Apprentissage non-supervisé

- Typologie de la réduction de dimension
  - méthode de base: ACP
  - “groupement (clustering) des dimensions”
  - extensions:
    - ACP non-linéaire (NLPCA)
    - échelonnement multidimensionnel (multidimensional scaling – MDS)
    - cartes auto-organisatrices (self-organizing maps – SOM)
    - local linear embedding (LLE)
    - ISOMAP
    - courbes principales (principal curves)

Apprentissage non-supervisé

- Typologie de groupement (clustering)
  - méthode de base: k-moyennes
  - groupement (clustering) des points
  - extensions:
    - k-moyennes flou (fuzzy k-means) $\equiv$ SOM
    - densités du mélange $\subseteq$ k-moyennes flou
    - groupement hiérarchique (hierarchical clustering)

Apprentissage non-supervisé

- Densités du mélange
  - modèle semi-paramétrique:

$$p(\mathbf{x}|\Theta) = \sum_{\ell=1}^{k} p(\mathbf{x}|C_\ell, \Theta_\ell) P(C_\ell)$$

  - k classes
  - vecteur des paramètres: $\Theta = (\Theta_1, \ldots, \Theta_k)$
  - densités de composante: $p(\mathbf{x}|C_\ell, \Theta_\ell)$
  - probabilités a-priori (paramètres du mélange): $P(C_\ell)$

- Objectif
  - estimer Θ, $(P(C_\ell))$ étant donné $X_n = \{\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \ldots, \mathbf{X}_n\}$

Apprentissage non-supervisé

- Approche de maximum de vraisemblance
  - $p(X_n|\Theta) = \prod_{i=1}^{n} p(\mathbf{x}_i|\Theta)$
  - $l = \sum_{i=1}^{n} \log p(\mathbf{x}_i|\Theta)$

$$\begin{aligned} \nabla_{\Theta_\ell} l &= \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{p(\mathbf{x}_i|\Theta)} \nabla_{\Theta_\ell} \left[\sum_{j=1}^{k} p(\mathbf{x}_i|C_j, \Theta_j) P(C_j) \right] \\ &= \sum_{i=1}^{n} P(C_\ell|\mathbf{x}_i, \Theta) \nabla_{\Theta_\ell} \log p(\mathbf{x}_i|C_\ell, \Theta_\ell) = 0 \end{aligned}$$

  - où $P(C_\ell|\mathbf{x}_i, \Theta) = \dfrac{p(\mathbf{x}_i|C_\ell, \Theta_\ell) P(C_\ell)}{p(\mathbf{x}_i|\Theta)}$

Apprentissage non-supervisé

- Algorithme itératif

DENSITÉSDUMÉLANGE(X_n)

1 $\Theta^{(0)} \leftarrow \left\{\Theta_1^{(0)}, \ldots, \Theta_k^{(0)}\right\}$, $j \leftarrow 0$

2 **faire**

3 **pour** $\ell \leftarrow 1$ **à** k **faire**

4 **pour** $i \leftarrow 1$ **à** n **faire**

5 $$P_{\ell,i}^{(j)} = P(C_\ell|\mathbf{x}_i, \Theta^{(j)}) \leftarrow \frac{p(\mathbf{x}_i|C_\ell, \Theta_\ell^{(j)})P(C_\ell)}{p(\mathbf{x}_i|\Theta^{(j)})}$$

6 **pour** $\ell \leftarrow 1$ **à** k **faire**

7 $$\Theta_\ell^{(j+1)} \leftarrow solution\left\{\sum_{i=1}^{n} P_{\ell,i}^{(j)} \nabla_{\Theta_\ell} \log p(\mathbf{x}_i|C_\ell, \Theta_\ell) = 0\right\}$$

8 $j \leftarrow j+1$

9 **jusqu'à** $\left(1 - \frac{l^{(j)}}{l^{(j+1)}}\right) < seuil$

Apprentissage non-supervisé

- k-moyennes flou (fuzzy k-means)
  - $\mathbf{x}_i$ appartient à V_ℓ avec un poids $\mathbf{W}_{i,\ell}$ ($\sim P(C_\ell|x_i)$)
  - $\mathbf{W}_{i,\ell}$ est normalisé pour tous les points $\mathbf{x}_i$:

$$\sum_{\ell=1}^{k} \mathbf{W}_{i,\ell} = 1$$

  - objectif: minimiser

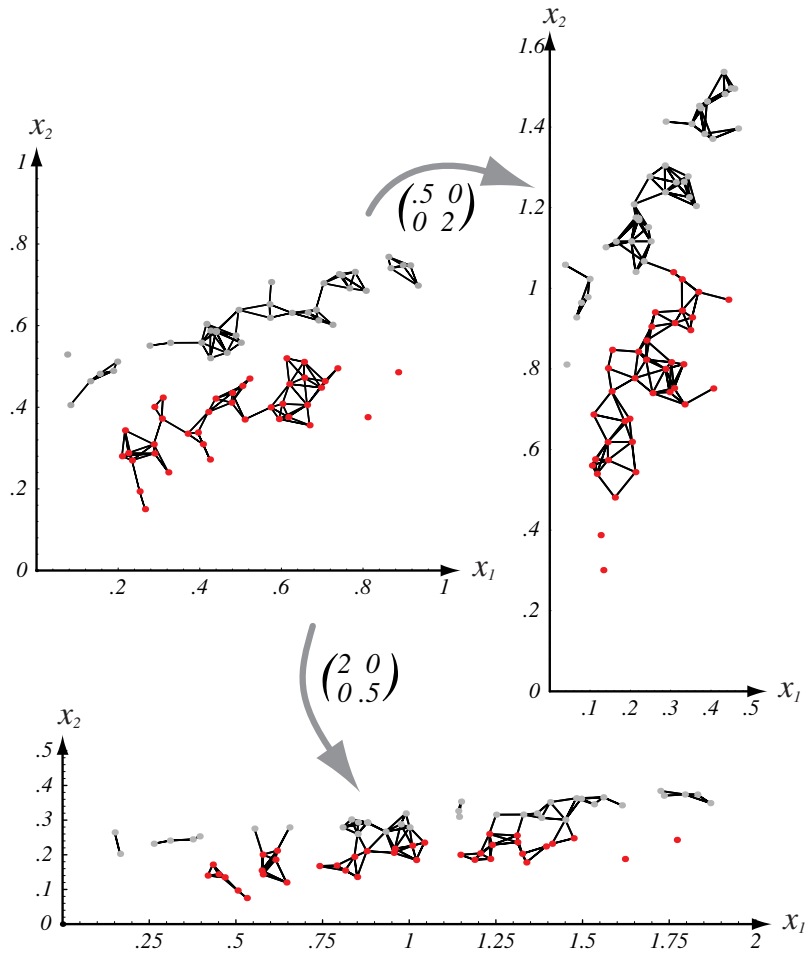
$$J_{\text{fuz}} = \sum_{\ell=1}^{k} \sum_{i=1}^{n} \mathbf{W}_{i,\ell}^{b} \|\mathbf{x}_i - \mu_\ell\|^2$$

Apprentissage non-supervisé

- Solution ($b > 1$)
  - $\mu_\ell = \dfrac{\sum_{i=1}^{n} \mathbf{W}_{i,\ell}^{b} \mathbf{x}_i}{\sum_{i=1}^{n} \mathbf{W}_{i,\ell}^{b}}$
  - $W_{i,\ell} = \dfrac{(1/d_{i\ell})^{1/(b-1)}}{\sum_{\ell'=1}^{k} (1/d_{i\ell'})^{1/(b-1)}}$, $(d_{i\ell} = \|\mathbf{x}_i - \mu_\ell\|^2)$
  - algorithme itératif

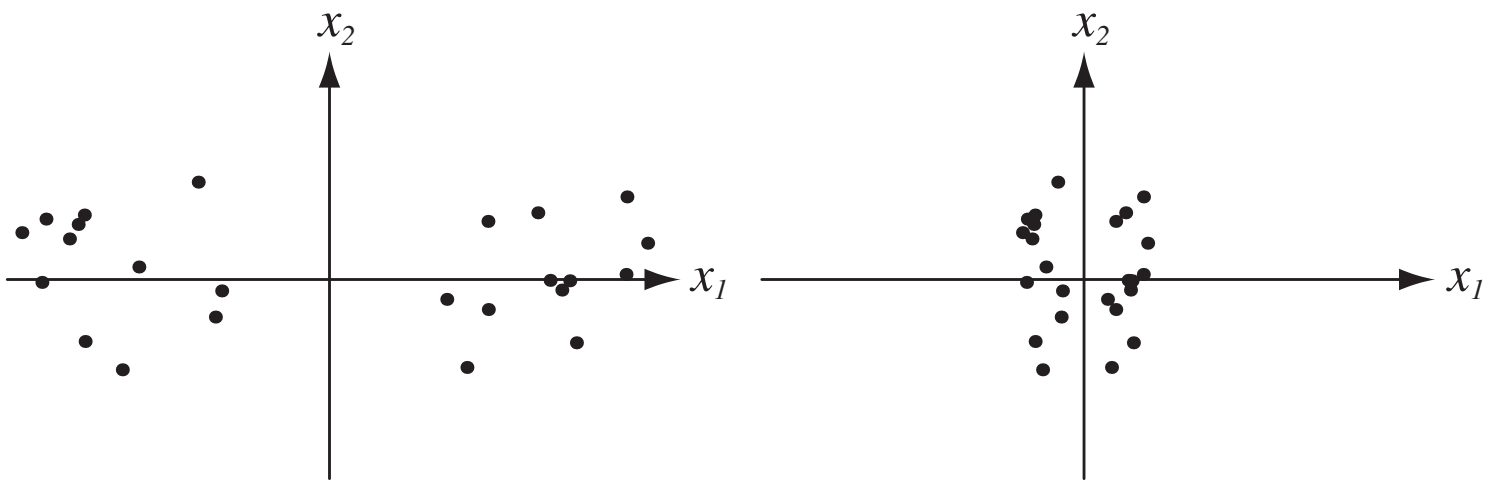
Apprentissage non-supervisé

- Normalisation



Apprentissage non-supervisé

- Normalisation



Apprentissage non-supervisé

- Critères différents
  - métrique de Minkowski:

$$d(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \left(\sum_{i=1}^{d} |x_i - x_i'|^p\right)^{1/p}$$

  - mesures de similarité:

$$s(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \frac{\mathbf{x}^t\mathbf{x}'}{\|\mathbf{x}\|\ \|\mathbf{x}'\|}$$

    - $\mathbf{x}^t\mathbf{x}'$ est le nombre des attributs partagés (variables binaires)
    - $\|\mathbf{x}\|\ \|\mathbf{x}'\|$ est la moyenne géométrique des attributs possédés par $\mathbf{x}$ et $\mathbf{x}'$
    - $s(\mathbf{x},\mathbf{x}')$: possession relative des attributs

Apprentissage non-supervisé

- Critères différents
  - versions différentes:
    - fraction des attributs partagés: $s(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \dfrac{\mathbf{x}^t\mathbf{x}'}{d}$
    - distance de Tanimoto: $s(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \dfrac{\mathbf{x}^t\mathbf{x}'}{\mathbf{x}^t\mathbf{x} + \mathbf{x}'^t\mathbf{x}' - \mathbf{x}^t\mathbf{x}'}$

Apprentissage non-supervisé

- Critères différents
  - métrique quadratique:

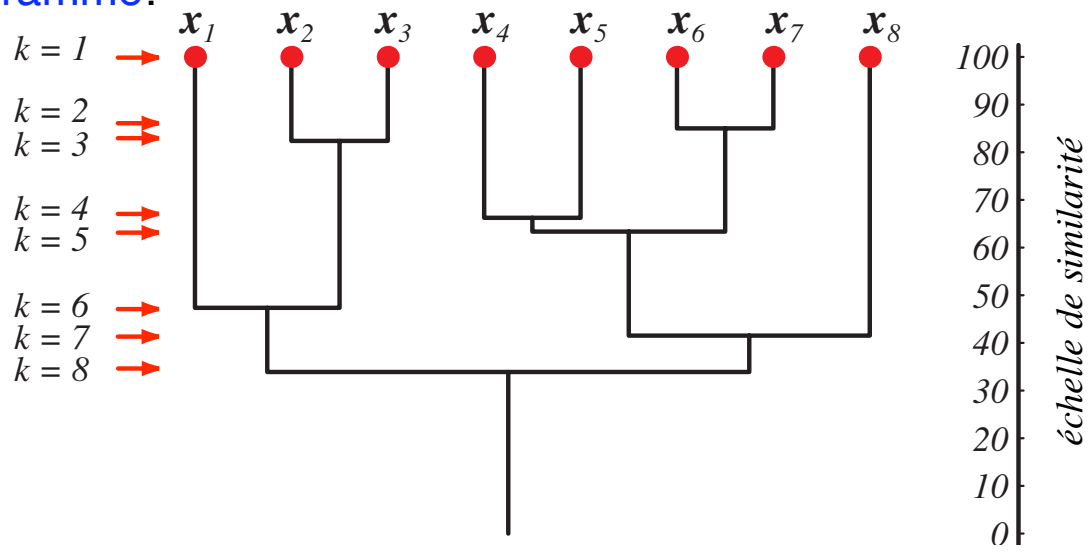
$$J_e = \sum_{i=1}^{c} \sum_{\mathbf{x} \in V_i} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{v}_i\|^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{c} n_i \bar{s}_i$$

  - où $\bar{s}_i = \frac{1}{n_i^2} \sum_{\mathbf{x} \in V_i} \sum_{\mathbf{x}' \in V_i} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2$
  - généralisations:

$$\begin{aligned} \bar{s}_i &= \frac{1}{n_i^2} \sum_{\mathbf{x} \in V_i} \sum_{\mathbf{x}' \in V_i} s(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \\ \bar{s}_i &= \max_{\mathbf{x}, \mathbf{x}' \in V_i} s(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \end{aligned}$$

Apprentissage non-supervisé

- Groupement hiérarchique
  - dendogramme:



Apprentissage non-supervisé

- Groupement hiérarchique agglomératif

GROUPEMENTHIERARCHIQUEAGGLOMERATIF(X_n, c)

1 $\widehat{c} \leftarrow n$
2 **pour** $i \leftarrow 1$ **à** n **faire**
3 $\quad V_i \leftarrow \{\mathbf{x}_i\}$
4 **faire**
5 $\quad$ trouver les groupes les plus proches V_i et V_j
6 $\quad$ fusionner V_i et V_j
7 $\quad \widehat{c} \leftarrow \widehat{c} - 1$
8 **jusqu'à** $c = \widehat{c}$

Apprentissage non-supervisé

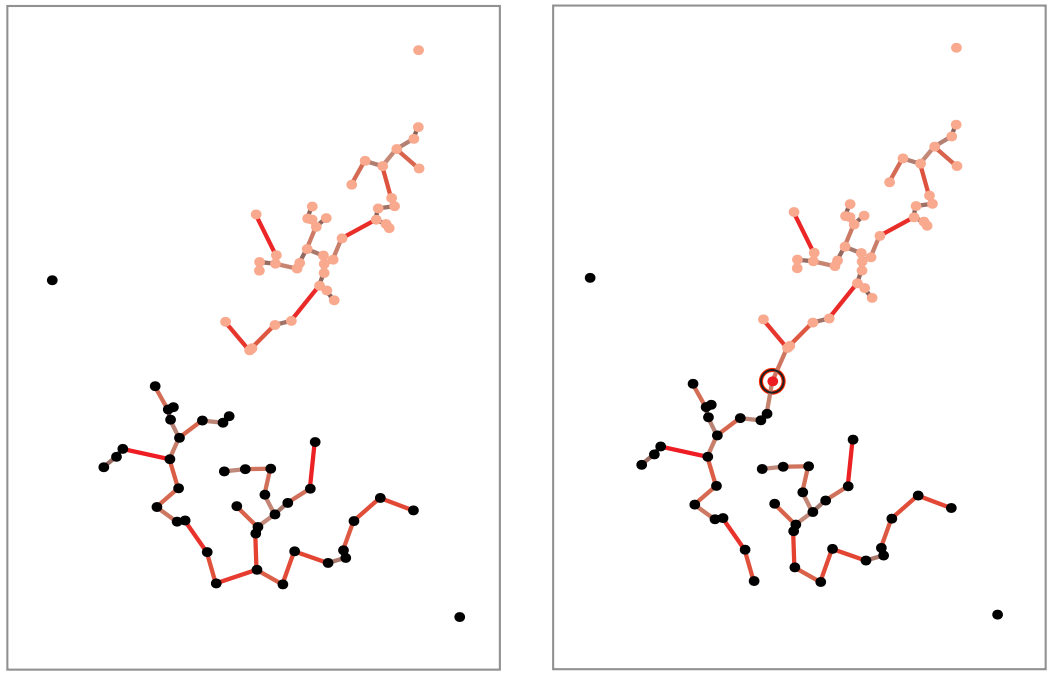
- Distances des groupes
  - $d_{min}(V_i, V_j) = \min_{\substack{\mathbf{x} \in V_i \\ \mathbf{x}' \in V_j}} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|$
  - $d_{max}(V_i, V_j) = \max_{\substack{\mathbf{x} \in V_i \\ \mathbf{x}' \in V_j}} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|$
  - $d_{avg}(V_i, V_j) = \frac{1}{n_i n_j} \sum_{\mathbf{x} \in V_i} \sum_{\mathbf{x}' \in V_j} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|$
  - $d_{mean}(V_i, V_j) = \|_i - _j\|$

Apprentissage non-supervisé

- Groupement hiérarchique – plus proche voisin
  - $d_{min}(V_i, V_j) = \min_{\substack{\mathbf{x} \in V_i \\ \mathbf{x}' \in V_j}} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|$
  - algorithme du lien simple (single-linkage)
  - arbre couvrant minimal (Kruskal)

Apprentissage non-supervisé

- Groupement hiérarchique – plus proche voisin

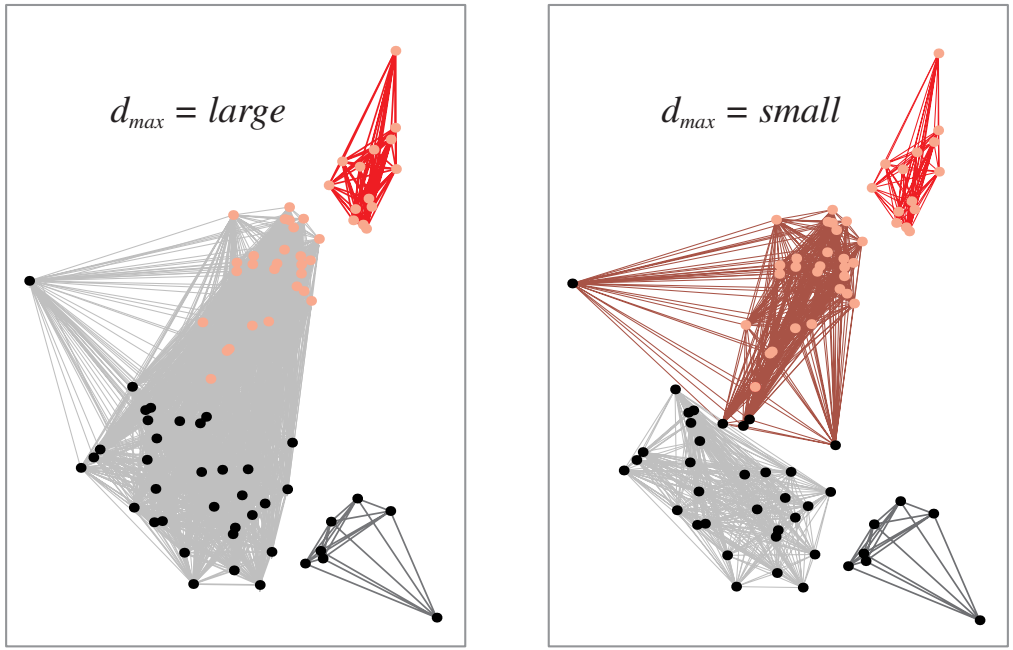


Apprentissage non-supervisé

- Groupement hiérarchique – plus loin voisin
  - $d_{max}(V_i, V_j) = \max_{\substack{\mathbf{x} \in V_i \\ \mathbf{x}' \in V_j}} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|$
  - algorithme du lien complet (complete linkage)
  - augmenter le diamètre le moins possible

Apprentissage non-supervisé

- Groupement hiérarchique – plus loin voisin



Apprentissage non-supervisé

- Groupement hiérarchique incrémentiel

GROUPEMENTHIERARCHIQUEINCREMENTIEL(X_n, c)

1 $\widehat{c} \leftarrow n$
2 **pour** $i \leftarrow 1$ **à** n **faire**
3 $\quad V_i \leftarrow \{\mathbf{x}_i\}$
4 **faire**
5 $\quad$ trouver V_i et V_j dont la fusion change une critère le moins
6 $\quad$ fusionner V_i et V_j
7 $\quad \widehat{c} \leftarrow \widehat{c} - 1$
8 **jusqu'à** $c = \widehat{c}$

- critère: $J_e = \sum_{i=1}^{c} \sum_{\mathbf{x} \in V_i} \|\mathbf{x} - {}_i\|^2$

- distance: $d_e(V_i, V_j) = \sqrt{\frac{n_i n_j}{n_i + n_j}} \|{}_i - {}_j\|$

Apprentissage non-supervisé

- Groupement hiérarchique – approche de théorie de graphe
- Matrice (graphe) de similarité

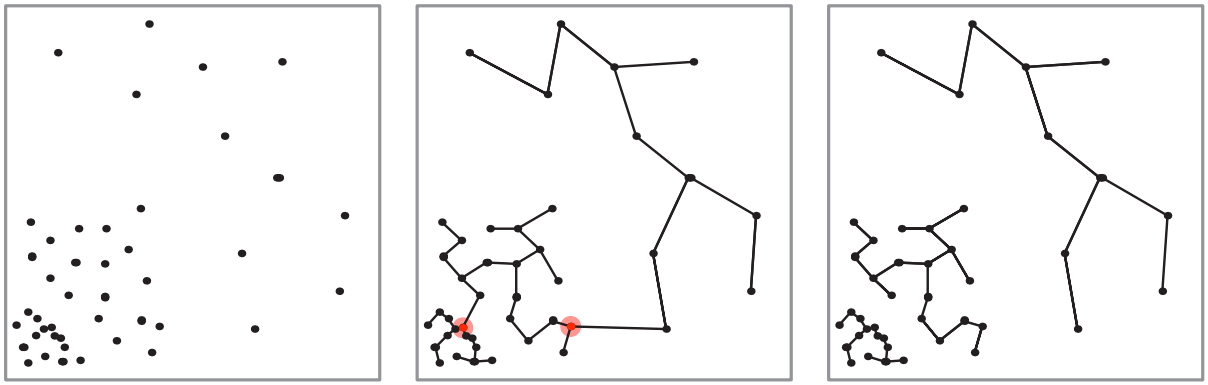
$$S_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) < d_0 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

  - $d_{min} \longrightarrow$ composantes connexes
  - $d_{max} \longrightarrow$ sous-graphes complets

- Approche de division
- Statistique de longueurs des arrêtes
- Chemin de diamètre

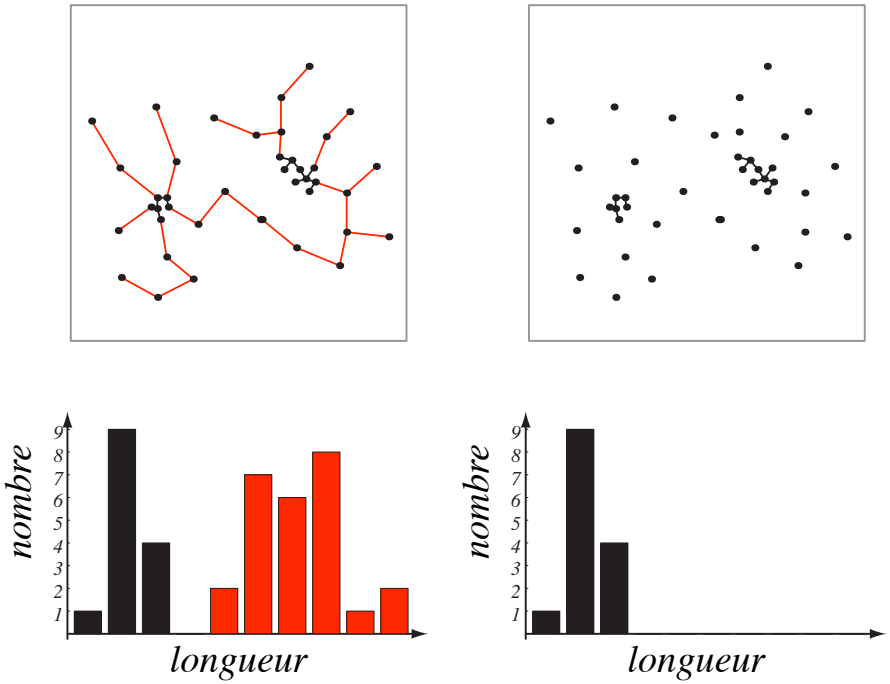
Apprentissage non-supervisé

- Groupement hiérarchique – approche de division
  - construire un arbre couvrant minimal
  - couper les arrêtes “longues”



Apprentissage non-supervisé

- Groupement hiérarch. – statistique de longueurs des arrêtes



Apprentissage non-supervisé

- Groupement hiérarchique – métrique générée
  - $\delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ "dissimilarité" non-métrique
    - non-négativité: $\delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \geq 0$
    - réflexivité: $\delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 0$ sii $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$
  - "dissimilarité" des groupes
    - $\delta_{min}(V_i, V_j) = \min_{\substack{\mathbf{x} \in V_i \\ \mathbf{x}' \in V_j}} \delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$
    - $\delta_{max}(V_i, V_j) = \max_{\substack{\mathbf{x} \in V_i \\ \mathbf{x}' \in V_j}} \delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$
  - $d(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ métrique générée:
    - le niveau de groupement plus bas où $\mathbf{x}$ et $\mathbf{x}'$ se trouvent dans le même groupe
    - aussi symétrique et satisfait l'inégalité de triangle

Apprentissage non-supervisé

- Groupement hiérarchique – dans l'espace des attributs
  - trouver les attributs les plus corrélés
  - matrice de covariance: $\mathbf{R} = [\sigma_{ij}]$
  - coefficients de corrélation: $\rho_{ij} = \dfrac{\sigma_{ij}}{\sigma_{ii}\sigma_{jj}}$
  - $0 \leq \rho_{ij} \leq 1$: mesure de similarité entre deux attributs