

COURS DE *DATA SCIENCE*

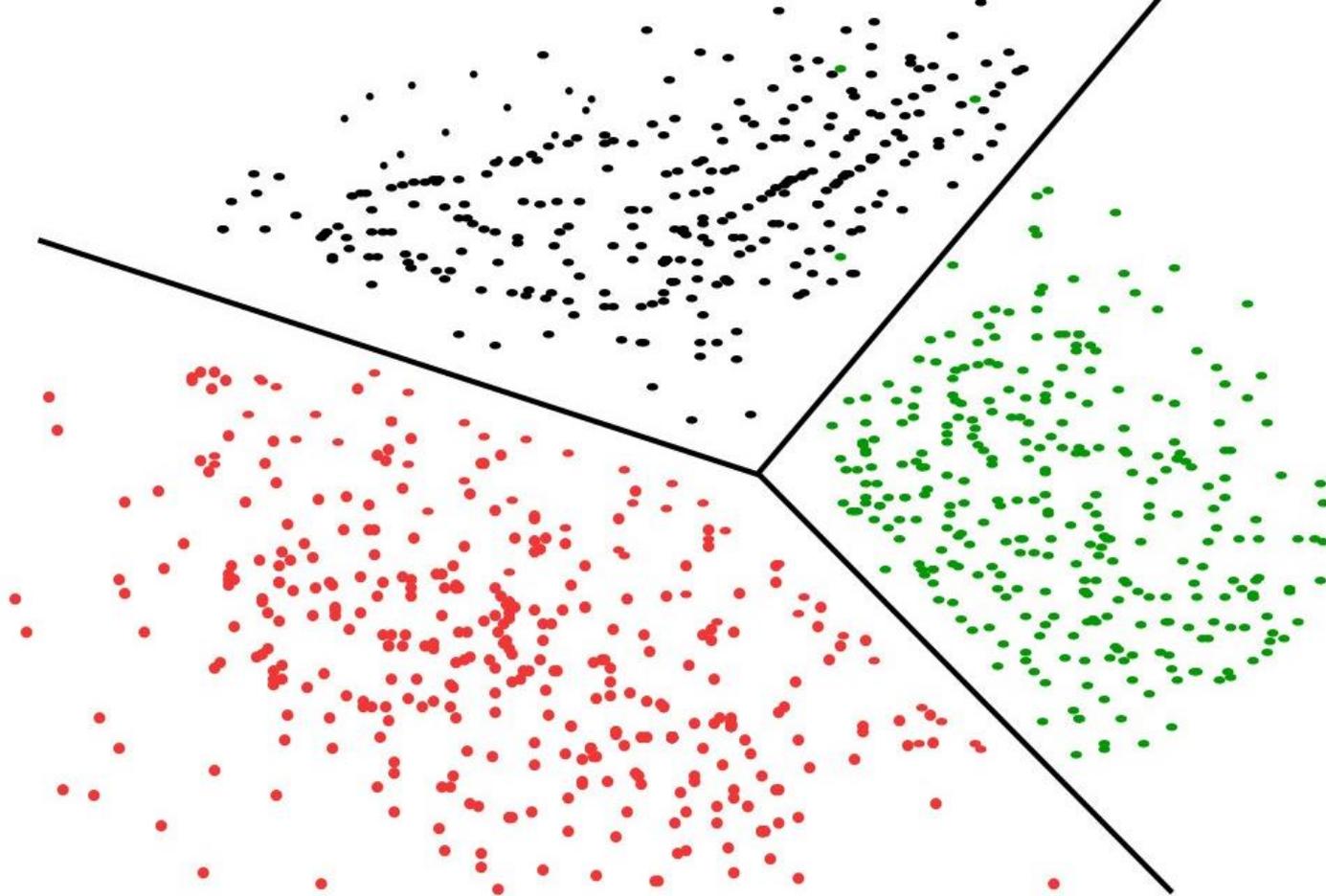
4^è Partie: Apprentissage non supervisé

Dr. Pegdwendé Nicolas Sawadogo

sawadogonicholas44@gmail.com

PROGRAMME DE LA SÉANCE 4

1. Modèles de clustering
2. Techniques de réduction de dimensions
3. Apprentissage non supervisé sous Python



MODÈLES DE CLUSTERING

SECTION 1

NOTION D'APPRENTISSAGE NON SUPERVISÉ

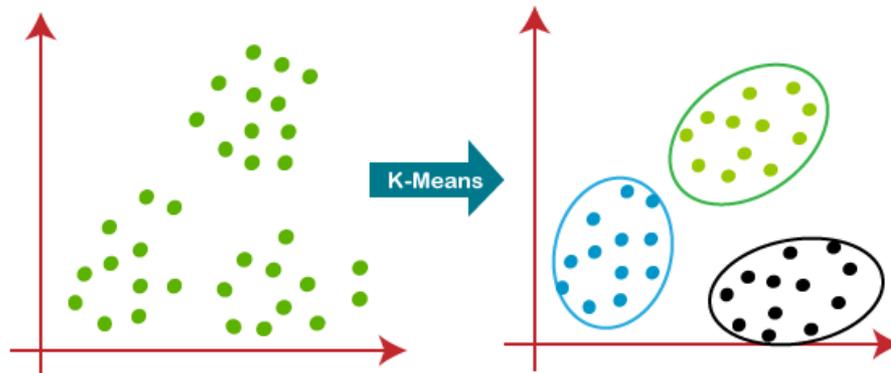
- On parle d'apprentissage non supervisé en absence de variable cible
 - L'objectif est simplement de regrouper les individus en fonction de leurs caractéristiques
 - On cherche à créer des groupes, des clusters
 - La machine n'a pas d'échantillon d'entraînement, d'où l'appellation « non supervisé »
- Exemples
 - K-means (K-moyennes)
 - Classification Ascendante Hiérarchique (CAH)
 - Density-Based Clustering of Applications with Noise (DBSCAN)

MODÈLES DE CLUSTERING

K-Means ou K-moyennes

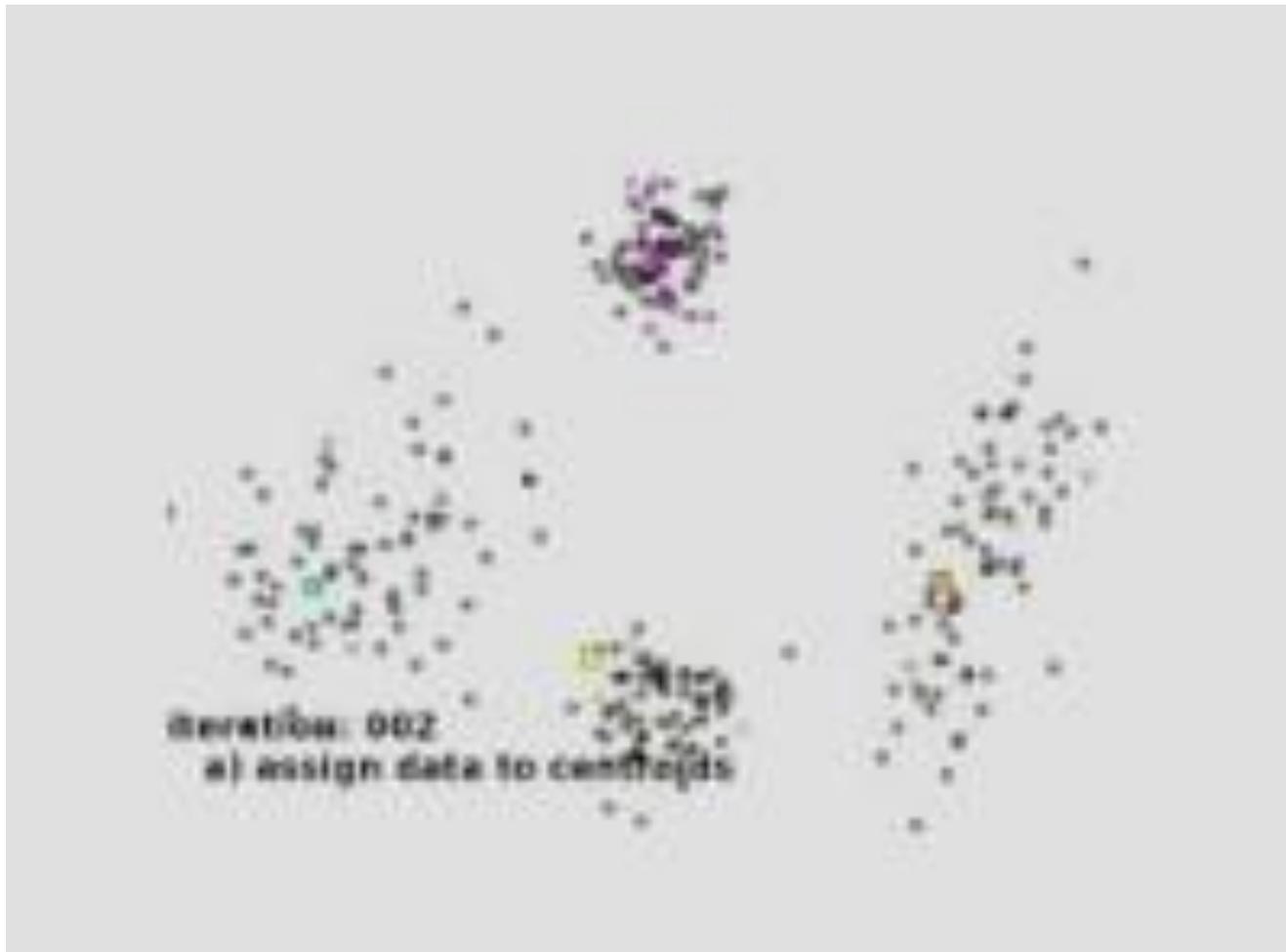
■ Principe

1. Tirage au hasard de K centres de classes parmi les individus
2. Calculer les distances entre chaque individu et les K centres de classes
3. Associer chaque individu au centre de classe le plus proche
4. Recalculer les centres de classes en faisant la moyenne
5. Répéter à partir de l'étape 2, jusqu'à ce que ça converge



MODÈLES DE CLUSTERING

K-Means ou K-moyennes : démo



MODÈLES DE CLUSTERING

K-Means ou K-moyennes : Choix du K

■ Par expérience

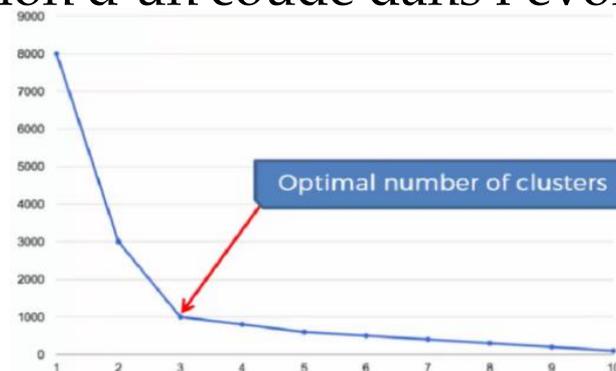
- On se base sur une connaissance ou une vision métier
- On sait par exemple qu'il y'a deux grandes catégories de supporters: les abonnés, et les « occasionnels »

■ Par la visualisation

- En visualisant la distribution des données, on aperçoit les clusters potentiels

■ Méthode du coude

- Rechercher l'apparition d'un coude dans l'évolution des inerties intra-classes



MODÈLES DE CLUSTERING

K-Means ou K-moyennes

■ Avantages

- Modèle simple à conceptualiser
- L'algorithme converge

■ Inconvénients

- Il faut choisir un nombre de classes
- Les résultats varient parfois selon l'initialisation

■ Exercice

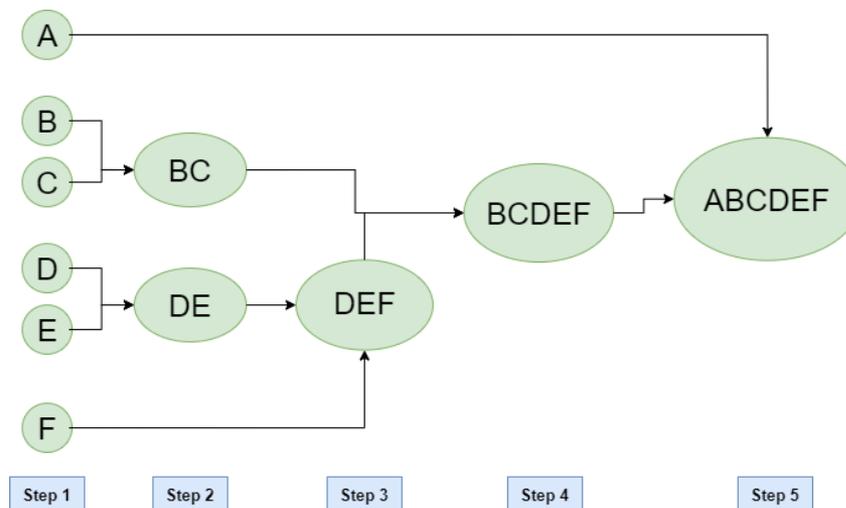
- Réaliser une classification automatique en deux classes avec les données suivantes:
- $X_1 = 0$; $X_2 = 2$; $X_3 = 6$; $X_4 = 11$

MODÈLES DE CLUSTERING

Classification Ascendante Hiérarchique

■ Principe

1. Au début, chaque individu constitue une classe
2. Calculer les distances entre les classes deux à deux
3. Agréger les deux classes les plus proches entre elles
4. Répéter à partir de l'étape 2, jusqu'à ce qu'il ne reste plus qu'une classe



MODÈLES DE CLUSTERING

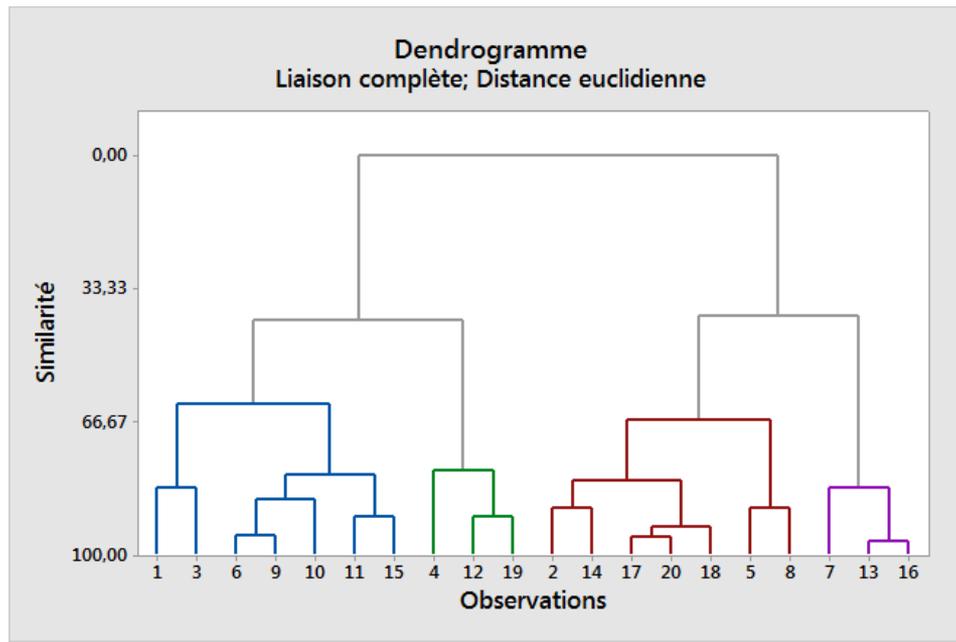
Classification Ascendante Hiérarchique

- Comment calculer la distance entre 2 classes ?
 - Saut minimum (*single linkage*): distance minimale
 - Saut maximum (*complete linkage*): distance maximale
 - Distance moyenne
 - Critère de ward: minimisation de l'inertie intra-classes
- Plusieurs types de distances
 - Distance euclidienne classique
 - Distance de Mahalanobis
 - Distance de Minkowski

MODÈLES DE CLUSTERING

Classification Ascendante Hiérarchique

- Choix du nombre de classes
 - Par visualisation ou expérience métier comme pour le K-Means
 - Un outil de visualisation en plus: le dendrogramme
 - Cela représente la hiérarchisation des classes



MODÈLES DE CLUSTERING

Classification Ascendante Hiérarchique

■ Exercice

- Réaliser une CAH sur les données suivantes à l'aide des critères du saut minimum et du saut maximum
- $X1 = 0$; $X2 = 2$; $X3 = 6$; $X4 = 11$
- Représenter les dendrogrammes
- Comparer avec le KMeans

MODÈLES DE CLUSTERING

DBSCAN: Principe

■ Concepts

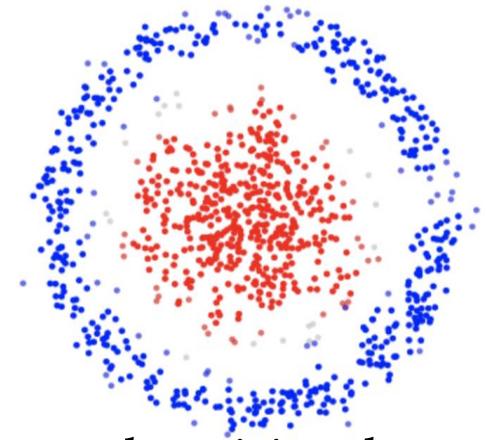
- Point central: un individu ayant suffisamment de voisins dans un rayon donné
- Point frontière: n'est pas un point central mais apparaît dans le voisinage d'un point central
- Point bruit/aberrant: ni central, ni frontière

■ Paramètres

- Rayon de voisinage
- Nombre minimal de voisins pour être un point dense

■ Algorithme

1. Partir d'un premier point dense et lui associer tous ses voisins
2. Pour tout point dense classifié, associer à la même classe tous ses voisins, et ainsi de suite
3. Répéter à partir de l'étape 1, jusqu'à épuiser les points denses



MODÈLES DE CLUSTERING

DBSCAN: Démo



MODÈLES DE CLUSTERING

DBSCAN

■ Avantages

- Algorithme simple à conceptualiser
- Capable de faire fi du bruit
- Reconnaît des clusters imbriquées

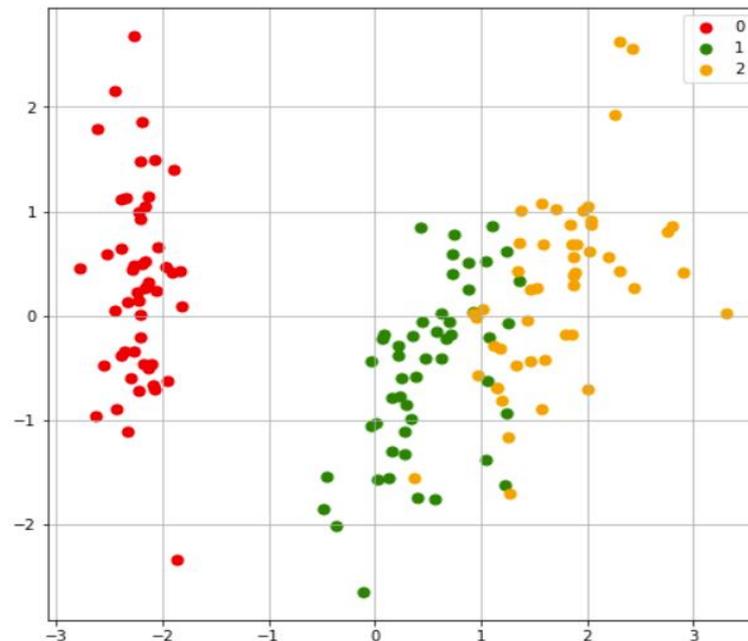
■ Inconvénients

- Incapable de gérer des clusters de densité variables
- Impossible de définir un nombre de clusters

EVALUATION D'UN MODÈLE DE CLUSTERING

Evaluation visuelle

- Réaliser une ACP
 - Projeter les individus sur le plan factoriel
 - Afficher les données en 2D, en définissant des couleurs en fonction des clusters
 - Comparer les colorations à la distribution des données



EVALUATION D'UN MODÈLE DE CLUSTERING

Indice de Rand

- Permet de comparer deux partitions
 - Fait abstraction des différences entre les noms des clusters
 - Comparer un clustering à la vérité terrain, si connue

- Formule

$$\mathbf{Z}_1 = (Z_{11}, \dots, Z_{1n}) \text{ et } \mathbf{Z}_2 = (Z_{21}, \dots, Z_{2n})$$

$$R = \frac{a + d}{a + b + c + d} = \frac{a + d}{\binom{2}{n}} \in [0, 1]$$

- a: nombre de paires dans une même classe dans Z1 et dans Z2
- b: nombre de paires dans une même classe dans Z1 mais séparées dans Z2
- c: nombre de paires séparées dans Z1 mais dans une même classe dans Z2
- d: nombre de paires séparées dans Z1 et séparées dans Z2

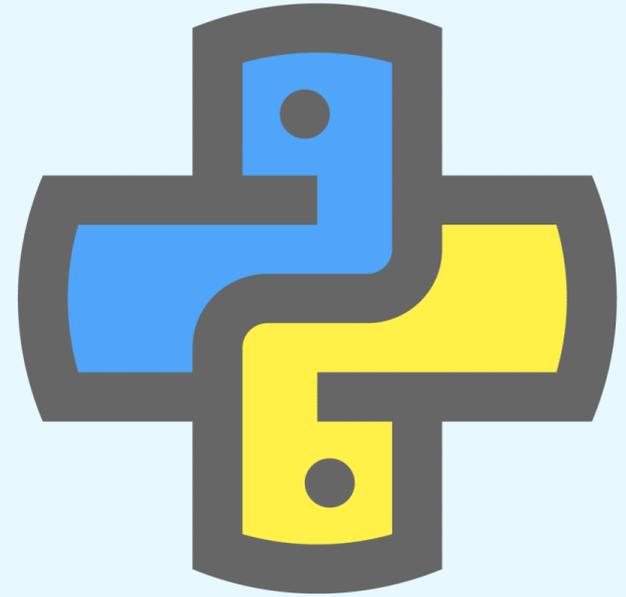
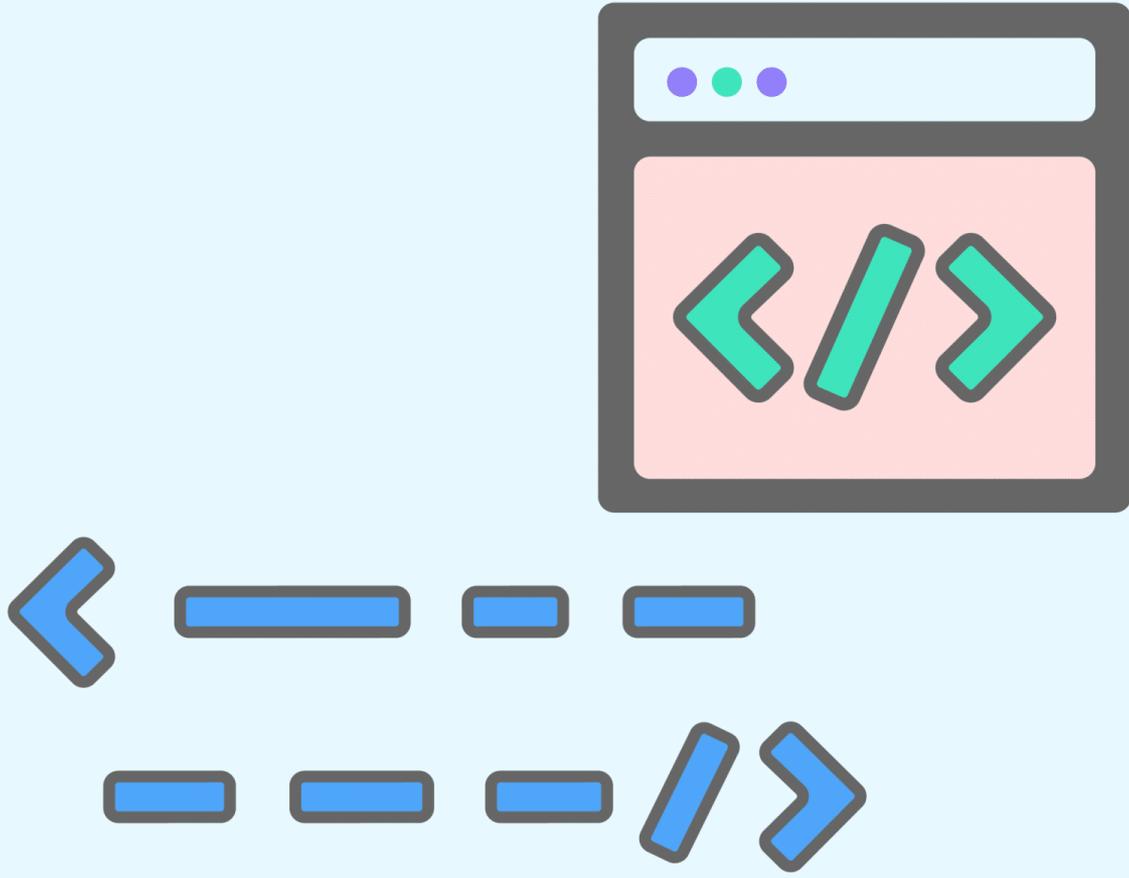
EVALUATION D'UN MODÈLE DE CLUSTERING

■ Exercice

- Deux méthodes de clustering ont conduit aux partitions suivantes
- $Z1 = \{1, 1, 2, 2, 2\}; Z2 = \{1, 2, 2, 1, 2\}$
- Calculer l'indice de Rand

■ Correction

- $a = 1; b=3 ; C_5^2 = \frac{5!}{(2!(5-2)!)} = \frac{120}{12} = 10$
- $R = \frac{3+1}{10} = \frac{4}{10} = 0.40$



CLUSTERING ET ACP SOUS PYTHON

SECTION 2

ANALYSE EN COMPOSANTES PRINCIPALES

- Chargement et instantiation du modèle

```
from sklearn.decomposition import PCA
acp = PCA(n_components=2)
X_projected = acp.fit_transform(X)
```

- Sorties

```
acp.explained_variance_ #var. expliquée
acp.explained_variance_ratio_ #% de var. expliquée
```

K-MEANS

- Chargement et instanciation du modèle

```
from sklearn.cluster import KMeans  
kmeans = KMeans(n_clusters=4)  
kmeans.fit(X)
```

- Sorties

```
kmeans.labels_ #affichage des clusters  
kmeans.cluster_centers_ #coord. des centres de classes  
kmeans.inertia_ #inertie totale
```

CLASSIFICATION ASCENDANTE HIERARCHIQUE

- Chargement et instanciation du modèle

- Création de la matrice des liens

```
from scipy.cluster.hierarchy import dendrogram, linkage  
Z = linkage(X) #Matrice des liens
```

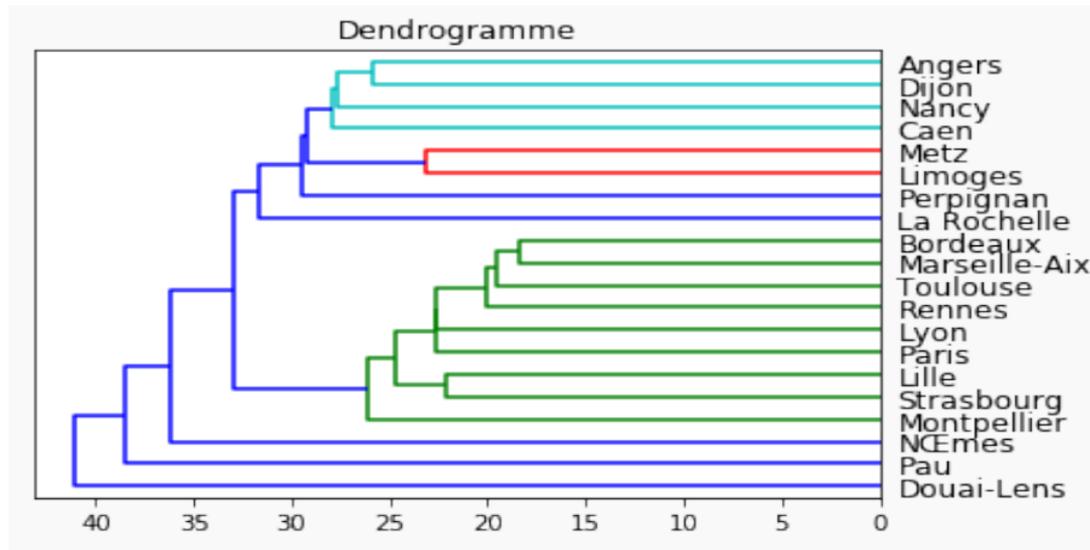
- Constitution des groupes

```
groupes_cah = fcluster(Z,t=28,criterion='distance')
```

CLASSIFICATION ASCENDANTE HIERARCHIQUE

- Affichage du dendrogramme

```
dendrogram(Z, labels=df.Villes[selection],  
orientation='left', color_threshold=28) #découpage à 28
```



EVALUATION DE CLUSTERING ET VISUALISATION

- Indice de Rand

```
from sklearn.metrics.cluster import adjusted_rand_score  
adjusted_rand_score(cluster_kmeans, iris.target) #0.73
```

- Graphiques dans Python

```
import matplotlib.pyplot as plt  
plt.plot(x, y, ...) // plt.scatter(x, y, ...)   
plt.show() // plt.savefig('image1.png')
```

QUELQUES RESSOURCES

- <https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.cluster.KMeans.html>
- https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.adjusted_rand_score
- <https://openclassrooms.com/fr/courses/4452741-decouvrez-les-librairies-python-pour-la-data-science/4740942-maitrisez-les-possibilites-offertes-par-matplotlib>