Algorithmes d'apprentissage non supervisé

01-03
Regroupement hiérarchique

Au programme

- Introduction
- Dendrogramme
- Où couper un dendrogramme ?
- Mesure de similarité
- Algorithme de regroupement hiérarchique
- Regroupement hiérarchique avec scikit-learn
- Ateliers
- Lectures et références

Introduction

Rappel des principaux types de partitionnement

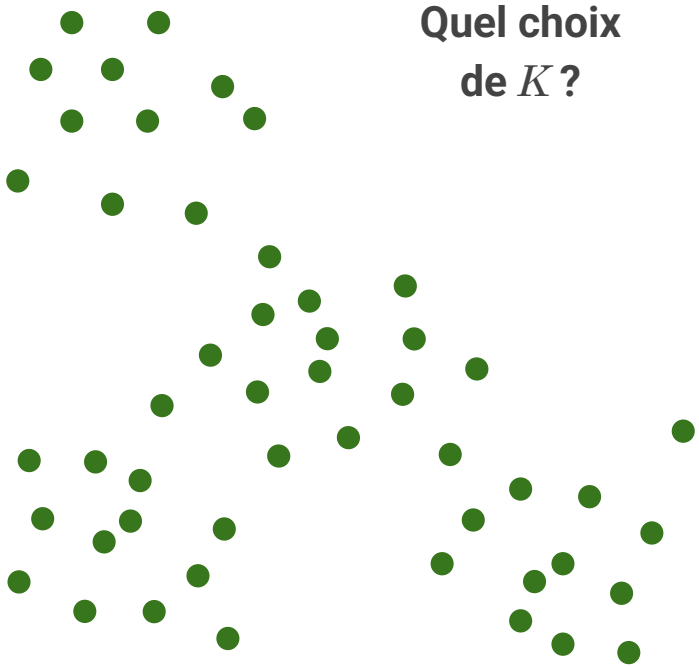
- Partitionnement basé sur
  - les centroïdes (K-moyennes, CURE, …)
  - la connectivité (hiérarchique, ...)
  - la distribution (BFR, …)
  - la densité (DBSCAN, OPTICS, …)
  - les grilles
- Et d’autres ….

Rappel des principaux types de partitionnement

- Partitionnement basé sur
  - les centroïdes (K-moyennes, CURE, …)
  - la connectivité (**hiérarchique**, ...) 👉 On parle alors de **regroupement hiérarchique**
  - la distribution (BFR, …)
  - la densité (DBSCAN, OPTICS, …)
  - les grilles
- Et d’autres ….

K-moyennes, choix de K

- Le partitionnement basé sur les *K*-moyennes nécessite de **spécifier le nombre de clusters K**
- Ceci est un **inconvénient** car il n'existe pas de méthode "universelle" et robuste pour le **choix** de K
- Le **regroupement hiérarchique** est une technique de partitionnement alternative à l'algorithme des K-moyennes ne nécessitant pas le choix préalable du nombre de clusters

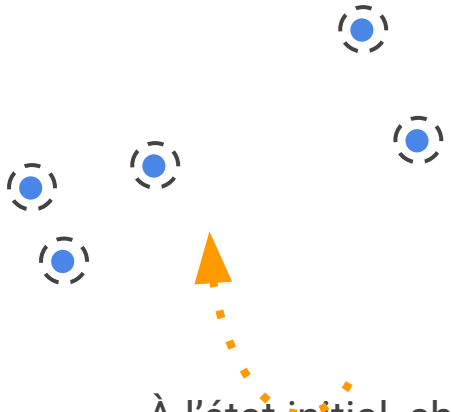


Regroupement hiérarchique

- Nous allons décrire ici le regroupement hiérarchique de type **agglomératif** (ou ascendant / bottom-up)
- Il s’agit du type le plus **courant** de regroupement hiérarchique
- Réfère au fait qu’un **dendrogramme** est construit à partir des observations (**feuilles**) en combinant successivement les clusters obtenus jusqu’à la **racine** (arbre / hiérarchie)

Regroupement hiérarchique

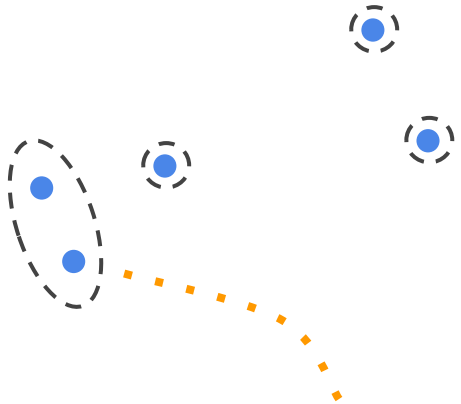
- Nous allons décrire ici le regroupement hiérarchique de type **agglomératif** (ou ascendant / bottom-up)
- Il s'agit du type le plus **courant** de regroupement hiérarchique
- Réfère au fait qu'un **dendrogramme** est construit à partir des observations (**feuilles**) en combinant successivement les clusters obtenus jusqu'à la **racine** (arbre / hiérarchie)



À l'état initial, chaque observation (feuille) est son propre cluster

Regroupement hiérarchique

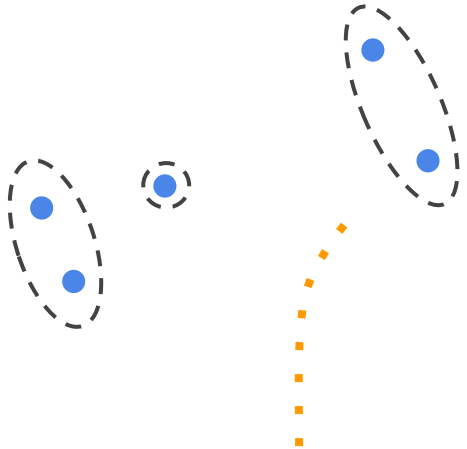
- Nous allons décrire ici le regroupement hiérarchique de type **agglomératif** (ou ascendant / bottom-up)
- Il s'agit du type le plus **courant** de regroupement hiérarchique
- Réfère au fait qu'un **dendrogramme** est construit à partir des observations (**feuilles**) en combinant successivement les clusters obtenus jusqu'à la **racine** (arbre / hiérarchie)



Les deux observations / clusters les plus proches sont regroupées en un cluster

Regroupement hiérarchique

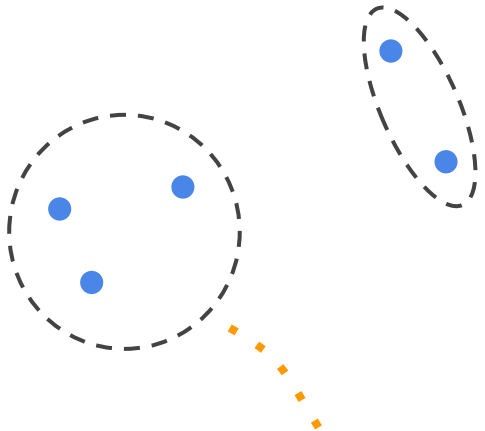
- Nous allons décrire ici le regroupement hiérarchique de type **agglomératif** (ou ascendant / bottom-up)
- Il s'agit du type le plus **courant** de regroupement hiérarchique
- Réfère au fait qu'un **dendrogramme** est construit à partir des observations (**feuilles**) en combinant successivement les clusters obtenus jusqu'à la **racine** (arbre / hiérarchie)



Les deux clusters les plus proches sont regroupées en un cluster

Regroupement hiérarchique

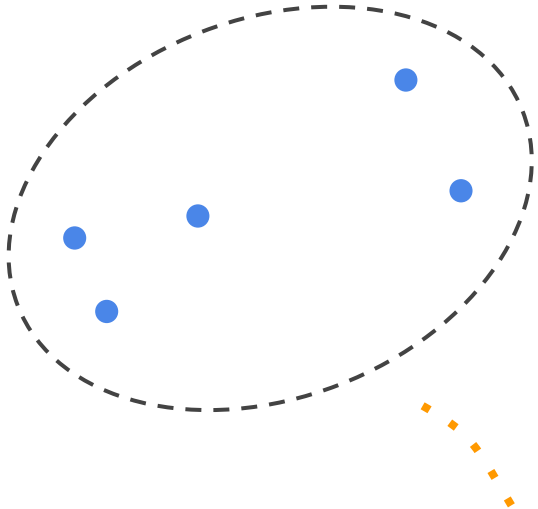
- Nous allons décrire ici le regroupement hiérarchique de type **agglomératif** (ou ascendant / bottom-up)
- Il s'agit du type le plus **courant** de regroupement hiérarchique
- Réfère au fait qu'un **dendrogramme** est construit à partir des observations (**feuilles**) en combinant successivement les clusters obtenus jusqu'à la **racine** (arbre / hiérarchie)



Les deux clusters les plus proches sont regroupées en un cluster

Regroupement hiérarchique

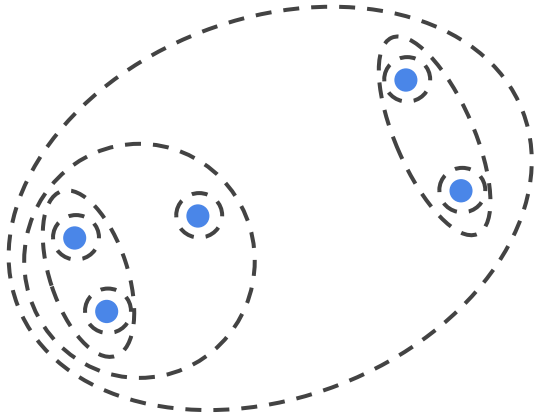
- Nous allons décrire ici le regroupement hiérarchique de type **agglomératif** (ou ascendant / bottom-up)
- Il s'agit du type le plus **courant** de regroupement hiérarchique
- Réfère au fait qu'un **dendrogramme** est construit à partir des observations (**feuilles**) en combinant successivement les clusters obtenus jusqu'à la **racine** (arbre / hiérarchie)



Au final, un seul cluster (racine) contenant toutes les observations est obtenu

Regroupement hiérarchique

- Nous allons décrire ici le regroupement hiérarchique de type **agglomératif** (ou ascendant / bottom-up)
- Il s'agit du type le plus **courant** de regroupement hiérarchique
- Réfère au fait qu'un **dendrogramme** est construit à partir des observations (**feuilles**) en combinant successivement les clusters obtenus jusqu'à la **racine** (arbre / hiérarchie)



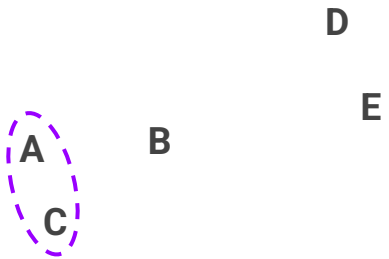
Les regroupements successifs permettent d'obtenir le **dendrogramme**

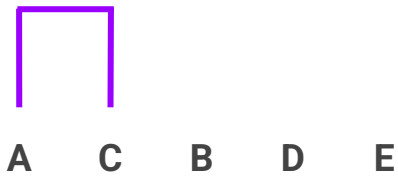
Dendrogramme

Dendrogramme

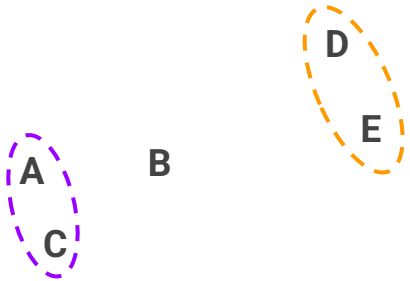
Clusters initiaux: **A** **C** **B** **D** **E**

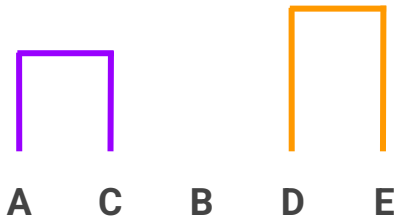
Dendrogramme



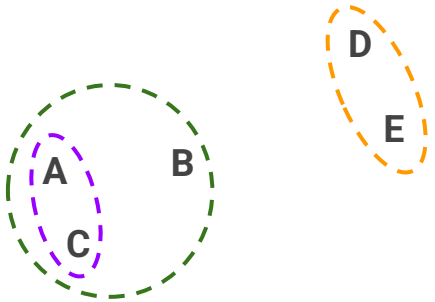


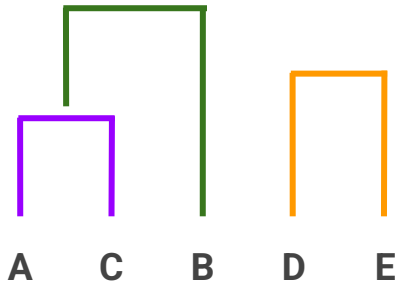
Dendrogramme



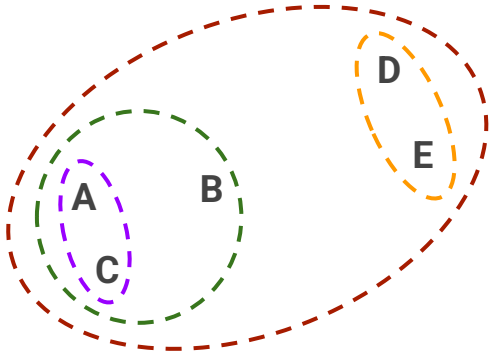


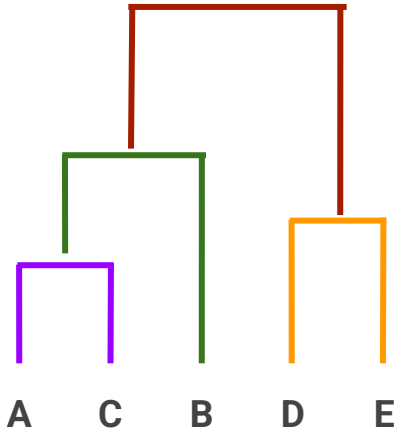
Dendrogramme





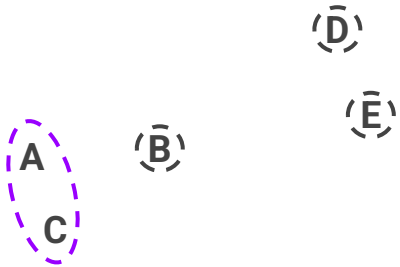
Dendrogramme

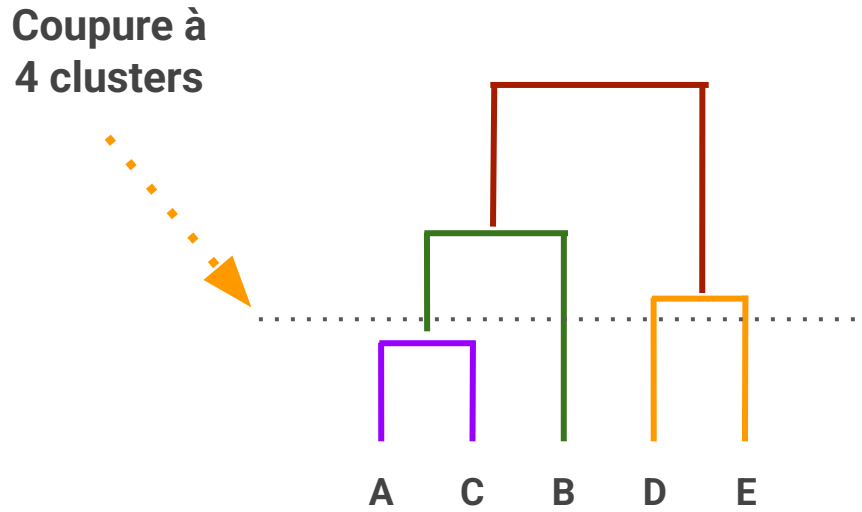




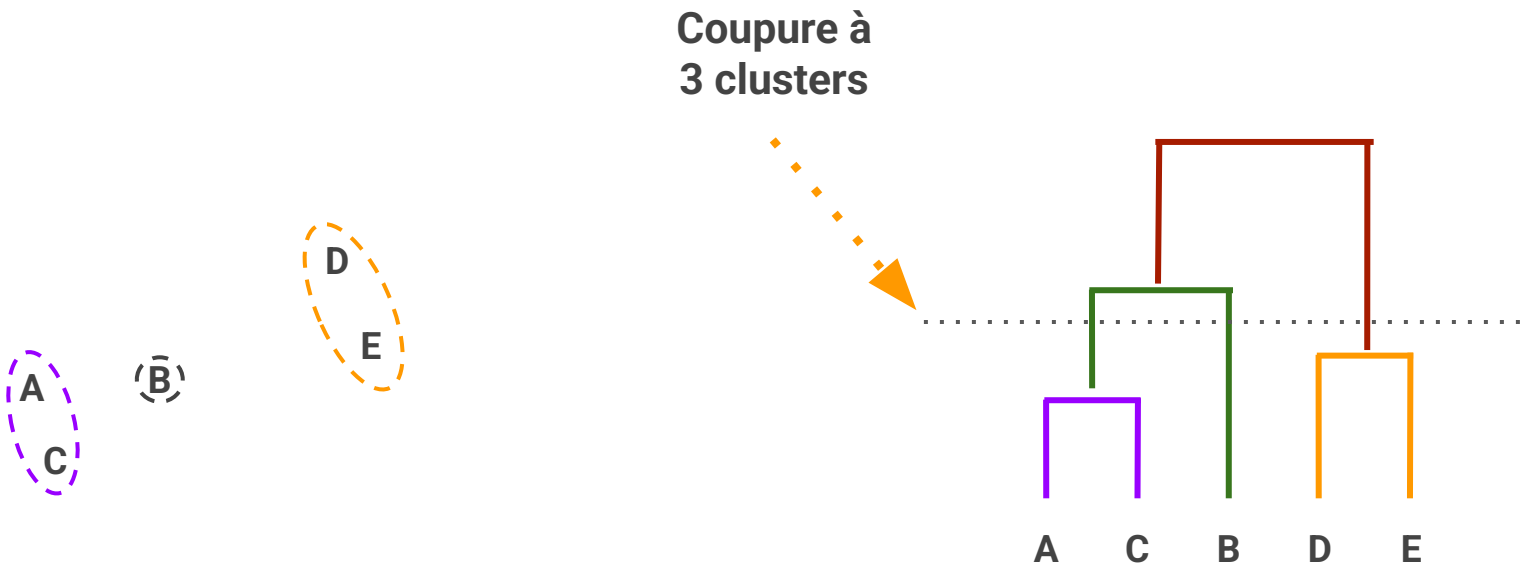
Le dendrogramme complet est obtenu lorsque toutes les observations appartiennent au même cluster

Coupure du dendrogramme

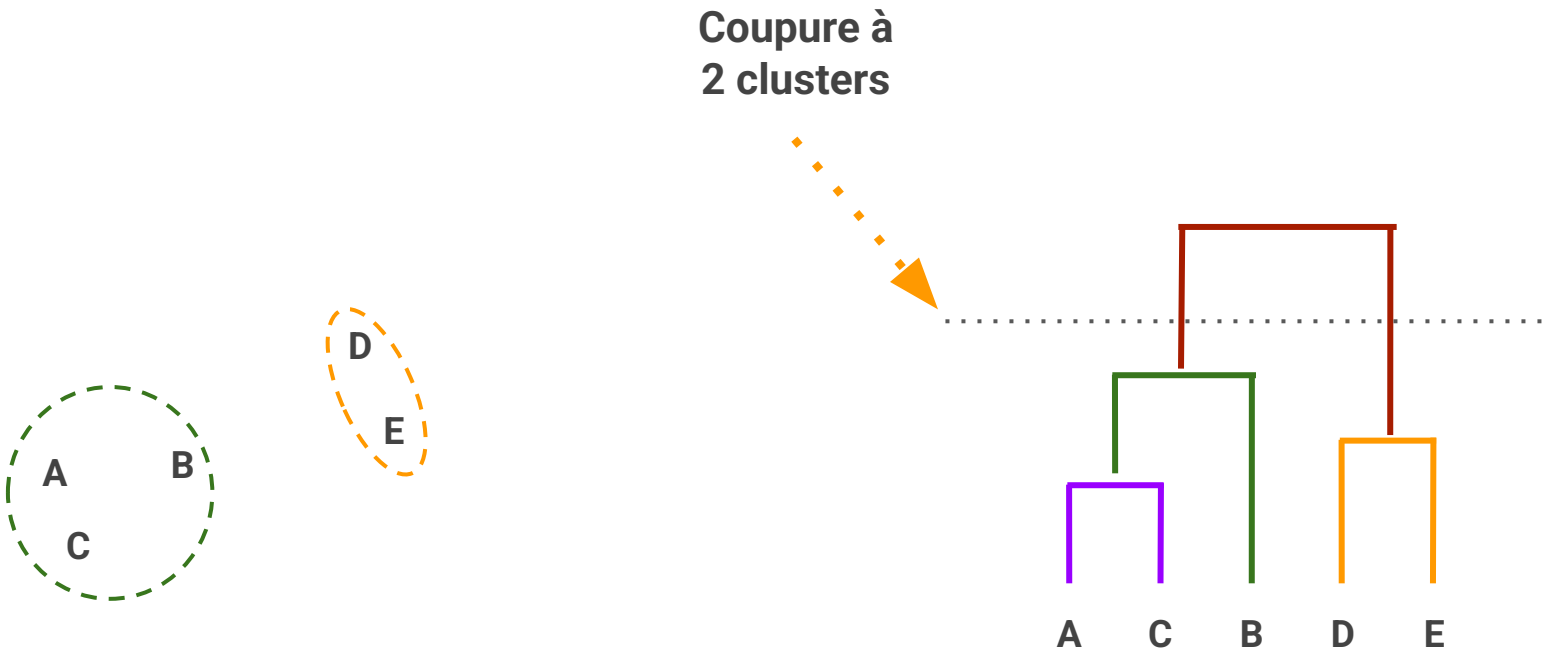




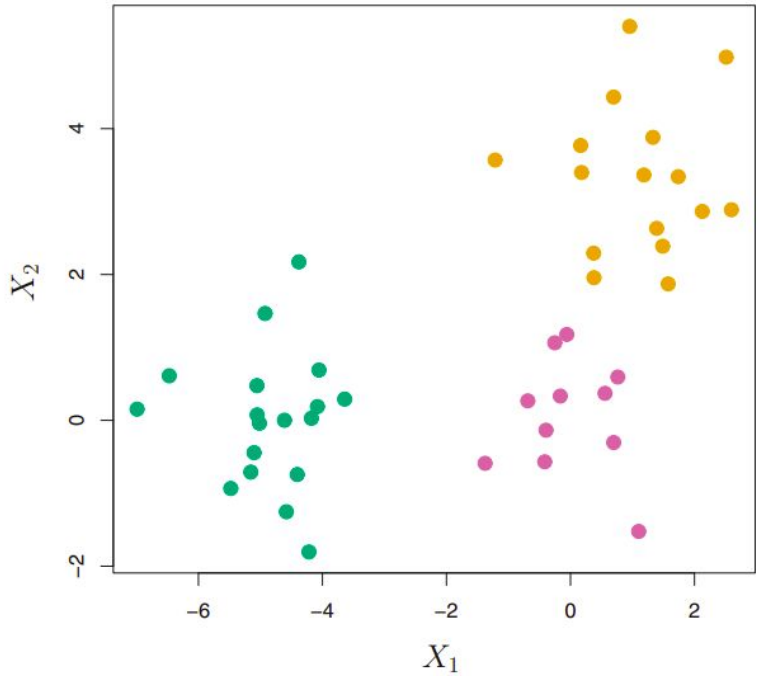
Coupure du dendrogramme



Coupure du dendrogramme

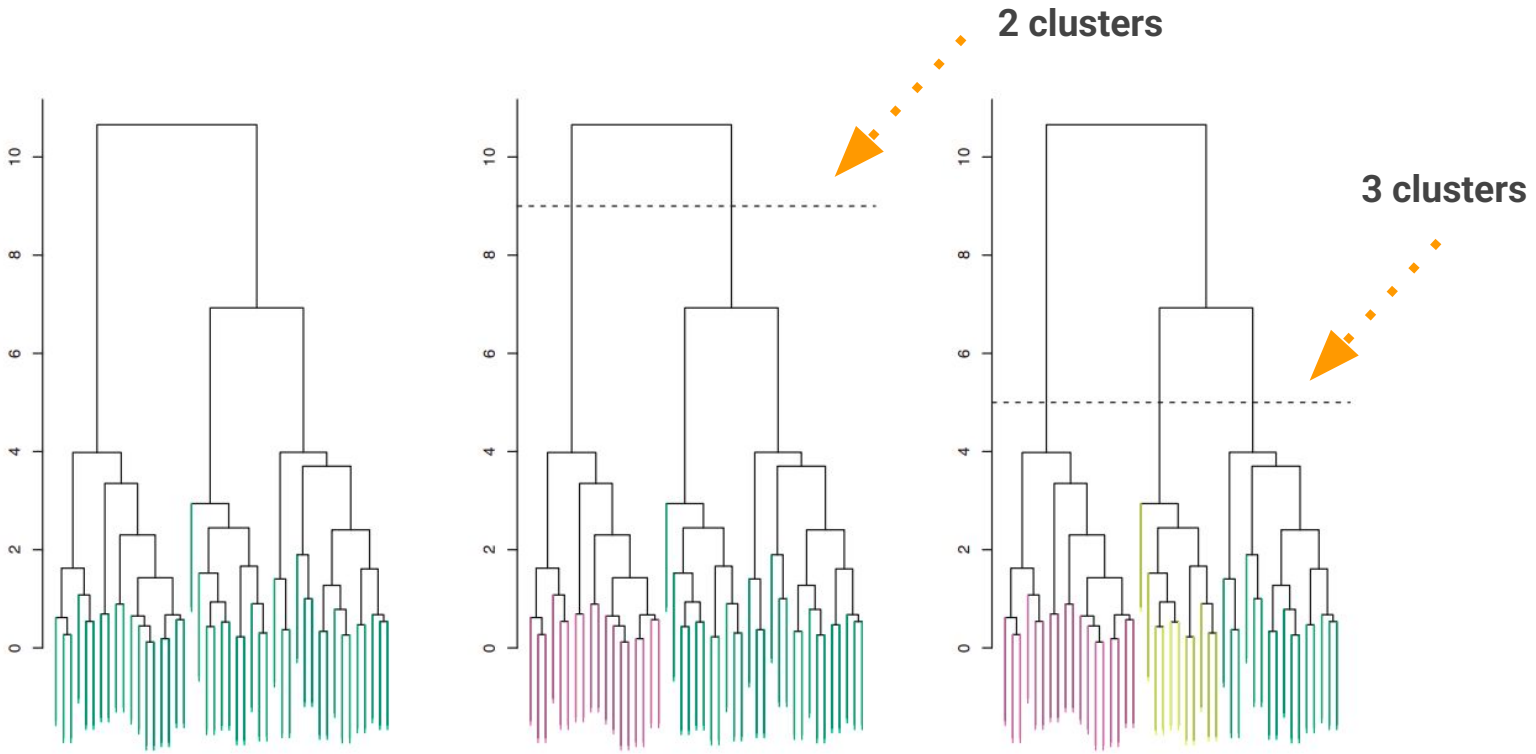


Exemple avec des données simulées



Extrait de [2] - 45 observations simulées dans une espace 2D

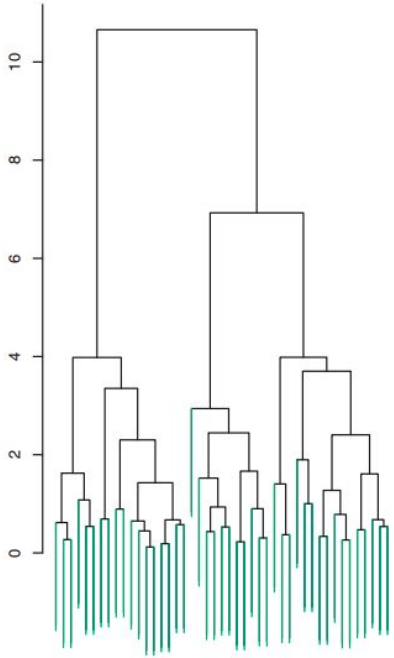
Exemple avec des données simulées



Extrait de [2] - Dendrogramme obtenu par regroupement hiérarchique (saut maximum) et seuil de coupure

Où couper un dendrogramme ?

Où couper un dendrogramme ?



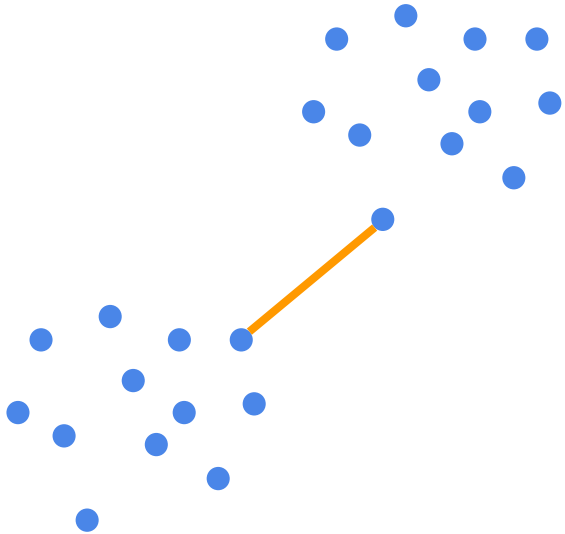
- Identifier les plus grandes distances de fusion (grands sauts).
- Choisir une hauteur juste avant un saut important.
- Utiliser des méthodes quantitatives (plus tard)
- Ajuster en fonction de l'objectif métier.

Mesure de similarité

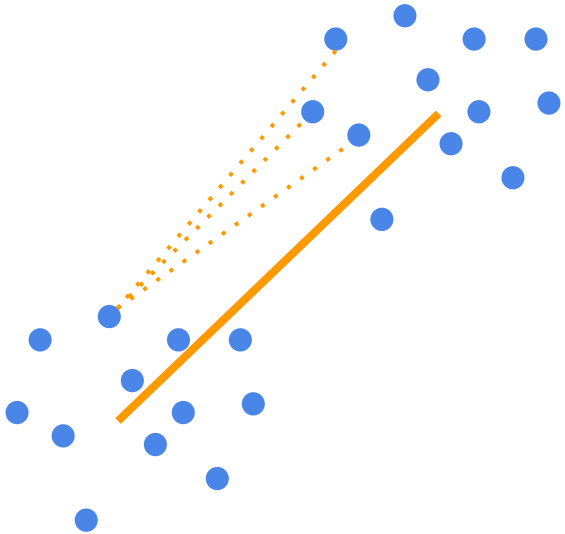
Mesure de similarité

- La mesure de similarité la plus souvent rencontrée est la **distance euclidienne**
- Il y a une analogie forte entre **distance** et **similarité**. En effet
  - Des observations proches dans l'espace sont considérés plus similaires que des observations éloignées
  - Plus la distance augmente, plus les observations diffèrent, et donc plus la similarité diminue
- Il existe de nombreuses mesures de similarité, qui seront étudiées au fur et à mesure du cours
- Plusieurs critères peuvent être utilisés pour calculer la similarité: **saut minimum**, **saut maximum**, **lien moyen** et **distance de Ward**

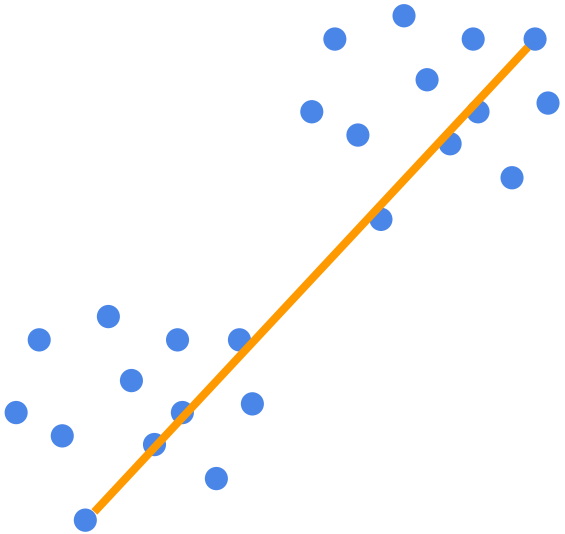
Saut minimum, lien moyen et saut maximum



Saut minimum
(simple link)



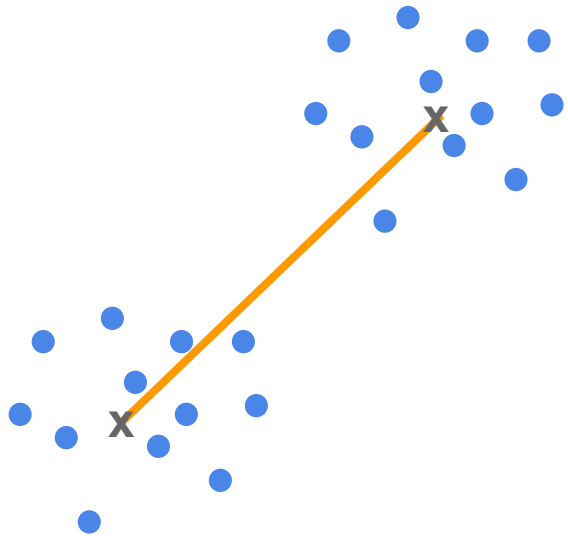
Lien moyen
(average link)



Saut maximum
(complete link)

Distance de Ward (ou centroïde)

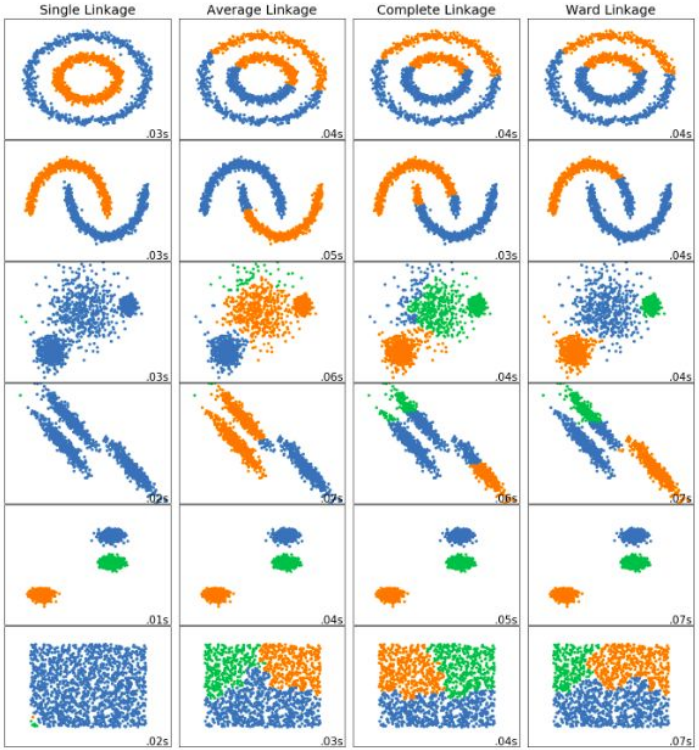
- La **distance de Ward** minimise la somme des carrés des différences à l'intérieur d'un cluster lors de la fusion
- Approche similaire à la fonction de coût de l'algorithme des K-moyennes
- **Applicable aux espaces euclidiens seulement**



Similarité selon les critères (1/2)

Lien	Similarité
Saut maximum	Maximale inter-clusters
Saut minimum	Minimale inter-clusters
Lien moyen	Moyenne inter-clusters
Ward / Centroïde	Entre les centroïdes de deux clusters

Similarité selon les critères (2/2)



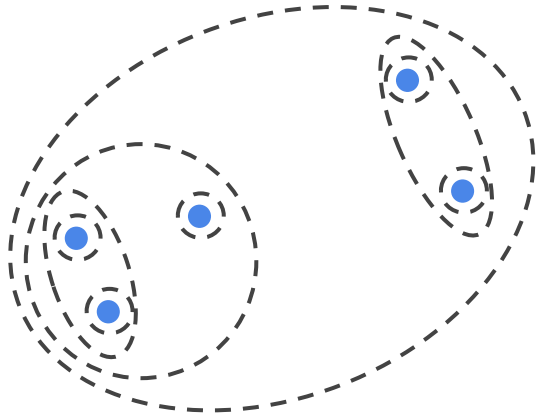
https://scikit-learn.org/stable/modules/clustering.html#hierarchical-clustering

Algorithme de regroupement hiérarchique

Algorithme de regroupement hiérarchique

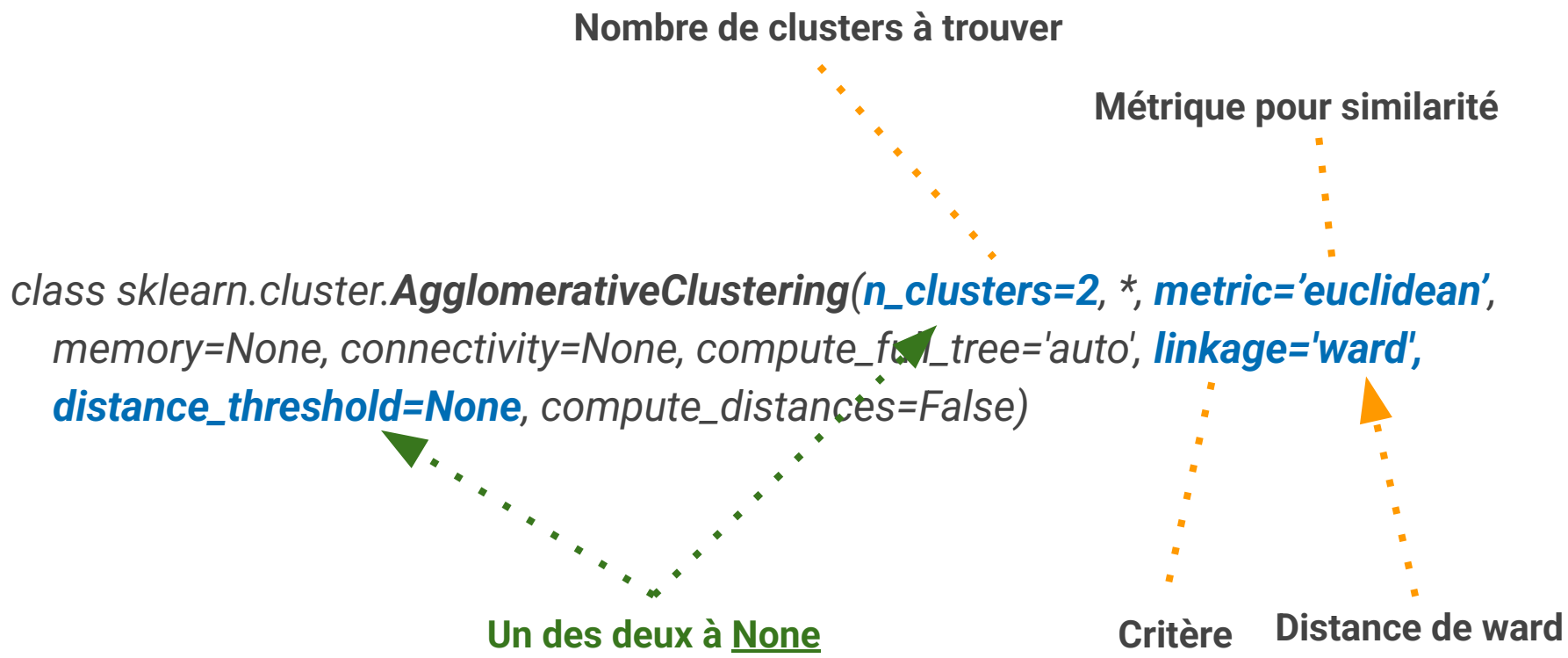
- Comparativement aux K-moyennes, l'algorithme de regroupement hiérarchique est relativement simple. Voici le pseudo-code

```
Démarrer avec un cluster par
observation

Répéter {

    Fusionner les deux clusters
    les plus similaires

} jusqu'à ce que toutes les
observations appartiennent à un
seul et même cluster
```



Regroupement hiérarchique avec scikit-learn

AgglomerativeClustering (scikit-learn 1.8)



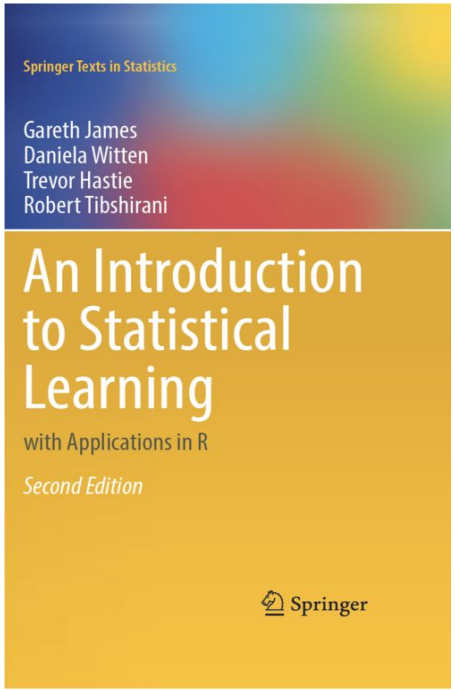
Ateliers

https://github.com/mswawola-cegep/420-a58-sf-gr-12022-hiver-2026.git

01-03

Lectures et références

Lectures



- Introduction to Statistical Learning with Applications in R Second edition (2021)

  → 12.4 Clustering Methods

Références

[1] CS229: Machine Learning - Stanford University

[2] Gareth James, Daniela Witten, Trevor Hastie and Robert Tibshirani, “Introduction to Statistical Learning with Applications in R - Second edition”