## Etude de la robustesse de RMixmod

(package de classification par modèles de mélanges) en cas de chevauchement de classes

F. Langrognet
(Lm ${ }^{\text {B }}$ )
laboratoire demathématiques debesançon
université de franche-comté - cnrs • umr 6623

## Rmixmod

(1) Le composant RMixmod du projet MIXMOD

- Projet Mixmod
- Principales fonctionnalités
- RMixmod
(2) Etude de la robustesse de RMixmod
- Problématique
- Capacité de RMixmod à trouver les bons paramètres et la bonne classification
- Capacité de RMixmod à trouver le bon nombre de classes (et la classification)
(3) Conclusion


## Etude de la robustesse de RMixmod

(1) Le composant RMixmod du projet MIXMOD

- Projet Mixmod
- Principales fonctionnalités
- RMixmod

Etude de la robustesse de RMixmod

- Problématique
- Capacité de RMixmod à trouver les bons paramètres et la bonne classification
- Capacité de RMixmod à trouver le bon nombre de classes (et la classification)
(3) Conclusion


## Etude de la robustesse de RMixmod

(1) Le composant RMixmod du projet MIXMOD

- Projet Mixmod
- Principales fonctionnalités
- RMixmod


## Etude de la robustesse de RMixmod

- Problématique
- Capacité de RMixmod à trouver les bons paramètres et la bonne classification
- Capacité de RMixmod à trouver le bon nombre de classes (et la classification)
(3) Conclusion


## MIXMOD

## Fiche d'identité

Objectif : diffuser auprès d'un large public un ensemble logiciel de classification par modèles de mélanges

- Projet débuté en 2001, soutenu par 5 organismes
- 4 composants logiciels Licence GNU GPL - www.mixmod.org
- mixmodLib (C++) : bibliothèque de calcul
mixmodGUI : interface graphique (QT)
mixmodForMatlab
RMixmod



## Etude de la robustesse de RMixmod

(1) Le composant RMixmod du projet MIXMOD

- Projet Mixmod
- Principales fonctionnalités
- RMixmod

Etude de la robustesse de RMixmod

- Problématique
- Capacité de RMixmod à trouver les bons paramètres et la bonne classification
- Capacité de RMixmod à trouver le bon nombre de classes (et la classification)
(3) Conclusion


## Fonctionnalités (1)

## Problématiques traitées

- Classification non supervisée
- Classification supervisée


## Modèles de mélange

- Outils souples pour modéliser un large spectre de situations
- Calcul des paramètres du modèle sous-jacent - Caractérisation des classes (proportion, moyenne, dispersion)
- Classification des individus avec des métriques adaptées



## Fonctionnalités (2)

## Modèles et métriques

## Données quantitatives

14 modèles gaussiens basés sur la décomposition en valeur sigulière de la matrice de variance


## Données quantitatives en grande dimension

8 modèles spécifiques pour la grande dimension

## Données qualitatives

5 modèles multinomiaux basés sur une reparamétrisation de la distribution Multinomiale

## Données mixtes

20 modèles hétérogènes
pour les données quantitatives/qualitatives

## Fonctionnalités (3)

## Algorithmes

Maximisation de la vraisemblance (ou vraisemblance complétée)

- EM (Expectation Maximisation)
- SEM (Stochatitic EM)
- CEM (Classification EM)


## Critères

- BIC (Bayesian Information Criterion)
- ICL (Integrated Completed Likelihood)
- NEC (Normalized Entropy Criterion)
- CV (Cross Validation)


## Initialisations et Stratégies

- 6 initialisations

Ex : 'random', 'short runs of EM',...

- Algorithmes chaînés

Ex : 100 iterations de SEM puis 50 iterations de EM

## Et aussi...

- Connaissance partielle des labels des individus (semi-supervisé)
- Individus pondérés


## Etude de la robustesse de RMixmod

(1) Le composant RMixmod du projet MIXMOD

- Projet Mixmod
- Principales fonctionnalités
- RMixmod
(2) Etude de la robustesse de RMixmod
- Problématique
- Capacité de RMixmod à trouver les bons paramètres et la bonne classification
- Capacité de RMixmod à trouver le bon nombre de classes (et la classification)
(3) Conclusion


## Rmixmod : le package R de Mixmod

## Architecture

## Rmixmod

## Ensemble de fonctions R



MixmodLib (C++)

## Avantages

- Atouts de R

Environnement "familier" de l'utilisateur

Interface avec d'autres packages

- Outils de visualisation
- Atouts de mixmodLib (C++)

Développée depuis 2001
Largement diffusée, et utilisée
Eprouvée, robuste, rapide

## Classes - Fonctions

## Classes Rmixmod

## Classes (S4)

```
Mixmod
MixmodCluster [<-Mixmod]
MixmodLearn [<-Mixmod]
MixmodPredict
MixmodResults
MixmodD AResults [<-MixmodResults]
Model
MultinomialModel [<-Model]
GaussianModel [<-Model]
Parameter
GaussianParameter [<-Parameter]
MultinomialParameter [<-Parameter]
Strategy
```


## Fonctions Rmixmod

```
    Fonctions
mixmodCluster
mixmodLearn
mixmodPredict
mixmodStrategy
mixmodGaussianModel
mixmodMultinomialModel
sortByCriterion
nbFactorFromData
summary
print
hist
histCluster
plot
PlotCluster
barplot
barplotCluster
```


## Illustration

## Classification non supervisée

## Classification non supervisée

Illustration
Geyser (données quantitatives)


## Illustration

## Commandes Rmixmod

```
> data(geyser)
> out<-mixmodCluster(geyser, nbCluster=2)
> summary(out)
**************************************************************
* Number of samples =}27
* Problem dimension = 2
****************************************************************
    Number of cluster = 2
            Model Type = Gaussian_pk_Lk_C
            Criterion = BIC(2322.9719)
            Parameters = list by cluster
                Cluster 1 :
                    Proportion = 0.6429
                    Means = 4.2922 79.9964
                    Variances = | | 0.1453 %.8301 |
                Cluster 2 :
                            Proportion = 0.3571
                            Means = 2.0397 54.5171
                            Variances = | 0.0984 0. 0.5618 |
        Log-likelihood = -1136.2599
**************************************************************
```


## Illustration

## Plot



## Plusieurs modèles et plusieurs critères

## Commandes Rmixmod

```
> out<-mixmodCluster(geyser, nbCluster=2:3, criterion=c("BIC","ICL"),
+ models=mixmodGaussianModel())
> summary(out)
*****************************************************************
* Number of samples = 272
* Problem dimension = 2
*****************************************************************
    Number of cluster = 3
        Model Type = Gaussian_p_L_C
    Criterion = BIC(2312.60}0\overline{6}) ICL(2377.6923
    Parameters = list by cluster
        Cluster 1 :
                        Proportion = 0.3333
                            Means = 3.9765 78.7195
                            Variances = | 0.0798 
* Cluster 2 :
                    Proportion = 0.3333
                            Means = 4.5545 81.0528
                            Variances = | 0.0798 
* Cluster 3 :
            Proportion = 0.3333
                            Means = 2.0390 54.5083
            Variances = | 0.0798 
* Log-likelihood = -1131.0742
*****************************************************************
```


## Illustration

## plot (3 classes)

## Histogram of Duration



Histogram of Waiting.Time


## Illustration

## Tri selon ICL

```
> out_icl<-sortByCriterion(out, "ICL")
> summary(out_icl)
**************************************************************
* Number of samples =}27
* Problem dimension = 2
**************************************************************
* Number of cluster = 2
* Model Type = Gaussian_pk_Lk_D_Ak_D
    Criterion = BIC(2320.28333) I CL (2}320.5794
    Parameters = list by cluster
    Cluster 1 :
    Proportion = 0.6432
                            Means = 4.291579.9893
                            Variances = | 0.1588 0.6810
        Cluster 2 :
    Proportion = 0.3568
                        Means = 2.0387 54.5041
                            Variances = | 0.0783 % 0.6467 |
* Log-likelihood = -1132.1126
*******************水水水水水水水水水水水水水水水水水水水水水水水水水水
```


## Illustration

## plot (2 classes)

## 2 classes

## Histogram of Duration



Histogram of Waiting.Time



## Etude de la robustesse de RMixmod

(1) Le composant RMixmod du projet MIXMOD

- Projet Mixmod
- Principales fonctionnalités
- RMixmod
(2) Etude de la robustesse de RMixmod
- Problématique
- Capacité de RMixmod à trouver les bons paramètres et la bonne classification
- Capacité de RMixmod à trouver le bon nombre de classes (et la classification)

Conclusion

## Etude de la robustesse de RMixmod

(1) Le composant RMixmod du projet MIXMOD

- Projet Mixmod
- Principales fonctionnalités
- RMixmod
(2) Etude de la robustesse de RMixmod
- Problématique
- Capacité de RMixmod à trouver les bons paramètres et la bonne classification
- Capacité de RMixmod à trouver le bon nombre de classes (et la classification)
(3) Conclusion


## Problématique

## Jeu de données sans chevauchement



La classification ne pose pas de problème

## Problématique

## Et avec plus de chevauchement?








## Chevauchement par paire de classes

## Définition (Maitra et Melnykov en 2010)

Le chevauchement $\omega_{k_{1} k_{2}}$ entre les classes $k_{1}$ et $k_{2}$ est défini par

$$
\omega_{k_{1} k_{2}}=\omega_{k_{1} \mid k_{2}}+\omega_{k_{2} \mid k_{1}}
$$

où $\omega_{k_{1} \mid k_{2}}$ est la probabilité que la variable aléatoire $X$ appartenant à la classe $k_{2}$ soit classée par erreur dans la classe $k_{1}$.

## Utilisation dans le cadre des modèles de mélange

On peut simuler des données

- distribuées selon un mélange gaussien
- et respectant un chevauchement (choisi) entre les différentes classes


## Etude de la robustesse de RMixmod

(1) Le composant RMixmod du projet MIXMOD

- Projet Mixmod
- Principales fonctionnalités
- RMixmod
(2) Etude de la robustesse de RMixmod
- Problématique
- Capacité de RMixmod à trouver les bons paramètres et la bonne classification
- Capacité de RMixmod à trouver le bon nombre de classes (et la classification)


## Protocole

## Pour 2 classes

- On fixe $\bar{\omega}$ (chevauchement moyen) entre les 2 classes (donc $\omega_{12}$ )
- On calcule les paramètres d'un mélange gaussien dont le degré de chevauchement est $\bar{\omega}$ (fonction MixSim du package MixSim)
- On simule des données suivant ces paramètres (fonction simdataset du package MixSim)
- Sur ce jeu de données (sans connaître ni les labels, ni les paramètres du modèle gaussien), on cherche une classification avec la fonction mixmodCluster du package RMixmod
- On compare les résultats obtenus avec RMixmod avec les vraies valeurs (labels et paramètres)


## $1^{r e}$ situation

## Modèle sphérique et même proportion [Gaussian_p_I]

## Les matrices de variance sont identiques et sphériques



```
parameters <- MixSim(BarOmega=0.15, K=2, p=2, sph=TRUE,hom=TRUE)
data <- simdataset(n=500, Pi=parameters$Pi, Mu=parameters$Mu, S=parameters$S)
model <- mixmodGaussianModel(listModels="Gaussian_p_L_I")
res_mixmod <- mixmodCluster(data.frame(data$X), model=model, nbCluster=2)
```

$$
\bar{\omega}=0.15
$$

Jeu de données (simulés)


Paramètres (vrais et calculés)



Pourcentage d'individus
mal classés = 7,4\%

## Probabilité d'appartenance

La class. par modèles de mélanges donne une information complémentaire :
la probabilité d'appartenance de l'individu i à la classe k : $p_{i k}$

```
> probas <- res_mixmod@bestResult@proba
>
> probas
```

|  | $[, 1]$ | $[, 2]$ |
| ---: | ---: | ---: |
| $[1]$, | $8.398762 \mathrm{e}-01$ | $1.601238 \mathrm{e}-01$ |
| $[2]$, | $7.551083 \mathrm{e}-01$ | $2.448917 \mathrm{e}-01$ |
| $[3]$, | $9.999366 \mathrm{e}-01$ | $6.339925 \mathrm{e}-05$ |
| $[4]$, | $2.692252 \mathrm{e}-01$ | $7.307748 \mathrm{e}-01$ |
| $[5]$, | $9.990483 \mathrm{e}-01$ | $9.517056 \mathrm{e}-04$ |
| $[6]$, | $9.999801 \mathrm{e}-01$ | $1.987949 \mathrm{e}-05$ |
| $[7]$, | $9.992282 \mathrm{e}-01$ | $7.717543 \mathrm{e}-04$ |
| $[8]$, | $9.992276 \mathrm{e}-01$ | $7.724087 \mathrm{e}-04$ |
| $[9]$, | $9.902374 \mathrm{e}-01$ | $9.762624 \mathrm{e}-03$ |
| $[10]$, | $3.779903 \mathrm{e}-01$ | $6.220097 \mathrm{e}-01$ |
| $[11]$, | $9.987837 \mathrm{e}-01$ | $1.216312 \mathrm{e}-03$ |
| $[12]$, | $9.936269 \mathrm{e}-01$ | $6.373078 \mathrm{e}-03$ |
| $[13]$, | $9.556769 \mathrm{e}-01$ | $4.432311 \mathrm{e}-02$ |
| $[14]$, | $9.679888 \mathrm{e}-01$ | $3.201120 \mathrm{e}-02$ |
| $[15]$, | $9.988387 \mathrm{e}-01$ | $1.161303 \mathrm{e}-03$ |
| $[16]$, | $6.010903 \mathrm{e}-02$ | $9.398910 \mathrm{e}-01$ |

## Probabilité d'appartenance

$$
\bar{\omega}=0.15
$$



## Individus mal classés

## Taux d'individus mal classés

Obtenu en comparant les labels calculés ( $\hat{z}_{i}$ ) aux vrais labels $\left(z_{i}\right)$ Rappel : $\hat{z}_{i}=\arg \max _{k} p_{i k}$


Pour $\bar{\omega}=0.15$, on obtient 37 individus mal classés (sur 500) -> 7, 4\% 9 individus classés à tord dans la classe 1, et 28 à tord dans la classe 2

Note : $\bar{\omega}=\omega_{12}=\omega_{1 \mid 2}+\omega_{2 \mid 1}$
$\bar{\omega}$ correspond bien au double du taux d'individus mal classés

## Chevauchement

## Estimation du degré de chevauchement a posteriori

## En utilisant les probabilités d'appartenance

- On peut calculer (a posteriori) $\hat{\omega}_{k_{1} \mid k_{2}}$
$\hat{\omega}_{k_{1} \mid k_{2}}=\frac{\sum_{i t q z_{i}=k_{2}} p_{i k_{1}}}{n_{k_{2}}}$ où $n_{k_{2}}$ est l'effectif de la classe $k_{2}$
- On peut donc calculer (a posteriori) $\hat{\omega}$
$\hat{\omega}=\hat{\omega}_{k_{1} \mid k_{2}}+\hat{\omega}_{k_{2} \mid k_{1}}$


## Pour $\bar{\omega}=0.15$, on obtient :

- $\hat{\omega}_{1 \mid 2}=0.1$ et $\hat{\omega}_{2 \mid 1}=0.09$
- $\hat{\omega}=0.19$
$>p$
$>$
> probas


## Avec d'autres valeurs de chevauchement

$$
\bar{\omega}=0.3
$$

## Jeu de données (simulés)



## Classification Mixmod



Pourcentage d'individus mal classés $=17,2 \%$

## $\bar{\omega}=0.65$

Jeu de données (simulés)


Classification Mixmod


Pourcentage d'individus mal classés $=31,8 \%$

$$
\bar{\omega}=0.9
$$

Jeu de données (simulés)


## Classification Mixmod



Pourcentage d'individus mal classés $=45,6 \%$

## $2^{e}$ situation

Modèle général et proportions libres [Gaussian_ $p_{k} \quad L_{k} C_{k}$ ]


$$
\bar{\omega}=0.15
$$

Jeu de données (simulés)


Classification Mixmod


Pourcentage d'individus mal classés = 8,2\%

$$
\bar{\omega}=0.3
$$

## Jeu de données (simulés)



Classification Mixmod


## Pourcentage d'individus mal classés = 15\%

$$
\bar{\omega}=0.6
$$

## Jeu de données (simulés)



## Classification Mixmod



Pourcentage d'individus mal classés $=31,4 \%$

$$
\bar{\omega}=0.9
$$



Pourcentage d'individus mal classés $=47,2 \%$

## Etude de la robustesse de RMixmod

(1) Le composant RMixmod du projet MIXMOD

- Projet Mixmod
- Principales fonctionnalités
- RMixmod
(2) Etude de la robustesse de RMixmod
- Problématique
- Capacité de RMixmod à trouver les bons paramètres et la bonne classification
- Capacité de RMixmod à trouver le bon nombre de classes (et la classification)


## Nombre de classes?

6 classes avec chevauchement (omega=0.3)


## Nombre de classes?

Combien de classes? 3 ou 6

- En thérorie : 6 classes
- Mais l'utilisateur peut souhaiter une solution avec des classes bien séparées: 3 classes


Que peut faire RMixmod dans cette situation?

## Nombre de classes

## RMixmod : de 2 à 6 classes

## La meilleure solution proposée par RMixmod est avec 6 classes

```
> res_mixmod <- mixmodCluster(data6, model=mod, nbCluster=2:6)
> summary(res_mixmod)
********************************
* Problem dimension = 2
*************************************************************
* Number of cluster = 6
    Model Type = Gaussian_p_L_I
        Criterion = BIC(1206.5190)
    Parameters = list by cluster
        Cluster 1 :
                            Proportion = 0.1667
                            Means = 0.9621 0.4730
                            Variances = | lll
        Cluster 2 :
            Proportion = 0.1667
                Means = 2.8463 1.2216
                    Variances = | lll
            Cluster 3 :
                    Proportion = 0.1667
                    Means = 1.9756 0.7203
                    Variances = | lll
            Cluster 4 :
                            Proportion = 0.1667
```


## 6 classes

## Qualité des résultats obtenus par RMixmod Résultats avec 6 classes (BIC)



Classification Mixmod (6 classes)


## Choix du nombre de classes dans RMimxod

## BIC - ICL



| critère | pénalité | interprétation | objectif |
| :---: | :---: | :---: | :---: |
| BIC | $0.5 \nu \ln (n)$ | complexité modèle | convergence |
| ICL | $0.5 \nu \ln (n)$ | complexité modèle | classes |
|  | $-\sum_{i, k} \hat{z}_{i k} \ln t_{i k}(\hat{\theta})$ | + entropie partition | bien séparées |

## $\nu$ : nombre de paramètres libres du modèle

## Options dans RMixmod

- Par défaut : BIC
- Options : ICL, NEC (class. non supervisée) et CV (class. supervisée) Ex : on peut utiliser BIC et ICL et trier selon l'un ou l'autre des critères


## Nombre de classes

## RMixmod : de 2 à 6 classes et tri selon ICL

## La meilleure solution proposée par RMixmod avec ICL est avec 3 classes

```
> res_mixmod <- mixmodCluster(data6, model=mod, nbCluster=2:6, criterion=c("BIC","ICL"))
>
> res_icl<-sortByCriterion(res_mixmod."ICL")
>
> summary(res_icl)
**************************************************************
* Number of samples = 1500
* Problem dimension = 2
**************************************************************
* Number of cluster = 3
* Model Type = Gaussian_p_L_I
* Criterion = BIC(1375.5983)
* Cluster 1 :
                            Proportion = 0.3333
                    Means = 0.8998 0.6007
                            Variances = | |lll
            Cluster 2 :
                        Proportion = 0.3333
                    Means = 2.9113 1.0999
                    Variances = | }\begin{array}{lll}{|.0304}&{0.0000 |}\\{}&{0.0000}&{0.0304 |}
            Cluster 3 :
                Proportion = 0.3333
                    Means = 1.9053 0.8483
                        Variances = | lll}
*
            Log-likelihood = -662.2029
**************************************************************
```


## 3 classes

## Qualité des résultats obtenus par RMixmod Résultats avec 3 classes (ICL)



Classification Mixmod (3 classes)


## Critères de sélection

## Valeurs de BIC et ICL en fonction du nombre de classes




## Etude de la robustesse de RMixmod

(1) Le composant RMixmod du projet MIXMOD

- Projet Mixmod
- Principales fonctionnalités
- RMixmod
(2) Etude de la robustesse de RMixmod
- Problématique
- Capacité de RMixmod à trouver les bons paramètres et la bonne classification
- Capacité de RMixmod à trouver le bon nombre de classes (et la classification)
(3) Conclusion


## Conclusion

## RMimxod et le chevauchement de classes

- RMixmod permet de retrouver la classification et les paramètres du modèle sous-jacent quelque soit la valeur de chevauchement avec une erreur (taux d'individus mal classés) conforme à la valeur de chevauchement
- Les probabilités d'appartenance aux classes donnent une information pertinente pour connaître les individus 'difficilement classables'
- Lors de la recherche du bon nombre de classes, les criteres de sélection disponibles dans RMimxod permettent de tenir compte de l'objectif de l'utilisateur


## Etude de la robustesse de RMixmod en cas de chevauchement de classes

## FIN

## Merci de votre attention

- Site web : http ://www.mixmod.org
- contact :
contact@mixmod.org
florent.langrognet@univ-fcomte.fr

