I Science des données

La science des données (*data science*) a pour objectif d'extraire de l'information à partir de données brutes.

Exemples :

- Données sur des fleurs : longueur et largeur des pétales et des sépales.
- Données sur des élèves : moyenne, classe...

Pour pouvoir avoir une notion de distance entre deux données, on représente chaque donnée comme un vecteur de $\mathbb{R}^p$. Les composantes de ce vecteur sont appelées les attributs.

Exemple : chaque donnée de fleur peut être représentée par un quadruplet de $\mathbb{R}^4$ correspondant à la longueur et largeur des pétales et des sépales.

Parfois il est moins évident de représenter une donnée par un vecteur :

- Variable catégorielle (non numérique : genre, couleur...) : on peut utiliser un vecteur avec un 1 et que des 0 (*one-hot vector*).

  Exemple : on peut représenter les classes MP2I/MPI/MPSI/MP par des vecteurs $\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$.

  Remarque : on pourrait utiliser un seul entier $(0, 1, 2, 3)$ mais 1 serait plus proche de 0 que 3, ce qui n'a pas de raison d'être, a priori. Les différents vecteurs possible d'une représentation par one-hot vector ont la même distance euclidienne.
- Image : On passe d'une matrice de pixels avec n lignes, p colonnes à un vecteur de taille np.

On représente classiquement l'ensemble des données (donc de vecteurs de $\mathbb{R}^p$) par une matrice X dont chaque ligne est une donnée et chaque colonne est un attribut.

Pour savoir si deux données sont « proches » l'une de l'autre, on utilise une distance sur les données, c'est-à-dire sur $\mathbb{R}^p$.

Exemples :

- Distance euclidienne :
$$d(x, y) = \sqrt{\sum_{i=1}^{p} (x_i - y_i)^2}$$
- Distance de Manhattan :
$$d(x, y) = \sum_{i=1}^{p} |x_i - y_i|$$

Quand les attributs n'ont pas la même échelle, un attribut peut avoir beaucoup plus d'importance qu'un autre dans les calculs de distance. Pour que les attributs aient la même importance, on peut standardiser les données, c'est-à-dire les modifier pour avoir une moyenne de 0 et un écart-type de 1, en utilisant :

Théorème

Si Z est une variable aléatoire d'écart-type $\sigma \neq 0$ alors $\dfrac{Z - \mathbb{E}(Z)}{\sigma}$ a une espérance nulle et un écart-type égal à 1.

Exercice 1.
Écrire une fonction `void standardiser(float** X, int n, int p)` qui standardise les données `X` de taille $n \times p$.

II Classification supervisée ♡

L'apprentissage supervisé consiste, à partir de données d'entraînement dont on connaît la classe, à prédire la classe d'une nouvelle donnée :

Définition : Problème d'apprentissage supervisé

- Inconnu : $f : X \longrightarrow Y$, où X un ensemble de données et Y un ensemble d'étiquettes (ou classes).
- Entrée : des données d'entraînement $x_1, ..., x_n \in X$ et leurs classes $f(x_1), ..., f(x_n) \in Y$.
- Sortie : une fonction $g : X \longrightarrow Y$ approximant f.

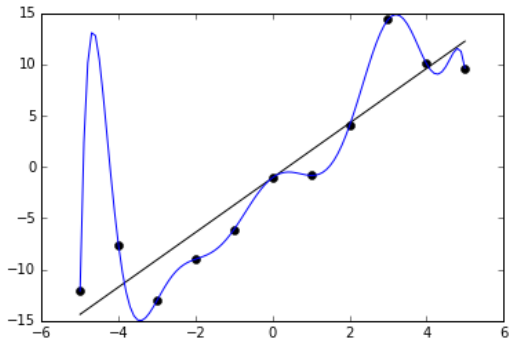
Suivant l'ensemble possible d'étiquettes, on parle de :

- Classification : Y est fini, par exemple $Y = \{1, ..., k\}$.
  Exemples : k plus proches voisins, arbre de décision, réseau de neurones...
- Régression : Y est un ensemble continu, par exemple $Y = \mathbb{R}$.
  Exemples : régression linéaire, modèle linéaire généralisé...

Exemples de problèmes de classification supervisée :

Données X	Classes Y	$f(x)$
Tailles de tumeurs	Maligne, Bénigne	Gravité de x
Mails	Spam, Non-spam	Ce mail est-il un spam ?
Images	$[\![0, 9]\!]$	Chiffre représenté sur x ?
Musiques	classique, rap, rock...	Genre musical de x

On souhaite éviter le surapprentissage (*overfitting*) où l'algorithme approxime trop bien les données d'entraînement et généralise mal sur de nouvelles données.



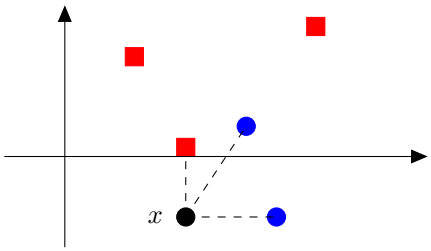
Le polynôme de Lagrange passe par tous les points d'entraînement mais généralise moins bien que la régression linéaire.

III Algorithme des k plus proches voisins (KNN) ♡

Soit $k \in \mathbb{N}$. L'algorithme des k plus proches voisins est un algorithme d'apprentissage supervisé qui prédit la classe d'une nouvelle donnée x de la façon suivante :

1. Trouver les k données d'entraînement les plus proches de x (en termes de distance).
2. Trouver la classe majoritaire $c \in Y$ parmi ces k données.
3. Prédire que x est de classe c.

III.1 Trouver les k plus proches voisins



La classe de x est prédite comme étant carrée bleue (ici, $k = 3$

Exercice 2.
Soit `x` un vecteur sous forme de tableau, `X` une matrice de données $n \times p$, `k` un entier et `d` une fonction de distance supposée définie.
Écrire une fonction `int* voisins(float* x, float** X, int k, int n, int p)` renvoyant un tableau des indices des k plus proches voisins de `x` dans `X`.

Autres solutions :

- Trier les données d'entraînement par ordre croissant de distance à x et prendre les k premières en $\mathrm{O}(np + n\log(n))$.
- Utiliser une file de priorité (tas min) en $\mathrm{O}(np + k\log(n))$.

Exercice 3.
Proposer une méthode plus efficace pour trouver les k plus proches voisins en dimension 1 (où les données sont des réels).

III.2 Trouver la classe majoritaire parmi les k plus proches voisins

Exercice 4.
Écrire une fonction `int maj(int* T, int n, int k)` renvoyant en $O(n+k)$ l'élément le plus fréquent d'un tableau `T` de taille `k` dont les éléments sont compris entre 0 et $n-1$.

Exercice 5.
Écrire une fonction `int knn(float* x, float** X, int* Y, int k, int n, int p, int nc)` qui prédit la classe de `x` en utilisant l'algorithme KNN, où :

- `x` est la donnée à prédire,
- `X` est la matrice des données d'entraînement,
- `Y[i]` est la classe de la donnée `X[i]`,
- `k` est le nombre de voisins à considérer,
- `n` est le nombre de données d'entraînement,
- `p` est le nombre d'attributs,
- `nc` est le nombre de classes.

IV Évaluation d'un algorithme d'apprentissage

IV.1 Données de test

Supposons posséder des données X avec des étiquettes Y et qu'on veuille savoir si KNN est un bon classifieur. Pour cela, on peut réserver une partie des données pour tester l'algorithme obtenu, en partitionnant X et Y en deux ensembles :

- Ensemble d'entraînement X_{train} (de classes Y_{train}) qu'on utilise pour classifier une nouvelle donnée.
- Ensemble de test X_{test} (de classes Y_{test}) qu'on utilise pour évaluer la qualité de l'algorithme (en comparant les prédictions aux vraies classes).

IV.2 Mesures d'évaluation

Définition :

- La précision d'un algorithme d'apprentissage est la proportion de données de test bien classées par rapport au nombre total de données.
- Erreur $= 1 -$ précision.
- La matrice de confusion est une matrice carrée dont les lignes et les colonnes sont les classes possibles. La case (i, j) contient le nombre de données de test de classe i qui ont été prédites comme appartenant à la classe j.

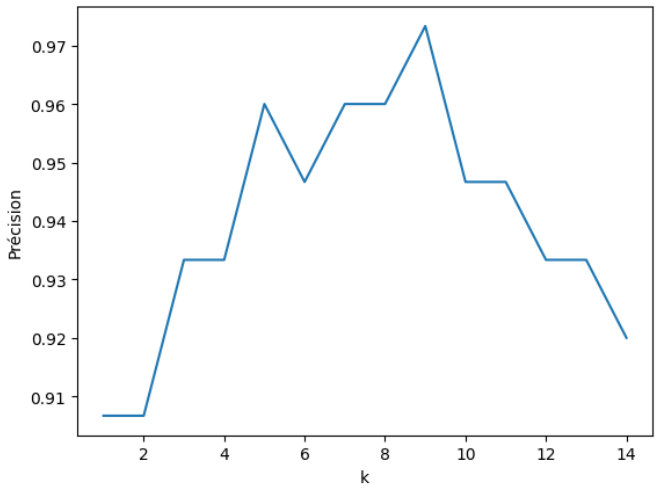
Exemple : Dans la matrice suivante, on voit que toutes les données de classe 0 ont été prédites correctement, une donnée de classe 1 a été prédite à tord comme appartenant à la classe 2.

$$\begin{pmatrix} 21 & 0 & 0 \\ 0 & 29 & 1 \\ 0 & 2 & 23 \end{pmatrix}$$

La précision est la somme des éléments diagonaux divisée par la somme de tous les éléments.

IV.3 Choix du nombre de voisins k

Pour choisir la meilleure valeur de k, on peut afficher la précision en fonction de k pour choisir la valeur de k qui maximise la précision.

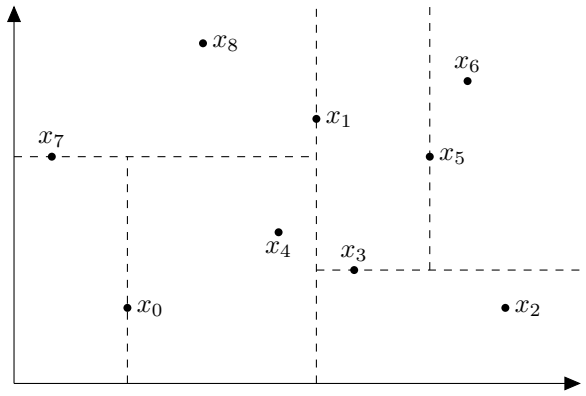


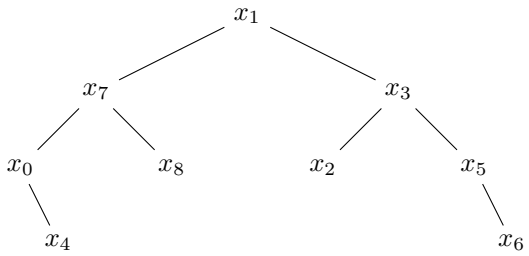
Choisir $k = 9$ permet de maximiser la précision

V Arbre $k-d$ (k-dimensionnel) ♡

Un arbre $k-d$ est une structure de données permettant de calculer plus rapidement les plus proches voisins.

Construction de l'arbre : à la profondeur i, on divise les points de $\mathbb{R}^p$ en deux parties égales (± 1) en prenant comme hyperplan de division l'axe i modulo p (x, y, z...).





Pour trouver le point le plus proche de $y \in \mathbb{R}^p$:

1. On trouve la feuille de l'arbre correspondant à la zone contenant y.
2. On remonte l'arbre en conservant la distance minimum trouvée et en explorant l'autre sous-arbre si nécessaire.

On peut adapter cette méthode pour trouver les k plus proches voisins parmi n points efficacement et accélerer l'algorithme des k plus proches voisins.

VI Algorithme ID3 ♡

On suppose dans cette partie que les attributs et les classes sont des booléens (0 ou 1), mais on peut généraliser l'algorithme à des attributs et classes finies.

Définition : Arbre de décision

Un arbre de décision est un arbre binaire où :
- Chaque nœud interne est associé à un attribut a et correspond à la question : « a est-il vrai ? ».
- Chaque feuille est associée à une classe.

L'algorithme de classification supervisée ID3 comporte deux étapes :

1. Entraînement : construction d'un arbre de décision.
2. Prédiction : classification d'une nouvelle donnée en parcourant l'arbre.

Définition : Entropie de Shannon

Si X est un ensemble de données de classes Y on définit son entropie :

$$H(X) = -\sum_{c \in Y} p(c) \log_2(p(c))$$

où $p(c)$ est la proportion de données de classe c dans X.

Intuitivement, l'entropie mesure la dispersion des valeurs : plus $H(X)$ est élevée, plus les données de X sont dispersées dans les classes de Y. Si toutes les données sont dans la même classe, $H(X) = 0$. On peut montrer avec l'inégalité de Jensen que $H(X)$ est maximum lorsque les données sont uniformément réparties entre les classes.

Exercice 6.
On veut justifier que $H(X)$ mesure la dispersion des valeurs de X, ou encore la surprise moyenne d'une observation de X. Une fonction $f : [0,1] \longrightarrow \mathbb{R}^+$ mesurant la surprise d'un évènement ($f(p)$ étant la surprise de voir un évènement avec

probabilité p se réaliser) doit raisonnablement vérifier :

1. f continue
2. $f(1) = 0$ (un évènement certain n'est pas surprenant)
3. Si $p < q$ alors $f(p) > f(q)$ (un évènement rare est plus surprenant qu'un évènement fréquent)
4. $f(pq) = f(p) + f(q)$ (la surprise de deux évènements indépendants est la somme des surprises)
5. $f(1/2) = 1$ (normalisation)

Montrer que $f(p) = -\log_2(p)$.

Définition : Entropie conditionnelle

Si a est un attribut de X, on définit :

$$H(X|a) = \sum_{v \in \{0,1\}} p(a = v) H(X|a = v)$$

où $p(a = v)$ est la proportion de données de X pour lesquelles $a = v$ et $X|a = v$ est l'ensemble des données de X pour lesquelles $a = v$.

L'algorithme ID3 choisit alors comme racine l'attribut a qui minimise l'entropie $H(X|a)$ après avoir séparé les données en fonction de a, puis on construit récursivement les deux sous-arbres.

Exemple : On considère un étudiant qui a laissé des avis (positifs ou négatifs) sur un certains nombre de livre d'informatique. Voici les attributs de chaque livre :

- E : Le livre contient des exercices.
- C : le livre contient les corrigés de ces exercices.
- F : le livre est écrit en français.
- O : le livre utilise OCaml.
- Y : l'étudiant a laissé un avis positif.

On souhaite prédire si un nouveau livre sera apprécié ou non. Il y a deux classes : $Y = \{0, 1\}$.

E	C	F	O	Y
1	1	1	1	1
1	1	1	0	0
1	1	0	1	1
1	1	0	0	0
1	0	1	1	1
1	0	1	0	0
1	0	0	1	0
1	0	0	0	0
0	0	1	1	0
0	0	1	0	0
0	0	0	1	1
0	0	0	0	0

On calcule :

$$H(X|E=1) = -\frac{3}{8}\log_2(\frac{3}{8}) - \frac{5}{8}\log_2(\frac{5}{8}) \approx 0.95$$

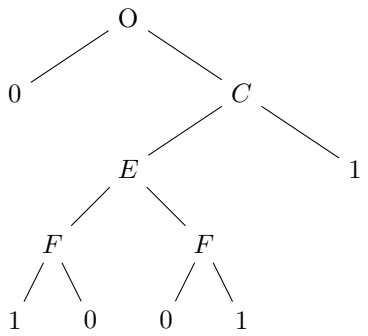
$$H(X|E=0) = -\frac{1}{4}\log_2(\frac{1}{4}) - \frac{3}{4}\log_2(\frac{3}{4}) \approx 0.81$$

$$H(X|E) = \frac{8}{12}H(X|E=1) + \frac{4}{12}H(X|E=0) \approx 0.9$$

De même, $H(X|C) \approx 0.876$, $H(X|F) \approx 0.92$ et $H(X|O) \approx 0.46$.

On choisit donc O comme attribut de la racine de l'arbre, puis on s'applique récursivement sur $X|O=1$ et $X|O=0$.

On obtient l'arbre de décision suivant (où le fils gauche correspond à 0 et le fils droit à 1) :



Exercice 7.
Selon l'algorithme ID3, quel avis obtiendrait un livre $(E, C, F, O) = (0, 1, 1, 1)$? $(1, 0, 1, 1)$?