Un modèle Bayésien de co-clustering de données mixtes

Aichetou Bouchareb[*,**], Marc Boullé[*], Fabrice Rossi[**], Fabrice Clérot[*]

[*]Orange Labs :
prenom.nom@orange.com
[**]SAMM EA 4534 - Université Paris 1 Panthéon-Sorbonne :
prenom.nom@univ-paris1.fr

Résumé. Nous proposons un modèle de co-clustering de données mixtes et un critère Bayésien de sélection du meilleur modèle. Le modèle infère automatiquement les discrétisations optimales de toutes les variables et effectue un co-clustering en minimisant un critère Bayésien de sélection de modèle. Un avantage de cette approche est qu'elle ne nécessite aucun paramètre utilisateur. De plus, le critère proposé mesure de façon exacte la qualité d'un modèle tout en étant régularisé. L'optimisation de ce critère permet donc d'améliorer continuellement les modèles trouvés sans pour autant sur-apprendre les données. Les expériences réalisées sur des données réelles montrent l'intérêt de cette approche pour l'analyse exploratoire des grandes bases de données.

1 Introduction

Dans un monde où les technologies d'acquisition de données sont en croissance rapide, l'analyse exploratoire des bases de données hétérogènes et de grandes tailles reste un domaine peu étudié. Une technique fondamentale de l'analyse non supervisée est celle du clustering, dont l'objectif est de découvrir la structure sous-jacente des données en regroupant les individus *similaires* dans des groupes homogènes. Cependant, dans de nombreux contextes d'analyse exploratoire de données, cette technique de regroupement d'objets reste insuffisante pour découvrir les motifs les plus pertinents. Le co-clustering (Hartigan, 1975), apparu comme extension du clustering, est une technique non-supervisée dont l'objectif est regrouper conjointement les deux dimensions de la même table de données, en profitant de l'interdépendance entre les deux entités (individus et variables) représentées par ces deux dimensions pour extraire la structure sous-jacente des données. Cette technique est la plus adaptée, par example, dans des contextes comme l'analyse des paniers de consommation où l'objectif est d'identifier les sous-ensembles de clients ayant tendance à acheter les mêmes de produits, plutôt que de grouper simplement les clients (ou les produits) en fonction des modèles d'achat/vente.

Dans la littérature, plusieurs approches de co-clustering ont été développées. En particulier, certains algorithmes de co-clustering proposent d'optimiser une fonction qui mesure l'écart entre la matrice de données et la matrice de co-clusters (Cheng et Church, 2000). D'autres techniques sont basées sur la théorie de l'information (Dhillon et al. (2003)), sur les modèles de mélange pour définir des modèles de blocs latents (Govaert et Nadif, 2008), sur l'estimation Bayésienne des paramètres (Shan et Banerjee (2008)), sur l'approximation matricielle (Lee et

Seung, 2011), ou sur le partitionnement des graphes (Dhillon, 2001). Cependant, ces méthodes s'appliquent naturellement sur des données de même type.

Dans Bouchareb et al. (2017), nous avons proposé une méthodologie permettant d'étendre l'utilisation du co-clustering au cas d'une table de données contenant des variables numériques et catégorielles simultanément. L'approche est basée sur une discrétisation de toutes les variables en fréquences égales, suivant un paramètre utilisateur, suivi par l'application d'une méthode de co-clustering sur les données discretisées. Dans ce papier, nous proposons une nouvelle famille de modèles permettant de formaliser cette méthodologie. Le modèle proposé ici ne nécessite aucun paramètre utilisateur et permet une inférence automatique des discrétisations optimales des variables selon une approche regularisée, par opposition à la discrétisation définie par l'utilisateur proposée par Bouchareb et al. (2017). Un nouveau critère, mesurant la capacité du modèle à représenter les données, et de nouveaux algorithmes sont présentés.

Le reste de ce papier est organisé comme suit. En section 2, nous présentons le modèle proposé, le critère de sélection et la stratégie d'optimisation implémentée. La section 3 présente des résultats expérimentaux sur des données réelles, et la section 4 conclusion et perspectives.

2 Un modèle de co-clustering de données mixtes

Avant de présenter le modèle proposé, décrivons les données telles qu'elles sont vues par notre modèle. Les données sont composées d'un ensemble d'instances (identifiants de ligne de la matrice) et un ensemble de variables pouvant être numériques ou catégorielles. Nous définissons la notion d'une observation qui représente un 'log' d'une interaction entre une instance et une variable. Cette représentation nous permet de considérer le cas des valeurs manquantes dans les données mais aussi le cas de plusieurs observations par couple (instance, variable) comme dans les séries temporelles. Un example simple, illustrant cette représentation, est donné par :

$$\begin{array}{c} \\ i_1 \rightarrow \\ i_2 \rightarrow \\ i_3 \rightarrow \\ i_4 \rightarrow \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 & X_5 \end{array} \\ \begin{bmatrix} 0 & -1 & . & \{b,a\} & A \\ 3 & \{0.2,1,0\} & 0 & b & B \\ 2 & . & 5 & \{a,c\} & A \\ . & 1 & 22 & c & C \end{bmatrix} \end{array}$$

Cet example contient 4 instances ($i_1, \ldots, i_4$), 3 variables numériques (X_1, X_2, X_3), 2 variables catégorielles (X_4, X_5) et un total de 21 observations.

2.1 Les paramètres du modèle

Le modèle de co-clustering est défini par une hiérarchie des paramètres. A chaque étage de la hiérarchie, les paramètres sont choisis en fonction des paramètres précédents.

Définition 1. *Le modèle de co-clustering des données mixtes est défini par :*

- *la taille de la partition de chaque variable. Une partition est un regroupement des valeurs dans le cas d'une variable catégorielle et une discrétisation en intervalles dans le cas d'une variable numérique,*
- *la partition des valeurs de chaque variable catégorielle en groupes de valeurs,*
- *le nombre de clusters d'instances et de clusters de parties de variables. Ces choix définissent la taille de la matrice des co-clusters,*

— *la partition des instances et des parties de variables selon le nombre de clusters choisi,*
— *la distribution des observations sur les cellules de la matrice des co-clusters,*
— *la distribution des observations associées à chaque cluster d'instances (resp. parties de variables) sur l'ensemble des instances (resp. parties de variables) dans le cluster,*
— *la distribution des observations dans chaque partie de variable catégorielle sur l'ensemble des valeurs dans la partie.*

Notations. Pour formaliser ce modèle, nous considérons les notations suivantes :

- N : le nombre total d'observations (connu),
- K_n : le nombre de variables numériques (connu),
- K_c : le nombre de variables catégorielles (connu). $\mathbf{X}_c$ l'ensemble de ces variables,
- V_k : le nombre de valeurs uniques de la variable catégorielle X_k (connu),
- J_k : le nombre de parties de la variable X_k (**inconnu**),
- I : le nombre total d'instances (connu),
- $J = \sum_k J_k$: le nombre total de parties de variables (déduit),
- G_u : le nombre de clusters d'instances (**inconnu**),
- G_p : le nombre de clusters de parties de variables (**inconnu**),
- $G = G_u \times G_p$: le nombre de co-clusters (déduit),
- N_{g_u,g_p} : le nombre d'observations dans le co-cluster formé par le cluster d'instances g_u et le cluster de parties de variables g_p (**inconnu**),
- $N_{g_u}^{(u)}$: le nombre d'observations dans le cluster d'instances g_u (déduit),
- $N_{g_p}^{(p)}$: nombre d'observations dans le cluster de parties de variables g_p (déduit),
- $m_{g_u}^{(u)}$: le nombre d'instances dans le cluster d'instances g_u (déduit),
- $m_{g_p}^{(p)}$: le nombre de parties dans le cluster de parties de variables g_p (déduit),
- $m_{j_k}^{(k)}$: le nombre de valeurs dans la partie j_k de la variable X_k (déduit)
- $n_{i.}$: le nombre d'observations associées à la $i^{ème}$ instance (**inconnu**),
- $n_{.kj_k}$: le nombre d'observations associées à la partie j_k de la variable X_k (**inconnu**)
- n_{v_k} : le nombre d'observations associées à la valeur v_k de la variable catégorielle X_k (**inconnu**)

Un modèle de la définition 1 est complètement défini par le choix des paramètres ci-dessus notés **inconnu**.

2.2 Le critère Bayésien de sélection du meilleur modèle

Nous faisons l'hypothèse d'une distribution a priori des paramètres la moins informative possible, en exploitant la hiérarchie des paramètres avec un a priori uniforme à chaque niveau.

Étant donné les paramètres, la vraisemblance conditionnelle $P(\mathcal{D}|\mathcal{M})$ des données sachant le modèle peut être définie par une distribution multinomiale sur chaque niveau de la hiérarchie. Le produit de la probabilité a priori du modèle et de la vraisemblance, permet de calculer de manière exacte la probabilité a posteriori du modèle connaissant les données $P(\mathcal{M}|\mathcal{D})$. A partir de cette probabilité, nous définissons un critère de sélection de modèle $\mathcal{C}(\mathcal{M}) = -\log P(\mathcal{M}|\mathcal{D})$, donné par théorème 1.

Théorème 1. *Parmi les modèles définis en définition 1, un modèle suivant un a priori hiérarchique uniforme est optimal s'il minimise le critère :*

$$\begin{aligned}
\mathcal{C}(\mathcal{M}) = & \sum_{X_k \in \mathbf{X}_c} \log V_k + K_n \log N + \sum_{X_k \in \mathbf{X}_c} \log B(V_k, J_k) + \log I + \log J \\
& + \log B(I, G_u) + \log B(J, G_p) + \log \binom{N+G-1}{G-1} + \sum_{g_u=1}^{G_u} \log \binom{N_{g_u}^{(u)} + m_{g_u}^{(u)} - 1}{m_{g_u}^{(u)} - 1} \\
& + \sum_{g_p=1}^{G_p} \log \binom{N_{g_p}^{(p)} + m_{g_p}^{(p)} - 1}{m_{g_p}^{(p)} - 1} + \sum_{X_k \in \mathbf{X}_c} \sum_{j_k=1}^{J_k} \log \binom{n_{\cdot kj_k} + m_{j_k}^{(k)} - 1}{m_{j_k}^{(k)} - 1} \\
& + \log N! - \sum_{g_u=1}^{G_u} \sum_{g_p=1}^{G_p} \log N_{g_u,g_p}! + \sum_{g_u=1}^{G_u} \log N_{g_u}^{(u)}! - \sum_{i=1}^{I} \log n_{i\cdot}! \\
& + \sum_{g_p=1}^{G_p} \log N_{g_p}^{(p)}! - \sum_{X_k \in \mathbf{X}_c} \sum_{v_k=1}^{V_k} \log n_{v_k}!
\end{aligned} \tag{1}$$

où $B(A, B) = \sum_{b=1}^{B} S(A, b)$ *est le nombre de Stirling de deuxième espèce donnant le nombre de répartitions possibles de* A *valeurs en, au plus,* B *groupes.*

Les trois première lignes représentent le coût a priori du modèle tandis que les deux dernières représentent le coût de la vraisemblance. Pour des raisons de manque d'espace, la preuve de ce théorème n'est pas présentée dans ce papier.

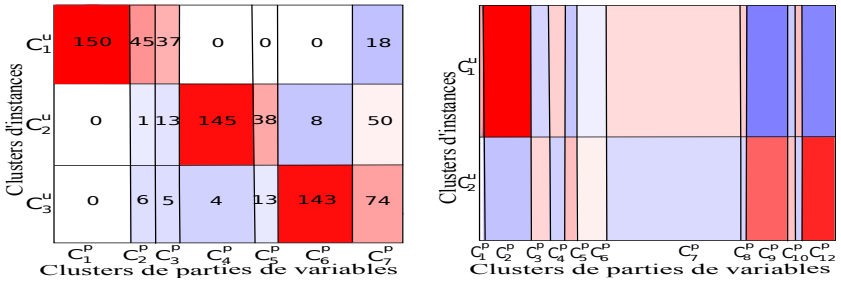
2.3 Algorithme d'optimisation

En raison de leur grande expressivité, les modelés de co-clustering des données mixtes sont complexes à optimiser. Dans ce papier, nous proposons une heuristique d'optimisation en deux étapes. Dans la première étape, nous commençons par partitionner les variables en fréquences égales en utilisant un ensemble prédéfini des tailles de partitions et nous appliquons la méthodologie proposée en Bouchareb et al. (2017) pour trouver des co-clusters initiaux. Parmi les tailles testées, nous choisissons la solution initiale qui correspond à la valeur minimale du critère (1) comme point de départ. A partir de cette solution initiale, la deuxième étape est une post-optimisation qui effectue les fusions de clusters, les fusions de parties de variables, les déplacements de parties de variables entre clusters et déplacements de valeurs entre parties, qui minimisent le mieux le critère. Cette post-optimisation permet de choisir le meilleur modèle parmi un large sous-ensemble de modèles testés tout en améliorant l'interpretabilité, étant donné que le modèle optimisé est souvent très compact, comparé à la solution initiale.

3 Expérimentation

Pour valider l'apport du modèle proposé dans l'analyse exploratoire des données mixtes, nous l'avons appliqué sur les bases de données Iris et CensusIncome (Lichman, 2013).

La base Iris est composée de 150 instances, 750 observations, 4 variables numériques et 1 variable catégorielle. Les tailles des partitions de départ sont de 2 à 10 parties par variable.



(a) Iris : le meilleur modèle (b) CensusIncome : 2×12 Co-clusters

FIG. 1 – *(a) : le meilleur modèle représentant la base Iris. (b) : un modèle simplifié de la base CensusIncome.*

La figure 1a montre le meilleur modèle pour la base Iris. Ce modèle est le résultat d'une discrétisation initiale en 3 parties par variable en fréquences égales suivi d'une post-optimisation qui fusionne deux parties pour en faire 14 au total. La couleur du co-cluster montre l'information mutuelle entre les instances et les parties de variables formant le co-cluster. La couleur rouge représente une sur-représentation des observations par rapport au cas d'indépendance. La couleur bleu représente une sous-représentation et la couleur blanche un co-cluster vide. Pour confirmation, le nombre d'observations par co-cluster est montré sur la figure 1a.

Le modèle optimisé comporte 3 clusters d'instances et 7 clusters de parties de variables. Les compositions des clusters de parties de variables les mieux représentés permettent d'expliquer les clusters d'instances. En particulier, nous distinguons :

— un cluster (C_1^u) de 50 instances contenant les petites fleurs setosa caractérisées par C_1^p (i.e. *Class*$\{setosa\}$, *PetalLength*$] - inf; 2.4]$, et *PetalWidth*$] - inf; 0.8]$),
— un cluster (C_2^u) de 51 instances contenant les grandes fleurs virginica caractérisées par C_4^p (i.e. *PetalLength*$]4.85; +inf[$, *PetalWidth*$]1.65; +inf[$, et *Class*$\{virginica\}$),
— un cluster (C_3^u) de 49 instances contenant les fleurs moyennes versicolor caractérisées par C_6^p (i.e. *PetalLength*$]2.4; 4.85]$, *PetalWidth*$]0.8; 1.65]$, et *Class*$\{versicolor\}$).

On remarque que les variables *Class*, *PetalLength*, et *PetalWidth* sont fortement corrélées et les plus informatives vis-à-vis des clusters d'instances.

Pour la base CensusIncome, composée de 299.285 instances, 11.945.874 observations, 8 variables numériques et 34 variables catégorielles, les tailles de partitions de départ sont de 2 à 128, par puissance de 2. Le meilleur modèle est trouvé à partir de la solution initiale correspondant à 64 parties par variable. Le modèle post-optimisé contient 256 parties de variables, 607 clusters d'instances, et 97 clusters de parties de variables. En première analyse, notre modèle de co-clustering permet de distinguer globalement deux familles d'instances (figure 1b), les individus actifs (payeurs d'impôts, âgés de 27 à 64, gagnant plus que $50K$ par an, ...) et les individus inactifs (non payeurs d'impôts, âgés de moins de 15 ans, gagnant moins de $50K$ par an, ...).

Globalement, le modèle obtenu permet d'obtenir un résumé de la base de données très riche en informations et exploitable à plusieurs niveaux de granularité pour piloter l'analyse exploratoire.

4 Conclusion

Dans ce papier, nous avons proposé un modèle de co-clustering des données mixtes, un critère de sélection du meilleur modèle et un algorithme d'optimisation. Nous avons montré l'efficacité de ce modèle pour extraire des motifs intéressants à partir des bases petites et simples comme Iris et des bases grandes et complexes comme CensusIncome.

Toutefois, quand les données sont volumineuses et de grande complexité, notre modèle capture cette complexité et fourni un co-clustering très détaillé, au détriment de l'interprétabilité. Dans des travaux futurs, nous viserons à développer une méthodologie permettant d'interpréter les résultats sur différents niveaux de granularité et de définir les instances et parties de variables les plus représentatives de chaque cluster pour faciliter l'interprétation du modèle.

Références

Bouchareb, A., M. Boullé, F. Clérot, et F. Rossi (2017). Application du coclustering à l'analyse exploratoire d'une table de données. In *Extraction et gestion des connaissances*, Volume RNTI-E-33, pp. 177–188.

Cheng, Y. et G. M. Church (2000). Biclustering of expression data. In *Proc. of the Inter. Conf. on Intelligent Systems for Molecular Biology*, Volume 8, pp. 93–103. AAAI Press.

Dhillon, I. (2001). Co-clustering documents and words using bipartite spectral graph partitioning. In *the 7th ACM SIGKDD*, KDD '01, New York, NY, USA, pp. 269–274. ACM.

Dhillon, I. S., S. Mallela, et D. S. Modha (2003). Information-theoretic co-clustering. In *Proc. of the ninth Inter. Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining*, pp. 89–98. ACM.

Govaert, G. et M. Nadif (2008). Block clustering with Bernoulli mixture models : Comparison of different approaches. *Computational Statistics and Data Analysis 52*(6), 3233–3245.

Hartigan, J. A. (1975). *Clustering Algorithms*. New York, NY, USA : John Wiley & Sons, Inc.

Lee, D. D. et H. S. Seung (2011). Algorithms for non-negative matrix factorization. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, Volume 13, pp. 556–562.

Lichman, M. (2013). UCI ML repository. `http://archive.ics.uci.edu/ml`.

Shan, H. et A. Banerjee (2008). Bayesian co-clustering. In *Proc. of the Eighth IEEE ICDM*, ICDM '08, Washington, DC, USA, pp. 530–539. IEEE Computer Society.

Summary

We propose a MAP Bayesian approach to perform and evaluate a co-clustering of mixed-type data tables. The proposed model infers an optimal segmentation of all variables then performs a co-clustering by minimizing a Bayesian model selection cost function. One advantage of this approach is that it is user parameter-free. Another main advantage is the proposed criterion which gives an exact measure of the model quality, measured by probability of fitting it to the data. Continuous optimization of this criterion ensures finding better and better models while avoiding data over-fitting. The experiments conducted on real data show the interest of this co-clustering approach in exploratory data analysis of large data sets.