DATA EXPLORATION

EISTI
Ecole Internationale des Sciences du Traitement de l'Information

Méthodes de clustering :

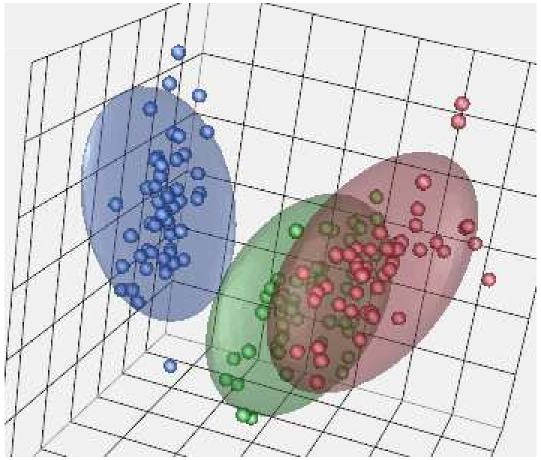
- Généralités
- K-means
- Classification hiérarchique ascendante

GÉNÉRALITÉS SUR LE CLUSTERING

Le clustering est la technique non supervisée la plus répandue en datamining.

Elle permet de distinguer des groupes homogènes (classes, segments, clusters) au sein d'un grand volume de données.

- De part leur constitution, ces groupes peuvent apporter une information pertinente sur les données, notamment s'ils sont représentés graphiquement à l'aide d'une ACP.
- Ils peuvent aussi servir à découper une étude en sous-parties, chacune pouvant bénéficier de traitements particuliers.



L'objectif des méthodes est

- à la fois, de regrouper les observations ayant des caractéristiques **similaires** au sein d'une même classe, et
- à la fois de construire des classes les plus **dissemblables** possibles.

Notons que le nombres de partitions distinctes de n objets est

$$\frac{1}{e}\sum_{k\geq 1}\frac{k^n}{k!}$$

Par exemple pour 30 objets, on a plus 10^{23} partitions possibles , d'où l'intérêt d'avoir un algorithme performant .

LES MÉTRIQUES SUR LES INDIVIDUS

Pour trouver des **similarités** entre les observations il faut définir une métrique sur les observations :

- Distance euclidienne : $d_2(x,y)=\left(\sum_{i=1}^{d}(x_i-y_i)^2\right)^{1/2}$

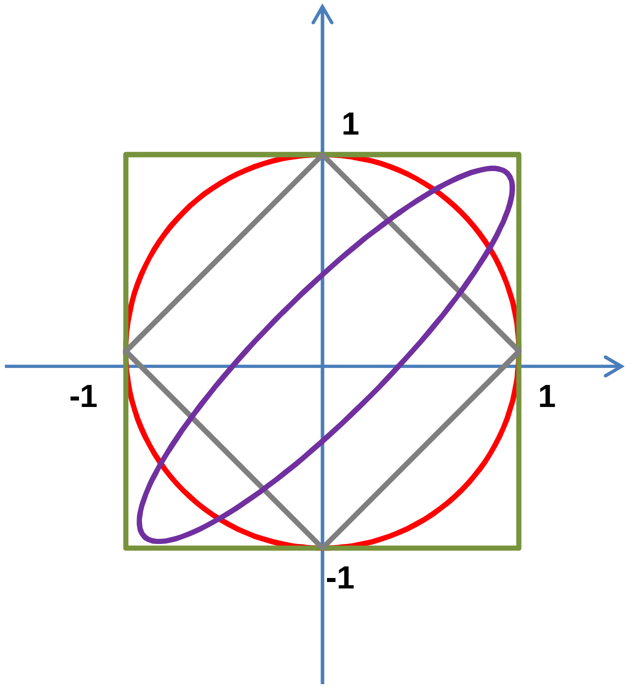
- Distance Manhattan : $d_1(x,y)=\sum_{i=1}^{d}|x_i-y_i|$

Atténue l'impact des individus hors norme car pas d'écart au carré

- Distance infinie : $d_\infty(x,y)=\max\{|x_1-y_1|,\dots,|x_d-y_d|\}$

- Distance de Mahalanobis : $d(x,y)=\left((x-y)^T\Sigma^{-1}(x-y)\right)^{1/2}$

Σ =matrice carrée définie positive
(permet d'introduire une corrélation entre les variables)



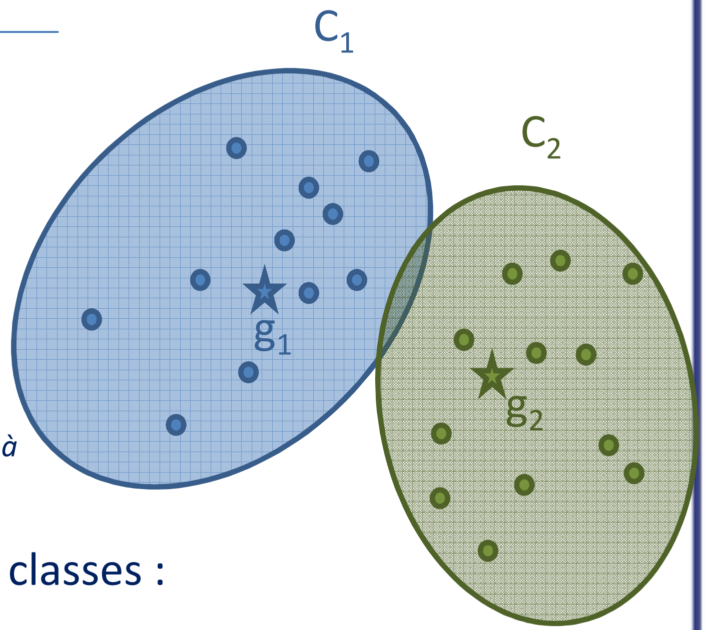
Centrer et réduire

Illustration du fléau de la dimension *% de couverture du cube $[-1,1]^d$ par la boule unité*	d	vol. cube	vol. boule	%
	2	4	3,1	78,5%
	4	16	4,9	30,8%
	6	64	5,2	8,1%
	8	256	4,1	1,6%
	10	1024	2,6	0,2%

Et le qualitatif !!!!!!

$\Longrightarrow$ Faire une AFC/ACM au préalable

LES MÉTRIQUES SUR LES CLASSES



Pour construire des classes **dissemblables** il faut définir une métrique sur les classes:

- *Distance minimale* entre deux observations des deux classes :

$$d_{min}(C_1,C_2) = \min_{x \in C_1, y \in C_2} d(x,y)$$

détecte les formes allongées voire sinueuses, sensible à l'effet de de chaîne (2 points éloignés sont considérés comme appartenant à la même classe car reliés par une série de points proches les uns des autres)

- *Distance maximale* entre deux observations des deux classes :

$$d_{max}(C_1,C_2) = \max_{x \in C_1, y \in C_2} d(x,y)$$

très sensible aux observations atypiques

- *Distance moyenne* entre deux observations des deux classes :

$$d_{moy}(C_1,C_2) = \underset{x \in C_1, y \in C_2}{\text{moyenne}} \; d(x,y)$$

moins sensible au bruit, tend à produire des classes de même variance.

- *Distance de Ward* :

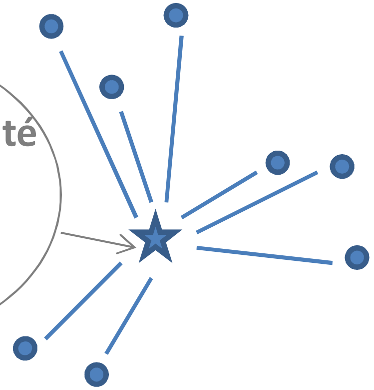
$$d_{Ward}(C_1,C_2) = \frac{n_1 \times n_2}{n_1 + n_2} d^2(g_1,g_2)$$

la plus utilisée, permet de fusionner les deux classes faisant le moins baisser l'inertie inter-classes, tend à produire des classes sphériques de même effectif .

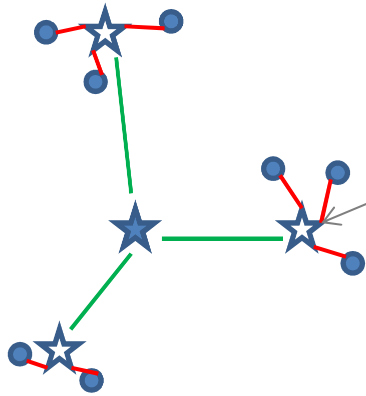
Inertie inter et intra classes

Centre de gravité du nuage

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



Ça ne vous rappelle rien?



Centre de gravité d'une classe C_k

$$g_k = \frac{1}{n_k}\sum_{x_i \in C_k} x_i$$

Inertie Totale = Inertie intra classes + Inertie inter classes

$$\underbrace{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} d^2(x_i, g)}_{I_{tot}} = \underbrace{\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{p}\sum_{i=1}^{n_k} d^2(x_i - g_k)}_{I_{intra}} + \underbrace{\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{p} n_k d^2(g_k, g)}_{I_{inter}}$$

- Chercher la partition qui minimise l'inertie intra classes *(homogénéité des observations dans les classes)*
- Chercher la partition qui maximise l'inertie inter classes *(dissimilarité des classes entre elles)*

Le coefficient

$$R^2 = \frac{I_{inter}}{I_{tot}}$$

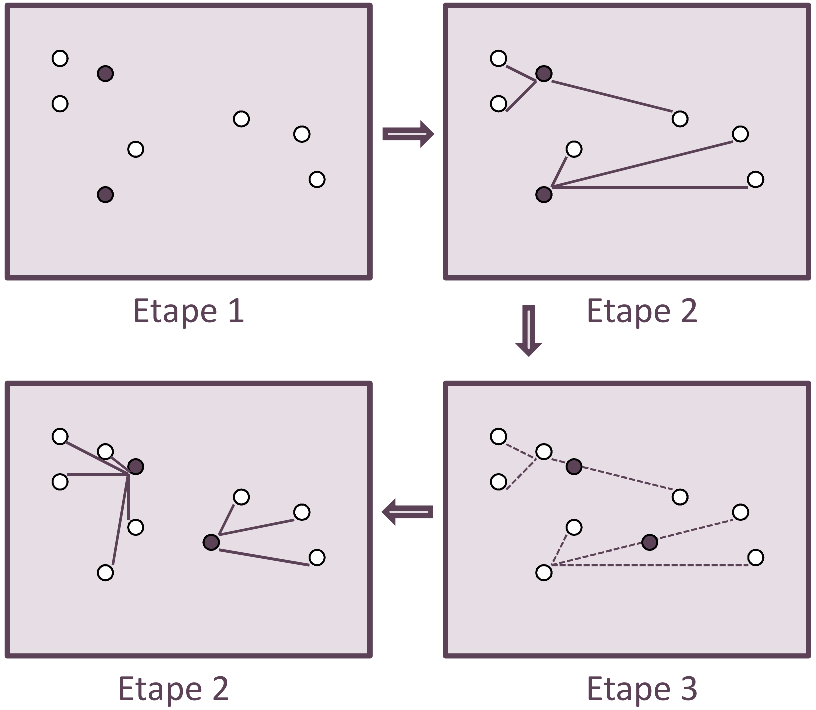
est le pourcentage d'inertie du nuage expliquée par les classes. L'objectif est d'obtenir un R^2 proche de 1 avec un minimum de classes (si nb classes =n alors R^2=1)

Il peut servir pour

- Comparer deux partitionnements ayant le <u>même nombre de classes</u>
- Sélectionner le nombre de classes (courbe R^2 *vs* nb classes. on choisit le dernier saut important du R^2)

MÉTHODE DES K-MEANS

```
                Algorithme
Etape 1 : Choisir C individus au hasard
          comme centres initiaux des
          classes
Etape 2 : On calcule les distances entre
          chaque individu et chaque centre
          de classe, et on affecte
          l'individu à la classe la plus
          proche
Etape 3 : On remplace les centres des
          classes par  les C barycentres
          des classes définies à l'étape 2
Etape 4 : On itère à partir de l'étape 2
          jusqu'à convergence
```



Basé sur la distance entre individus

Caractéristiques

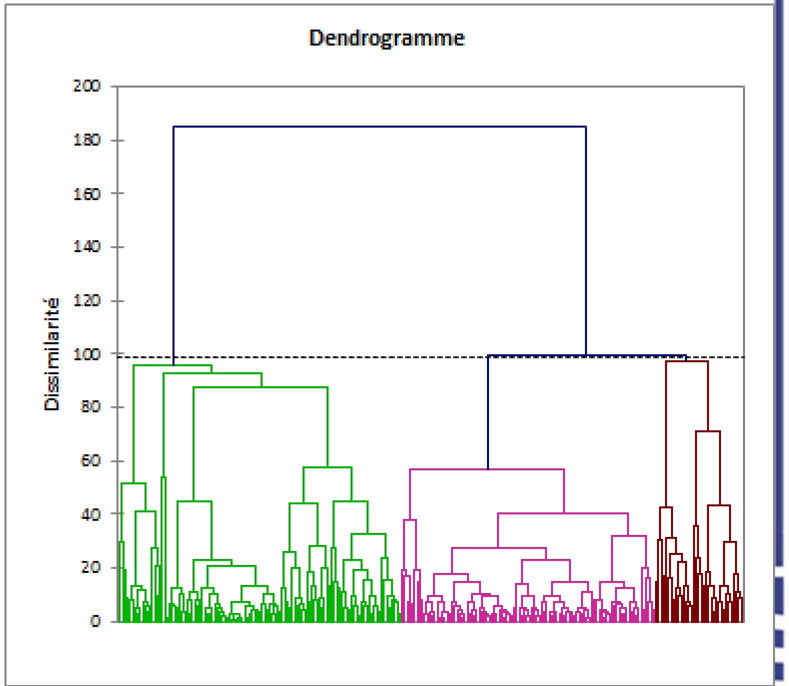
- Variables numériques
- Dépend de l'initialisation des centres $\Rightarrow$ répéter plusieurs fois l'algorithme
- Nombre C de classes fixé à l'avance $\Rightarrow$ tester plusieurs valeurs de C (s'aider d'une ACP)
- Distance euclidienne $\Rightarrow$ ne forme que des groupes sphériques
- Un individu atypique est détecté car il forme une classe à lui tout seul (en général)
- Complexité linéaire $\Rightarrow$ adapté à de grands volumes de données

Classification hiérarchique ascendante (1/2)

```
                Algorithme
Etape 1 : Chaque individu forme une classe
          (n classes)
Etape 2 : On calcule les distances entre
          les classes et on regroupe les
          deux classes les plus proches
          (C classes → C-1 classes)
Etape 3 : On itère à partir de l'étape 2
          jusqu'à n'avoir qu'une seule
          classe
Etape 4 : Choix du partitionnement à
          partir de dendrogramme
```

Basé sur la distance entre classes

Le dendrogramme représente la suite de partitions obtenues au cours de l'algorithme. L'axe des ordonnées représente une mesure de dissimilarité/inertie inter-classes (R^2 partiel,…). Comme la perte d'inertie inter-classes doit être minimale, c'est-à-dire que les classes doivent être les plus dissemblables possibles, on coupe le dendrogramme où la hauteur des branches est élevée.



CAH (2/2)

<u>Caractéristiques</u>

- Regroupe des individus ou des variables dès qu'il y a une notion de distance
- Pas de dépendance à l'initialisation
- Nombre de classes non fixé à l'avance
- formes diverses des groupes grâce au choix de la distance
- A chaque étape le partitionnement dépend de celui obtenu avant $\Rightarrow$ Optimum local
- Complexité exponentielle de l'algorithmique

Méthodes non hiérarchiques

- ✓ Il faut avoir une idée a priori du nombre de classes
- ✓ L'initialisation de l'algorithme peut avoir un impact sur la partition finale
- ✓ L'algorithme converge assez vite (complexité linéaire)

Algorithme hiérarchiques

- ✓ La complexité de l'algorithme est exponentielle
- ✓ L'algorithme est glouton
- ✓ On n'a pas besoin de connaitre à l'avance le nombre de classes

Un bon compromis

- ✓ Démarrer avec une CAH pour connaitre le nombre de classes
- ✓ Appliquer ensuite une méthode non hiérarchique avec le nombre de classes trouvé

Remarque : Possibilité de faire des classes avec recouvrement. Un objet possède alors une probabilité d'appartenir à tel ou tel segment. On parle alors de « fuzzy clustering »

Avez-vous des questions?

Documents ayant servis à la rédaction des slides et TD :

- *DataMining et Statistiques décisionnelles, Stéphane Tufféry, Ed. Technip*