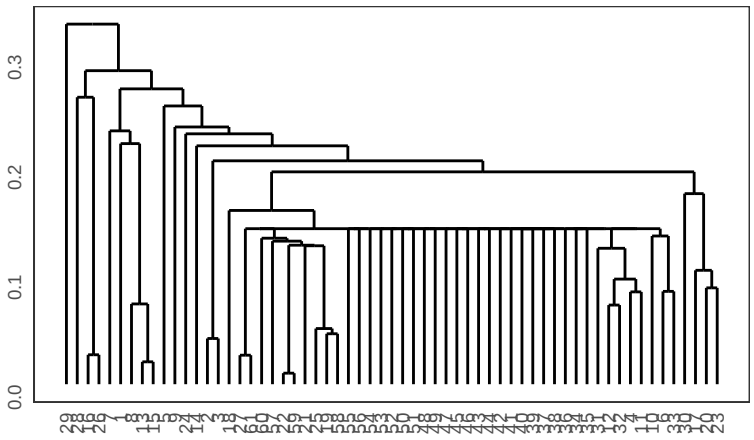
Commentaires

- Bien adapté à la distance euclidienne
- liens forts avec l'ACP.



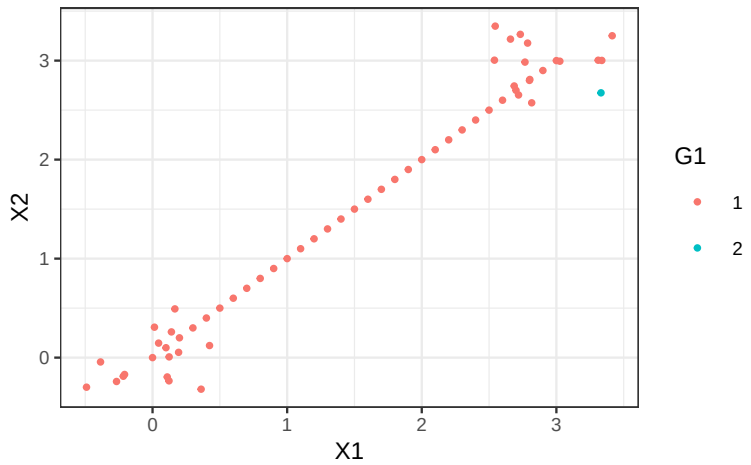
Exemple

```
> class1 <- hclust(D,method = "single")
> ggdendrogram(class1)
```




```
> class2 <- hclust(D,method = "ward")
> ggdendrogram(class2)
```

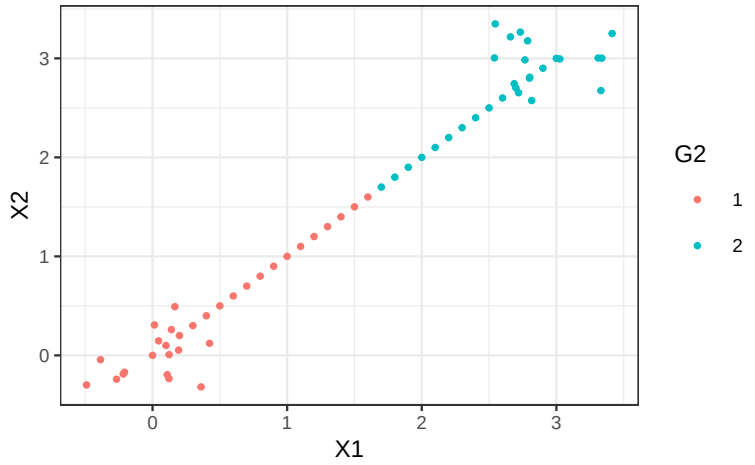
```
> G1 <- cutree(class1,k = 2)
```



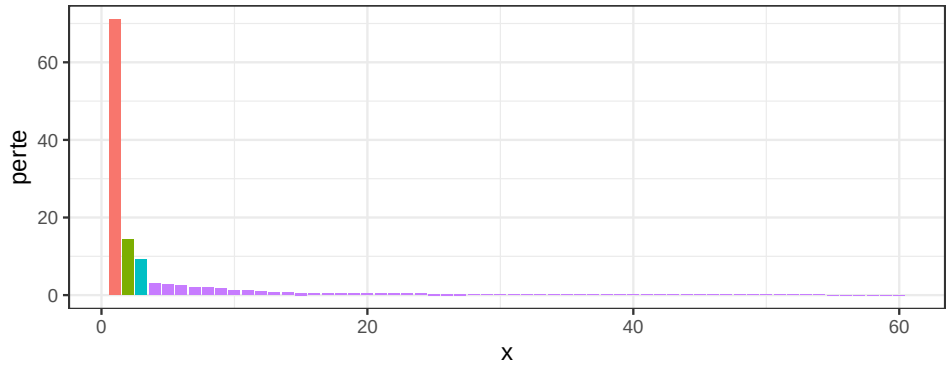

```
> G2 <- cutree(class2,k =2)
```

Choix du nombre de classes

- Toujours *difficile*... On se base généralement sur la *perte d'inertie inter* obtenue en agrégeant les clusters :

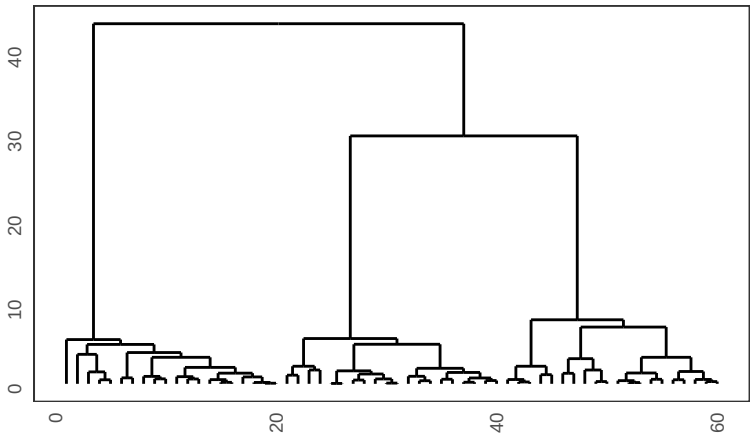



```
> tibble(perte=rev(class2$height),x=1:60,
+        col=as.factor(c(1:3,rep(4,57)))) |>
+   ggplot()+aes(x=x,y=perte,fill=col)+
+   geom_bar(stat = "identity",show.legend = FALSE)
```



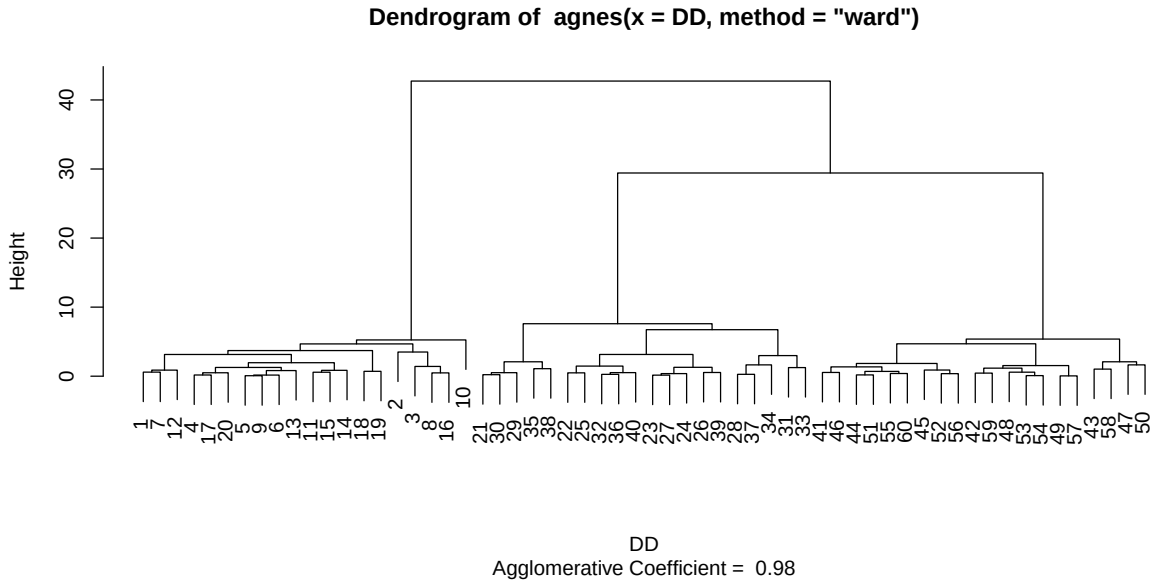
Le coin R : hclust

```
> DD <- dist(tbl)
> classif <- hclust(DD,method = "ward.D2")
> library(ggdendro)
> ggdendrogram(classif,labels = FALSE)
```



Le coin R : agnes de cluster

```
> library(cluster)
> classif1 <- agnes(DD,method = "ward")
> plot(classif1,which.plots=2)
```



Bilan

Avantages

- Pas besoin de connaître le nombre de classes a priori
- Visualisation dendrogramme

Inconvénients

- Coupure du dendrogramme pas toujours simple
- Complexité algorithmique élevée lorsque n est grand $\Longrightarrow O(n^3)$.

2.3 Compléments

n grand $\Longrightarrow$ Classification mixte

- La CAH est souvent trop couteuse en temps de calcule lorsque n est grand.

Classification Mixte

1. Faire un k-means sur les données avec k grand (par exemple $k = 1000$)
2. Lancer la CAH sur les centroïdes obtenus dans le k-means (en prenant en considération les effectifs des clusters)

- Sur **R** on peut utiliser la fonction `HCPC` du package **FactoMineR**.

Exemple

```
> dim(tbl)
[1] 70000     2
> aa <- dist(tbl)
Error: vecteurs de mémoire épuisés (limite atteinte ?)
```

```
> library(FactoMineR)
> classif <- HCPC(tbl,kk=100,nb.clust = 5,
+                 description = FALSE,graph = FALSE)
> summary(classif$data.clust)
       V1                 V2          clust
 Min.   :-3.8960   Min.   :-2.9089   1: 9968
 1st Qu.: 0.7978   1st Qu.: 0.2049   2: 8851
 Median : 4.4625   Median : 4.0371   3:11027
 Mean   : 3.5691   Mean   : 2.8530   4: 9986
 3rd Qu.: 5.4406   3rd Qu.: 5.1447   5:30168
 Max.   : 8.3466   Max.   : 8.6905
```

d grand

- CAH et k-means reposent sur des *distances entre individus*.
- Les distances standards ne sont *pas forcément pertinentes en grande dimension*.

Réduction de dimension

- Souvent pertinent d'effectuer une analyse factorielle au préalable(ACP-ACM...) pour réduire la dimension.
- On fait ensuite le k-means et/ou la CAH sur les premiers axes de l'analyse factorielle.
- Sur R : fonction `HCPC` de **FactoMineR**.

Fastcluster et flashClust

Packages qui proposent d'*autres algorithmes* pour le calcul de la CAH.

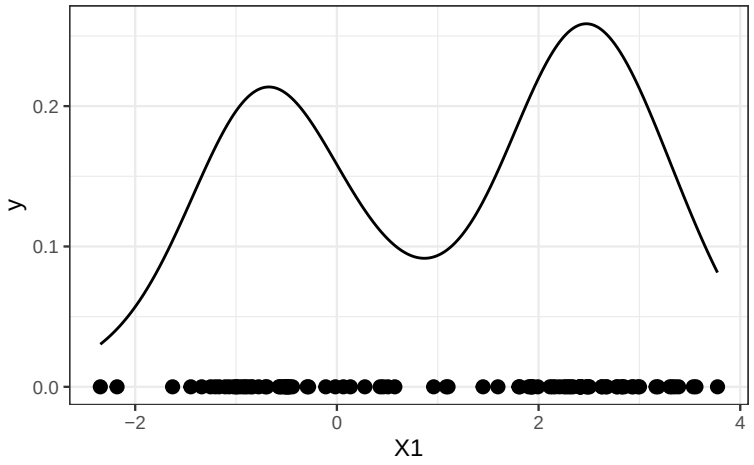
```
> tbl1 <- tbl |> slice(sample(70000,10000));D <- dist(tbl1)
> system.time(aa <- stats::hclust(D,method = "ward.D2"))
utilisateur     système      écoulé
      2.608       0.219       2.867
> system.time(bb <- fastcluster::hclust(D,method="ward.D2"))
utilisateur     système      écoulé
      1.293       0.114       1.461
> system.time(cc <- flashClust::flashClust(D,method="ward"))
utilisateur     système      écoulé
      3.739       0.227       4.024
```

3 Méthodes fondées sur la densité - DBSCAN

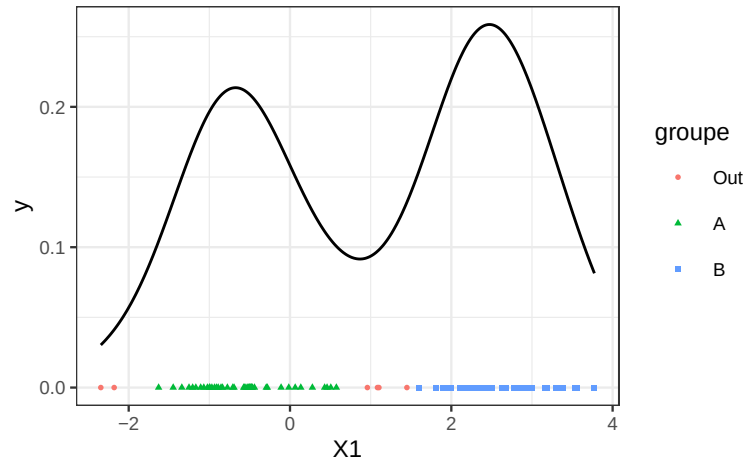
Introduction

- Le principe est de déterminer les *classes* d'une partition à partir des *zones de forte densité*.
- Les zones de *faible densité* sont utilisées pour *délimiter les classes*.
- Les éléments sont *regroupés de proche en proche* et les éléments éloignés des zones de forte densité sont ignorés et considérés comme des outliers.
- Ester et al. [3] : DBSCAN (Density-based spatial clustering of applications with noise)

L'idée



L'idée



Noyaux et points de bordure

- Soit $\varepsilon > 0$ et MinPts $\leq n$ fixés.
- On note $B_\varepsilon(y)$ le voisinage centré sur y et de rayon ε et $|B_\varepsilon(y)|$ le nombre de points dans $B_\varepsilon(y)$.

Définition

- Si $|B_\varepsilon(y)| \geq \text{MinPts}$ alors y est un *noyau* et est dans une zone de forte densité.
- Si $|B_\varepsilon(y)| < \text{MinPts}$ alors y est un *point bordure* et n'est pas dans une zone de forte densité.

Accéssibilité

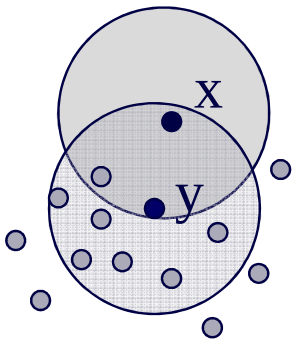
Définition

- x est *directement accessible* depuis y si $x \in B_\varepsilon(y)$ et y est un noyau.
- x est *accessible depuis* y si il existe une chaîne de points $p_1 = y, p_2, \ldots, p_k = x$ telle que $\forall i, p_{i+1}$ est directement accessible depuis p_i.

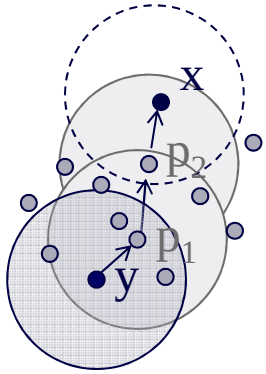
Définition

- Deux éléments x et y sont *connectés* s'ils sont tous les deux accessibles depuis un même élément z (l'éléments z peut éventuellement être x ou y).
- Un cluster est *constitué* par un ensemble d'éléments connectés.

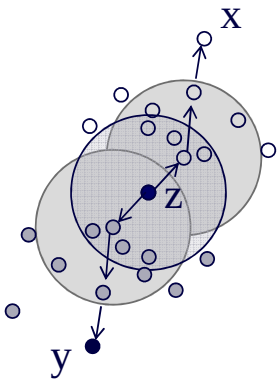
Exemple : MinPts $= 4$



x bordure, y noyau



x accessible depuis y
y non accessible depuis x

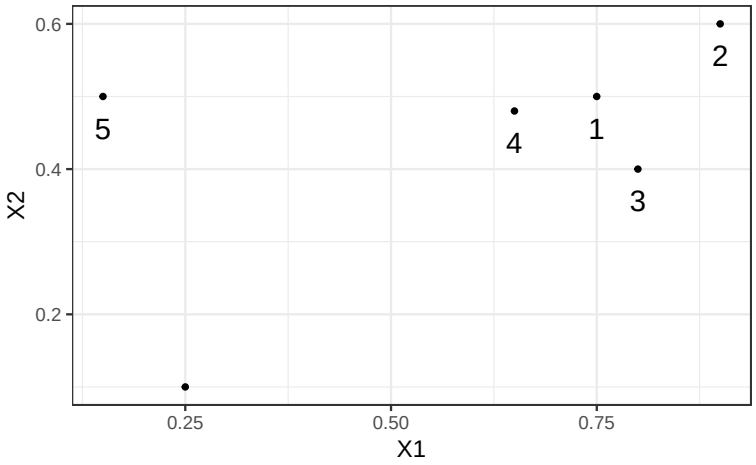


x et y connectés

Un exemple

```
> round(dist(tbl[,1:2]),2)
     1    2    3    4    5
2 0.18
3 0.11 0.22
4 0.10 0.28 0.17
5 0.60 0.76 0.66 0.50
6 0.64 0.82 0.63 0.55 0.41
```

```
> is.corepoint(tbl[,1:2],eps=0.25,minPts = 4)
[1]  TRUE FALSE  TRUE FALSE FALSE FALSE
```



Résultats

```
> (db <- dbscan(tbl[,1:2],eps=0.25,minPts = 3))
DBSCAN clustering for 6 objects.
Parameters: eps = 0.25, minPts = 3
Using euclidean distances and borderpoints = TRUE
The clustering contains 1 cluster(s) and 2 noise points.

0 1
2 4

Available fields: cluster, eps, minPts, dist, borderPoints
> db$cluster
[1] 1 1 1 1 0 0
```

Résultats

1 cluster de 4 points et 2 outliers.

Choix des paramètres

- 2 paramètres sont à calibrer ε et minPts ; Leur choix est *crucial*...
- minPts $\nearrow \Longrightarrow$ moins de noyaux $\Longrightarrow$ moins de clusters
- $\varepsilon \searrow \Longrightarrow$ moins de noyaux $\Longrightarrow$ plus d'outliers

Conséquence

Il faut calibrer ces paramètres

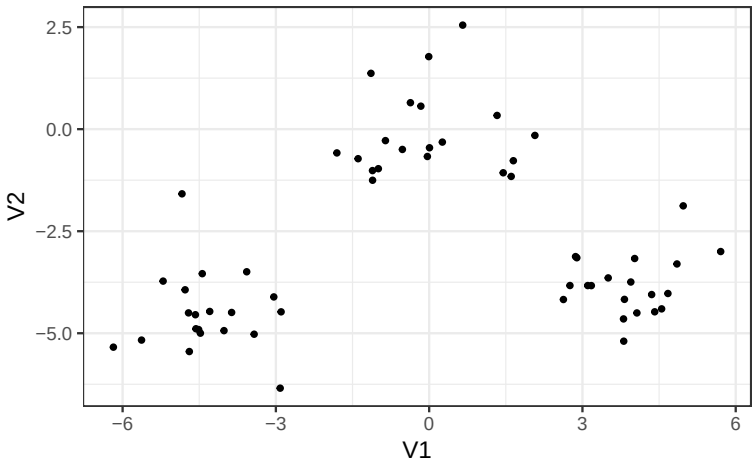
Heuristique

- On devra bien entendu faire *plusieurs* essais et analyser les résultats.

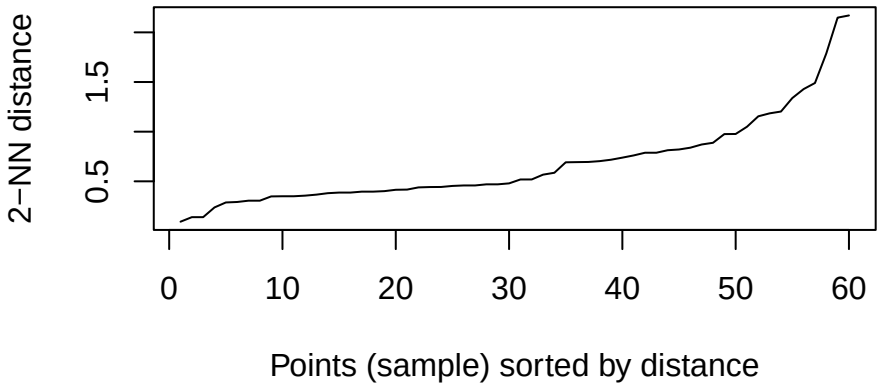
Heuristique

- Choisir minPts de l'ordre de la dimension des données + 1
- Tracer le graphe des `kNNdisplot` en utilisant $k = \text{minPts} - 1$.
- Utiliser un *critère du coude* pour choisir ε.

Exemple 1



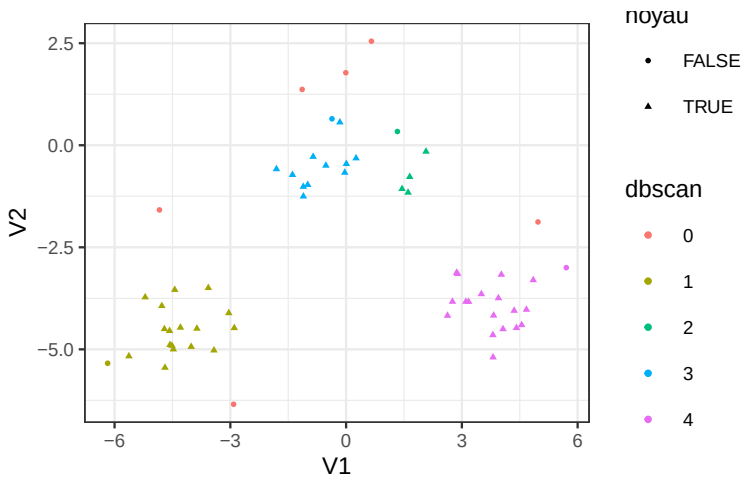

```
> kNNdistplot(tbl[,2:3],k=2)
```

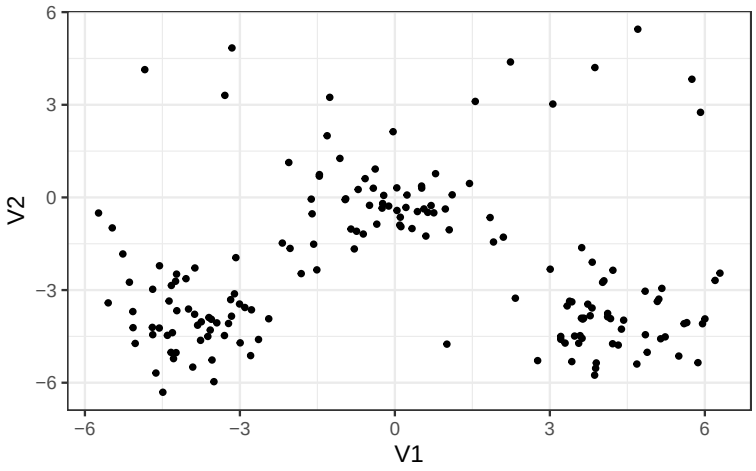


$\Longrightarrow$ on pourra prendre ε autour de 1

Résultats

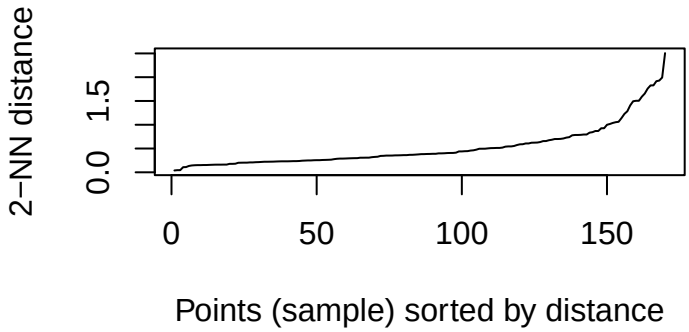
```
> db <- dbscan(tbl[,2:3],eps=1,minPts = 3)
> noyau <- is.corepoint(tbl[,2:3],eps=1,minPts = 3)
> tbl_db <- tbl |> mutate(dbscan=as.factor(db$cluster),noyau=noyau)
> ggplot(tbl_db)+aes(x=V1,y=V2,color=dbscan,shape=noyau)+geom_point()
```





Exemple 2

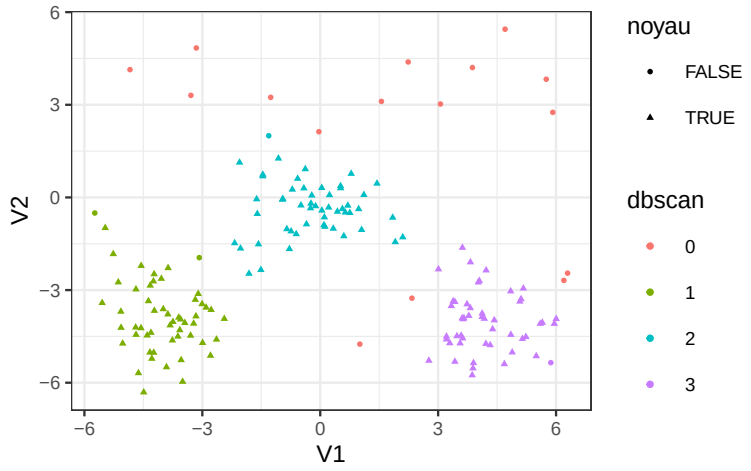
```
> kNNdistplot(tbl1[,2:3],k=2)
```



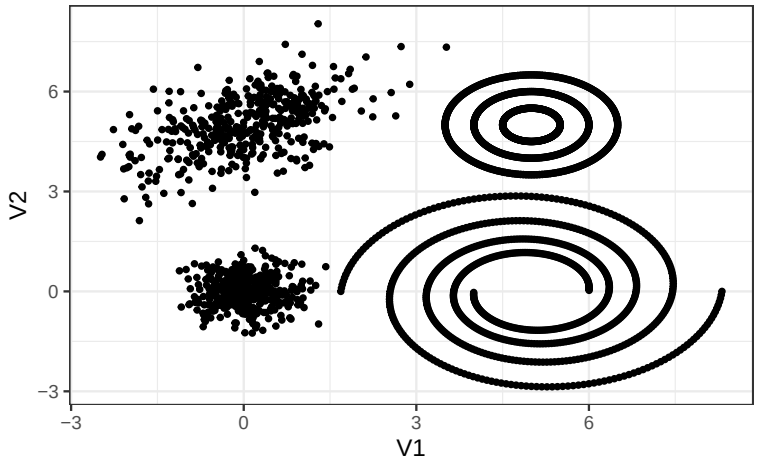
$\Longrightarrow$ on pourra prendre ε autour de 1

Résultats

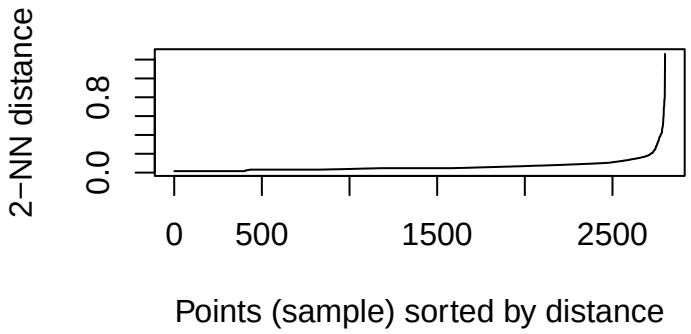
```
> db1 <- dbscan(tbl1[,2:3],eps=1,minPts = 3)
> noyau <- is.corepoint(tbl1[,2:3],eps=1,minPts = 3)
> tbl_db <- tbl1 |> mutate(dbscan=as.factor(db1$cluster),noyau=noyau)
> ggplot(tbl_db)+aes(x=V1,y=V2,color=dbscan,shape=noyau)+geom_point()
```



Exemple 3



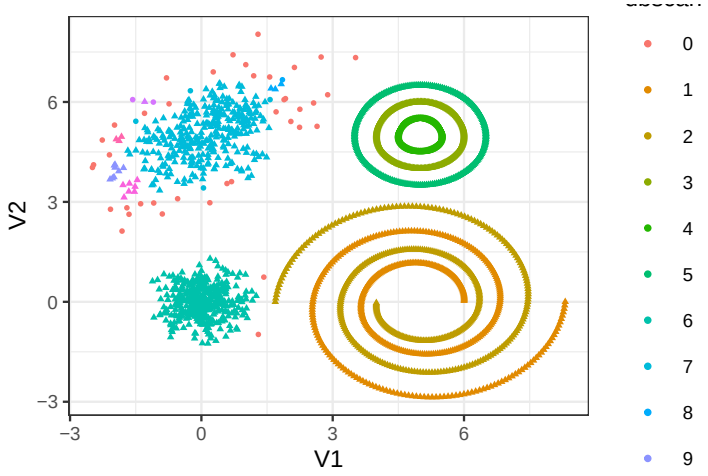

```
> kNNdistplot(tbl,k=2)
```



$\Longrightarrow$ on pourra prendre ε autour de 0.3.

Résultats

```
> db1 <- dbscan(tbl,eps=0.3,minPts = 3)
> noyau <- is.corepoint(tbl,eps=0.3,minPts = 3)
> tbl_db <- tbl |> mutate(dbscan=as.factor(db1$cluster),noyau=noyau)
> ggplot(tbl_db)+aes(x=V1,y=V2,color=dbscan,shape=noyau)+geom_point()
```



Compléments

- Le nombre de groupes n'est pas un paramètre de l'algorithme.

Si trop de groupes ou d'outliers

- assembler les groupes à faibles effectifs à des groupes aux effectifs plus conséquents
- affecter les outliers aux clusters les plus proches.

$\Longrightarrow$ par exemple avec un algorithme du *1 plus proche voisin*.

Bilan

Avantages

- Permet d'identifier différentes structures géométriques.
- Inutile de spécifier le nombre de clusters.
- Identifie les potentiels outliers.

Inconvénients

- 2 paramètres à choisir (comme toujours...).
- Trouver la "bonne" distance, en particulier en grande dimension.

4 Clustering spectral

- *Cadre identique* : $G = (V, E)$ un graphe et on veut trouver une partition de V en clusters ou communautés.
- Approche basée sur la *décomposition spectrale du Laplacien du graphe*.
- Approche utilisée dans un *cadre plus large* :
  - Problème : clustering sur un jeu de données standards $n \times p$;
  - L'approche peut être appliquée à une matrice de similarité.
- On pourra consulter [8] dont cette partie est fortement inspirée.

* Notations

- $G = (V, E)$ un graphe *non dirigé valué* avec $n = |V|$.
- $w_{ij} \geq 0$ *poids de l'arête* entre i et j et $W = (w_{ij})_{1 \leq i,i \leq n}$ la *matrice d'adjacence*.
- $d_i = \sum_{j \neq i} w_{ij}$ *degré* du nœud i et $D = \text{diag}(d_i)_{1 \leq i \leq n}$ la matrice des degrés.

Laplacien non normalisé

Le *Laplacien non normalisé* de G est la matrice $n \times n$ définie par :

$$L = D - W.$$

* Quelques propriétés

Les deux propositions suivantes sont fondamentales pour l'algorithme de *clustering spectral*.

Proposition 1

1. Pour tout vecteur $f \in \mathbb{R}^n$ on a
$$f'Lf = \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i,j \leq n} w_{ij}(f_i - f_j)^2.$$
2. L est symétrique et semi définie positive.
3. La plus petite valeur propre de L est 0, le vecteur propre correspondant est $\mathbf{1}_n$.
4. L a n valeurs propres non nulles $0 = \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_n$.

* Valeurs propre et nombre de compo. connexes

Proposition 2

Soit G un graphe *non dirigé*. Alors

1. le degrés de multiplicité k de la valeur propre 0 de L est égal au nombre de composantes connexes $A_1, \dots, A_k$ dans G.
2. l'espace propre associé à la valeur propre 0 est engendré par les vecteurs d'indicatrices $\mathbf{1}_{A_1}, \dots, \mathbf{1}_{A_k}$.

Conséquence importante

Le *spectre de L* permet d'identifier *les composantes connexes de G.*.

- *En pratique* : 1 communauté n'est pas forcément égale à une composante connexe.
- On peut par exemple vouloir *extraire des communautés* dans un graphe à une composante connexe.

Idée

Considérer les k plus petites valeurs propres du Laplacien.

* Spectral clustering non normalisé

Algorithme

Entrées : un graphe non dirigé G, k le nombre de clusters.

1. Calculer le Laplacien non normalisé L de G.
2. Calculer les *k premiers vecteurs propres* $u_1, \dots, u_k$ de G.
3. On note U la matrice $n \times k$ qui contient les u_k et y_i la $i$ieme ligne de U.
4. Faire un *k-means* avec les points $y_i, i = 1, \dots, n \Longrightarrow A_1, \dots, A_k$.

Sortie : clusters $C_1, \dots, C_k$ avec

$$C_j = \{i | y_i \in A_j\}.$$

* Remarque

- Si G ne possède pas k composantes connexes alors *U n'est pas composé* que de 1 et de 0.
- On ne *peut donc pas extraire directement* les composantes à cette étape.
- Mais si il *existe (presque) k composantes*, alors les $y_i \in \mathbb{R}^k$ risquent de se rapprocher de cette configuration 0-1.
- C'est pourquoi on fait un *k-means* en 4.
- Il existe *plusieurs versions* d'algorithme de clustering spectral.
- Les plus utilisées s'appliquent à une *version normalisée du Laplacien*, par exemple :

$$L_{\text{norm}} = I - D^{-1/2} W D^{-1/2}.$$

- Les propriétés de L_{norm} sont *proches* de celles de L. On a par exemple la propriété suivante.

Proposition 3

Soit G un graphe *non dirigé*. Alors

1. le degrés de multiplicité k de la valeur propre 0 de L_{norm} est égal au nombre de composantes connexes $A_1, \ldots, A_k$ dans G.
2. l'espace propre associé à la valeur propre 0 est engendré par les vecteurs d'indicatrices $D^{1/2}\mathbf{1}_{A_1}, \ldots, D^{1/2}\mathbf{1}_{A_k}$.

* Clustering spectral normalisé

- On déduit de cette propriété *la version la plus courante* de clustering spectral du à [10].

Algorithme

Entrées : un graphe non dirigé G, k le nombre de clusters.

1. Calculer le Laplacien normalisé L_{norm} de G.
2. Calculer les *k premiers vecteurs propres* $u_1, \ldots, u_k$ de G. On note U la matrice $n \times k$ qui les contient.

3. Calculer T en *normalisant les lignes* de U : $t_{ij} = u_{ij}/(\sum_\ell u_{i\ell}^2)^{1/2}$.
4. Faire un *k-means* avec les points $y_i, i = 1, \ldots, n$ (i*ieme* ligne de T) $\Longrightarrow A_1, \ldots, A_k$.

Sortie : clusters $C_1, \ldots, C_k$ avec

$$C_j = \{i | y_i \in A_j\}.$$

* Remarques

- Algorithme *quasi similaire* au clustering spectral non normalisé.
- Une étape de *normalisation* en plus.
- Cette étape se justifie par la *théorie de la perturbation* du spectre d'une matrice.
- On pourra consulter [8] pour des justifications.

* Choix de k

- Comme souvent en *clustering*, cet algorithme nécessite de connaître le nombre de groupes.
- Utilisation de *connaissances métier* pour ce choix
- ou étude des *valeurs propres* du Laplacien.

* Généralisation

Remarque importante

- L'algorithme n'utilise pas nécessairement la structure du graphe.
- Il est entièrement basé sur la matrice (d'adjacence) W des poids qui contient des arêtes.
- Cette matrice peut également être vue comme une matrice de similarité.

Conséquence

- On peut donc *généraliser cet algorithme* à n'importe quel problème où on *possède une matrice de similarité*.
- *Exemple* : problème de clustering standard sur des données $n \times p$ (il "suffit" de construire une matrice de similarité).

* Clustering spectral sur un tableau de données

- *Données* : tableau $n \times p$ n individus, p variables.
- *Problème* : classification non supervisée des n individus.
- *Méthodes classiques* : k-means, CAH...

Alternative : clustering spectral

1. construire un graphe de similarité ;
2. lancer l'algorithme de clustering spectral sur ce graphe (ou plutôt sur sa matrice de similarité.

* Construction du graphe de similarités

- On peut utiliser les techniques vues dans la *section* **??** : ε-neighborhood graph ou plus proches voisins (mutuels ou non).
- De façon plus générale, la matrice de similarités s'obtient souvent à partir d'un *noyau* K :

$$\begin{aligned} K : \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p &\to \mathbb{R} \\ (x, y) &\mapsto \langle \Phi(x), \Phi(y) \rangle_{\mathcal{H}} \end{aligned}$$

où $\Phi : \mathbb{R}^p \to \mathcal{H}$ est une fonction qui plonge les observations dans un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ appelé *feature space*.

* Exemples de noyau

- *Linéaire* (vanilladot) : $K(x, y) = \langle x, y \rangle$.
- *Gaussien* (rfbdot) : $K(x, y) = \exp(-\sigma \|x - y\|^2)$.
- *Polynomial* (polydot) : $K(x, y) = (\text{scale}\langle x, y \rangle + \text{offset})^{\text{degree}}$.
- ...

Références

On pourra trouver dans exemples de noyau dans [6].

* Matrice de similarités avec un noyau

- Etant données n observations $x_i \in \mathbb{R}^p$ et un noyau K
- on peut construire une *matrice de similarité*, par exemple pour un noyau Gaussien :

$$w_{ij} = \begin{cases} \exp(-\sigma \|x_i - x_j\|^2) & \text{si } i \neq j \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Clustering spectral

Le clustering spectral consiste à appliquer l'algorithme vu précédemment en calculant le Laplacien normalisé à partir de cette matrice de similarités (voir [10, 1]).

* Clustering spectral sur des données $n \times p$

Algorithme

Entrées : tableau de données $n \times p$, K un noyau, k le nombre de clusters.

1. Calculer la matrice de *similarités* W sur les données avec le *noyau* K.
2. Calculer le *Laplacien normalisé* L_{norm} à partir de W.
3. Calculer les *k premiers vecteurs propres* $u_1, \ldots, u_k$ de G. On note U la matrice $n \times k$ qui les contient.
4. Calculer T en *normalisant les lignes* de U : $t_{ij} = u_{ij}/(\sum_\ell u_{i\ell}^2)^{1/2}$.
5. Faire un *k-means* avec les points $y_i, i = 1, \ldots, n$ (ii*eme* ligne de T) $\Longrightarrow A_1, \ldots, A_k$.

Sortie : clusters $C_1, \ldots, C_k$ avec

$$C_j = \{i | y_i \in A_j\}.$$

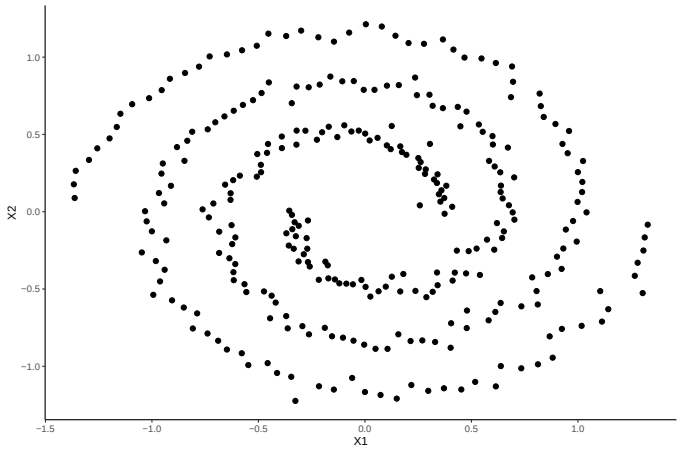
* Le coin R

- La fonction *specc* du package kernlab permet de faire le clustering spectral.
- Exemple : données *spirals*

```
> library(kernlab)
> data(spirals)
> spirals1 <- data.frame(spirals)
> head(spirals1)
##           X1          X2
## 1  0.8123568 -0.98712687
## 2 -0.2675890 -0.32552004
## 3  0.3739746 -0.01293652
## 4  0.2576481  0.04130805
## 5 -0.8472613  0.32939461
## 6  0.4097649  0.03205686
```

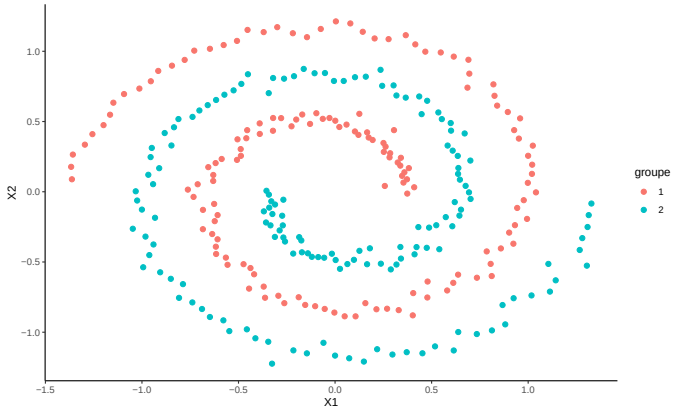
* Visualisation du nuage de points

```
> ggplot(spirals1)+aes(x=X1,y=X2)+geom_point()+theme_classic()
```



* Le clustering spectral

```
> groupe <- specc(spirals,centers=2,kernel="rbfdot")
> head(groupe)
## [1] 2 2 1 1 2 1
> spirals1 <- spirals1 %>% mutate(groupe=as.factor(groupe))
> ggplot(spirals1)+aes(x=X1,y=X2,color=groupe)+geom_point(size=2)+theme_classic()
```



Références

[1] E. Arias-Castro. “Clustering based on pairwise distances when the data is of mixed dimensions”. In : *IEEE Transaction on Information Theory* 57.3 (2011), p. 1692-1706.

[2] Hans-Hermann Bock. “Origins and extensions of the k-means algorithm in cluster analysis”. In : *Electronic journal for history of probability and statistics* 4 (2008), p. 1-18.

[3] M. Ester et al. “A Density-Based Algorithm for Discovering Clusters in Large Spatial Databases with Noise”. In : Proceedings of 2nd International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD-96). 1996.

[4] E. W. Forgy. “Cluster analysis of multivariate data: efficiency vs interpretability of classifications”. In : *Biometrics* 21 (1965), p. 768-769.

[5] J. A. Hartigan et M. A. Wong. “Algorithm AS 136: A K-means clustering algorithm”. In : *Applied Statistics* 28 (1979), p. 100-108.

[6] A Karatzoglou et al. “kernlab – An S4 Package for Kernel Methods in R”. In : *Journal of Statitstical Software* 11.9 (2004).

[7] S. P. Lloyd. “Least squares quantization in PCM”. In : *IEEE Transactions on Information Theory* 28 (1982), p. 128-137.

[8] U. von Luxburg. “A tutorial on spectral clustering”. In : *Statistics and computing* 17 (2017), p. 395-416.

[9] J. MacQueen. “Some methods for classification and analysis of multivariate observations”. In : *Proceedings of the Fifth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*. Sous la dir. de L. M. Le Cam & J. Neyman. T. 28. Berkeley, 1967, p. 281-297.

[10] A. Ng, M. Jordan et Y. Weiss. “On spectral clustering analysis”. In : *Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS)*, t. 14. 2002, p. 849-856.