Big Data Analytics

Jour 3 — Algorithmes 2/2

François-Marie Giraud

ORSYS formation
https://www.orsys.fr/

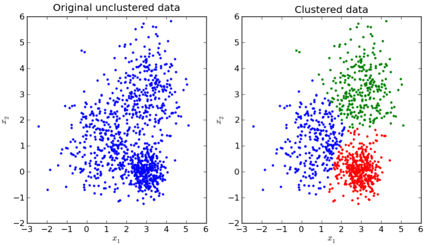
Apprentissage non-supervisé

Apprentissage non-supervisé

Introduction

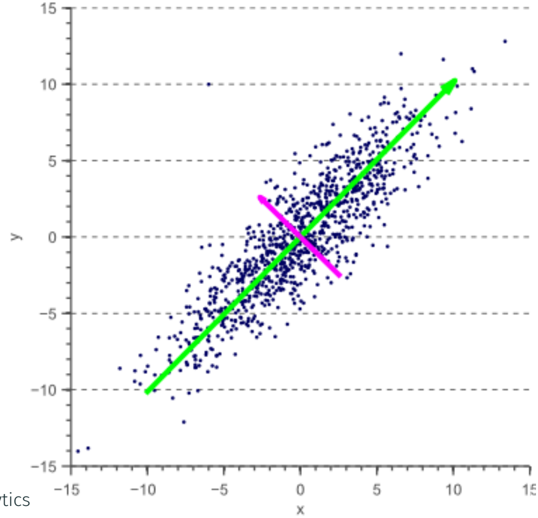
Données Non-Suppervisées

Problème : détection de variables cachées, de “structures” cachées (clusters, variété topologique (manifold), ...)

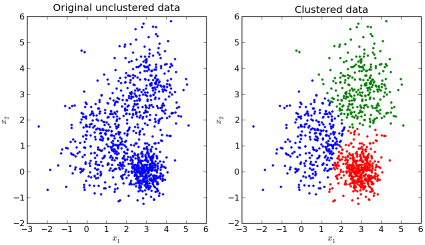


Données Non-Suppervisées

≈ Réduction de Dimensionalité



Données Non-Suppervisées

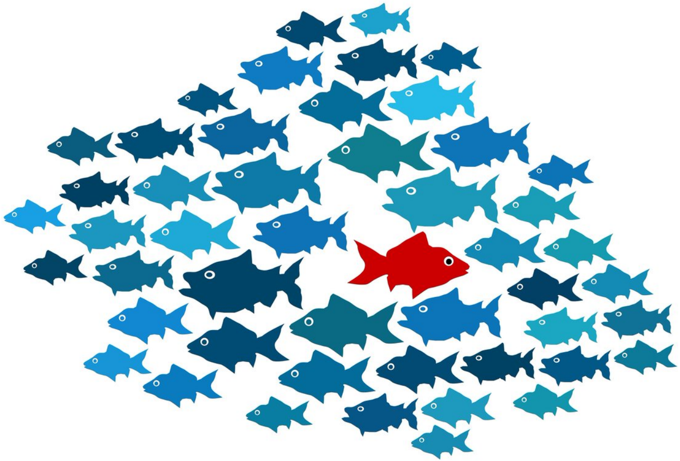


Données Non-Suppervisées

Clustering de Clients

Données Non-Suppervisées

Détection d'anomalie :



Apprentissage non-supervisé

Réduction de la dimensionalité

Réduction de la dimensionalité

Comment appréhender des données en grande dimension ?

$$X = \begin{bmatrix} X_{1,1} & X_{1,2} & \dots & X_{1,D} \\ X_{2,1} & X_{2,2} & \dots & X_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{N,1} & X_{N,2} & \dots & X_{N,D} \end{bmatrix}$$

La malédiction des grandes dimensions!

Nombre d'extrémités dans une espace de dimension :

dim	1	2	3	4	5	...
pts	2	4	8	16	32	...

Réduction de la dimensionalité

- Séléction de dimensions
- Projections linéaires (ACP, LDA, ...)
- Projections non-linéaires (kernels, neural network embeddings, ...)

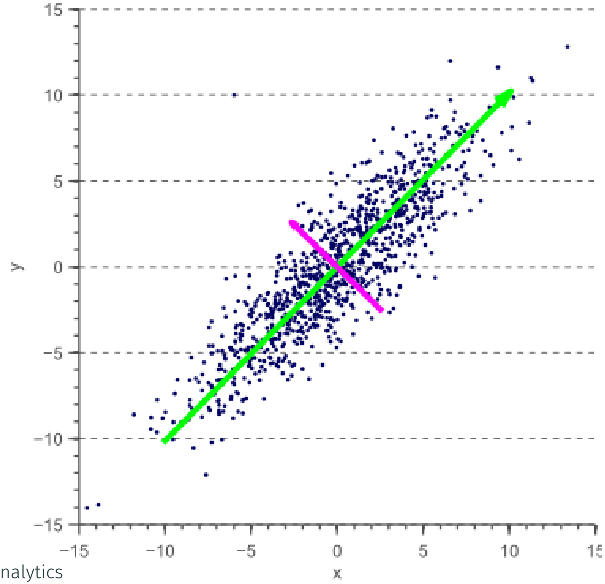
Apprentissage non-supervisé

Réduction de la dimensionalité : Projections linéaires

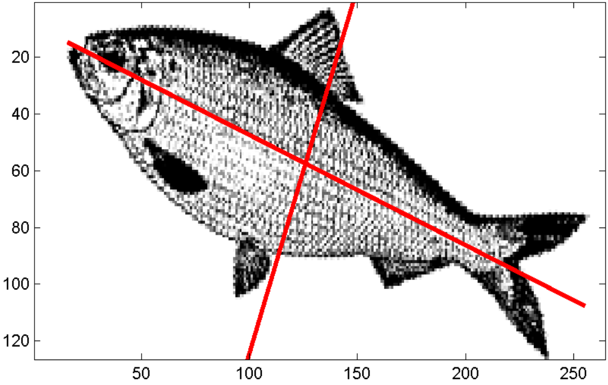
Réduction de la dimensionalité : Projections linéaires

- Principal Component Analysis (Non-supervisée)
- Linear Discriminant Analysis (Supervisée)

Réduction de la dimensionalité : PCA



Réduction de la dimensionalité : PCA



Réduction de la dimensionalité : PCA

$$X = \begin{bmatrix} X_{1,1} & \cdots & X_{1,D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{N,1} & \cdots & X_{N,D} \end{bmatrix}$$

Réduction de la dimensionalité : PCA

chaque dimension est centrée (et réduite) :

$$\bar{X} = \begin{bmatrix} X_{1,1} - \bar{X_1} & \dots & X_{1,D} - \bar{X_D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{N,1} - \bar{X_1} & \dots & X_{N,D} - \bar{X_D} \end{bmatrix}$$

ou

$$\tilde{X} = \begin{bmatrix} \frac{X_{1,1} - \bar{X_1}}{\sigma(X_1)} & \dots & \frac{X_{1,D} - \bar{X_D}}{\sigma(X_D)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{X_{N,1} - \bar{X_1}}{\sigma(X_1)} & \dots & \frac{X_{N,D} - \bar{X_D}}{\sigma(X_D)} \end{bmatrix}$$

Réduction de la dimensionalité : PCA

Matrice de covariance (resp. corrélation) :

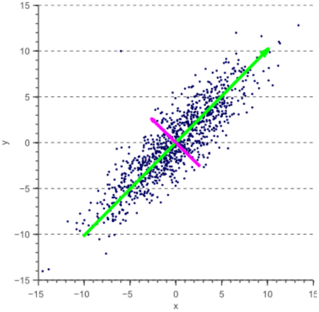
$$\frac{1}{N} * \bar{X}^T * \bar{X} \ , \ (\frac{1}{N} * \tilde{X}^T * \tilde{X})$$

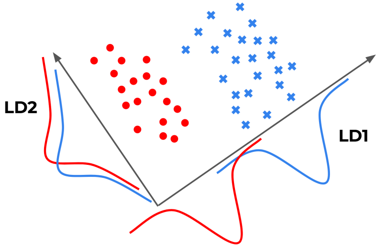
ACP :
Retrouver les valeurs et vecteurs propres de de la matrice de covariance (resp. corrélation), donc diagonaliser la matrice carrée obtenue.

Vecteur propre : vecteur permettant de projeter les données
Valeur propre : “proportion d’information” conservée par la projection suivant le vecteur propre correspondant
Réduction de dimension : On ne projette que suivant le nombre de vecteurs propres voulus

Réduction de la dimensionalité : LDA

Linear Discriminant Analysis





Apprentissage non-supervisé

Démo Sklearn

Support TP : PCA/LDA

PCA- iris dataset - Tutoriel

PCA-LDA - Tutoriel

Apprentissage non-supervisé

Variantes Spécifiques

Analyse des Correspondances Multiples (ACM)

ACP sur des données qualitatives (Ex : enquètes d'opinions avec QCM)
Chaque variable qualitative est transformé en vecteur sparse.
On obtient une matrice binaire sur laquelle on procède à l'ACP.

Analyse Factorielle pour données mixtes (AFDM)

Quand on a des variables qualitative ET quantitatives pour décrires nos échantillons, on discrétise chaque variable quantitative. On peut ainsi procéder à l'Analyse en Composantes Multiples

Analyse Factorielle des Correspondances (AFC)

Méthode sur un tableau de contingence :

Yaourts	Nantes	Bordeaux	Limoges	Tours	Poitiers	TOTAL
Ananas	14	15	9	20	20	78
Banane	15	10	14	20	21	80
Fraise	16	16	26	8	22	88
Framboise	18	14	24	20	17	93
Abricot	17	18	20	22	16	93
TOTAL	80	73	93	90	96	432

On procède alors à une double ACP (une sur le profil ligne, l'autre sur le profil colonne) en utilisant une métrique particulière : le χ^2

Avez-vous des questions ?

Apprentissage non-supervisé

Métriques de clustering

Métriques en Non-Supervisé

$$\text{coût} = \sum_i \sum_j \delta_{i,j} \left| x_j - \mu_i \right|$$

où $\delta_{i,j}$ vaut 1 si le cluster μ_i est le plus proche du point x_j, 0 sinon

Métrique : Silouhette

Points $x = \{x_1, \ldots, x_n\}$, Clusters $\mu = \{\mu_1, \ldots, \mu_k\}$.

$$\boxed{a(x_i) = \frac{1}{\#\mu_i - 1} \sum_j |x_i - x_j|}$$

$$\boxed{b(x_i) = \min_{i \neq j} \frac{1}{\#\mu_j} \sum_j |x_i - x_j|}$$

où :
$\#\mu_i$ est le nombre d'éléments de x dans le cluster μ_i
L'ensembe d'indice j ne représente que ceux des points appartenant au cluster μ_j
$a(x_i)$: distance moyenne aux autres points du cluster contenant x_i
$b(x_i)$: distance moyenne aux points du cluster le plus proche

Métrique : Silouhette

$$s_i = \frac{b_i - a_i}{\max\{a_i, b_i\}} \quad , \quad s_i = \begin{cases} 1 - a_i/b_i & \text{if } a_i < b_i \\ 0 & \text{if } a_i = b_i \\ b_i/a_i - 1 & \text{if } a_i > b_i \end{cases}$$

donc $s_i \in [-1, 1]$

$s_i \approx 1 \iff x_i$ bien clusterisé
$s_i \approx 0 \iff x_i$ au bord de 2 clusters
$s_i \approx -1 \iff x_i$ mal clusterisé

Métrique : etc

- Calinski-Harabaz index
- Davies-Bouldin Index
- ...

Apprentissage non-supervisé

Clustering Hiérarchique

Clustering Hiérarchique

Deux approches :

- Agglomérantes (bottom-up)
- Divisantes (top-down)

Classification Ascendante Hiérarchique (CAH)

Métode Agglomérante

- Chaque élément est dans une classe distincte
- On itère jusqu'à ce qu'on ait le nombre de classes voulues
- On utilise une mesure de dissimilarité inter-classe comme critère d'aggrégation

A chaque itération, on calcule la dissimilarité entre toutes les classes puis on fusionne les plus similaires.

Classification Ascendante Hiérarchique (CAH)

Quelques distances de dissimilarités, après avoir défini une distance D dans l'espace :

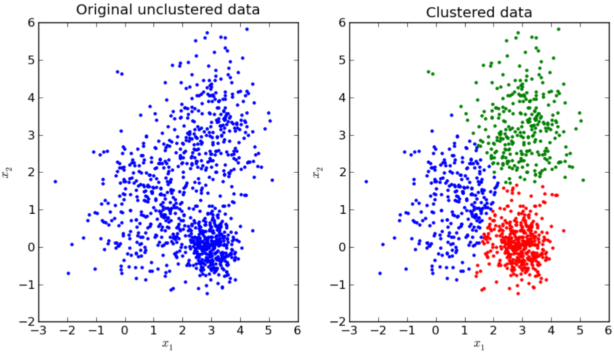
- saut minimum : $dissim(C_1, C_2) = \min_{x \in C_1, y \in C_2} D(x, y)$
- saut maximum : $dissim(C_1, C_2) = \max_{x \in C_1, y \in C_2} D(x, y)$
- saut moyen : $dissim(C_1, C_2) = \underset{x \in C_1, y \in C_2}{moyenne} \, D(x, y)$
- distance de Ward qui vise à maximiser l'inertie inter-classe
- ...

$O(n^2)$ < complexité < $O(n^3)$!

Apprentissage non-supervisé

Espérance-Maximisation

Expectation-Maximisation



Expectation-Maximisation

Input : Données, nombre de clusters, métrique
Initialisation Aléatoire
Jusqu'à clusters "stables" :

1. Calculer les "centres" de chaque cluster
2. Réassigner les clusters à tous les points

Expectation-Maximisation

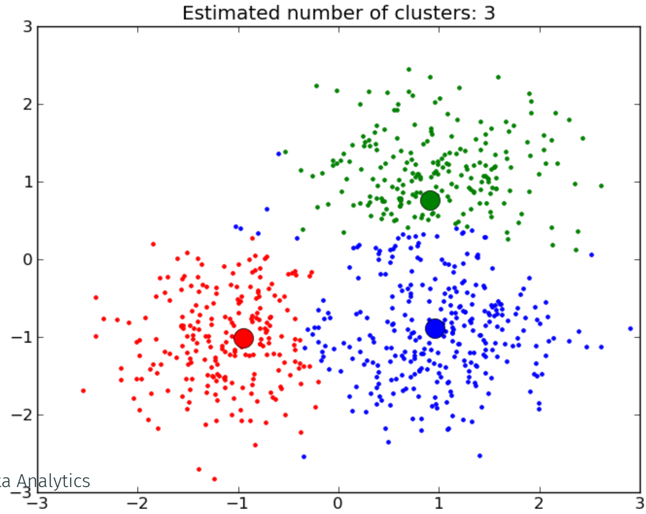
video time

Apprentissage non-supervisé

K-Means

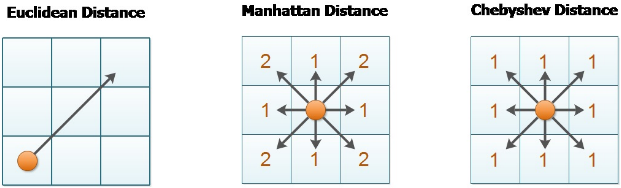
K-Means

Algorithme EM



K-Means

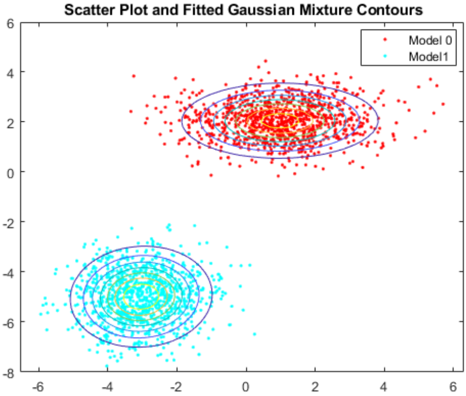
distance euclidienne, Manhattan, Chebychev



$$\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} \quad |x_1 - x_2| + |y_1 - y_2| \quad \max(|x_1 - x_2|, |y_1 - y_2|)$$

Gaussian Mixture Model

Les clusters sont représentés par un centre et une matrice de covariance.



Apprentissage non-supervisé

DBSCAN

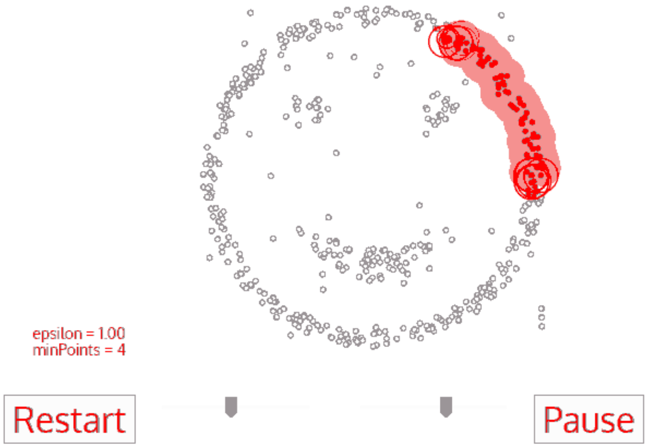
DBSCAN

Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise…

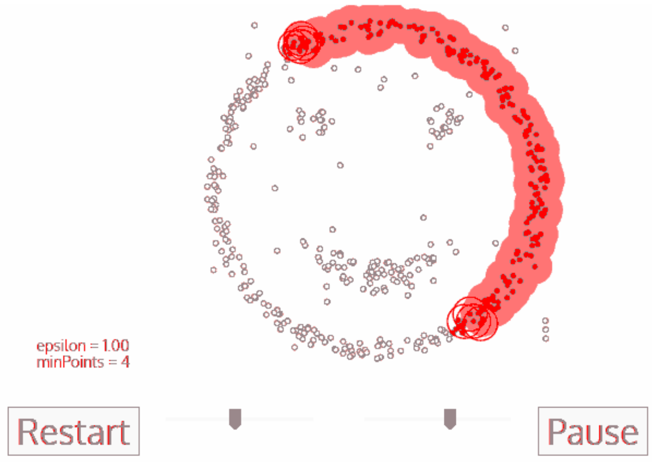
Tant qu'il reste des points non-étiquettés :

1. Prend un point non-étiquettés au hasard et on regarde son voisinage
2. Si (densité > seuil) alors (Nouveau cluster)
    2.1 Expansion du cluster de proche en proche dans le voisinage
3. Sinon (Bruit)

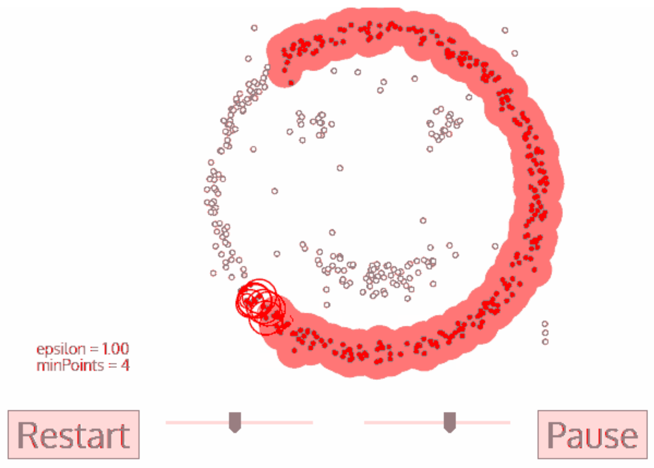
DBSCAN



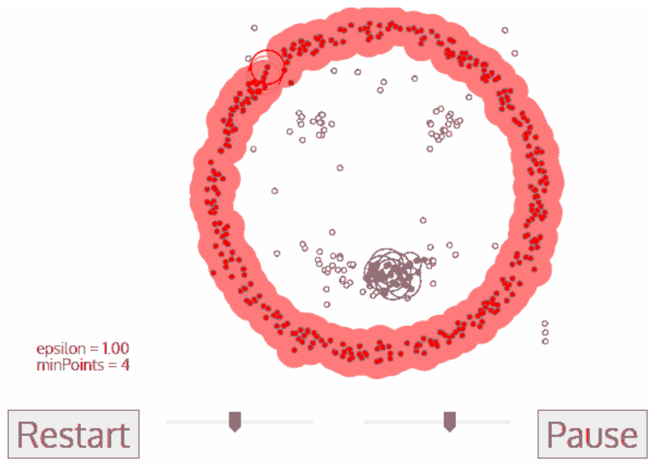
DBSCAN



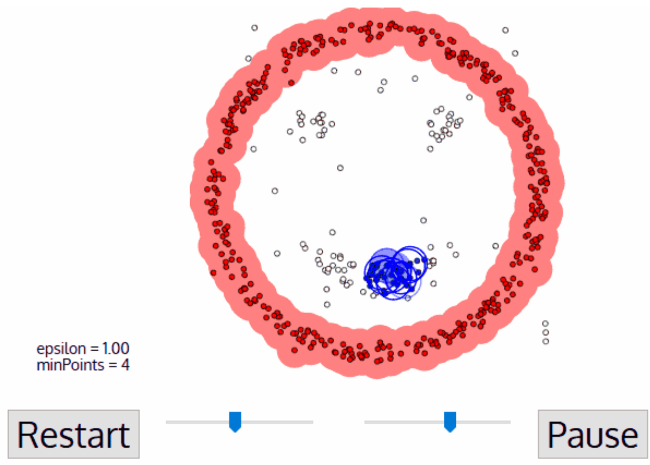
DBSCAN



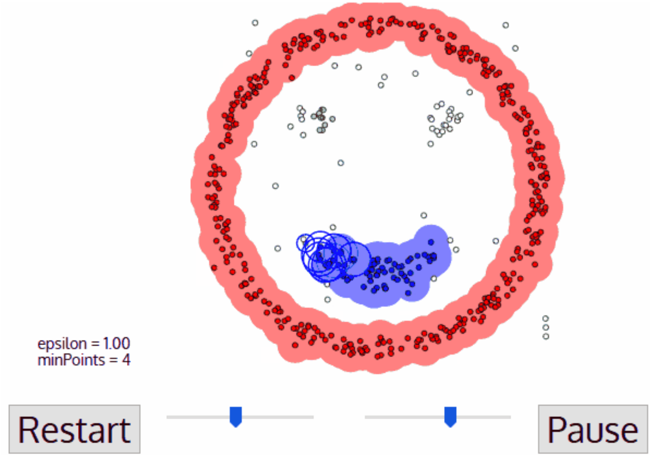
DBSCAN



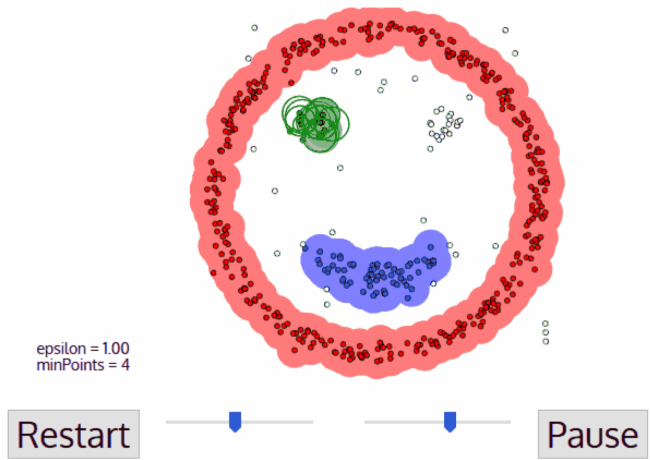
DBSCAN



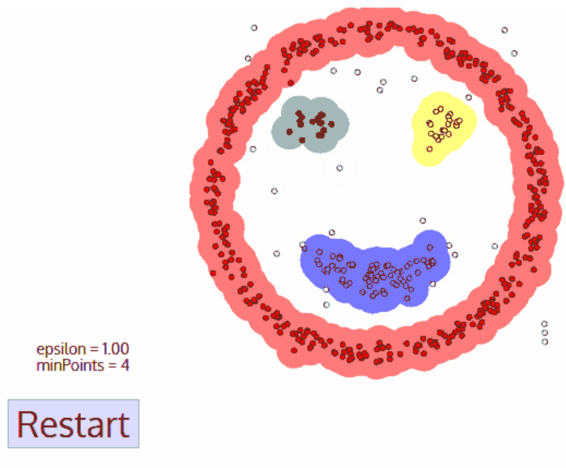
DBSCAN



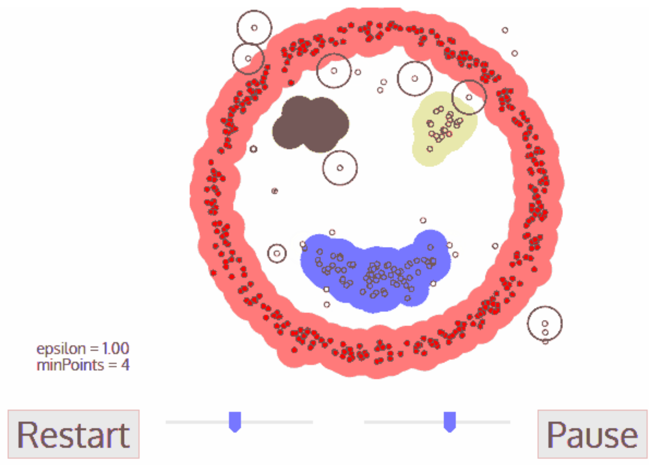
DBSCAN



DBSCAN



DBSCAN



Apprentissage non-supervisé

Démo Sklearn

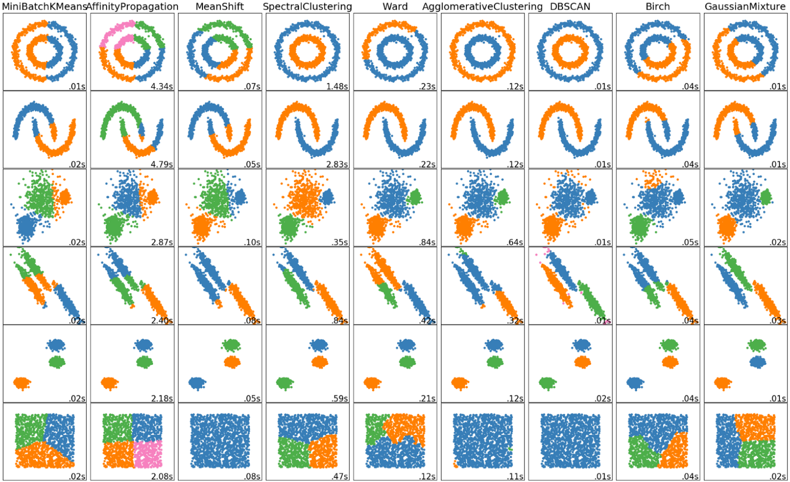
Support TP : Clustering

kmean - Tutoriel
dbscan - Tutoriel

Apprentissage non-supervisé

Conclusions

Clustering - Conclusions



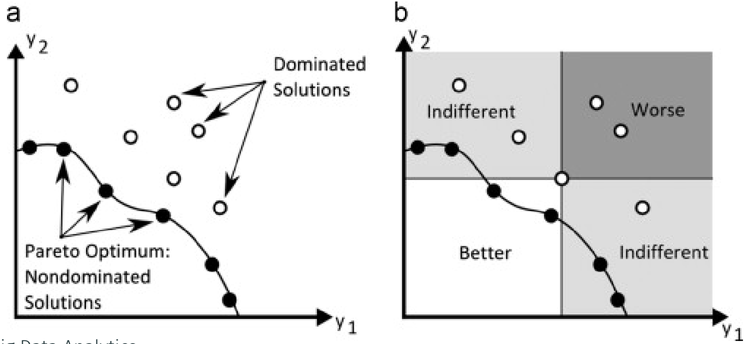
Clustering - Conclusions

Pas de métrique satisfaisante! $\Leftarrow$ Théorie de la Décision :

Problème qui se mesure en plusieurs dimensions

$\Rightarrow$

Pas de solution unique!

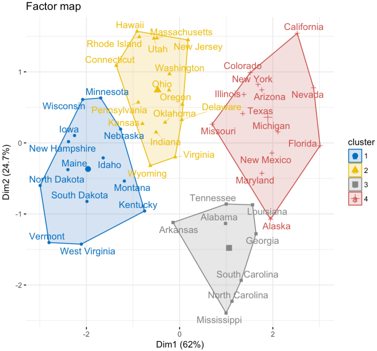


Apprentissage non-supervisé

Classification Hiérarchique sur Composantes Principales

Classification Hiérarchique sur Composantes Principales (CHCP)

Après réduction de dimension, on procède à un algorithme de classification hiérarchique.



Obtenus à partir de données relatives aux crimes aux États-Unis.
Colonnes d'origine : Population Totale, Meurtres, Viols, Agression

Apprentissage non-supervisé

Clustering par ACP

Réduction de la dimensionalité : PCA

(Souvenez-vous)
Matrice de covariance (resp. corrélation) :

$$\frac{1}{N} * \bar{X}^T * \bar{X} \ , \ (\frac{1}{N} * \tilde{X}^T * \tilde{X})$$

<u>ACP</u> :
Retrouver les valeurs et vecteurs propres de de la matrice de covariance (resp. corrélation), donc diagonaliser la matrice carrée obtenue.

Vecteur propre : vecteur permettant de projeter les données
Valeur propre : “proportion d’information” conservée par la projection suivant le vecteur propre correspondant
Réduction de dimension : On ne projette que suivant le nombre de vecteurs propres voulus

Clustering par ACP

$$\frac{1}{N} * \bar{X} * \bar{X}^T \, , \, (\frac{1}{N} * \tilde{X} * \tilde{X}^T)$$

En considérant les individus comme des features et les features comme des individus, les vecteurs propres ayant une grande valeur propre peuvent être considérés comme des centre de cluster d'individus.

Avez-vous des questions ?

Apprentissage non-supervisé

Détection d’anomalies

Détection d’Anomalies

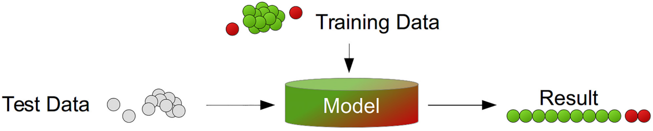
Détection :

- de Fraude
- d’Intrusion/Fuite (physique ou électronique)
- Santé (biologique, geologique, machine, ...)

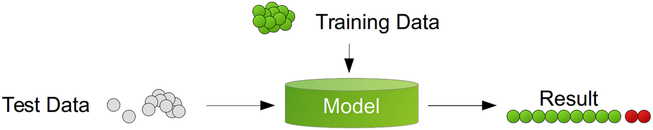
Définition

- une anomalie diffère de la norme par ses features
- les anomalies sont rares comparées aux instances normales

Modes de détection d'anomalie



(a) Supervised anomaly detection



(b) Semi-supervised anomaly detection

(c) Unsupervised anomaly detection

Détection d’Anomalies : Supervisé

Problème de classification normal.
Réseaux de neurones et SVM très performants.

Détection d'Anomalies : Semi-Supervisé

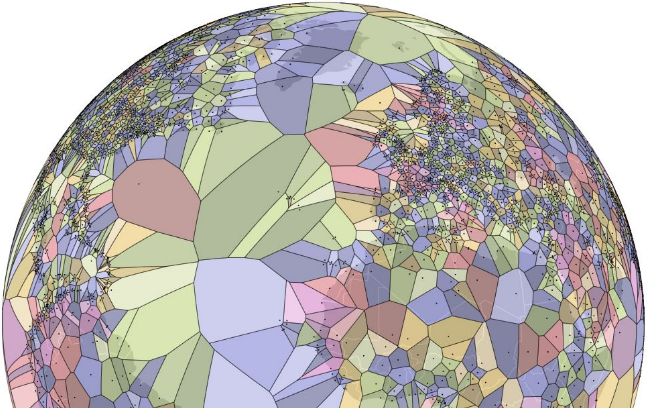
Détection de nouveauté.
Pas traité ici.
One-class SVM très utilisé.

Détection d’Anomalies : Non-Supervisé

De nombreuses méthodes :

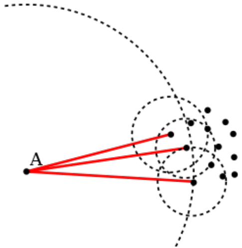
- Local Outlier Factor (LOF)
- Unweighted Cluster-Based Outlier Factor
- Isolation Forest
- Autoencoder
- ...

Détection d'Anomalies



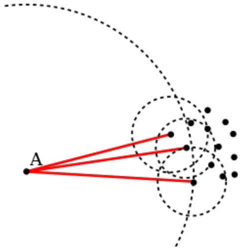
Local Outlier Factor

- anomalies locales



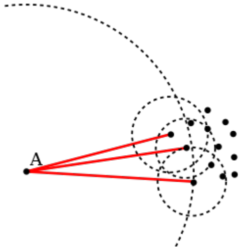
Local Outlier Factor

- anomalies locales
- basé sur les k voisins du point



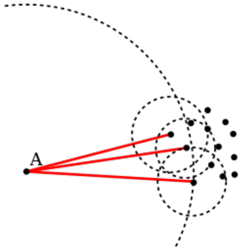
Local Outlier Factor

- anomalies locales
- basé sur les k voisins du point
- définit une « atteignabilité » par les distances de ces voisins



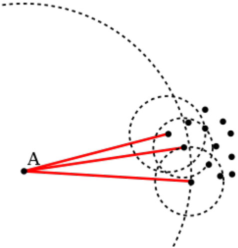
Local Outlier Factor

- anomalies locales
- basé sur les k voisins du point
- définit une « atteignabilité » par les distances de ces voisins
- calcule un ratio moyen d’atteignabilité du point et de ses voisins



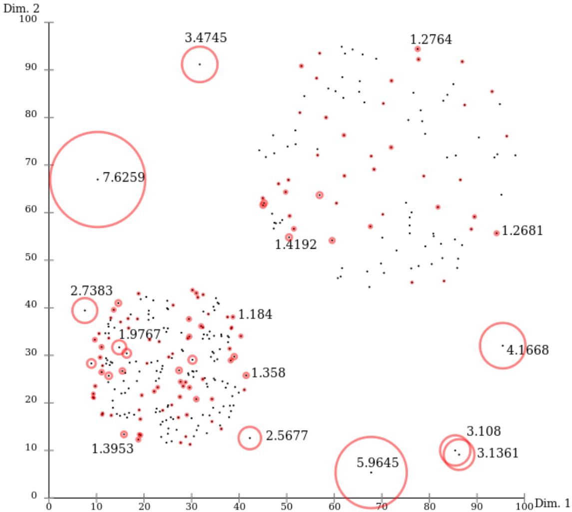
Local Outlier Factor

- anomalies locales
- basé sur les k voisins du point
- définit une « atteignabilité » par les distances de ces voisins
- calcule un ratio moyen d’atteignabilité du point et de ses voisins



→ Anomalie si le ratio moyen d’atteignabilité est beaucoup plus faible que celui de ses plus proches voisins

Local Outlier Factor



Désavantages

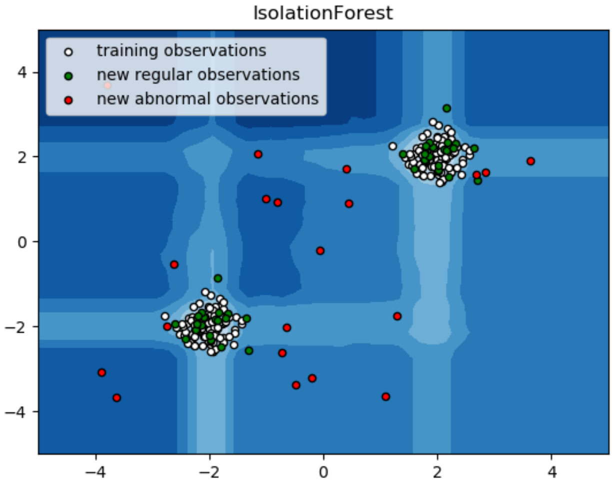
- lent (quadratique)
- a des à priori sur la distribution des données

Isolation tree

- arbre aléatoire (comme random forest mais le split est aléatoire)
- but : isoler une anomalie plus vite qu’un exemple normal
- petit chemin pour arriver à une feuille : anomalie

→ Se sert du fait que les features des anomalies ne sont pas distribuées comme les autres.

Isolation forest



Apprentissage non-supervisé

Démo Sklearn

Support TP : Détection d'anomalie

local-outlier-factor - Tutoriel

isolation-forest - Tutoriel

Avez-vous des questions ?

Apprentissage non-supervisé

Travaux Pratiques : Réduction de dimension

TP : Réduction dimension

PCA - TP

Apprentissage non-supervisé

Travaux Pratiques : Clustering

TP : Clustering

clustering - TP

Avez-vous des questions ?