01-05
Conseils et considérations pratiques

NOUS ÉCLAIRONS.
VOUS BRILLEZ.

FORMATION CONTINUE
ET SERVICES AUX ENTREPRISES

Cégep de Sainte-Foy

Sommaire

1. Petites décisions, grandes conséquences
2. Mesures de distances
3. Fléau de la dimension
4. Complexité des algorithmes
5. Lectures et références

Sommaire

1. Petites décisions, grandes conséquences
2. Mesures de distances
3. Fléau de la dimension
4. Complexité des algorithmes
5. Lectures et références

Petites décisions, grandes conséquences

- Les algorithmes de partitionnement représentent de puissantes techniques d'apprentissage non supervisé, cependant des **choix** doivent être faits !
  - Doit-on mettre les données à l'échelle ?
  - En partitionnement K-moyennes
    - Quelle valeur de K choisir ?
  - En partitionnement hiérarchique
    - Quel type de dissimilarité utiliser ?
    - Quelle méthode de lien choisir ?
    - À quelle hauteur couper le dendrogramme ?
  - Avec DBSCAN
    - Quelle densité utiliser ?

En fonction des choix réalisés, les résultats peuvent être complètement différents !

Petites décisions, grandes conséquences

- Les algorithmes de partitionnement représentent de puissantes techniques d’apprentissage non supervisé, cependant des **choix** doivent être faits !
  - Doit-on mettre les données à l’échelle ?
  - En partitionnement K-moyennes
    - Quelle valeur de K choisir ?
  - En partitionnement hiérarchique
    - Quel type de dissimilarité utiliser ?
    - Quelle méthode de lien choisir ?
    - À quelle hauteur couper le dendrogramme ?
  - Avec DBSCAN
    - Quelle densité utiliser ?

En fonction des choix réalisés, les résultats peuvent être complètement différents !

Il n’existe pas de réponse unique et meilleure que les autres à ces questions. Chaque solution permettant de mettre en lumière un aspect intéressant des données doit être considérée

Sommaire

1. Petites décisions, grandes conséquences
2. Mesures de distances
3. Fléau de la dimension
4. Complexité des algorithmes
5. Lectures et références

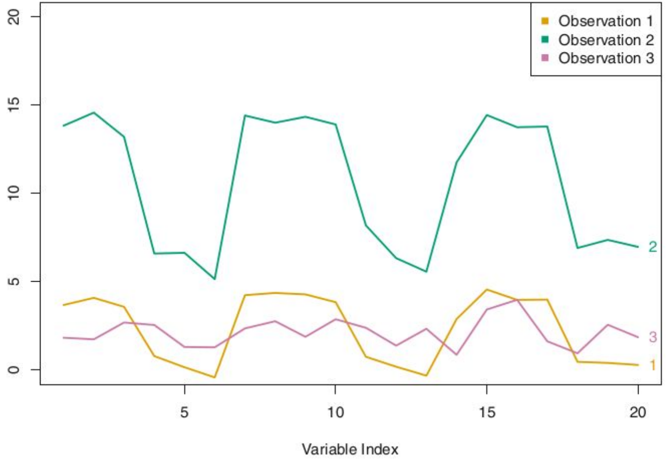
Mesures de distance

- Comme nous l’avons vu précédemment, il y a un lien fort entre **distance** et **dissimilarité** (ou inverse de la similarité)
- Le choix d’une mesure de distance est crucial doit être réalisé en connaissance des données. L’analyse exploratoire est donc une étape indispensable avec toute tentative de modélisation par partitionnement
- Parmi les distances les plus couramment utilisées, on trouve entre-autre
  - La distance euclidienne
  - La distance de Manhattan (city-block)
  - La similarité cosinus
  - **La distance basée sur la corrélation**
  - **Les distances basées sur la distribution des clusters (ex. Mahalanobis)**

Distance basée sur la corrélation

- Une première alternative possible à la distance euclidienne est la **distance basée sur la corrélation**

  → **Deux observations sont similaires si leurs variables explicatives sont corrélées**



Extrait de [1] - Page 398

Exemple #1

- Prenons l'exemple d'une boutique en ligne souhaitant effectuer un partitionnement des consommateurs basé sur leurs achats passés
- L'objectif est d'identifier des **sous groupes de consommateurs similaires**, de manière à leur proposer des articles et publicités d'intérêt
- Remarque: nous allons voir ce type d'application beaucoup plus en détails lors de la partie 3 du cours dédiée aux Systèmes de recommandation

Exemple #1

- Supposons que les données soient regroupées dans une matrice **X** dont les lignes correspondent aux **consommateurs** et les colonnes aux **articles disponibles** à l'achat.

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 42 & & 27 \\ 4 & 0 & & 1 \\ 0 & 2 & & 8 \\ & & \cdots & \\ 1 & 16 & & 24 \end{pmatrix}$$

Exemple #1

- Supposons que les données soient regroupées dans une matrice **X** dont les lignes correspondent aux **consommateurs** et les colonnes aux **articles disponibles** à l'achat.

Les éléments de la matrice indiquent le nombre de fois qu'un acheteur donné à acheté un article donné

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 42 & & 27 \\ 4 & 0 & & 1 \\ 0 & 2 & & 8 \\ & & \cdots & \\ 1 & 16 & & 24 \end{pmatrix}$$

Exemple #1

- Supposons que les données soient regroupées dans une matrice **X** dont les lignes correspondent aux **consommateurs** et les colonnes aux **articles disponibles** à l'achat.

Les éléments de la matrice indiquent le nombre de fois qu'un acheteur donné a acheté un article donné

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 42 & & 27 \\ 4 & 0 & & 1 \\ 0 & 2 & & 8 \\ & & \cdots & \\ 1 & 16 & & 24 \end{pmatrix}$$

Quel est l'impact du choix de mesure de dissimilarité et laquelle utiliser pour regrouper les consommateurs en sous groupes ?

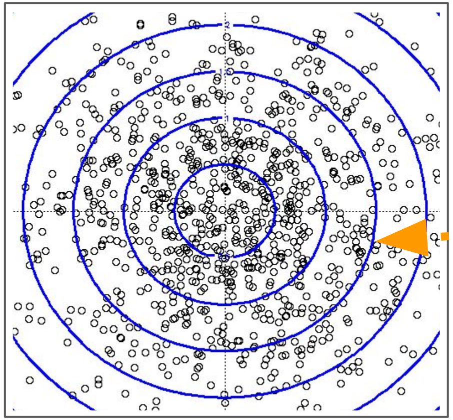
Exemple #1

- **Distance euclidienne**
  Les consommateurs ayant acheté **peu d'articles** seront regroupés (consommateurs occasionnels). Ceci n'a pas grande utilité commerciale

- **Distance basée sur la corrélation**
  Les consommateurs ayant acheté des **articles similaires** seront regroupés indépendamment des quantités achetées

  → Ainsi, la distance basée sur la corrélation est un meilleur choix pour cette application

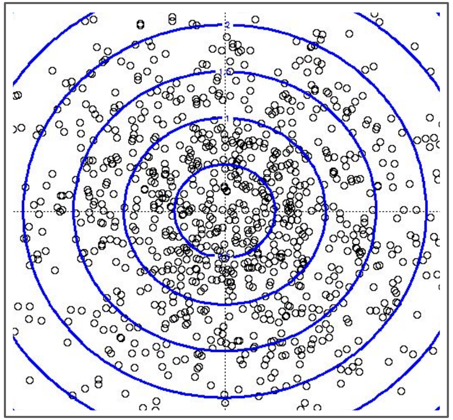
Example #2



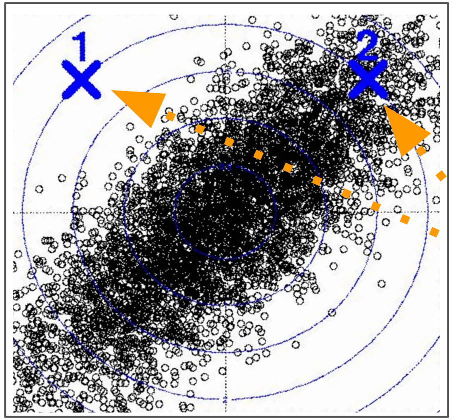
Point **uniformément** distribués
Distance euclidienne

Les lignes de contour représentent les points **équidistant** de l'origine

Example #2



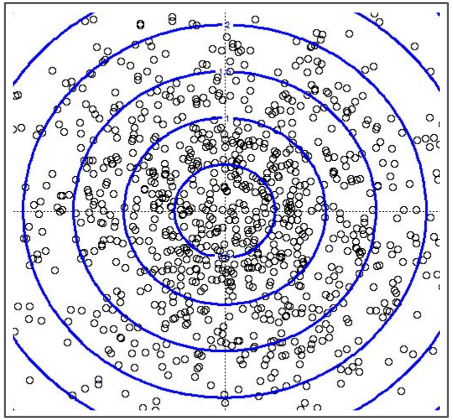
Point **uniformément** distribués
Distance euclidienne



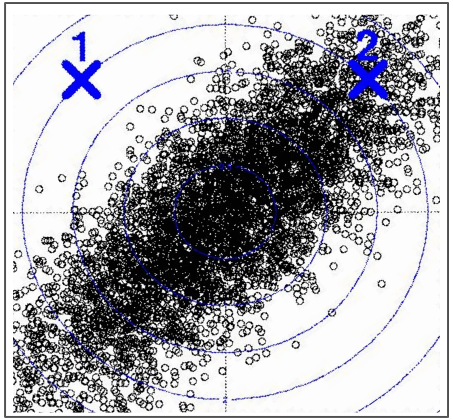
Point **normalement** distribués
Distance euclidienne

Ici les points 1 et 2 sont à une même distance euclidienne de l'origine

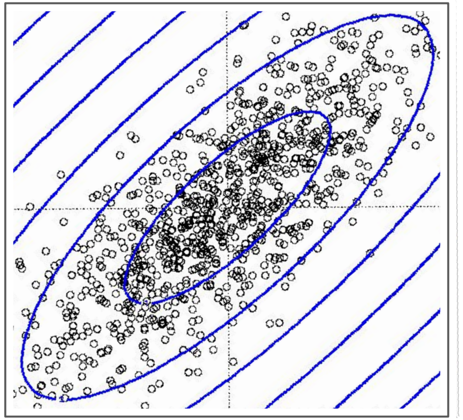
Example #2



Point **uniformément** distribués
Distance euclidienne



Point **normalement** distribués
Distance euclidienne



Point **normalement** distribués
Distance de **Mahalanobis**

Distance de Mahalanobis

- La distance de Mahalanobis est la **distance au centroïde normalisée**
- Considérons un cluster **C** de centroïde (c_1, …, c_d) et d'écart-type (σ_1, …, σ_d) ainsi qu'un point **P** (x_1, …, x_d)
- Alors la **distance normalisée** entre **P** et **C** selon la dimension **i** s'exprime sous la forme:

$$y_i = \frac{(x_i - c_i)}{\sigma_i}$$

- La distance de Mahalanobis du point P au cluster C est:

$$\mathrm{MD} = \sqrt{\sum_{i=1}^{d} y_i^2}$$

Sommaire

1. Petites décisions, grandes conséquences
2. Mesures de distances
3. Fléau de la dimension
4. Complexité des algorithmes
5. Lectures et références

Fléau de la dimension (1/2)

- Comme vu lors du cours *420-A52-SF, Algorithmes d'apprentissage supervisé*, les espaces (euclidiens ou non) à haute dimension montrent des propriétés étonnantes…
- Ces propriétés étonnantes, ou contre-intuitives, sont désignées par le **Fléau de la dimension** (curse of dimensionality)
- Notamment
  - La distance entre chaque points tend à être équivalente
  - Les vecteurs tendent à être orthogonaux deux-à-deux

Fléau de la dimension (2/2)

- Ceci peut naturellement poser problème lors de l’application du clustering (calcul de distance, …). Il convient dans ce cas de **réduire le nombre de dimensions**
  - Par Analyse en Composantes Principales (ACP)
  - Par sélection d’un sous-espace des variables
  - En utilisant d’autres types d'algorithmes
    - Correlation clustering
    - Projected clustering (PreDeCon, ...)
    - Approches hybrides (FIRES, …)

Sommaire

1. Petites décisions, grandes conséquences
2. Mesures de distances
3. Fléau de la dimension
4. Complexité des algorithmes
5. Lectures et références

Partitionnement K-moyennes

- Rappel: la solution optimale est un problème **NP-hard**
- Complexité de la solution approchée ~ $O(kn)$
- Complexité linéaire pour la solution approchée …
- … mais l’algorithme des K moyennes est de nature itérative et **peut être lent à converger** !

Partitionnement hiérarchique

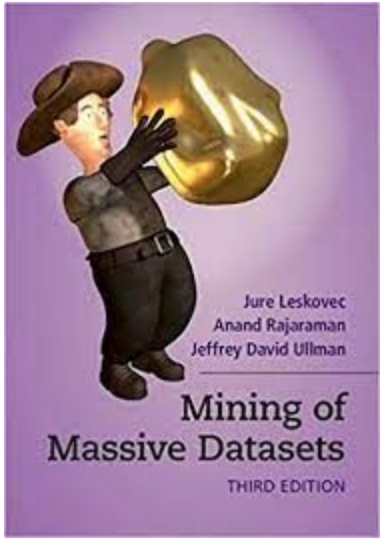
- Chaque étape requiert le **calcul des distances entre chaque paires de clusters**
- $O(n^2)$, $O((n - 1)^2)$, $O((n - 2)^2)$, ….
- $O(n^3)$! L'algorithme est **cubique** !
- Certaines optimisations permettent d'obtenir $O(n^2 \log n)$
- **Cela reste tout de même une forte limitation de l'algorithme**

Partitionnement DBSCAN

- Au pire, $O(n^2)$
- Selon la valeur de ε et si un index est utilisé, il est possible d'obtenir $O(n\log n)$

Complexité des algorithmes

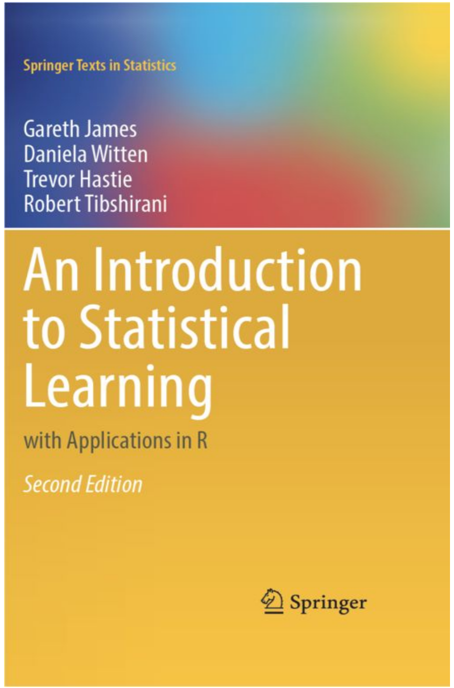
- Les complexités précédentes montrent que les algorithmes de partitionnement K-moyennes, hiérarchique et DBSCAN **ne sont pas adaptés aux données volumineuses / massives**
- Il existe des algorithmes adaptés à ce type de données
  - **Algorithme BFR**
  - **Algorithme CURE**
  - **Implémentation MapReduce de l'algorithme de K-moyennes**
- Consulter la référence [3] pour en apprendre plus



Sommaire

1. Petites décisions, grandes conséquences
2. Mesures de distances
3. Fléau de la dimension
4. Complexité des algorithmes
5. Lectures et références

Lectures recommandées



- 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”

[3] Jure Leskovec, Anand Rajaraman, and Jeffrey D. Ullman, “Mining of Massive Datasets”