Cours 8 : Classification automatique de données par la méthode des centres mobiles.

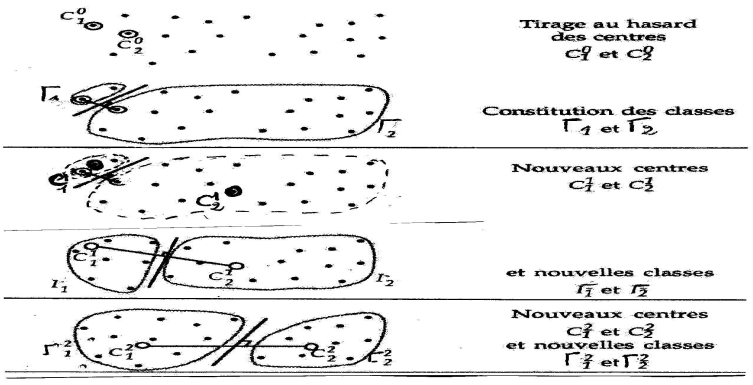
Comme l'algorithme de classification hiérarchique ascendante, l'algorithme des centres mobiles (*K-mean clustering* en anglais) est un outils de "fouille de données"(*data mining*). La fouille de données joue un rôle important dans presque tous les domaines scientifiques, du marketing qui l'a fait naître[1], à la génétique en passant par l'informatique (reconnaissance de forme) ou la linguistique.

Les centres mobiles :

L'objectif de la méthode est de partitionner en différentes classes des individus pour lesquels on dispose de mesures. On représente les individus comme des points de l'espace ayant pour coordonnées ces mesures. On cherche à regrouper autant que possible les individus les plus semblables (du point de vue des mesures que l'on possède) tout en séparant les classes le mieux possible les unes des autres. Ici encore (comme dans le cas de la classification hiérachique ascendante) on choisit de procéder *de façon automatique*, c'est-à-dire qu'on ne cherche pas à utiliser l'expertise que l'on aurait des individus pour trouver des regroupements avec ce que l'on connait les concernant mais plutot un moyen de *faire apparaître*, uniquement à partir des mesures, des ressemblances et des différences à priori peu visibles. Cette idée, travailler automatiquement, à l'aide de l'ordinateur et *en aveugle*, est appelée *apprentissage non supervisé*.

La méthode des centres mobiles s'applique lorsque l'on sait à l'avance combien de classes on veut obtenir. Appelons k ce nombre de classes. L'algorithme est le suivant :
Etape 0 : Pour initialiser l'algorithme, on tire au hasard k individus appartenant à la population, C_1^0, C_2^0, ..., C_k^0 : ce sont les k *centres* initiaux. On notera que l'indice numérote les différents centres et l'exposant indique qu'il s'agit des k centres initiaux.
On va ensuite répéter un grand nombre de fois les deux étapes suivantes :
Etape 1 : Constitution de classes : On répartit l'ensemble des individus en k classes Γ_1^0, Γ_2^0, ..., Γ_k^0 en regroupant autour de chaque centre C_i^0 (pour former la classe Γ_i^0) l'ensemble des individus qui sont plus proches du centre C_i^0 que des autres centres (au sens de la distance euclidienne).
Etape 2 : Calcul des nouveaux centres : On détermine les centres de gravité G_1, G_2, ... , G_k des k classes ainsi obtenues et on désigne ces points comme les nouveaux centres $C_1^1 = G_1$, $C_2^1 = G_2$, ... , $C_k^1 = G_k$
Répétition des étapes 1 et 2 : on répèteces deux étapes jusqu'à ce qu'à stabilisation de l'algorithme,c'est-à-dire jusqu'à ce que le découpage en classes obtenu ne soit (presque) plus modifié par une itération suplémentaire.

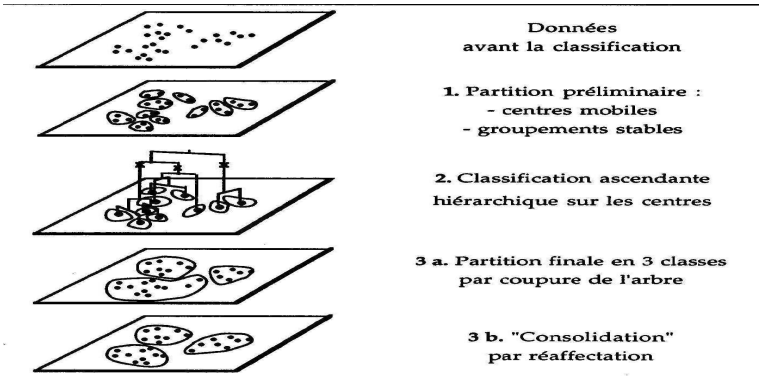
Le shéma ci-dessous illustre la méthode (mais, en pratique, bien sur, on ne fait pas ces calculs "à la main" mais à l'aide d'un logiciel d'analyse de données).



[1]Selon `http ://fr.wikipedia.oeg/Exploration_de_données`, cet algorithme qui remonte à 1956 serait devenu célèbre en mettant en évidence pour les magasins Wal-Mart un lien entre l'achat de couches pour bébés et l'achat de bières le samedi après midi. L'analyse des résultats d'une classification automatique permit de comprendre qu'il s'agissait de messieurs envoyés par leurs compagnes chercher des couches, jugées trop volumineuses, et qui s'offraient alors des packs de bière. On réorganisa les rayons des magasins en disposant couches et packs de bière à proximité et les ventes de bière s'envolèrent.

Mais est-on sur que cet algorithme conduit bien à une partition *meilleurs* que celle dont on est parti, c'est-à-dire celle qui était issue du tirage aléatoire initial de k centres ? rappelons ce que l'on entend par *meilleurs*. On a vu que lorsqu'un nuage est composé de plusieures classes étant chacune très bien regroupée autour de leur centres de gravité, son inertie intra, qui est la somme des inertie de chaque classe sera petite. On aura donc, pour un nombre de classes fixé, une partition d'autant meilleure que son inertie intra sera petite. Or on peut montrer justement que l'inertie intra classe ne peut que décroître lorsque l'on passe d'un regroupement en classes $\{\Gamma_1^i, \Gamma_2,^i \ldots, \Gamma_k^i\}$ au suivant $\{\Gamma_1^{i+1}, \Gamma_2,^{i+1} \ldots, \Gamma_k^{i+1}\}$ par une itération de l'algorithme des centres mobiles. Si cette décroissance était toujours stricte, le nombre de partitions différentes d'un ensemble fini de points est lui-même fini (même s'il est gigantesque), on serait sur d'atteindre ainsi le minimum. En pratique, cet algorithme est populaire car il est facile à utiliser et il suffit souvent de peu d'itérations pour avoir deja une partition de qualité.
Il a cependant deux défauts principaux :
1) tout d'abord il exige de l'utilisateur de choisir à l'avance le nombre de classes de la partition, ce qui est parfois difficile.
2) Ensuite on s'aperçoit que la partition que l'on obtient peut varier sensiblement en fonction du choix des centres initiaux. Cela vient du fait que, si l'inertie intra décroit effectivement à chaque itération, ce n'est pas forcément vers le minimum recherché mais parfois vers un *minimum local* qui n'est pas du tout optimal. En pratique, comme le déroulement de l'algorithme est généralement rapide, on n'hesite pas à l'exécuter plusieurs fois avec des choix différents des centres initiaux et on compare les partitions obtenues pour ne retenir que celle dont l'inertie intra est minimale, ou, si aucune n'est clairement minimale, la partition qui revient le plus souvent (groupements stables).

Méthodes mixtes : Au dela de la classification hierarchique ascendante et de la méthode des centres mobiles, il existes beaucoup d'autres méthodes (par exemple des méthodes stochastiques comme les reseaux de neurones) mais l'utilisateur privilégie souvent, lorsque le nombre d'individus est très grands et qu'il est alors difficile de choisir d'avance le nombre de classes, une classification mixte comme indiquées sur la figure suivante :



Si l'on a des milliers, voir des dizaines de milliers d'individus à classifier, on commence par les répartir en un (trop) grand nombre de classes (par exemple $k = 100$) par la méthode des centres mobiles. Puis, on ne retient que les centres des classes (avec leur poids qui sera proportionnel au nombre d'individus dans chaque classe) $\{(C_1^n, p_1), (C_2^n, p_2), \ldots, (C_{100}^n, p_{100})\}$ et on effectue une classification hiérarchique ascendante sur ces centres.Une partition est alors obtenue par coupure du dendrogramme que l'on choisit aussi judicieusement que possible (par exemple *au plus grand saut*) pour avoir le *bon* nombre de classes. On peut alors calculer leurs centres de gravité et finalement alouer chaque individu au centre le plus proche, ce qui *consolide* la partition.