LU3I026 - Science des données

Représentations des données

Olivier Schwander <olivier.schwander@sorbonne-universite.fr>

Sorbonne Université

2025-2026

Modèles non-linéaires

Typiquement

- Passage linéaire/affine (ajout de la colonne de 1)
- Polynômes
- Gaussiennes

Réseaux de neurones (deep learning)

- Très grosses fonctions non-linéaires

Modèles polynomiaux

[Au tableau]

Astuce du noyau: kernelisation

[Au tableau]

Feature engineering

Travail sur les variables

- Moins de variables
- Meilleures variables
- Pour faire plus facilement la prédiction

Intérêts

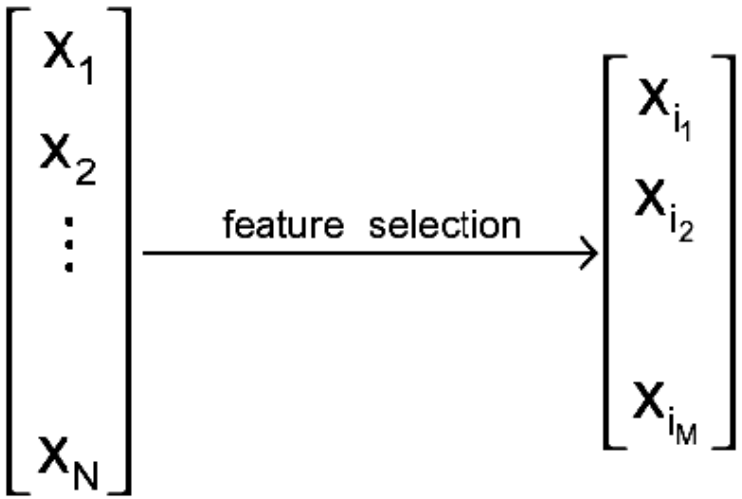
- Contourner les limites des modèles
- Guider l'apprentissage en cas de manque de données
- Limiter la dimension du problème

Importance des pré-traitements

[Au tableau]

Sélection de caractéristiques

Sélectionner un sous-ensemble des caractéristiques existantes



Comment faire ?

Exhaustivement

- Tous les sous-ensembles possibles ?
- Trop coûteux: exponentiel

Besoin de méthodes approchées

- Filtrage: a priori
- Wrapper: a posteriori

Méthodes de filtrage

Étapes

- Analyser chaque variable individuellement
- Estimer son pouvoir prédictif
- Trier les variables et ne garder que les meilleures

Exemple

- Corrélation entre chaque variable et la sortie à prédire

Limites

- Chaque variable est analysée toute seule
- Qualité de l'estimation du pouvoir prédictif ?
- Pas directement lié à la tâche

Méthodes de wrapper

Principe

- Choisir un sous-ensemble
- Évaluer les performances de ce sous-ensemble
- Ajouter ou supprimer des varibles
- Recommencer

Limites

- Stratégies d'ajout ou de suppression
- Coûteux

Extraction de caratéristiques

Construire de nouvelles variables

- Complexe

Analyse en composantes principales: motivation

ACP ou PCA pour Principal Components Analysis

[Au tableau]

Formulation

Minimiser l'erreur de reconstruction

$$\min_P \sum_i \|x_i - P(x_i)\|^2$$

Projection P

- Espace de départ $\mathbb{R}^d$
- Espace d'arrivée: sous-espace vectoriel E_p de rang p
- avec $p < d$
- P projection orthogonale des points sur E_p

Centrer et réduire

Centrer: indispensable

[Au tableau]

Réduire: facultatif

- En fonction des cas
- En particulier: échelles très différentes ou unités différentes

Changement de base

Projection linéaire sur un vecteur

Pour un vecteur unitaire m (de norme 1)

$$\hat{x_i} = (m_i \cdot x_i)m$$

Sur un sous-espace

Pour une base orthogonale $m_i, \ldots, m_p$ tq $m_i \cdot m_j = 0$ si $i \neq j$

$$\hat{x_i} = \sum_{j=1}^{p} (m_j \cdot x_i)m_j$$

Sous forme matricielle

Avec $M = (m_1, \ldots, m_p)$

$$\hat{x_i} = MM^t x_i$$

Représentation dans le sous-espace

Dans la base M

$$\tilde{x_i} = M^t x_i$$

Algorithme

Avec la covariance empirique

- Estimater $\Sigma = \frac{1}{n} X^t X$
- Décomposer en valeur propres $\Sigma = Q \Lambda Q^t$ (Λ valeurs propres et Q vecteurs propres)
- Trier les valeurs propres $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ et les vecteurs propres associés
- Prendre les p premières colonnes de Q: $\tilde{Q} = (Q_1, \ldots, Q_p)$ (avec Q_m une colonne de Q)
- $\tilde{Q}$ est la projection qu'on cherche

$$\tilde{x_i} = \tilde{Q}^t x_i$$

En pratique

Décomposition en valeurs singulière

Singular Value Decomposition ou SVD

- $X = USV^t$
- avec $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$
- et $V \in \mathbb{R}^{d \times d}$
- et $S \in \mathbb{R}^{n \times d}$ diagonale (valeurs singulières)

Pour l'ACP

- On veut éviter de calculer $X^t X$
- SVD sur la matrice des points
- $X^t X = V(S^t S)V^t$

Ou sinon

- Descente de gradient

Variance expliquée

[Au tableau]

Conclusion

Analyse des données indispensable

- Manuellement
- Avec un expert
- Automatiquement

Dualité

- Modèle plus souple
- Données transformées

Analyse en composante principale

- Outil basique mais classique
- Plein de variantes
- Utilisable aussi pour la visualisation