CentraleSupélec

Statistique et apprentissage

Chargés de cours (ordre alphabétique) :

Julien Bect, Ziad Kobeissi, Gilles Faÿ, Laurent Le Brusquet,
Vincent Lescarret, Arshak Minasyan, Arthur Tenenhaus[†] & Xujia Zhu

[†] Coordinateur du cours

Cours 10/9

Apprentissage non supervisé : deux exemples

Objectifs du cours 10

- Comprendre les enjeux de l'apprentissage non-supervisé à travers deux exemples de tâches non supervisées.
- Savoir réduire la dimension d'un jeu de données grâce à l'analyse en composantes principales.
- Savoir réaliser un partitionnement de données (*clustering*) par l'algorithme des K-moyennes.

Plan du cours

Plan du cours

Rappel : apprentissage supervisé

- On observe des couples (X_i, Y_i) :

$$(X_1, Y_1), \ldots, (X_n, Y_n) \overset{\text{iid}}{\sim} \mathrm{P}^{X,Y},$$

avec $X_i \in \mathcal{X}$: exemple et $Y_i \in \mathcal{Y}$: étiquette.

- On cherche à approcher le prédicteur optimal

$$h^* = \operatorname{argmin}_h \mathbb{E}\left(L(Y, h(X))\right),$$

qui est une propriété de la loi conditionnelle $\mathrm{P}^{Y|X}$:

$$\begin{aligned} h^*(x) &= \operatorname{argmin}_{\tilde{y} \in \mathcal{Y}} \mathbb{E}\left(L(Y, \tilde{y}) \mid X = x\right) \\ &= \operatorname{argmin}_{\tilde{y} \in \mathcal{Y}} \int L(y, \tilde{y}) \, \mathrm{P}^{Y|X=x}(\mathrm{d}y). \end{aligned}$$

Rappel : apprentissage supervisé

- On observe des couples (X_i, Y_i) :

$$(X_1, Y_1), \ldots, (X_n, Y_n) \overset{\text{iid}}{\sim} \mathrm{P}^{X,Y},$$

avec $X_i \in \mathcal{X}$: exemple et $Y_i \in \mathcal{Y}$: étiquette.

- On cherche à approcher le prédicteur optimal

$$h^* = \operatorname{argmin}_h \mathbb{E}\left(L(Y, h(X))\right),$$

qui est une propriété de la loi conditionnelle $\mathrm{P}^{Y|X}$:

$$h^*(x) = \operatorname{argmin}_{\tilde{y} \in \mathcal{Y}} \mathbb{E}\left(L(Y, \tilde{y}) \mid X = x\right)$$
$$= \operatorname{argmin}_{\tilde{y} \in \mathcal{Y}} \int L(y, \tilde{y}) \, \mathrm{P}^{Y|X=x}(\mathrm{d}y).$$

Rappel : apprentissage supervisé

- On observe des couples (X_i, Y_i) :

$$(X_1, Y_1), \ldots, (X_n, Y_n) \overset{\text{iid}}{\sim} \mathrm{P}^{X,Y},$$

avec $X_i \in \mathcal{X}$: exemple et $Y_i \in \mathcal{Y}$: étiquette.

- On cherche à approcher le prédicteur optimal

$$h^* = \operatorname{argmin}_h \mathbb{E}\left(L(Y, h(X))\right),$$

qui est une propriété de la loi conditionnelle $\mathrm{P}^{Y|X}$:

$$\begin{aligned} h^*(x) &= \operatorname{argmin}_{\tilde{y} \in \mathcal{Y}} \mathbb{E}\left(L(Y, \tilde{y}) \mid X = x\right) \\ &= \operatorname{argmin}_{\tilde{y} \in \mathcal{Y}} \int L(y, \tilde{y}) \, \mathrm{P}^{Y|X=x}(\mathrm{d}y). \end{aligned}$$

Apprentissage non supervisé

Apprentissage sans l'aide d'un « enseignant » :

- on observe seulement les exemples,

$$X_1, \ldots, X_n \overset{\text{iid}}{\sim} \mathrm{P}^X,$$

et on s'interesse à la loi P^X.

Supposons que $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^p$ et que P^X admet une ddp f^X.

Problème : fléau de la dimension

Estimer une densité f^X « quelconque » a un coût (taille d'échantillon nécessaire pour atteindre une précision donnée) qui augmente exponentiellement avec la dimension p.[†]

[†] La *statistique non paramétrique*, une branche de la statistique qui s'intéresse notamment à l'estimation de densité sous des hypothèses très générales, fournit des énoncés rigoureux (hors programme) qui permettent d'étayer cette affirmation.

Apprentissage non supervisé

Apprentissage sans l'aide d'un « enseignant » :

- on observe seulement les exemples,

$$X_1, \ldots, X_n \overset{\text{iid}}{\sim} \mathrm{P}^X,$$

et on s'interesse à la loi P^X.

Supposons que $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^p$ et que P^X admet une ddp f^X.

Problème : fléau de la dimension

Estimer une densité f^X « quelconque » a un coût (taille d'échantillon nécessaire pour atteindre une précision donnée) qui augmente exponentiellement avec la dimension p.[†]

[†] La *statistique non paramétrique*, une branche de la statistique qui s'intéresse notamment à l'estimation de densité sous des hypothèses très générales, fournit des énoncés rigoureux (hors programme) qui permettent d'étayer cette affirmation.

Objectifs de l'apprentissage non-supervisé

1. Idéalement, estimer la densité f^X de la loi des données.
   - ➠ à moins que p ne soit assez petit (disons $p \lesssim 5$, rare en apprentissage), c'est en général un problème trop difficile[†].
2. Révéler des « structures »dans la loi des données (sans passer explicitement par l'estimation de la densité)

[†] En petite dimension, on peut utiliser par exemple un *estimateur à noyau* (hors programme).

Objectifs de l'apprentissage non-supervisé

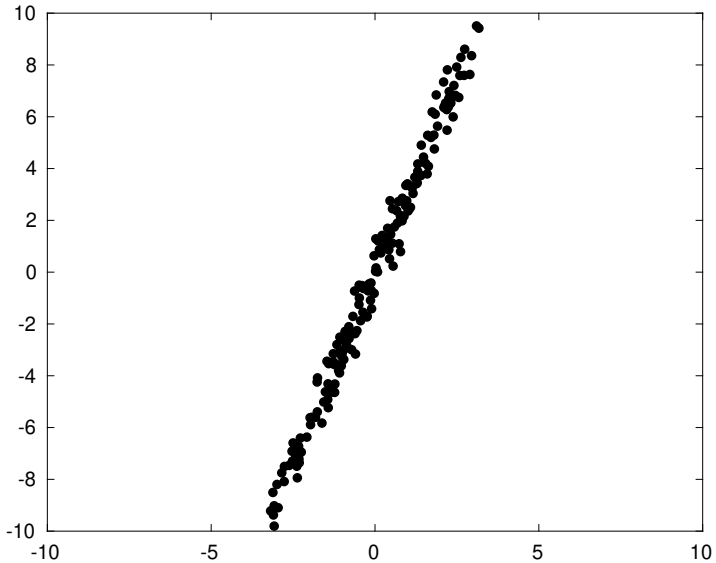
1. Idéalement, estimer la densité f^X de la loi des données.
   - ➠ à moins que p ne soit assez petit (disons $p \lesssim 5$, rare en apprentissage), c'est en général un problème trop difficile[†].
2. Révéler des « structures »dans la loi des données
   (sans passer explicitement par l'estimation de la densité)

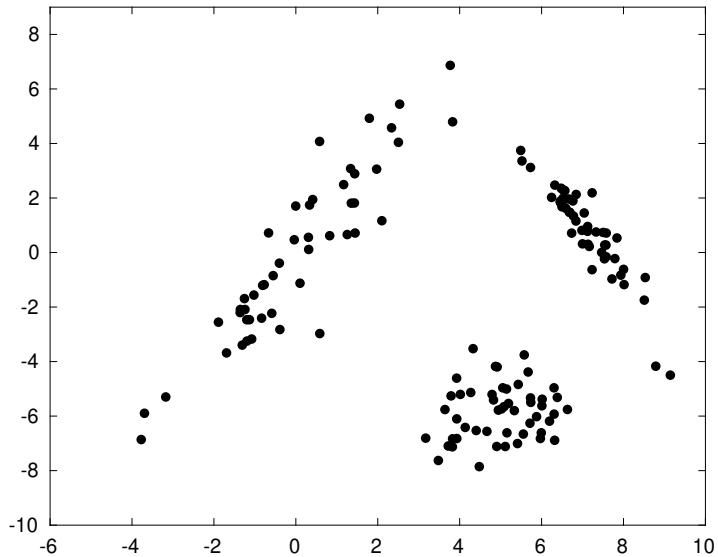
[†] En petite dimension, on peut utiliser par exemple un *estimateur à noyau* (hors programme).

Objectifs de l'apprentissage non-supervisé

1. Idéalement, estimer la densité f^X de la loi des données.
   - ➠ à moins que p ne soit assez petit (disons $p \lesssim 5$, rare en apprentissage), c'est en général un problème trop difficile[†].

2. Révéler des « structures »dans la loi des données (sans passer explicitement par l'estimation de la densité)





[†] En petite dimension, on peut utiliser par exemple un *estimateur à noyau* (hors programme).

Plan du cours

Objectif : réduction de dimension

On cherche une transformation

$$\begin{array}{rccl} T: & \mathcal{X} & \to & \mathcal{Z} \subset \mathbb{R}^q \\ & x & \mapsto & z = T(x) \end{array} \qquad \text{avec } q \ll p$$

ainsi qu'une procédure de reconstruction

$$\begin{array}{rccl} \tilde{T}: & \mathcal{Z} & \to & \mathcal{X} \\ & z & \mapsto & \hat{x} = \tilde{T}(z) \end{array}$$

telles que

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L(x_i, \hat{x}_i) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L\Big(x_i, \tilde{T}\big(\underbrace{T(x_i)}_{z_i}\big)\Big)$$

soit le plus petit possible (avec $L(x, \hat{x})$ une fonction de perte).

Remarque : plus généralement, $\mathcal{Z}$ pourrait être une *variété* de dimension q, généralisation abstraite des notions de courbes ($q = 1$) et de surface ($q = 2$) ; voir géométrie différentielle.

Objectif : réduction de dimension

On cherche une transformation

$$\begin{array}{rccll} T: & \mathcal{X} & \to & \mathcal{Z} \subset \mathbb{R}^q & \text{avec } q \ll p \\ & x & \mapsto & z = T(x) & \end{array}$$

ainsi qu'une procédure de reconstruction

$$\begin{array}{rccl} \tilde{T}: & \mathcal{Z} & \to & \mathcal{X} \\ & z & \mapsto & \hat{x} = \tilde{T}(z) \end{array}$$

telles que

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L(x_i, \hat{x}_i) \;=\; \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L\Big(x_i, \tilde{T}\big(\underbrace{T(x_i)}_{z_i}\big)\Big)$$

soit le plus petit possible (avec $L(x, \hat{x})$ une fonction de perte).

Remarque : plus généralement, $\mathcal{Z}$ pourrait être une *variété* de dimension q, généralisation abstraite des notions de courbes ($q = 1$) et de surface ($q = 2$) ; voir géométrie différentielle.

Plan du cours

Réduction « linéaire » de dimension

Soit $x_1, \ldots, x_n \in \mathbb{R}^p$ un échantillon observé. Soit $q < p$.

Définition : sous-espace affine

$\mathscr{A}_q \subset \mathbb{R}^p$ est un sous-espace affine de dimension q s'il existe

- $\mu \in \mathbb{R}^p$,
- A matrice de taille $p \times q$ de rang q,

tels que $\mathscr{A}_q = \mathrm{Aff}_{\mu,A} = \{y \in \mathbb{R}^p \text{ tel que } y = \mu + Az,\ z \in \mathbb{R}^q\}$.

Définition : analyse en composantes principales (ACP)

L'ACP consiste à trouver la meilleure approximation des données, pour la perte quadratique, par un sous-espace affine $\mathscr{A}_q$.

La dimension q est soit donnée, soit déterminée automatiquement.

Réduction « linéaire » de dimension

Soit $x_1, \ldots, x_n \in \mathbb{R}^p$ un échantillon observé. Soit $q < p$.

Définition : sous-espace affine

$\mathscr{A}_q \subset \mathbb{R}^p$ est un sous-espace affine de dimension q s'il existe

- $\mu \in \mathbb{R}^p$,
- A matrice de taille $p \times q$ de rang q,

tels que $\mathscr{A}_q = \mathrm{Aff}_{\mu,A} = \{y \in \mathbb{R}^p \text{ tel que } y = \mu + Az,\ z \in \mathbb{R}^q\}$.

Définition : analyse en composantes principales (ACP)

L'ACP consiste à trouver la meilleure approximation des données, pour la perte quadratique, par un sous-espace affine $\mathscr{A}_q$.

La dimension q est soit donnée, soit déterminée automatiquement.

Réduction « linéaire » de dimension (suite)

On cherche donc $\mathscr{A}_q = \mathrm{Aff}_{\mu,A}$ et (z_i) tels que

$$\mu,\ A,\ (z_i) \ \in\ \text{argmin} \sum_{i=1}^{n} \|x_i - (\mu + A z_i)\|^2 . \qquad (\star)$$

⚠ Il n'y a pas unicité de la solution.

✏ Si $\tilde{A}$ a la même image que A, alors
il existe des $\tilde{z}_i$ tels que $A\, z_i = \tilde{A}\, \tilde{z}_i$ pour tout i.

➠ On supposera sans perte de généralité que les colonnes de la matrice A sont orthonormées :

$$A^\top A \ = \ \mathrm{Id}_q .$$

Remarque : l'hypothèse d'orthonormalité ne lève pas complètement l'indétermination de A...

Réduction « linéaire » de dimension (suite)

On cherche donc $\mathscr{A}_q = \mathrm{Aff}_{\mu,A}$ et (z_i) tels que

$$\mu,\, A,\, (z_i) \;\in\; \text{argmin} \sum_{i=1}^{n} \|x_i - (\mu + Az_i)\|^2 . \qquad (\star)$$

Il n'y a pas unicité de la solution.

✏ Si $\tilde{A}$ a la même image que A, alors
il existe des $\tilde{z}_i$ tels que $A\,z_i = \tilde{A}\,\tilde{z}_i$ pour tout i.

➠ On supposera sans perte de généralité que les colonnes de la matrice A sont orthonormées :

$$A^\top A \;=\; \mathrm{Id}_q .$$

Remarque : l'hypothèse d'orthonormalité ne lève pas complètement l'indétermination de A...

Réduction « linéaire » de dimension (suite)

On cherche donc $\mathscr{A}_q = \mathrm{Aff}_{\mu,A}$ et (z_i) tels que

$$\mu,\, A,\, (z_i) \;\in\; \text{argmin} \sum_{i=1}^{n} \|x_i - (\mu + Az_i)\|^2 . \qquad (\star)$$

Il n'y a pas unicité de la solution.

✏ Si $\tilde{A}$ a la même image que A, alors
il existe des $\tilde{z}_i$ tels que $A\,z_i = \tilde{A}\,\tilde{z}_i$ pour tout i.

➠ On supposera sans perte de généralité que les colonnes de la matrice A sont orthonormées :

$$A^\top A \;=\; \mathrm{Id}_q.$$

Remarque : l'hypothèse d'orthonormalité ne lève pas complètement l'indétermination de A...

Réduction « linéaire » de dimension (suite)

- ✏ Fixons μ, A et (z_i), et posons $\tilde{z}_i = z_i - \bar{z}$. Alors

$$\begin{aligned} \mu + Az_i &= \mu + A(\tilde{z}_i + \bar{z}) \\ &= \underbrace{\mu + A\bar{z}}_{\tilde{\mu}} + A\tilde{z}_i. \end{aligned}$$

  - ➠ Sans perte de généralité, on cherchera les z_i t.q. $\bar{z} = 0$.

Réduction « linéaire » de dimension (suite)

✏ Fixons μ, A et (z_i), et posons $\tilde{z}_i = z_i - \bar{z}$. Alors

$$\begin{aligned} \mu + Az_i &= \mu + A(\tilde{z}_i + \bar{z}) \\ &= \underbrace{\mu + A\bar{z}}_{\tilde{\mu}} + A\tilde{z}_i. \end{aligned}$$

➠ Sans perte de généralité, on cherchera les z_i t.q. $\bar{z} = 0$.

Résultat partiel

Proposition

La minimisation du critère pour une matrice A donnée conduit à :

$$\begin{aligned} \mu &= \bar{x}, \\ z_i &= A^\top (x_i - \bar{x}), \end{aligned}$$

et on a l'interprétation géométrique :

- $\hat{x}_i = \mu + A z_i$ est la projection orthogonale de x_i sur $\mathrm{Aff}_{\mu,A}$.

Conséquence. En insérant ce résultat dans $(\star)$, il vient

$$A = \operatorname{argmin} \sum_{i=1}^{n} \left\| \left(\mathrm{Id}_p - AA^\top \right) (x_i - \bar{x}) \right\|^2 .$$

Résultat partiel

Proposition

La minimisation du critère pour une matrice A donnée conduit à :

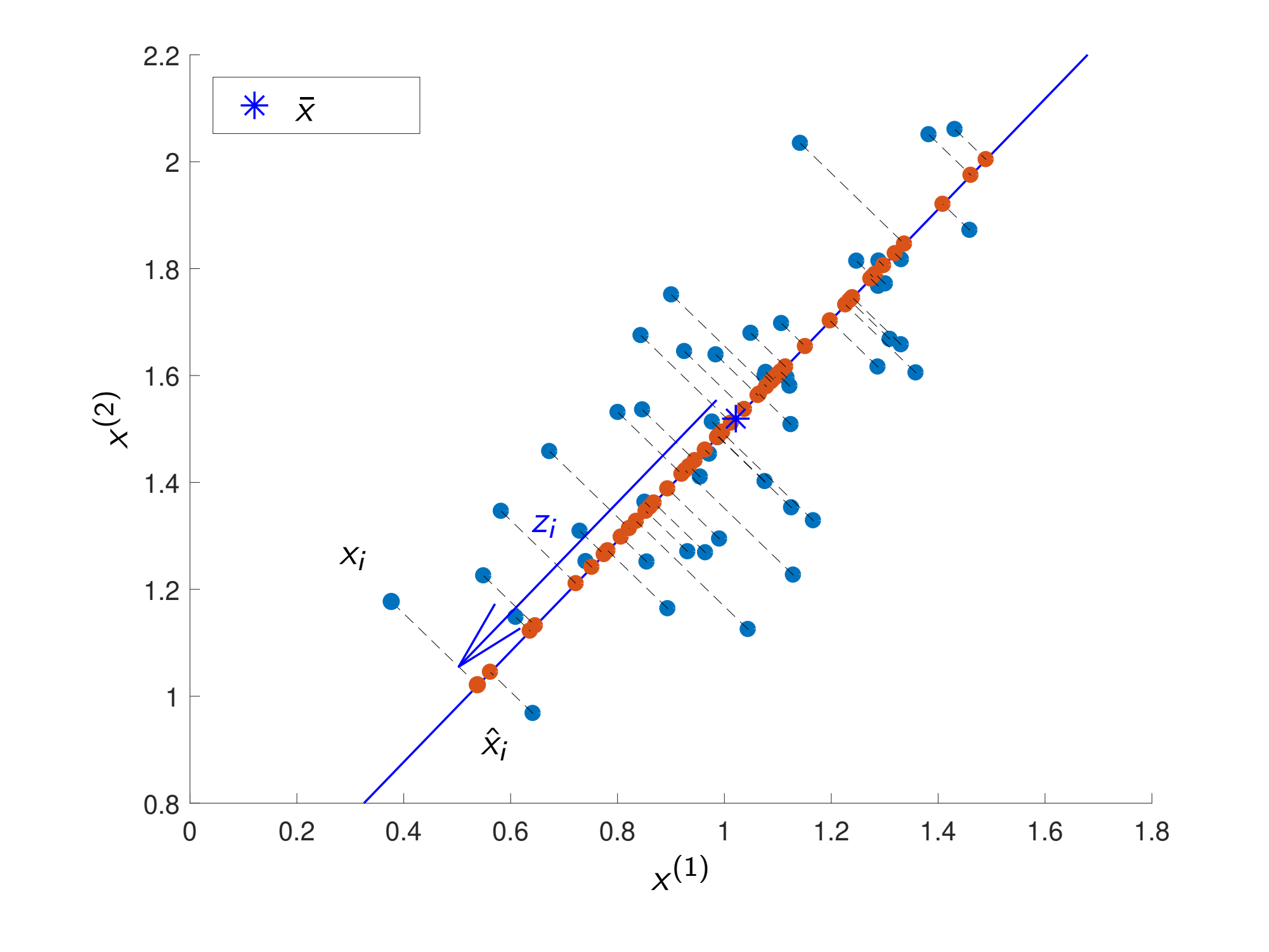
$$\begin{aligned} \mu &= \bar{x}, \\ z_i &= A^\top (x_i - \bar{x}), \end{aligned}$$

et on a l'interprétation géométrique :

- $\hat{x}_i = \mu + A z_i$ est la projection orthogonale de x_i sur $\mathrm{Aff}_{\mu,A}$.

Conséquence. En insérant ce résultat dans $(\star)$, il vient

$$A = \operatorname{argmin} \sum_{i=1}^{n} \left\| \left(\mathrm{Id}_p - AA^\top \right) (x_i - \bar{x}) \right\|^2 .$$


$\bar{x}$
x_i
z_i
$\hat{x}_i$
$x^{(1)}$
$x^{(2)}$
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
1.2
1.4
1.6
1.8
0.8
1
1.2
1.4
1.6
1.8
2
2.2

Résultat partiel : démonstration

Fixons A et (z_i), avec $\bar{z} = 0$, et posons $v_i = x_i - Az_i$. Alors

$$\begin{aligned}\sum_i \|x_i - (\mu + Az_i)\|^2 &= \sum_i \|v_i - \mu\|^2 \\ &= n\,\|\mu - \frac{1}{n}\sum_i v_i\|^2 + c\end{aligned}$$

où c ne dépend pas de μ. Ainsi, le μ optimal est

$$\mu = \frac{1}{n}\sum_i v_i = \bar{x} - A\bar{z} = \bar{x}.$$

On fixe donc $\mu = \bar{x}$, et on procède de façon similaire pour déterminer chaque z_i. Pour tout i le minimum est atteint (exercice) en

$$z_i = A^\top (x_i - \bar{x}),$$

et on vérifie que $\bar{z} = \frac{1}{n}\sum_i z_i = A^\top(\bar{x} - \bar{x}) = 0$. □

Remarque : on peut aussi retrouver les expressions rapidement en calculant le gradient du critère.

Résultat partiel : démonstration

Fixons A et (z_i), avec $\bar{z} = 0$, et posons $v_i = x_i - Az_i$. Alors

$$\begin{aligned}\sum_i \|x_i - (\mu + Az_i)\|^2 &= \sum_i \|v_i - \mu\|^2 \\ &= n\,\|\mu - \frac{1}{n}\sum_i v_i\|^2 + c\end{aligned}$$

où c ne dépend pas de μ. Ainsi, le μ optimal est

$$\mu = \frac{1}{n}\sum_i v_i = \bar{x} - A\bar{z} = \bar{x}.$$

On fixe donc $\mu = \bar{x}$, et on procède de façon similaire pour déterminer chaque z_i. Pour tout i le minimum est atteint (exercice) en

$$z_i = A^\top (x_i - \bar{x}),$$

et on vérifie que $\bar{z} = \frac{1}{n}\sum_i z_i = A^\top(\bar{x} - \bar{x}) = 0$. □

Remarque : on peut aussi retrouver les expressions rapidement en calculant le gradient du critère.

Plan du cours

Notations

Soit X la matrice des observations :

$$X = \begin{pmatrix} (x_1)^\top \\ \vdots \\ (x_n)^\top \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^{(1)} & \dots & x_1^{(p)} \\ \vdots & & \vdots \\ x_n^{(1)} & \dots & x_n^{(p)} \end{pmatrix}$$

Dans la suite on supposera, sans perte de généralité, $\bar{x} = 0$.

On cherche A telle que

$$\begin{aligned} A &= \operatorname{argmin} \sum_{i=1}^{n} \left\| \left(\mathrm{Id}_p - AA^\top \right) x_i \right\|^2 \\ &= \operatorname{argmin} \left\| \left(\mathrm{Id}_p - AA^\top \right) X^\top \right\|_F^2 \end{aligned}$$

avec $\|.\|_F$ la norme de Frobenius :

$$\|M\|_F^2 = \sum_{i,j} M_{ij}^2 = \operatorname{tr}(M^\top M) = \operatorname{tr}(MM^\top).$$

Notations

Soit X la matrice des observations :

$$X = \begin{pmatrix} (x_1)^\top \\ \vdots \\ (x_n)^\top \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^{(1)} & \dots & x_1^{(p)} \\ \vdots & & \vdots \\ x_n^{(1)} & \dots & x_n^{(p)} \end{pmatrix}$$

Dans la suite on supposera, sans perte de généralité, $\bar{x} = 0$.

On cherche A telle que

$$\begin{aligned} A &= \operatorname{argmin} \sum_{i=1}^{n} \left\| \left(\mathrm{Id}_p - AA^\top \right) x_i \right\|^2 \\ &= \operatorname{argmin} \left\| \left(\mathrm{Id}_p - AA^\top \right) X^\top \right\|_F^2 \end{aligned}$$

avec $\|.\|_F$ la norme de Frobenius :

$$\|M\|_F^2 = \sum_{i,j} M_{ij}^2 = \operatorname{tr}(M^\top M) = \operatorname{tr}(MM^\top).$$

Décomposition en valeurs singulières (SVD)

Théorème

Soit M une matrice réelle de taille $n \times p$. Il existe des matrices :

- U orthogonale de taille $n \times n$ $\quad (U^\top U = \mathrm{Id}_n)$,
- V orthogonale de taille $p \times p$ $\quad (V^\top V = \mathrm{Id}_p)$,
- $D = \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_r, 0, \ldots, 0)$ de taille $n \times p$, avec $d_1 \geq d_2 \geq \ldots \geq d_r > 0$

telles que :

$$M = UDV^\top,$$

et r est le rang des matrices D et M.

Les scalaires $d_1, \ldots, d_r, 0, \ldots 0$ sont les valeurs singulières de M.

- $d_1^2, \ldots, d_r^2$ sont les valeurs propres $\neq 0$ de $MM^\top$ et $M^\top M$.

Démonstration. Voir TD 8, exercice bonus. □

Décomposition en valeurs singulières (SVD)

Théorème

Soit M une matrice réelle de taille $n \times p$. Il existe des matrices :

- U orthogonale de taille $n \times n$ $\quad (U^\top U = \mathrm{Id}_n)$,
- V orthogonale de taille $p \times p$ $\quad (V^\top V = \mathrm{Id}_p)$,
- $D = \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_r, 0, \ldots, 0)$ de taille $n \times p$,
  avec $d_1 \geq d_2 \geq \ldots \geq d_r > 0$

telles que :

$$M = UDV^\top,$$

et r est le rang des matrices D et M.

Les scalaires $d_1, \ldots, d_r, 0, \ldots 0$ sont les valeurs singulières de M.

- $d_1^2, \ldots, d_r^2$ sont les valeurs propres $\neq 0$ de $MM^\top$ et $M^\top M$.

Démonstration. Voir TD 8, exercice bonus. □

Décomposition en valeurs singulières (SVD)

Théorème

Soit M une matrice réelle de taille $n \times p$. Il existe des matrices :

- U orthogonale de taille $n \times n$ $\quad (U^\top U = \mathrm{Id}_n)$,
- V orthogonale de taille $p \times p$ $\quad (V^\top V = \mathrm{Id}_p)$,
- $D = \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_r, 0, \ldots, 0)$ de taille $n \times p$, avec $d_1 \geq d_2 \geq \ldots \geq d_r > 0$

telles que :

$$M = UDV^\top,$$

et r est le rang des matrices D et M.

Les scalaires $d_1, \ldots, d_r, 0, \ldots 0$ sont les valeurs singulières de M.

- $d_1^2, \ldots, d_r^2$ sont les valeurs propres $\neq 0$ de $MM^\top$ et $M^\top M$.

Démonstration. Voir TD 8, exercice bonus. □

Solution du problème d'optimisation

Soient U, D et V les matrices issues de la SVD de X :

$$X = UDV^\top.$$

Théorème fondamental de l'ACP

Soient

- $v_1, v_2, \ldots, v_p$ les colonnes de V,
- $V_q = (v_1 \mid \ldots \mid v_q)$ la sous-matrice des q premières colonnes.

Alors

$$V_q \in \operatorname{argmin}_A \left\| \left(\mathrm{Id}_p - AA^\top \right) X^\top \right\|_F^2,$$

où A parcourt l'ensemble des matrices $p \times q$ de rang q.

démonstration

L'ACP en résumé

Algorithme : Analyse en Composantes Principales (ACP)

Réaliser l'ACP de l'échantillon $(x_1, \ldots, x_n)$ consiste à :

1. Calculer la moyenne $\bar{x}$ et centrer les observations : $x_i \leftarrow x_i - \bar{x}$.
2. Former la matrice X des observations centrées.
3. Calculer la matrice V par SVD de X
   (les valeurs singulières sont utiles aussi, cf. section suivante)
4. Réaliser la réduction de dimension : $z_i = V_q^\top x_i$.

Reconstruction. $\hat{x}_i = \bar{x} + V_q z_i$.

Vocabulaire.

- $v_1, \ldots, v_q$ (colonnes de V_q) : axes principaux.
- $z_i^{(1)}, \ldots, z_i^{(q)}$: composantes principales.

L'ACP en résumé

Algorithme : Analyse en Composantes Principales (ACP)

Réaliser l'ACP de l'échantillon $(x_1, \ldots, x_n)$ consiste à :

1. Calculer la moyenne $\bar{x}$ et centrer les observations : $x_i \leftarrow x_i - \bar{x}$.
2. Former la matrice X des observations centrées.
3. Calculer la matrice V par SVD de X
   (les valeurs singulières sont utiles aussi, cf. section suivante)
4. Réaliser la réduction de dimension : $z_i = V_q^\top x_i$.

Reconstruction. $\hat{x}_i = \bar{x} + V_q z_i$.

Vocabulaire.

- $v_1, \ldots, v_q$ (colonnes de V_q) : axes principaux.
- $z_i^{(1)}, \ldots, z_i^{(q)}$: composantes principales.

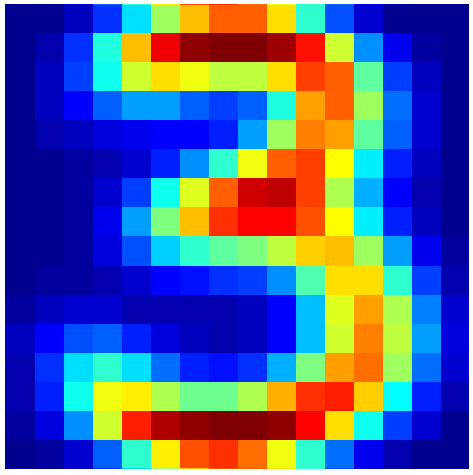
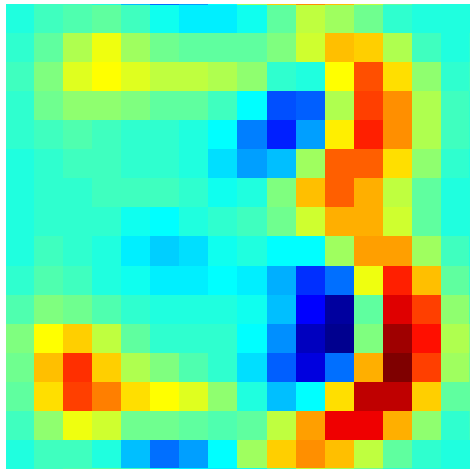
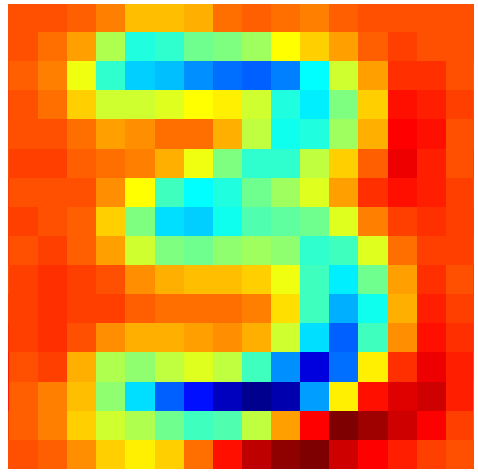
Exemple « Code postal » (pas MNIST, un autre !)

Données : $n = 658$ images 16×16 du chiffre « 3 » $\rightarrow$ $p = 256$

Source : The Elements of Statistical Learning, Springer

Exemple « Code postal » (suite)

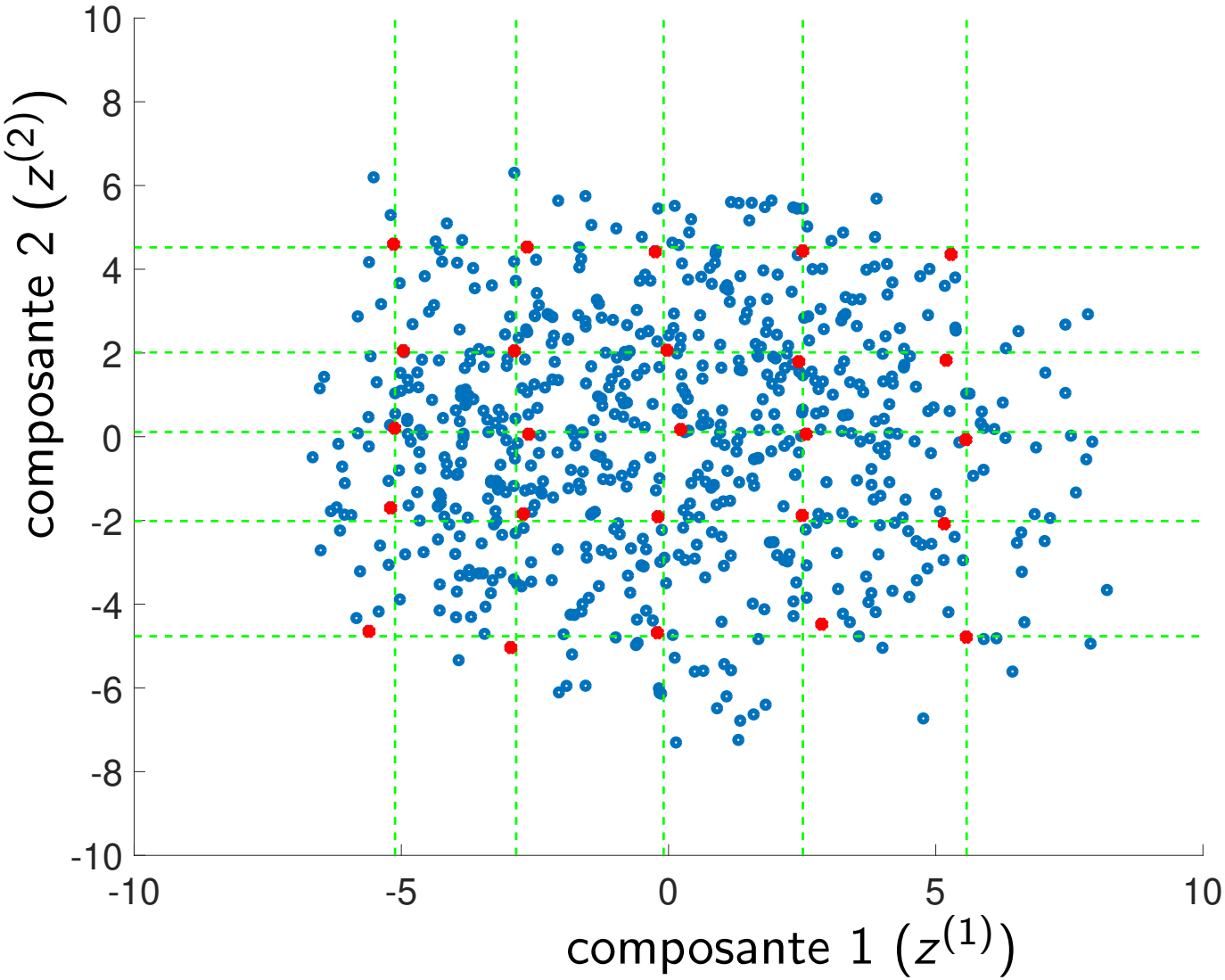
Visualisation des 2 premiers axes principaux

moyenne $\bar{x}$ axe principal v_1 axe principal v_2

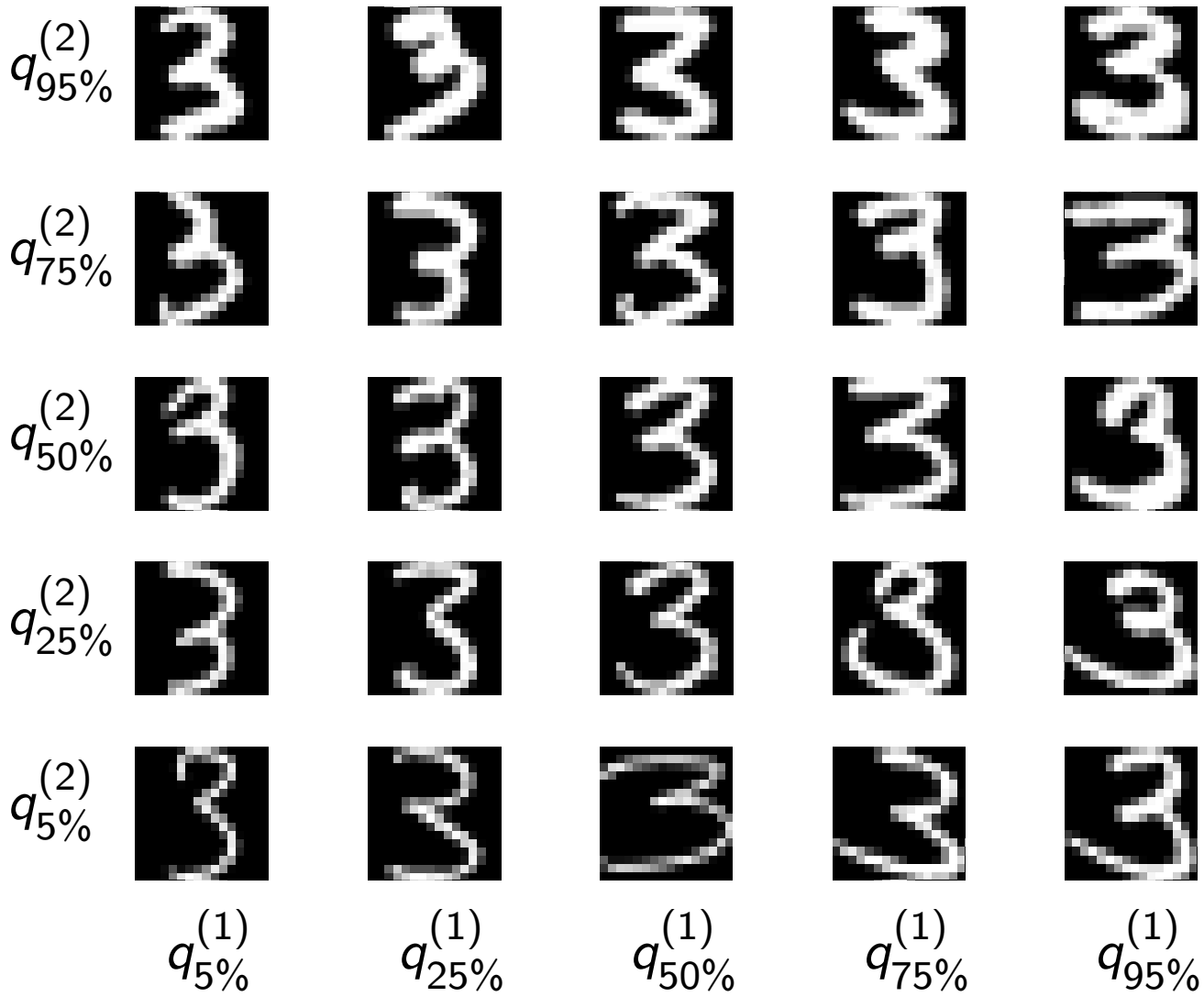
$$\forall i,\ \hat{x}_i = \bar{x} + z_i^{(1)}\, v_1 + z_i^{(2)}\, v_2$$

Plan principal $\left(z^{(1)}, z^{(2)}\right)$



Lignes en pointillés : quantiles à 5%, 25%, 50%, 75%, 95%.
Points rouges : exemples montrés sur le slide suivant.

Interprétation des composantes $\left(z^{(1)}, z^{(2)}\right)$ à l'aide de 25 observations localisées sur une grille du plan principal.



Plan du cours

Matrice de covariance des composantes

Soit $\hat{\Sigma}_Z$ la matrice de covariance empirique des q composantes

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}_Z &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(z_i - \bar{z})(z_i - \bar{z})^\top \\ &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} z_i z_i^\top \qquad (\text{car } \bar{z} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} z_i = 0) \\ &= \frac{1}{n} Z^\top Z\end{aligned}$$

avec $Z = \begin{pmatrix} z_1^\top \\ \vdots \\ z_n^\top \end{pmatrix}$. Rappel : $z_i = V_q^\top x_i$, donc $Z = XV_q$.

En utilisant $X = UDV^\top$, il vient

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}_Z &= \frac{1}{n} V_q^\top V D^\top D V^\top V_q \\ &= \frac{1}{n}\operatorname{diag}(d_1^2, \ldots, d_q^2).\end{aligned}$$

Matrice de covariance des composantes

Soit $\hat{\Sigma}_Z$ la matrice de covariance empirique des q composantes

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}_Z &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(z_i - \bar{z})(z_i - \bar{z})^\top \\ &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} z_i z_i^\top \qquad (\text{car } \bar{z} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} z_i = 0) \\ &= \frac{1}{n} Z^\top Z\end{aligned}$$

avec $Z = \begin{pmatrix} z_1^\top \\ \vdots \\ z_n^\top \end{pmatrix}$. Rappel : $z_i = V_q^\top x_i$, donc $Z = XV_q$.

En utilisant $X = UDV^\top$, il vient

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}_Z &= \frac{1}{n} V_q^\top V D^\top D V^\top V_q \\ &= \frac{1}{n}\,\mathrm{diag}(d_1^2, \ldots, d_q^2).\end{aligned}$$

Matrice de covariance des composantes (suite)

Conclusions.

- La variance (empirique) de la composante $z^{(j)}$ est $\frac{d_j^2}{n}$.
  - ➠ Composantes rangées par ordre de variance décroissante.
- Les covariances (empiriques) sont nulles.
  - ➠ Les composantes sont décorrélées.

Matrice de covariance des composantes (suite)

Conclusions.

- La variance (empirique) de la composante $z^{(j)}$ est $\frac{d_j^2}{n}$.
  - ⇛ Composantes rangées par ordre de variance décroissante.
- Les covariances (empiriques) sont nulles.
  - ⇛ Les composantes sont décorrélées.

Variance totale d'un échantillon

Définition / Proposition

La variance totale de l'échantillon p-varié $(x_1, \dots, x_n)$ est

$$VT(x_1, \dots, x_n) = \sum_{j=1}^{p} \operatorname{var}\left(x_1^{(j)}, \dots, x_n^{(j)}\right).$$

Les x_i étant centrés, on a

$$VT(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{n} \operatorname{tr}(X^\top X) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{r} d_j^2.$$

Démonstration. En effet, en utilisant que les x_i sont centrés, on a

$$VT(x_1, \dots, x_n) = \sum_{j=1}^{p} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(x_i^{(j)}\right)^2 \right) = \frac{1}{n} \|X\|_F^2 = \frac{1}{n} \operatorname{tr}(X^\top X).$$

En utilisant ensuite $X = UDV^\top$, avec $U^\top U = \mathrm{Id}_n$ et $V^\top V = \mathrm{Id}_p$, il vient

$$VT(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{n} \operatorname{tr}(D^\top D) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{r} d_j^2.$$

Variance totale d'un échantillon

Définition / Proposition

La variance totale de l'échantillon p-varié $(x_1, \ldots, x_n)$ est

$$VT(x_1, \ldots, x_n) = \sum_{j=1}^{p} \operatorname{var}\left(x_1^{(j)}, \ldots, x_n^{(j)}\right).$$

Les x_i étant centrés, on a

$$VT(x_1, \ldots, x_n) = \frac{1}{n} \operatorname{tr}(X^\top X) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{r} d_j^2.$$

Démonstration. En effet, en utilisant que les x_i sont centrés, on a

$$VT(x_1, \ldots, x_n) = \sum_{j=1}^{p} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(x_i^{(j)}\right)^2 \right) = \frac{1}{n} \|X\|_F^2 = \frac{1}{n} \operatorname{tr}(X^\top X).$$

En utilisant ensuite $X = UDV^\top$, avec $U^\top U = \mathrm{Id}_n$ et $V^\top V = \mathrm{Id}_p$, il vient

$$VT(x_1, \ldots, x_n) = \frac{1}{n} \operatorname{tr}(D^\top D) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{r} d_j^2.$$

Variance totale d'un échantillon

Définition / Proposition

La variance totale de l'échantillon p-varié $(x_1, \dots, x_n)$ est

$$VT(x_1, \dots, x_n) = \sum_{j=1}^{p} \operatorname{var}\left(x_1^{(j)}, \dots, x_n^{(j)}\right).$$

Les x_i étant centrés, on a

$$VT(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{n} \operatorname{tr}(X^\top X) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{r} d_j^2.$$

Démonstration. En effet, en utilisant que les x_i sont centrés, on a

$$VT(x_1, \dots, x_n) = \sum_{j=1}^{p} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(x_i^{(j)}\right)^2 \right) = \frac{1}{n} \|X\|_F^2 = \frac{1}{n} \operatorname{tr}(X^\top X).$$

En utilisant ensuite $X = UDV^\top$, avec $U^\top U = \mathrm{Id}_n$ et $V^\top V = \mathrm{Id}_p$, il vient

$$VT(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{n} \operatorname{tr}(D^\top D) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{r} d_j^2.$$

Proportion de variance expliquée

Variance totale de l'échantillon reconstruit $(\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_n)$:

$$VT(\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_n) = \frac{1}{n} \operatorname{tr}(\hat{X}^\top \hat{X}) = ?.$$

En utilisant $\hat{X} = ZV_q^\top$, il vient :

$$VT(\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_n) = \operatorname{tr}(V_q \hat{\Sigma}_Z V_q^\top) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{q} d_j^2.$$

Proportion de variance expliquée

On appelle proportion de variance expliquée la quantité

$$\frac{VT(\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_n)}{VT(x_1, \ldots, x_n)} = \frac{\sum_{j=1}^{q} d_j^2}{\sum_{j=1}^{r} d_j^2}.$$

Proportion de variance expliquée

Variance totale de l'échantillon reconstruit $(\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_n)$:

$$VT(\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_n) = \frac{1}{n} \operatorname{tr}(\hat{X}^\top \hat{X}) = ?.$$

En utilisant $\hat{X} = ZV_q^\top$, il vient :

$$VT(\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_n) = \operatorname{tr}(V_q \hat{\Sigma}_Z V_q^\top) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{q} d_j^2.$$

Proportion de variance expliquée

On appelle proportion de variance expliquée la quantité

$$\frac{VT(\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_n)}{VT(x_1, \ldots, x_n)} = \frac{\sum_{j=1}^{q} d_j^2}{\sum_{j=1}^{r} d_j^2}.$$

Proportion de variance expliquée

Variance totale de l'échantillon reconstruit $(\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_n)$:

$$VT(\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_n) = \frac{1}{n} \operatorname{tr}(\hat{X}^\top \hat{X}) = ?.$$

En utilisant $\hat{X} = ZV_q^\top$, il vient :

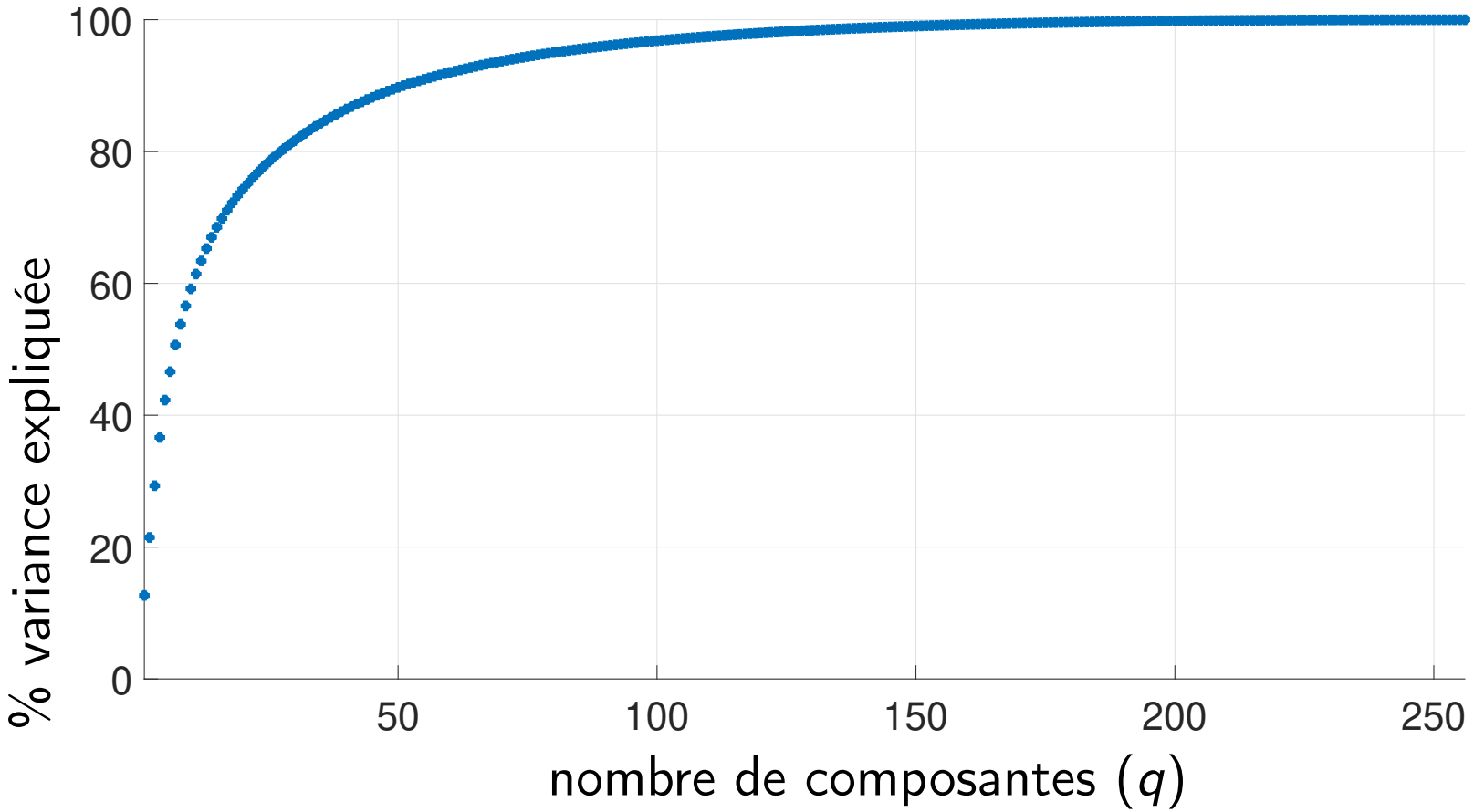
$$VT(\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_n) = \operatorname{tr}(V_q \hat{\Sigma}_Z V_q^\top) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{q} d_j^2.$$

Proportion de variance expliquée

On appelle proportion de variance expliquée la quantité

$$\frac{VT(\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_n)}{VT(x_1, \ldots, x_n)} = \frac{\sum_{j=1}^{q} d_j^2}{\sum_{j=1}^{r} d_j^2}.$$

Exemple « Code postal » (MNIST, $p = 28^2 = 784$)



Remarque : similarité avec le coefficient de détermination (R^2) en régression.

Plan du cours

Définition : clustering, clusters

Soit $E = \{x_1, \ldots, x_n\}$ un échantillon de n observations $x_i \in \mathcal{X}$.

- On suppose $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^p$, donc $E \subset \mathbb{R}^p$.

Définitions

Le clustering[†] consiste à partitionner l'ensemble E en K parties non vides $E_k \subset E$, $1 \leq k \leq K$, regroupant des données « similaires ».

Le nombre K peut être fixé ou déterminé automatiquement.

Les ensembles E_k sont appelés groupes ou grappes (*clusters*).

Notations.

- On note $\pi_k = \{i \leq n \mid x_i \in E_k\}$ les indices du cluster E_k.
- $\Pi = \{\pi_1, \ldots, \pi_K\}$ est une partition de $\{1, \ldots n\}$.

[†] ou « partitionnement des données », en bon français.

Définition : clustering, clusters

Soit $E = \{x_1, \ldots, x_n\}$ un échantillon de n observations $x_i \in \mathcal{X}$.

- On suppose $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^p$, donc $E \subset \mathbb{R}^p$.

Définitions

Le clustering[†] consiste à partitionner l'ensemble E en K parties non vides $E_k \subset E$, $1 \leq k \leq K$, regroupant des données « similaires ».

Le nombre K peut être fixé ou déterminé automatiquement.

Les ensembles E_k sont appelés groupes ou grappes (*clusters*).

Notations.

- On note $\pi_k = \{i \leq n \mid x_i \in E_k\}$ les indices du cluster E_k.
- $\Pi = \{\pi_1, \ldots, \pi_K\}$ est une partition de $\{1, \ldots n\}$.

[†] ou « partitionnement des données », en bon français.

Définition : clustering, clusters

Soit $E = \{x_1, \ldots, x_n\}$ un échantillon de n observations $x_i \in \mathcal{X}$.

- On suppose $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^p$, donc $E \subset \mathbb{R}^p$.

Définitions

Le clustering[†] consiste à partitionner l'ensemble E en K parties non vides $E_k \subset E$, $1 \leq k \leq K$, regroupant des données « similaires ».

Le nombre K peut être fixé ou déterminé automatiquement.

Les ensembles E_k sont appelés groupes ou grappes (*clusters*).

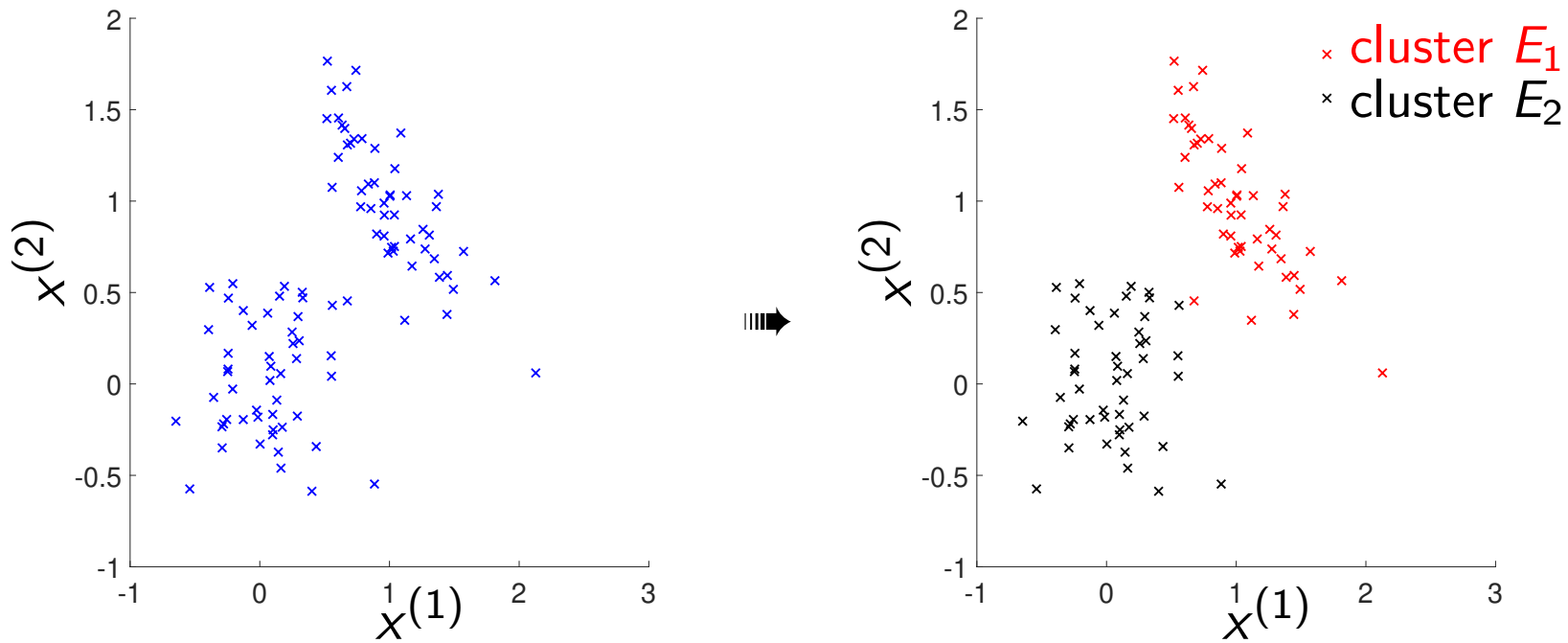
Notations.

- On note $\pi_k = \{i \leq n \mid x_i \in E_k\}$ les indices du cluster E_k.
- $\Pi = \{\pi_1, \ldots, \pi_K\}$ est une partition de $\{1, \ldots n\}$.

[†] ou « partitionnement des données », en bon français.

Un exemple de résultat

Exemple avec $p = 2$ et $K = 2$



Plan du cours

Dissimilarité : définition

On cherche une partition telle que, pour tout k,

- les exemples[†] du cluster E_k sont « similaires » entre eux,
- et aussi dissimilaires que possibles de ceux des autres clusters.

Définition

Dans les algorithmes de clustering, on appelle dissimilarité la fonction $D : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ utilisée pour mesurer la « distance » entre les exemples.

Remarque : pas toujours une distance mais vérifie en général

- la propriété de symétrie : $D(x, y) = D(y, x)$,
- la propriété de positivité : $D(x, y) \geq 0$.

[†] ou « observations », « données », « individus » ...

Dissimilarité : définition

On cherche une partition telle que, pour tout k,

- les exemples[†] du cluster E_k sont « similaires » entre eux,
- et aussi dissimilaires que possibles de ceux des autres clusters.

Définition

Dans les algorithmes de clustering, on appelle dissimilarité la fonction $D : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ utilisée pour mesurer la « distance » entre les exemples.

Remarque : pas toujours une distance mais vérifie en général

- la propriété de symétrie : $D(x, y) = D(y, x)$,
- la propriété de positivité : $D(x, y) \geq 0$.

[†] ou « observations », « données », « individus » ...

Dissimilarité : définition

On cherche une partition telle que, pour tout k,

- les exemples[†] du cluster E_k sont « similaires » entre eux,
- et aussi dissimilaires que possibles de ceux des autres clusters.

Définition

Dans les algorithmes de clustering, on appelle dissimilarité la fonction $D : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ utilisée pour mesurer la « distance » entre les exemples.

Remarque : pas toujours une distance mais vérifie en général

- la propriété de symétrie : $D(x, y) = D(y, x)$,
- la propriété de positivité : $D(x, y) \geq 0$.

[†] ou « observations », « données », « individus » ...

Dissimilarité : exemples

- Forme générale : $D(x_i, x_{i'}) = \sum_{j=1}^{p} d_j\left(x_i^{(j)}, x_{i'}^{(j)}\right)$
- Variable quantitative : $d_j\left(x_i^{(j)}, x_{i'}^{(j)}\right) = f\left(|x_i^{(j)} - x_{i'}^{(j)}|\right)$.

  Exemple : $d_j\left(x_i^{(j)}, x_{i'}^{(j)}\right) = \left(x_i^{(j)} - x_{i'}^{(j)}\right)^2$.

  Remarque : il est souvent utile de normaliser les variables :

  $x_i^{(j)} \to \frac{x_i^{(j)}}{s_j}$, (choix courant pour s_j : écart-type empirique)
- Variable qualitative : $d_j\left(x_i^{(j)}, x_{i'}^{(j)}\right) = \mathrm{cste}$ si $x_i^{(j)} \neq x_{i'}^{(j)}$ (0 sinon)

Inertie intra-cluster & inertie inter-cluster

Notons $d_{ii'} = D(x_i, x_{i'})$.

Inertie intra-cluster

On appelle inertie intra-cluster la quantité :

$$W(\Pi) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{K} \sum_{i,i' \in \pi_k} d_{ii'}.$$

(W=Within)

Inertie inter-cluster

On appelle inertie inter-cluster la quantité :

$$B(\Pi) = \frac{1}{2} \sum_{k,k' \neq k} \sum_{i \in \pi_k} \sum_{i' \in \pi_{k'}} d_{ii'}.$$

(B=Between)

Inertie intra-cluster & inertie inter-cluster

Notons $d_{ii'} = D(x_i, x_{i'})$.

Inertie intra-cluster

On appelle inertie intra-cluster la quantité :

$$W(\Pi) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{K} \sum_{i,i' \in \pi_k} d_{ii'}.$$

(W=Within)

Inertie inter-cluster

On appelle inertie inter-cluster la quantité :

$$B(\Pi) = \frac{1}{2} \sum_{k,k' \neq k} \sum_{i \in \pi_k} \sum_{i' \in \pi_{k'}} d_{ii'}.$$

(B=Between)

Inertie intra-cluster & inertie inter-cluster (suite)

Propriété

$W(\Pi) + B(\Pi) = \frac{1}{2} \sum_{i,i'} d_{ii'}$

Définition

$T = \frac{1}{2} \sum_{i,i'} d_{ii'}$ est l'inertie totale.

- Ne dépend pas de la partition.

Démonstration de la propriété :

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i,i'} d_{ii'} = \frac{1}{2} \sum_{k,k'} \sum_{i \in \pi_k} \sum_{i' \in \pi_{k'}} d_{ii'}$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{k} \sum_{i,i' \in \pi_k} d_{ii'}}_{W(\Pi)} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{k,k' \neq k} \sum_{i \in \pi_k} \sum_{i' \in \pi_{k'}} d_{ii'}}_{B(\Pi)}$$

Inertie intra-cluster & inertie inter-cluster (suite)

Propriété

$W(\Pi) + B(\Pi) = \frac{1}{2} \sum_{i,i'} d_{ii'}$

Définition

$T = \frac{1}{2} \sum_{i,i'} d_{ii'}$ est l'inertie totale.

- Ne dépend pas de la partition.

Démonstration de la propriété :

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i,i'} d_{ii'} = \frac{1}{2} \sum_{k,k'} \sum_{i \in \pi_k} \sum_{i' \in \pi_{k'}} d_{ii'}$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{k} \sum_{i,i' \in \pi_k} d_{ii'}}_{W(\Pi)} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{k,k' \neq k} \sum_{i \in \pi_k} \sum_{i' \in \pi_{k'}} d_{ii'}}_{B(\Pi)}$$

Partition optimale

On aimerait déterminer la partition optimale :

$$\Pi_\star \;=\; \arg\min_\Pi W(\Pi)$$

Remarque : comme $W(\Pi) + B(\Pi) = T$, $\Pi_\star = \arg\max_\Pi B(\Pi)$.

Difficulté : Il s'agit d'un problème d'optimisation combinatoire

- 34105 partitions pour $n = 10$ et $K = 4$,
- $\approx 7.5\,10^{11}$ partitions pour $n = 20$ et $K = 5$.

Solution : Recherche d'une partition sous-optimale

➠ algorithme K-means

Partition optimale

On aimerait déterminer la partition optimale :

$$\Pi_\star \;=\; \arg\min_\Pi W(\Pi)$$

Remarque : comme $W(\Pi) + B(\Pi) = T$, $\Pi_\star = \arg\max_\Pi B(\Pi)$.

Difficulté : Il s'agit d'un problème d'optimisation combinatoire

- 34105 partitions pour $n = 10$ et $K = 4$,
- $\approx 7.5\,10^{11}$ partitions pour $n = 20$ et $K = 5$.

Solution : Recherche d'une partition sous-optimale

➠ algorithme K-means

Plan du cours

Dissimilarité considérée : $d_{ii'} = \|x_i - x_{i'}\|^2$.

Avec cette dissimilarité (démonstration) :

$$W(\Pi) = \sum_{k=1}^{K} n_k \sum_{i \in \pi_k} \|x_i - \bar{x}_k\|^2$$

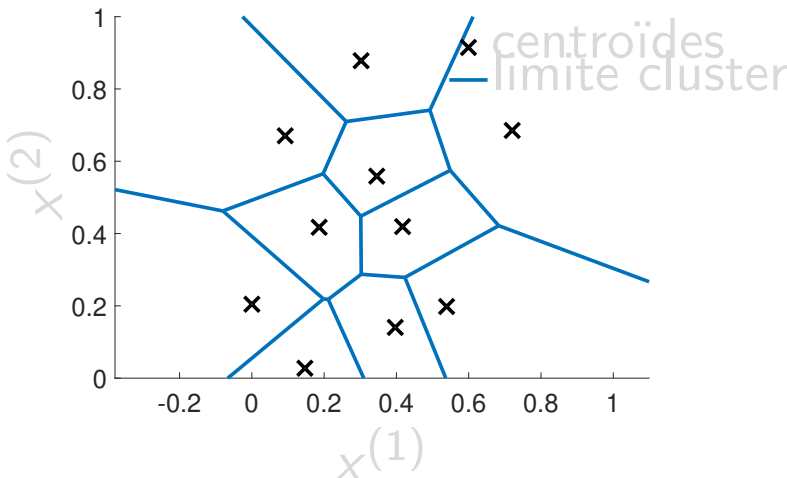
où $\bar{x}_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i \in \pi_k} x_i$ est le barycentre du cluster, $n_k = |\pi_k|$.

- $\bar{x}_k$ s'appelle le centroïde du cluster k.

Principe de l'algorithme $K-$means

Itérativement,

- Partant d'une partition Π, calculer les centroïdes $\bar{x}_k$.
- Modifier Π de sorte que chaque x_i soit associé au cluster π_k dont le centroïde (courant) $\bar{x}_k$ est le plus proche.



- diagramme de Voronoï

Dissimilarité considérée : $d_{ii'} = \|x_i - x_{i'}\|^2$.

Avec cette dissimilarité (démonstration) :

$$W(\Pi) = \sum_{k=1}^{K} n_k \sum_{i \in \pi_k} \|x_i - \bar{x}_k\|^2$$

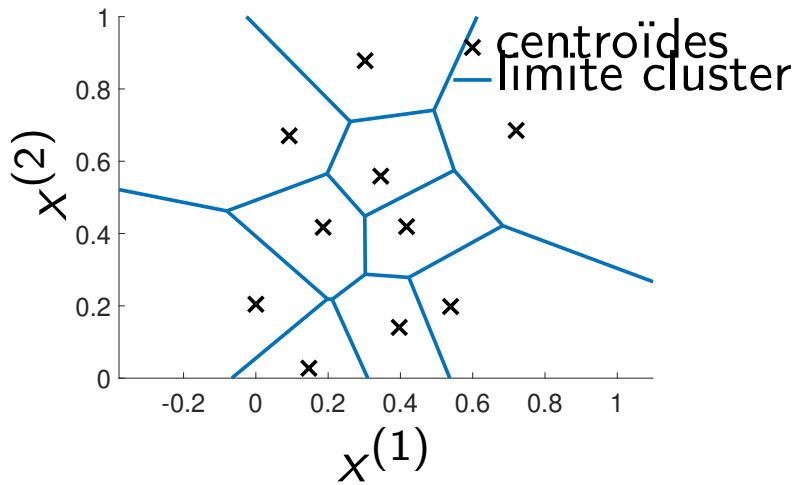
où $\bar{x}_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i \in \pi_k} x_i$ est le barycentre du cluster, $n_k = |\pi_k|$.

➠ $\bar{x}_k$ s'appelle le centroïde du cluster k.

Principe de l'algorithme $K-$means

Itérativement,

- Partant d'une partition Π, calculer les centroïdes $\bar{x}_k$.
- Modifier Π de sorte que chaque x_i soit associé au cluster π_k dont le centroïde (courant) $\bar{x}_k$ est le plus proche.



➠ diagramme de Voronoï

Algorithme $K-$means

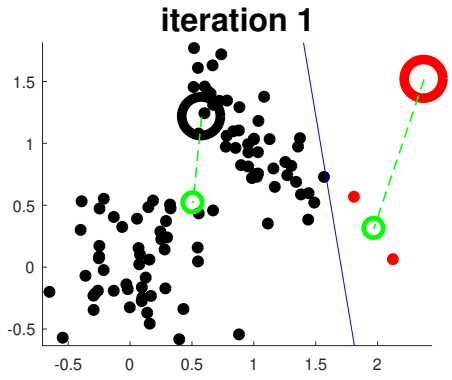
Require: $K > 0$ {nombre de clusters}
Require: $(\bar{x}_{1,0}, \ldots, \bar{x}_{K,0})$ {initialisation des centroïdes}

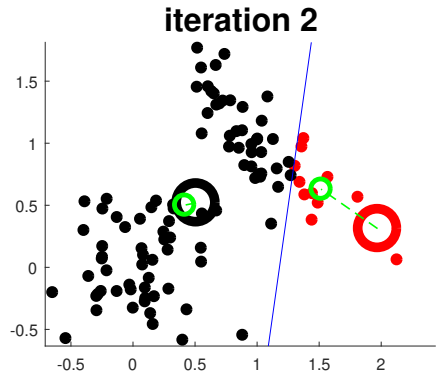
$t \leftarrow 0$
repeat

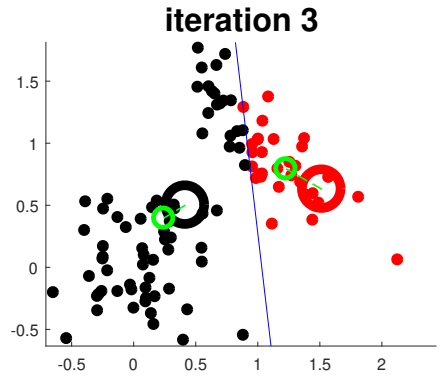
Step 1 {construction de Π_t à partir des centroïdes}
for all k **do**
$\pi_{k,t} = \{i \text{ t.q. } k = \arg\min_{k'} \|x_i - \bar{x}_{k',t}\|\}$
end for

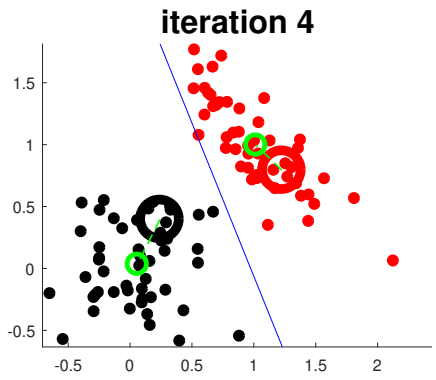
Step 2 {mise à jour des centroïdes}
for all k **do**
$\bar{x}_{k,t} = \frac{1}{|\pi_{k,t}|} \sum_{i \in \pi_{k,t}} x_i$
end for

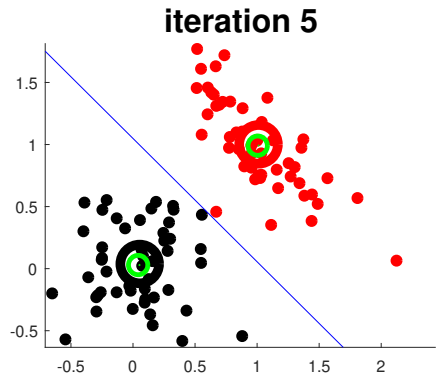
$t \leftarrow t + 1$
until $W(\Pi_{t-1}) = W(\Pi_{t-2})$
return Π_{t-1}

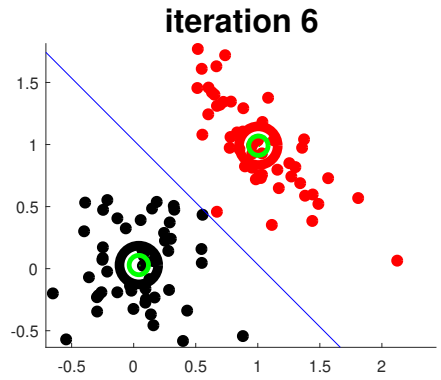

iteration 1
1.5
1
0.5
0
-0.5
-0.5
0
0.5
1
1.5
2


iteration 2
1.5
1
0.5
0
-0.5
-0.5
0
0.5
1
1.5
2


iteration 3
1.5
1
0.5
0
-0.5
-0.5
0
0.5
1
1.5
2


iteration 4
1.5
1
0.5
0
-0.5
-0.5
0
0.5
1
1.5
2


iteration 5
1.5
1
0.5
0
-0.5
-0.5
0
0.5
1
1.5
2


iteration 6
1.5
1
0.5
0
-0.5
-0.5
0
0.5
1
1.5
2

Propriétés de l'algorithme $K-$means

Proposition

Soit $(\Pi_t)_{t\geq 0}$ la suite des partitions construites par l'algorithme.

Alors, il existe T tel que :

1. $\forall t \leq T,\ W(\Pi_t) < W(\Pi_{t-1})$,
2. $W(\Pi_{T+1}) = W(\Pi_T)$.

L'algorithme se termine en un nombre fini d'itérations, mais

- la partition Π_T n'est pas, en général, la partition optimale ;
- elle dépend du point de départ $(\bar{x}_{1,0}, \ldots, \bar{x}_{K,0})$.

➠ Recommandé : essais avec différentes initialisations aléatoires.

Propriétés de l'algorithme $K-$means

Proposition

Soit $(\Pi_t)_{t\geq 0}$ la suite des partitions construites par l'algorithme.

Alors, il existe T tel que :

1. $\forall t \leq T,\ W(\Pi_t) < W(\Pi_{t-1})$,
2. $W(\Pi_{T+1}) = W(\Pi_T)$.

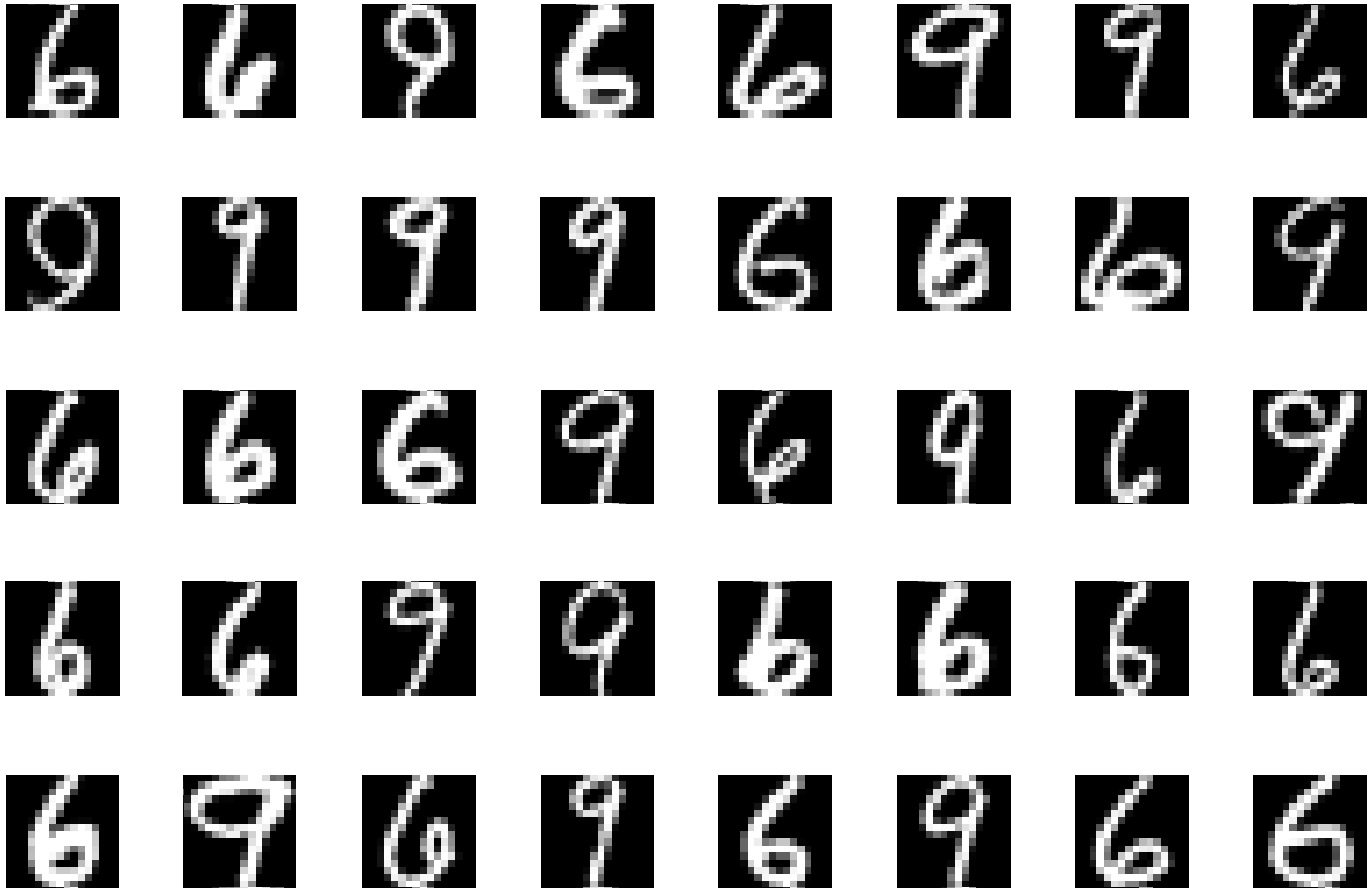
L'algorithme se termine en un nombre fini d'itérations, mais

- la partition Π_T n'est pas, en général, la partition optimale ;
- elle dépend du point de départ $(\bar{x}_{1,0}, \ldots, \bar{x}_{K,0})$.

➠ Recommandé : essais avec différentes initialisations aléatoires.

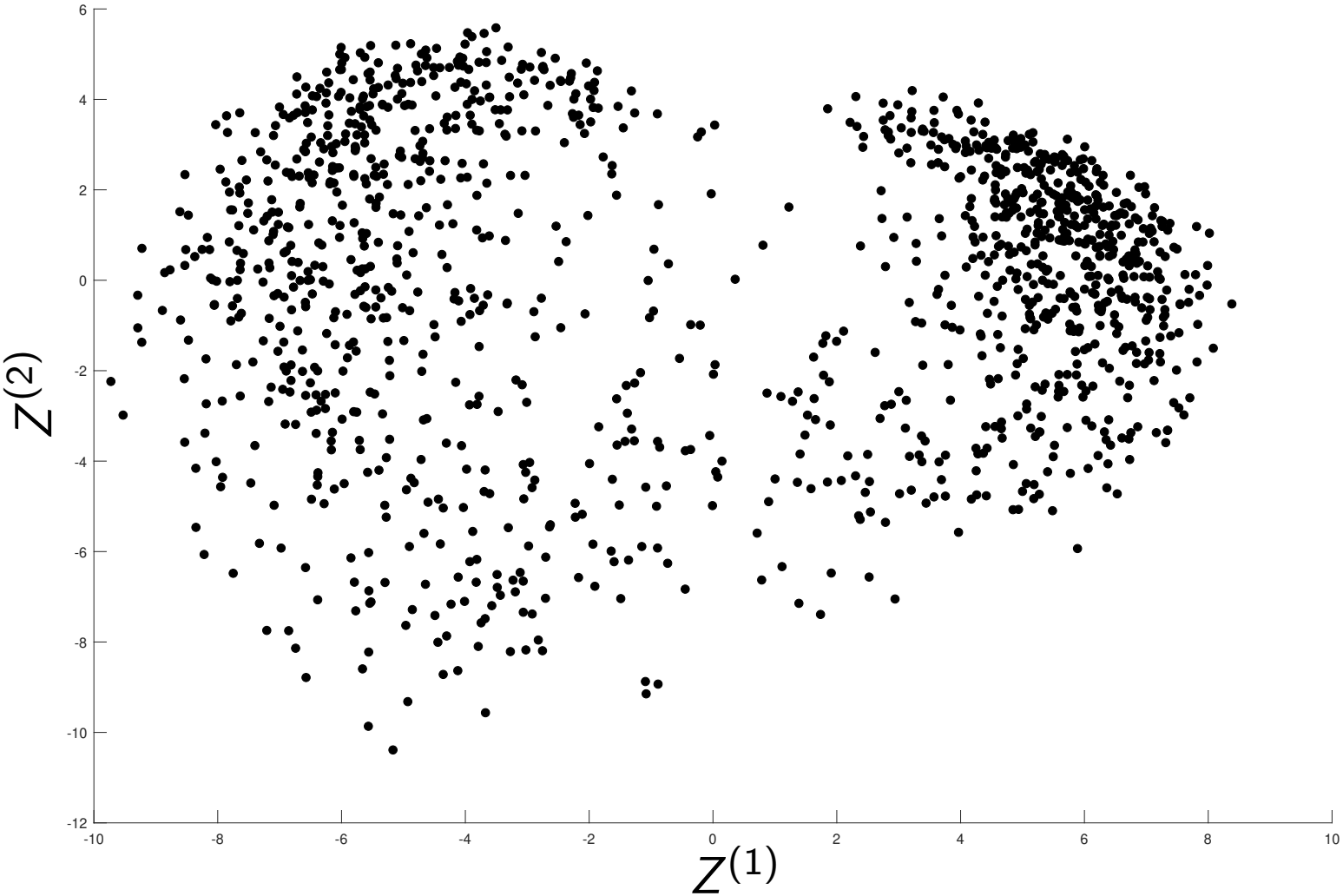
Retour sur l'exemple « Code postal »

Considérons les chiffres « 6 » (664 images) et « 9 » (644 images)

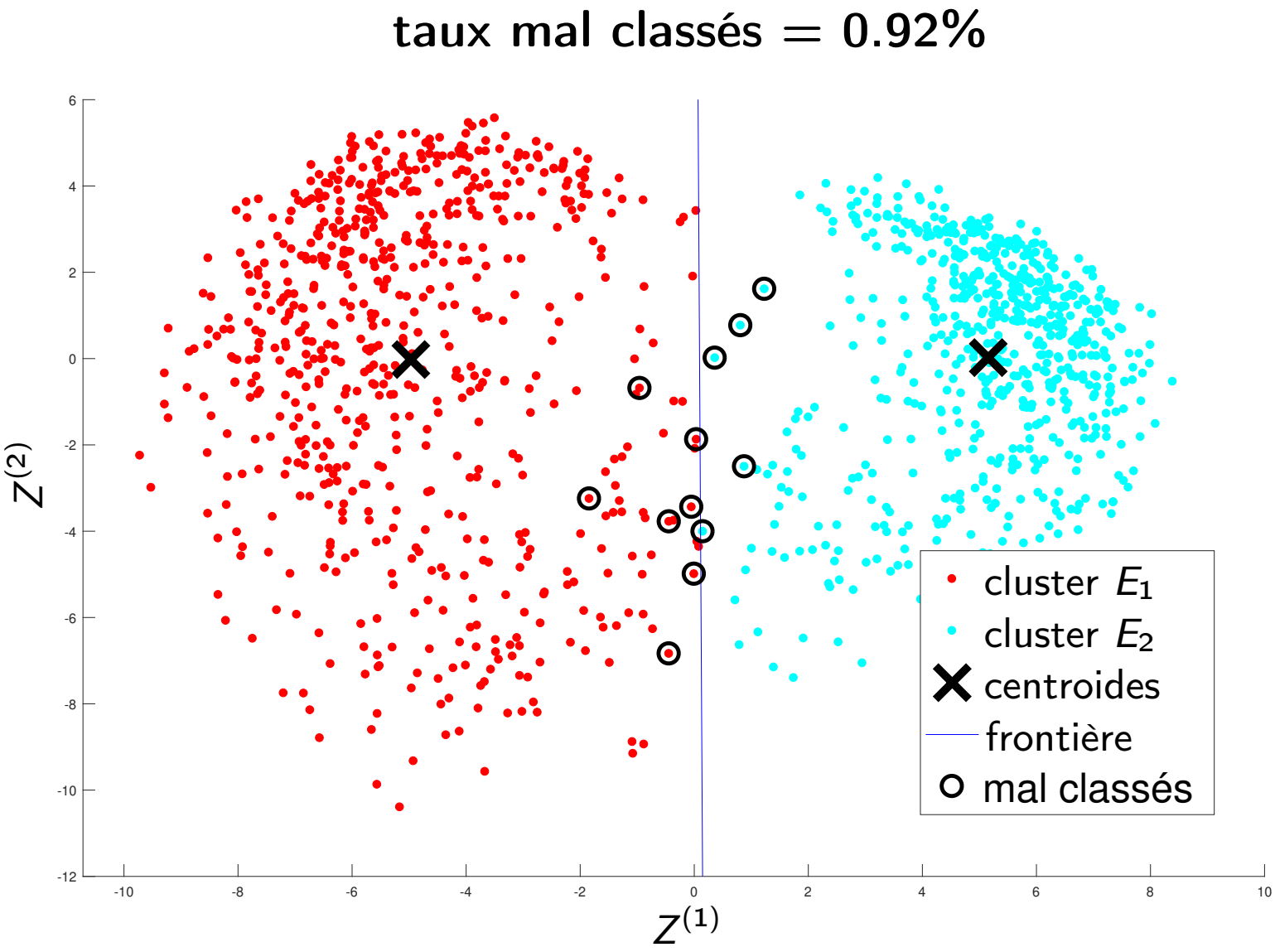


Exemple « Code postal »

Appliquons l'algorithme $K-$means dans le plan principal (ACP).



Exemple « Code postal »



Note : on utilise ici les étiquettes, supposées indisponibles dans un cadre non-supervisé, à la seule fin d'évaluer la qualité de la partition obtenue.

Plan du cours

Homogénéité / dispersion

Rappel. On cherche une partition telle que, pour tout k,

- les exemples[†] du cluster E_k sont « similaires » entre eux,
- et aussi dissimilaires que possibles de ceux des autres clusters.

Définition : dispersion

On mesure (souvent) la dispersion du cluster E_k par

$$S_k = \left(\frac{1}{|\pi_k|} \sum_{i \in \pi_k} \|x_i - \bar{x}_k\|^q \right)^{\frac{1}{q}},$$

avec q un réel positif à choisir[†].

Interprétation. Plus S_k est petit, plus le cluster est homogène.

[†] Le polycopié de P.-H. Cournède et scikit-learn utilisent $q = 1$.

Homogénéité / dispersion

Rappel. On cherche une partition telle que, pour tout k,

- les exemples[†] du cluster E_k sont « similaires » entre eux,
- et aussi dissimilaires que possibles de ceux des autres clusters.

Définition : dispersion

On mesure (souvent) la dispersion du cluster E_k par

$$S_k = \left(\frac{1}{|\pi_k|} \sum_{i \in \pi_k} \|x_i - \bar{x}_k\|^q \right)^{\frac{1}{q}},$$

avec q un réel positif à choisir[†].

Interprétation. Plus S_k est petit, plus le cluster est homogène.

[†] Le polycopié de P.-H. Cournède et scikit-learn utilisent $q = 1$.

Indice de Davies-Bouldin

Définition : similarité des clusters E_k et $E_{k'}$

$$R_{k,k'} = \frac{S_k + S_{k'}}{\|\bar{x}_k - \bar{x}_{k'}\|}, \qquad 1 \leq k, k' \leq K, \quad k \neq k'.$$

Interprétation. Les clusters sont d'autant plus dissimilaires que leurs dispersions sont petites comparées à la distance entre les centroïdes.

Définition : indice de Davies-Bouldin d'une partition

$$\mathrm{DB} = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \max_{k' \neq k} R_{k,k'}$$

➠ Utilisation : on choisit K de façon à minimiser DB.

Indice de Davies-Bouldin

Définition : similarité des clusters E_k et $E_{k'}$

$$R_{k,k'} = \frac{S_k + S_{k'}}{\|\bar{x}_k - \bar{x}_{k'}\|}, \qquad 1 \leq k, k' \leq K, \quad k \neq k'.$$

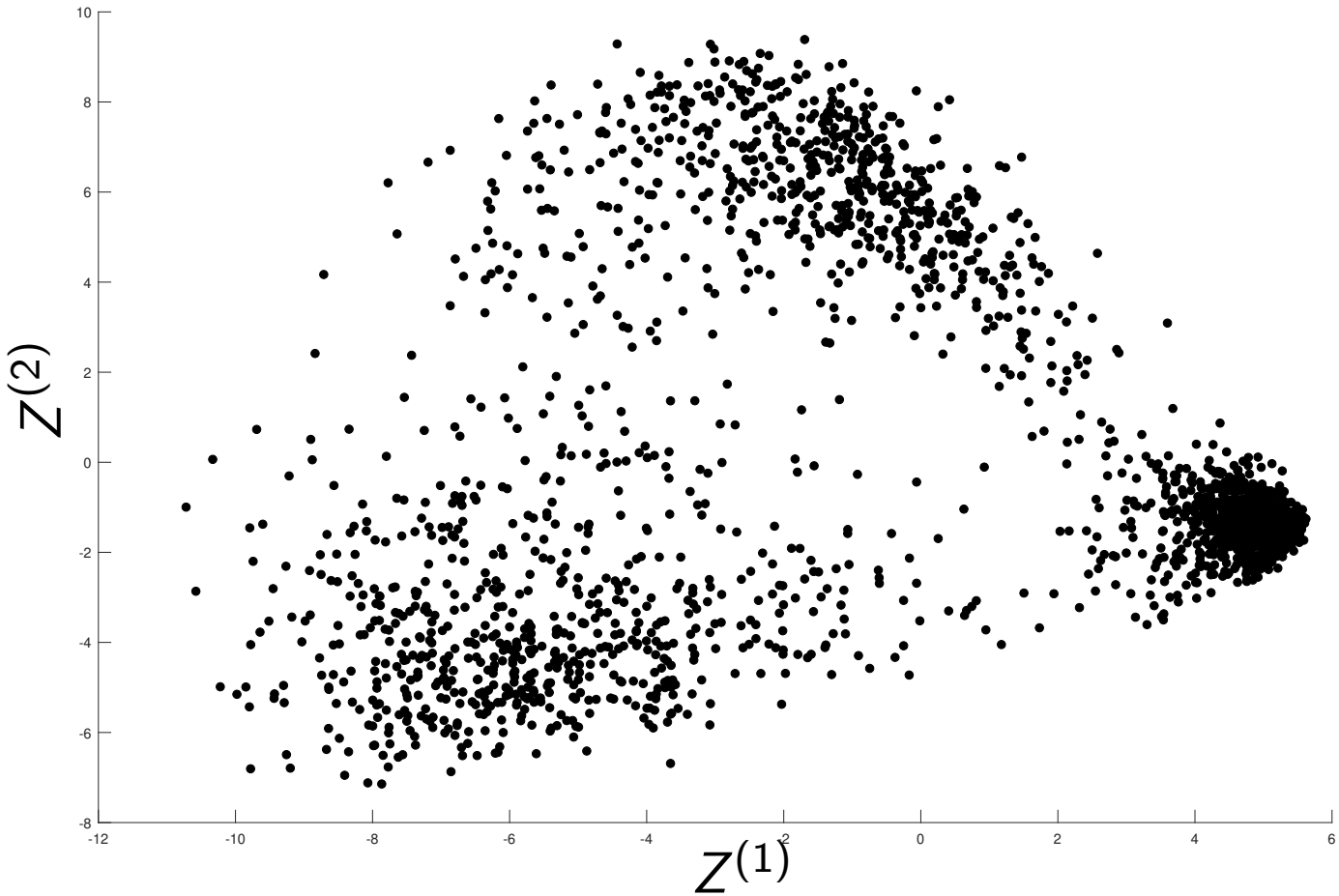
Interprétation. Les clusters sont d'autant plus dissimilaires que leurs dispersions sont petites comparées à la distance entre les centroïdes.

Définition : indice de Davies-Bouldin d'une partition

$$\mathrm{DB} = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \max_{k' \neq k} R_{k,k'}$$

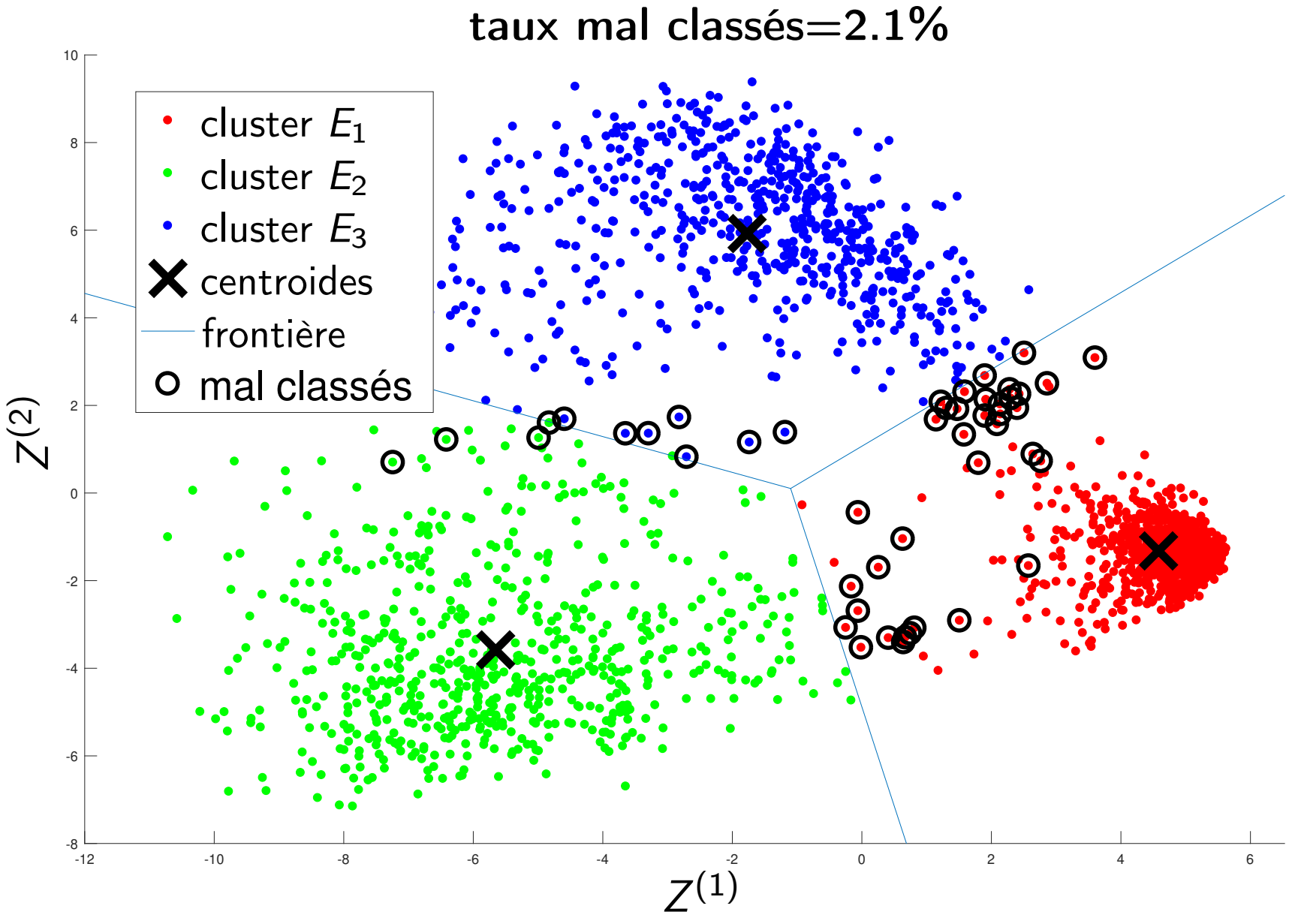
➠ Utilisation : on choisit K de façon à minimiser DB.

Exemple « Code postal » avec les chiffres 1, 6 et 9

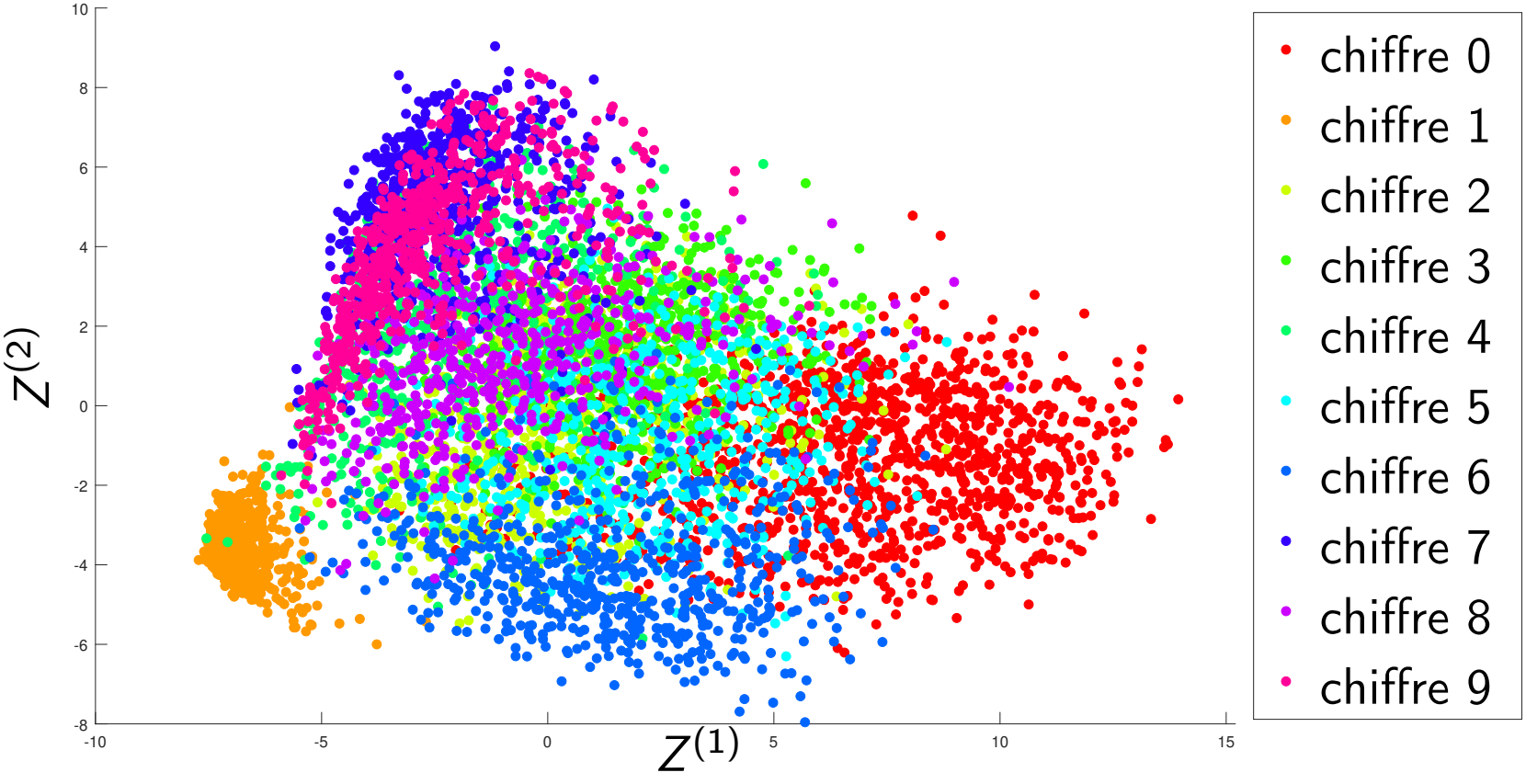


K	2	3	4	5	6	7	8
$DB(K)$	0.76	0.42	0.77	0.89	0.76	0.77	0.79

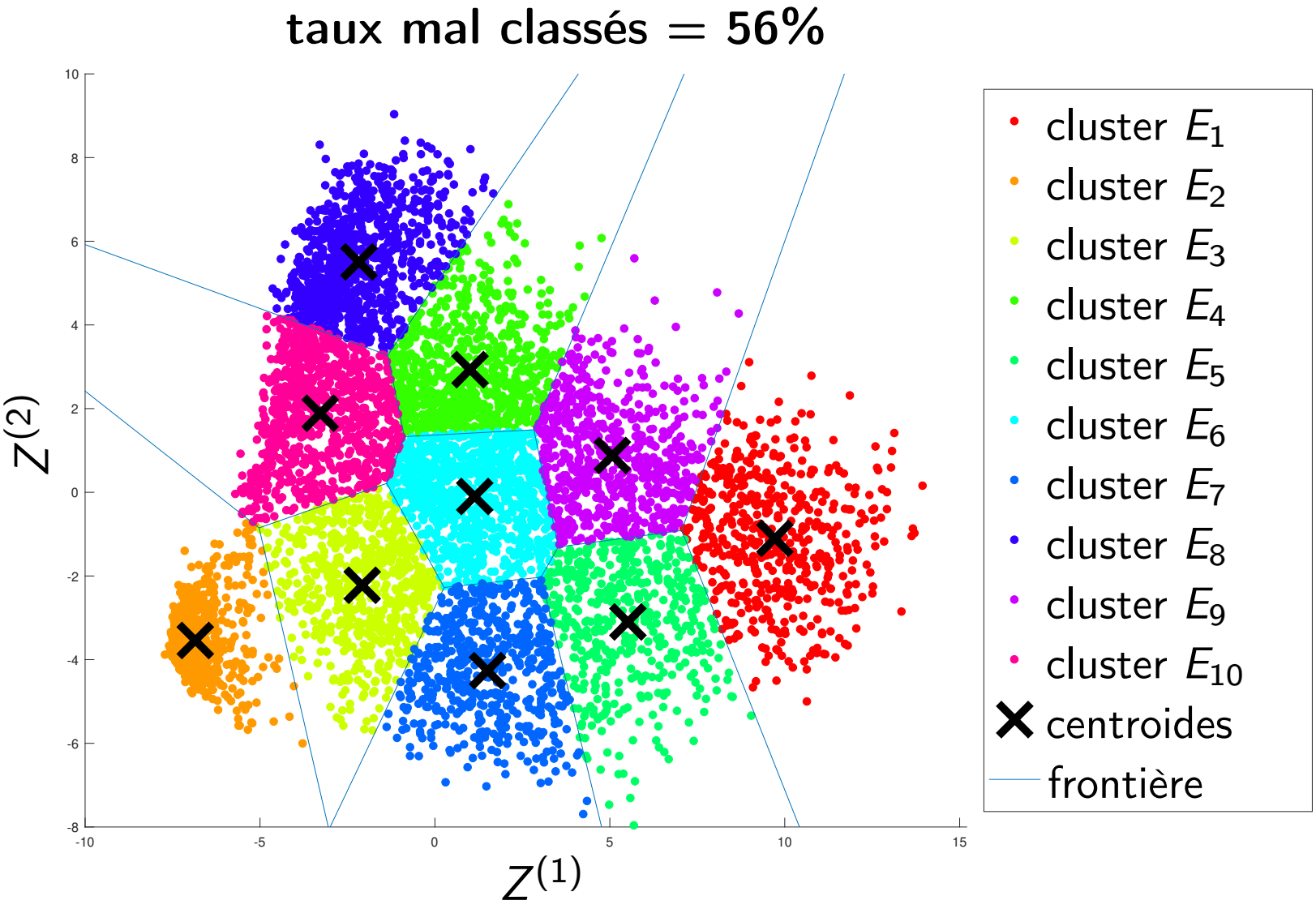
Exemple « Code postal » avec les chiffres 1, 6 et 9



Exemple « Code postal » avec les chiffres de 0 à 9



Exemple « Code postal » avec les chiffres de 0 à 9



Exemple « Code postal » avec les chiffres de 0 à 9

	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	E_6	E_7	E_8	E_9	E_{10}	total
« 0 »	498	0	22	6	260	82	64	0	262	0	1194
« 1 »	0	1000	4	0	0	0	0	0	0	1	1005
« 2 »	3	1	234	122	12	202	54	3	60	40	731
« 3 »	1	0	29	230	4	211	5	5	131	42	658
« 4 »	0	21	70	112	2	42	3	144	19	239	652
« 5 »	2	0	61	37	66	171	88	1	119	11	556
« 6 »	3	6	135	0	128	43	335	0	10	4	664
« 7 »	0	2	2	49	0	6	0	458	1	127	645
« 8 »	2	7	82	138	1	93	1	17	41	160	542
« 9 »	0	10	0	64	0	3	0	303	7	257	644
total	509	1047	639	758	473	853	550	931	650	881	7291

Peu concluant ➠ besoin d'une meilleure mesure de dissimilarité !

(et, en particulier, d'une meilleure *représentation*)

Exemple « Code postal » avec les chiffres de 0 à 9

	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	E_6	E_7	E_8	E_9	E_{10}	total
« 0 »	498	0	22	6	260	82	64	0	262	0	1194
« 1 »	0	1000	4	0	0	0	0	0	0	1	1005
« 2 »	3	1	234	122	12	202	54	3	60	40	731
« 3 »	1	0	29	230	4	211	5	5	131	42	658
« 4 »	0	21	70	112	2	42	3	144	19	239	652
« 5 »	2	0	61	37	66	171	88	1	119	11	556
« 6 »	3	6	135	0	128	43	335	0	10	4	664
« 7 »	0	2	2	49	0	6	0	458	1	127	645
« 8 »	2	7	82	138	1	93	1	17	41	160	542
« 9 »	0	10	0	64	0	3	0	303	7	257	644
total	509	1047	639	758	473	853	550	931	650	881	7291

Peu concluant ➠ besoin d'une meilleure mesure de dissimilarité !

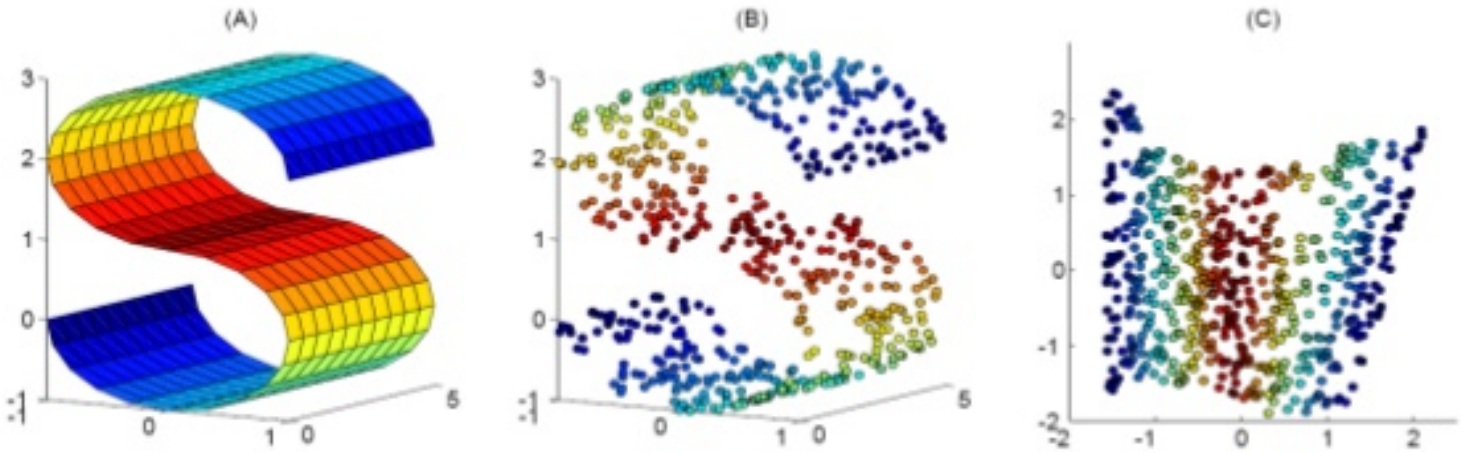
(et, en particulier, d'une meilleure *représentation*)

Plan du cours

Réduction de dimension non-linéaire

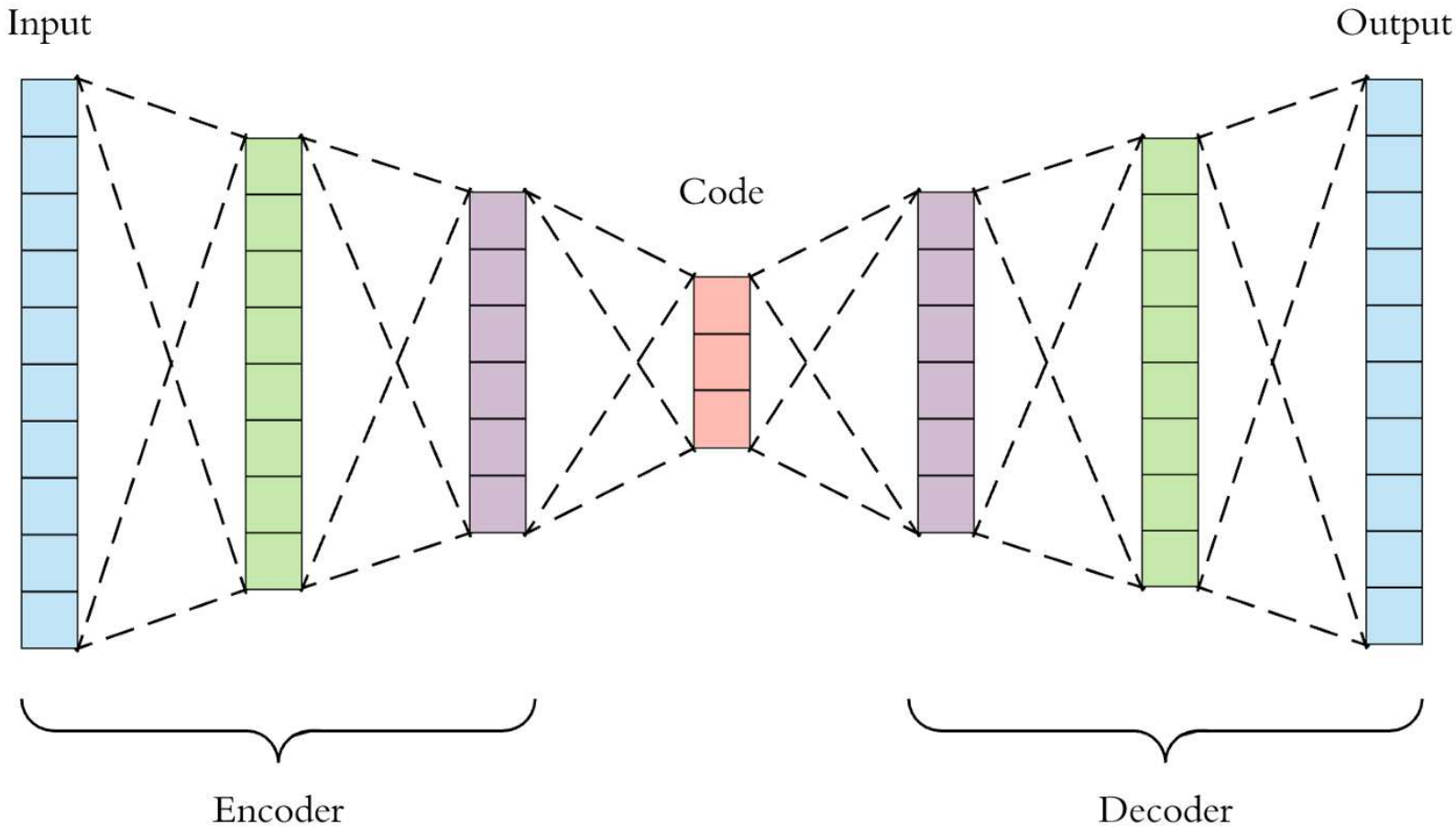
Nonlinear Dimensionality Reduction

- Many data sets contain essential nonlinear structures that invisible to PCA.



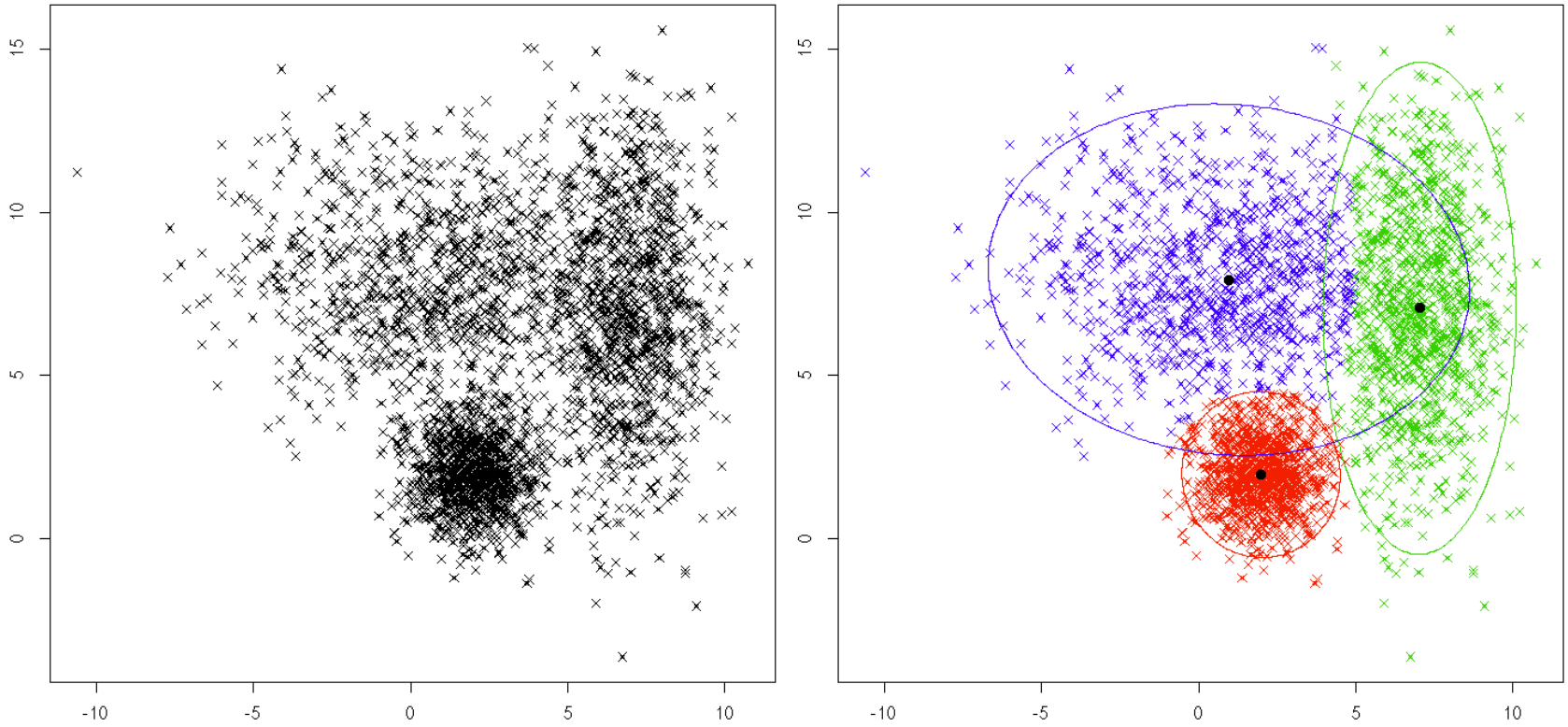
source : Yan Xu, Houston Machine Learning Meetup, 2017

Exemple : auto-encodeur



source : https://towardsdatascience.com, Applied Data Deep Learning Part 3

Clustering fondé sur les modèles de mélange



source : bioinfo-fr.net

Plan du cours

Plan du cours

Démonstration du théorème fondamental de l'ACP

$$\left\|\left(\mathrm{Id}_p - AA^\top\right) X^\top\right\|_F^2 = \left\|VD^\top U^\top - AA^\top VD^\top U^\top\right\|_F^2$$

Propriété de la norme de Frobenius : si U et V sont orthogonales,

$$\left\|VMU^\top\right\|_F^2 = \|M\|_F^2 .$$

D'où : $\left\|\left(\mathrm{Id}_p - AA^\top\right) X\right\|_F^2 = \left\|D^\top - V^\top AA^\top VD^\top\right\|_F^2$.

Soit $\mathscr{M}_{n,p,q}$ l'ensemble des matrices de taille $n \times p$ et de rang q. Alors

$$D_q \;=\; \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_q, 0, \ldots, 0) \;\in\; \mathrm{argmin}_{M \in \mathscr{M}_{n,p,q}} \left\|D^\top - M^\top\right\|_F^2$$

(matrice diagonale des q plus grandes valeurs singulières).

On obtient le résultat en vérifiant que $V^\top V_q V_q^\top VD^\top = D_q^\top$. □

retour au slide 16

Plan du cours

Expressions de T et $W(\Pi)$ pour $d_{ii'} = \|x_i - x_{i'}\|^2$

$$
\begin{aligned}
T &= \tfrac{1}{2} \textstyle\sum_{i,i'} \|x_i - x_{i'}\|^2 \\
&= \tfrac{1}{2} \textstyle\sum_{i,i'} \|(x_i - \bar{x}) - (x_{i'} - \bar{x})\|^2 \\
&= n \textstyle\sum_i \|x_i - \bar{x}\|^2 - \sum_{i,i'} (x_i - \bar{x})^\top (x_{i'} - \bar{x}) \\
&= n \textstyle\sum_i \|x_i - \bar{x}\|^2
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
W(\Pi) &= \tfrac{1}{2} \textstyle\sum_k \sum_{i,i' \in \pi_k} \|x_i - x_{i'}\|^2 \\
&= \tfrac{1}{2} \textstyle\sum_k \sum_{i,i' \in \pi_k} \|(x_i - \bar{x}_k) - (x_{i'} - \bar{x}_k)\|^2 \\
&= \textstyle\sum_k n_k \sum_{i \in \pi_k} \|x_i - \bar{x}_k\|^2
\end{aligned}
$$

retour au slide 34

Plan du cours

Coefficient de silhouette d'une partition

Autre indicateur de la cohérence globale d'une partition Π.

Soit $i \in \pi_k$. Pour le point x_i, on définit :

- $a(x_i)$: moyenne des distances aux autres points du cluster π_k
- $b(x_i)$: minimum de cette moyenne si x_i appartenait à un autre cluster

$$a(x_i) = \frac{1}{|\pi_k|} \sum_{i' \in \pi_k} \|x_{i'} - x_i\|$$
$$b(x_i) = \min_{k' \neq k} \left(\frac{1}{|\pi_{k'}|} \sum_{i' \in \pi_{k'}} \|x_{i'} - x_i\| \right)$$

Interprétation : $a(x_i) \ll b(x_i)$ si les clusters sont homogènes et bien séparés.

Coefficient de silhouette de la partition Π

$$s(\Pi) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \frac{b(x_i) - a(x_i)}{\max(a(x_i), b(x_i))}$$

Choix du nombre K de clusters :

$\forall \Pi$, $s(\Pi) \leq 1$ et on choisit la partition tel que $s(\Pi)$ est maximum.