Classification non supervisée (Clustering)

Classification hiérarchique

Cathy Maugis-Rabusseau

3 MIC / INSA Toulouse

Chapitre 3 - Classification hiérarchique

Introduction

- Données : On observe n individus décrits par p variables

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{np} \end{bmatrix} \text{ avec } x_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip}) \in \mathcal{X}$$

- Objectif : Hiérarchiser les données c'est à dire obtenir une suite de partitions emboîtées des données.

- Notation : on note d la dissimilarité choisie entre les individus

Hiérarchie

Définition : Hiérarchie

Une **hiérarchie** $\mathcal{H}$ est un ensemble de parties de **X** satisfaisant:

1. $\forall 1 \leq i \leq n, \ \{x_i\} \in \mathcal{H}$
2. $\mathbf{X} \in \mathcal{H}$
3. $\forall A, B \in \mathcal{H}, \ A \cap B = \emptyset \text{ ou } A \subset B \text{ ou } B \subset A$

Exemple

$\{\{1\}, \{2\}, \{3\}, \{4\}, \{1, 2\}, \{3, 4\}, \{1, 2, 3, 4\}\}$
est une hiérarchie de $\{1, 2, 3, 4\}$.

Hiérarchie indicée

Définition : Hiérarchie indicée

Une **hiérarchie indicée** est un couple $(\mathcal{H}, h)$ où $\mathcal{H}$ est une hiérarchie et $h : \mathcal{H} \to \mathbb{R}^+$ satisfait :

1. $\forall A \in \mathcal{H},\ h(A) = 0 \Leftrightarrow A \text{ est un singleton}$
2. $\forall A, B \in \mathcal{H},\ A \neq B,\ A \subset B \Rightarrow h(A) \leq h(B)$

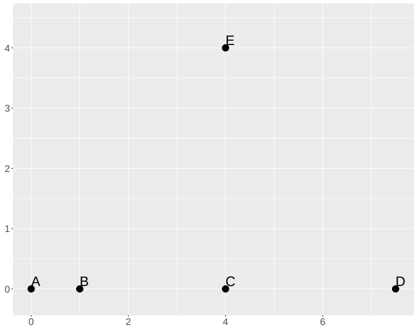
Exemple

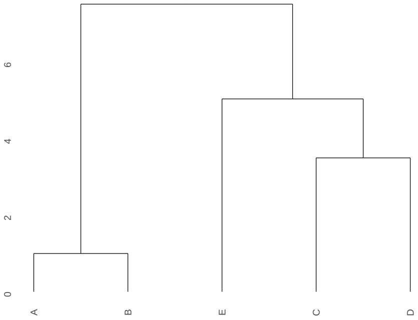
$\mathcal{H} = \{\{A\}, \{B\}, \{C\}, \{D\}, \{E\}, \{C, D\}, \{A, B\},\ \{C, D, E\}, \{A, B, C, D, E\}\}$

- $h(\{x\}) = 0,\ \forall x \in \{A, B, C, D, E\}$
- $h(\{A, B\}) = 1$
- $h(\{C, D\}) = 3.5$
- $h(\{C, D, E\}) = 5.04$
- $h(\{A, B, C, D, E\}) = 7.52$

$\Rightarrow$ Représentation graphique d'une hiérarchie indicée : le **dendrogramme**.

Représentation par dendrogramme





La représentation du dendrogramme n'est pas unique : si $\mathbf{X}$ est un ensemble de n points, il existe 2^{n-1} possibilités pour ordonner les feuilles de l'arbre.

Construction d'une hiérarchie indicée

- 1ère stratégie : on part du bas du dendrogramme (les singletons) et on agrège deux à deux les parties les plus proches jusqu'à obtenir qu'une seule classe $\Rrightarrow$ **Classification Ascendante Hiérarchique** (CAH)

Question : Comment choisir les classes à agréger ?

- 2ème stratégie : on part du haut du dendrogramme en procédant par divisions successives de $\underline{\mathbf{x}}$ jusqu'à obtenir des classes réduites à des singletons
  $\Rrightarrow$ **Classification Descendante Hiérarchique** (CDH)

Question : Comment choisir la classe à diviser à chaque étape ?

Algorithme général de CAH

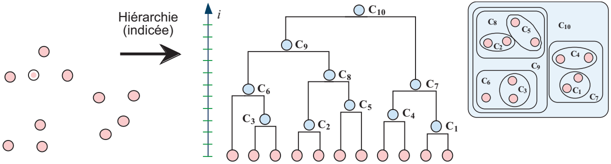
- Initialisation : on part de la partition en singletons

$$\mathcal{P}_n = \{\{x_1\}, \dots, \{x_n\}\}$$

- Étapes agrégatives :
  - on part de la partition précédente $\mathcal{P}_K = \{\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_K\}$ en K classes
  - on agrège les deux classes $\mathcal{C}_k$ et $\mathcal{C}_{k'}$ qui minimisent une **mesure d'agrégation** $D(\mathcal{C}_k, \mathcal{C}_{k'})$: $\mathcal{C}_{k \cup k'} = \mathcal{C}_k \cup \mathcal{C}_{k'}$
  - on obtient ainsi une partition en $K - 1$ classes

- On recommence l'étape d'agrégation jusqu'à obtenir une partition en une seule classe

(Bisson 2001)



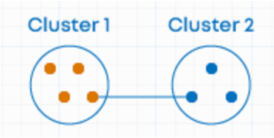
Les choix à faire

- Choix d'une **dissimilarité** d entre les points
- Choix d'une **mesure d'agrégation** D entre classes
- Construction d'un dendrogramme
- **Critère pour la coupure du dendrogramme** pour en déduire une classification des données

Chapitre 3 - Classification hiérarchique

Lien simple (*Single linkage*)

$$D(\mathcal{C}_k, \mathcal{C}_{k'}) = \min_{i \in \mathcal{C}_k,\, \ell \in \mathcal{C}_{k'}} d(x_i, x_\ell)$$



- Arbre couvrant minimal
- Classes avec des diamètres très différents
- Effet de chaînage : tendance à l'agrégation plutôt qu'à la création de nouvelles classes
- Sensibilité aux individus bruités

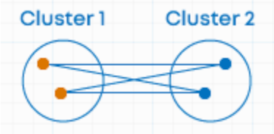
Lien complet (*Complete linkage*)

$$D(\mathcal{C}_k, \mathcal{C}_{k'}) = \max_{i \in \mathcal{C}_k, \ell \in \mathcal{C}_{k'}} d(x_i, x_\ell)$$

- Crée des classes compactes (contrôle du diamètre) : cette fusion engendre l'accroissement le plus faible des diamètres
- Pas de contrôle de la séparation: classes arbitrairement proches
- Sensibilité aux individus bruités

Lien moyen (*Average linkage*)

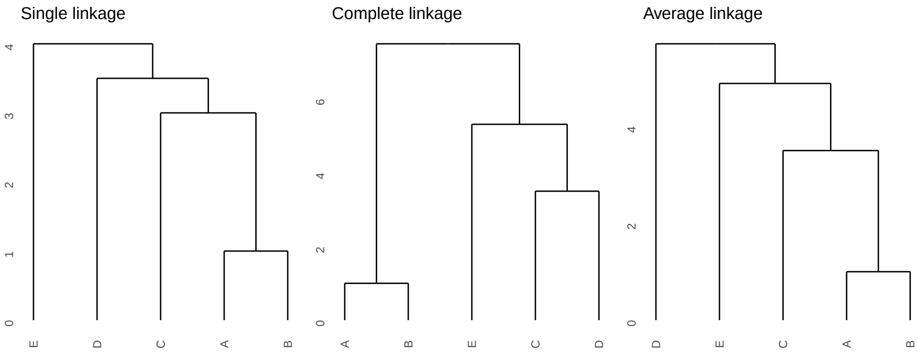
$$D(\mathcal{C}_k, \mathcal{C}_{k'}) = \frac{1}{|\mathcal{C}_k||\mathcal{C}_{k'}|} \sum_{i \in \mathcal{C}_k} \sum_{\ell \in \mathcal{C}_{k'}} d(x_i, x_\ell)$$



- Compromis entre les deux liens précédents : bon équilibre entre séparation des classes et diamètre des classes
- Tendance à produire des classes de variance proche

Exemple jouet

- d = distance euclidienne usuelle



Méthode de Ward

Proposition

Soit $\mathcal{P}_K = \{\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_K\}$ une partition des données et soit $k \neq k'$. Si l'on rassemble les deux classes $\mathcal{C}_k$ et $\mathcal{C}_{k'}$ en une classe notée $\mathcal{C}_{k \cup k'}$ alors l'inertie interclasse diminue (l'inertie intraclasse augmente) de :

$$\frac{|\mathcal{C}_k||\mathcal{C}_{k'}|}{|\mathcal{C}_k| + |\mathcal{C}_{k'}|} d(m_k, m_{k'})^2.$$

- m_k (resp. $m_{k'}$) centre de gravité de $\mathcal{C}_k$ (resp. $\mathcal{C}_{k'}$)
- d distance euclidienne

Méthode de Ward : Elle consiste à choisir à chaque étape les deux classes dont le regroupement implique une augmentation minimale de l'inertie intraclasse.

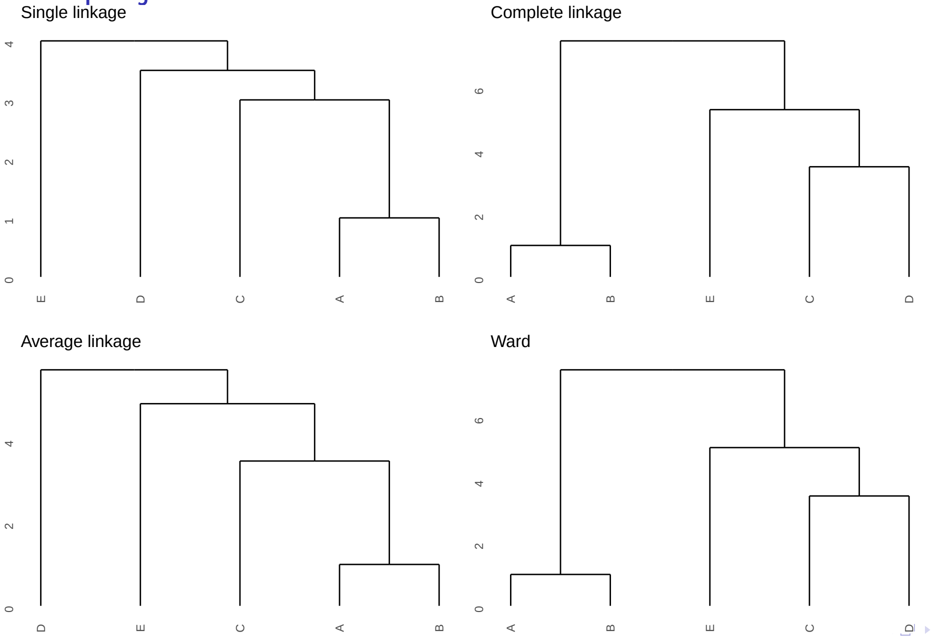
Mesures d'agrégation de Ward

$$D(\mathcal{C}_k, \mathcal{C}_{k'}) = \frac{|\mathcal{C}_k||\mathcal{C}_{k'}|}{|\mathcal{C}_k| + |\mathcal{C}_{k'}|} d(m_k, m_{k'})^2$$

où m_k (resp. $m_{k'}$) centre de gravité de $\mathcal{C}_k$ (resp. $\mathcal{C}_{k'}$) et d est une distance euclidienne.

- Tendance à construire des classes ayant des effectifs égaux pour un niveau de hiérarchie donné
- Favorise les classes sphériques

Exemple jouet



Formule de Lance et Williams

Cette formule permet de mettre à jour les distances pour l'agrégation

$$\begin{aligned} D(\mathcal{C}_u, \mathcal{C}_{k\cup k'}) &= \alpha_1 D(\mathcal{C}_u, \mathcal{C}_k) + \alpha_2 D(\mathcal{C}_u, \mathcal{C}_{k'}) + \alpha_3 D(\mathcal{C}_k, \mathcal{C}_{k'}) \\ &\quad + \alpha_4 |D(\mathcal{C}_u, \mathcal{C}_k) - D(\mathcal{C}_u, \mathcal{C}_{k'})| \end{aligned}$$

Lien	α_1	α_2	α_3	α_4
simple	0.5	0.5	0	-0.5
complet	0.5	0.5	0	0.5
moyen	$\frac{\lvert\mathcal{C}_k\rvert}{\lvert\mathcal{C}_{k'}\rvert+\lvert\mathcal{C}_k\rvert}$	$\frac{\lvert\mathcal{C}_{k'}\rvert}{\lvert\mathcal{C}_{k'}\rvert+\lvert\mathcal{C}_k\rvert}$	0	0
Ward	$\frac{\lvert\mathcal{C}_u\rvert+\lvert\mathcal{C}_k\rvert}{\lvert\mathcal{C}_k\rvert+\lvert\mathcal{C}_{k'}\rvert+\lvert\mathcal{C}_u\rvert}$	$\frac{\lvert\mathcal{C}_u\rvert+\lvert\mathcal{C}_{k'}\rvert}{\lvert\mathcal{C}_k\rvert+\lvert\mathcal{C}_{k'}\rvert+\lvert\mathcal{C}_u\rvert}$	$-\frac{\lvert\mathcal{C}_u\rvert}{\lvert\mathcal{C}_k\rvert+\lvert\mathcal{C}_{k'}\rvert+\lvert\mathcal{C}_u\rvert}$	0

Indicer la hiérarchie

- En général, $\forall A, B \in \mathcal{H},\ h(A \cup B) = D(A, B)$
- Si (H, h) ainsi définie ne vérifie pas les propriétés d'une hiérarchie indicée, on peut utiliser la relation suivante:

$$\forall A, B \in \mathcal{H},\ h(A \cup B) = \max\left[D(A, B), h(A), h(B)\right]$$

Chapitre 3 - Classification hiérarchique

Comment faire ?

- Le choix du niveau de coupure du dendrogramme détermine le nombre de classes et ces classes sont alors uniques
- On peut définir la coupure du dendrogramme en déterminant à l'avance le nombre de classes dans lesquelles on désire répartir l'ensemble des données
- Le choix du niveau de coupure peut être facilité par l'examen des indices croissants de niveau de l'arbre hiérarchique
- On peut aussi faire ce choix en utilisant les indices tels que R^2, CH, Silhouette, Gap Statistic, ...

Quelques critères

- Critères fondés sur les inerties
  - R-Square :

$$K \mapsto RSQ(K) = 1 - \frac{I_{intra}(\mathcal{P}_K)}{I_{totale}} = \frac{I_{inter}(\mathcal{P}_K)}{I_{totale}}$$

    On retient l'endroit où la courbe $K \mapsto \mathrm{RSQ}(K)$ forme un coude.
  - Semi-Partial R-Square :

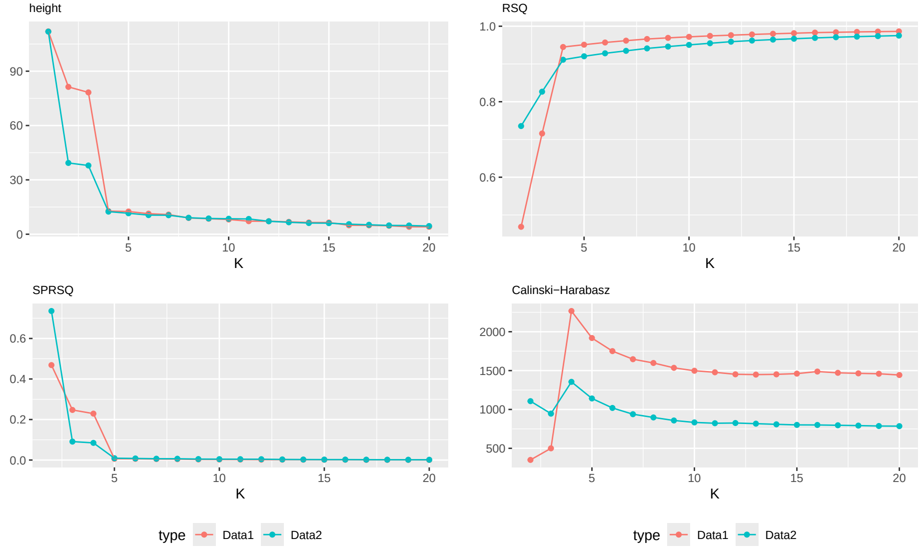
$$K \mapsto SPRSQ(K) = \frac{I_{inter}(\mathcal{P}_K) - I_{inter}(\mathcal{P}_{K-1})}{I_{totale}}$$

    On retient l'endroit où on a la plus forte réduction du SPRSQ.
  - CH (Calinski-Harabasz) :

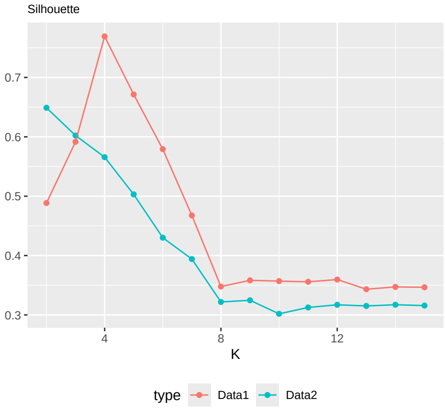
$$K \mapsto CH(K) = \frac{I_{inter}(\mathcal{P}_K)/(K-1)}{I_{intra}(\mathcal{P}_K)/(n-K)}$$

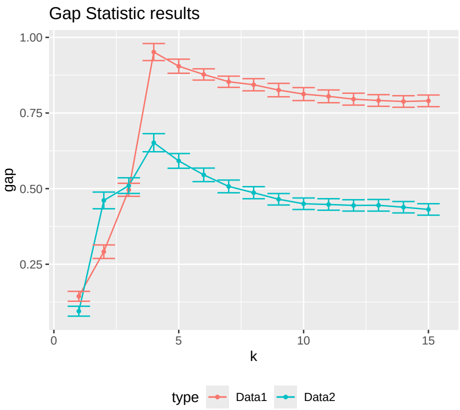
    On cherche un pic sur cette courbe
- Critère Silhouette
- Le Gap Statistique

Exemple des données simulées

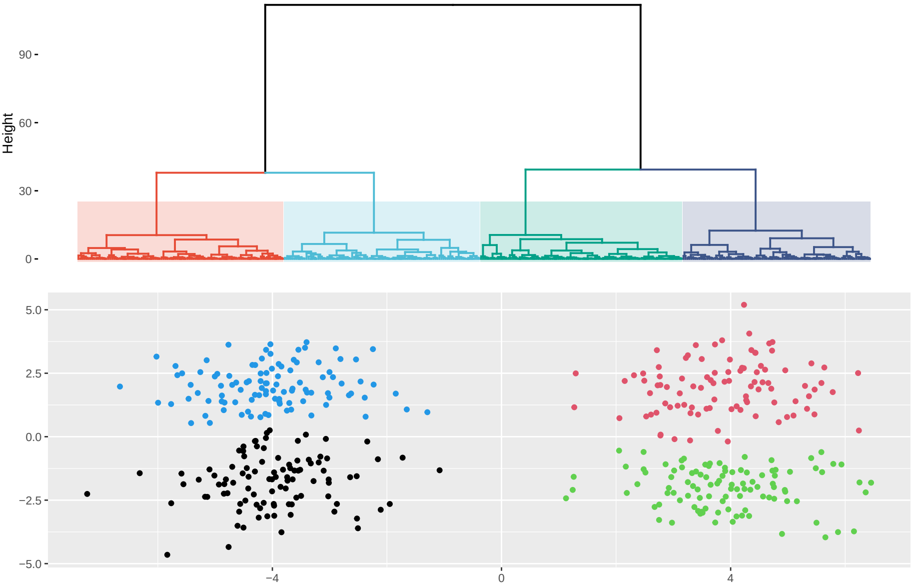


Exemple des données simulées





Exemple des données simulées



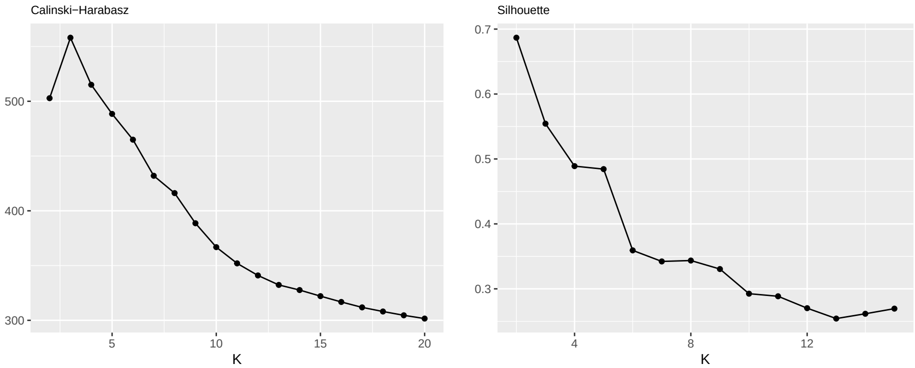
Chapitre 3 - Classification hiérarchique

Quelques commandes avec R

- `hc=hclust(d,method=)`
  - *d* : tableau de distances comme produit par `dist()`
  - *method* : agrégation “ward.D2”,“single”,“complete”, “average”, ...
- `plot(hc,hang=,...)` ou `ggdendrogram(hc,...)` ou `fviz_dend()` pour tracer le dendrogramme
- `cutree(hc,k=..)` pour obtenir la classification en k classes

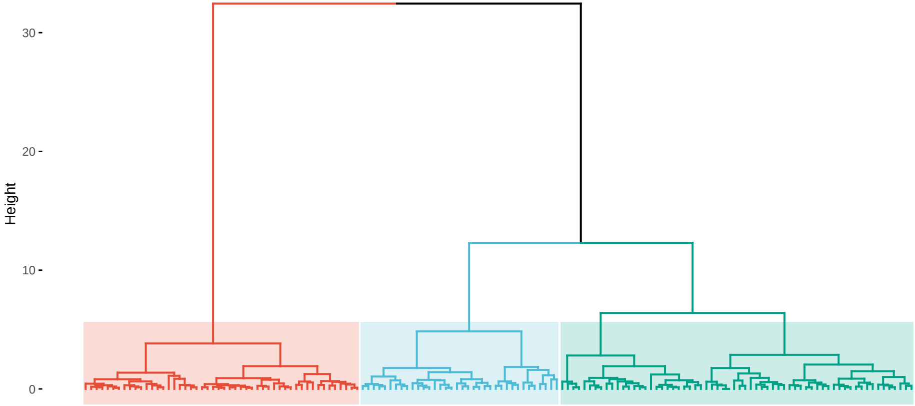
Exemple des iris

```r
dx<-dist(iris[,-5],method="euclidian")
hward<-hclust(dx,method="ward.D2")
```



Exemple des iris

```
fviz_dend(hward,k=3,show_labels = FALSE,
          rect = TRUE, rect_fill = TRUE,palette = "npg",
          rect_border = "npg",
          labels_track_height = 0.8)+ggtitle("")
```



Chapitre 3 - Classification hiérarchique

Avantages et inconvénients CAH

- Avantages :
  - Méthode flexible pour le niveau de finesse de la classification
  - Prise en compte facile de distances et d'indices de similarité de n'importe quel type
  - Rapidité d'execution et reproductible
- Inconvénients :
  - Choix de la coupure de l'arbre
  - La partition obtenue à une étape dépend de celle à l'étape précédente
  - Classifications très différentes selon la mesure d'agrégation choisie