IFT870/BIN710
Forage de données

Thème 2 : Exploration de données

Davy Ouedraogo
Département d'informatique

Université de Sherbrooke

Inspiré des notes de cours de Pre Aida Ouangraoua

Partie I : Théorie

Type de données

- **Données sous forme d'enregistrement**
  - Vecteurs de valeurs d'attributs (ex : matrices numériques)
  - Données de documents (ex: matrices documents-termes)
  - Données de transactions (ex. ensembles d'items)

- **Données structurées sous forme de séquences ou graphes**
  - Ordonnées : vidéo (séquence d'images), données séquentielles (séquences de données, ex: séquences biologiques), données temporelles (série de données ordonnées dans le temps)
  - Graphes : réseaux sociaux, données du web

- **Données spatiales et de multimédia**
  - Données spatiales (cartes)
  - Images

Type de données

- Vecteurs de valeurs d'attributs (ex : matrices numériques)
- Données de documents (ex: matrices documents-termes)

	équipe	coach	pays	balle	score	jeu	gagné	perdu	saison
Document 1	3	0	5	0	2	6	0	2	0
Document 2	0	7	0	2	1	0	0	3	0
Document 3	0	1	0	0	1	2	2	0	3

- Données de transactions (ex. ensembles d'items)

TID	*Items*
1	Bread, Coke, Milk
2	Beer, Bread
3	Beer, Coke, Diaper, Milk
4	Beer, Bread, Diaper, Milk
5	Coke, Diaper, Milk

Ensemble de données

- Ensemble d'objets (ou entités, enregistrements, vecteurs, points)
- Objets représentés par des valeurs d'attributs
- Ensemble d'objets représentés sous forme de matrice *M*
  - Lignes : objets
  - Colonnes : attributs (ou dimensions, variables, caractéristiques, propriétés «features»)
  - *M*(*i*,*j*) : valeur de l'attribut *j* pour l'objet *i*.

	équipe	coach	pays	balle	score	jeu	gagné	perdu	saison
Document 1	3	0	5	0	2	6	0	2	0
Document 2	0	7	0	2	1	0	0	3	0
Document 3	0	1	0	0	1	2	2	0	3

Type d'attributs

- Nominal ou catégoriel (discret)
  - Valeurs représentant des classes ou catégories

    Exemple : continent = {NA, SA, AF, AS, OC, EU}

- Binaire (discret) : Nominal à 2 valeurs (symétrique ou asymétrique)

- Ordinal (discret)
  - Valeurs ordonnées

    Exemple : Cote : A+, A, A-, B+, B, B-, …

- Numérique:
  - Discret : valeurs entières
  - Continu : valeurs réelles

Descriptions statistiques

- Permet de mieux connaître les données pour identifier des questions, et des modèles potentiellement adéquats

- Synthèse des valeurs d'un attribut
  - Minimum, maximum, moyenne, médiane, mode, estimation de la probabilité des valeurs (distribution de probabilités)

- Synthèse de la dispersion des valeurs
  - Variance, écart-type, quartile, écart inter-quartile, valeurs aberrantes, nombre d'objets par intervalle de valeurs (histogramme), distribution des probabilités

Descriptions statistiques : Synthèse des valeurs

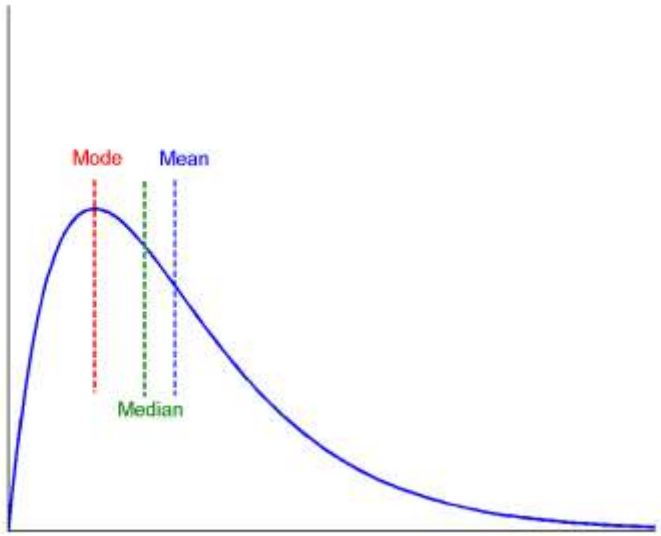
- Minimum, Maximum, Moyenne $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$
- Médiane: valeur *m* telle qu'il y a autant de valeurs supérieures à *m* que de valeurs inférieures à *m*.

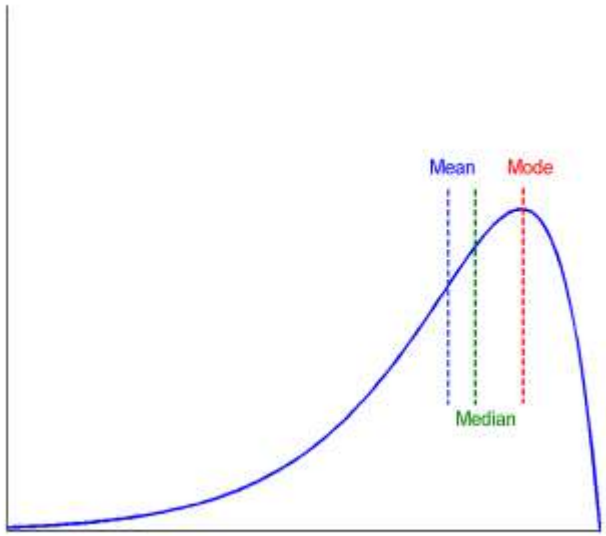
  Exemple : Médiane$([1,2,10,12,13])$ = 10 ; Médiane$([2,10,12,13])$ = 11

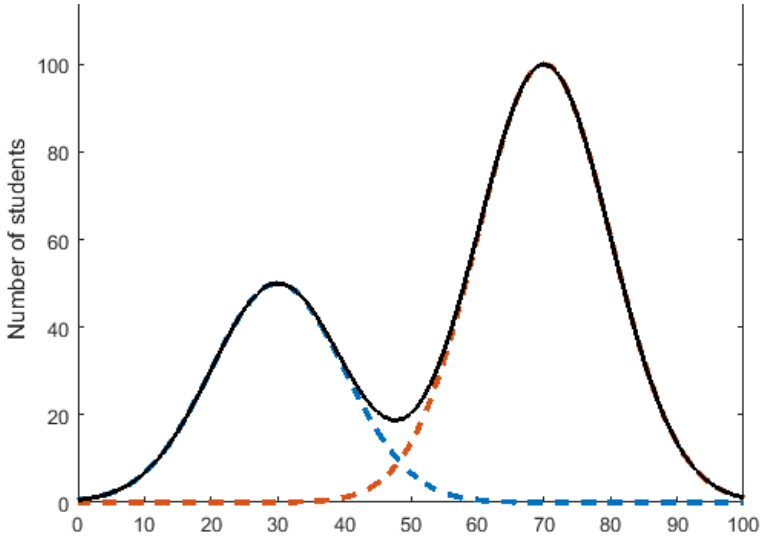
- Mode : valeur la plus fréquente

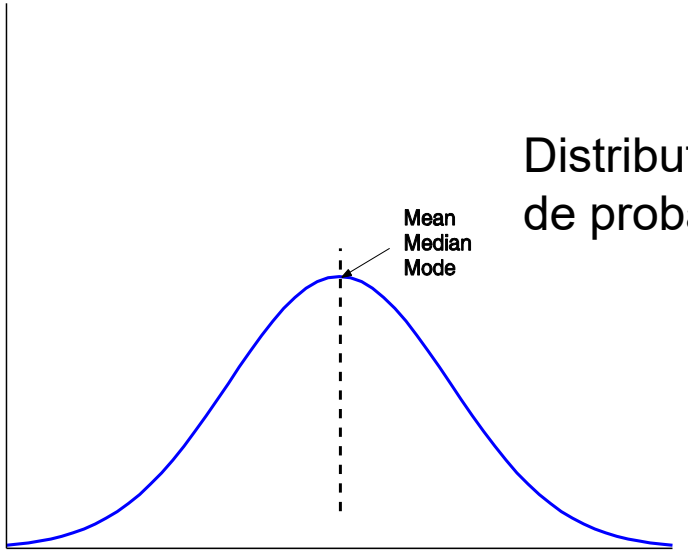
Descriptions statistiques : Synthèse des valeurs

- Mode : valeur la plus fréquente
  - Peut-être unimodal, bimodal, trimodal







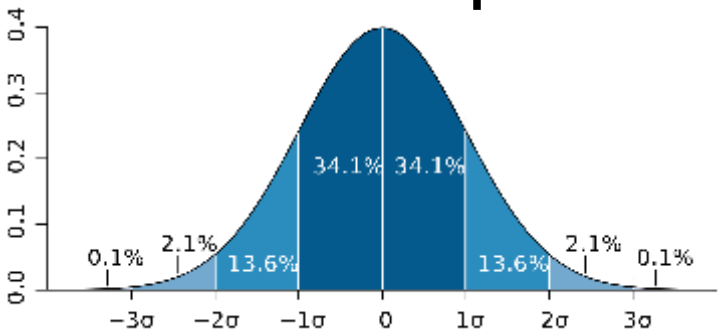


Distributions de probabilités

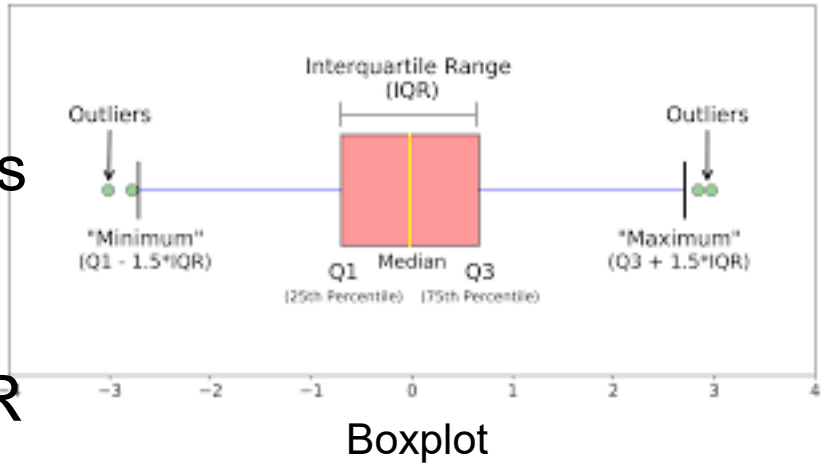
Descriptions statistiques : Synthèse de la dispersion

- Variance: $\sigma^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2$ Écart-type: σ

- Quartiles :
  - 1er quartile Q1 : médiane des valeurs inférieures à la médiane
  - 2e quartile Q2 : médiane
  - 3e quartile Q3 : médiane des valeurs supérieures à la médiane
  - Écart inter-quartile (IQR) = Q3 – Q1
  - Valeurs aberrantes : < Q1 – 1.5*IQR ou > Q3 + 1.5*IQR

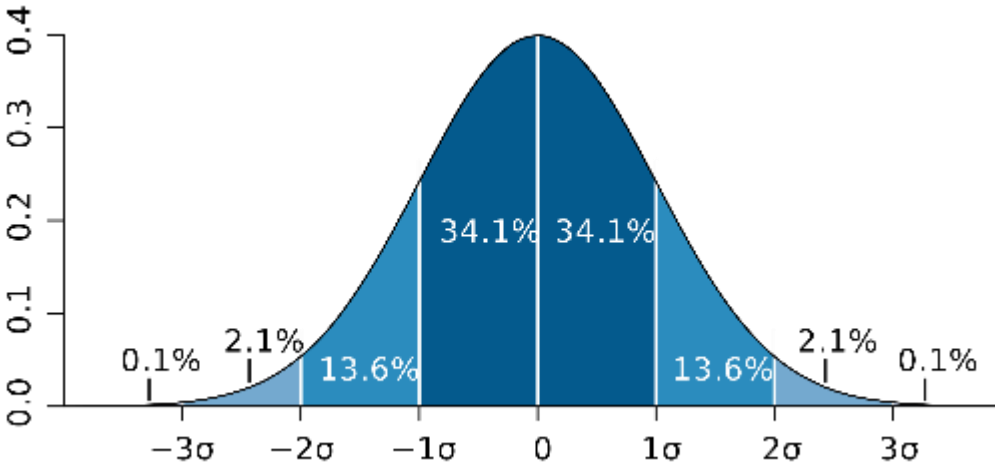


Distribution de probabilités (normale)

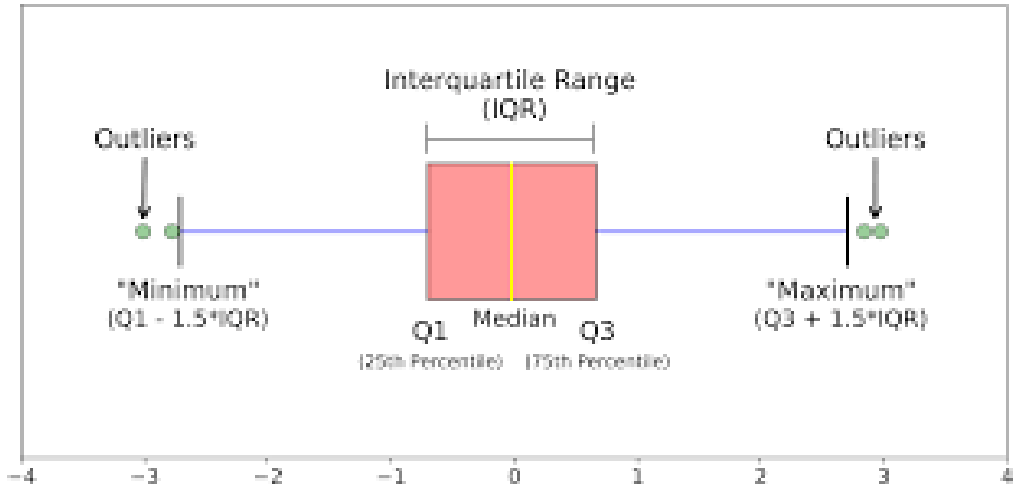


Boxplot

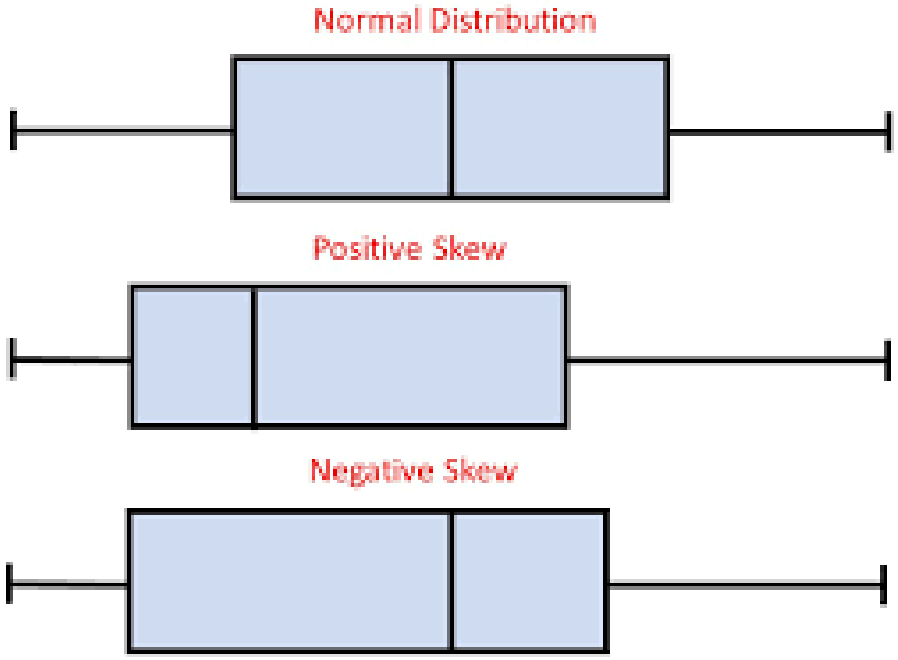
Descriptions statistiques : Synthèse de la dispersion

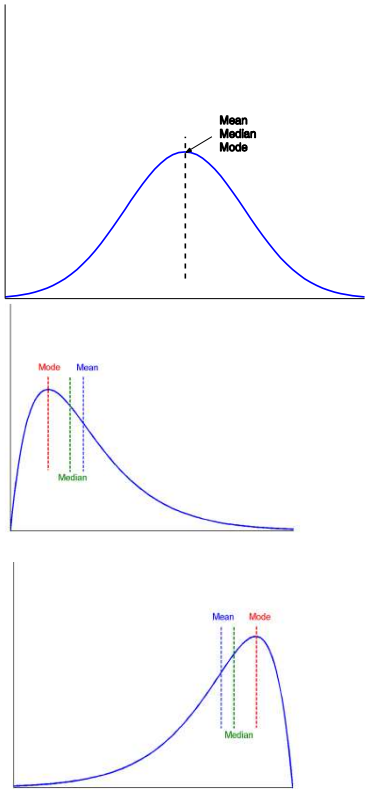


Distribution de probabilités (normale)



Boxplot





Visualisation des descriptions statistiques : utilité

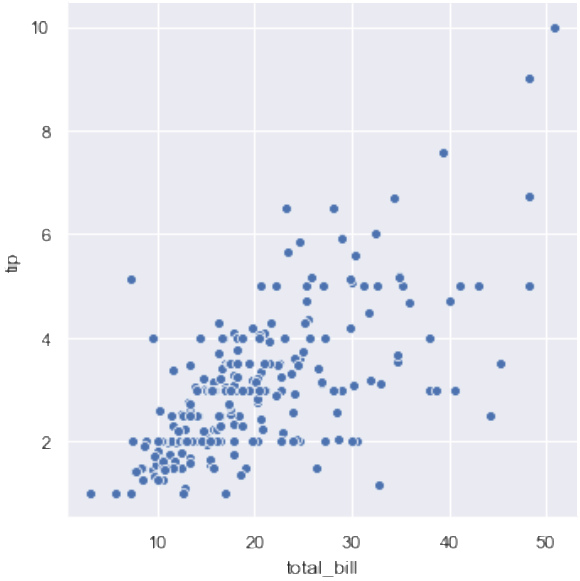
- Pré-traitement
  - Aide à l'exploration des données
  - Donne un aperçu et une vue d'ensemble qualitative de l'espace des données
  - Permet d'identifier des tendances, structures, irrégularités, relations ou modèles entre les données
  - Guide pour trouver des régions intéressantes et des paramètres appropriés pour une analyse quantitative approfondie
- Post-traitement
  - Fournit une preuve visuelle des modèles dérivées

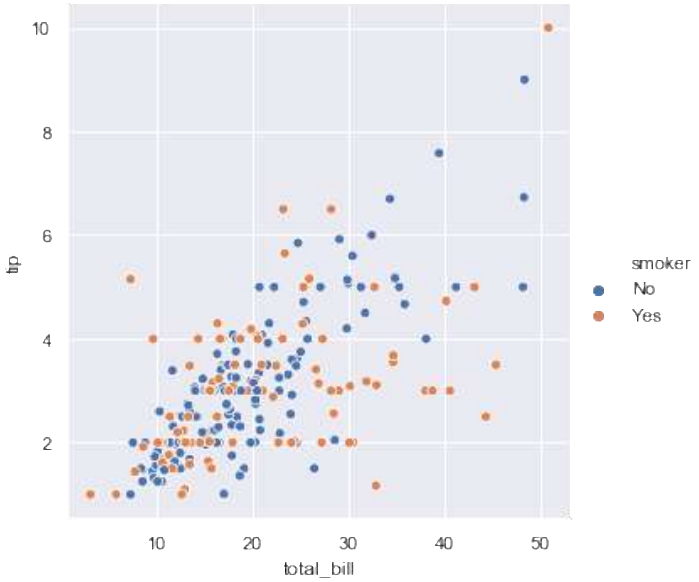
Visualisation des descriptions statistiques : types de graphique

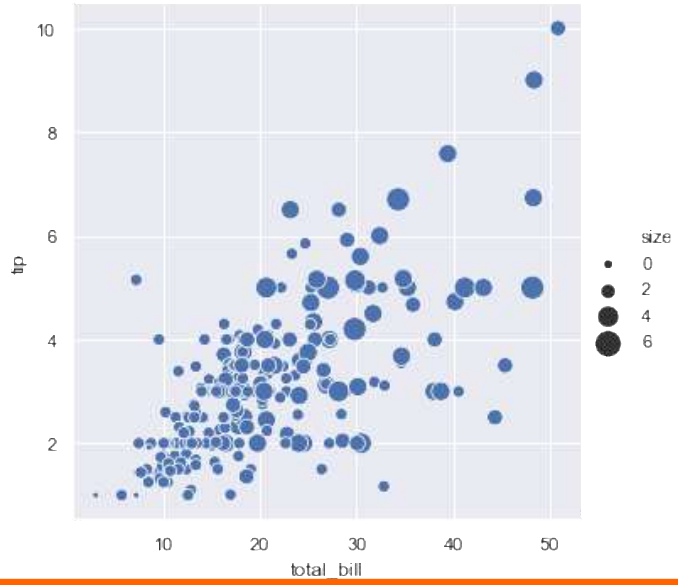
- Relation entre deux variables (possibilité de distinguer suivant d'autres variables)
- Régression entre deux variables (possibilité de distinguer suivant d'autres variables)
- Relation entre deux variables dont une catégorielle (possibilité de distinguer suivant d'autres variables)
- Distribution univariée et bivariée
- Matrice de couleurs pour des données rectangulaires
- Grille multi-graphique
  - Groupement suivant deux variables (lignes, colonnes)
  - Grille de relations deux-à-deux entre toutes les variables
  - Relation ou distribution bivariée couplée aux 2 distributions univariées
- Visualisation en 3D

Visualisation : Relation entre deux variables

- Points 2D (**scatter plot**) : tendance globale

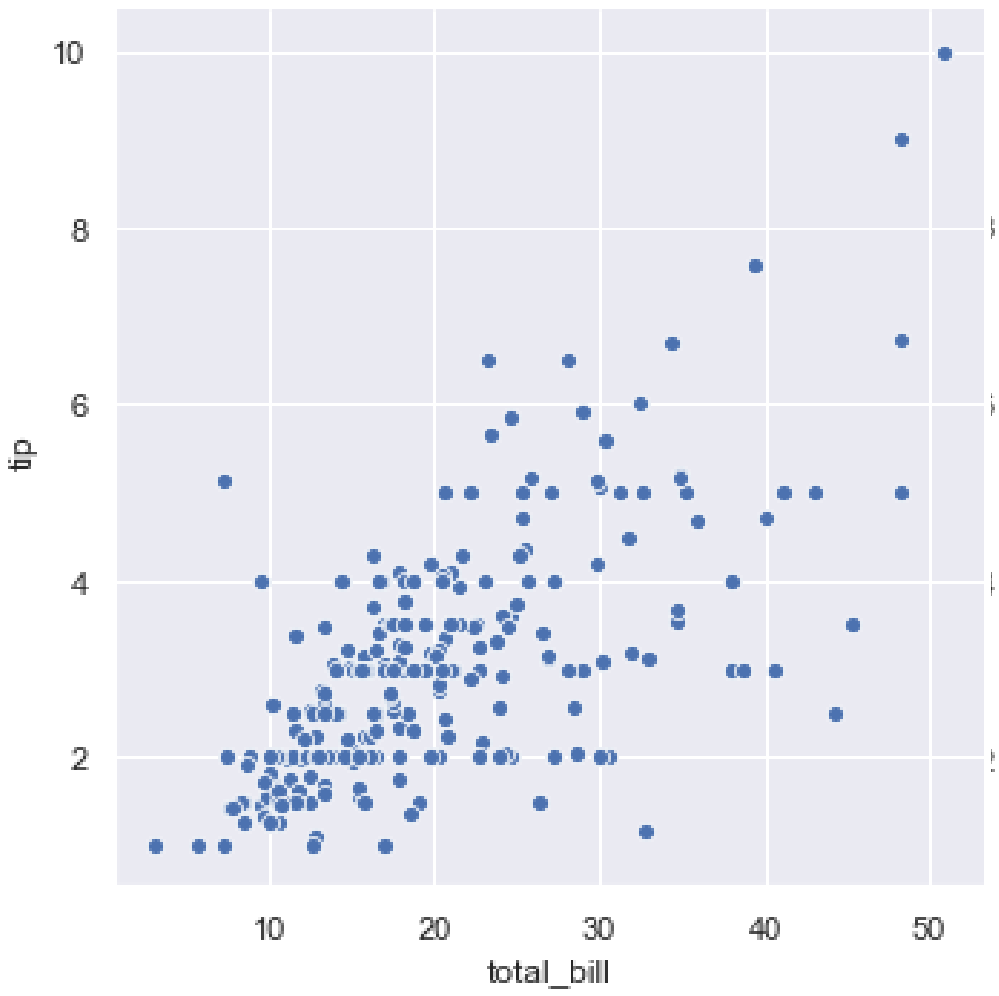


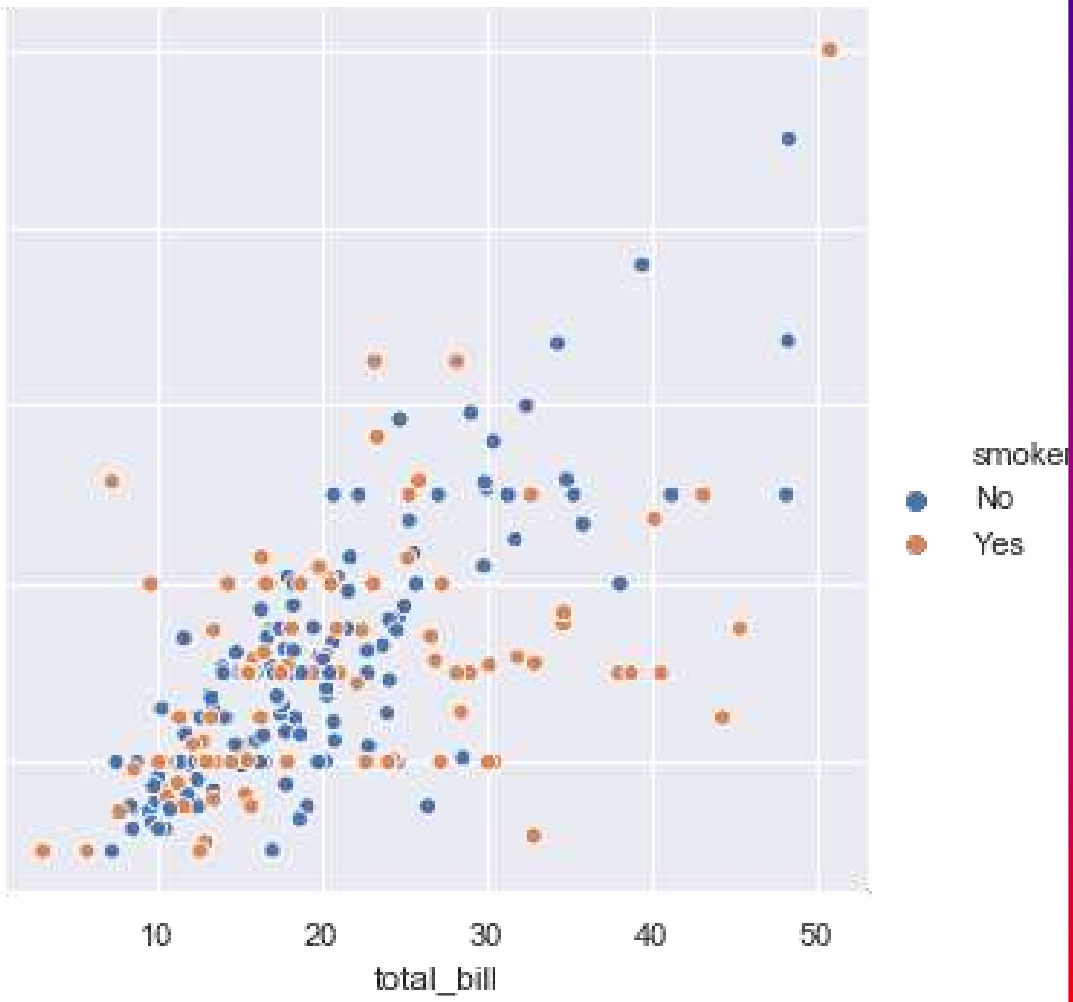




Visualisation : Relation entre deux variables

- Points 2D (**scatter plot**) : tendance globale

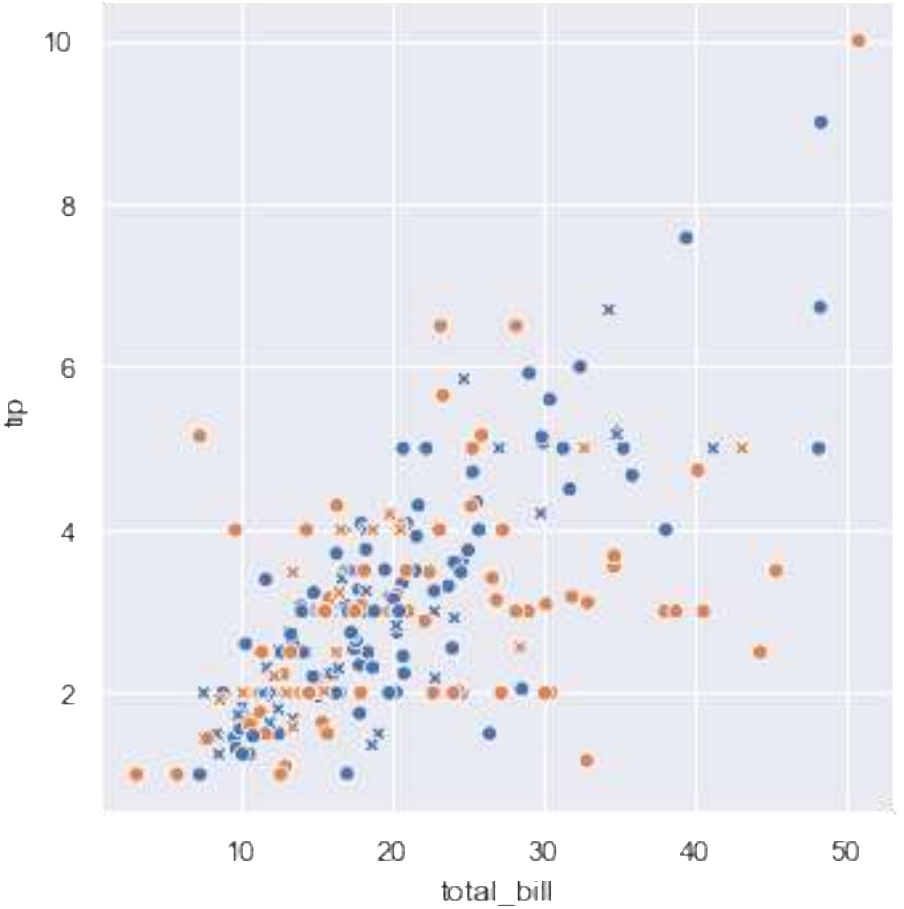




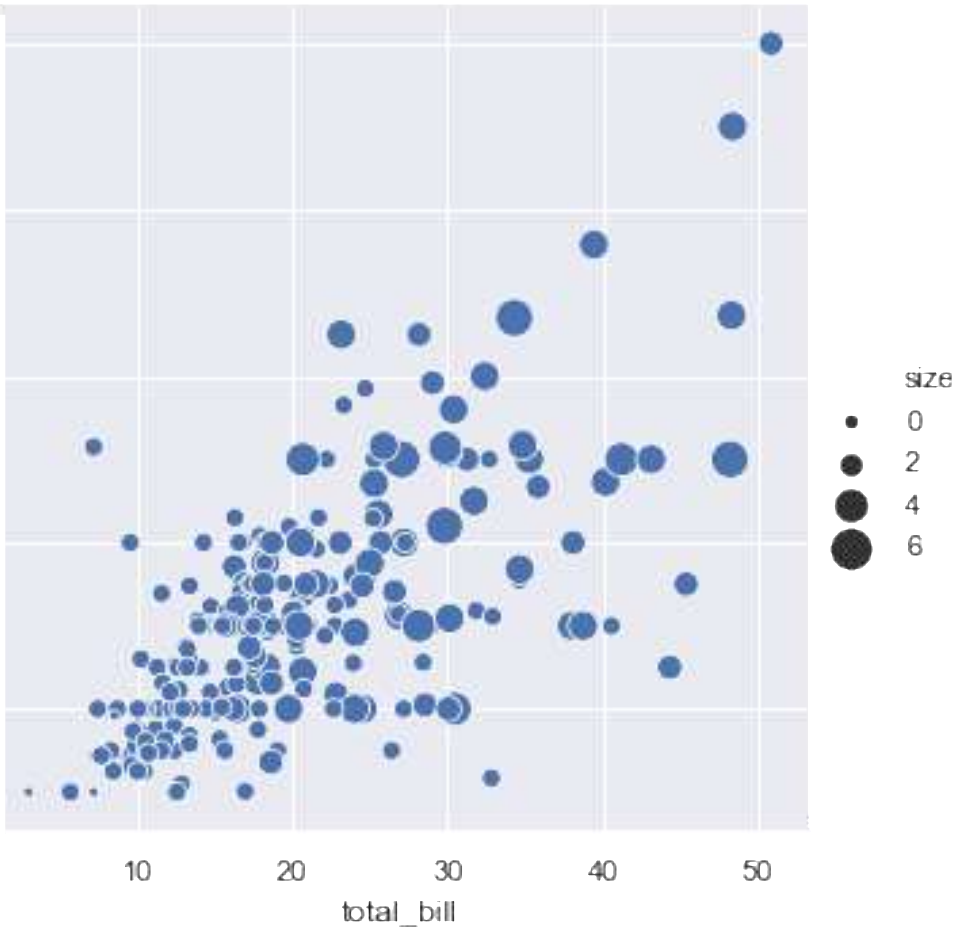
3e variable : couleur (hue)

Visualisation : Relation entre deux variables

- Points 2D (**scatter plot**) : tendance globale



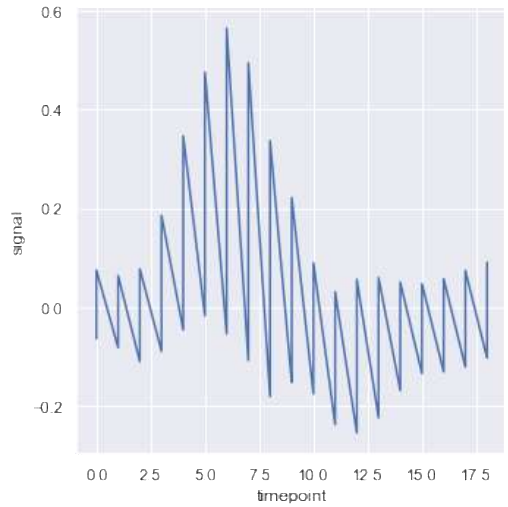
3e variable : couleur (hue)
4e variable : style (style)

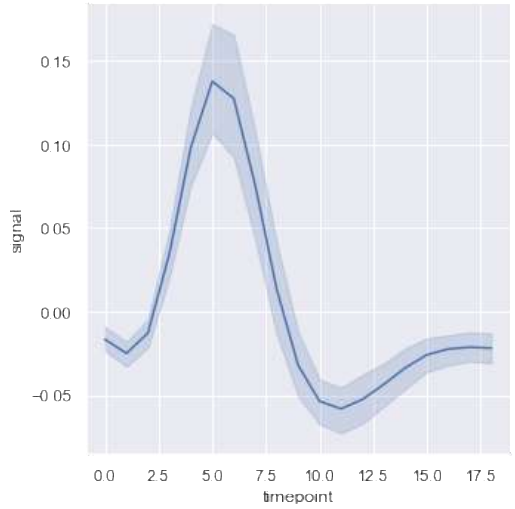


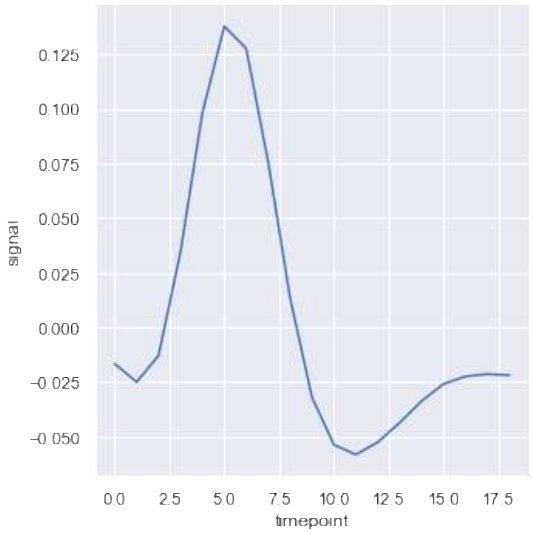
3e variable : taille (size)

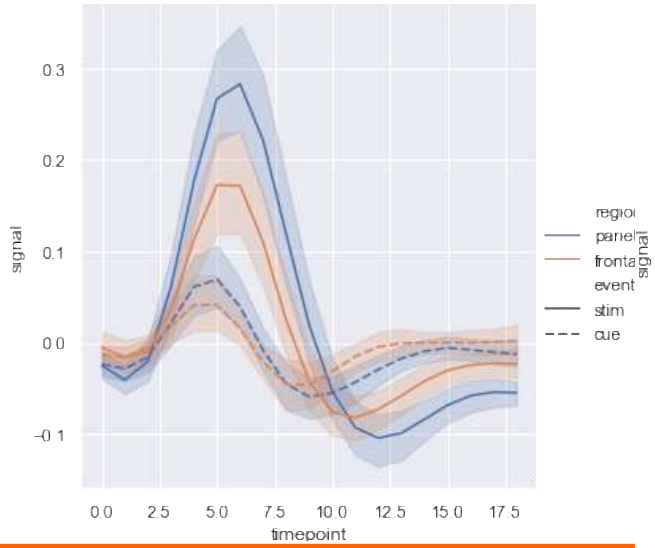
Visualisation : Relation entre deux variables

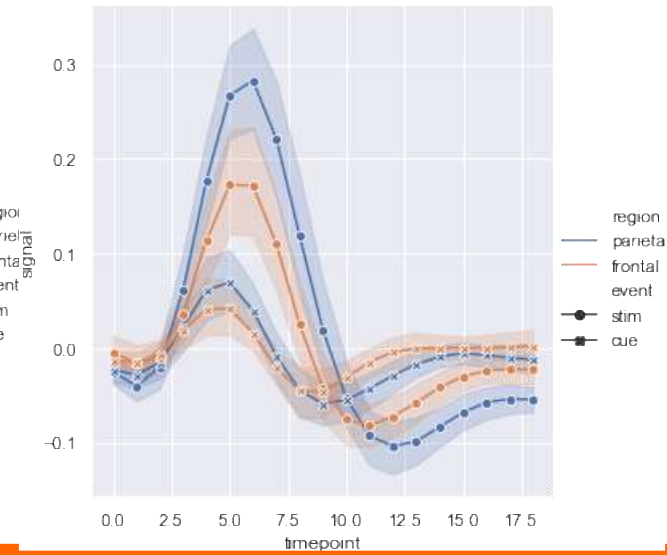
- Courbe de fonction (**line plot**) : tendance locale

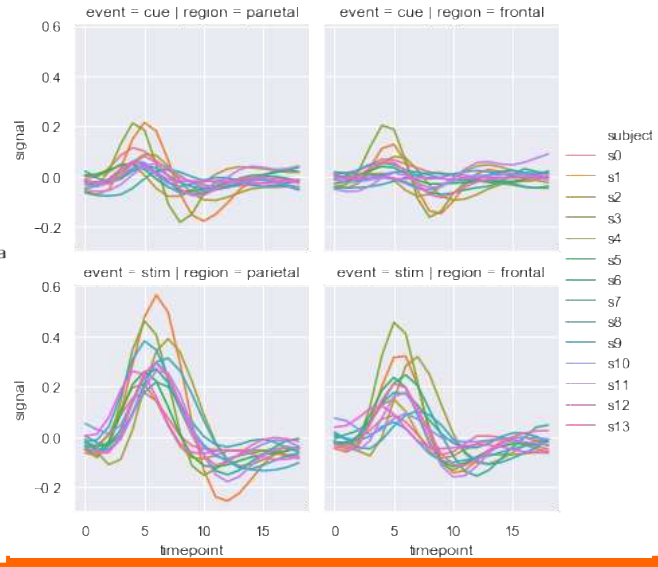








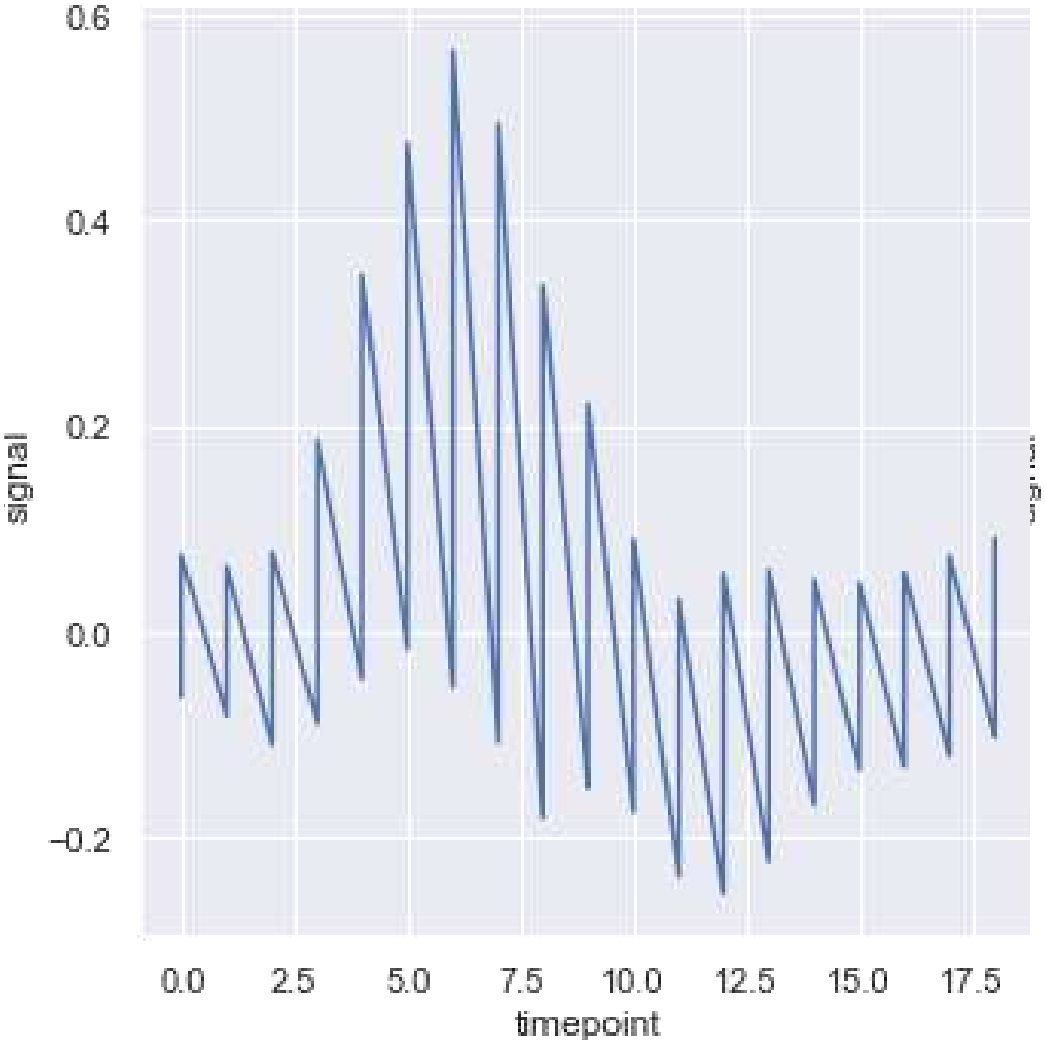




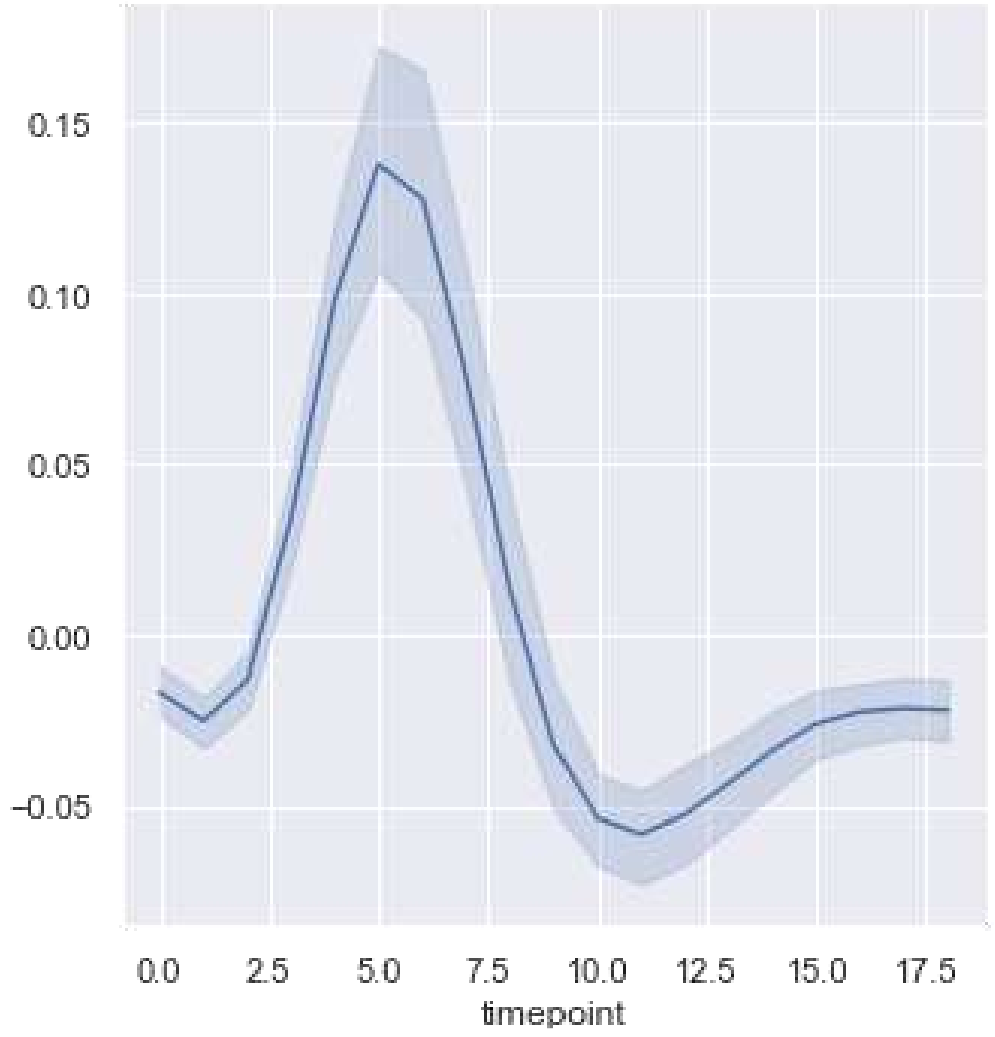
Visualisation : Relation entre deux variables

- Courbe de fonction (**line plot**) : tendance locale

Observations sans
estimation de moyennes

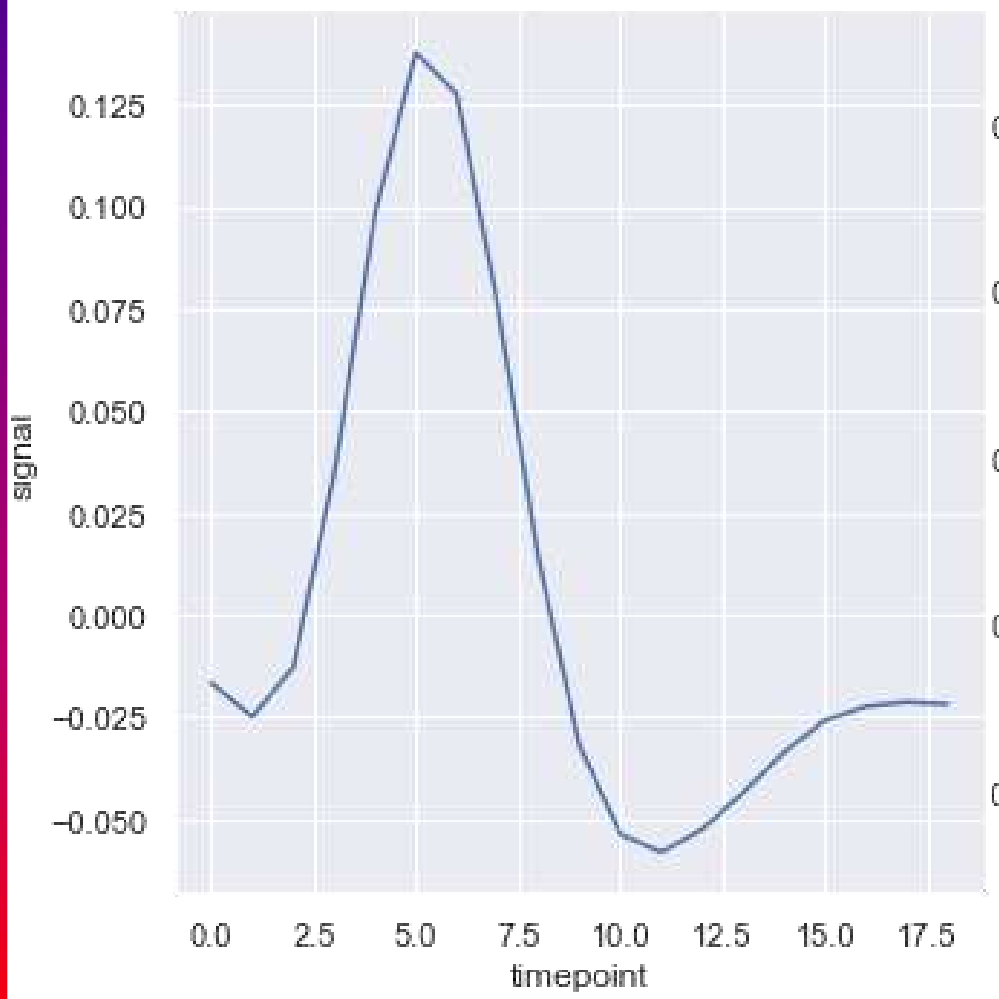


Estimation de moyennes
et intervalle de confiance (ci)

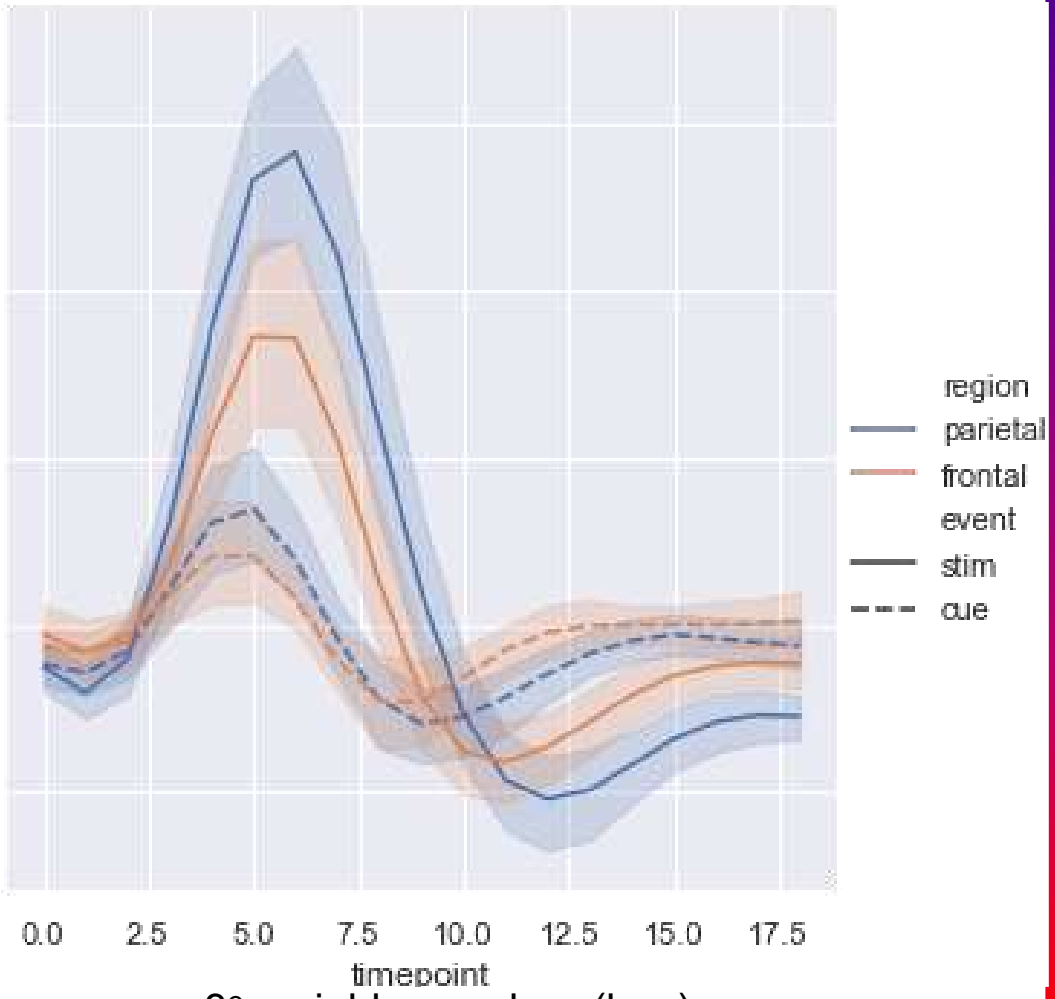


Visualisation : Relation entre deux variables

- Courbe de fonction (**line plot**) : tendance locale



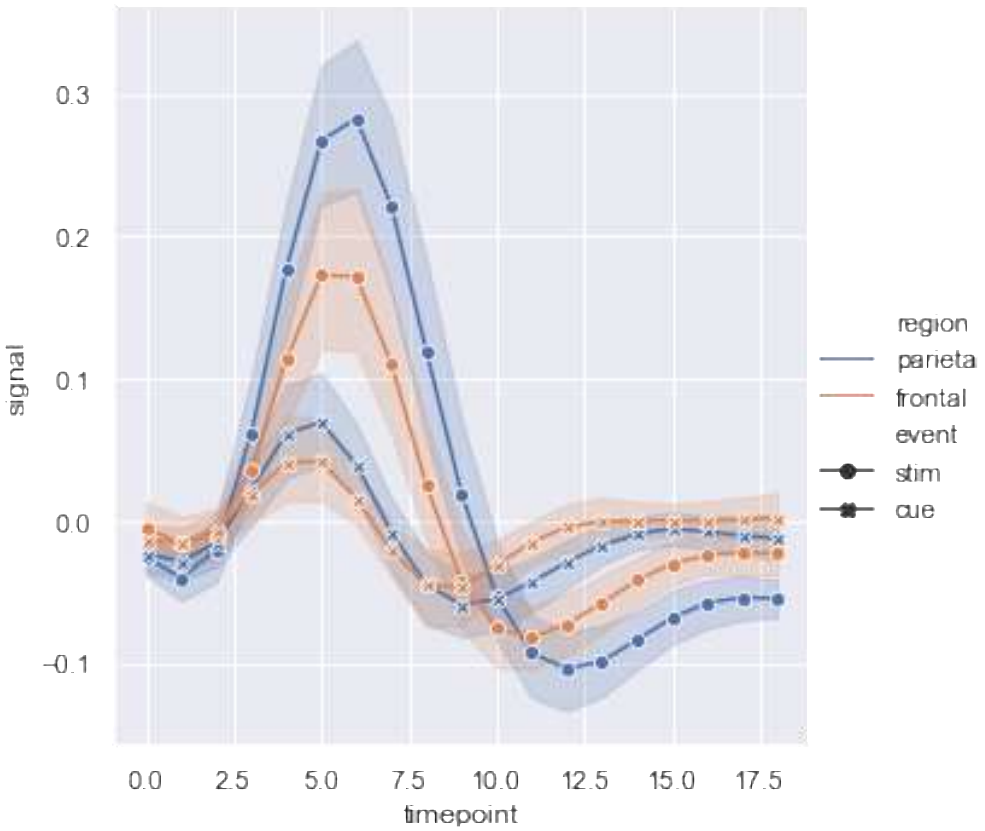
Estimation de moyennes sans intervalle de confiance



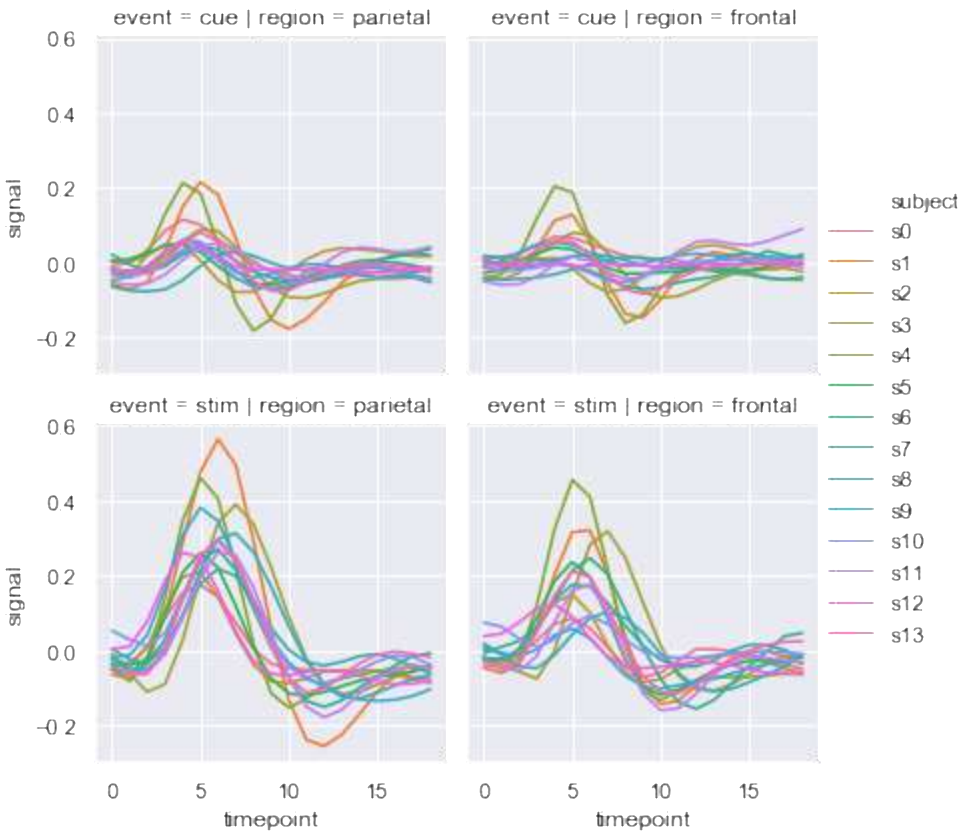
3e variable : couleur (hue)
4e variable : style (style: dashes)

Visualisation : Relation entre deux variables

- Courbe de fonction (**line plot**) : tendance locale



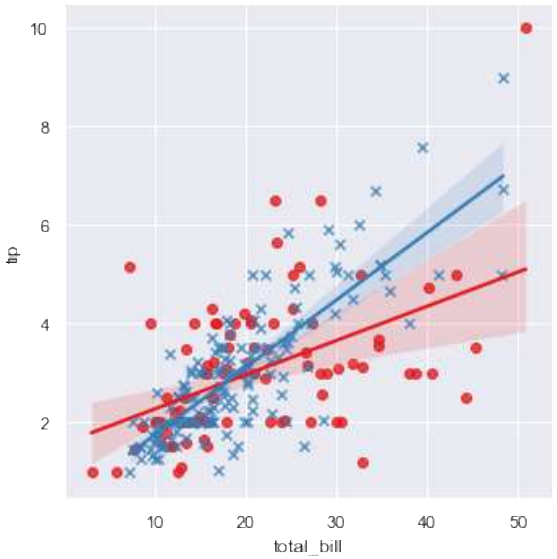
3e variable : couleur (hue)
4e variable : style (style: markers)

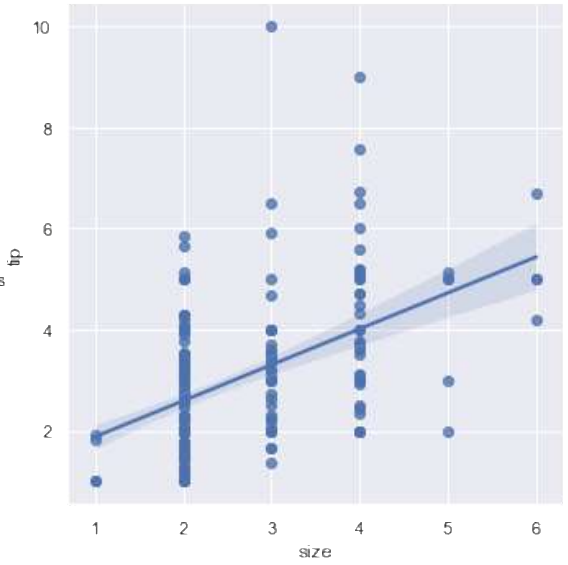


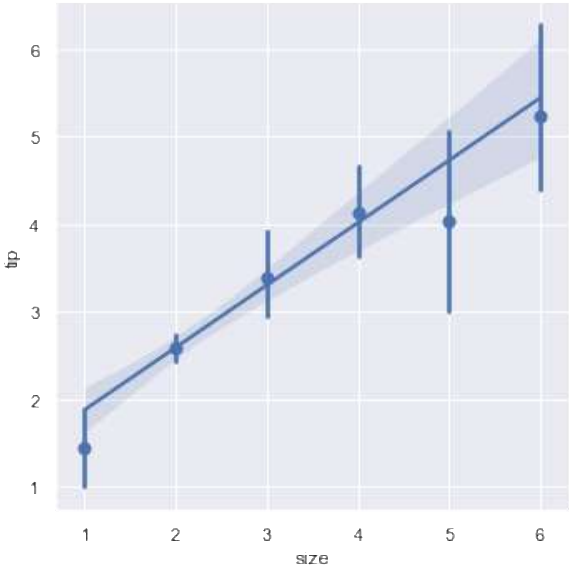
Regroupement suivant 3e variable (row) et 4e variable (col)

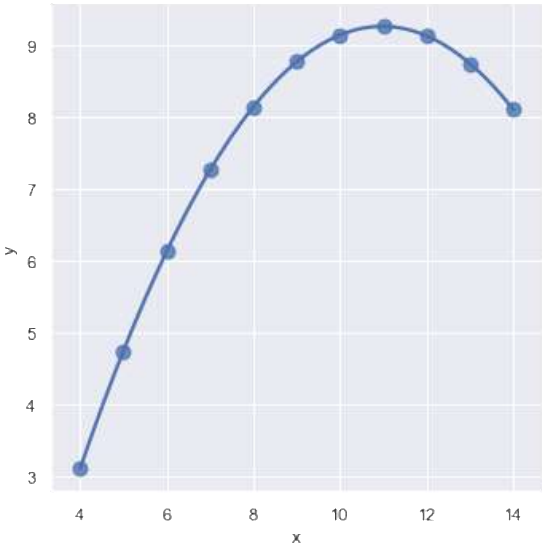
Visualisation : Régression entre deux variables

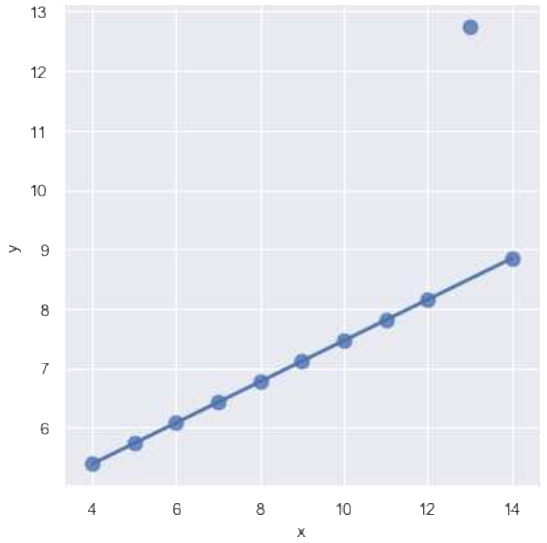
- Régression (**reg plot, lm plot**) : estimation d'une relation simple

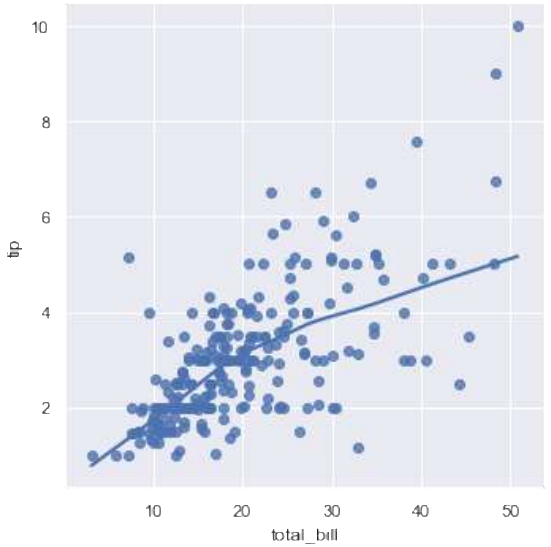






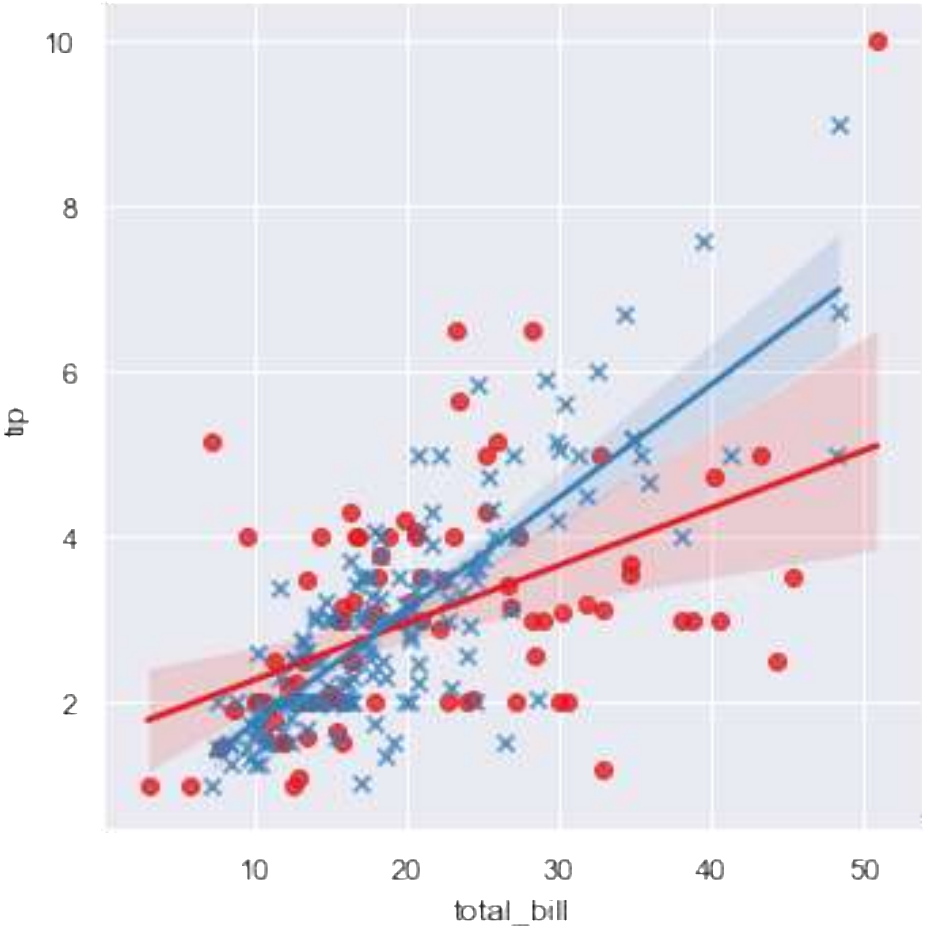




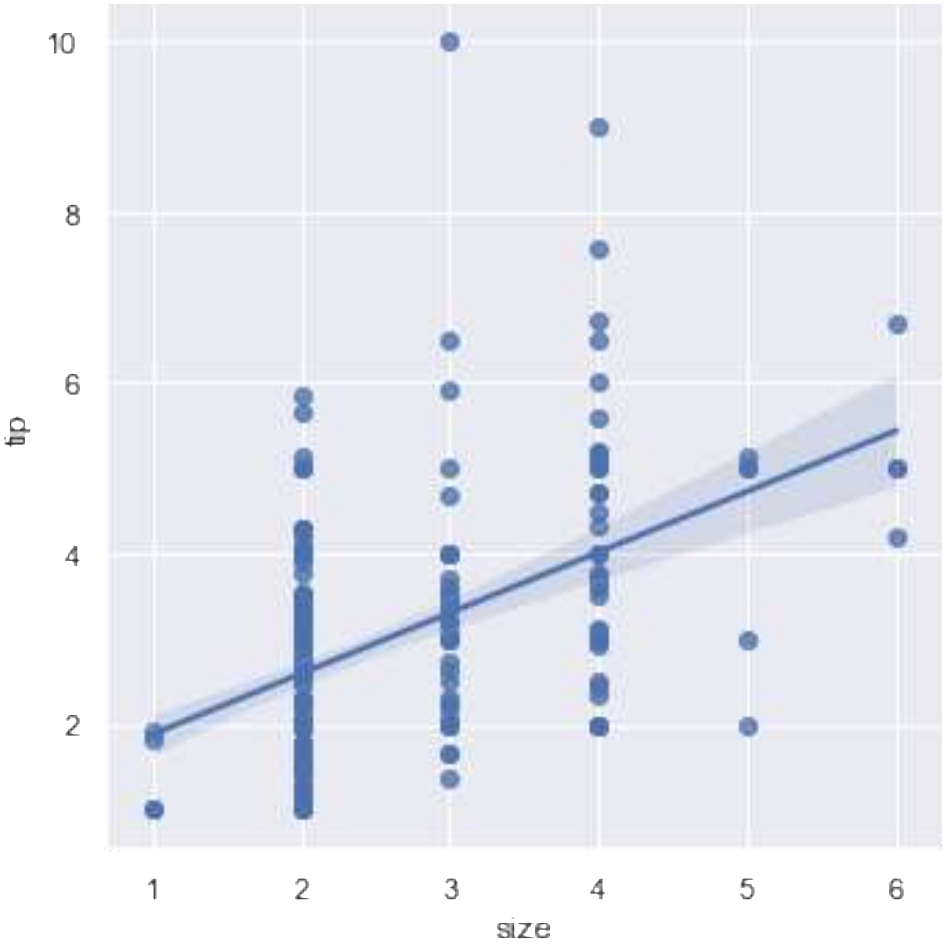


Visualisation : Régression entre deux variables

- Régression (**reg plot, lm plot**) : estimation d'une relation simple



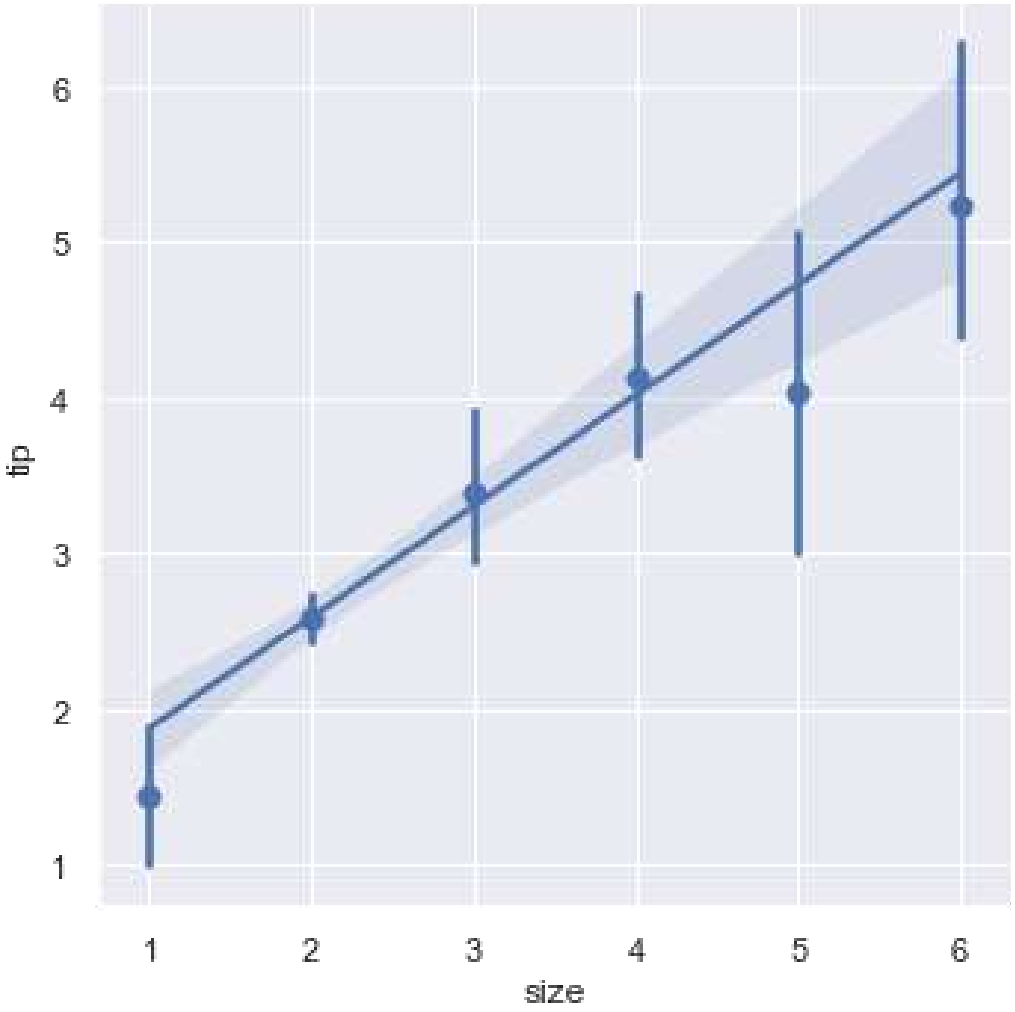
Avec estimation d'intervalle de confiance (ci)



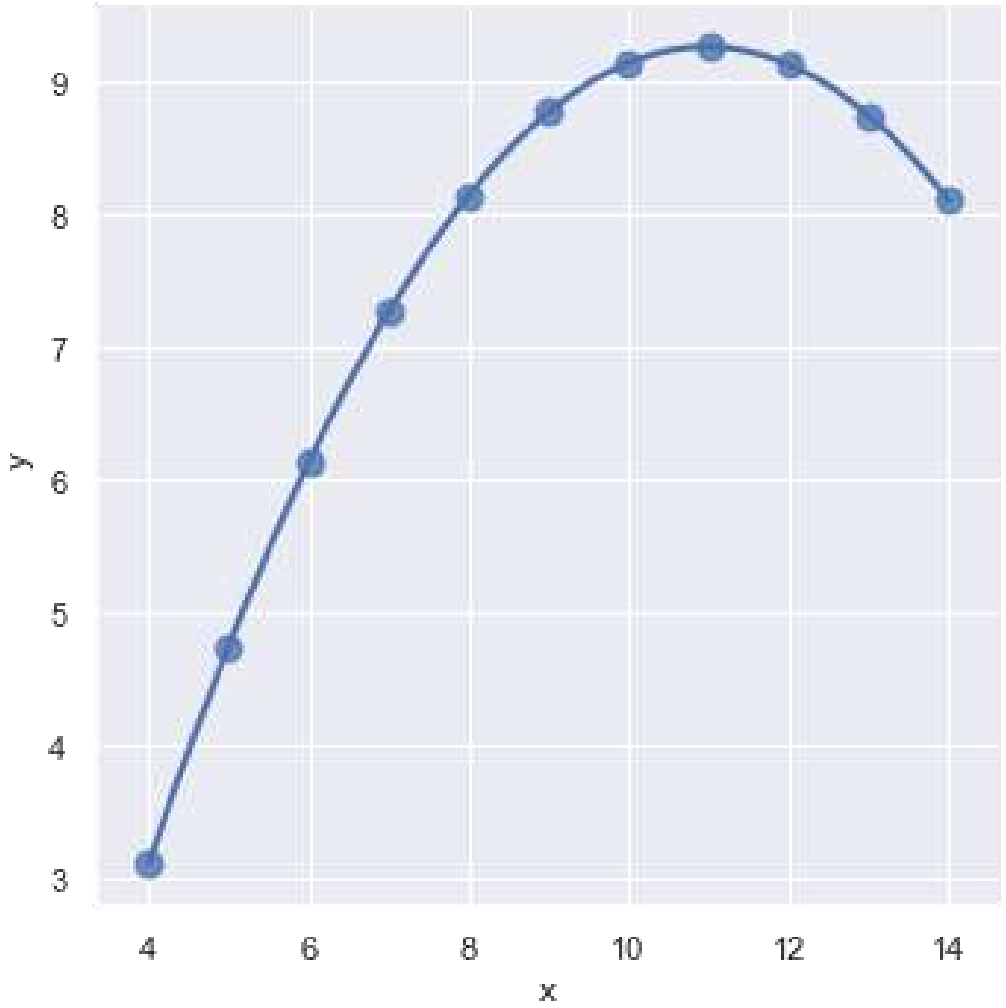
Une des variables est catégorielle

Visualisation : Régression entre deux variables

- Régression (**reg plot, lm plot**) : estimation d'une relation simple



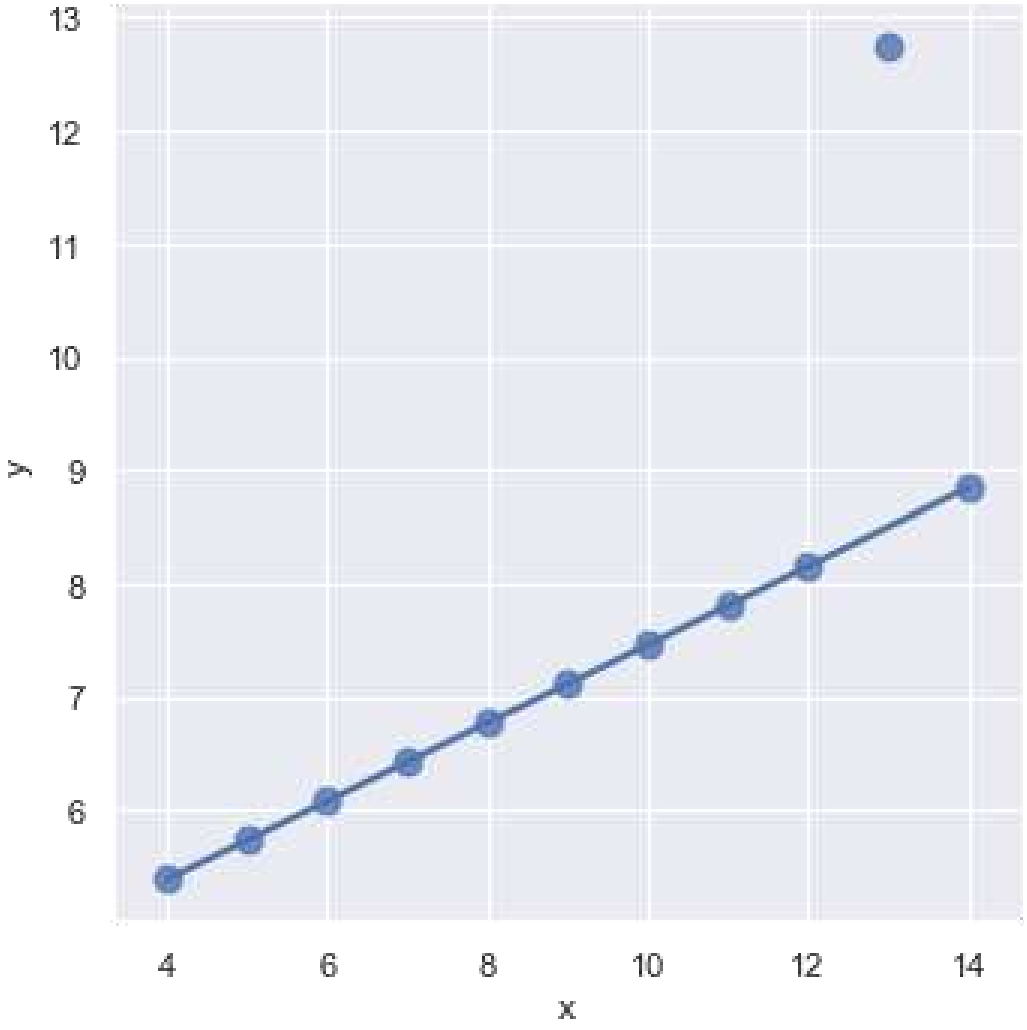
Relation polynomiale (order)



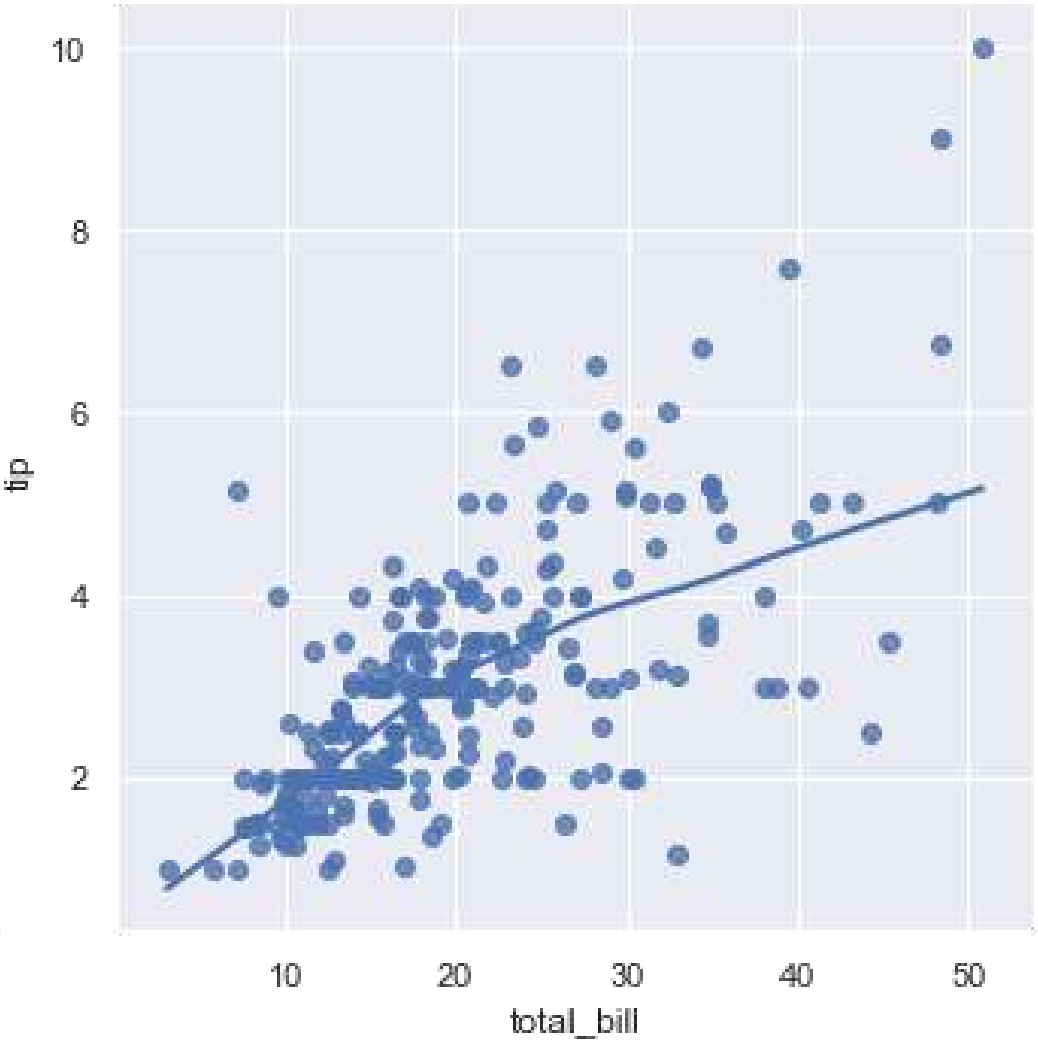
Avec estimation de moyenne et intervalle de confiance (ci)

Visualisation : Régression entre deux variables

- Régression (**reg plot, lm plot**) : estimation d'une relation simple



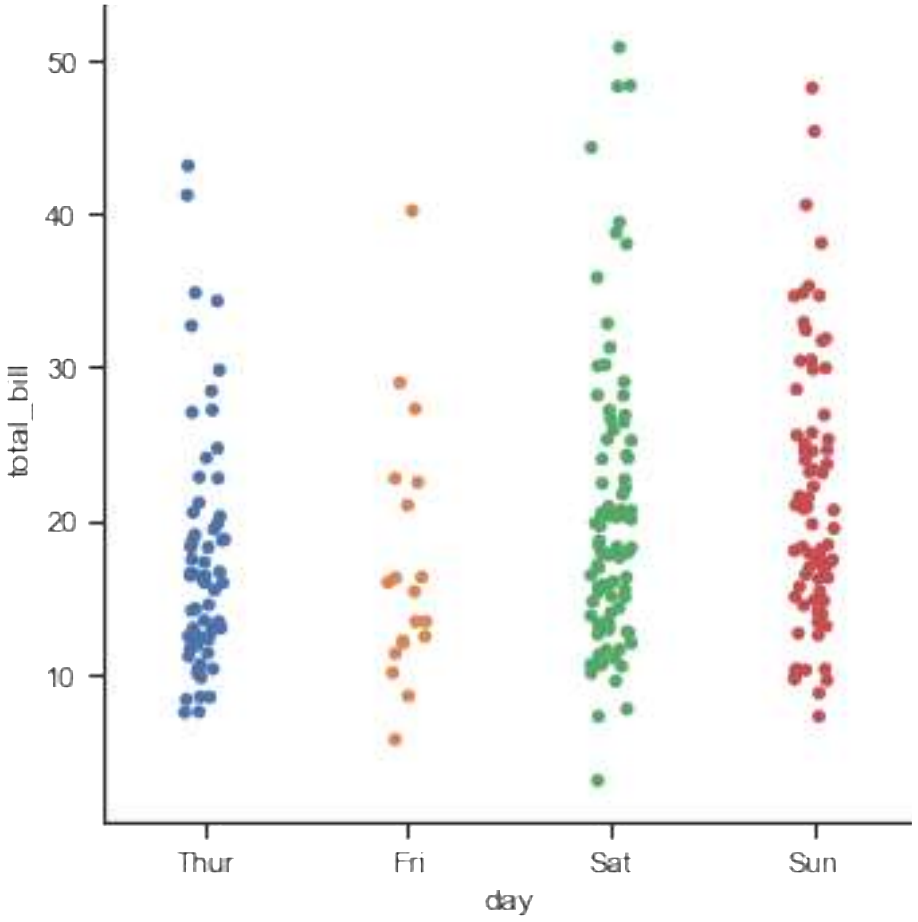
Estimation robuste aux
données aberrantes (robust)



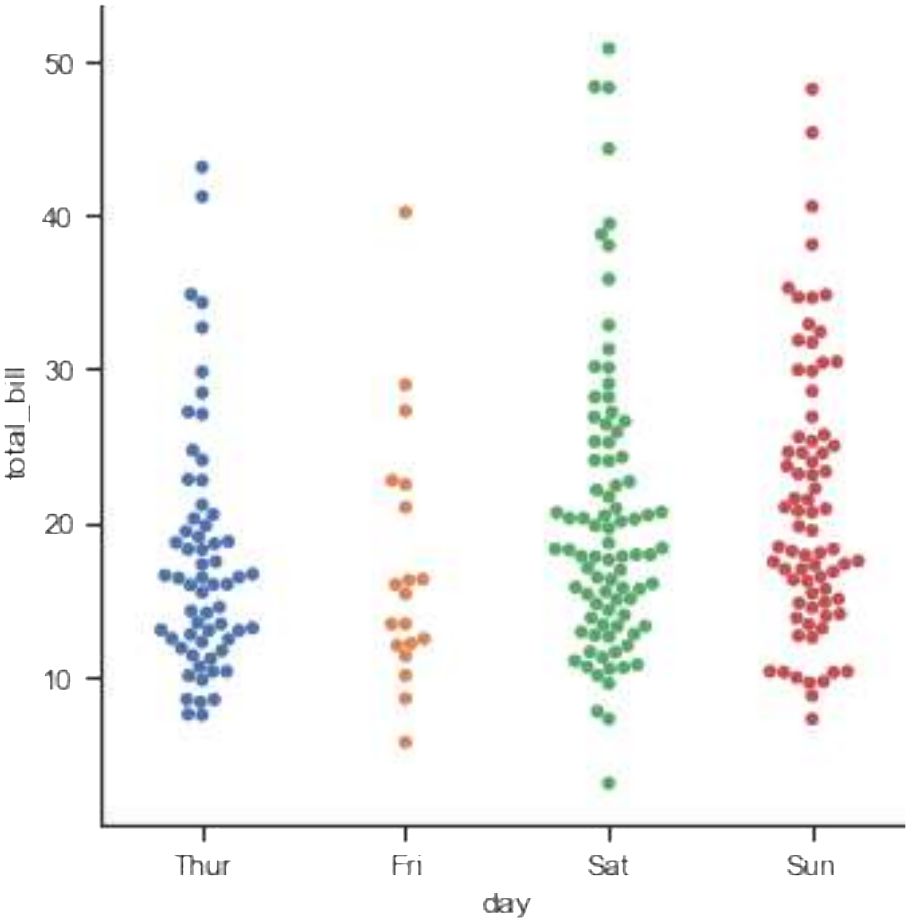
Lissage de la courbe
de régression (lowess)

Visualisation : Relation entre deux variables dont une catégorielle

- Point 2D : comparer les tendances globales dans les différentes catégories



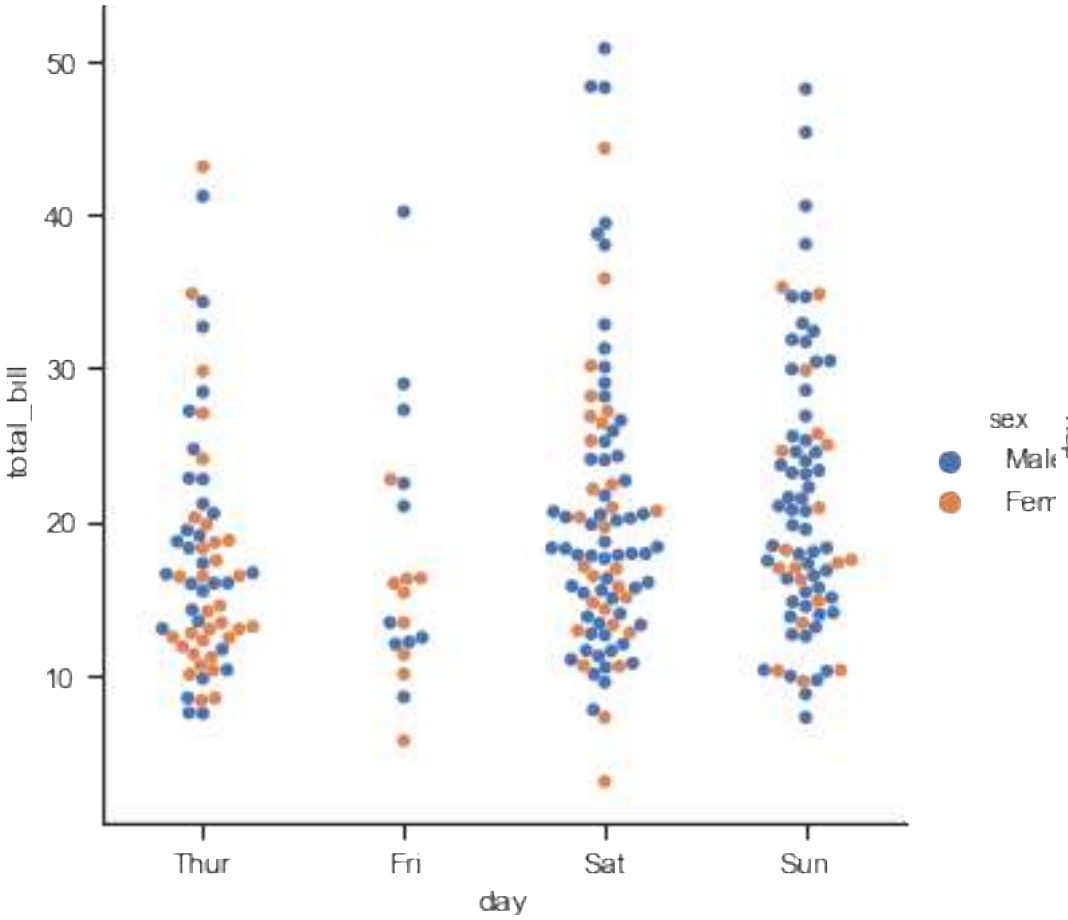
En bande (**strip plot**)

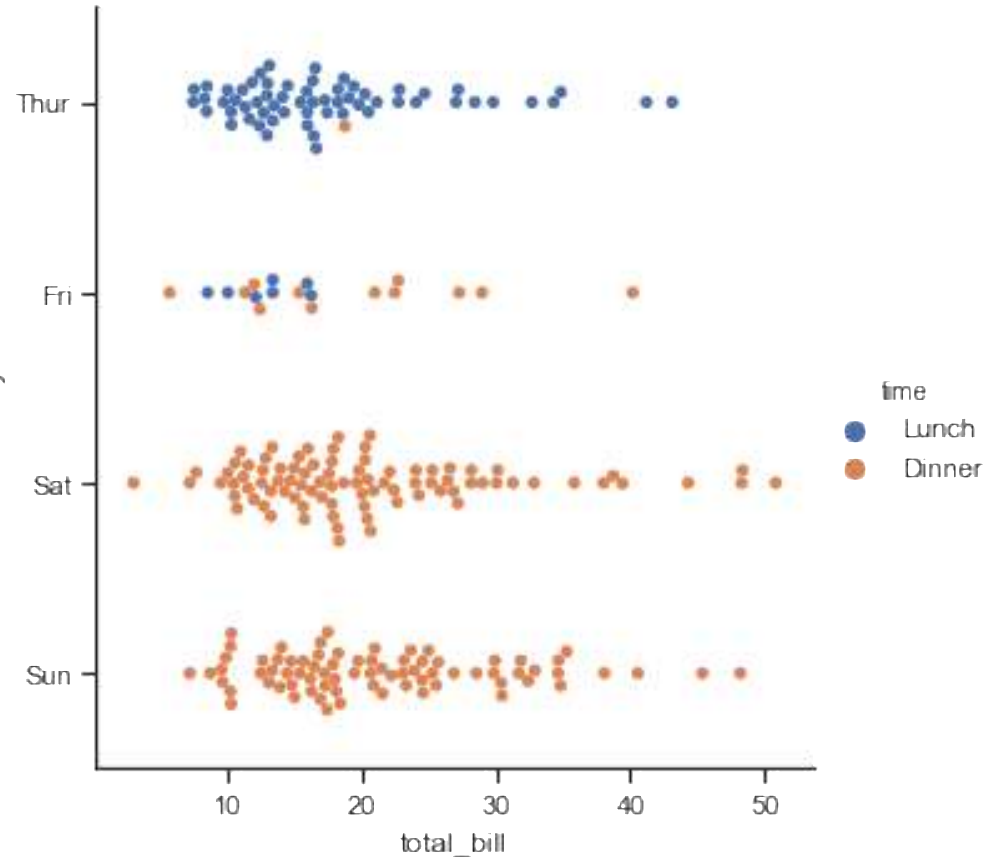


En essaim (**swarm plot**)

Visualisation : Relation entre deux variables dont une catégorielle

- Point 2D : comparer les tendances globales dans les différentes catégories



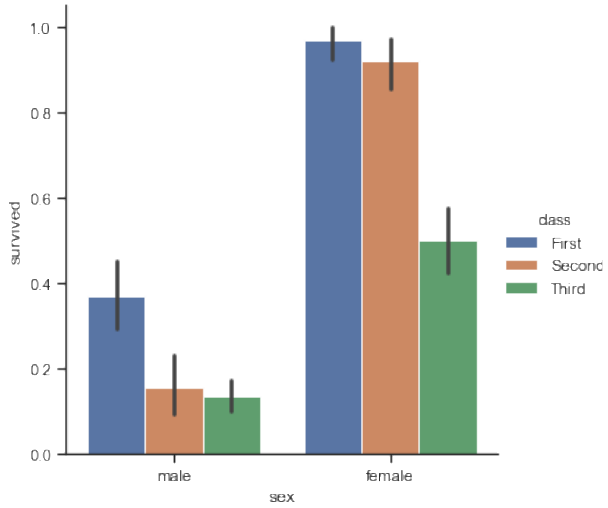


3e variable : couleur (hue)

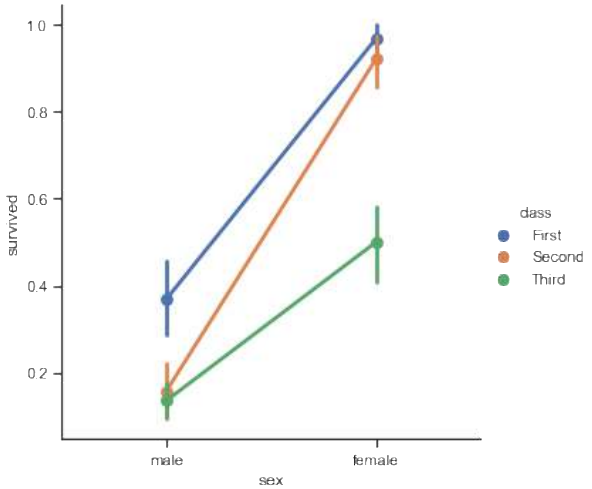
Visualisation : Relation entre deux variables dont une catégorielle

- Diagramme à barres et dérivées : comparer les tendances centrales dans les différentes catégories

Estimation de moyennes
En barre (**bar plot**)

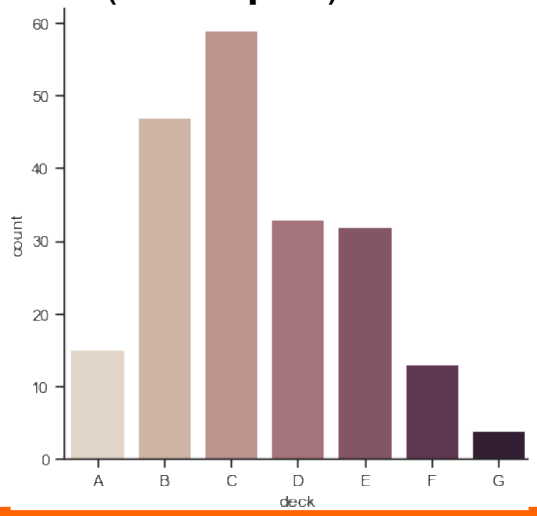


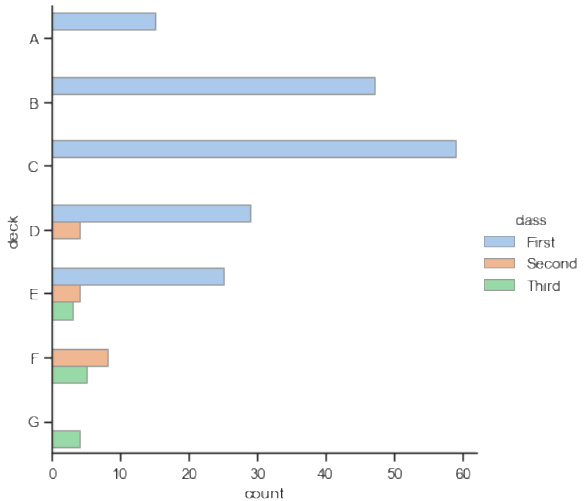
Moyennes en
Point (**point plot**)



3e variable :
couleur (hue)

Compte pour une seule variable
(**count plot**)



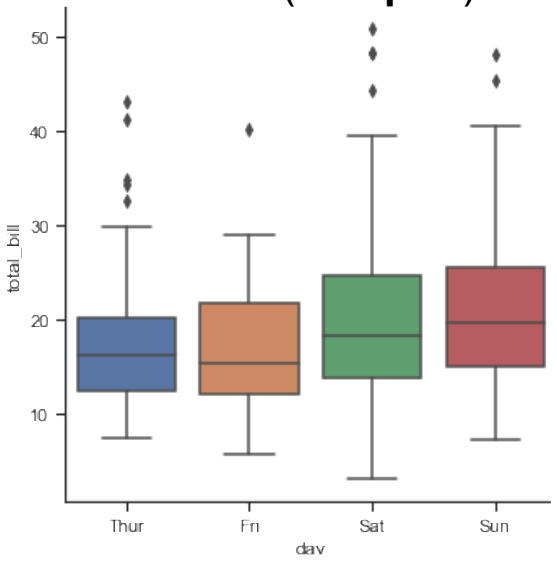


2e variable :
couleur (hue)

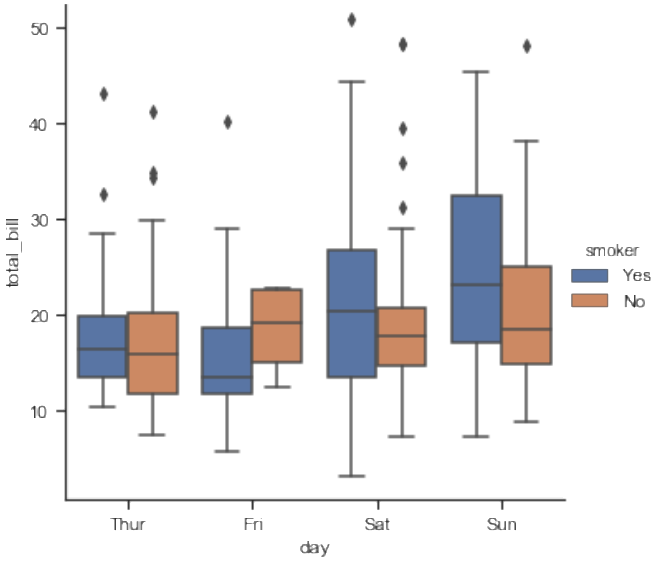
Visualisation : Relation entre deux variables dont une catégorielle

- Boîtes à moustaches et dérivées : comparer les distributions dans les différentes catégories

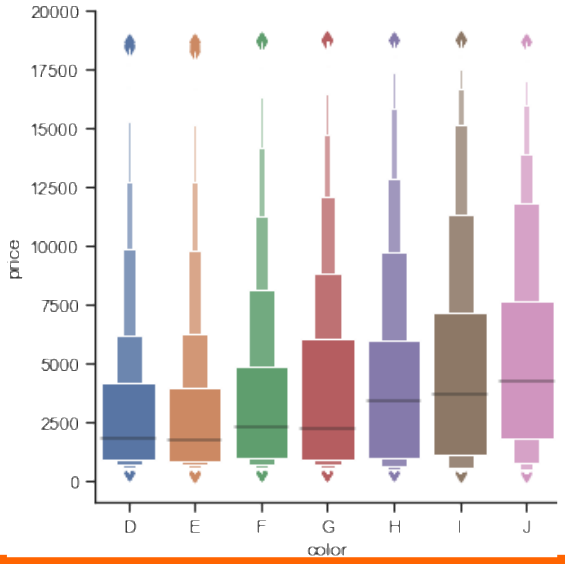
Observations : Quartiles 1,2,3.
En bande (**box plot**)



3e variable : couleur (hue)



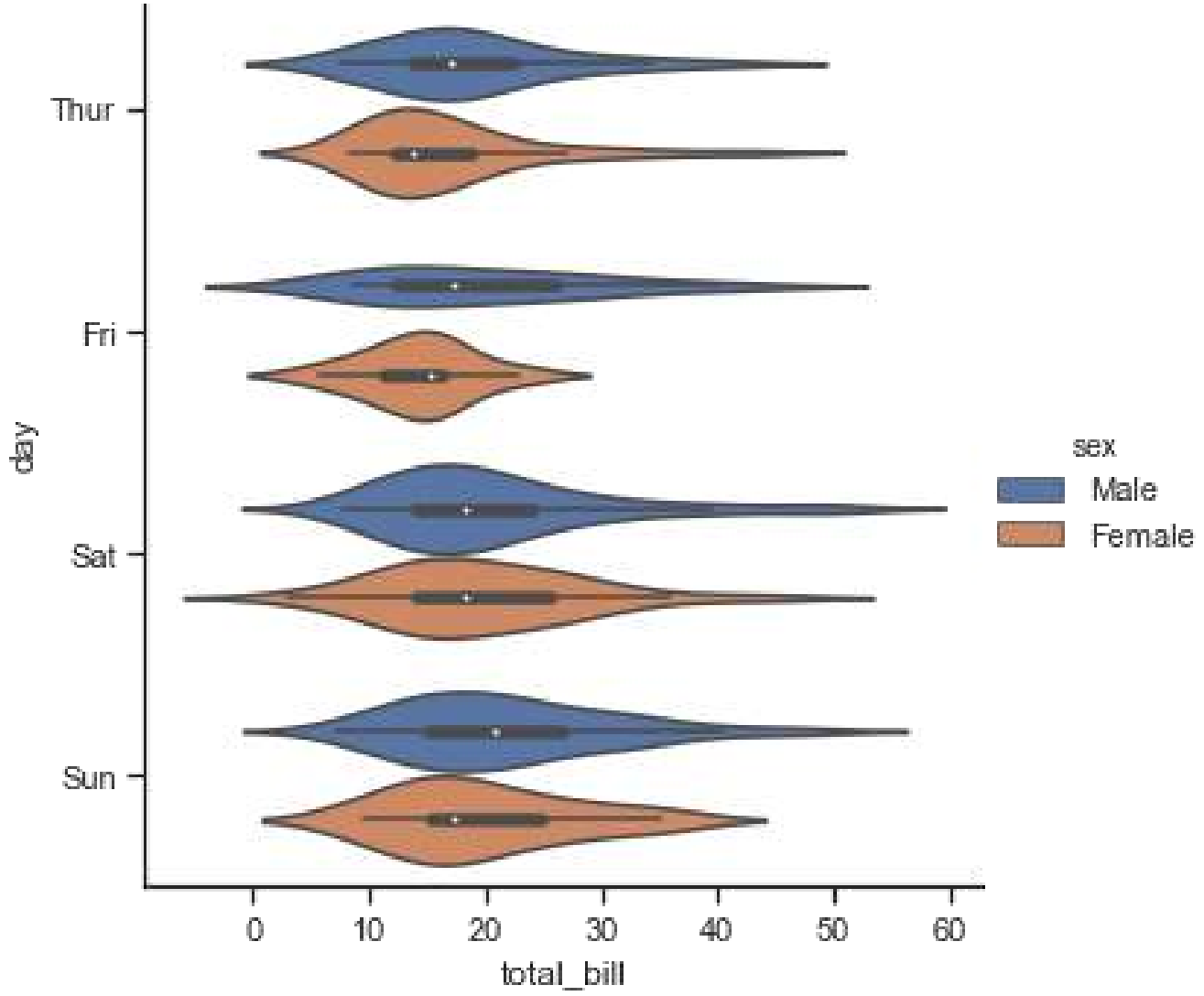
Quartiles supplémentaires (**boxen plot**)



Visualisation : Relation entre deux variables dont une catégorielle

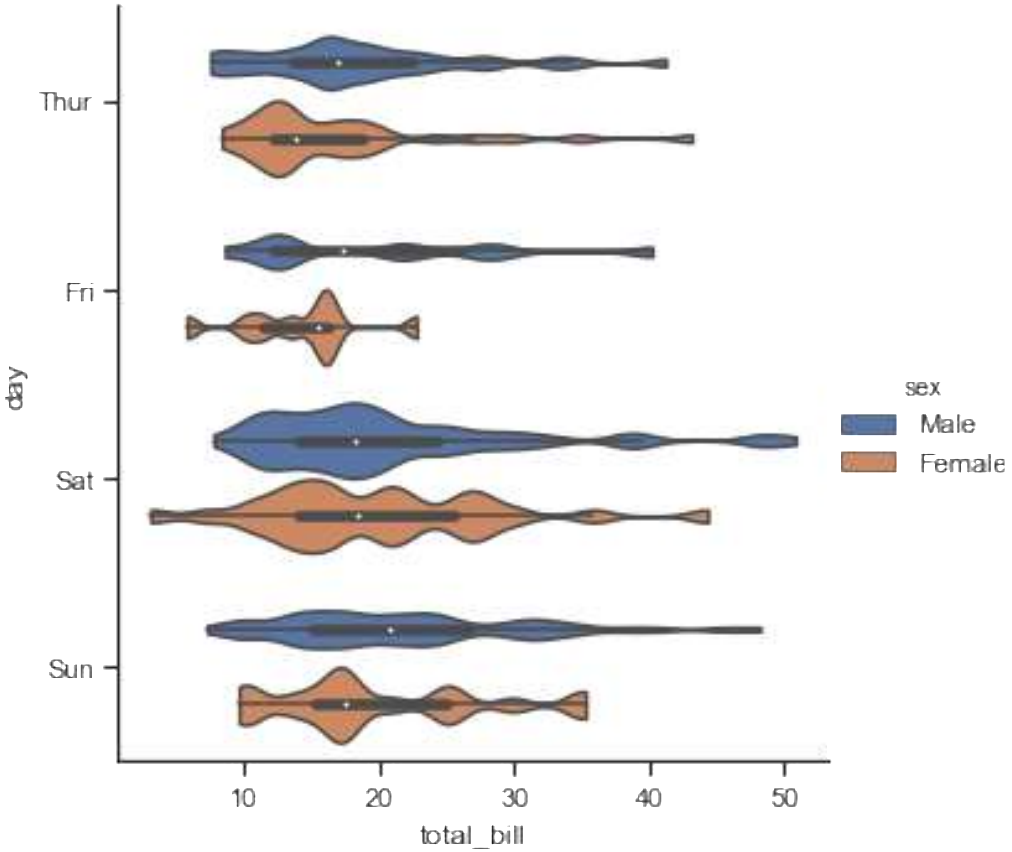
- Boîtes à moustaches et dérivées : comparer les distributions dans les différentes catégories

Estimation de distributions
En violon (**violin plot**)

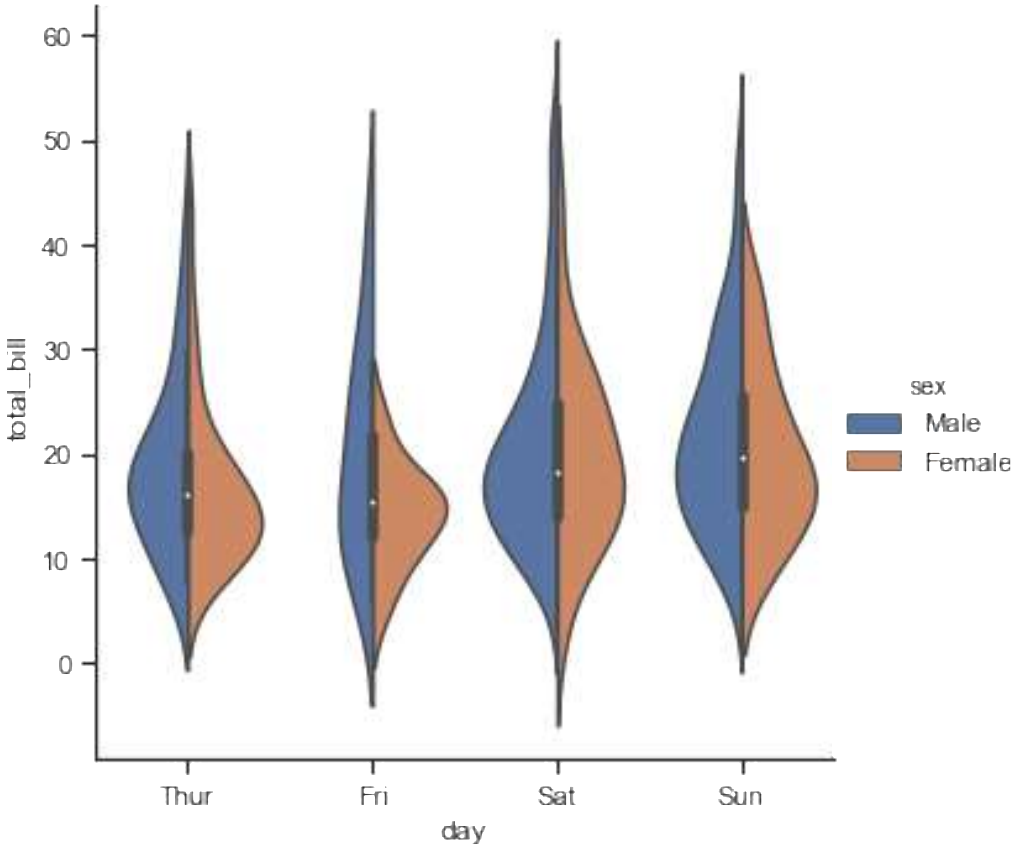


Visualisation : Relation entre deux variables dont une catégorielle

- Boîtes à moustaches et dérivées : comparer les distributions dans les différentes catégories



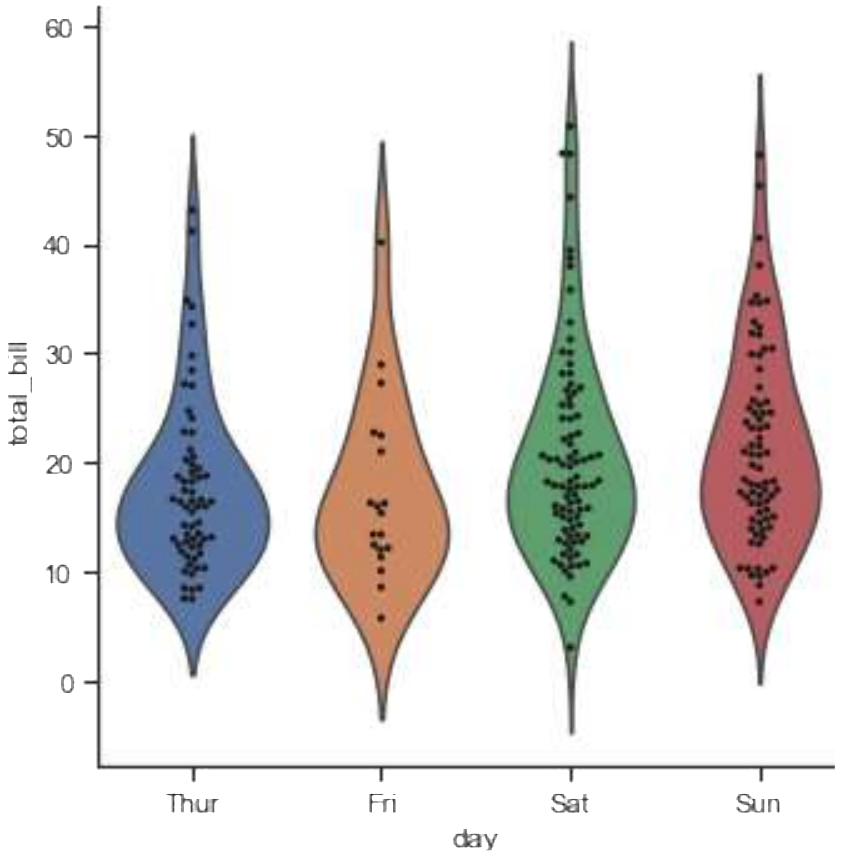
Large de bande (bandwidth bw)
3e variable : couleur (hue)



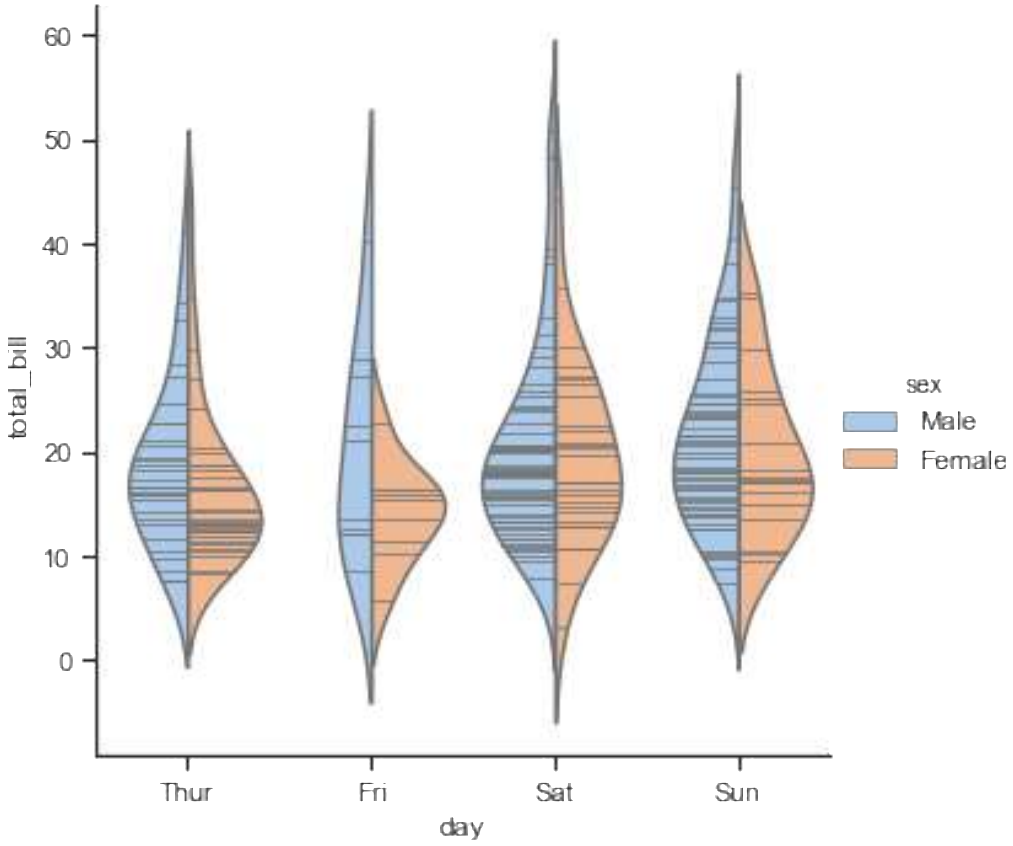
3e variable : couleur (hue, split)

Visualisation : Relation entre deux variables dont une catégorielle

- Boîtes à moustaches et dérivées : comparer les distributions dans les différentes catégories



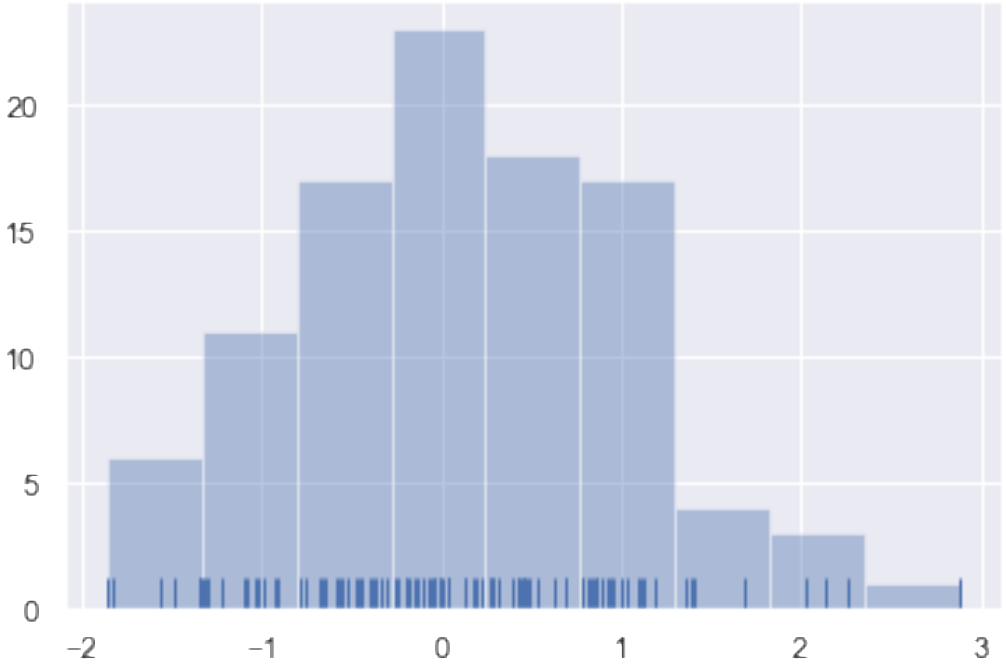
Inner : swarmplot



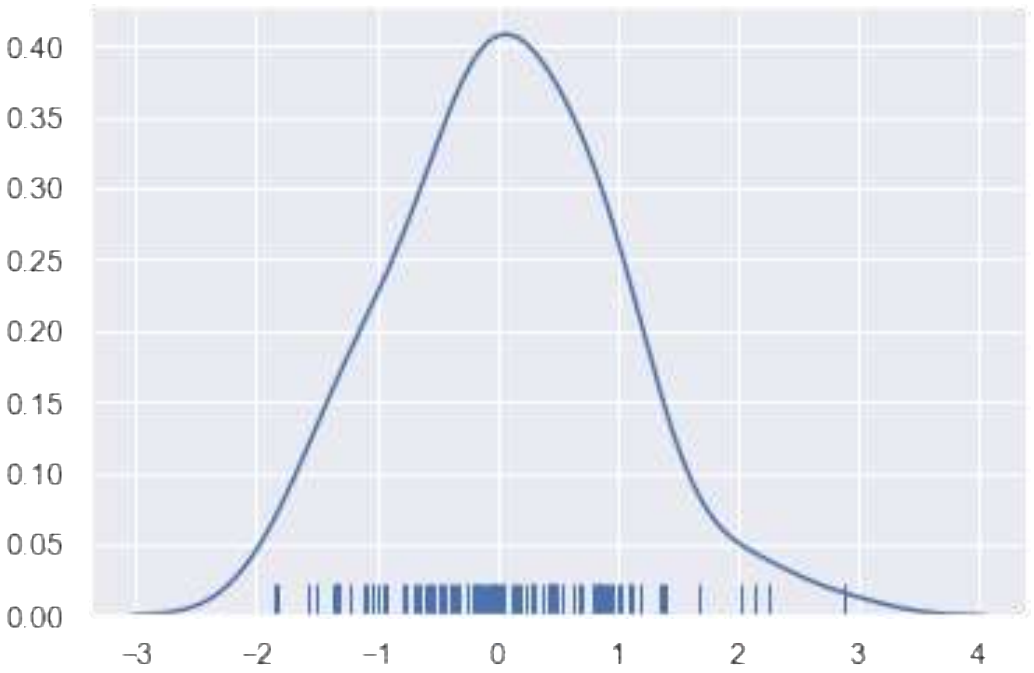
Inner : stick

Visualisation : Distribution univariée et bivariée

- Distribution univariée



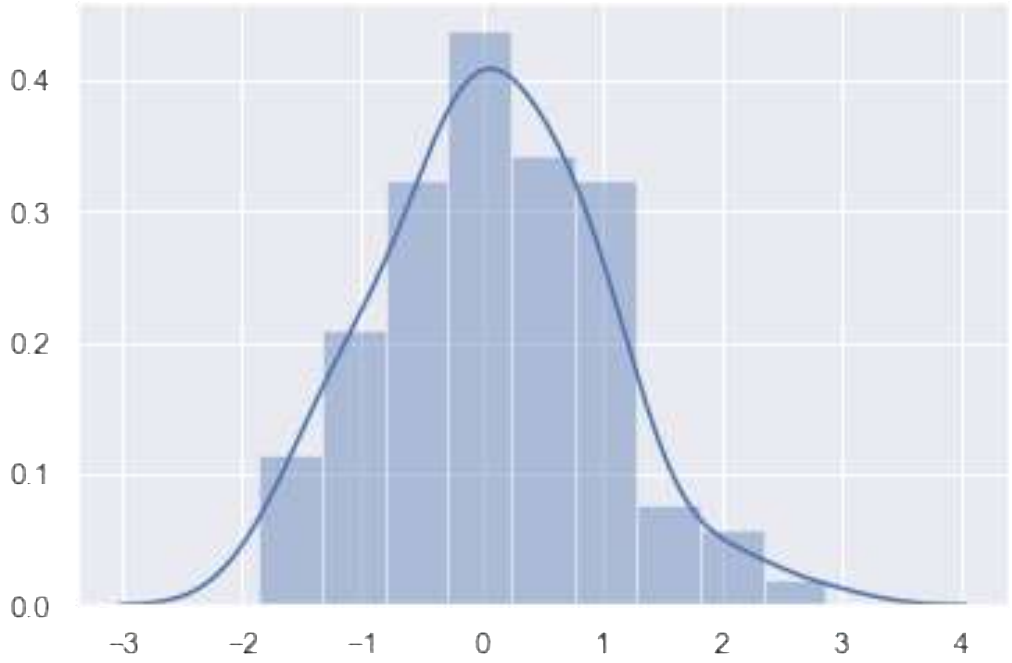
Observation
En histogramme (**hist plot**)



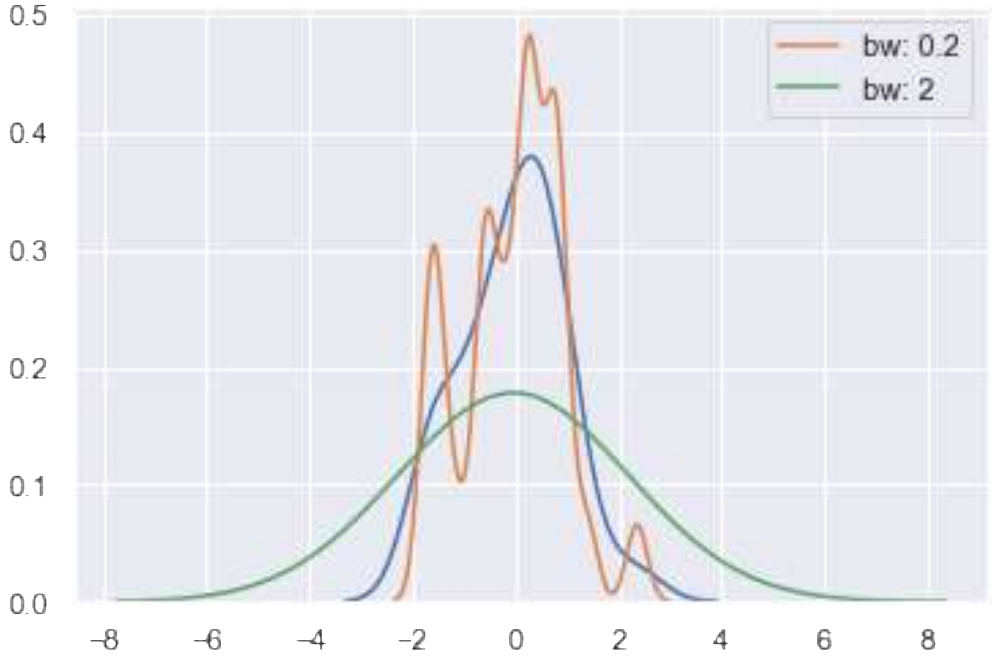
Estimation de distributions
suivant loi normale
En courbe (**kde plot**)

Visualisation : Distribution univariée et bivariée

❑ Distribution univariée



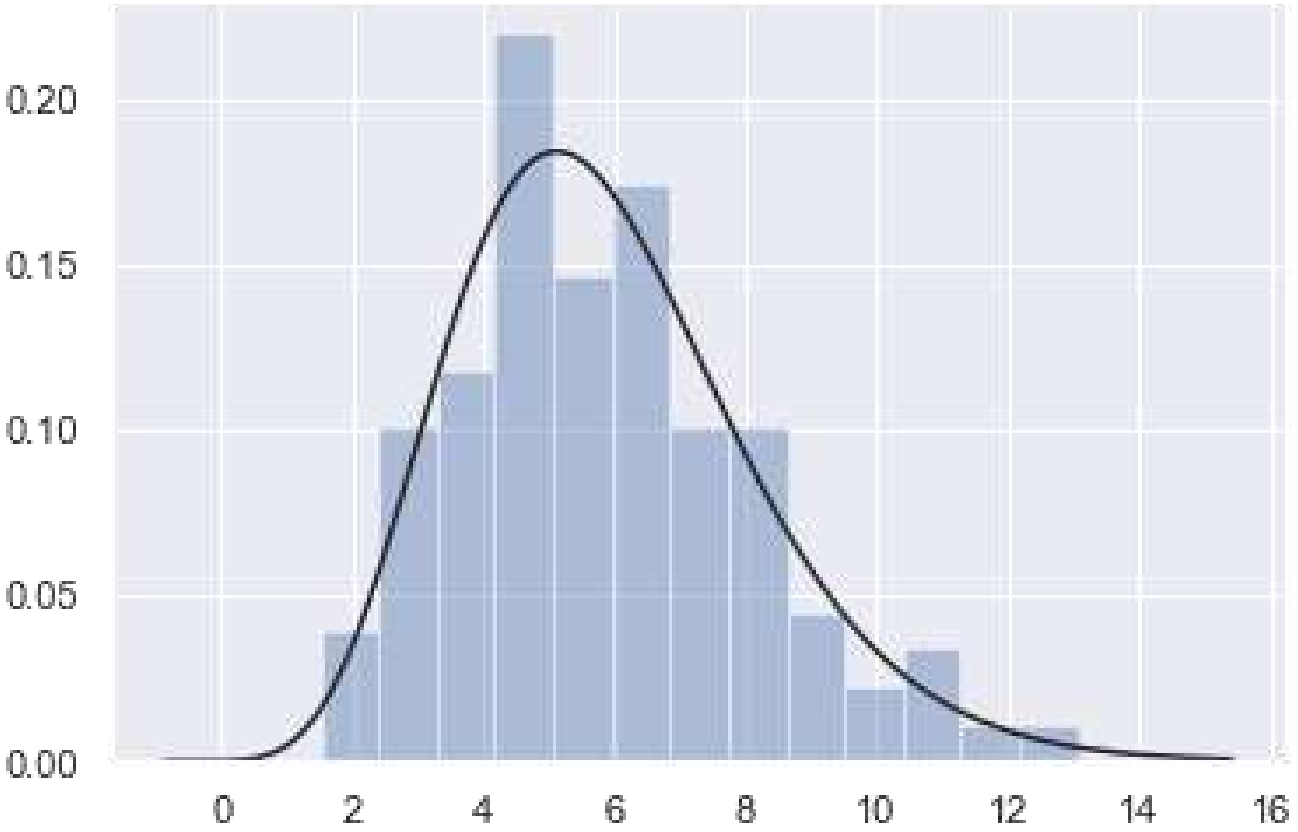
Histogramme + courbe



Large de bande (bandwidth bw)
3e variable : couleur (hue)

Visualisation : Distribution univariée et bivariée

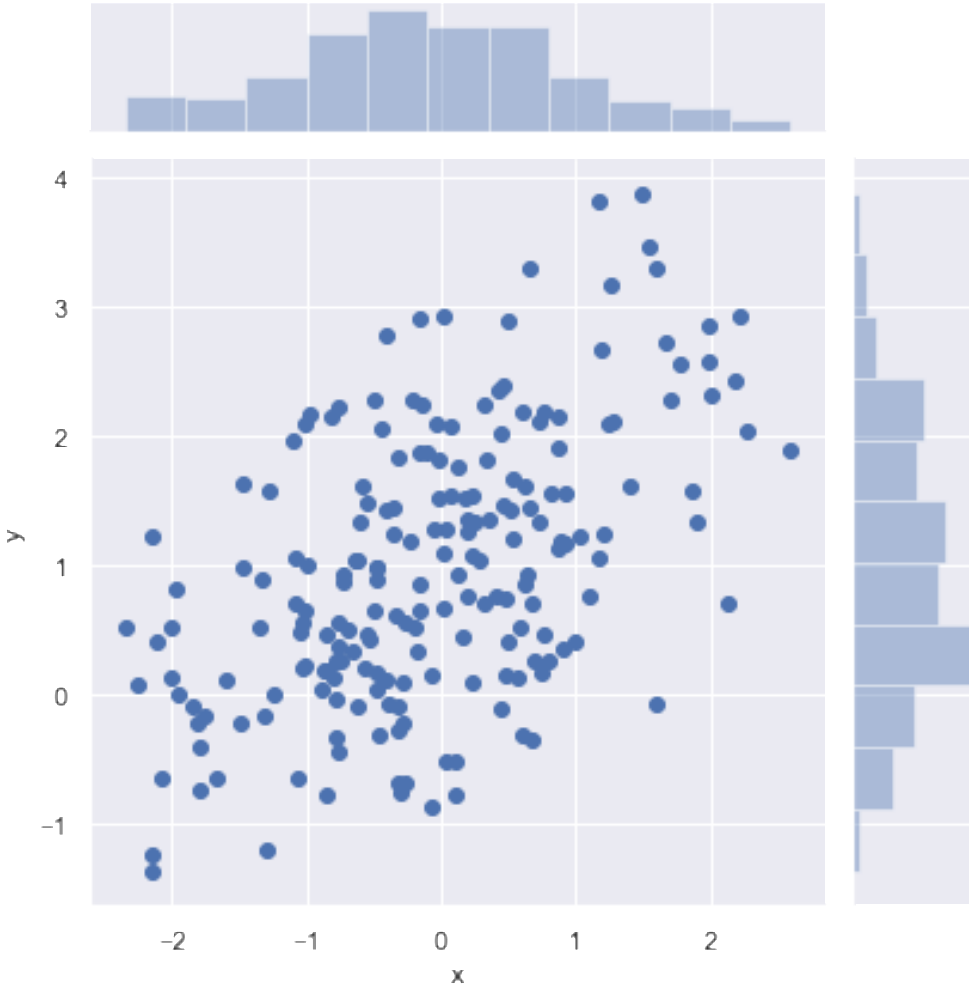
- Distribution univariée



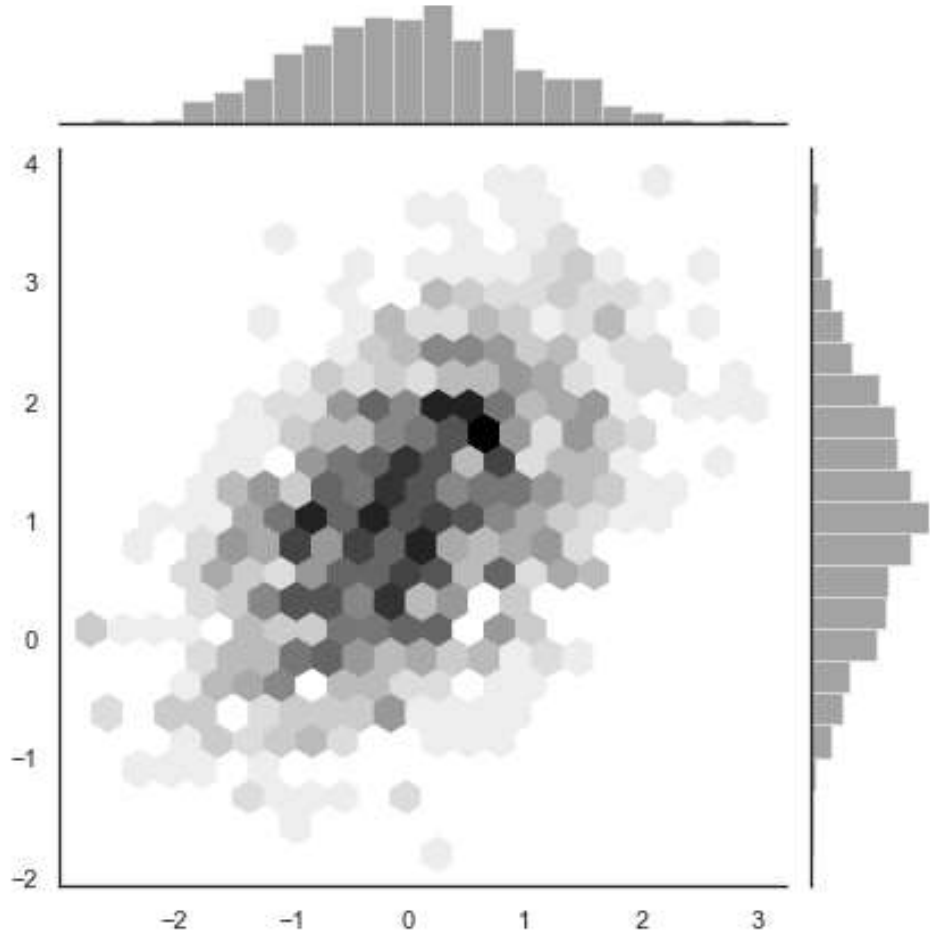
Estimation de distributions
suivant une loi donnée
Ex: loi gamma

Visualisation : Distribution univariée et bivariée

- Distribution bivariée : graphique conjoint bivarié + 2 univarié (**joint plot, joint grid**)



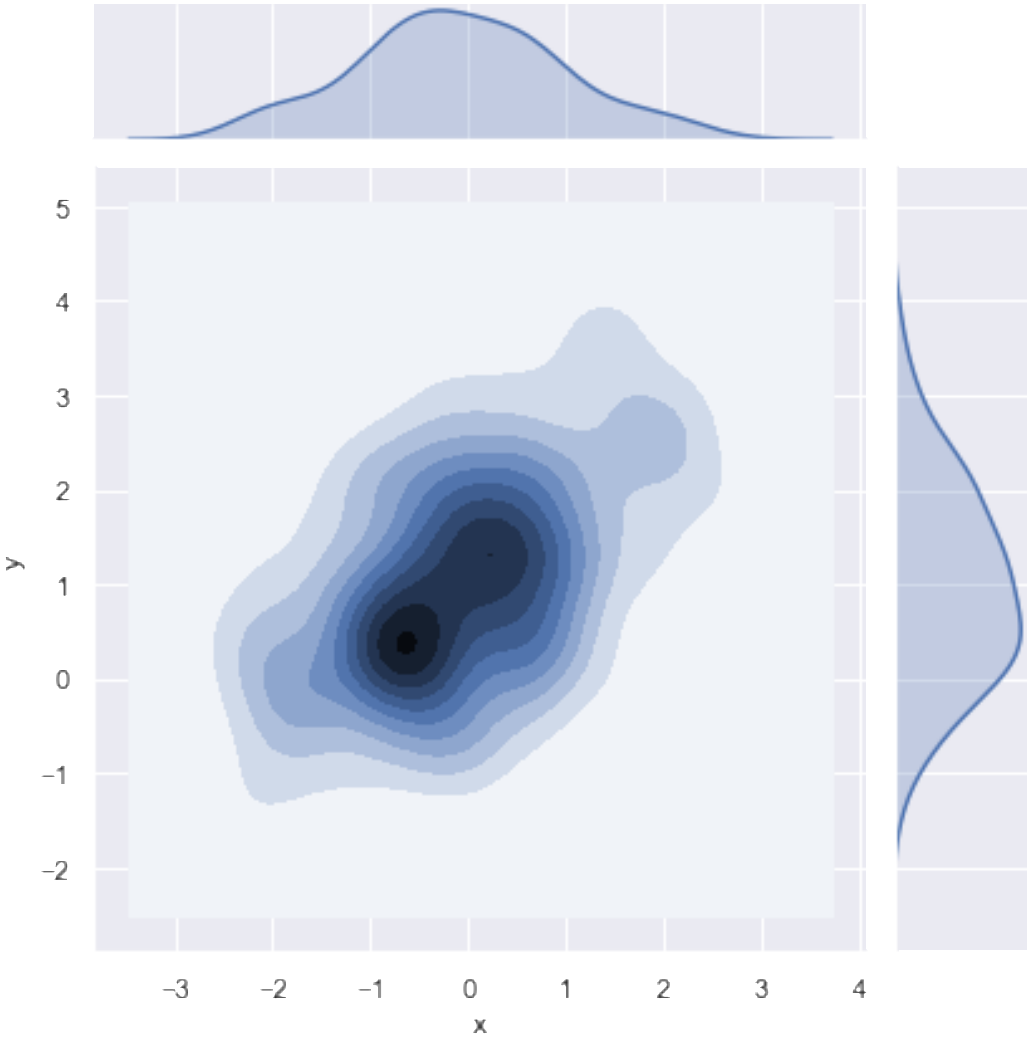
Bivarié (scatter) + univarié (hist)



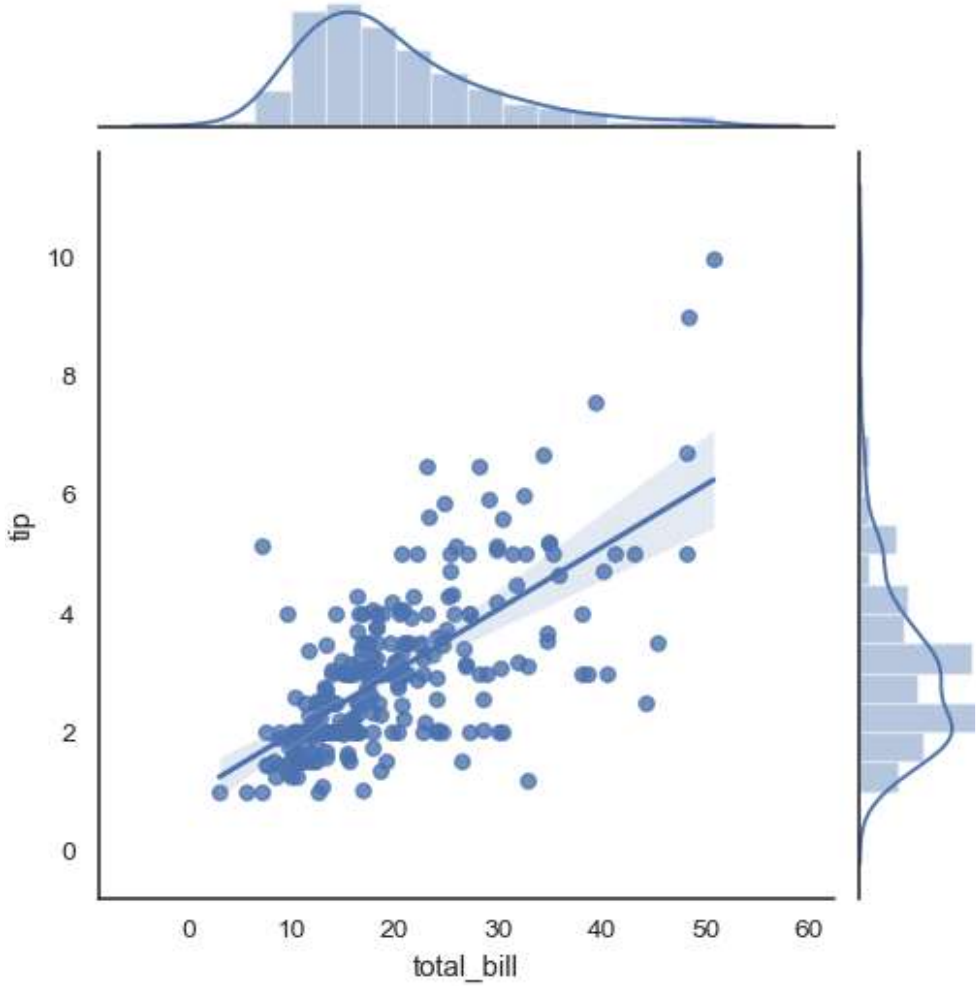
Bivarié hexagone (hex) + univarié (hist)

Visualisation : Distribution univariée et bivariée

- Distribution bivariée : graphique conjoint bivarié + 2 univarié (**joint plot, joint grid**)



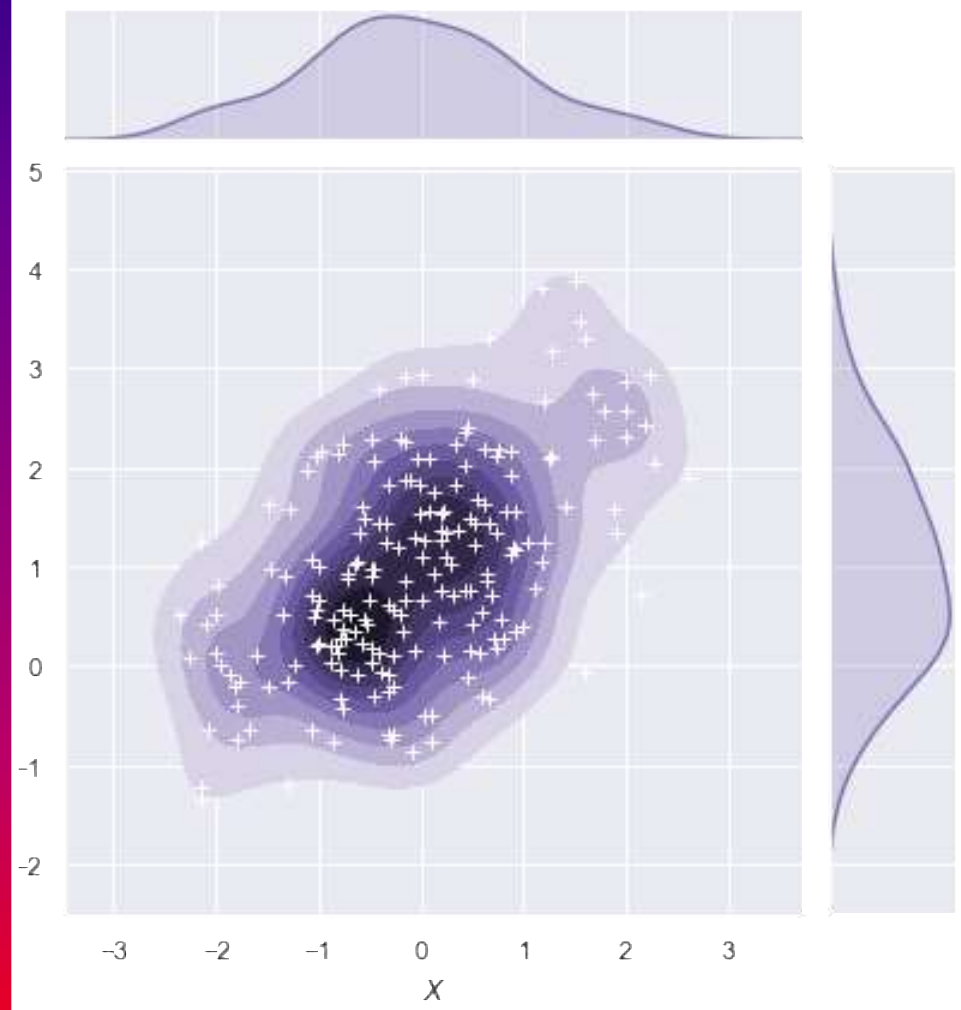
Bivarié (kde) +
univarié (kde)



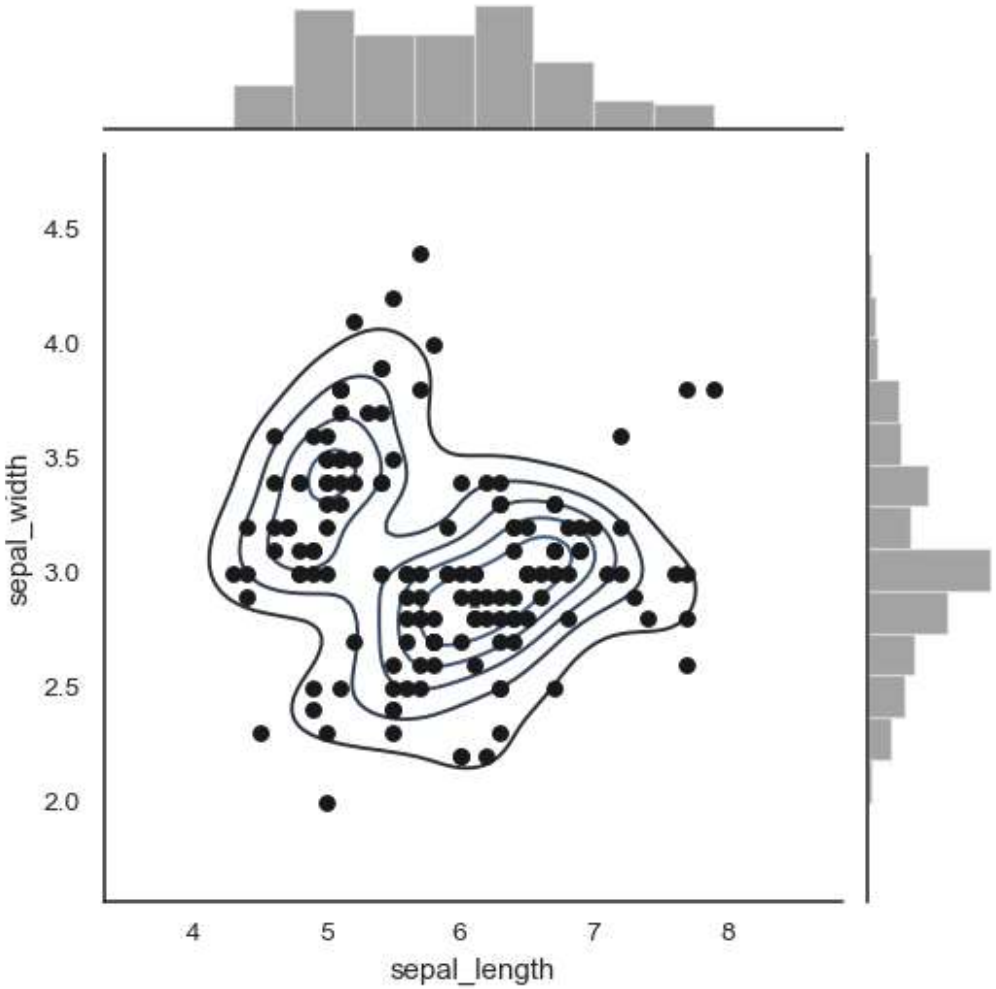
Bivarié : regression (reg) +
univarié (hist + kde)

Visualisation : Distribution univariée et bivariée

- Distribution bivariée : graphique conjoint bivarié + 2 univarié (**joint plot, joint grid**)



Bivarié (kde + scatter) + univarié (kde)



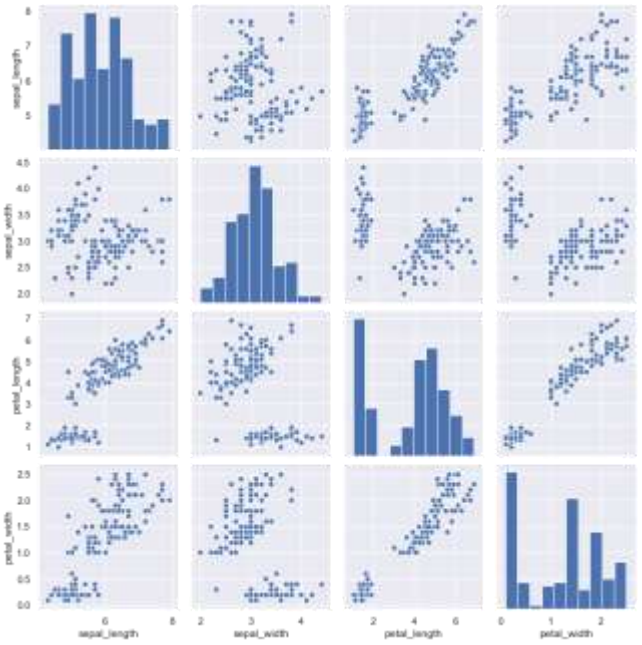
Bivarié : (scatter + kde) + univarié (hist)

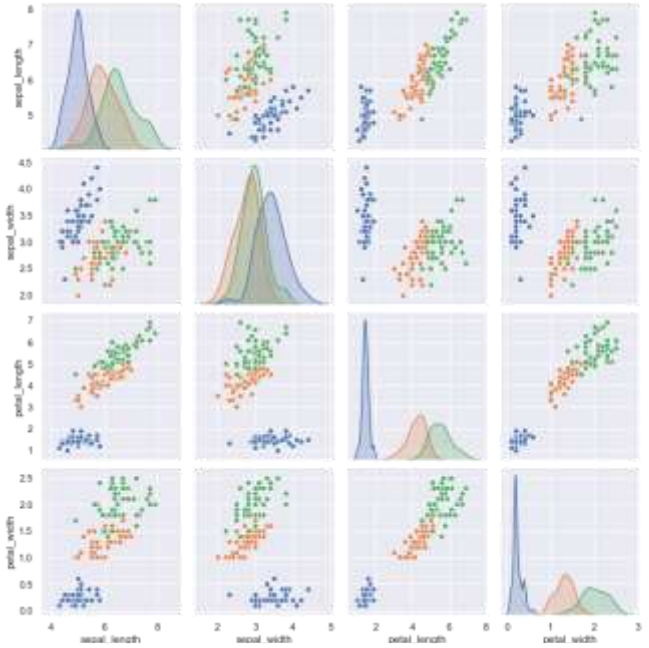
Visualisation : Distributions univariée et bivariée

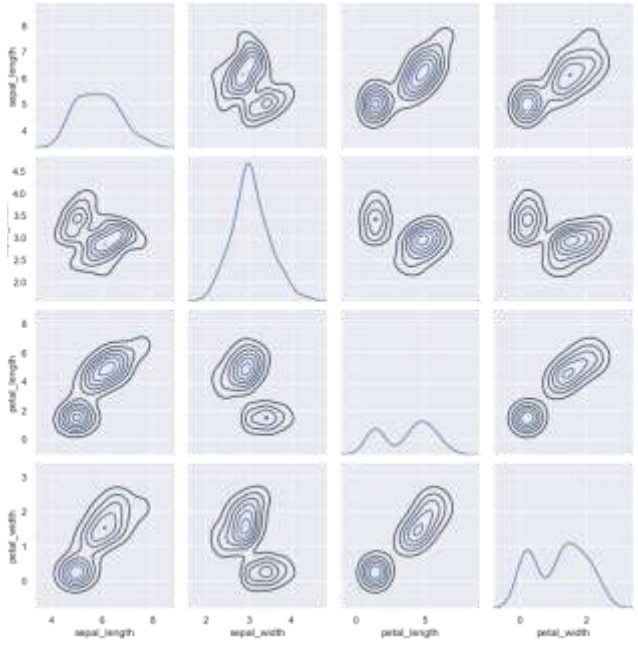
- Distribution bivariée : pour toutes les paires d'attributs (**pair plot, pair grid**)

Case diagonale univarié
(diag_kind : hist, kde)

Autre cas bivarié
(kind : scatter, reg, kde, hex)



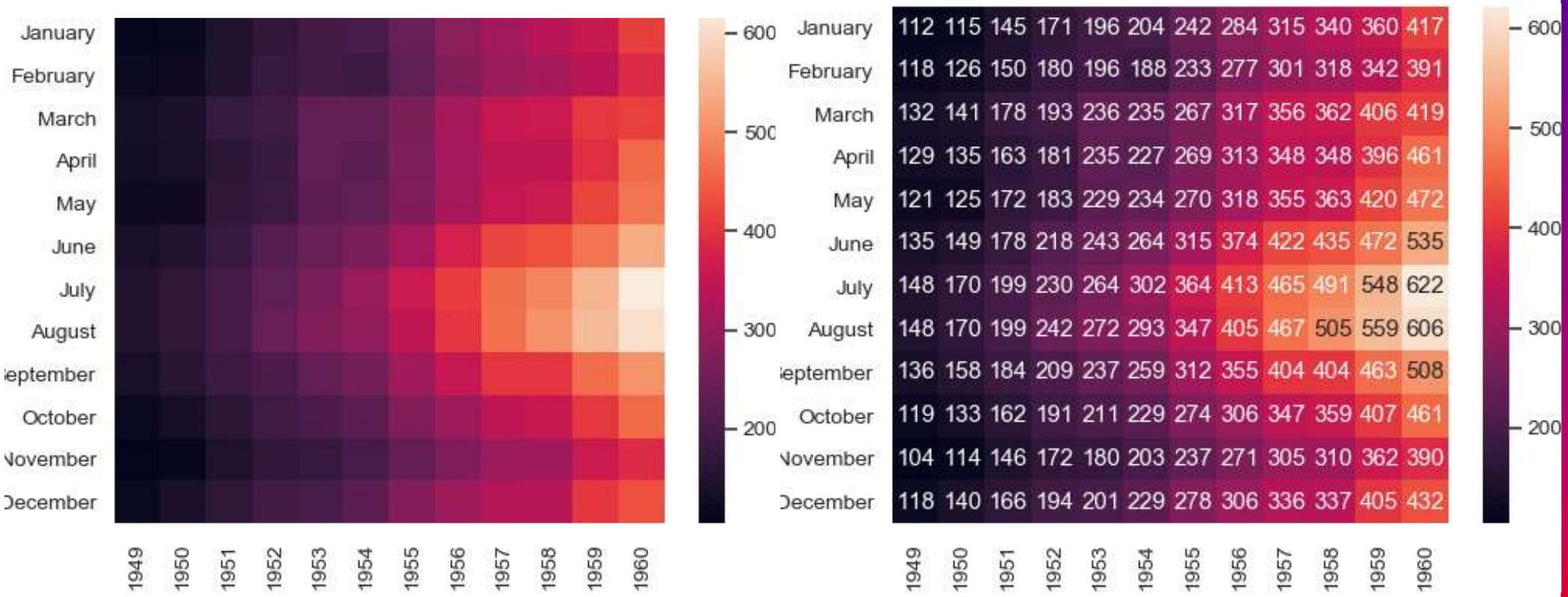




Visualisation : Données rectangulaires

- Matrice de couleurs (**heatmap,clustermap**): valeurs => couleurs

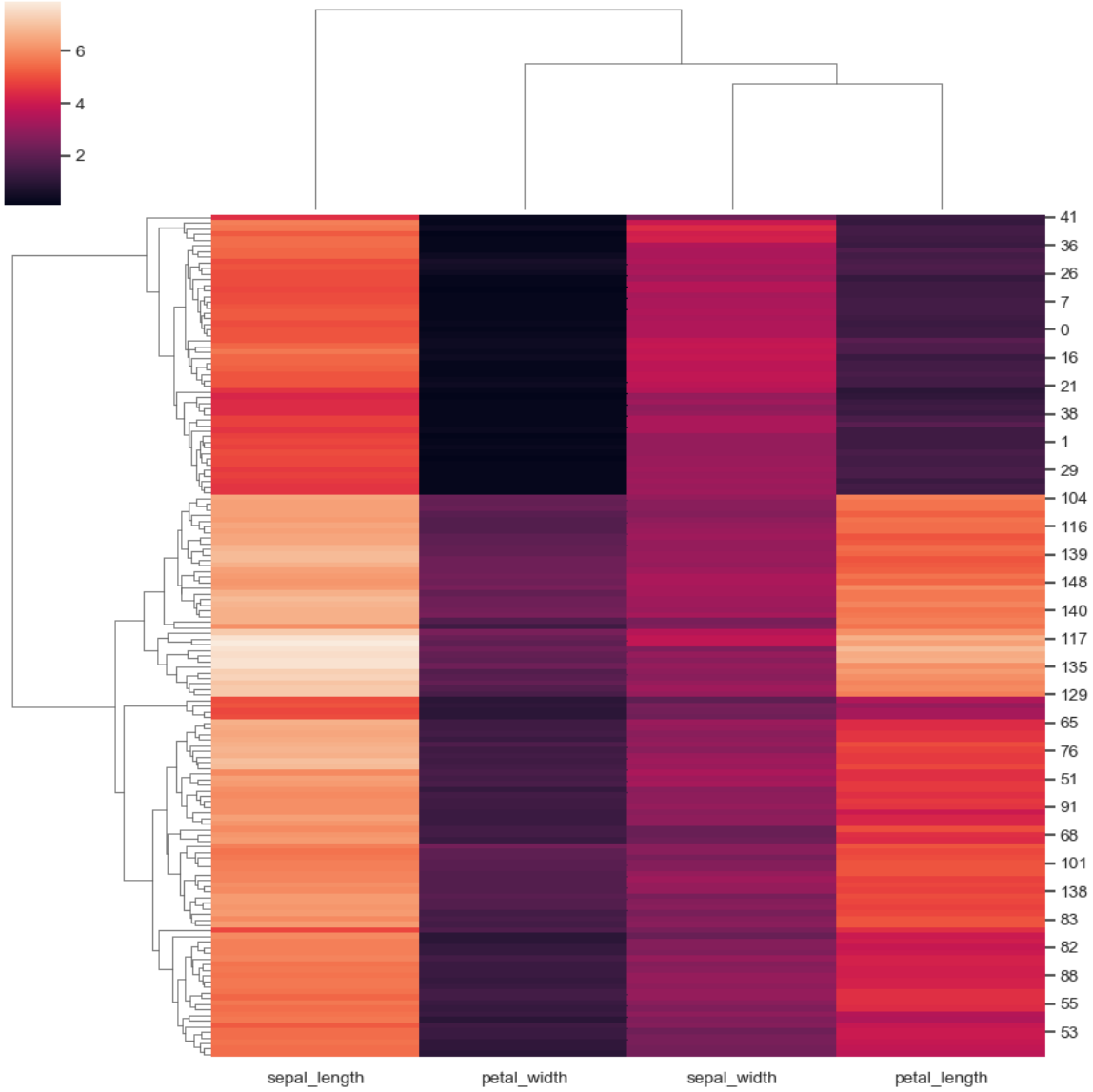
Heatmap



Visualisation : Données rectangulaires

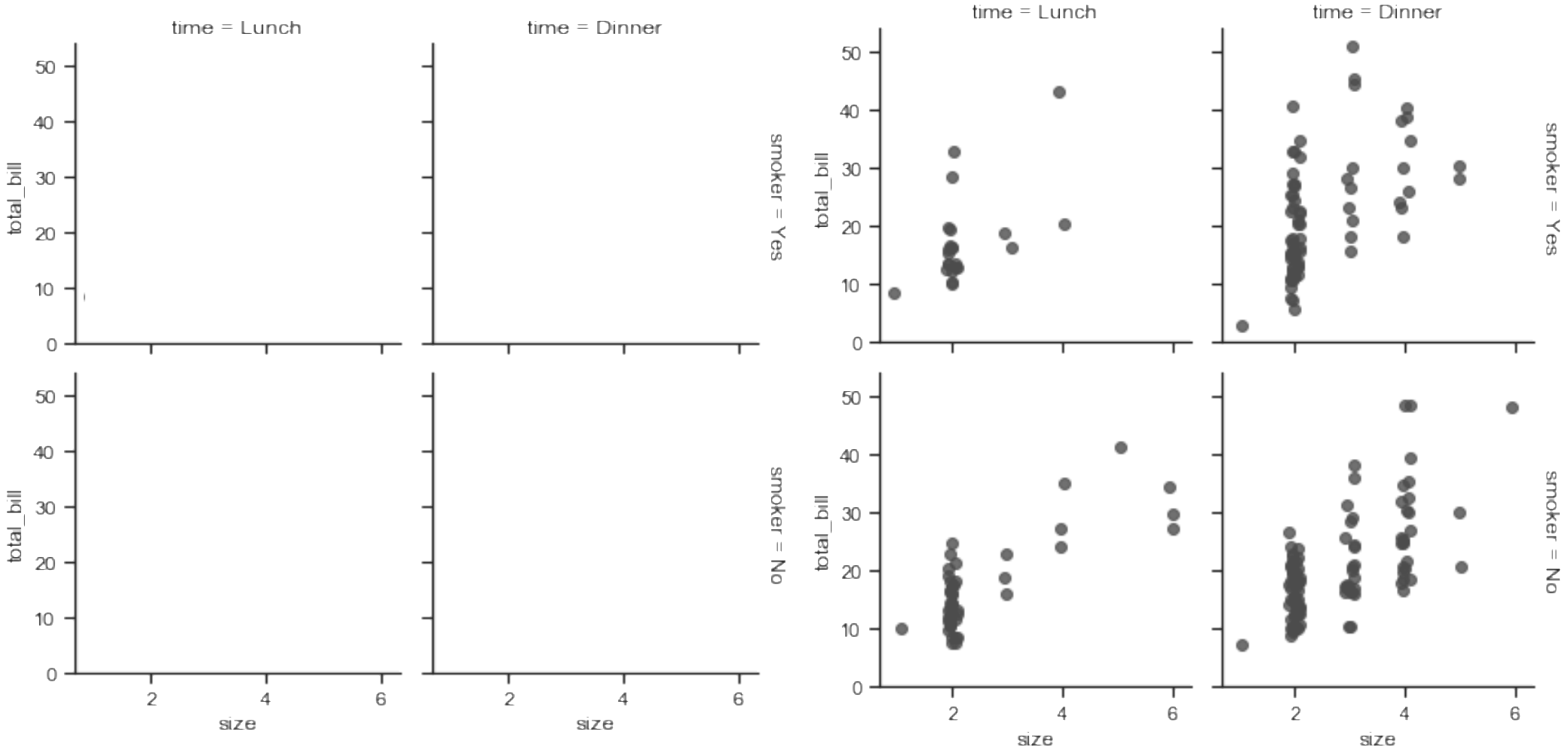
- Matrice de couleurs (**heatmap,clustermap**): valeurs => couleurs

Clustermap: choix de la mesure de distance ou de similarité.



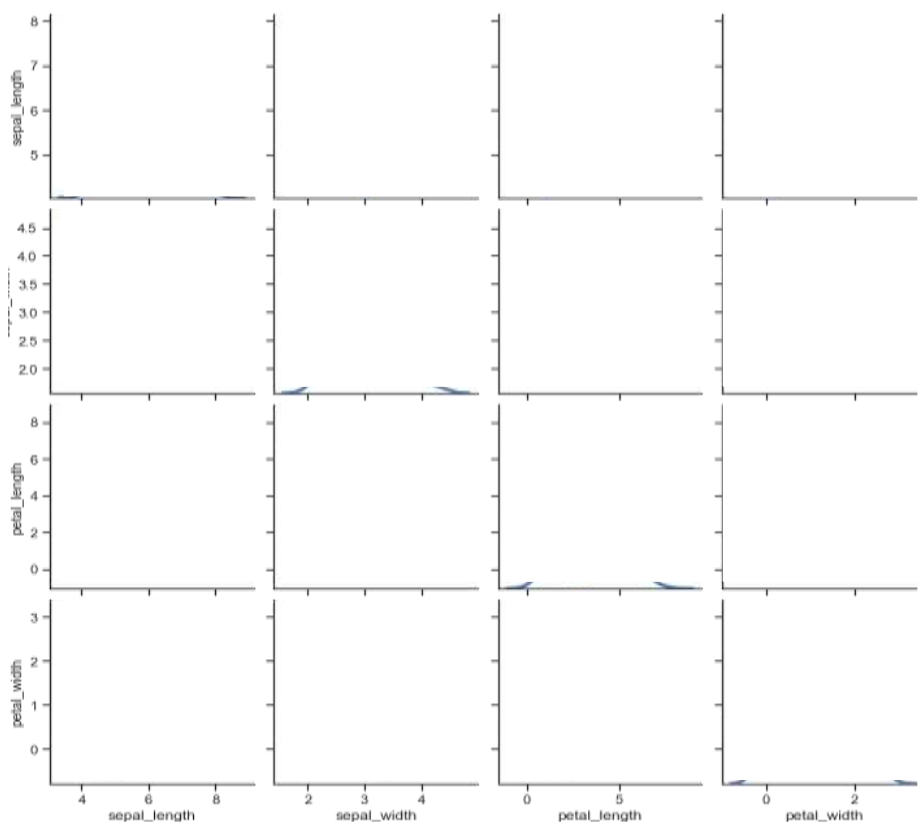
Visualisation : Grille multi-graphique

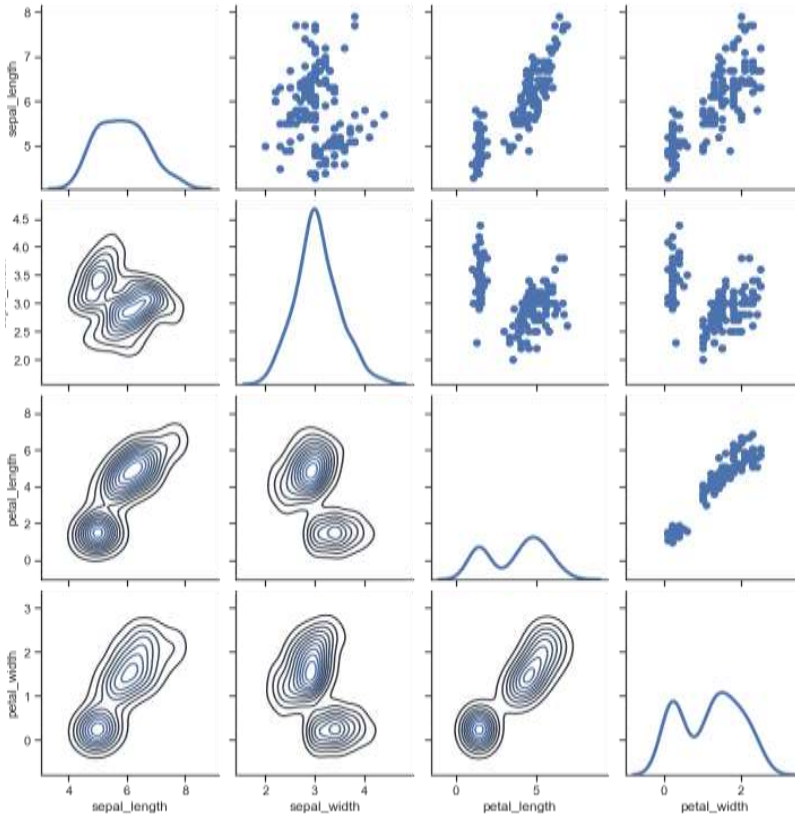
- Groupement suivant deux variables (**FacetGrid**) (row, column)



Visualisation : Grille multi-graphique

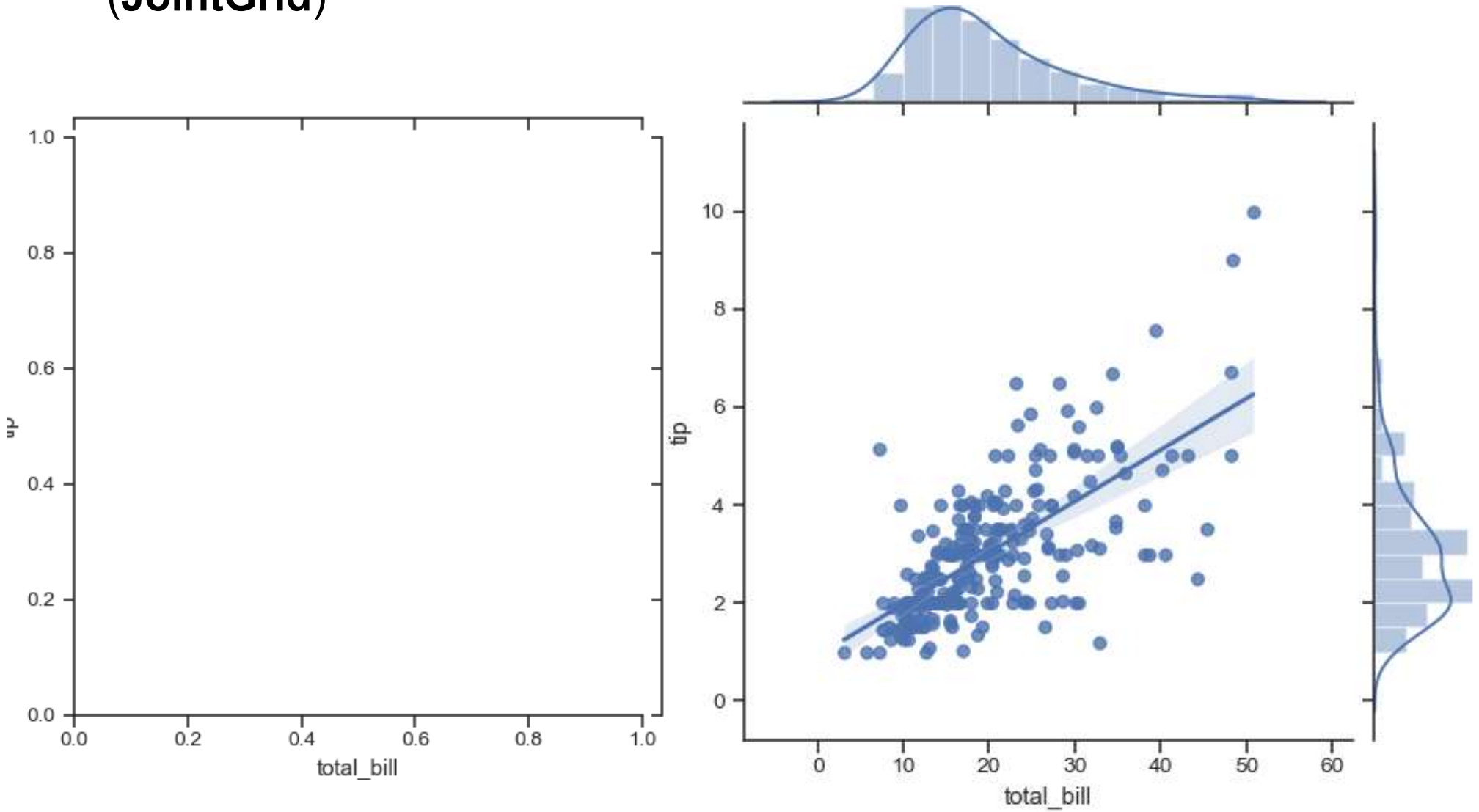
- Grille de relations deux-à-deux entre toutes les variables (**PairGrid**)





Visualisation : Grille multi-graphique

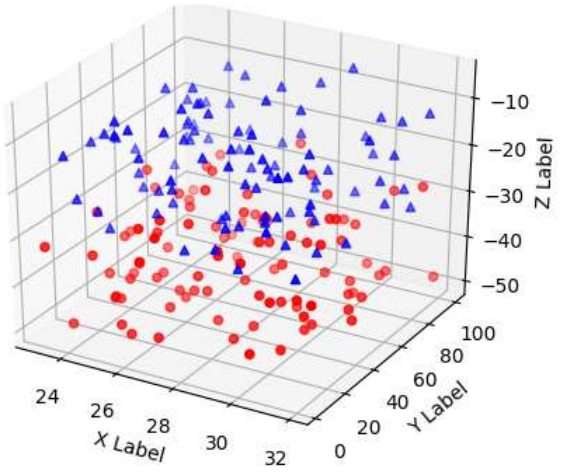
- Relation ou distribution bivariée couplée aux 2 distributions univariées (**JointGrid**)



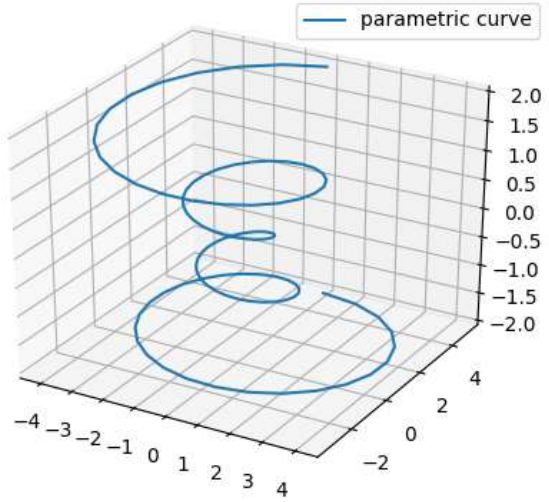
Visualisation : 3D (Matplotlib)

❑ Relation entre 3 variables

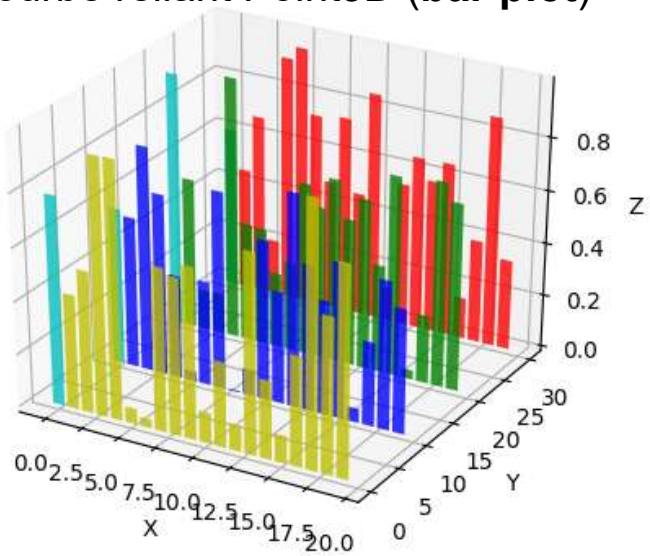
Point3D (**Scatter plot**)



Courbe reliant Point3D (**line plot**)

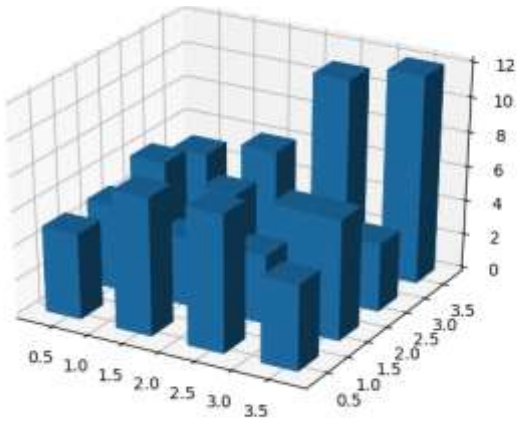


Courbe reliant Point3D (**bar plot**)



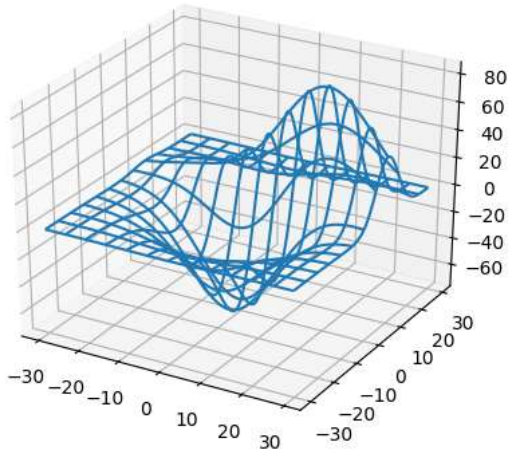
❑ Distribution bi-variée

Histogramme (**hist plot**)



❑ Distribution tri-variée

wireframe plot, surface plot



Mesure de similarité / dissimilarité

- Similarité : mesure de la ressemblance entre deux objets. Plus les objets se ressemble, plus la mesure est élevée.

- Dissimilarité : mesure de la différence entre deux objets. Plus les objets sont différents, plus la mesure est élevée.
  Exemple : distance

Matrice rectangulaire (n x m) de n objets représentés sur k dimensions

$$\begin{bmatrix} x_{11} & \dots & x_{1j} & \dots & x_{1m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{i1} & \dots & x_{ij} & \dots & x_{im} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{n1} & \dots & x_{nj} & \dots & x_{nm} \end{bmatrix}$$

Matrice carré (n x n) symétrique ou triangulaire des distances deux-à-deux

$$\begin{bmatrix} 0 & & & & \\ d_{2,1} & 0 & & & \\ d_{3,1} & d_{3,2} & 0 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \\ d_{n,1} & d_{n,2} & \dots & d_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix}$$

Similarité / dissimilarité entre vecteurs de valeurs catégorielles

- Proportion d'égalités (similarité): $s(x_i, x_j) = \frac{\sum_{k=1}^{m} (x_{ik} = x_{jk})}{m}$

- Proportion de différences (dissimilarité): $d(x_i, x_j) = \frac{\sum_{k=1}^{m} (x_{ik} \neq x_{jk})}{m}$

- Autre méthode : transformer chaque attribut catégoriel à *v* valeurs en *v* attributs binaires, puis appliquer une mesure de similarité ou dissimilarité entre vecteurs binaires.

Similarité / dissimilarité entre vecteurs de valeurs binaires

- Matrice de contingence:

x_i \ x_j	0	1
0	m00	m01
1	m10	m11

m = m00 + m01 + m10 + m11

- Distance pour variables binaires symétriques:

$$d(x_i, x_j) = \frac{m01 + m10}{m}$$

- Distance pour variables binaires asymétriques:

$$d(x_i, x_j) = \frac{m01 + m10}{m01 + m10 + m11}$$

- Coefficient de correspondance simple (SMC) (similarité pour variables binaires symétriques):

$$SMC(x_i, x_j) = \frac{m00 + m11}{m}$$

- Coefficient de Jaccard (similarité pour variables binaires non-symétriques):

$$Jaccard(x_i, x_j) = \frac{m11}{m11 + m01 + m10}$$

Similarité / dissimilarité entre vecteurs de valeurs ordinales

- Pour chaque variable ordinale, remplacer chaque valeur par son rang, puis appliquer une mesure de similarité ou dissimilarité entre vecteurs numériques.

Similarité / dissimilarité entre vecteurs de valeurs numériques

- Distance de Minkowski : $$d(x_i, x_j) = \sqrt[h]{\sum_{k=1}^{m} | x_{ik} - x_{jk} |^h}$$

- Si h = 1 (norme L1) : Distance de Manhattan (Distance de Hamming pour vecteurs binaires)

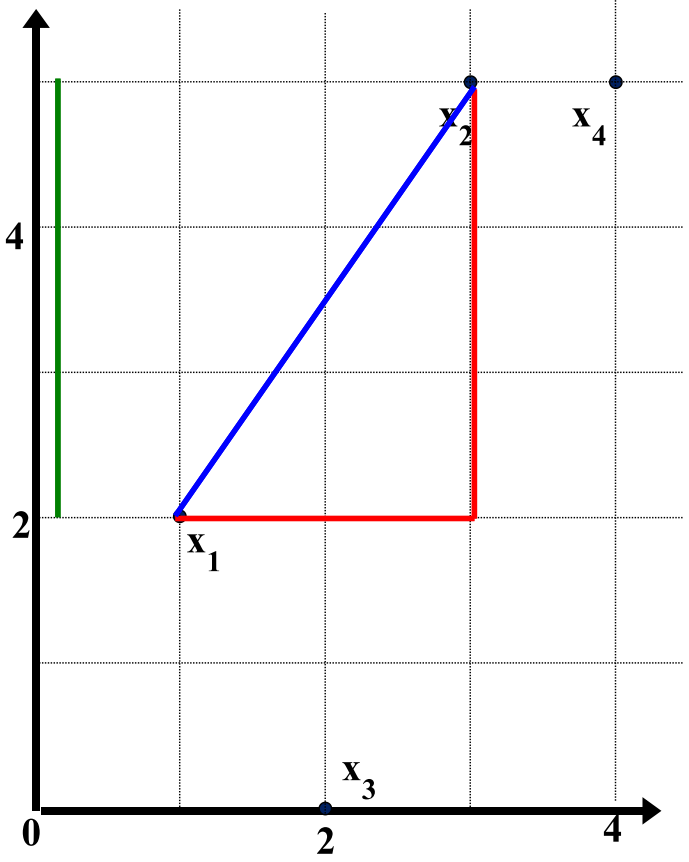
- Si h = 2 (norme L2) : Distance euclidienne

- Si h = infini : Supremum (plus grande différence parmi tous les attributs)

Similarité / dissimilarité entre vecteurs de valeurs numériques

- Distance de Minkowski :

	attribut 1	attribut 2
x1	1	2
x2	3	5
x3	2	0
x4	4	5



Manhattan (L_1)

Matrices de dissimilarité

L	x1	x2	x3	x4
x1	0			
x2	5	0		
x3	3	6	0	
x4	6	1	7	0

Euclidienne (L_2)

L2	x1	x2	x3	x4
x1	0			
x2	3.61	0		
x3	2.24	5.1	0	
x4	4.24	1	5.39	0

Supremum

L_∞	x1	x2	x3	x4
x1	0			
x2	3	0		
x3	2	5	0	
x4	3	1	5	0

Similarité / dissimilarité entre vecteurs de valeurs numériques

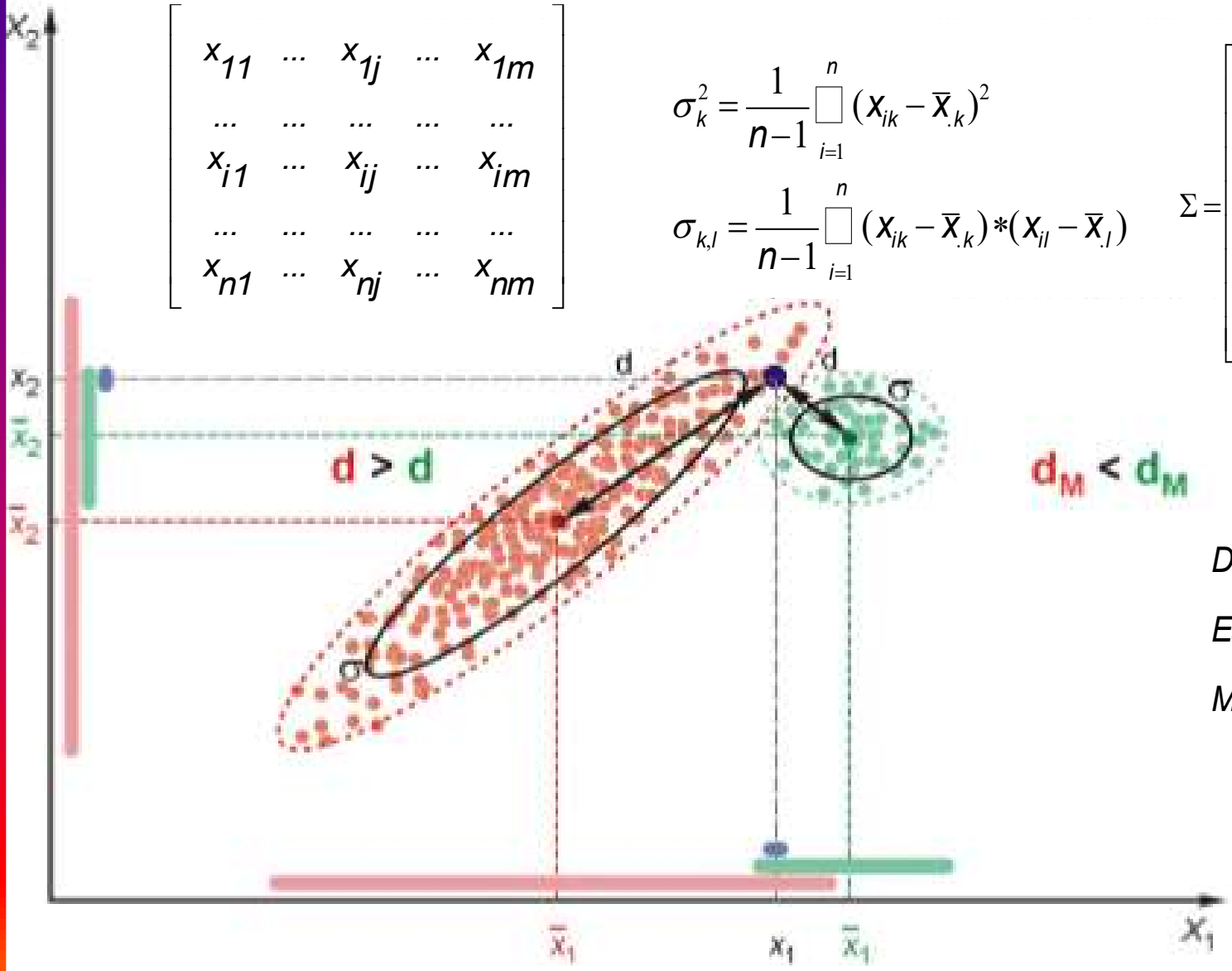
- Distance de Mahalanobis : distance entre deux points en tenant compte de la contribution de différentes variances et des corrélations existant entre elles.

$$\begin{bmatrix} x_{11} & \dots & x_{1j} & \dots & x_{1m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{i1} & \dots & x_{ij} & \dots & x_{im} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{n1} & \dots & x_{nj} & \dots & x_{nm} \end{bmatrix}$$

$$\sigma_k^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_{ik} - \bar{x}_{.k})^2$$

$$\sigma_{k,l} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_{ik} - \bar{x}_{.k}) * (x_{il} - \bar{x}_{.l})$$

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{2,1} & \sigma_{3,1} & \dots & \sigma_{m,1} \\ \sigma_{2,1} & \sigma_2^2 & \sigma_{3,2} & \dots & \sigma_{m,2} \\ \sigma_{3,1} & \sigma_{3,2} & \sigma_3^2 & \dots & \sigma_{m,3} \\ : & : & : & : & : \\ \sigma_{m,1} & \sigma_{m,2} & \dots & \sigma_{m,m-1} & \sigma_m^2 \end{bmatrix}$$



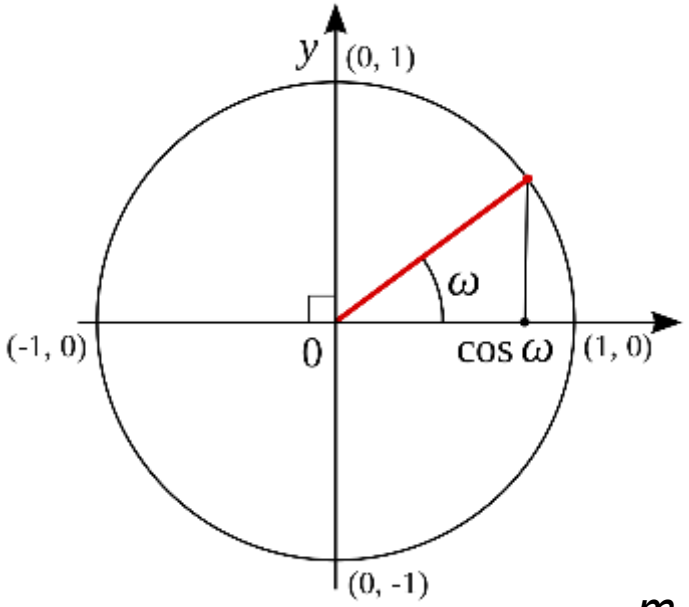
$$D = x_i - x_j$$

$$\text{Euclidienne} : d(x_i, x_j) = \sqrt{D^t . D}$$

$$\text{Mahalanobis} : d_m(x_i, x_j) = \sqrt{D^t . \Sigma^{-1} . D}$$

Similarité / dissimilarité entre vecteurs de valeurs numériques

- Similarité de Cosinus : cosinus de l'angle entre les vecteurs x_i et x_j
  Compare uniquement l'orientation des deux vecteurs

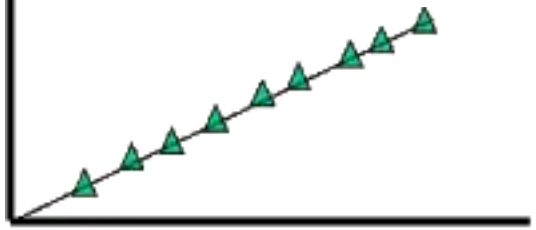


$$\cos(x_i, x_j) = \frac{x_i \square x_j}{\| x_i \| * \| x_j \|} = \frac{\sum_{k=1}^{m} x_{ik} * x_{jk}}{\sqrt{\sum_{k=1}^{m} x_{ik}^2} * \sqrt{\sum_{k=1}^{m} x_{jk}^2}}$$

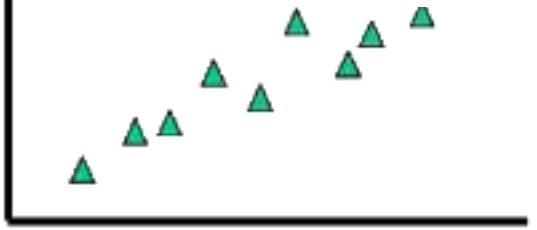
Similarité / dissimilarité entre vecteurs de valeurs numériques

- Coefficient de corrélation :

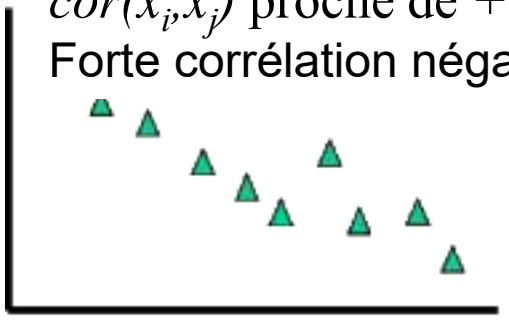
$cor(x_i,x_j) = +1$
Parfaite corrélation positive



$cor(x_i,x_j)$ proche de $+1$
Forte corrélaton positive

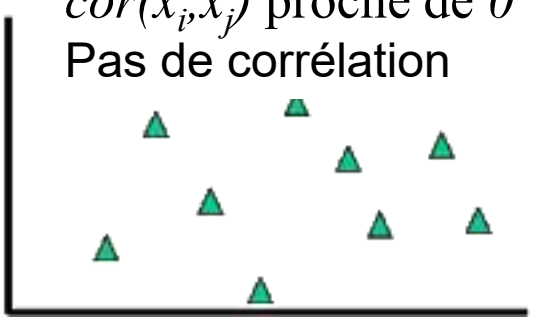


$cor(x_i,x_j)$ proche de $+1$
Forte corrélation négative



m

$cor(x_i,x_j)$ proche de 0
Pas de corrélation



$$cor(x_i, x_j) = \frac{\sum_{k=1}^{m} (x_{ik} - \bar{x}_{i.}) * (x_{jk} - \bar{x}_{j.})}{\sqrt{\sum_{k=1}^{m} (x_{ik} - \bar{x}_{i.})^2} * \sqrt{\sum_{k=1}^{m} (x_{jk} - \bar{x}_{j.})^2}}$$

Références

[1] PEDREGOSA et al. : *Scikit-learn : Machine Learning in Python*. JMLR 12, pp. 2825-2830. (User guide and API : https ://scikit-learn.org/stable/), 2011.

[2] Jiawei HAN, Micheline KAMBER, Jian PEI. *DataMining: Concepts and Techniques (Third edition)*. Morgan Kaufmann Publishers Inc., San Francisco, CA, USA, 2011.