

Il y a deux types d'algorithme de classification :

- Classification supervisée : on connaît les classes de certaines données (données d'entraînement) qui permettent de prédire la classe d'une nouvelle donnée. Exemples : k plus proches voisins, ID3.
- Classification non supervisée : Il n'y a pas de donnée d'entraînement et l'ensemble des classes possibles n'est pas connue à l'avance... Exemples : k -moyennes, classification hiérarchique ascendante.

I Algorithme des k -moyennes

On note d une distance (par exemple la distance euclidienne).

Définition : Centre

Le centre (ou : isobarycentre) d'un ensemble de vecteurs x_1, \dots, x_n est le vecteur

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

Définition : Variance

La variance (ou : moment d'inertie) $V(X)$ d'un ensemble de vecteur X est définie par

$$V(X) = \sum_{x \in X} d(x, \bar{X})^2$$

Définition : Inertie

On veut trouver un partitionnement de X en k sous-ensembles X_1, \dots, X_k (classes ou *clusters*) minimisant l'inertie I :

$$I = \sum_{i=1}^k V(X_i)$$

Plus l'inertie est petite, plus les données sont proches du centre de leur classe et plus le partitionnement est bon.

Algorithme des k -moyennes (*k-means*)

Objectif : partitionner X en classes X_1, \dots, X_k .

1. Soient c_1, \dots, c_k des vecteurs (centres) choisis aléatoirement.
2. Associer chaque donnée x à la classe X_i telle que $d(x, c_i)$ soit minimum.
3. Recalculer les centres des classes $c_i = \bar{X}_i$.
4. Si les centres ont changé, revenir à l'étape 2.

Attention : dans l'algorithme des k -moyennes, k est le nombre de classes alors que dans l'algorithme des k plus proches voisins, k est le nombre de voisins.

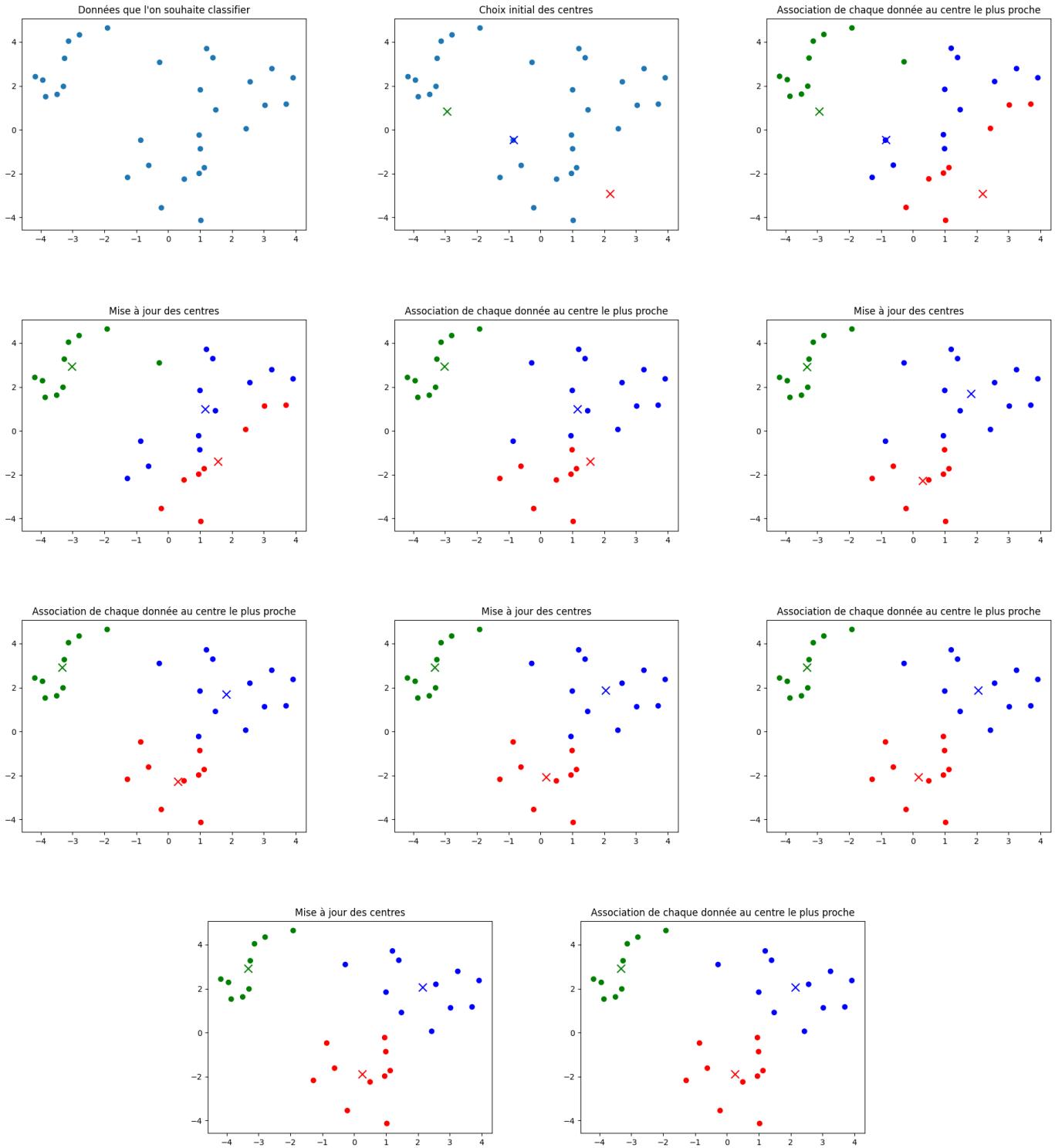
I.1 Terminaison (HP)

Théorème

L'algorithme des k -moyennes termine (pas de boucle infinie).

Preuve : On montre que I est un variant de boucle et ne peut prendre qu'un nombre fini de valeurs, donc le nombre d'itérations est fini. Il existe un nombre fini de partitions de X en k classes, donc l'inertie I ne peut prendre qu'un nombre fini de valeurs. Il suffit donc de montrer que I décroît strictement :

- Réassigner x de X_i à X_j si $d(x, c_i) > d(x, c_j)$ fait diminuer I .
- Recalculer les centres des classes fait diminuer I , d'après le résultat suivant :



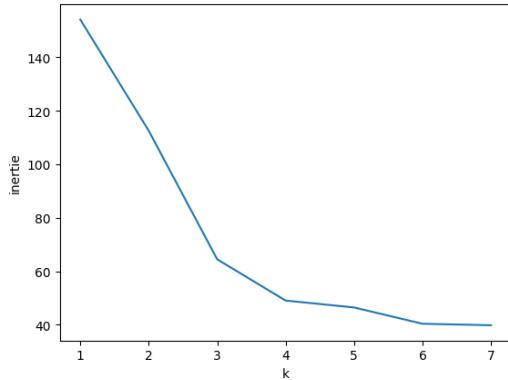
Exemple d'exécution de l'algorithme des k -moyennes

Théorème

Si X est un ensemble de vecteurs alors $f : y \mapsto \sum_{x \in X} d(x, y)^2$ est minimum pour $y = \bar{X}$.

I.2 Choisir k

On peut calculer l'inertie obtenue pour différentes valeurs de k . La méthode du coude consiste à choisir la plus grande valeur de k pour laquelle l'inertie diminue de façon significative.



On choisit $k = 3$ ou $k = 4$.

I.3 Non optimalité

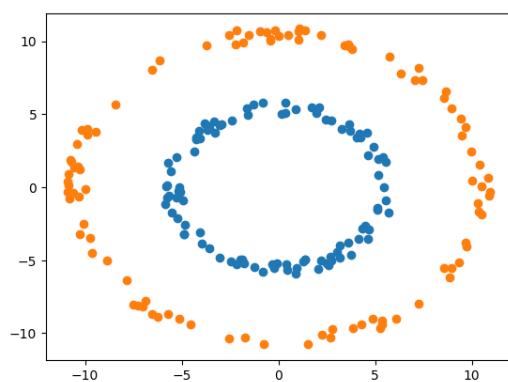
L'algorithme des k -moyennes converge toujours vers un minimum local, mais pas forcément vers un minimum global de l'inertie.

Exercice 1.

Donner un exemple d'exécution de l'algorithme des k -moyennes qui ne donne pas une partition d'inertie minimum.

I.4 Limites

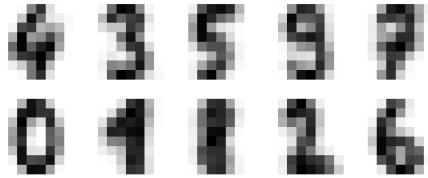
L'algorithme des k -moyennes ne marche que sur des données linéairement séparables (pouvant être séparées par un hyperplan).



L'algorithme des k -moyennes ne permettrait pas de classifier correctement ces données.

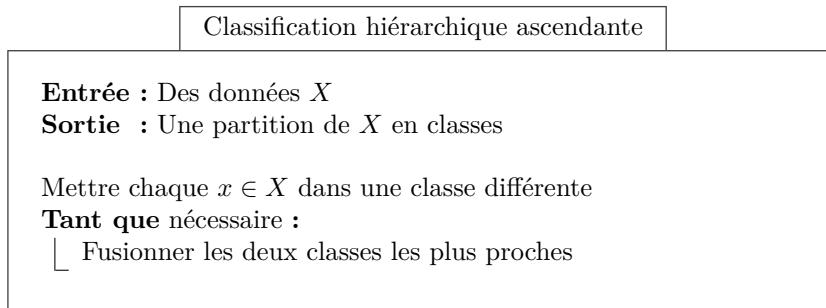
I.5 Interprétations

Les centres obtenus à la fin de l'algorithme donnent des informations sur les constituants des classes.



Centres obtenus avec $k = 10$ sur des chiffres manuscrits

II Classification hiérarchique ascendante (CHA)



On peut choisir d'arrêter l'algorithme à un certain nombre de classes ou quand la distance minimum entre deux classes est supérieure à un certain seuil.

Exemples de distances entre classes A et B :

1. Distance minimum : $\min_{a \in A, b \in B} d(a, b)$.
2. Distance maximum : $\max_{a \in A, b \in B} d(a, b)$.
3. Distance moyenne : $\frac{1}{|A||B|} \sum_{a \in A, b \in B} d(a, b)$.

Exercice 2.

Appliquer l'algorithme de classification hiérarchique ascendante sur les données suivantes en dessinant le dendrogramme obtenu. On utilisera la distance 1.

