Apprentissage non supervisé
Cartes Auto-Organisatrices

Master "Machine Learning for Data Science", Paris V

Allou Samé
allou.same@ifsttar.fr

2017/2018

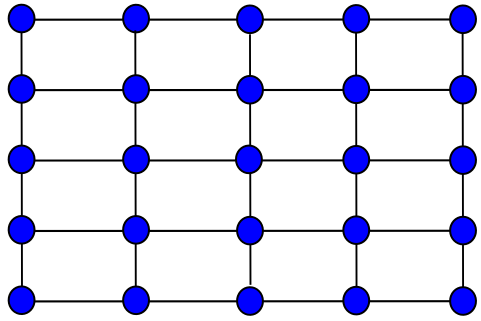
Plan

Carte topologique de Kohonen (1982) ou Self Organising MAP (SOM)

Objectifs

Associer des données multidimensionnelles aux nœuds d'une grille régulière (généralement 1D ou 2D)

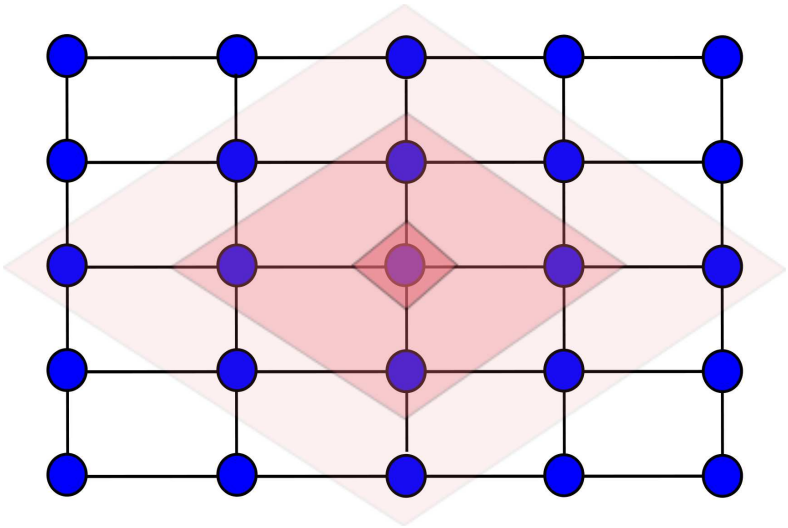
- Réduction de la dimension des données
- Respect de la topologie des données à travers la grille (des données voisines correspondent à des nœuds voisins)



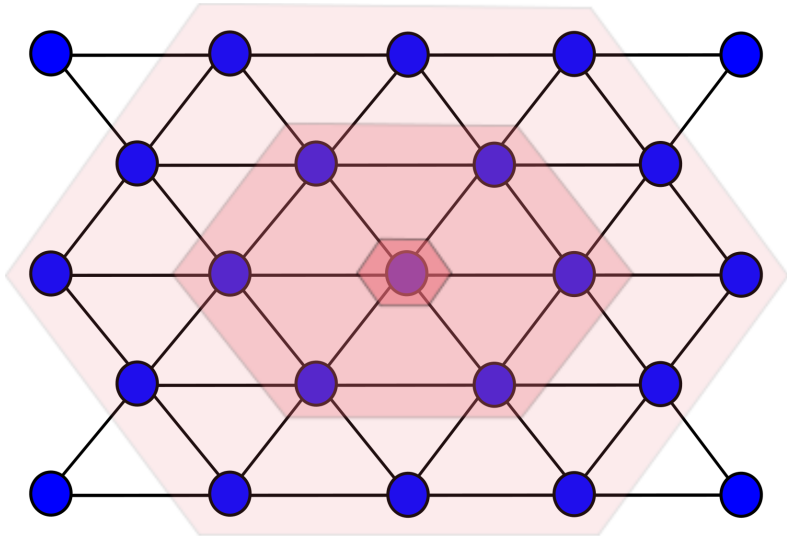
Autres synonymes

- Carte auto-organisatrice ou réseau auto-adaptatif
- SOM (Self Organizing Map)

Exemple de topologies et voisinages associés



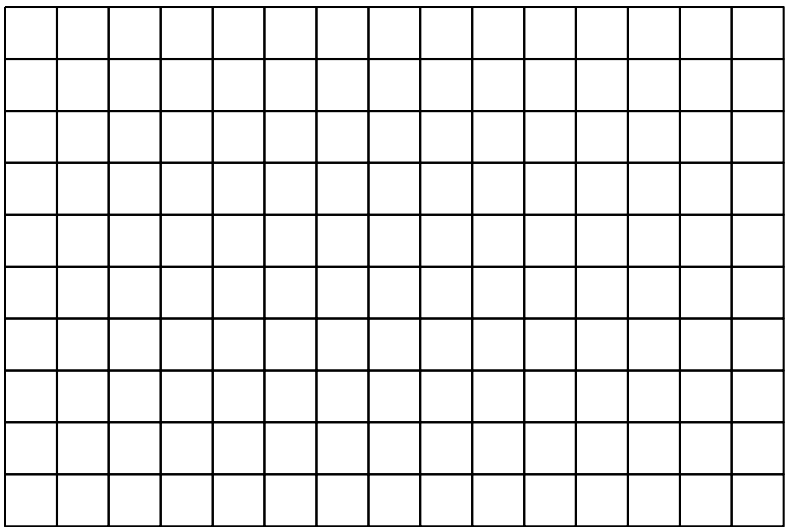
Grille rectangulaire



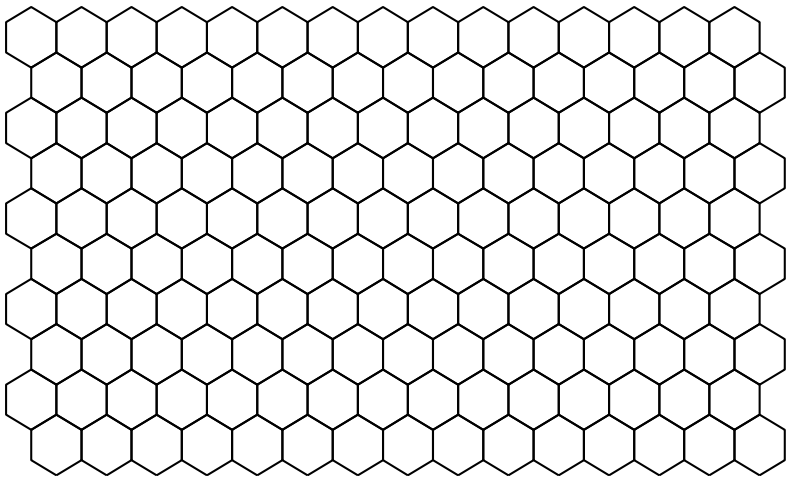
Grille hexagonale

Exemple de topologies et voisinages associés

Représentation équivalente



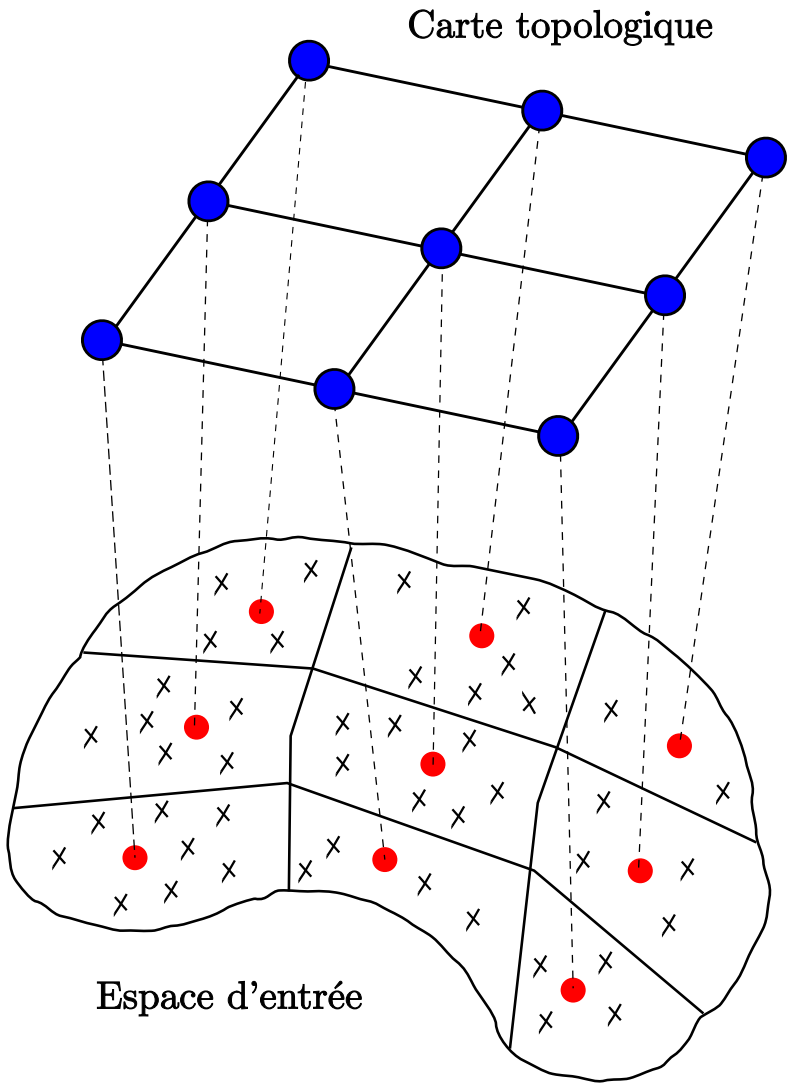
Grille rectangulaire



Grille hexagonale

Structure d'une carte topologique

- Espace d'entrée : espace dans lequel se trouvent les données d'origine ($\mathbb{R}^p$)
- Carte topologique : grille décrivant les données appelée aussi espace de sortie
- A chaque nœud de la carte topologique est associé un représentant ou centre dans l'espace d'entrée



Rappel : version online des k-means

- Choix de K centres au hasard : $\boldsymbol{\mu}_1(0), \ldots, \boldsymbol{\mu}_K(0)$
- Dès qu'un nouveau point $\mathbf{x}_{t+1}$ est présenté :
  - Affecter $\mathbf{x}_{t+1}$ à la classe dont le centre est le plus proche (soit $\boldsymbol{\mu}_k(t)$ ce centre et $n_k(t)$ l'effectif de la classe)
  - Mettre à jour le centre (gagnant) et l'effectif associé :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu}_k(t+1) &= \boldsymbol{\mu}_k(t) + \frac{1}{n_k(t)+1}\Big(\mathbf{x}_{t+1} - \boldsymbol{\mu}_k(t)\Big) \\ n_k(t+1) &= n_k(t) + 1 \end{aligned}$$

  - poser $t = t+1$

Convergence assurée dans le cadre des algorithmes de gradient stochastique : $\boldsymbol{\mu}_k(t+1) = \boldsymbol{\mu}_k(t) + \varepsilon_t\big(\mathbf{x}_{t+1} - \boldsymbol{\mu}_k(t)\big)$, avec

$$\sum_{t=1}^{\infty} \varepsilon_t = \infty \quad \sum_{t=1}^{\infty} \varepsilon_t^2 < \infty$$

L'algorithme SOM (version on-line)

- ***Initialisation*** :
  - choix de la taille de la grille (K_1 lignes et K_2 colones)
  - choix aléatoire des centres $\boldsymbol{\mu}_1, \ldots, \boldsymbol{\mu}_k, \ldots, \boldsymbol{\mu}_K$ avec $K = K_1 K_2$
- ***Répéter tant que le nombre d'itérations maxi n'est pas atteint*** :
  - choix aléatoire d'un point $\mathbf{x}$ dans le jeu de données
  - Phase de compétition :
    Affecter $\mathbf{x}$ au nœud dont le représentant $\boldsymbol{\mu}_{k^*}$ dans l'espace d'entrée est le plus proche de $\mathbf{x}$ au sens de la distance euclidienne

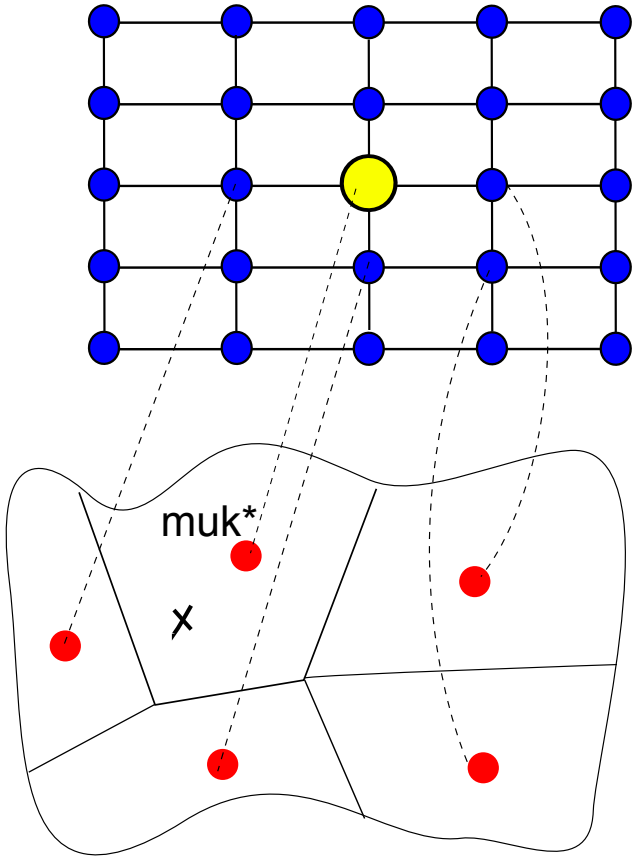
    $$k^* = \arg\min_k \|\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k\|^2$$

    $\rightarrow$ le centre $\boldsymbol{\mu}_k^*$ est appelé centre gagnant
  - Phase de coopération :
    Mettre à jour le centre $\boldsymbol{\mu}_{k^*}$ et ses voisins

    $$\boldsymbol{\mu}_k \leftarrow \boldsymbol{\mu}_k + \varepsilon_t \, h(k, k^*) \, (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k)$$

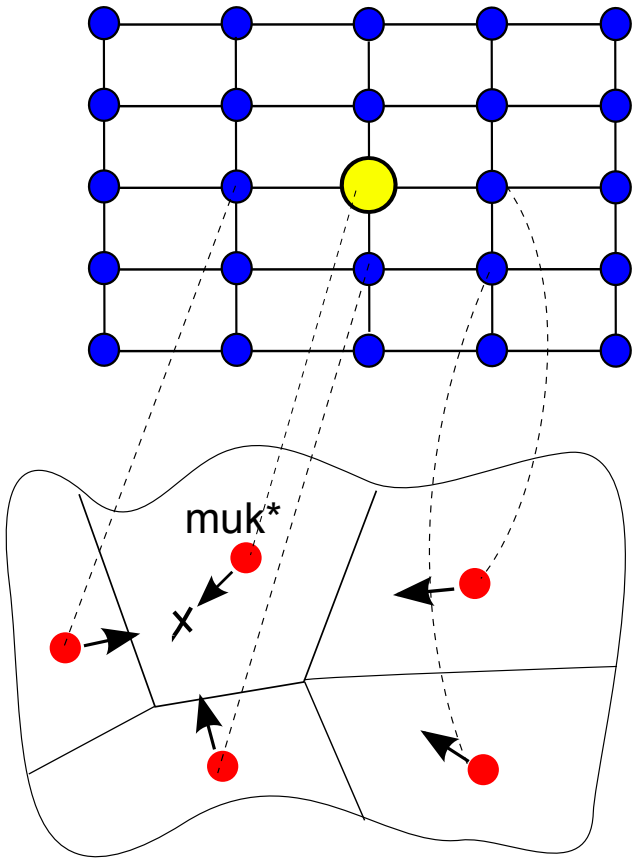
    où $h(k, k^*)$ est la fonction de voisinage et ε_t est le pas d'apprentissage.

Algorithme SOM : phase de compétition



Sélection du nœud associé au centre le plus proche de $\mathbf{x}$
(centre gagnant $\boldsymbol{\mu}_{k^*}$)

Algorithme SOM : phase de collaboration



Le centre gagnant $\boldsymbol{\mu}_{k^*}$ et les autres centres sont rapprochés du point $\mathbf{x}$ avec une amplitude qui dépend de leur proximité (dans l'espace de sortie) avec le centre gagnant

Fonction de voisinage $h(k, k^*)$

Noyau gaussien

$$h(k, k^*) = \exp\left(-\frac{\|c_{k*} - c_k\|^2}{2\,\sigma^2}\right)$$

- $\|.\|$ désigne la distance euclidienne
- c_k et c_{k^*} sont les coordonnées de $\boldsymbol{\mu}_k$ et $\boldsymbol{\mu}_{k*}$ dans la grille
- $\sigma > 0$ permet de régler l'amplitude du voisinage de c_{k^*}.

Fonction de voisinage $h(k, k^*)$

Noyau gaussien

$$h(k, k^*) = \exp\left(-\frac{\|c_{k*} - c_k\|^2}{2\,\sigma^2}\right)$$

- $\|.\|$ désigne la distance euclidienne
- c_k et c_{k^*} sont les coordonnées de $\boldsymbol{\mu}_k$ et $\boldsymbol{\mu}_{k*}$ dans la grille
- $\sigma > 0$ permet de régler l'amplitude du voisinage de c_{k^*}.

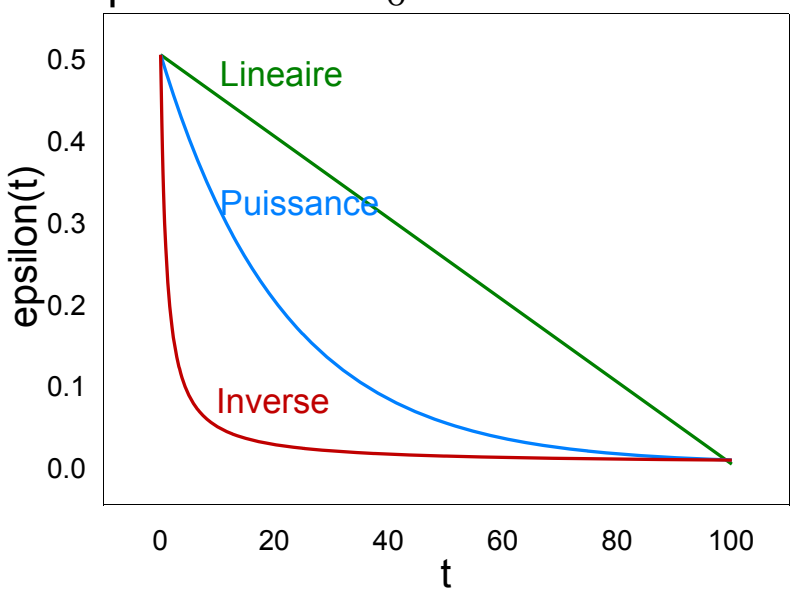
Remarque

- $h(k, k^*)$ est une fonction décroissante de la distance entre c_k et c_{k^*}
- $h(k^*, k^*) = 1$
- $h(k, k^*)$ tend vers 0 quand c_k et c_{k^*} sont très éloignés

Pas (ou taux) d'apprentissage ε_t

- Le pas ε_t est une fonction décroissante du nombre d'itérations t, telle que $0 \leq \varepsilon_t \leq 1$
- Les pas généralement utilisés sont :
  - fonction linéaire $\varepsilon_t = \varepsilon_0(1 - \frac{t}{T})$
  - fonction puissance $\varepsilon_t = \varepsilon_0 \exp\left(-\frac{t}{T}\right)$
  - fonction inverse $\varepsilon_t = \frac{\varepsilon_0}{1+\frac{c_0 t}{T}}$

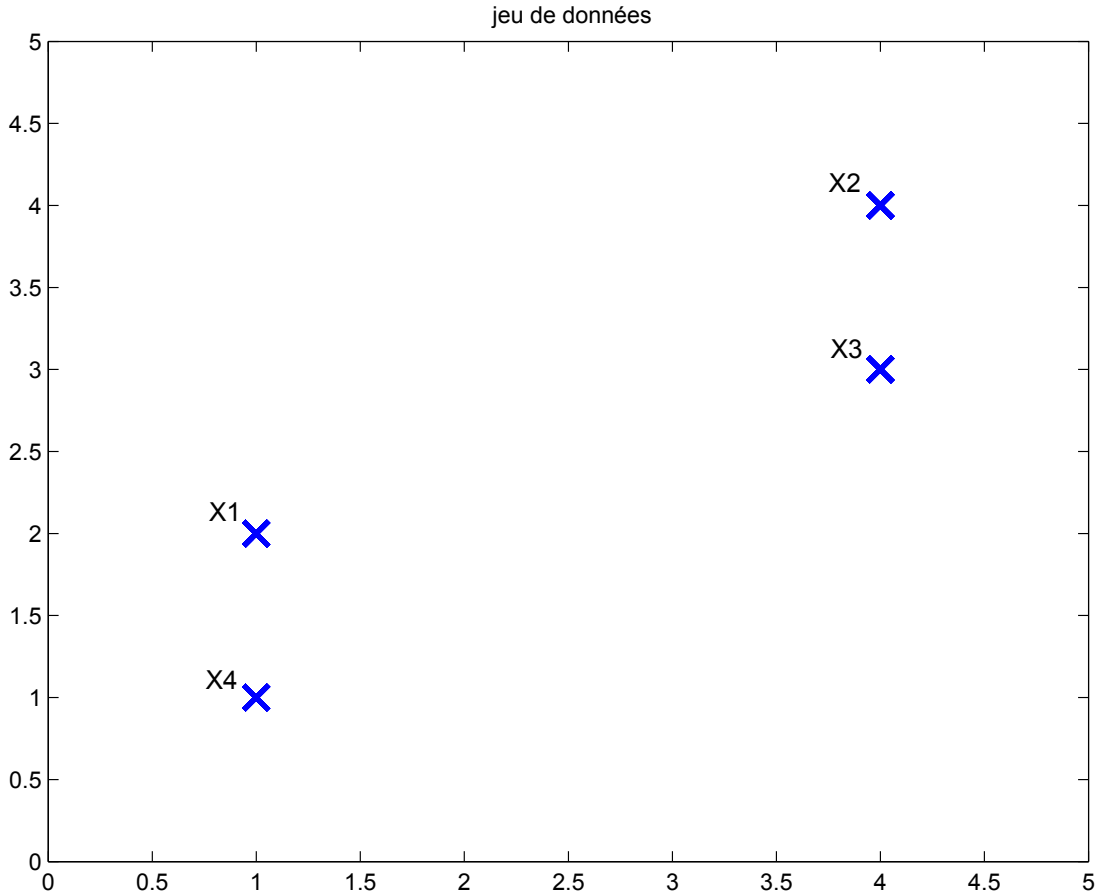
Exemple avec $\varepsilon_0 = 0.5$ et $T = 100$



où ε_0 est un pas initial et T est le nombre total d'itérations

Exemple illustratif

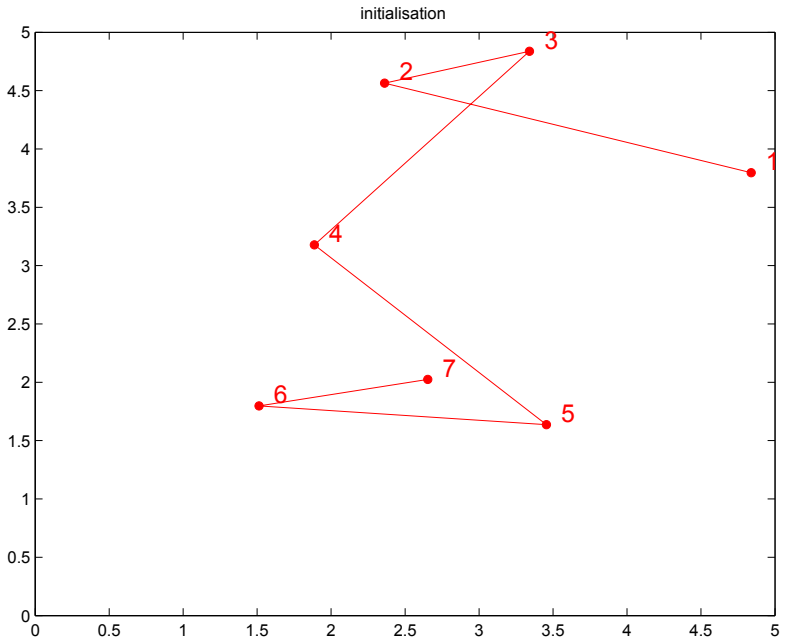
Jeu de données : 4 points de $\mathbb{R}^2$
$\mathbf{x}_1 = (1\ \ 2)$, $\mathbf{x}_2 = (4\ \ 4)$, $\mathbf{x}_3 = (4\ \ 3)$, $\mathbf{x}_4 = (1\ \ 1)$ formant deux groupes



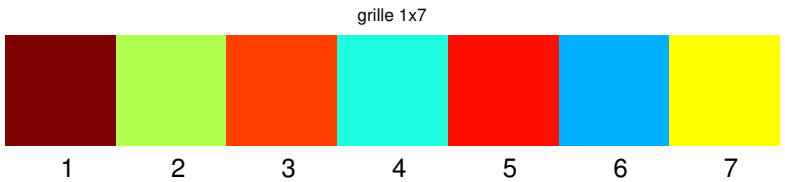
On se propose de décrire ces données à l'aide d'une grille rectangulaire 1×7.

Exemple illustratif

Initialisation des centres dans l'espace d'entrée



Grille dans l'espace de sortie

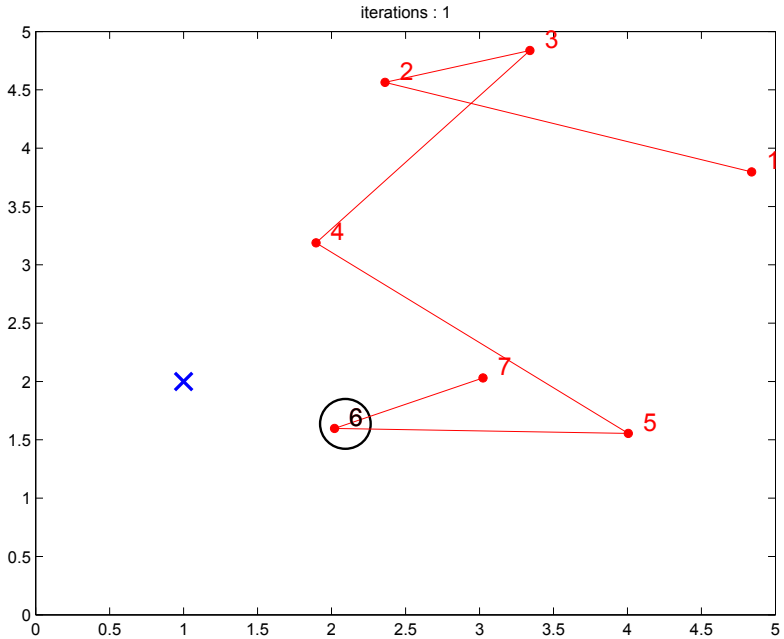


abscisse des points codée en couleur : bleu (0) $\rightarrow$ jaune (2.5) $\rightarrow$ rouge (5)

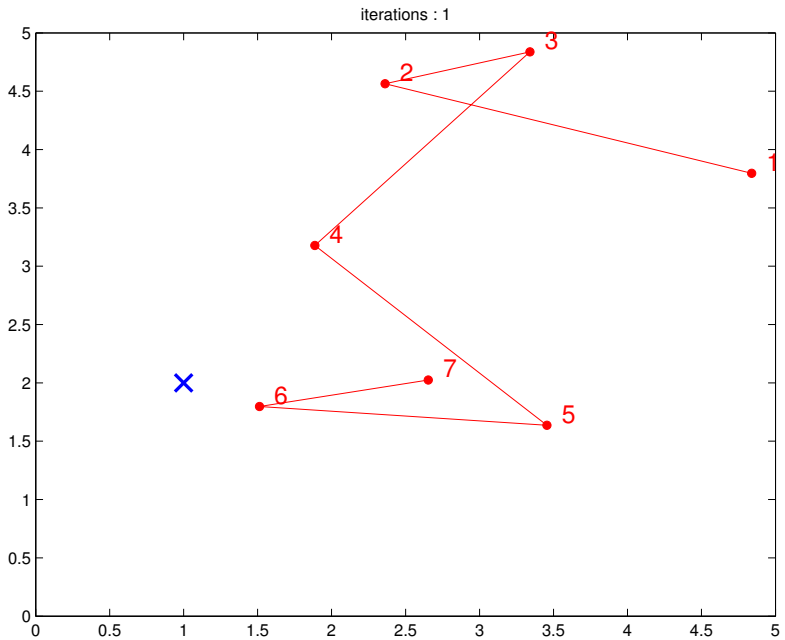
Exemple illustratif

Tirage aléatoire d'un point : soit $\mathbf{x}_1$ ce point

Phase de compétition
centre gagnant : $\mathbf{g}_6$



Phase de coopération
mise à jour des centres

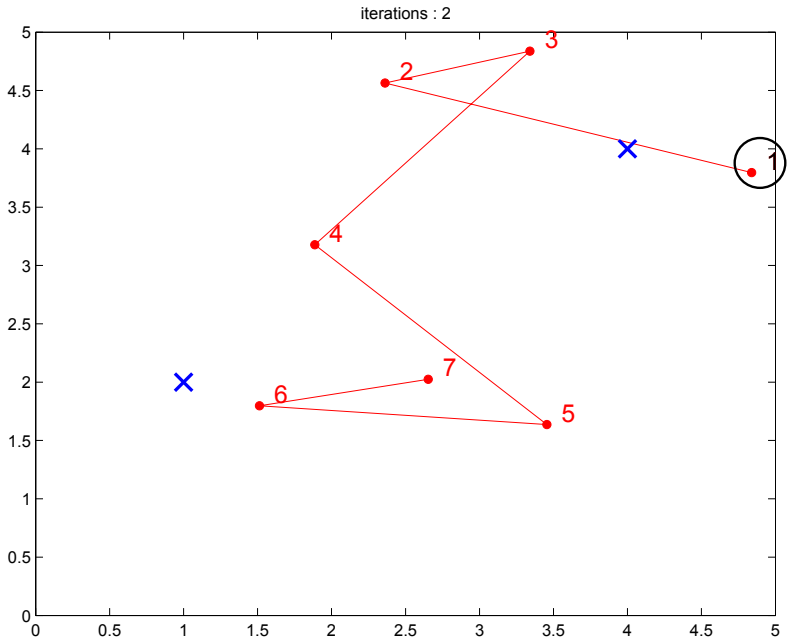


Grille dans l'espace de sortie

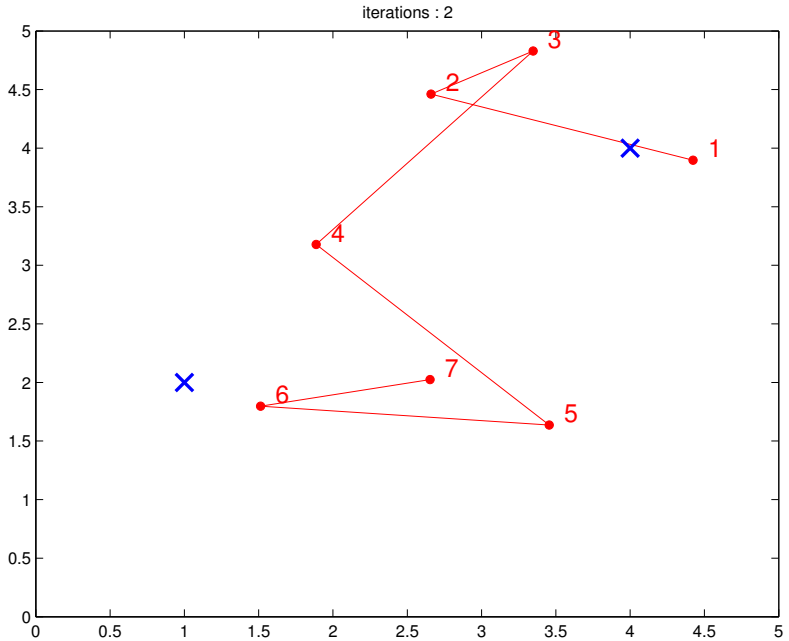
Exemple illustratif

Tirage aléatoire d'un point : soit $\mathbf{x}_2$ ce point

Phase de compétition
centre gagnant : $\mathbf{g}_1$



Phase de coopération
mise à jour des centres

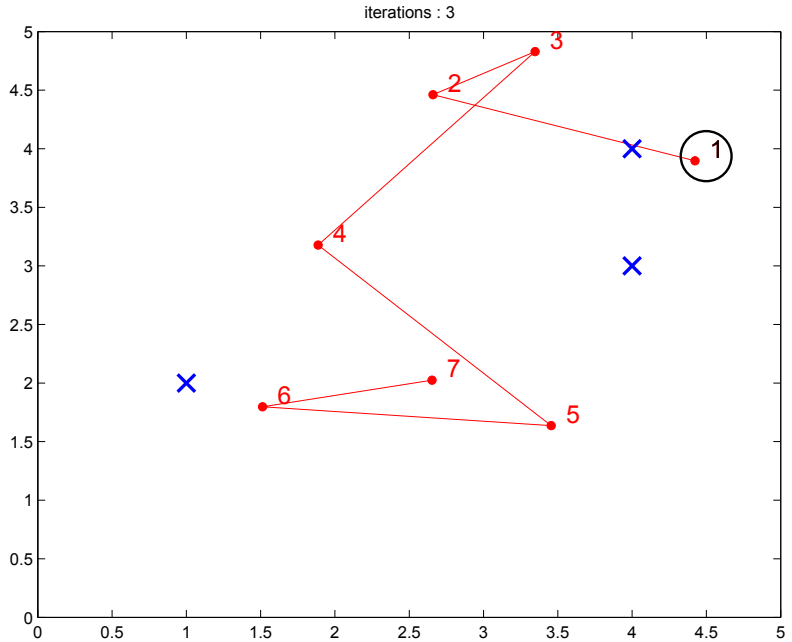


Grille dans l'espace de sortie

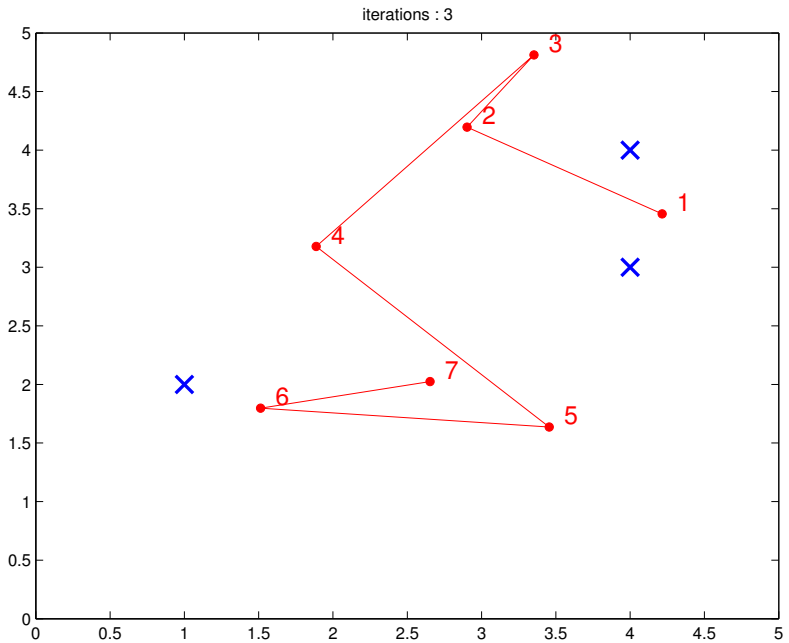
Exemple illustratif

Tirage aléatoire d'un point : soit $\mathbf{x}_3$ ce point

Phase de compétition
centre gagnant : $\mathbf{g}_1$



Phase de coopération
mise à jour des centres

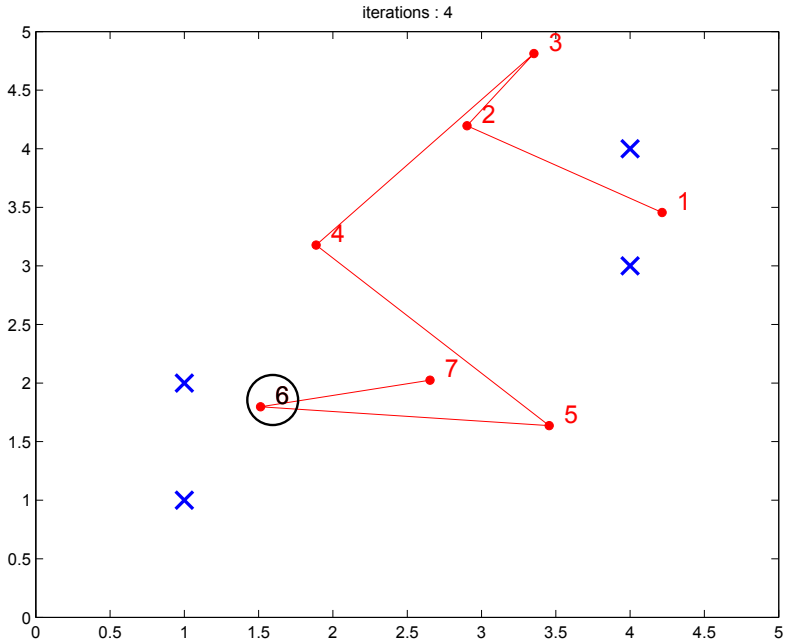


Grille dans l'espace de sortie

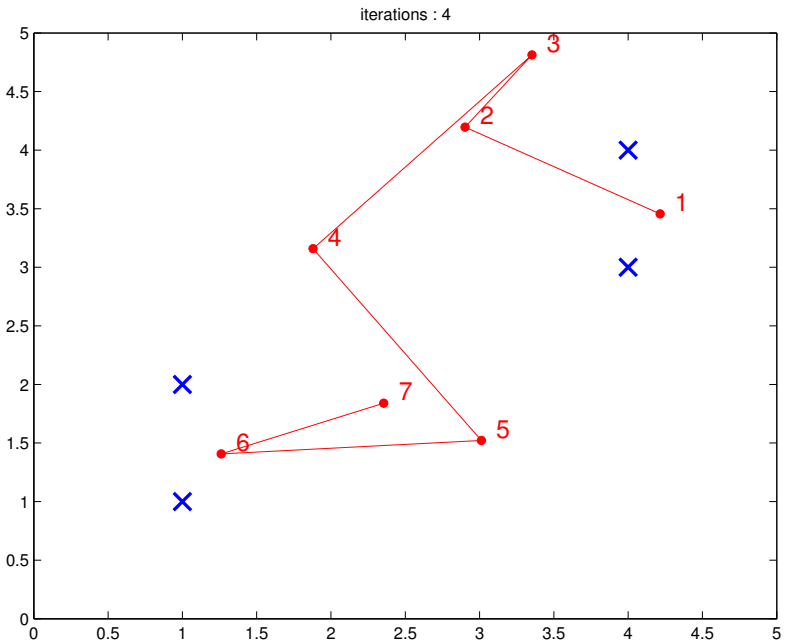
Exemple illustratif

Tirage aléatoire d'un point : soit $\mathbf{x}_4$ ce point

Phase de compétition
centre gagnant : $\mathbf{g}_6$



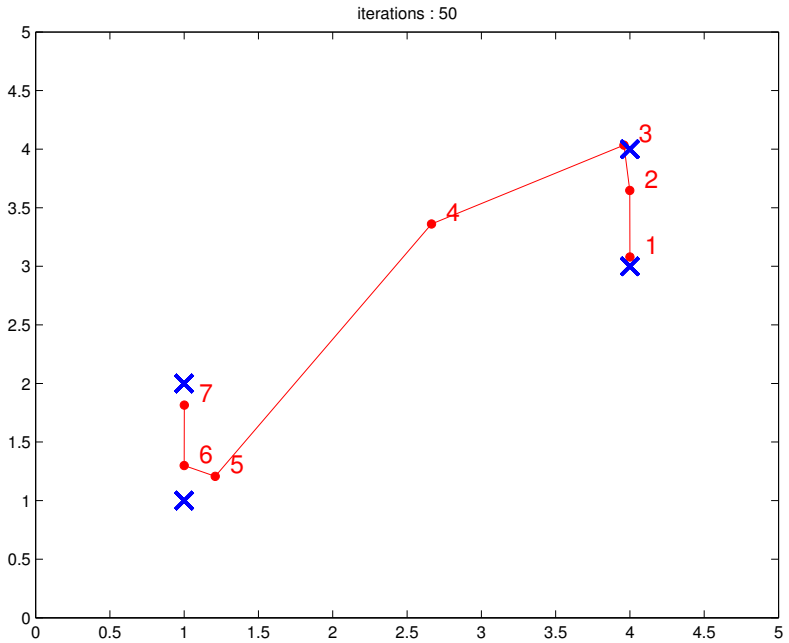
Phase de coopération
mise à jour des centres



Grille dans l'espace de sortie

Exemple illustratif

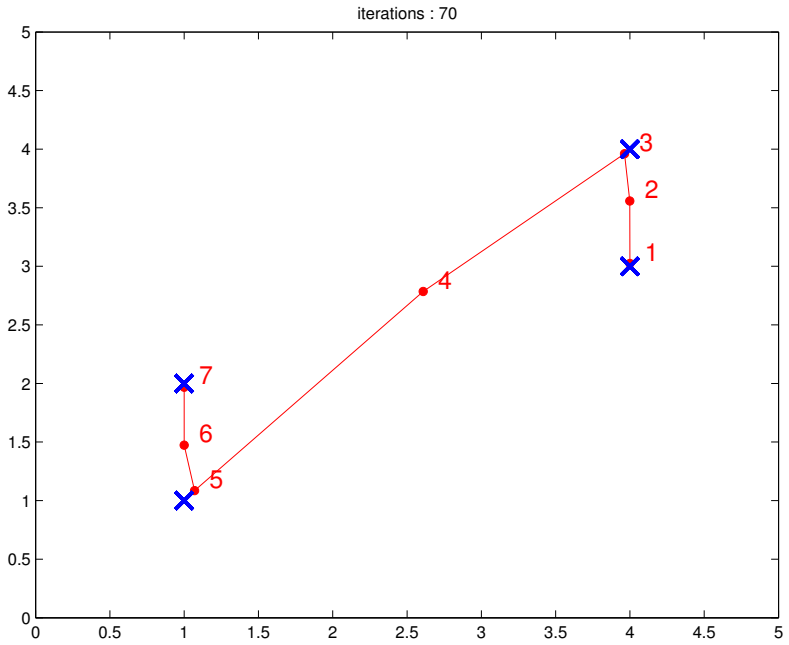
Centres obtenus au 50^{e} tirage (après la phase de coopération)



Grille dans l'espace de sortie

Exemple illustratif

Centres obtenus au 70^{e} tirage (après la phase de coopération)



Grille dans l'espace de sortie

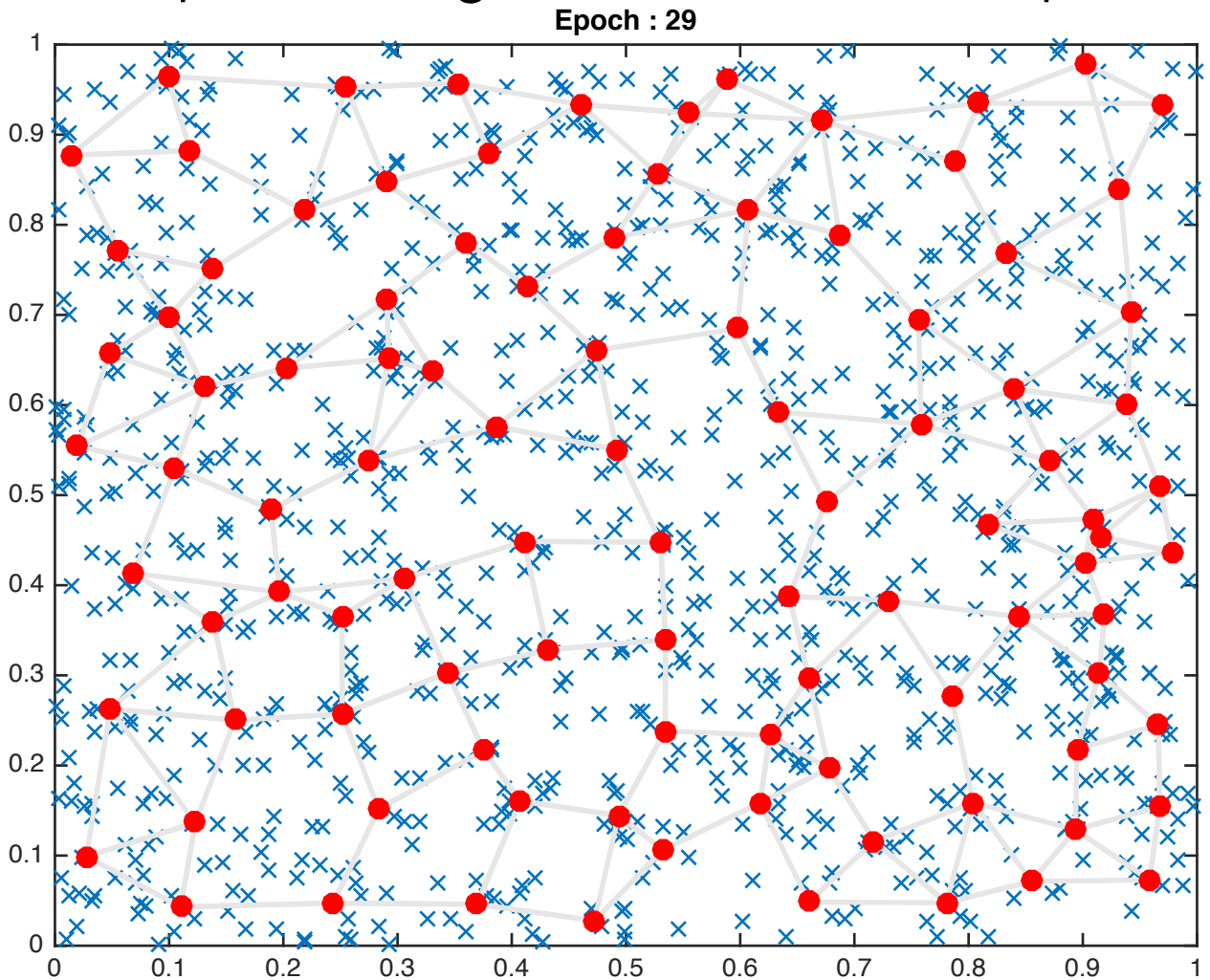
On retrouve bien la structure initiale (deux classes) des données

Utilisation des cartes de Kohonen en classification automatique

- L'algorithme SOM fonctionne en affectant itérativement chaque individu (de l'espace d'entrée) à un nœud de la carte topologique.
- Ainsi chaque nœud de la grille peut être considéré comme une classe.
- Néanmoins, si l'objectif est de classifier les observations, ceci peut conduire généralement à un trop grand nombre de classes. Dans ce cas, les nœuds de la grille doivent être eux-aussi regroupés en classes.
- La mise en œuvre de l'algorithme SOM nécessite généralement un re-bouclage cyclique sur le même ensemble de données pour que l'algorithme converge.

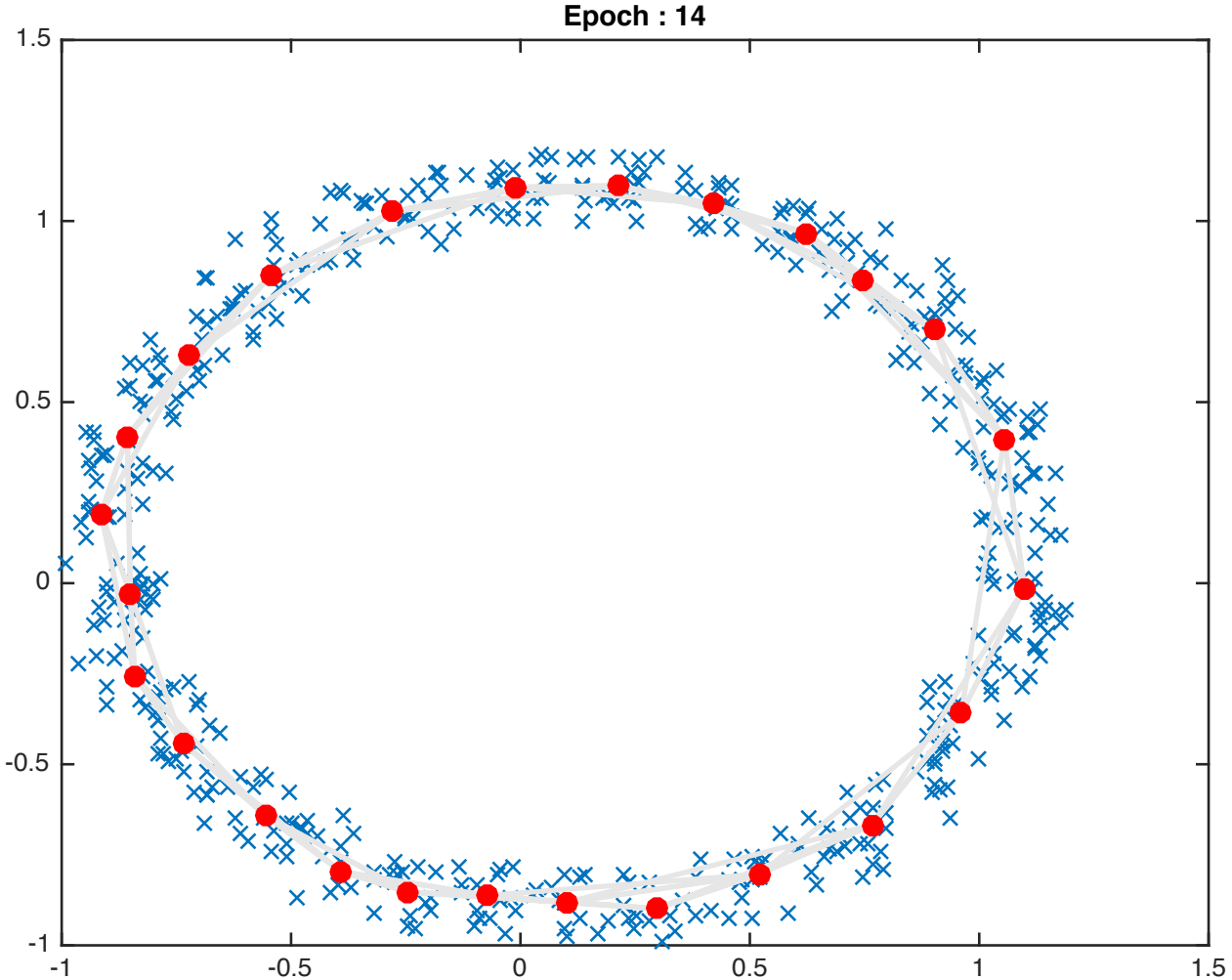
Exemple sur des données uniformément distribuées dans le plan

Données (1000 points) et grille 10×10 dans l'espace d'entrée



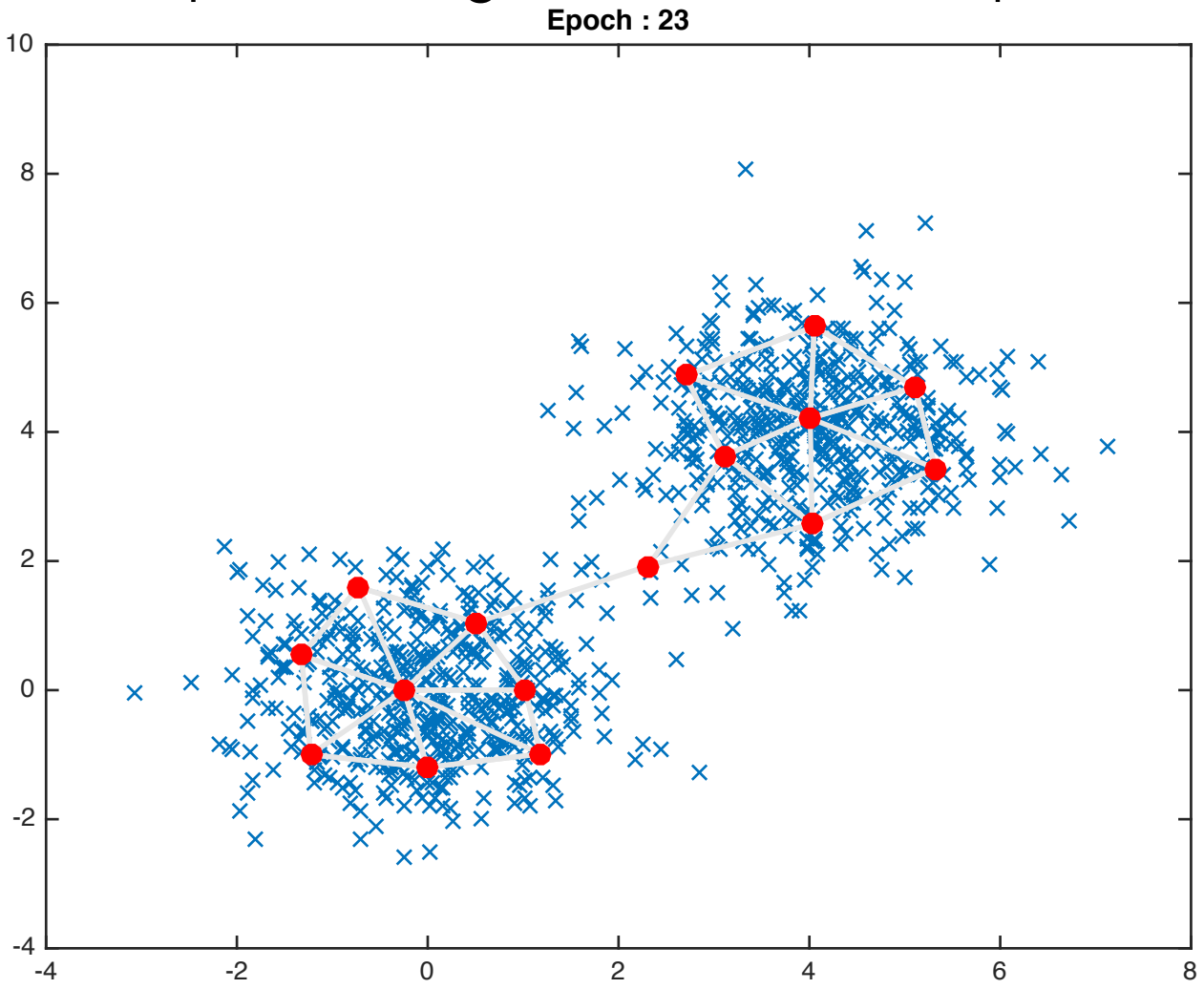
Exemple sur des données en forme de circle

Données (500 points) et grille 5×5 dans l'espace d'entrée



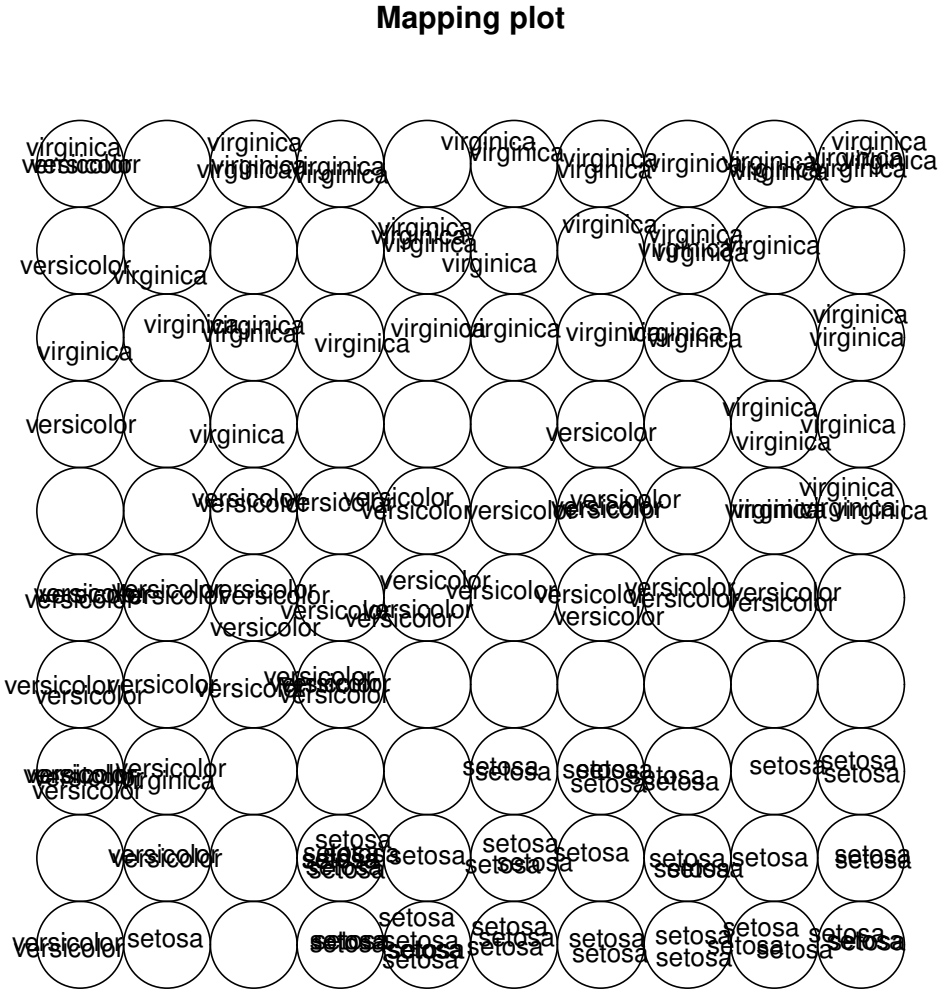
Exemple sur des données constituées de classes

Données (500 points) et grille 4×4 dans l'espace d'entrée



Exemple des données IRIS de Fisher

Visualisation des données sur une grille (à l'intérieur des grilles les vrais labels des données sont affichés)

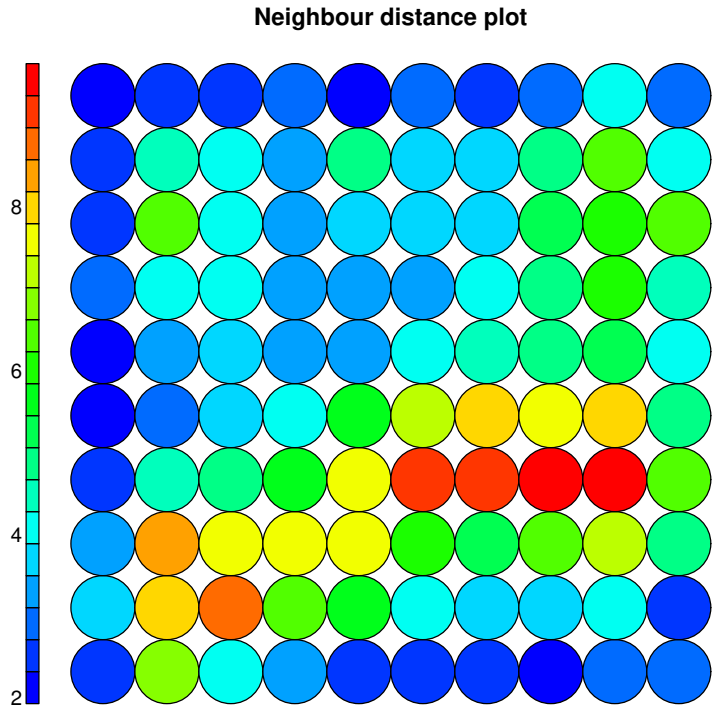


Visualisation des résultats : Unified-Distance Matrix ou U-matrix

- Chaque entrée de la matrice représente la moyenne des distances euclidiennes avec ses neurones adjacents.
- Une valeur faible la matrice indique que les nœuds voisins sont proches dans l'espace d'entrée alors qu'une valeur élevée indique des nœuds voisins éloignés dans l'espace d'entrée, même s'ils sont proches dans l'espace de sortie.

Visualisation des résultats : Unified-Distance Matrix ou U-matrix

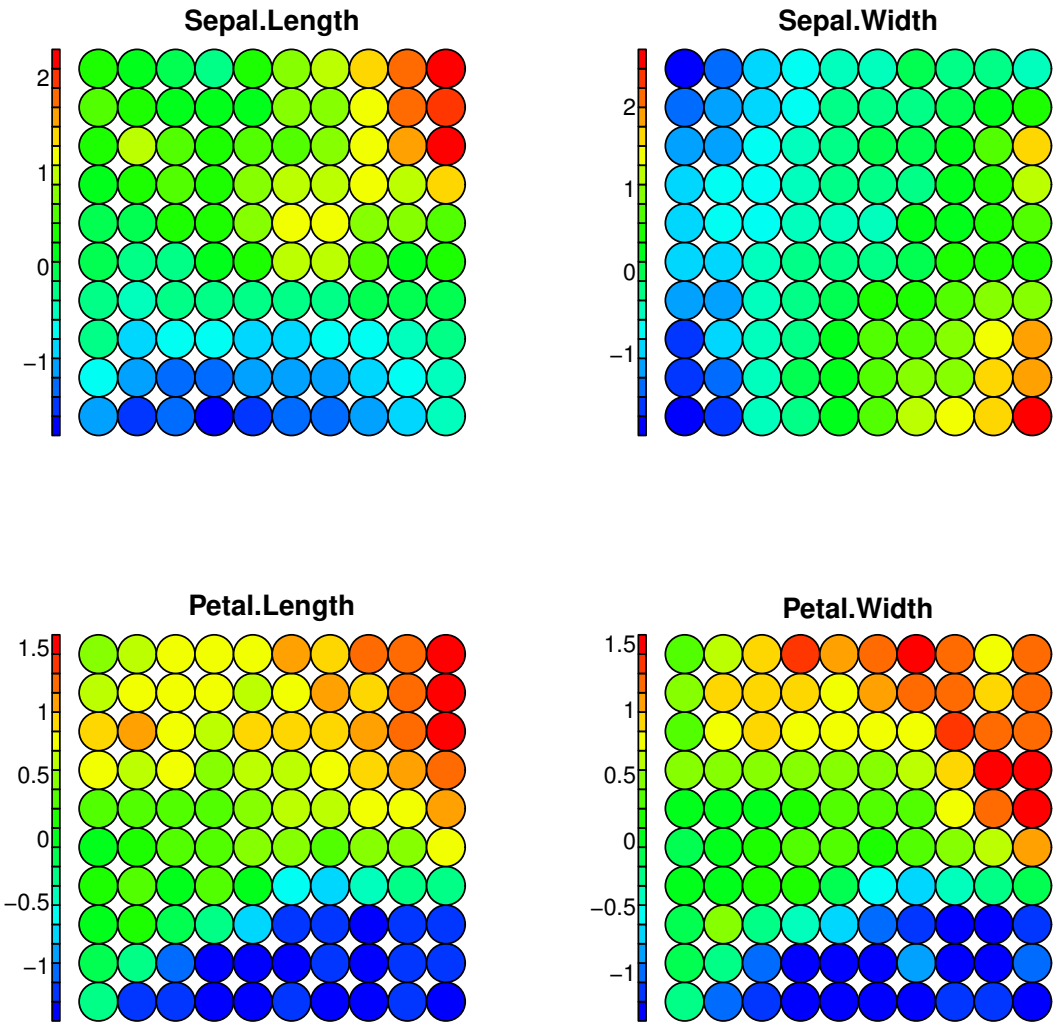
U-matrix obtenue pour les donnée IRIS



La bande jaune-rouge représente une frontière entre classes (espèces).

Visualisation des résultats : cartes par variable appelées aussi “components planes”

Pour chaque variable, les coordonnées des centres obtenus à l’issue de l’algorithme SOM sont affichés suivant un code de couleurs



Différences par rapport à l'algorithme des k-means

- L'algorithme SOM fait penser à la version séquentielle de l'algorithme des k-means.
- Dans la méthode des k-means, l'introduction d'une nouvelle observation conduit au recalcul du centre de sa classe.
- Dans l'algorithme SOM, on modifie non seulement le centre gagnant, mais aussi les centres voisins.
- Contrairement à la méthode des k-means, la méthode de Kohonen opère en plus une réduction du nombre de dimensions de l'espace d'entrée, comme dans l'ACP.
- A la différence de l'ACP, la projection résultante est non linéaire.

Convergence de l'algorithme SOM

- Pas de résultats théoriques sur la convergence de l'algorithme SOM.
- Cependant si la distribution des données est discrète, il a été prouvé que l'algorithme SOM est un algorithme de gradient stochastique qui minimise, quand le nombre d'itérations tend vers l'infini, un critère analogue à l'inertie intraclasse.

Algorithme SOM dans R

```
library(class)
library(MASS)
library(kohonen)

x = scale(iris[,-5], center = TRUE, scale = TRUE)

SOM.IRIS = som(x, grid = somgrid(10,10, "rectangular"))
SOM.IRIS$codes # coordonnees des centres (espace d'entrée)
SOM.IRIS$distances # distances entres neuronnes adjacents
SOM.IRIS$changes # erreur entre les donnees et les centres

colour1 = tricolor(SOM.IRIS$grid)
plot(SOM.IRIS, type="mapping", bgcol = rgb(colour1))
plot(SOM.IRIS, type="mapping", labels=iris[,5], pchs=2)
plot(SOM.IRIS,type="quality")  # quqlité de représentation
plot(SOM.IRIS,type="counts") # quqlité de représentation
plot(SOM.IRIS,type="codes")
```

Algorithme SOM dans R

```
# Modification de la palette de couleurs (bleu -> rouge)
coolBlueHotRed = function(n, alpha = 1)
{
rainbow(n, end=4/6, alpha=alpha)[n:1]
}

# U-matrix (matrice de voisinage)
plot(SOM.IRIS, type="dist.neighbours",palette.name=coolBlueHotRed)

# Component planes
par(mfrow=c(2,2))
for (i in 1:4)
{
plot(SOM.IRIS, type="property", palette.name=coolBlueHotRed,
property=SOM.IRIS$codes[,i], main=colnames(SOM.IRIS$codes)[i])
}
```

Exercice

1. Appliquer l'algorithme SOM avec une grille rectangulaire 10×10 sur les données *aiguillage*
2. Représenter graphiquement l'écart entre les données et les centres, obtenu au cours des itérations de l'algorithme.
3. Représenter la matrice de voisinage.
4. Représenter les centres (espace d'entrée) ainsi que la grille (espace de sortie) obtenus.
5. Réaliser un clustering des nœuds de la grille. Colorer la grille suivant la classification obtenue.