UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

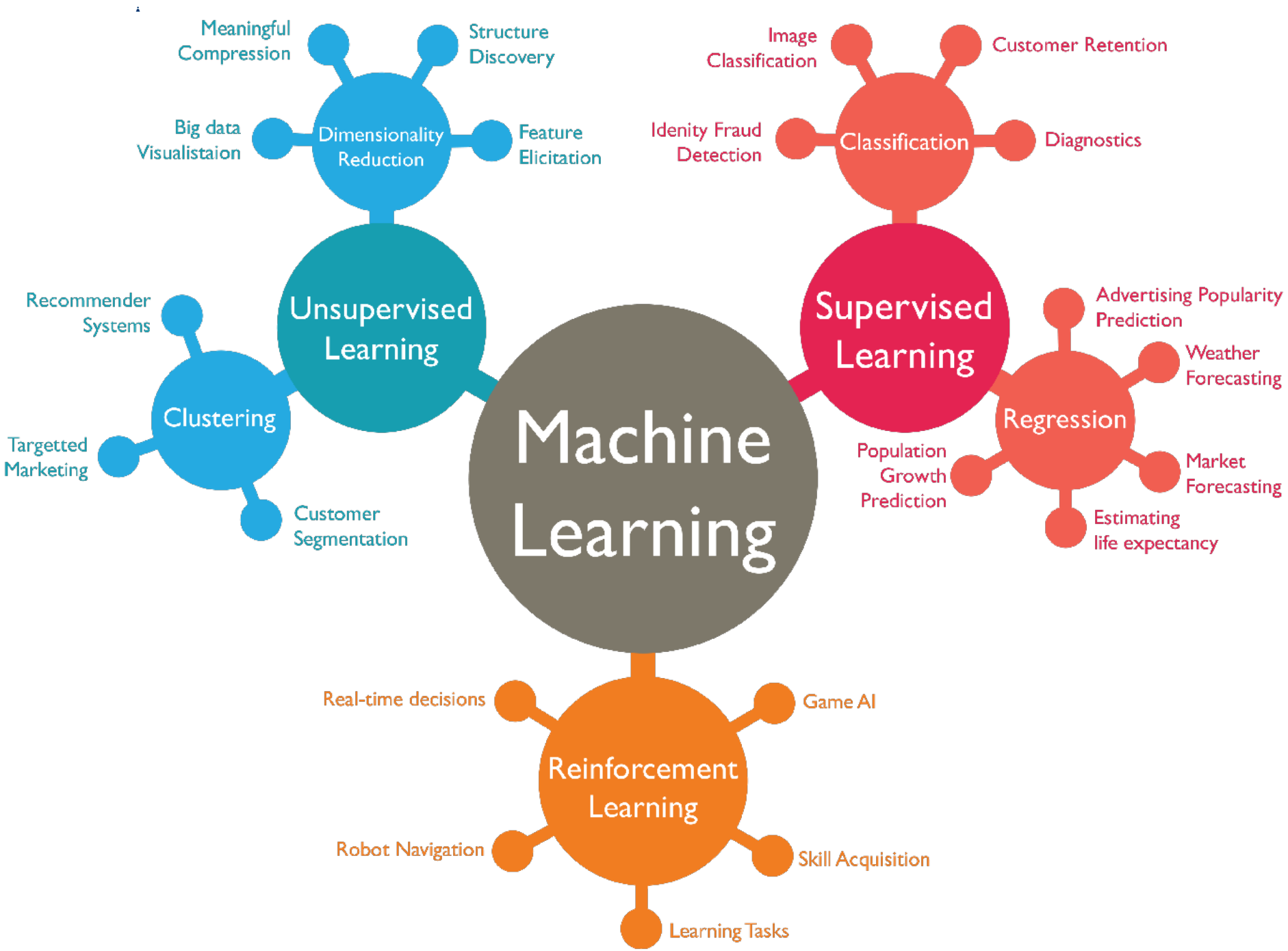
Clustering

(= Classification non-supervisée)

Fichiers sur

https://github.com/mkirschpin/CoursPython

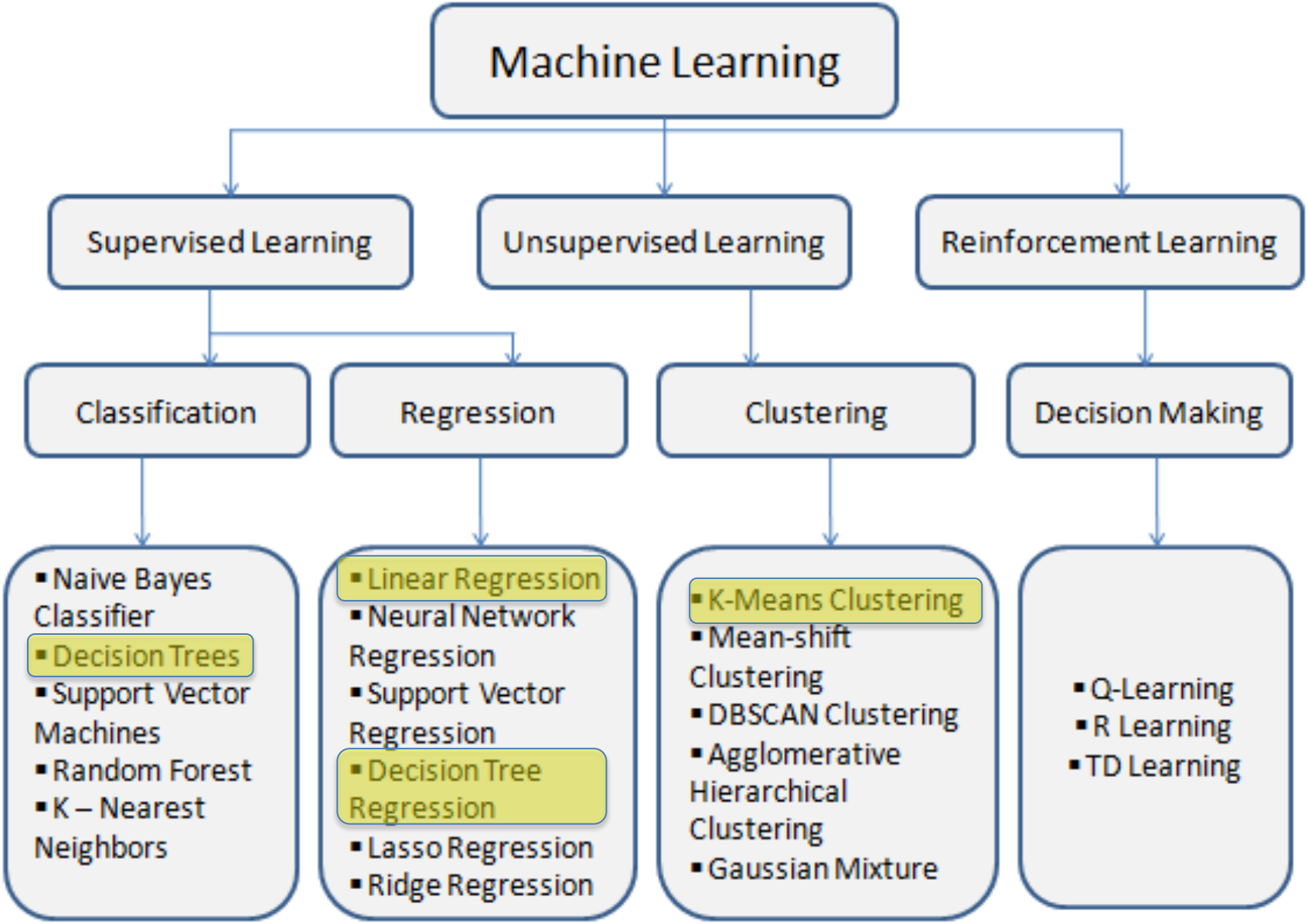
http://kirschpm.fr/cours/PythonDataScience/



https://wordstream-files-prod.s3.amazonaws.com/s3fs-public/machine-learning.png

UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT

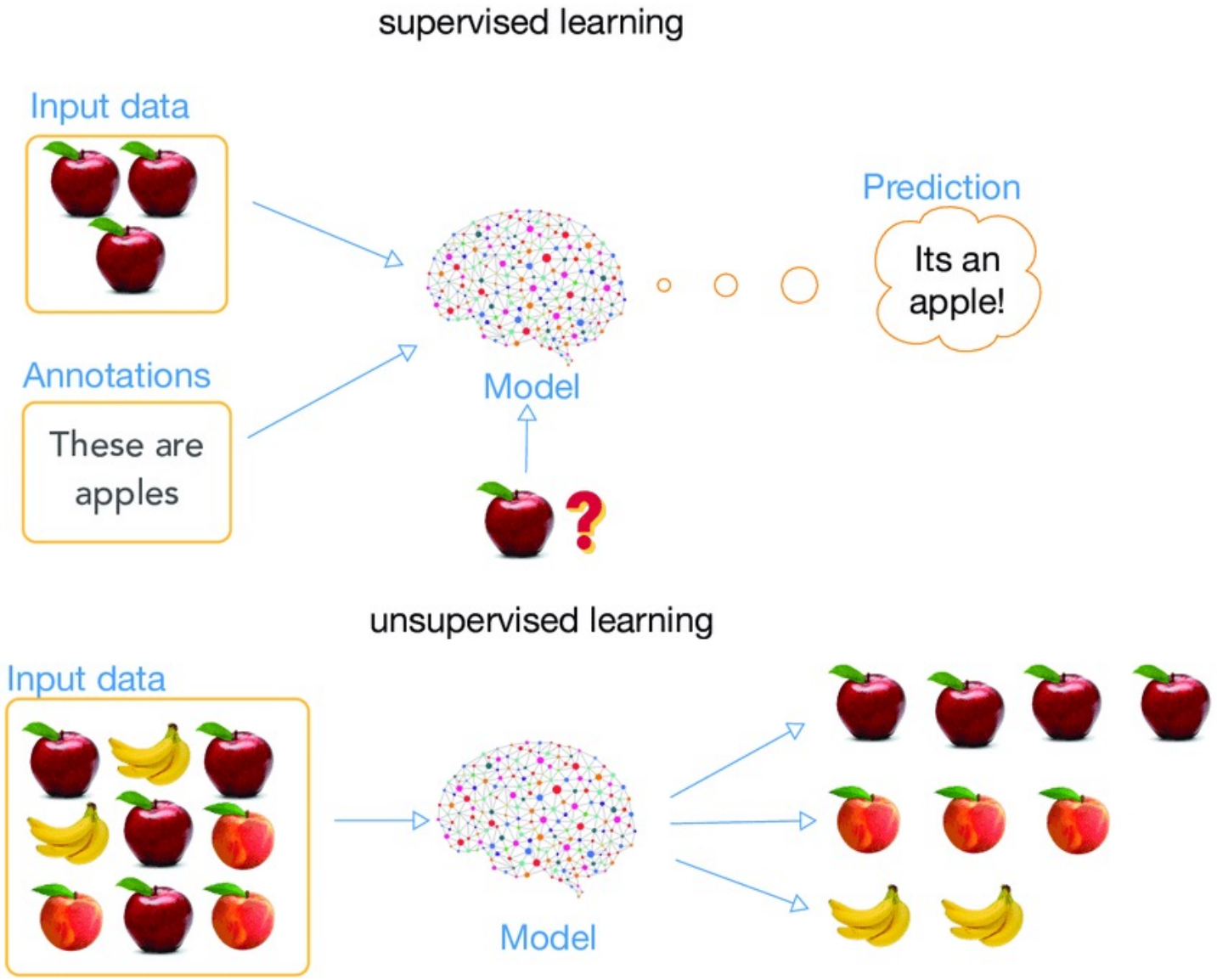
Types of Machine Learning



https://www.analyticsvidhya.com/blog/2021/03/everything-you-need-to-know-about-machine-learning/

UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Apprentissage supervisé / non supervisé

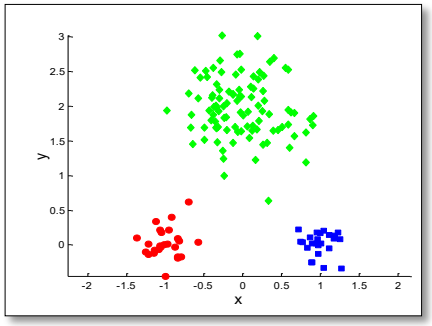


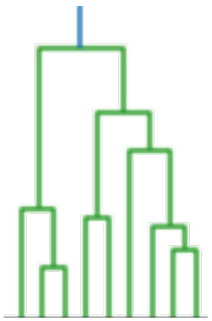
Ma, Y., Liu, K., Guan, Z., Xu, X., Qian, X., & Bao, H. (2018). Background augmentation generative adversarial etworks (BAGANs): Effective data generation based on GAN-augmented 3D synthesizing. *Symmetry*, *10*(12), 734.

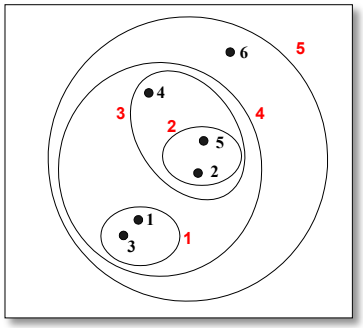
UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

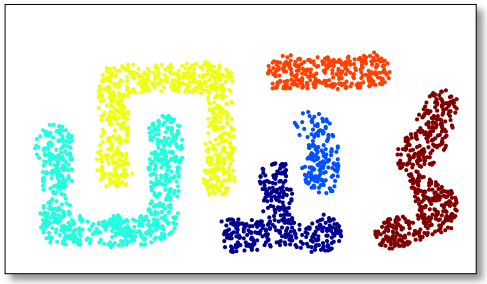
Trois grands types de clustering

- Séparer les éléments en groupes (***clusters***) **disjoints**
- Les clusters ne sont **pas connus à l'avance**
- **Clustering par partition**
  - Une division des données en **sous-ensembles (clusters)** « patatoides »
  - Ex.: K-Means, K-Medians, Fuzzy C-Means
- **Clustering hiérarchique**
  - Un ensemble de ***clusters*** **emboités** les uns dans les autres, avec une **structure hiérarchique (arbre)**
  - Ex.: Agglomerative (linkage), Divisive
- **Clustering par densité**
  - Une division en ***clusters*** s'appuie sur la **densité** estimée des clusters
  - Ex.: DBScan









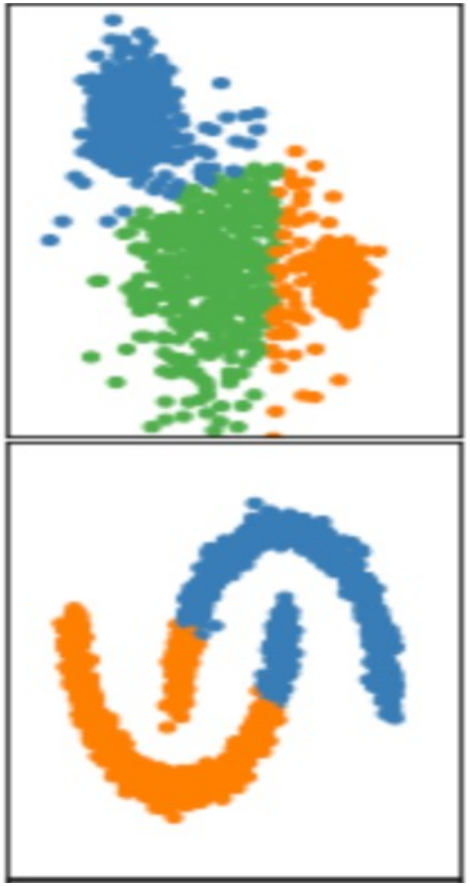
UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Clustering par Partition (le plus utilisé)

- Une bonne méthode de **regroupement**
  - Exemple d'application : customer segmentation

- Permet de garantir :
  - Une **grande** **similarité** **intra-groupe**
  - Une **faible** **similarité** **inter-groupe**

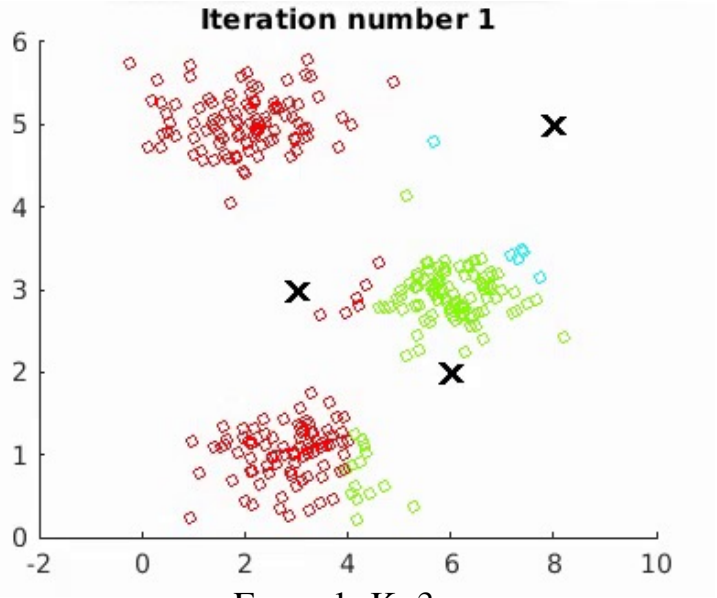
- **Quelques limitations :**
  - N'est pas adapté à des « formes » complexes
  - Peut produire des résultats différents à chaque exécution



UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Fonctionnement K-means

- Prendre **K** points (au hasard) comme centroïdes initiaux
- Répéter
  - Former K clusters en assignant les points à leur centroïde le **plus proche**
  - Mettre à jour le centroïde de chaque cluster jusqu'à ce que qu'aucun centroïde ne bouge



Exemple K=3

- **Notion de distance**
  - Chaque cluster contient **les points les plus proches**
    - Distance Euclidienne ≈ **métrique MSE**
    - **Attention à la Normalisation**
- **Aucune étiquette n'est nécessaire**

Clusters peuvent être interprétés

UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

K-means

```
from sklearn.cluster import KMeans
```

Création objet modèle

```
means = KMeans(n_clusters=3)
```

*On doit indiquer le nombre de clusters **K***

*On **construit** le modèle (**fit**)*

```
means.fit(X)
```

Ou

```
labels = means.fit_predict(X)
```

*Dataframe avec les données (**features**) en entrée*
*(sans colonne 'target' car apprentissage **non supervisé**)*

```
means.labels_
```

*On **récupère** les labels (clusters) attribués à chaque valeur*

```
means.cluster_centers_
```

*On **récupère** le centre (centroide) de chaque clusters*

UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Fonctionnement K-means (hyperparamètres)

- Choix des **centroides de départ** est **déterminant**
  - Mauvais choix → difficultés à converger → résultat + médiocre
- **Hyperparamètres** : ***init*** et ***n_init***
  - **init** : méthode d'initialisation
    - Valeurs : **k-means++**, random ou n-array *(k clusters, n features)*
  - **n_init** : nb de fois l'algo sera exécuté avec ≠ *centroid seeds*
    - Valeur par défaut : 10

```
means = KMeans(init='k-means++',
               n_init=12,
               n_clusters=3)
```

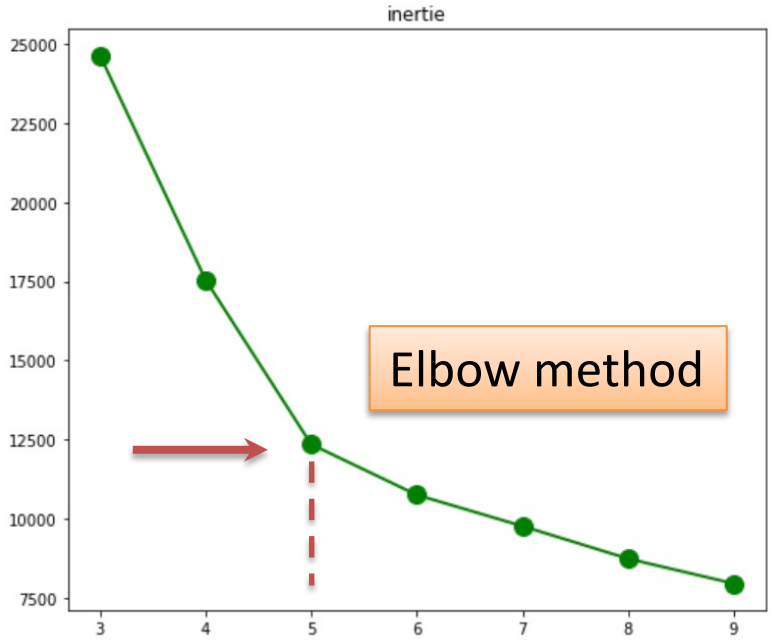
```
means = KMeans(init='random',
               n_clusters=3,
               n_init=12)
```

```
import numpy as np

centroids = np.array( [ [-15, 10],
                        [5, 8],
                        [-10, 10],
                        [5,-5] ] )

means = KMeans(init=centroids,
               n_clusters=4,
               n_init=1)
```

UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Fonctionnement K-means (choix du k)

- **Comment choisir son K ?**
  - Tester des multiples valeurs !
- Comment **évaluer** la qualité de son cluster ?
  - ***Pas de labels*** disponibles (« **ground truth** »)



Inertie (attribut ***inertia_***)

- Somme des distances au carré entre un point et son centroide
- Une faible inertie correspond à une **faible distance intra-cluster**
- Inertie 0 théorique : autant des clusters que des points

```
means.inertia_
```

UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Fonctionnement K-means (choix du k)

- **Silhouette Score**
  - À quel point un élément est similaire à son propre cluster comparé aux éléments sur les autres clusters

$$silhouette = \frac{B - A}{\max(A, B)}$$

A → distance moyenne entre un point et les autres points du ***cluster plus proche (inter-cluster)***

B → distance moyenne entre un point et les autres points de ***son cluster (intra-cluster)***

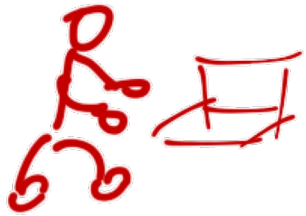
Score entre [-1, 1]
1 → clusters **+ dense** et **mieux séparés**

```
from sklearn.metrics import silhouette_score

scoef = silhouette_score(X,means.labels_)
```

*On lui indique les données (**X**) et les **labels** obtenus*

UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Hands On !



- **Etude du dataset**
  - Créer le **DataFrame avec les données aléatoires**

On n'oublie pas les **imports**

```
import pandas as pnd
from sklearn.datasets import make_blobs

x,y = make_blobs(n_samples=150, centers=4, n_features=2,
                 cluster_std=[1, 1.5, 2, 2.3], random_state=42)


df_blobs = pnd.DataFrame ({'x1' : x[:,0] ,
                           'x2' : x[:,1],
                           'y' : y })

df_blobs.sample(25)
```

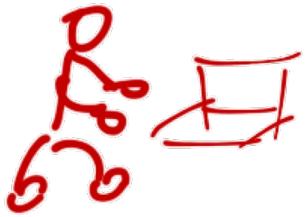
Création d'un dataset de 150 éléments plus ou moins dispersés autour de 4 centres

	x1	x2	y
53	-2.972615	8.548556	0
27	-2.165579	7.251246	0
121	-10.193867	9.277608	3
141	-1.696672	10.370526	0

***Deux features** seulement pour rendre la visualisation plus facile*

UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

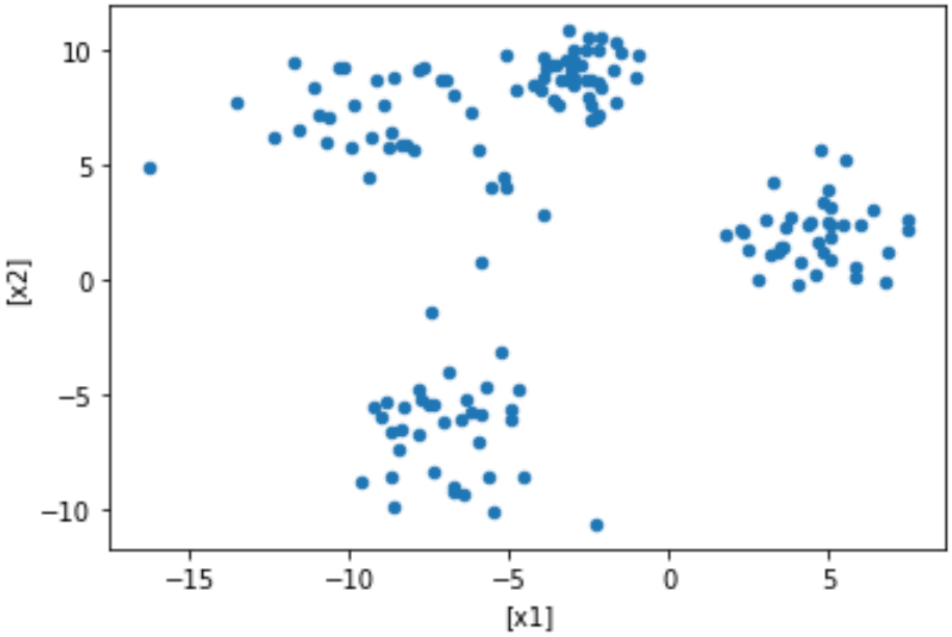
Hands On !



- Visualisation des données
  - On peut afficher les données sur un plan 2D

```
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline


df_blobs.plot(kind='scatter',
                x=['x1'], y=['x2'])
```

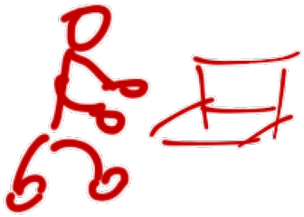
*Création d'un graphique de type **scatter***
*à partir de notre **dataframe***



L'observation des différentes combinaisons de *features 2 par 2* peut nous montrer les *features* les plus propices à la séparation en clusters

UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Hands On !



- **Exemple clustering**
  - Créer le modèle K-Means
  - Entraîner le modèle

On va d'abord **éliminer la colonne y,** et ne garder que les features.

```
X = df_blobs.drop(columns=['y'])
```

On n'oublie pas l'import

```
from sklearn.cluster import KMeans
```

*Méthode d'initialisation : **k-means++***

```
km = KMeans(init='k-means++', n_clusters=3)
```

*Création du modèle **avec 3 classes (K = 3)***

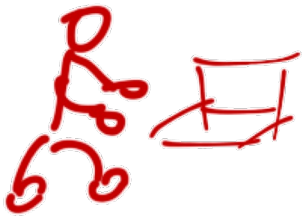
Entrainement du modèle (seulement avec les features)

```
km.fit( X )
```

Important :** modèle non supervisé, donc on ne fournit pas de target avec le **fit

UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Hands On !



- **Exemple clustering**
  - Afficher les labels créés lors du clustering :

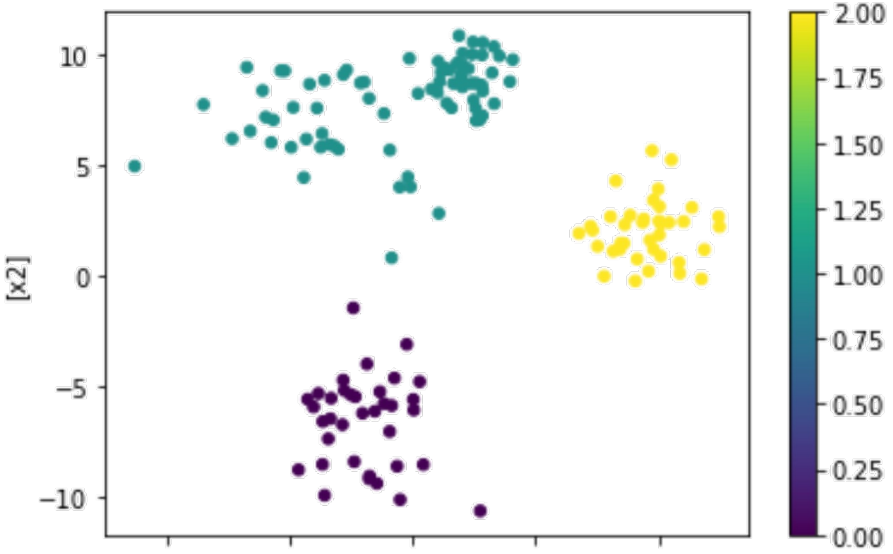
```
print(km.labels_)
```

```
[1 1 1 2 0 0 1 1 0 0 1 1 2 1 0 2 1 2 2 2 1 1 0 1 0 1 1 1 1 2 2 1 0 1 2 2 0
 1 0 1 2 1 1 1 0 2 1 0 1 1 2 2 2 1 1 1 2 0 1 1 1 1 1 0 0 2 0 0 2 2 1 1 2 1
 1 2 2 0 2 1 1 1 1 0 2 1 2 0 1 2 1 2 1 1 0 2 1 1 1 2 0 0 1 1 0 1 1 2 2 1 0
 2 2 1 1 2 1 0 1 1 1 1 2 1 1 0 1 0 2 1 1 1 2 0 1 0 0 0 2 1 1 1 0 0 1 1 0 1
 1 0]
```

  - Visualisation

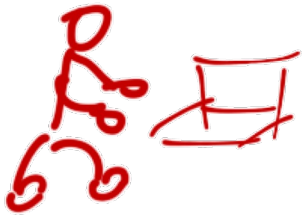
```
df_blobs.plot(kind='scatter',
              x=['x1'], y=['x2'],
              c=km.labels_,
              colormap='viridis')
```

On utilise les labels comme indicateur de couleur dans l'échelle « viridis ».



UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Hands On !

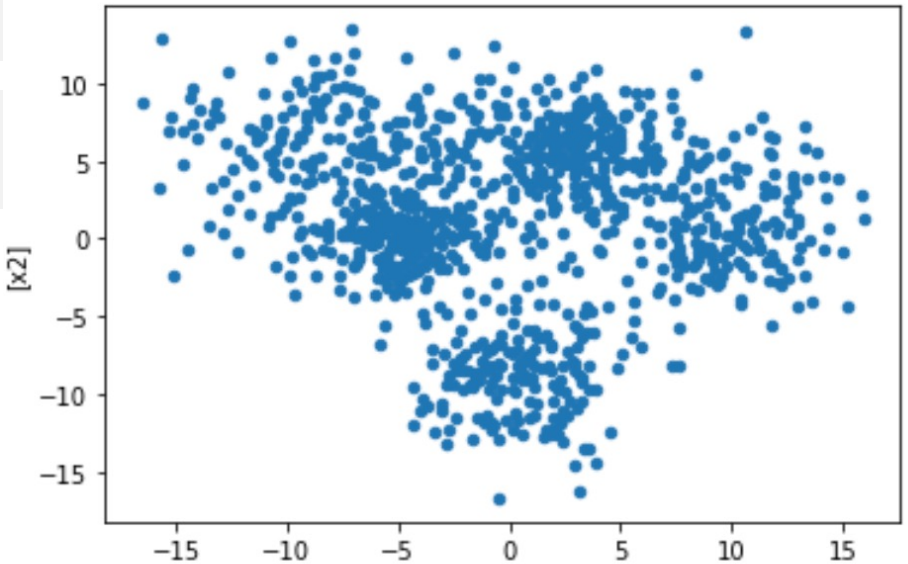


- **Exemple clustering : comment trouver le bon K ?**
  - On va tester plusieurs valeurs de K
  - Pour plus de fun : on va augmenter le nombre de points dans le dataset

```
x,y = make_blobs(n_samples=1000, centers=6, n_features=2,
                 cluster_std=[3.5, 4.5, 3.0, 2.5, 1.5, 2.0],
                 random_state=7)

X = pnd.DataFrame ({'x1' : x[:,0] , 'x2' : x[:,1] })

X.describe()
```

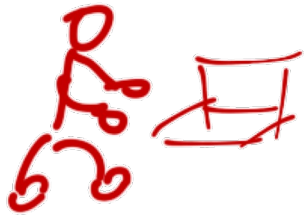
```
X.plot(kind='scatter', x=['x1'],
                       y=['x2'])
```

	x1	x2
count	1000.000000	1000.000000
mean	-0.160541	1.148996
std	6.515354	5.811310
min	-16.541976	-16.697765



UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Hands On !



- **Exemple clustering : comment trouver le bon K ?**
  - Définir les valeurs de K à tester
  - Enregistrer les valeurs d'inertie et le Silhouette score pour les comparer

```
from sklearn.metrics import silhouette_score

n_clusters = [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9]
inerties = []
silhouettes = []
```

On n'oublie pas l'import

On va tester le K de 3 à 9

Deux tableaux pour garder l'inertie et le silhouette score

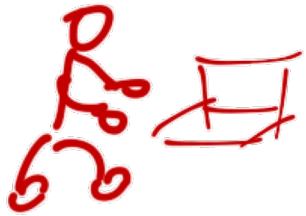
Pour chaque valeur de k, on va créer un modèle

```
for k in n_clusters :
    km = KMeans(n_clusters=k, init='k-means++', n_init=12,  random_state=7)
    km.fit(X)

    scoef = silhouette_score(X,km.labels_)

    inerties.append(km.inertia_)
    silhouettes.append(scoef)

    print ('inertie =', km.inertia_,'silhouette score=', scoef)
```

Puis, on récupère le score silhouette et l'inertie et on les garde

UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Hands On !



- **Exemple clustering : comment trouver le bon K ?**
  - On peut aussi afficher les clusters et leurs centroide

Pour chaque valeur de k, on va créer un modèle

```
for k in n_clusters :
    km = KMeans(n_clusters=k, init='k-means++', n_init=12,  random_state=7)
    km.fit(X)

    scoef = silhouette_score(X,km.labels_)

    inerties.append(km.inertia_)
    silhouettes.append(scoef)

    fig, ax = plt.subplots(1,1, figsize=(10,5) )
    X.plot(kind='scatter', x=['x1'], y=['x2'], c=km.labels_,
           colormap='viridis', ax=ax, title=f'{k} clusters')

    ax.plot(km.cluster_centers_[:,0], km.cluster_centers_[:,1],'k^', ms=12,
                                                              alpha=0.35)
```

Puis, on récupère le score silhouette et l'inertie et on les garde

Création de la figure et plot des points colorés avec leur label.

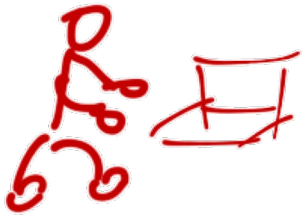
Plot des centroides

L'attribut cluster_centers_ est une liste contenant le centroide de chaque cluster.

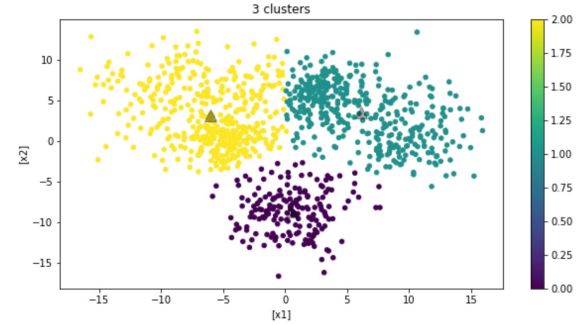
`km.cluster_centers_[:,0]` *donne les 'x1' des centroides,* `km.cluster_centers_[:,1]` *le 'x2'*

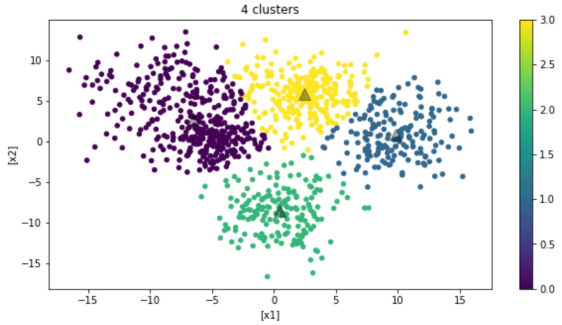
UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

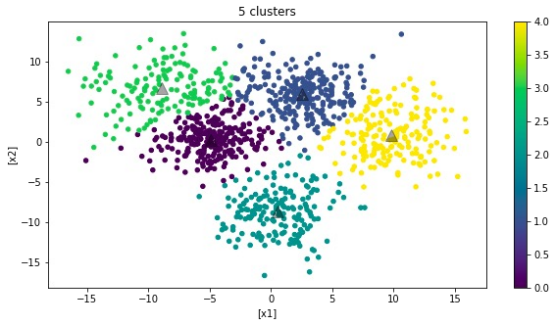
Hands On !

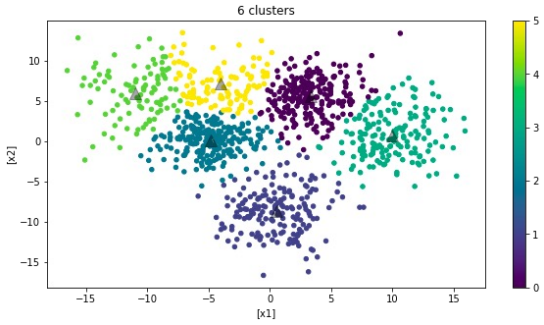


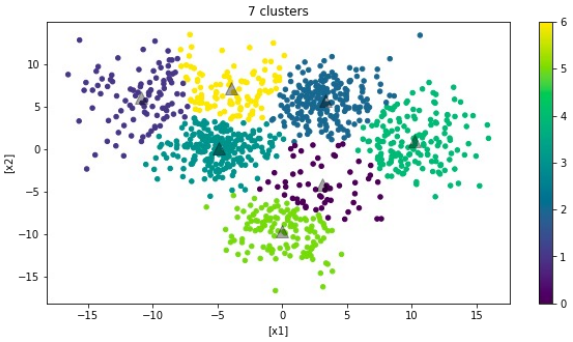
- **Exemple clustering : comment trouver le bon K ?**
  - On peut aussi afficher les clusters et leurs centroide

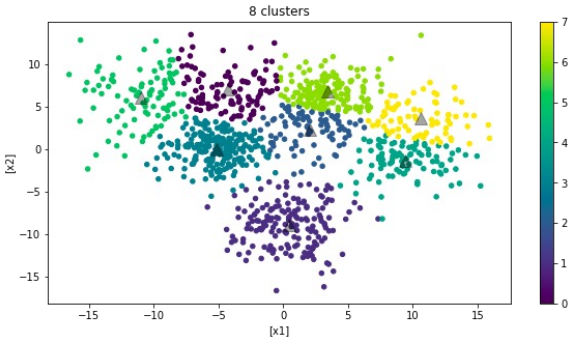






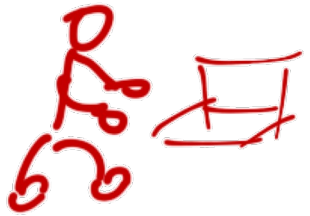






UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Hands On !



- **Exemple clustering : comment trouver le bon K ?**
  - Comparer les valeurs d'inertie et le score silhouette

```
fig, axs = plt.subplots(1,2, figsize=(18,7) )

axs[0].set_title('inertie')
axs[0].plot(n_clusters,inerties, marker='o', color='green',
                                 linewidth=2, markersize=12)

axs[1].set_title('silhouette score')
axs[1].plot(n_clusters,silhouettes, marker='+',
                    color='darkblue',
                    linewidth=2, markersize=12)
```

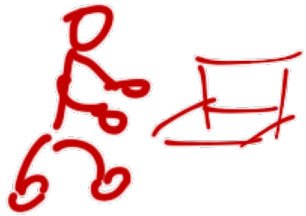
Création de l'espace pour 2 figures côté à côté.

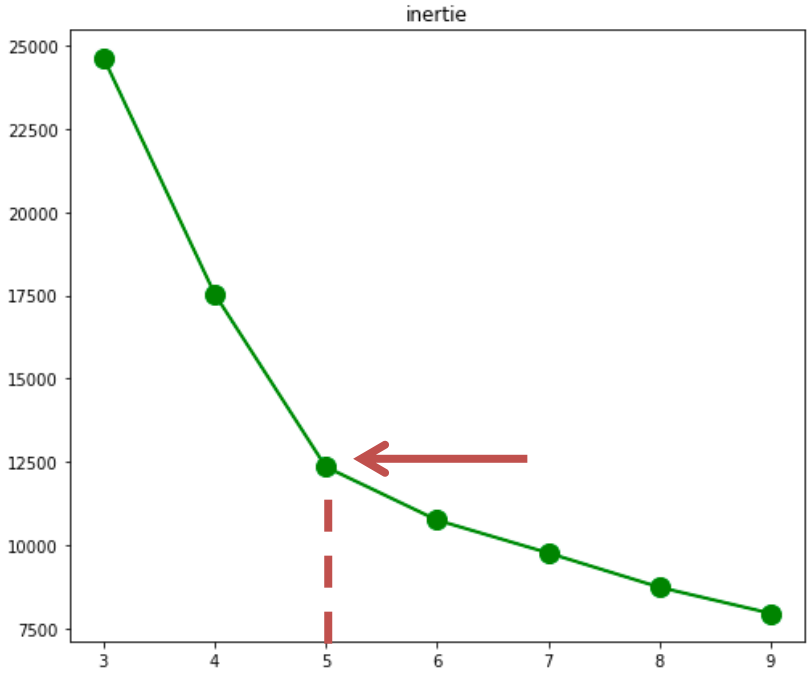
*Dans le 1er espace (**axs[0]**), on plotte les valeurs de k (**n_clusters**) vs les **inerties.***

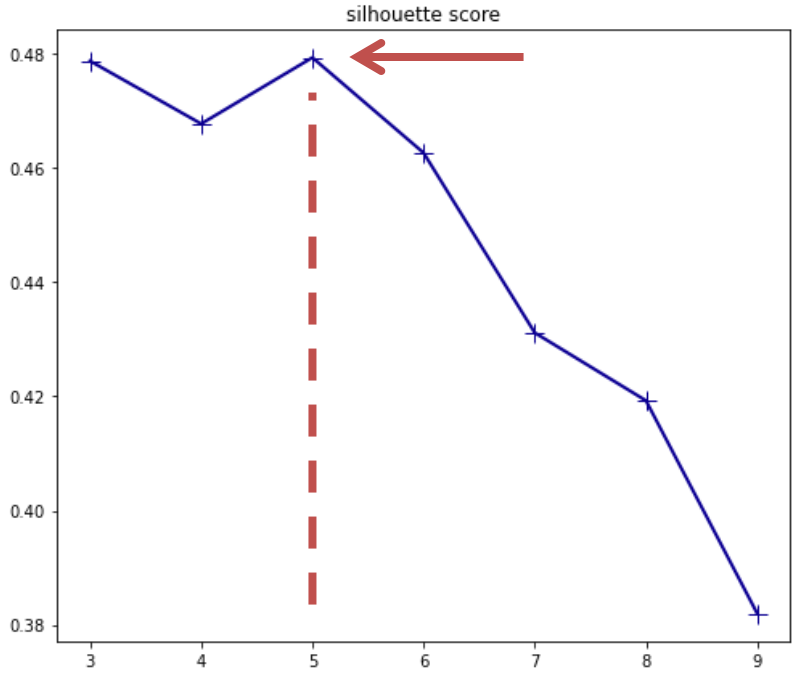
*Au 2ème espace (**axs[1]**), on plotte les valeurs de k (**n_clusters**) vs les valeurs du score **silhouette.***

UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Hands On !

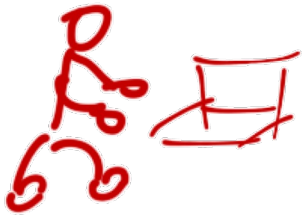






UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Hands On !



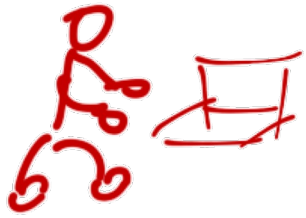
- **Exemple : Analyse Titanic**
  - « Segmentation » des passager du Titanic
    - Mieux comprendre la population, pas que en fonction de la survie
  - Dataset avec plus de features : **titanic.csv**
    - Survival, Sex, Age
    - pclass: Ticket class (1 = 1st, 2 = 2nd, 3 = 3rd)
    - sibsp: nb de personne de la famille (enfant, épouses…)
    - parch: nb de parents / enfants

```
import pandas as pnd

df_titanic = pnd.read_csv('titanic.csv',
                          delimiter=',',
                          header=[0])

df_titanic.info()
```

```
RangeIndex: 891 entries, 0 to 890
Data columns (total 12 columns):
 #   Column       Non-Null Count  Dtype
---  ------       --------------  -----
 0   PassengerId  891 non-null    int64
 1   Survived     891 non-null    int64
 2   Pclass       891 non-null    int64
 3   Name         891 non-null    object
 4   Sex          891 non-null    object
 5   Age          714 non-null    float64
 6   SibSp        891 non-null    int64
 7   Parch        891 non-null    int64
 8   Ticket       891 non-null    object
```

UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Hands On !



- **Exemple : Analyse Titanic**
  - Nettoyage des données
    - Supprimer les colonnes qui ne nous intéressent pas
    - Remplir les données manquantes (âge notamment)

```
df_titanic.drop(columns=['PassengerId','Name','Ticket','Fare','Cabin', 'Embarked'],
                inplace=True)

df_titanic['Age'].fillna (df_titanic['Age'].mean(),inplace=True)

df_titanic.info()
```

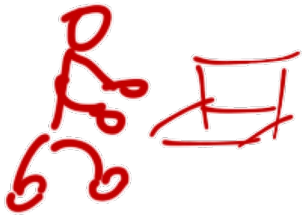
```
RangeIndex: 891 entries, 0 to 890
Data columns (total 6 columns):
 #   Column    Non-Null Count  Dtype
---  ------    --------------  -----
 0   Survived  891 non-null    int64
 1   Pclass    891 non-null    int64
 2   Sex       891 non-null    object
 3   Age       891 non-null    float64
 4   SibSp     891 non-null    int64
 5   Parch     891 non-null    int64
```

```
df_titanic.sample(15)
```

	Survived	Pclass	Sex	Age	SibSp	Parch
437	1	2	female	24.000000	2	3
343	0	2	male	25.000000	0	0
226	1	2	male	19.000000	0	0
383	1	1	female	35.000000	1	0
309	1	1	female	30.000000	0	0
119	0	3	female	2.000000	4	2

UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Hands On !



- **Exemple : Analyse Titanic**
  - Nettoyage des données
    - Il faut « encoder » la colonne « Sex »

```
df_titanic = pnd.get_dummies(df_titanic, columns=['Sex'],drop_first=True)

df_titanic.info()
```

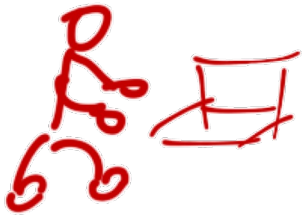
  - Créer des nouvelles colonnes : **NbFamily** et **Alone**

```
df_titanic['FamilyNb'] = df_titanic['SibSp'] + df_titanic['Parch']
df_titanic['Alone'] = ( df_titanic['FamilyNb'] == 0)

df_titanic.drop(columns=['SibSp','Parch'],
                inplace=True)

df_titanic.info()
```

```
RangeIndex: 891 entries, 0 to 890
Data columns (total 6 columns):
 #   Column    Non-Null Count  Dtype
---  ------    --------------  -----
 0   Survived  891 non-null    int64
 1   Pclass    891 non-null    int64
 2   Age       891 non-null    float64
 3   Sex_male  891 non-null    uint8
 4   FamilyNb  891 non-null    int64
 5   Alone     891 non-null    bool
```

UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Hands On !



- **Exemple : Analyse Titanic**

	Survived	Pclass	Age	Sex_male	FamilyNb	Alone
699	0	3	42.000000	1	0	True
206	0	3	32.000000	1	1	False
592	0	3	47.000000	1	0	True
817	0	2	31.000000	1	2	False
430	1	1	28.000000	1	0	True

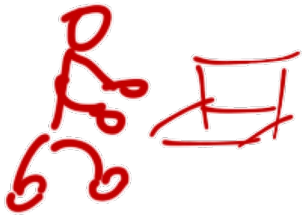
```
df_titanic.sample(15)
```

```
df_titanic. describe()
```

	Survived	Pclass	Age	Sex_male	FamilyNb
count	891.000000	891.000000	891.000000	891.000000	891.000000
mean	0.383838	2.308642	29.699118	0.647587	0.904602
std	0.486592	0.836071	13.002015	0.477990	1.613459
min	0.000000	1.000000	0.420000	0.000000	0.000000
25%	0.000000	2.000000	22.000000	0.000000	0.000000
50%	0.000000	3.000000	29.699118	1.000000	0.000000
75%	1.000000	3.000000	35.000000	1.000000	1.000000
max	1.000000	3.000000	80.000000	1.000000	10.000000

UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Hands On !



- **Exemple : Analyse Titanic**
  - Construction du modèle

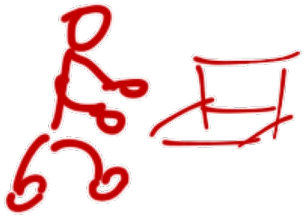
```
from sklearn.cluster import KMeans

km = KMeans(n_clusters=4, random_state=42)

km.fit(df_titanic)

print(km.inertia_)

print (df_titanic.columns)
print (km.cluster_centers_)
```

```
21081.28798483158
```

```
Index(['Survived', 'Pclass', 'Age', 'Sex_male', 'FamilyNb', 'Alone'], dtype='object')
[[3.60000000e-01 2.48000000e+00 2.08400000e+01 6.20000000e-01
  7.44000000e-01 6.32000000e-01]
 [3.73239437e-01 1.71126761e+00 5.16408451e+01 6.90140845e-01
  6.47887324e-01 6.05633803e-01]
 [5.79710145e-01 2.63768116e+00 4.77057971e+00 5.36231884e-01
  3.27536232e+00 2.89855072e-02]
 [3.69767442e-01 2.35348837e+00 3.16040554e+01 6.67441860e-01
  7.02325581e-01 6.76744186e-01]]
```

UNIVERSITÉ PARIS 1
PANTHÉON SORBONNE
ÉCOLE DE MANAGEMENT
DE LA SORBONNE

Hands On !



- **Exemple : Analyse Titanic**
  - Interprétation des labels (clusters) obtenus

```
df_titanic['labels'] = km.labels_

df_titanic.groupby('labels').describe().transpose()
```

	labels	0	1	2	3
Survived	count	250.000000	142.000000	69.000000	430.000000
	mean	0.360000	0.373239	0.579710	0.369767
	std	0.480963	0.485377	0.497222	0.483304
	min	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
	25%	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
	50%	0.000000	0.000000	1.000000	0.000000
	75%	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
	max	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
Pclass	count	250.000000	142.000000	69.000000	430.000000
	mean	2.480000	1.711268	2.637681	2.353488
	std	0.756232	0.830116	0.593371	0.825398
	min	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
	25%	2.000000	1.000000	2.000000	2.000000
	50%	3.000000	1.000000	3.000000	3.000000
	75%	3.000000	2.000000	3.000000	3.000000
	max	3.000000	3.000000	3.000000	3.000000
Age	count	250.000000	142.000000	69.000000	430.000000
	mean	20.840000	51.640845	4.770580	31.604055
	std	3.361488	8.025086	3.390390	3.533436
	min	13.000000	42.000000	0.420000	27.000000
	25%	18.000000	45.000000	2.000000	29.699118
	50%	21.000000	50.000000	4.000000	29.699118
	75%	24.000000	56.000000	8.000000	34.000000
	max	26.000000	80.000000	12.000000	41.000000
Sex_male	count	250.000000	142.000000	69.000000	430.000000
	mean	0.620000	0.690141	0.536232	0.667442
	std	0.486360	0.464072	0.502339	0.471679
	min	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
	25%	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
	50%	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
	75%	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
	max	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
FamilyNb	count	250.000000	142.000000	69.000000	430.000000
	mean	0.744000	0.647887	3.275362	0.702326
	std	1.313532	1.105737	1.846173	1.573304