

Apprentissage non supervisé

Quentin Fortier

January 16, 2025

Définition

Un algorithme de classification est un algorithme qui permet d'associer à chaque donnée une classe (une espèce de fleur, un chiffre...)

Définition

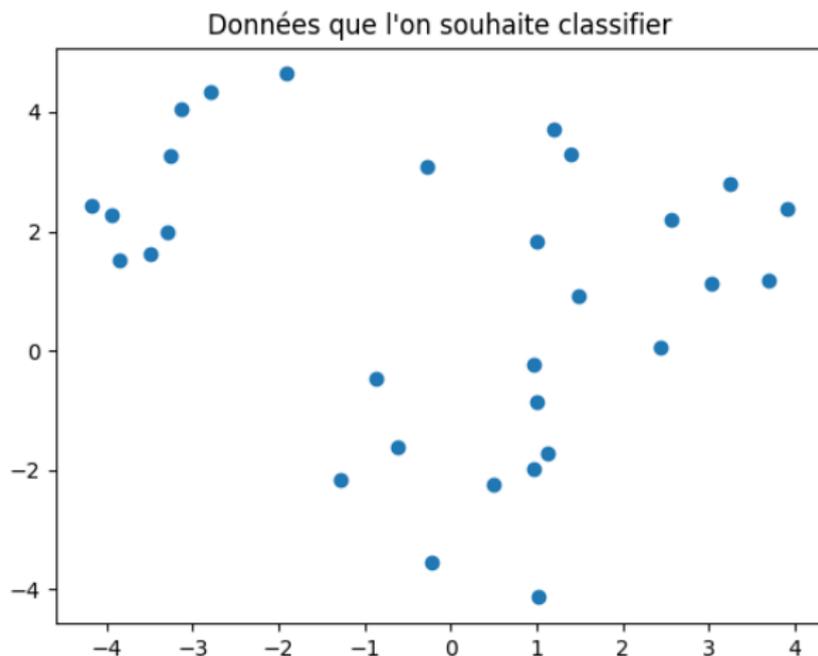
Un algorithme de classification est un algorithme qui permet d'associer à chaque donnée une classe (une espèce de fleur, un chiffre...)

Il y a deux types d'algorithmes de classification :

- Classification supervisée : on connaît les classes de certaines données (données d'entraînement) qui permettent de prédire la classe d'une nouvelle donnée.
Exemples : k plus proches voisins, ID3.
- Classification non supervisée : Il n'y a pas de donnée d'entraînement et l'ensemble des classes possibles n'est pas connue à l'avance..
Exemples : k -moyennes, classification hiérarchique ascendante.

Algorithme des k -moyennes : Principe général

Exemple : il semble y avoir $k = 3$ classes de données parmi ces points.



Définition

Le centre (ou : isobarycentre) d'un ensemble de vecteurs x_1, \dots, x_n est le vecteur

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

Algorithme des k -moyennes : Principe général

Dans tout le cours, on note d la distance euclidienne.

Définition

La variance (ou : moment d'inertie) $V(X)$ d'un ensemble de vecteur X est définie par

$$V(X) = \sum_{x \in X} d(x, \bar{X})^2$$

La variance mesure la variation par rapport à la moyenne : plus $V(X)$ est petit, plus les vecteurs de X sont proches du barycentre \bar{X} .

Algorithme des k -moyennes : Principe général

Soit X un ensemble de données et un entier k .

Objectif

On veut trouver un partitionnement de X en k sous-ensembles X_1, \dots, X_k (classes ou *clusters*) minimisant l'inertie I :

$$I = \sum_{i=1}^k V(X_i)$$

Plus l'inertie est petite, plus les données sont proches du centre de leur classe et plus le partitionnement est bon.

Algorithme des k -moyennes : Principe général

Algorithme des k -moyennes

Objectif : partitionner X en classes X_1, \dots, X_k .

- 1 Soit c_1, \dots, c_k des vecteurs choisis aléatoirement.

Attention : dans l'algorithme des k -moyennes, k est le nombre de classes alors que dans l'algorithme des plus proches voisins, k est le nombre de voisins.

Algorithme des k -moyennes : Principe général

Algorithme des k -moyennes

Objectif : partitionner X en classes X_1, \dots, X_k .

- 1 Soit c_1, \dots, c_k des vecteurs choisis aléatoirement.
- 2 Associer chaque donnée x à la classe X_i telle que $d(x, c_i)$ soit minimum.

Attention : dans l'algorithme des k -moyennes, k est le nombre de classes alors que dans l'algorithme des plus proches voisins, k est le nombre de voisins.

Algorithme des k -moyennes

Objectif : partitionner X en classes X_1, \dots, X_k .

- 1 Soit c_1, \dots, c_k des vecteurs choisis aléatoirement.
- 2 Associer chaque donnée x à la classe X_i telle que $d(x, c_i)$ soit minimum.
- 3 Recalculer les centres des classes $c_i = \overline{X_i}$.

Attention : dans l'algorithme des k -moyennes, k est le nombre de classes alors que dans l'algorithme des plus proches voisins, k est le nombre de voisins.

Algorithme des k -moyennes

Objectif : partitionner X en classes X_1, \dots, X_k .

- 1 Soit c_1, \dots, c_k des vecteurs choisis aléatoirement.
- 2 Associer chaque donnée x à la classe X_i telle que $d(x, c_i)$ soit minimum.
- 3 Recalculer les centres des classes $c_i = \overline{X_i}$.
- 4 Si les centres ont changé, revenir à l'étape 2.

Algorithme des k -moyennes : Principe général

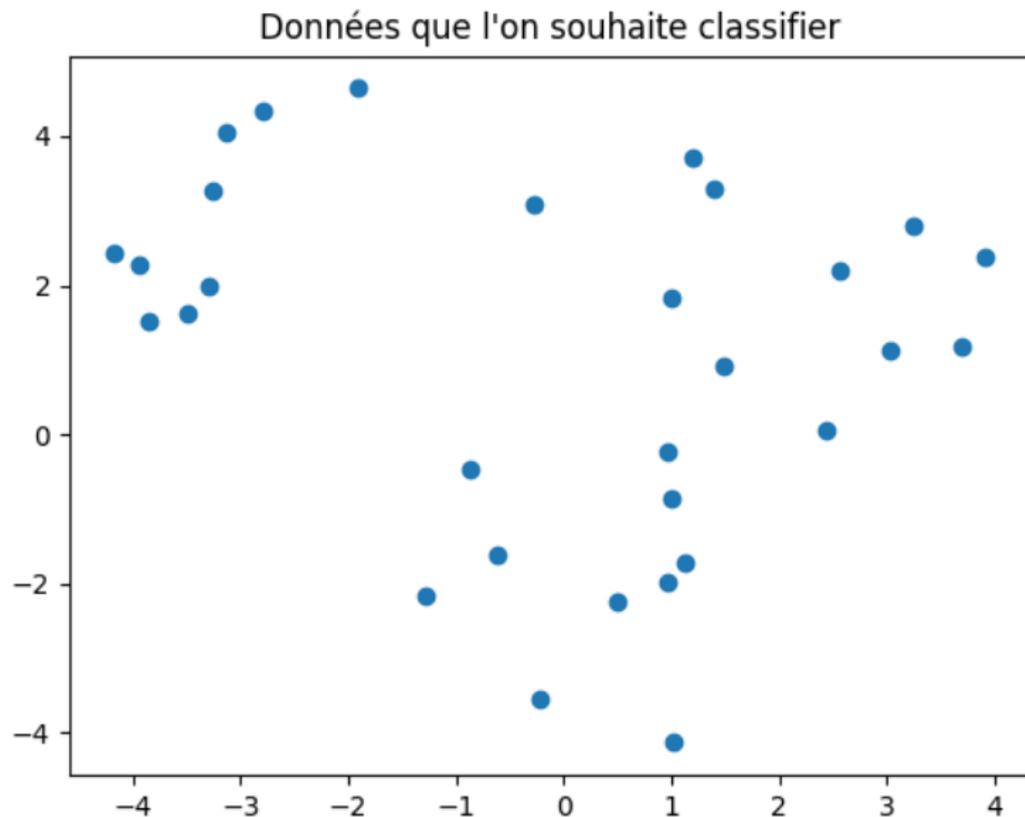
Algorithme des k -moyennes

Objectif : partitionner X en classes X_1, \dots, X_k .

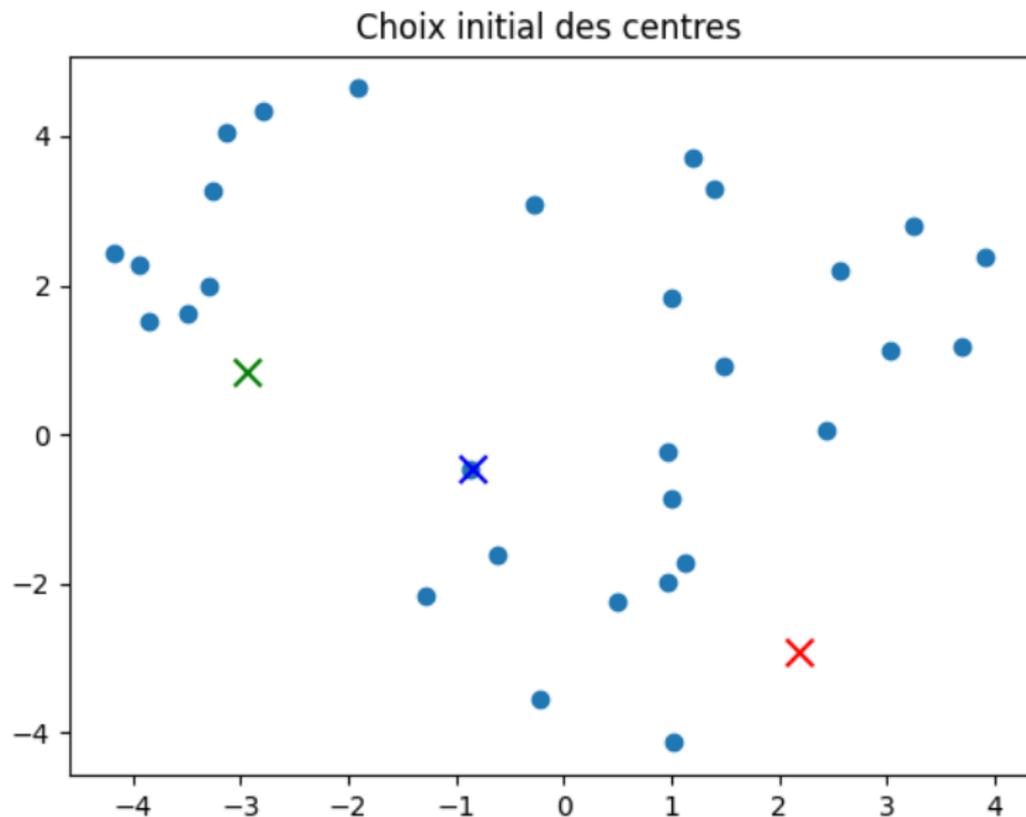
- 1 Soit c_1, \dots, c_k des vecteurs choisis aléatoirement.
- 2 Associer chaque donnée x à la classe X_i telle que $d(x, c_i)$ soit minimum.
- 3 Recalculer les centres des classes $c_i = \overline{X_i}$.
- 4 Si les centres ont changé, revenir à l'étape 2.

Attention : dans l'algorithme des k -moyennes, k est le nombre de classes alors que dans l'algorithme des plus proches voisins, k est le nombre de voisins.

Algorithme des k -moyennes : Exemple

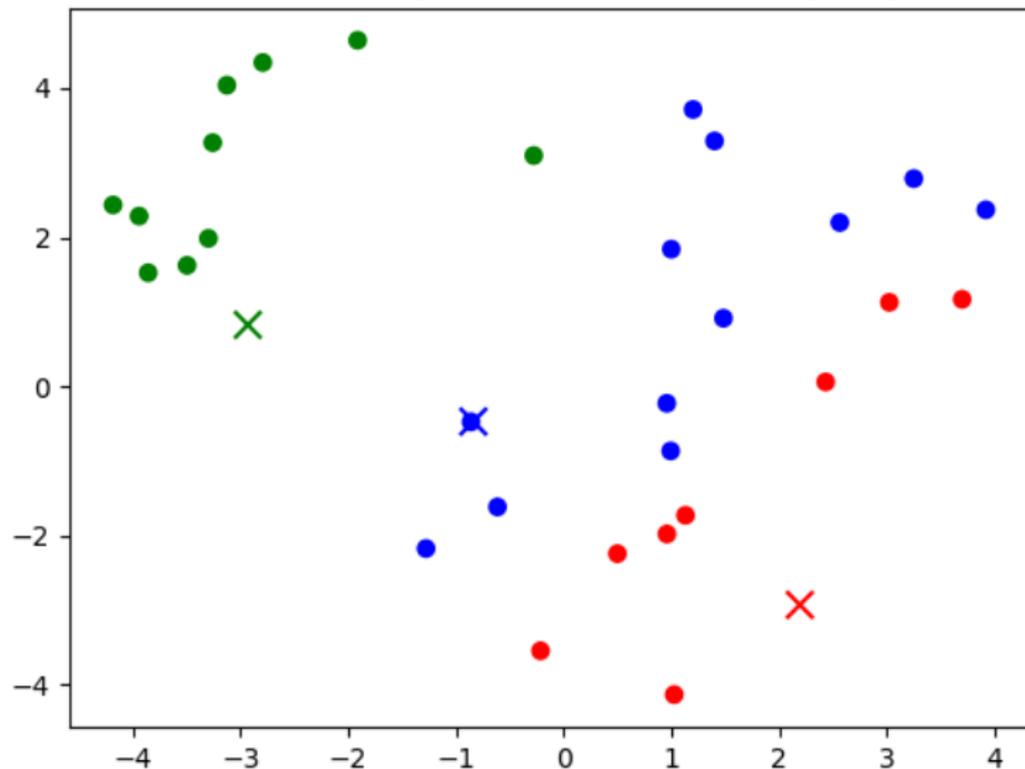


Algorithme des k -moyennes : Exemple

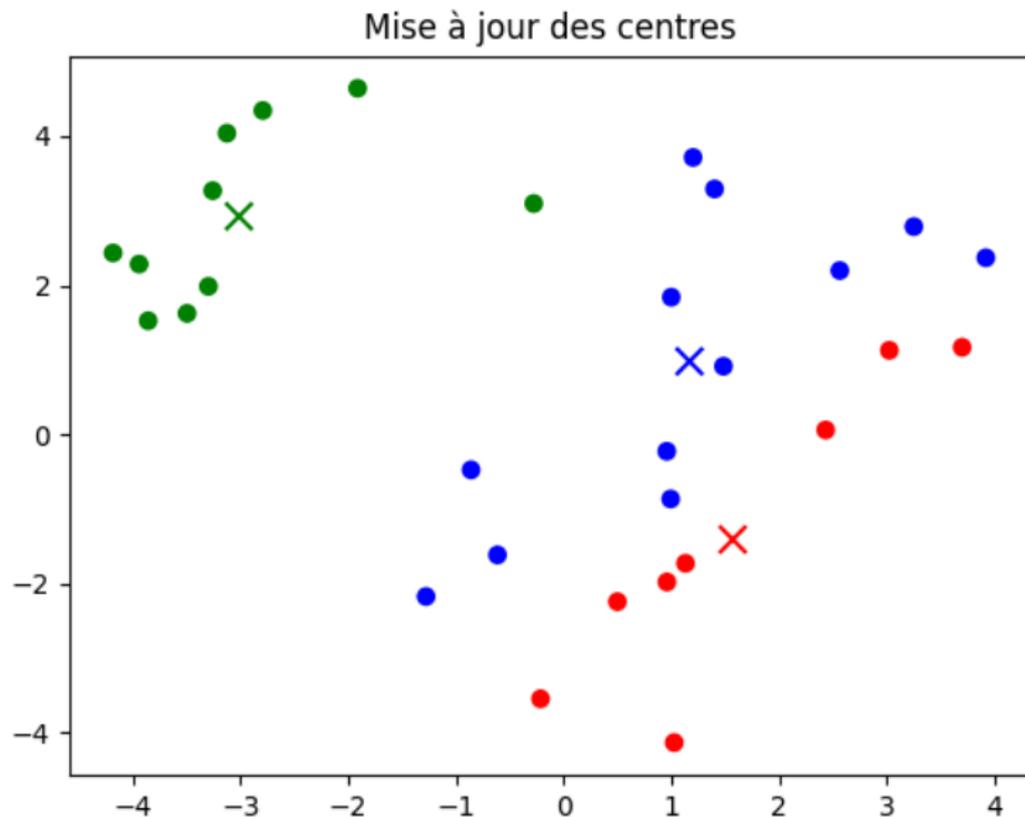


Algorithme des k -moyennes : Exemple

Association de chaque donnée au centre le plus proche

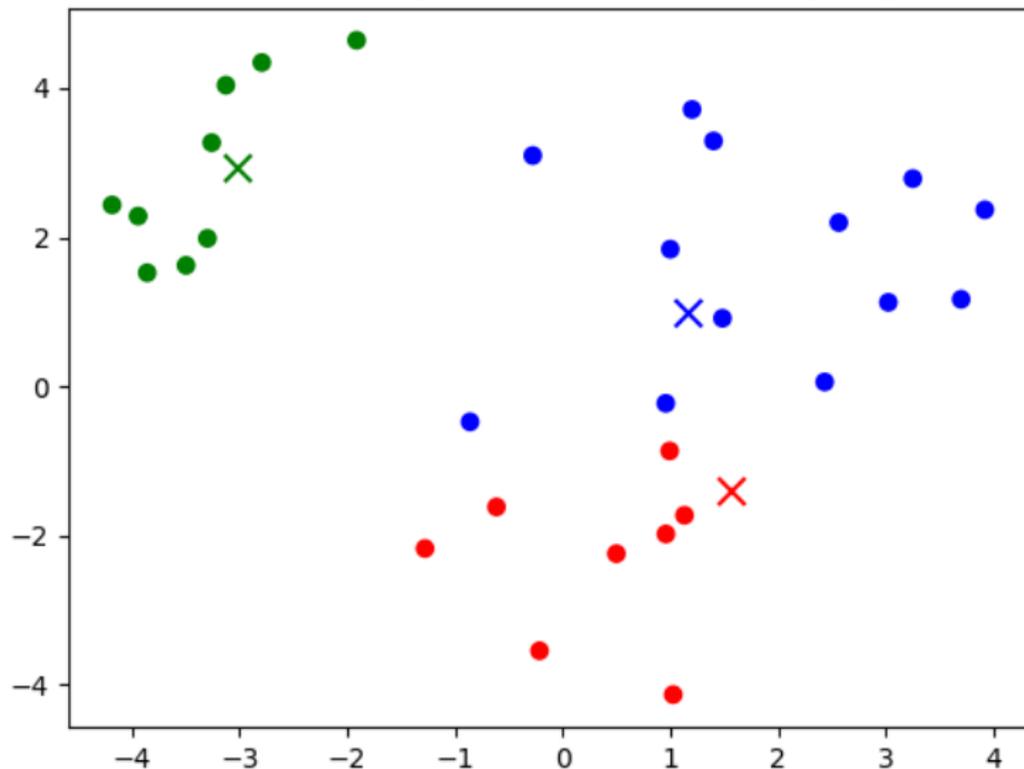


Algorithme des k -moyennes : Exemple

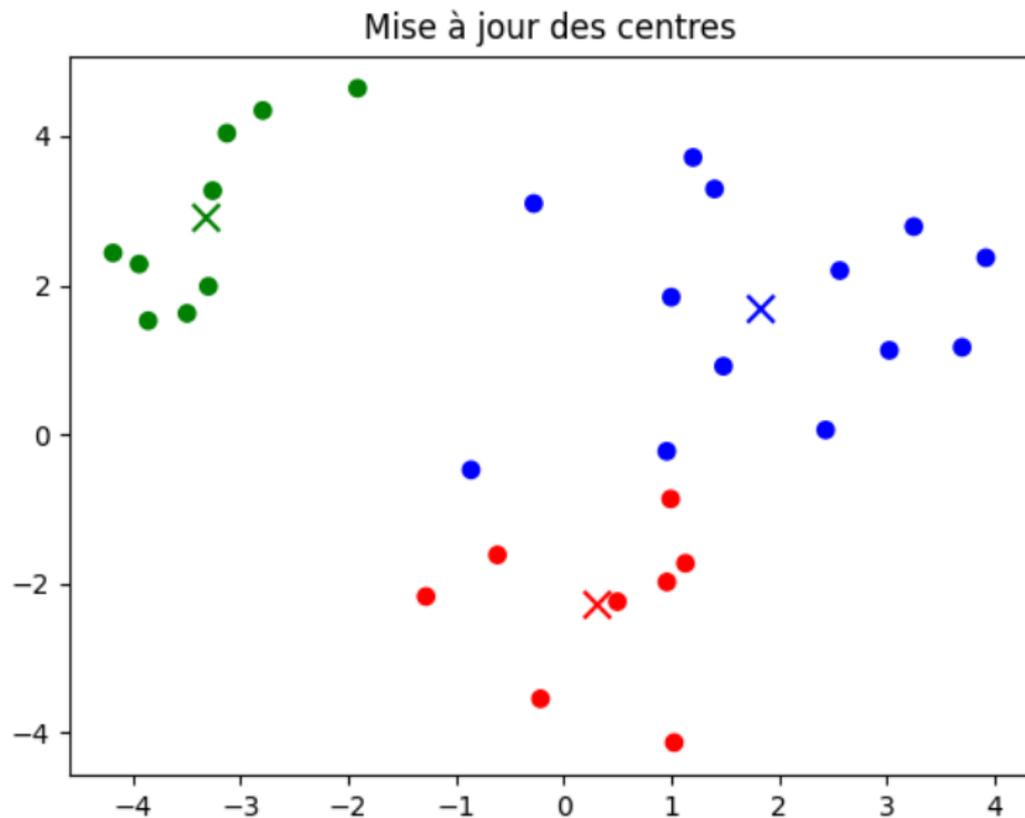


Algorithme des k -moyennes : Exemple

Association de chaque donnée au centre le plus proche

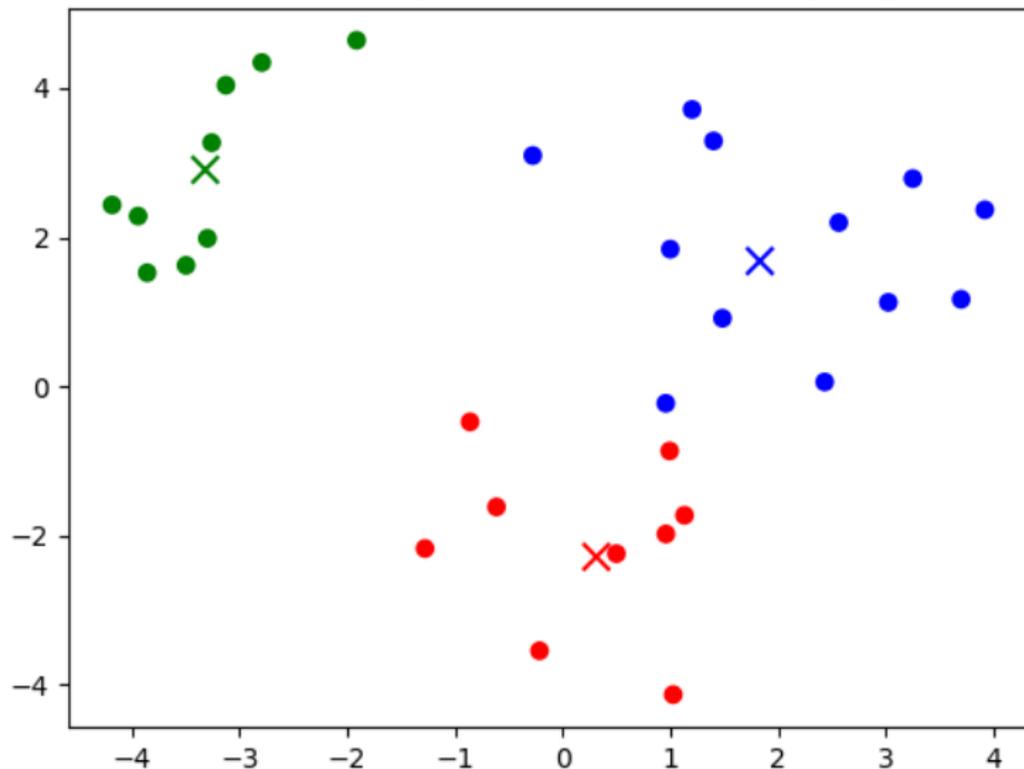


Algorithme des k -moyennes : Exemple

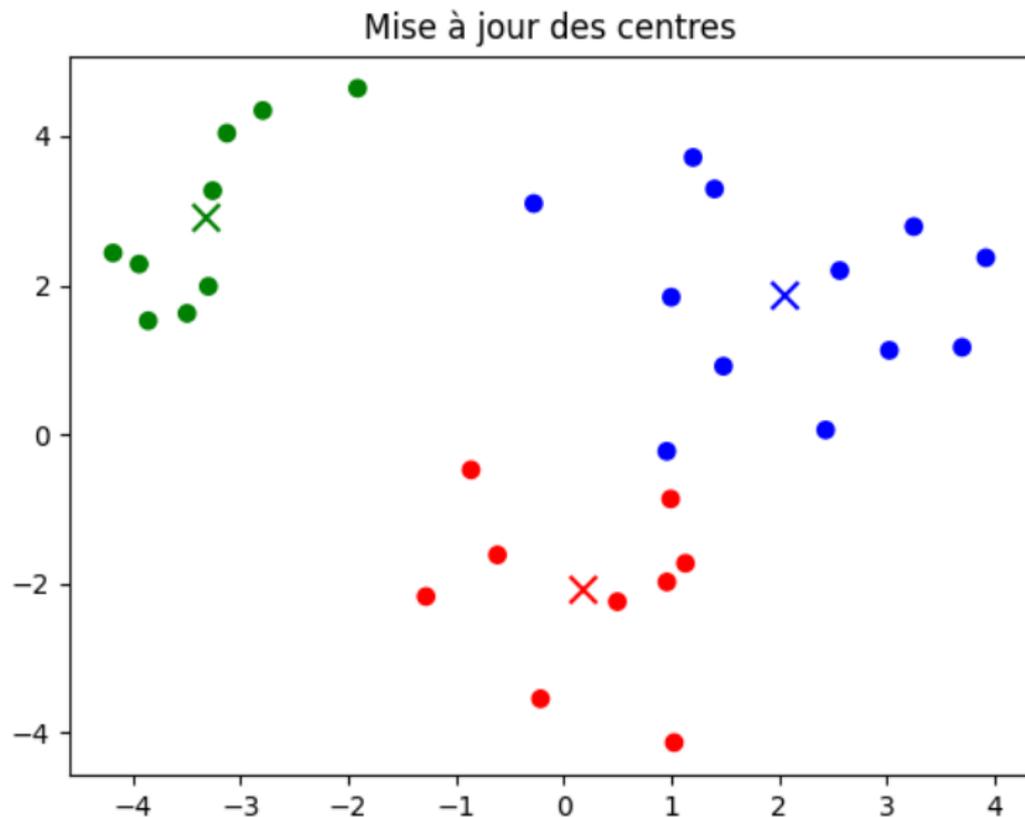


Algorithme des k -moyennes : Exemple

Association de chaque donnée au centre le plus proche

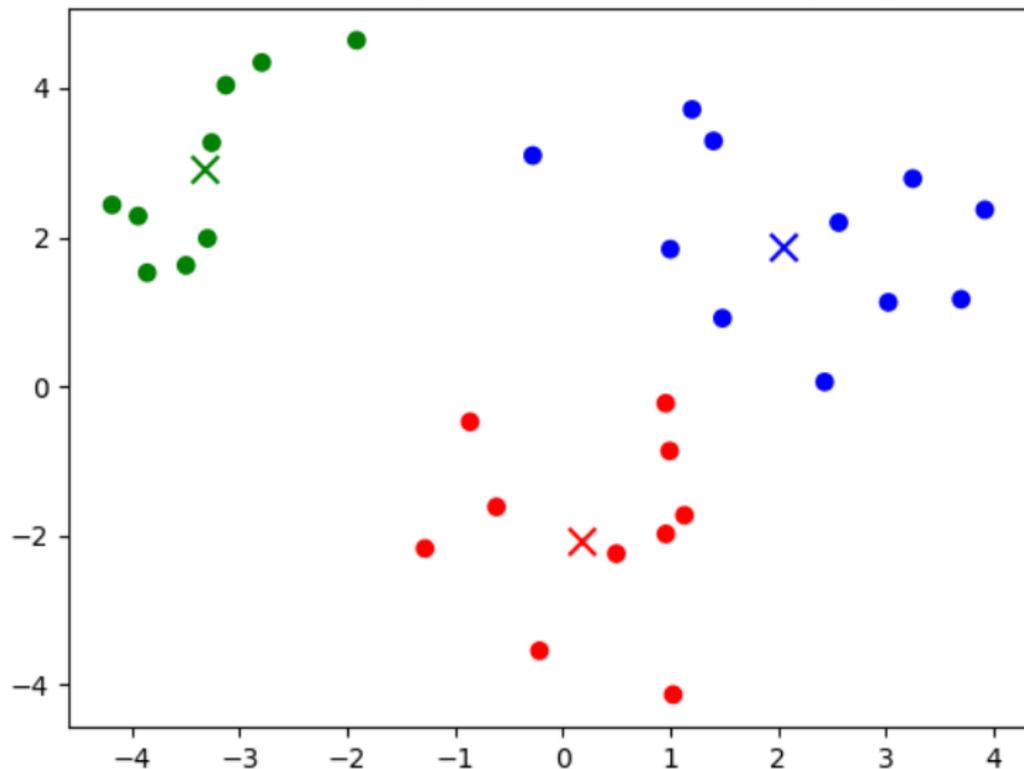


Algorithme des k -moyennes : Exemple

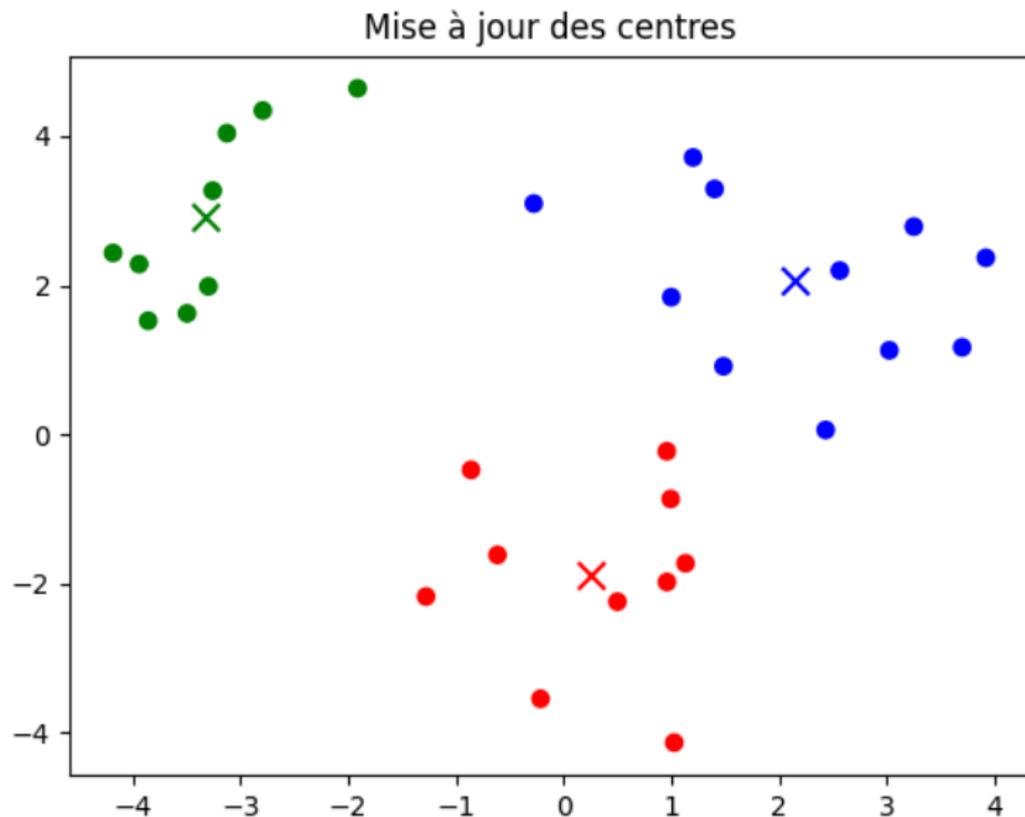


Algorithme des k -moyennes : Exemple

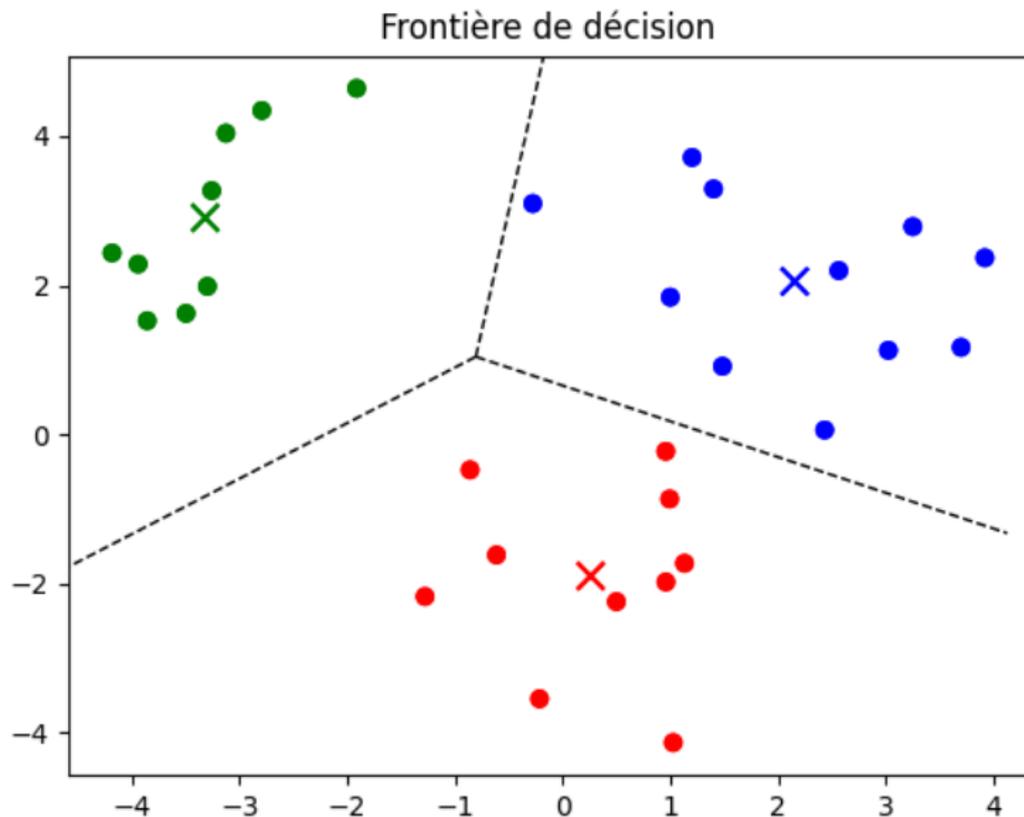
Association de chaque donnée au centre le plus proche



Algorithme des k -moyennes : Exemple



Algorithme des k -moyennes : Exemple



Algorithme des k -moyennes : Terminaison

Théorème (HP)

L'algorithme des k -moyennes termine (pas de boucle infinie).

Preuve :

Théorème (HP)

L'algorithme des k -moyennes termine (pas de boucle infinie).

Preuve :

On montre que I est un variant de boucle : I décroît strictement à chaque itération et ne peut prendre qu'un nombre fini de valeurs, donc le nombre d'itérations est fini.

Théorème (HP)

L'algorithme des k -moyennes termine (pas de boucle infinie).

Preuve :

On montre que I est un variant de boucle : I décroît strictement à chaque itération et ne peut prendre qu'un nombre fini de valeurs, donc le nombre d'itérations est fini.

- Il existe un nombre fini de partitions de X en k classes, donc l'inertie I peut prendre qu'un nombre fini de valeurs.
- Il suffit donc de montrer que I décroît strictement à chaque itération.

Algorithme des k -moyennes : Terminaison

Preuve (suite) :

Il suffit donc de montrer que I décroît strictement à chaque itération :

- Réassigner x de X_i à X_j si $d(x, c_i) > d(x, c_j)$ fait diminuer I .

Algorithme des k -moyennes : Terminaison

Preuve (suite) :

Il suffit donc de montrer que I décroît strictement à chaque itération :

- Réassigner x de X_i à X_j si $d(x, c_i) > d(x, c_j)$ fait diminuer I .
- Recalculer les centres des classes fait diminuer I , d'après le lemme suivant :

Lemme

Si X est un ensemble de vecteurs alors $f : y \mapsto \sum_{x \in X} d(x, y)^2$ est minimum pour $y = \bar{X}$.

Algorithme des k -moyennes : Choisir k

Question

Comment choisir le nombre k de classes ?

Algorithme des k -moyennes : Choisir k

Question

Comment choisir le nombre k de classes ?

On peut calculer l'inertie obtenue pour différentes valeurs de k .

Question

Comment choisir le nombre k de classes ?

On peut calculer l'inertie obtenue pour différentes valeurs de k .
Cependant, plus k est grand, plus l'inertie diminue jusqu'à valoir 0 si k est égal au nombre de données (ce qui n'a aucun intérêt).

Question

Comment choisir le nombre k de classes ?

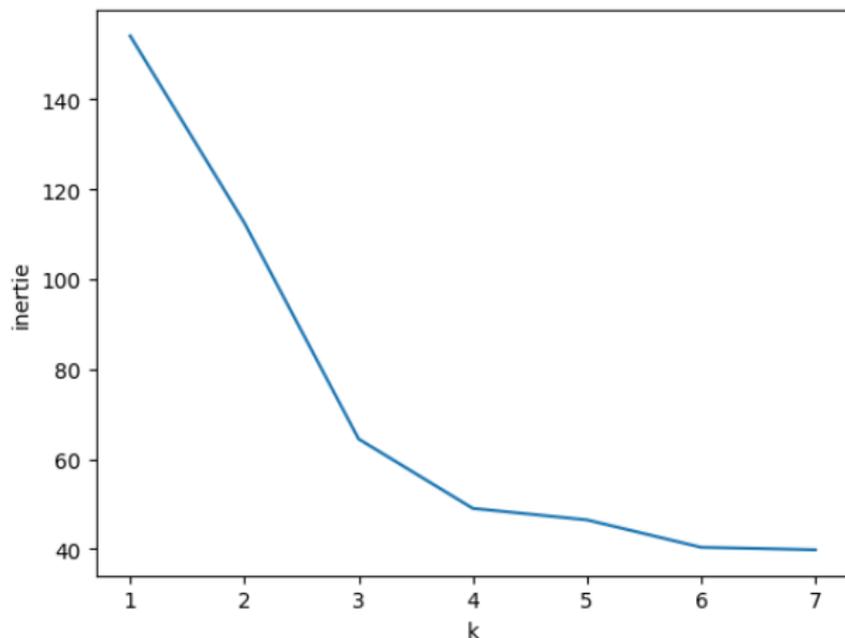
On peut calculer l'inertie obtenue pour différentes valeurs de k .

Cependant, plus k est grand, plus l'inertie diminue jusqu'à valoir 0 si k est égal au nombre de données (ce qui n'a aucun intérêt).

On choisit donc la plus grande valeur de k pour laquelle l'inertie diminue de façon significative.

Algorithme des k -moyennes : Choisir k

Méthode du coude (*elbow method*) : On choisit la plus grande valeur de k pour laquelle l'inertie diminue de façon significative.



On choisit $k = 3$ ou $k = 4$.

Algorithme des k -moyennes : Non optimalité

L'algorithme des k -moyennes converge toujours, mais pas forcément vers un minimum global de l'inertie (seulement vers un minimum local).

Question

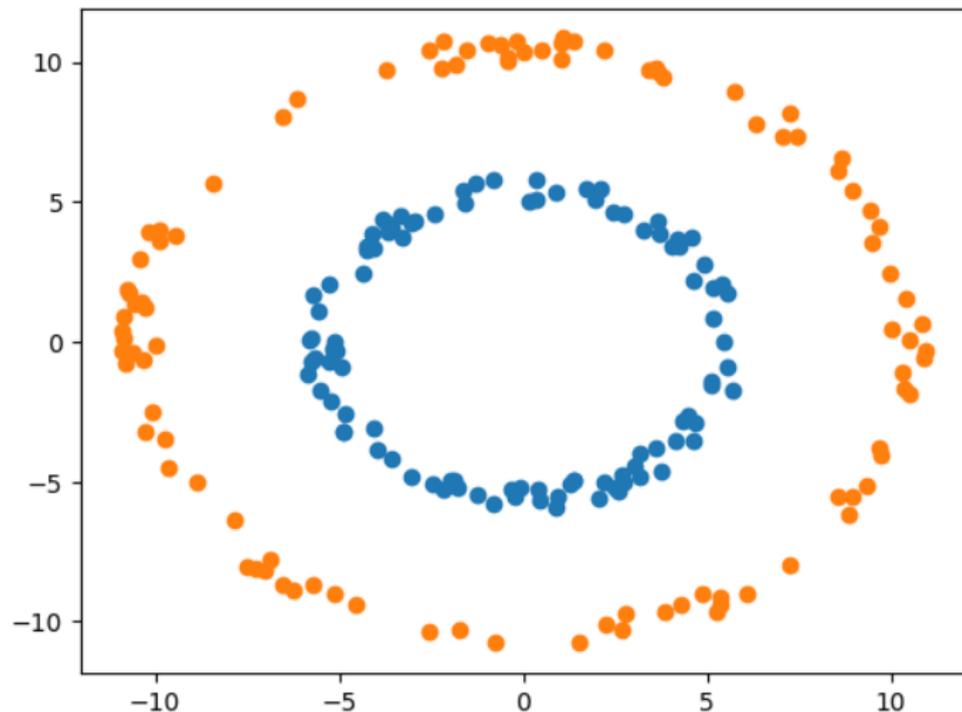
Donner un exemple d'exécution de l'algorithme des k -moyennes qui ne donne pas un clustering d'inertie optimale.

Algorithme des k -moyennes : Classification de nouvelles données

On peut utiliser l'algorithme des k -moyennes pour classifier une nouvelle donnée x : on associe x à la classe dont le centre est le plus proche de x .

Algorithme des k -moyennes : Limites

L'algorithme des k -moyennes ne marche que sur des données linéairement séparables (pouvant être séparées par un hyperplan).



Algorithme des k -moyennes : Interprétations

Les centres obtenus à la fin de l'algorithme donnent des informations sur les constituants des classes.

Voici par exemple les centres obtenus avec $k = 10$ sur des chiffres manuscrits :



Algorithme des k -moyennes : Interprétations

Il est également intéressant de regarder l'équation des frontières de décision, pour savoir quels sont les attributs qui permettent de discriminer les données.

Si par exemple l'équation de la frontière de décision entre les classes 1 et 2 est $ax + by = 0$ avec $a \gg b$, alors l'attribut x est plus discriminant que y pour pouvoir distinguer les classes 1 et 2.

Application à la compression d'images

Une image est souvent représentée par une matrice dont chaque élément (pixel) est un triplet de valeurs entre 0 et 255 (rouge, vert, bleu).

Application à la compression d'images

Une image est souvent représentée par une matrice dont chaque élément (pixel) est un triplet de valeurs entre 0 et 255 (rouge, vert, bleu).

Question

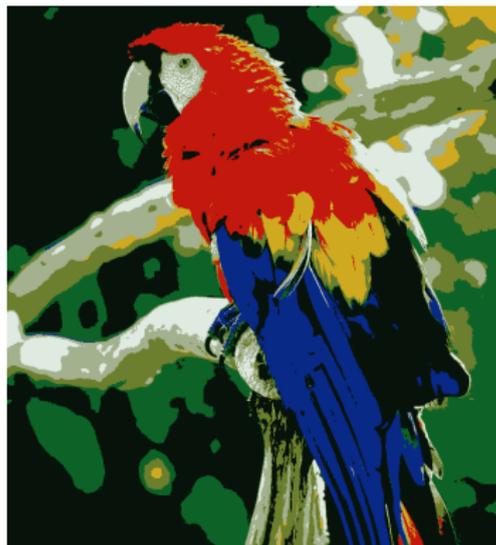
Combien y a-t-il de couleurs différentes possibles ?

On peut souhaiter limiter le nombre de couleurs différentes :

- Sur un écran avec un nombre plus limité de couleurs (console...)
- Pour diminuer la taille de l'image : si on utilise k couleurs, on peut utiliser stocker un entier entre 1 et k pour chaque pixel au lieu de trois entiers entre 0 et 255.

Application à la compression d'images

On applique l'algorithme des k -moyennes sur les pixels pour obtenir k couleurs différentes (ici $k = 8$) et on remplace chaque pixel par la couleur la plus proche.



Classification hiérarchique ascendante (CHA)

Classification hiérarchique ascendante

Entrée : Des données X

Sortie : Une partition de X en classes

Mettre chaque $x \in X$ dans une classe différente

Tant que nécessaire :

└ Fusionner les deux classes les plus proches

Classification hiérarchique ascendante (CHA)

On peut choisir d'arrêter l'algorithme à un certain nombre de classes ou quand la distance minimum entre deux classes est supérieure à un certain seuil.

Classification hiérarchique ascendante (CHA)

On peut choisir d'arrêter l'algorithme à un certain nombre de classes ou quand la distance minimum entre deux classes est supérieure à un certain seuil.

Exemples de distances entre classes A et B :

- Distance minimum : $\min_{a \in A, b \in B} d(a, b)$.
- Distance maximum : $\max_{a \in A, b \in B} d(a, b)$.
- Distance moyenne : $\frac{1}{|A||B|} \sum_{a \in A, b \in B} d(a, b)$.
- ...

