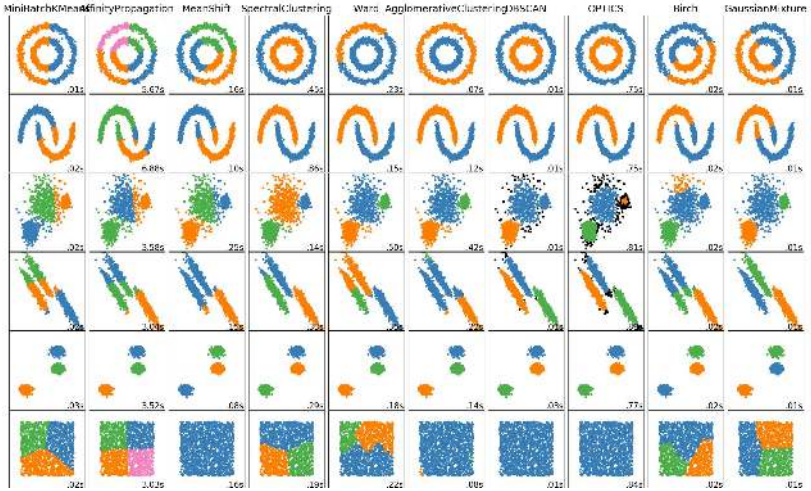
Clustering – Apprentissage non supervisée



Regroupement (Clustering) et similitude : Objectifs

- Comprendre la notion d'apprentissage **NON supervisé**
- Le lier à la notion de **Découverte de Structures**
- Connaître les grandes familles d'algorithmes de regroupement
  - algorithmes par partitionnement (k-means, GMM)
  - algorithme hiérarchiques (représentation par dendrogramme)
  - algorithmes basés sur la densité (DBSCAN, OPTICS)
- Comprendre que la notion de Similitude liée à la vaste notion mathématique de Distance est **subjective mais centrale** dans cette problématique
- Savoir **construire un espace** de mesure multi-dimensionnelle et définir une **mesure de similarité** dans cette espace
- Savoir **choisir l'algorithme** à utiliser en fonction des données en entrée
- Principes
  - Contexte non supervisé
  - "Révéler" l'organisation de motifs en groupes cohérents
  - Processus Subjectif
- Disciplines : Biologie, Zoologie, Psychiatrie, Sociologie, Géologie, Géographie...
- Synonymes : Apprentissage non supervisé, Taxonomie, Typologie, Partition

Qu'est-ce que le clustering ?

- Groupe ou Cluster : un ensemble d'objets ou d'individus
  - Semblables entre eux à l'intérieur d'un groupe
  - Différents d'un groupe à l'autre
- Segmentation ou Cluster analysis
  Classement des individus ou objets dans différents groupes ou segments
- Le clustering est une technique **non dirigée** (c-à-d. il n'y a pas de variable target)
- Quelques applications :
  - Reconnaissance de forme non supervisée
  - Taxonomie (biologie, zoologie)
  - Segmentation des marchés (marketing)
  - Geo-segmentation
  - WWW : classification des sites / des Weblog pour découvrir des profils d'accès semblables...

Comment déterminer une bonne segmentation ?

- Un bon algorithme de classification fera en sorte qu'il y aura une :
  - petite variabilité intra-classe (c-à-d petite distance entre les individus d'un même groupe)
  - grande variabilité inter-classe (c-à-d grande distance entre les individus de groupes différents)
- La qualité des résultats de la classification dépendra de la mesure de distance utilisée et de l'algorithme choisi pour l'implanter.

Segmentation floue vs précise

- Hard Clustering

Soit $X = \{x_1, ..., x_n\}$
On appelle m-clustering de X la partition de X en m ensembles (clusters) $C_1, ...C_m$ tels que :

1. $C_i \neq \emptyset, \quad i = 1, ...m$
2. $\bigcup_{i=1}^{n} C_i = X$
3. $C_i \cap C_i = \emptyset, \quad i \neq j, \quad i, j = 1, ...m$

- Fuzzy Clustering - Zadeh (1965)

Soit $X = \{x_1, ..., x_n\}$
On appelle m-clustering flou de X en m clusters est caractérisé par m fonctions d'appartenance u_j avec :

1. $u_j : X \rightarrow [0, 1], \quad j = 1, ..., m$
2. $\sum_{j=1}^{m} u_j(x_i) = 1, \quad i = 1, ..., N$
3. $0 < \sum_{i=1}^{N} u_j(x_i) < N, \quad j = 1, ..., m$

Approches de Clustering

- **Algorithmes de Partitionnement :** Construire plusieurs partitions puis les évaluer selon certains critères
- Algorithmes hiérarchiques : Créer une décomposition hiérarchique des objets selon certains critères
- Algorithmes basés sur la densité : basés sur des notions de connectivité et de densité

- Caractéristiques :
  - Extensibilité
  - Capacité à traiter différents types de données
  - Découverte de clusters de différents formes
  - Connaissances requises (paramètres de l'algorithme)
  - Capacité à traiter les données bruitées et isolées.

Algorithmes à partitionnement

- Construire une partition à k clusters d'une base D de n objets
- Les k clusters doivent optimiser le critère choisi
  - Global optimal : Considérer toutes les k-partitions
  - Heuristic methods : Algorithmes k-**means** et k-**medoids**
    - k-means (MacQueen'67) : Chaque cluster est représenté par son centre
    - k-medoids or PAM (Partition Around Medoids) (Kaufman & Rousseeuw'87) : Chaque cluster est représenté par un de ses objets

k-means / k-medoids

k-means

Algorithme en 4 étapes :

1. Choisir k objets formant ainsi k clusters
2. (Ré)affecter chaque objet O au cluster C_i de centre M_i tel que $dist(O, M_i)$ est minimale
3. Recalculer M_i de chaque cluster (le barycentre)
4. Aller à l'étape 2 si on vient de faire une affectation

Utilisation conseillée :

1. lorsque le nb de clusters est connu
2. pour le regroupement rapide de grands ensembles de données
3. passage à l'échelle : vers de grands ensembles de données

k-medoids

Algorithme en 4 étapes :

1. Choisir k objets formant ainsi k clusters
2. (Ré)affecter chaque objet O au cluster C_i de centre M_i tel que $dist(O, M_i)$ est minimale
3. Recalculer M_i de chaque cluster (le point le plus proche du barycentre)
4. Aller à l'étape 2 si on vient de faire une affectation

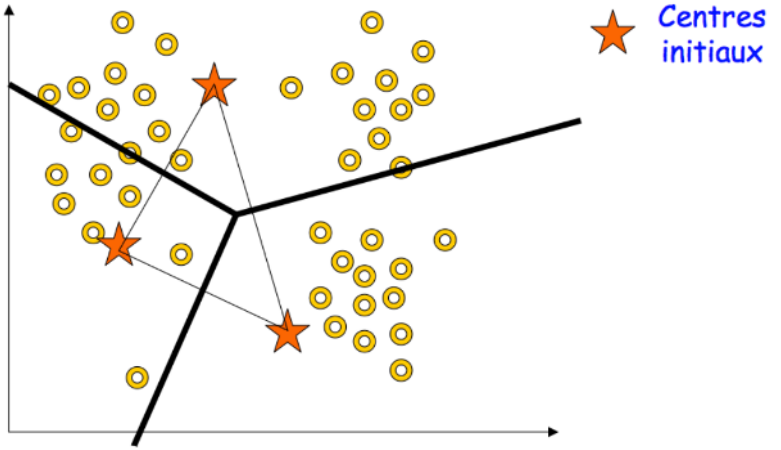
Utilisation conseillée :

1. lorsque le nb de clusters est connu
2. pour le regroupement rapide de données catégorielles
3. passage à l'échelle : vers de grands ensembles de données

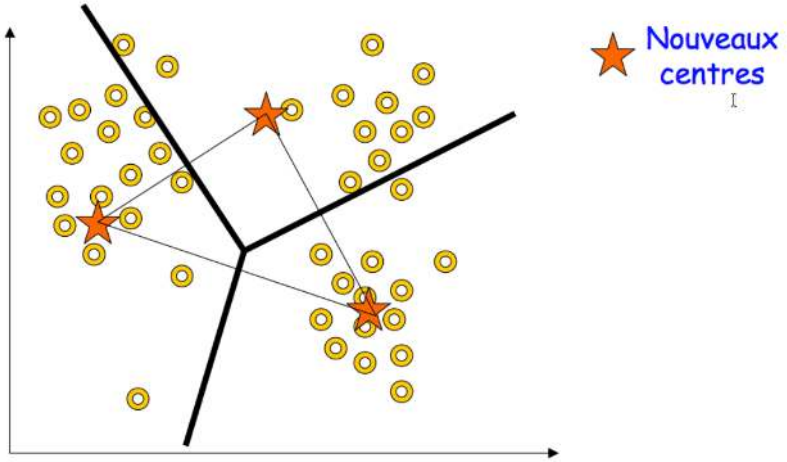
k-means : Exemple

- $A = \{1, 2, 3, 6, 7, 8, 13, 15, 17\}$. Créer 3 clusters à partir de A
- On prend 3 objets au hasard : 1, 2 et 3.
  $\Rightarrow C_1 = \{1\}$, $M_1 = 1$, $C_2 = \{2\}$, $M_2 = 2$, $C_3 = \{3\}$ et $M_3 = 3$
- Chaque objet O est affecté au cluster au milieu duquel, O est le plus proche.
  $\Rightarrow C_1 = \{1\}$, $M_1 = 1$
  $\Rightarrow C_2 = \{2\}$, $M_2 = 2$
  $\Rightarrow C_3 = \{3, 6, 7, 8, 13, 15, 17\}$, $M_3 = 69/7 = 9.86$
- $dist(3, M_2) < dist(3, M_3) \Rightarrow 3$ passe dans C_2.
  Tous les autres objets ne bougent pas.
  $C_1 = \{1\}$, $M_1 = 1$, $C_2 = \{2, 3\}$, $M_2 = 2.5$,
  $C_3 = \{6, 7, 8, 13, 15, 17\}$, $M_3 = 66/6 = 11$
- $dist(6, M_2) < dist(6, M_3) \Rightarrow 6$ passe dans C_2.
  Tous les autres objets ne bougent pas.
  $C_1 = \{1\}$, $M_1 = 1$, $C_2 = \{2, 3, 6\}$, $M_2 = 11/3 = 3.67$,
  $C_3 = \{7, 8, 13, 15, 17\}$, $M_3 = 12$
- $dist(2, M_1) < dist(2, M_2) \Rightarrow 2$ passe en C_1.
  $dist(7, M_2) < dist(7, M_3) \Rightarrow 7$ passe en C_2. Les autres ne bougent pas.
  $C_1 = \{1, 2\}$, $M_1 = 1.5$, $C_2 = \{3, 6, 7\}$, $M_2 = 5.34$,
  $C_3 = \{8, 13, 15, 17\}$, $M_3 = 13.25$
- $dist(3, M_1) < dist(3, M_2) \Rightarrow 3$ passe en 1.
  $dist(8, M_2) < dist(8, M_3) \Rightarrow 8$ passe en 2.
  $C_1 = \{1, 2, 3\}$, $M_1 = 2$, $C_2 = \{6, 7, 8\}$, $M_2 = 7$,
  $C_3 = \{13, 15, 17\}$, $M_3 = 15$
- Plus rien ne bouge

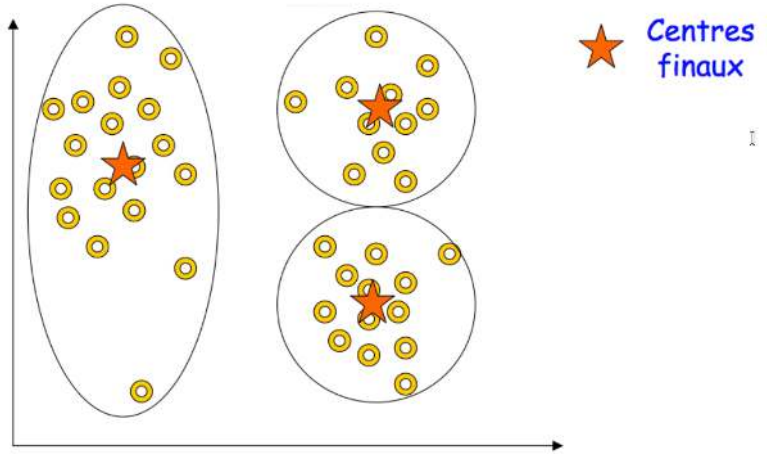
k-means : illustration (1)



k-means : illustration (2)



k-means : illustration (3)



Commentaires sur la méthode des k-means

Force

- Relativement extensible dans le traitement d'ensembles de taille importante
- Relativement efficace : $O(t.k.n)$, où n représente le nb objets, k le nb de clusters, et t le nb d'iterations. Normalement, $k, t << n$.

Faiblesses

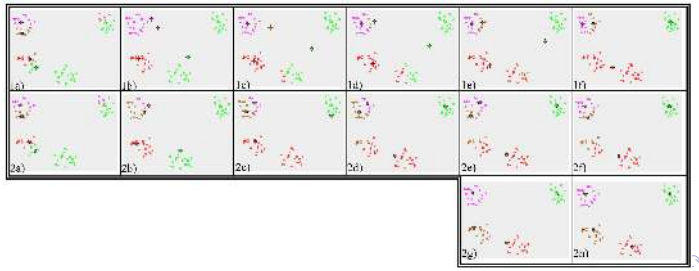
- N'est pas applicable en présence d'attributs où la moyenne n'est pas définie
- On doit spécifier k (nombre de clusters)
- Incapable de traiter des données bruitées
- Les clusters sont construits par rapports à des objets inexistants (les moyennes)
- Ne peut pas découvrir les groupes non-convexes
- Les outliers sont mal gérés.

Algorithme des k-medoides

1. Initialize : select k of the n data points as the medoids to minimize the cost
2. Associate each data point to the closest medoid.
3. While the cost of the configuration decreases :
   1. For each medoid m, and for each non-medoid data point o :
      1. Consider the swap of m and o, and compute the cost change
      2. If the cost change is the current best, remember this m and o combination
   2. Perform the best swap of m_{best} and o_{best}, if it decreases the cost function.
      Otherwise, the algorithm terminates.

La méthode des k-medoids : Exemple

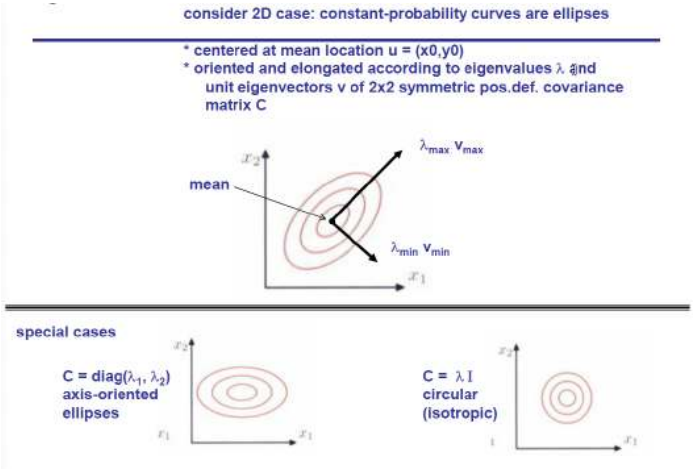
- Soit $A = \{1, 3, 4, 5, 8, 9\}$, $k = 2$ et $M = \{1, 8\}$ ensemble des médoides
- $C_1 = \{1, 3, 4\}$ et $C_2 = \{5, 8, 9\}$.
  $E_{\{1,8\}} = dist(3,1)^2 + dist(4,1)^2 + dist(5,8)^2 + dist(9,8)^2 = 23$
- Comparons 1 et 3 : $M = \{3, 8\}$,
  $C_1 = \{1, 3, 4, 5\}$ et $C_2 = \{8, 9\}$
  $E_{\{3,8\}} = dist(1,3)^2 + dist(4,3)^2 + dist(5,3)^2 + dist(9,8)^2 = 10$
  $TC_{1,3} = E_{\{3,8\}} - E_{\{1,8\}} = -13 < 0$
  $\Rightarrow$ le remplacement est fait.
- Comparons 3 et 4 : $M = \{4, 8\}$,
  C_1 et C_2 inchangés et
  $E_{\{4,8\}} = dist(1,4)^2 + dist(3,4)^2 + dist(5,4)^2 + dist(8,9)^2 = 12$
  $\Rightarrow$ 3 n'est pas remplacé par 4
- Comparons 3 et 5 : $M = \{5, 8\}$,
  C_1 et C_2 inchangés et $E_{\{5,8\}} > E_{\{3,8\}}$



Variantes des k-means

- Sélection des centres initiaux
- Calcul des similarités
- Calcul des centres (k-medoids : [Kaufman & Rousseeuw'87])
- GMM : Variantes de k-means basées sur les probabilités
- k-modes : données catégorielles [Huang'98]
- k-prototype : données mixtes (numériques et catégorielles)

Gaussian Mixture Model



Gaussian Mixture Model

- un GMM est un modèle probabiliste de $p(X)$
- la vraisemblance de x étant donné une distribution Gaussienne :

$$\mathcal{N}(x|\mu,\Sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}|\Sigma|^{1/2}} exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)\right)$$

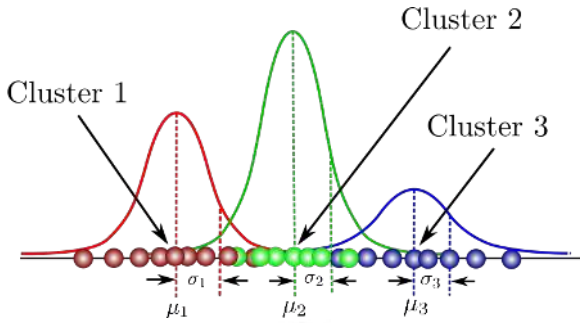
- la vraisemblance de x étant donné un GMM :

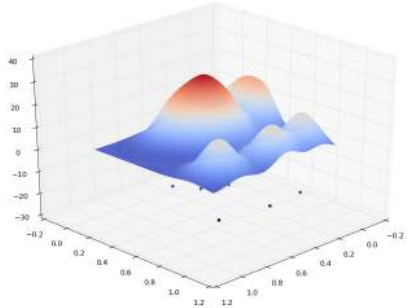
$$p(x) = \sum_{k=1}^{K} w_k.p(x|\mu_k,\Sigma_k) \quad \Leftrightarrow \quad p(x) = \sum_{k=1}^{K} P(k).p(x|k)$$

où K est le nombre de Gaussiennes et w_k est le poids associé à la Gaussienne k, avec : $\sum_k w_k = 1, w_k \geq 0$

- Propriétés du GMM :
  - les GMM sont connus comme des approximateurs universels de densités
  - on utilise souvent une matrice de covariance Σ diagonale car le nombre de paramètres à optimiser est plus gérable : Gaussiennes sphériques : $\Sigma = \sigma^2 \times Id$
  - on entraine les GMM avec Expectation-Maximisation (E-M) : un algorithme efficace de type maximum de vraisemblance (ML) pour optimiser les paramètres d'un modèle probabiliste

Gaussian Mixture Model





Gaussian Mixture Model : utilisation de Bayes

Notations :

- z_{nk} : variable aléatoire valant 1 si x_n provient de k, 0 sinon. probabilité que x_n provienne de k : $p(z_{nk} = 1|x_n)$
- probabilité d'observer un point provenant de k : $\pi_k = p(z_k = 1)$
- $z = (z_1, ..., z_K)$ où une seule composante vaut 1
- $p(z) = p(z_1 = 1)^{z_1} p(z_2 = 1)^{z_2} ... p(z_K = 1)^{z_k} = \prod_{k=1}^{K} \pi_k^{z_k}$

Calcul de la vraissemblance

- $p(x_n|z) = \prod_{k=1}^{K} \mathcal{N}(x_n|\mu_k,\Sigma_k)^{z_k}$
- $p(x_n, z) = p(x_n|z) \times p(z)$
- $p(x_n) = \sum_{k=1}^{K} p(x_n|z_k)p(z_k = 1) = \sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathcal{N}(x_n|\mu_k,\Sigma_k)$
- $p(x) = \prod_{n=1}^{N} p(x_n) = \prod_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathcal{N}(x_n|\mu_k,\Sigma_k)$
- $\ln p(x) = \sum_{n=1}^{N} \ln \sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathcal{N}(x_n|\mu_k,\Sigma_k)$

Règles de Bayes : $P(A|B) = P(A,B)/P(B)$

$$p(z_k = 1|x_n) = \frac{p(z_k = 1, x_n)}{p(x_n)} = \frac{p(x_n|z_k = 1) \times p(z_k = 1)}{p(x_n)}$$

$$p(z_k = 1|x_n) = \frac{p(x_n|z_k = 1) \times p(z_k = 1)}{\sum_{j=1}^{K} p(x_n|z_j = 1)p(z_j = 1)} = \frac{\pi_k.\mathcal{N}(x_n|\mu_k,\Sigma_k)}{\sum_{j=1}^{K} \pi_j \mathcal{N}(x_n|\mu_j,\Sigma_j)}$$

Gaussian Mixture Model : EM algorithm

Algorithme des k-means :

1. initialiser les μ_k
2. étape Estimation : assigner chaque point à un cluster
3. étape Maximisation : étant donnés les clusters, modifier les μ_k
4. alterner étapes 2 et 3 jusqu'à stabilisation

Algorithme EM (Expectation-Maximisation) pour les GMM :

1. initialiser les μ_k, Σ_k et les coeff π_k
2. étape Estimation : assigner à chaque point X_i un vecteur de score $\gamma_{i,k}$ (k parcourant les modèles gaussiens)
3. étape Maximisation : étant donnés les scores, ajuster les μ_k, Σ_k et π_k
4. Calculer la vraissemblance puis alterner étapes 2 et 3 jusqu'à convergence de la vraissemblance

Gaussian Mixture Model : EM algorithm

Algorithme EM (Expectation-Maximisation) pour les GMM :

1. initialiser les μ_k, Σ_k et les coeff π_k
2. étape Estimation : assigner à chaque point X_i un vecteur de score $\gamma_{i,k}$ (k parcourant les modèles gaussiens)

$$\gamma_{ik} = \frac{\pi_k . \mathcal{N}(x_n|\mu_k, \Sigma_k)}{\sum_{j=1}^{K} \pi_j \mathcal{N}(x_n|\mu_j, \Sigma_j)}$$

3. étape Maximisation : étant donnés les scores, ajuster les μ_k, Σ_k et π_k

$$\mu_k^{new} = \frac{1}{N_k}\sum_{n=1}^{N}\gamma_{nk}x_n \quad \text{où} \quad N_k = \sum_{n=1}^{N}\gamma_{nk}$$

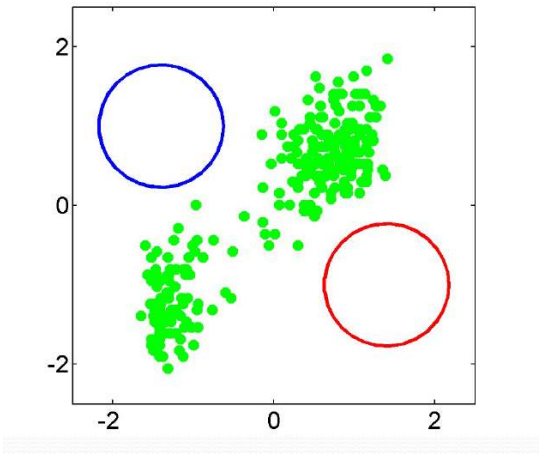
$$\Sigma_k^{new} = \frac{1}{N_k}\sum_{n=1}^{N}\gamma_{nk}(x_n - \mu_k^{new})(x_n - \mu_k^{new})^T$$

$$\pi_k^{new} = \frac{N_k}{N}$$

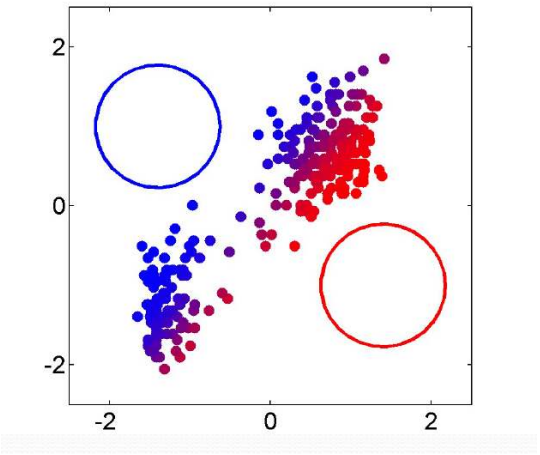
4. Calculer la vraissemblance puis alterner étapes 2 et 3 jusqu'à convergence de la vraissemblance

$$\ln p(X|\mu, \Sigma, \pi) = \sum_{n=1}^{N} \ln \left\{ \sum_{n=1}^{N} \pi_k \mathcal{N}(x_n|\mu_k, \Sigma_k) \right\}$$

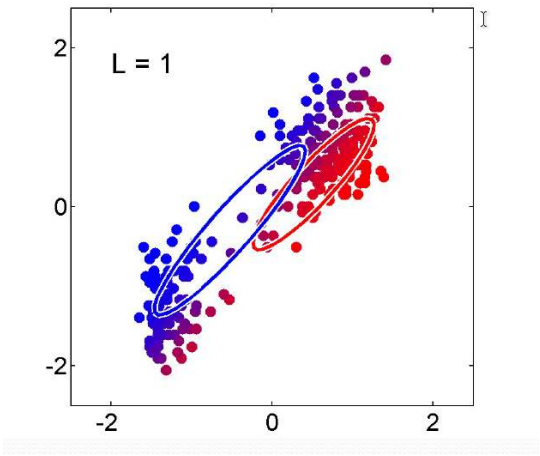
Gaussian Mixture Model



Gaussian Mixture Model



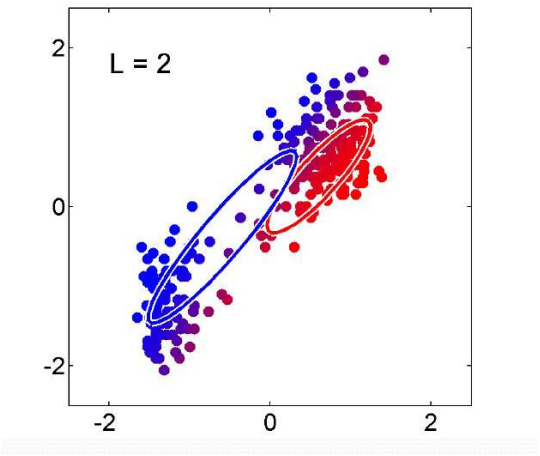
Gaussian Mixture Model



CÔTE D'AZUR

Gaussian Mixture Model

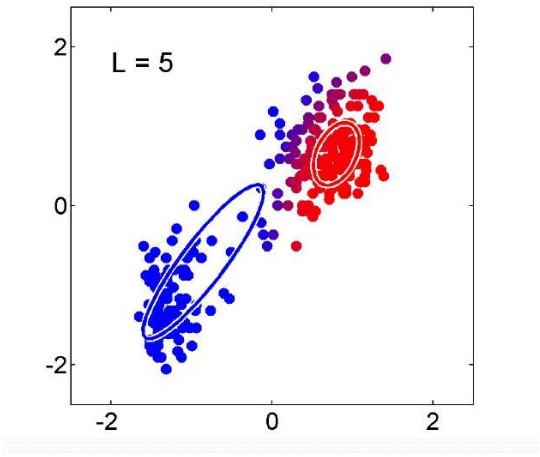
AI for bio
J-P Comet
Introduction
Trees
Clustering
Objectifs
Partitionnement
k-means
GMM
Hiérarchiques
Algorithmes-densité
DBSCAN + OPTICS
Résumé
kNN
Bayes
SVM
NN
Evaluation
Data Mining Project



CÔTE D'AZUR

Gaussian Mixture Model

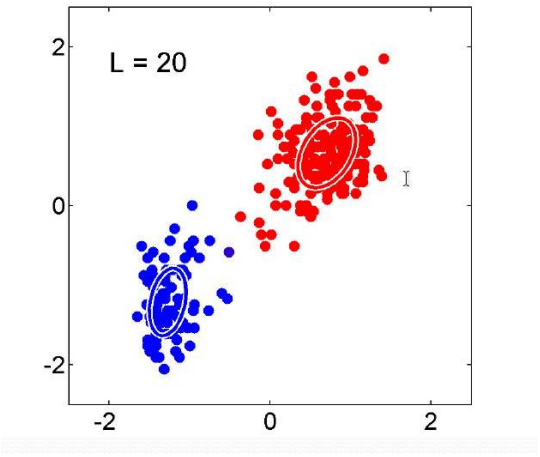
AI for bio
J-P Comet
Introduction
Trees
Clustering
Objectifs
Partitionnement
k-means
GMM
Hiérarchiques
Algorithmes-densité
DBSCAN + OPTICS
Résumé
kNN
Bayes
SVM
NN
Evaluation
Data Mining Project



CÔTE D'AZUR

Gaussian Mixture Model

AI for bio
J-P Comet
Introduction
Trees
Clustering
Objectifs
Partitionnement
k-means
GMM
Hiérarchiques
Algorithmes-densité
DBSCAN + OPTICS
Résumé
kNN
Bayes
SVM
NN
Evaluation
Data Mining Project

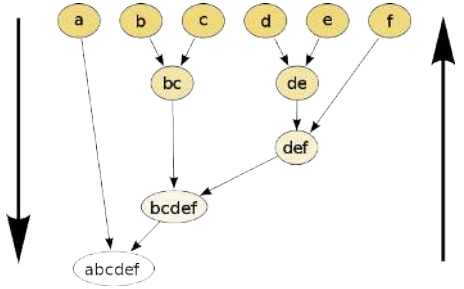


Approches de Clustering

- Algorithmes de Partitionnement : Construire plusieurs partitions puis les évaluer selon certains critères
- **Algorithmes hiérarchiques :** Créer une décomposition hiérarchique des objets selon certains critères
- Algorithmes basés sur la densité : basés sur des notions de connectivité et de densité

- caractéristiques :
  - Une méthode hiérarchique : construit une hiérarchie de clusters, non seulement une partition unique des objets.
  - Le nombre de clusters k n'est pas exigé comme donnée
  - Utilise une matrice de distances comme critère de clustering
  - Une condition de terminaison peut être utilisée (ex. Nombre de clusters)

Dendogramme



- Résultat : Graphe hiérarchique qui peut être coupé à un niveau de dissimilarité pour former une partition.
- La hiérarchie de clusters est représentée comme un arbre de clusters, appelé dendrogramme
- Les feuilles de l'arbre représentent les objets
- Les nœuds intermédiaires de l'arbre représentent les clusters

AGNES : AGgomerative NESting DIANA : DIvisive ANAlysis

Distances entre clusters

- Distance entre les centres des clusters (Centroid Method)
- Distance minimale entre toutes les paires de données des 2 clusters (Single Link Method)
$$d(i,j) = min_{x \in C_i, y \in C_j}\{d(x,y)\}$$
- Distance maximale entre toutes les paires de données des 2 clusters (Complete Link Method)
$$d(i,j) = max_{x \in C_i, y \in C_j}\{d(x,y)\}$$
- Distance moyenne entre toutes la paires d'enregistrements (Average Linkage)
$$d(i,j) = avg_{x \in C_i, y \in C_j}\{d(x,y)\}$$

+ et -

- Avantages :
  - Conceptuellement simple
  - Propriétés théoriques sont bien connues
  - Quand les clusters sont groupés, la décision est définitive ⇒ le nombre d'alternatives différentes à examiner est réduit
- Inconvénients :
  - Groupement de clusters est définitif ⇒ décisions erronées sont impossibles à modifier ultérieurement
  - Méthodes non extensibles pour des ensembles de données de grandes tailles

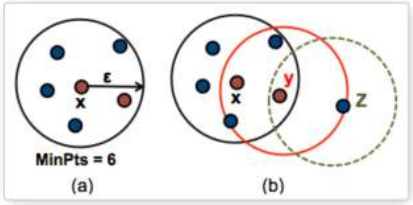
Approches de Clustering

- Algorithmes de Partitionnement : Construire plusieurs partitions puis les évaluer selon certains critères
- Algorithmes hiérarchiques : Créer une décomposition hiérarchique des objets selon certains critères
- **Algorithmes basés sur la densité :** basés sur des notions de connectivité et de densité

- Pour ce types de problèmes, l'utilisation de mesures de similarité (distance) est moins efficace que l'utilisation de densité de voisinage.

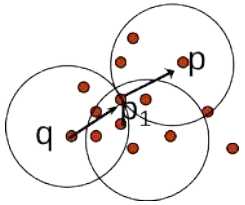
Clustering basé sur la densité

- Voit les clusters comme des régions denses séparées par des régions qui le sont moins (bruit)
- Deux paramètres :
  - ε : Rayon maximum du voisinage
  - MinPts : Nombre minimum de points dans le ε-voisinage d'un point
- Voisinage : $V_\varepsilon(p) = \{q \in D | dist(p,q) \leq \varepsilon\}$
- Un point p est directement densité-accessible à partir de q resp. à $\varepsilon, MinPts$ si
  - $p \in V_\varepsilon(q)$
  - $|V_{\varepsilon(q)}| \geq MinPts$

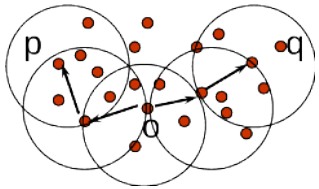


Clustering basé sur la densité

- Accessibilité :
  p est accessible à partir de q resp. à $\varepsilon, MinPts$ s'il existe $p_1, ..., p_n, p_1 = q, p_n = p$ t.q. p_{i+1} est directement densité-accessible à partir de p_i

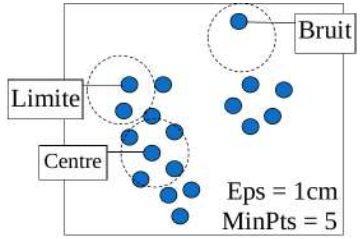


- Connexité :
  p est connecté à q resp. à $\varepsilon, MinPts$ s'il existe un point o t.q. p et q accessibles à partir de o resp. à $\varepsilon, MinPts$.



DBSCAN

- **D**ensity **B**ased **S**patial **C**lustering of **A**pplications with **N**oise
- Un cluster est l'ensemble maximal de points connectés
- Découvre des clusters non nécessairement convexes



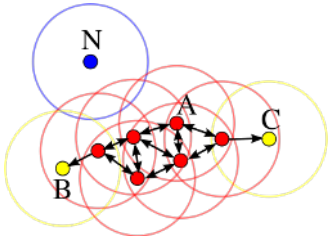
- Algorithme

```
DBSCAN(D, eps, MinPts)
   C = 0
   pour chaque point P non visité des données D
      marquer P comme visité
      PtsVoisins = epsilonVoisinage(D, P, eps)
      si tailleDe(PtsVoisins) < MinPts
         marquer P comme BRUIT
      sinon
         C++
         etendreCluster(D, P, PtsVoisins, C, eps, MinPts)

etendreCluster(D, P, PtsVoisins, C, eps, MinPts)
   ajouter P au cluster C
   pour chaque point P' de PtsVoisins
      si P' n'a pas été visité
         marquer P' comme visité
         PtsVoisins' = epsilonVoisinage(D, P', eps)
         si tailleDe(PtsVoisins') >= MinPts
            PtsVoisins = PtsVoisins U PtsVoisins'
      si P' n'est membre d'aucun cluster
         ajouter P' au cluster C
```

DBSCAN

- **D**ensity **B**ased **S**patial **C**lustering of **A**pplications with **N**oise
- Un cluster est l'ensemble maximal de points connectés
- Découvre des clusters non nécessairement convexes

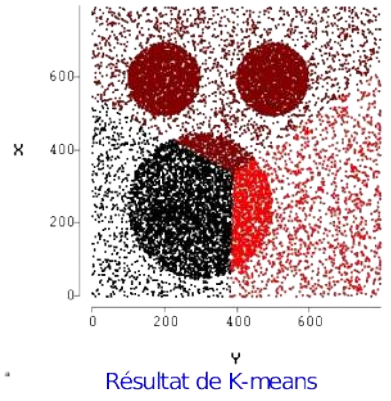


- Algorithme

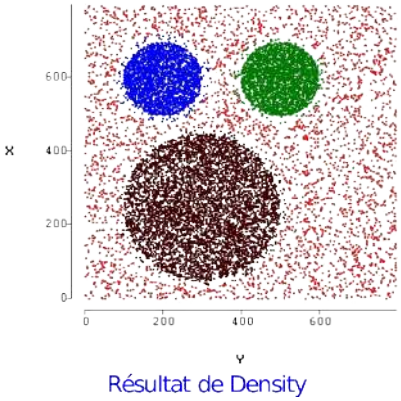
```
DBSCAN(D, eps, MinPts)
   C = 0
   pour chaque point P non visité des données D
      marquer P comme visité
      PtsVoisins = epsilonVoisinage(D, P, eps)
      si tailleDe(PtsVoisins) < MinPts
         marquer P comme BRUIT
      sinon
         C++
         etendreCluster(D, P, PtsVoisins, C, eps, MinPts)

etendreCluster(D, P, PtsVoisins, C, eps, MinPts)
   ajouter P au cluster C
   pour chaque point P' de PtsVoisins
      si P' n'a pas été visité
         marquer P' comme visité
         PtsVoisins' = epsilonVoisinage(D, P', eps)
         si tailleDe(PtsVoisins') >= MinPts
            PtsVoisins = PtsVoisins U PtsVoisins'
      si P' n'est membre d'aucun cluster
         ajouter P' au cluster C
```


Comparaisons



Résultat de K-means



Résultat de Density

OPTICS : Ordering Points to identify the clustering structure[1999]

- Extension de DBSCAN
- ε est optionnel. S'il est omis, il sera alors considéré comme infini.
- L'algorithme définit pour chaque point une distance, appelée **core-distance**, qui décrit la distance avec le $MinPts^{\text{ième}}$ point le plus proche :

$$\text{core-distance}_{\varepsilon,MinPts}(p) = \begin{cases} \text{Indéfini} & \text{si } |V_\varepsilon(p)| < MinPts \\ \text{distance au } MinPts\text{-ème pt le + proche} & \text{sinon} \end{cases} \quad (1)$$

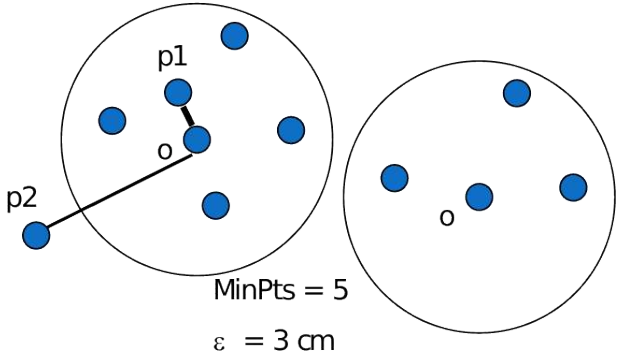
$\Rightarrow$ plus petite distance rendant le point central dense ($\min_\varepsilon$)

- La **reachability-distance** du point p à un autre point o est le max entre la distance entre o et p, et la core-distance de p :

$$\text{reachability-distance}_{\varepsilon,MinPts}(o,p) = \begin{cases} \text{Indéfini} & \text{si } |V_\varepsilon(p)| < MinPts \\ \max(\text{core-distance}_{\varepsilon,MinPts}(p), \text{distance}(p,o)) & \text{sinon} \end{cases} \quad (2)$$

- La core-distance et la reachability-distance sont indéfinis si le groupe de points n'est pas suffisamment dense.

OPTICS : Ordering Points to identify the clustering structure[1999]



- La **reachability-distance** du point p à un autre point o est le max entre la distance entre o et p, et la core-distance de p :

$$\text{reachability-distance}_{\varepsilon,MinPts}(o,p) = \begin{cases} \text{Indéfini} & \text{si } |V_\varepsilon(p)| < MinPts \\ \max(\text{core-distance}_{\varepsilon,MinPts}(p), \text{distance}(p,o)) & \text{sinon} \end{cases} \quad (1)$$

- La core-distance et la reachability-distance sont indéfinis si le groupe de points n'est pas suffisamment dense.

OPTICS : éléments de compréhension

- OPTICS ne produit pas directement des clusters
- il renvoie un *ordre de clustering*
  - tous les individus sont dans une liste ordonné
  - cette liste représente la structure de classification basée sur la densité
- les individus dans un cluster plus dense sont listés plus proches les uns des autres
- Le seuil ε n'est pas obligatoire
- Cet ordre sélectionne un individu qui est atteignable avec la plus faible valeur (ε) de telle manière que les clusters avec des hautes densités seront identifiés avant les autres
- pour chaque individu, on stocke la core-distance, et une reachability-distance
- On maintient une liste ordonnée des individus :
  - triée par la reachability-distance de l'individu-centre le plus proche
  - cad par la plus petite reachability-distance de chaque objet

OPTICS : algo

- commencer avec un individu arbitraire p
- Calculer $V_\varepsilon(p)$ et core-distance(p), reachability-distance(p) =UNDEFINED
- sortir l'individu p
- si p n'est pas un individu-centre : passer à l'individu d'après (soit dans Seeds, soit dans la BD)
- si p est un individu-centre :
  - pour chaque objet q de $V_\varepsilon(p)$:
    - mettre à jour reachability-distance(p)
    - insérer q dans Seeds si q n'a pas été traité
- L'itération continue tant que il reste des éléments dans BD et que Seeds n'est pas vide.

OPTICS : pseudo-code (1/3)

```
OPTICS(setOfObjects, e, MinPts, OrderedFile)
   OrderedFile.open()
   For i from 1 to SetOfObfects.size() Do:
      Obj = SetOfObjects.get(i)
      if not obj.processed then
         ExpandClusterOrder(SetOfObjects,
                            obj,e,MinPts,OrderedFile)
   OrderedFile.close()
```


OPTICS : pseudo-code (2/3)

```
ExpandClusterOrder(SetOfObjects,obj,e,MinPts,OrderedFile)
   neighbors = SetOfObjects.neighbors(obj,e)
   obj.processed = TRUE
   obj.reachDist = UNDEFINED
   obj.setCoreDistance(neighbrs,e,MinPts)
   OrderedFile.write(obj)
   if obj.coreDist <> UNDEFINED  then  (obj est un "centre")
      Seeds.update(neighbors, obj)
      While not Seeds.empty() do:
         currentObj = Seeds.next()
         neighbors = SetOfObjects.neighbors(currentObj,e)
         currentObj.processed = TRUE
         currentObj.setCoreDistance(neighbrs,e,MinPts)
         OrderedFile.write(currentObj)
         if currentObj.coreDist <> UNDEFINED  then
            Seeds.update(neighbors, currentObj)
```

Obj est implement écrit dans le fichier OrderedFile avec ses core-distance et reachability-distance

OPTICS : pseudo-code (3/3)

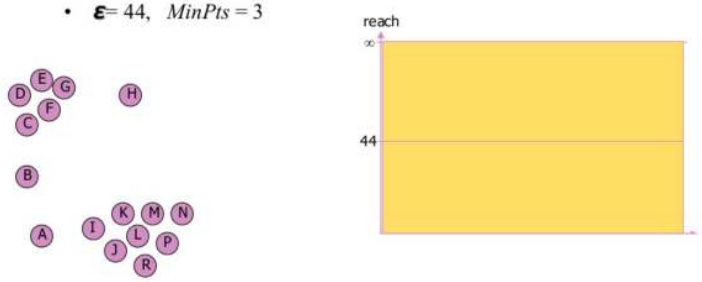
```
Seeds::update(neighbors, centerObj):
  c_dist = centerObj.coreDist
  for all obj from neighbors Do:
    if not obj.processed then:
      new_r_dist =  max(c_dist, centerObj.dist(obj))
      if obj.reachDist = UNDEFINED then:
        obj.reachDist = new_r_dist
        insert(obj,new_r_dist)
      else: // obj est déjà dans Seeds
        if new_r_dist < obj.reachDist then
          obj.reachDist = new_r_dist
          decrease(obj,new_r_dist)
```


OPTICS : finalement ...

- précondition $\varepsilon' \leq \varepsilon$ (utilisé avant)
- on n'a pas encore trouvé de cluster, donc au début, `ClusterID = NOISE`
- Pour tout Obj de la liste triée (pris dans l'ordre) :
  - Si `Obj.reachDist`$> \varepsilon'$: // `UNDEF`$> \varepsilon$
    - Si `Obj.coreDist`$\leq \varepsilon'$:
      `ClusterID = nextID(ClusterID)` // un cluster trouvé
      `Obj.clusterID = ClusterID`
    - Sinon
      `Obj.clusterID = NOISE`
  - Sinon
    `Obj.clusterID = ClusterID`

OPTICS : Exemple

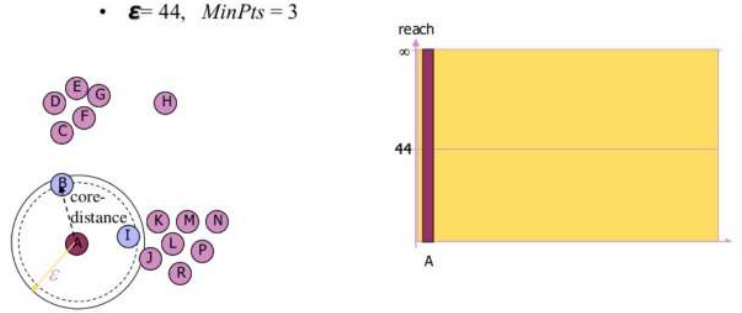
- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- ε= 44, *MinPts* = 3



seedlist:

OPTICS : Exemple

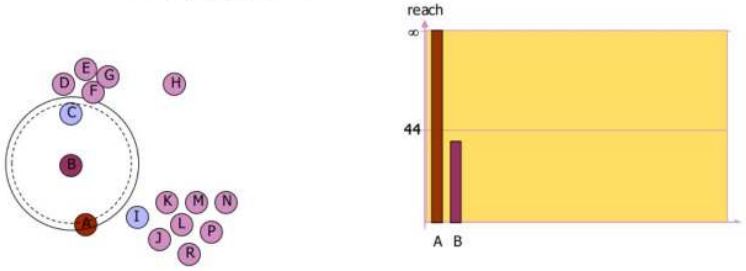
- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- ε= 44, *MinPts* = 3



seedlist: (B,40) (I, 40)

OPTICS : Exemple

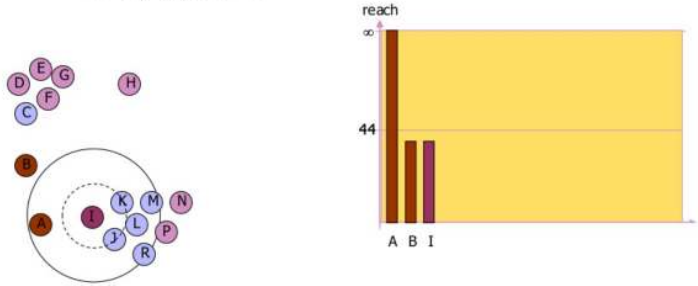
- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- $\varepsilon = 44$, $MinPts = 3$



seedlist: (I, 40) (C, 40)

OPTICS : Exemple

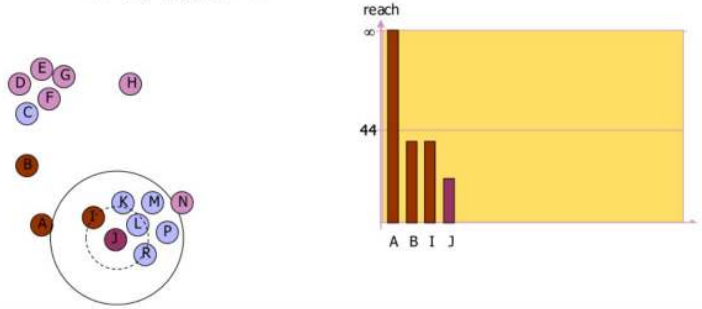
- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- $\varepsilon = 44$, $MinPts = 3$



seedlist: (J, 20) (K, 20) (L, 31) (C, 40) (M, 40) (R, 43)

OPTICS : Exemple

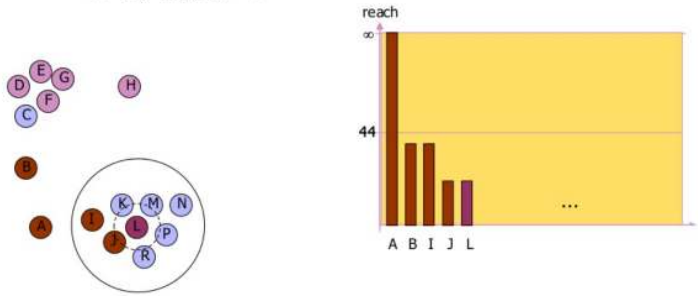
- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- $\varepsilon = 44$, $MinPts = 3$



seedlist: (L, 19) (K, 20) (R, 21) (M, 30) (P, 31) (C, 40)

OPTICS : Exemple

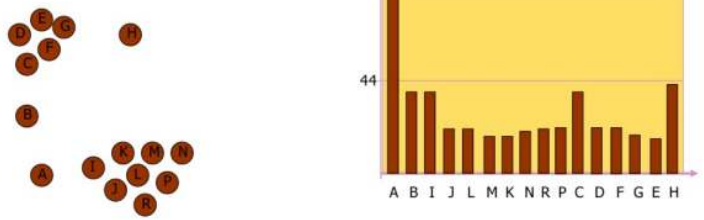
- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- $\varepsilon = 44$, $MinPts = 3$



seedlist: (M, 18) (K, 18) (R, 20) (P, 21) (N, 35) (C, 40)

OPTICS : Exemple

- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- $\varepsilon = 44$, $MinPts = 3$



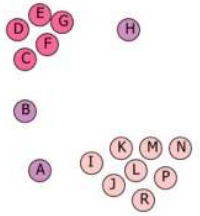
seedlist: -

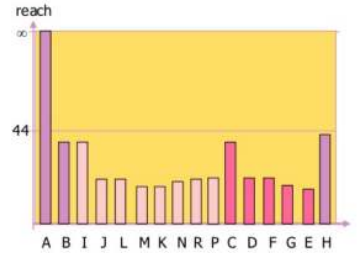
CÔTE D'AZUR

OPTICS : Exemple

AI for bio
J-P Comet
Introduction
Trees
Clustering
Objectifs
Partitionnement
k-means
GMM
Hiérarchiques
Algorithmes-densité
DBSCAN + OPTICS
Résumé
kNN
Bayes
SVM
NN
Evaluation
Data Mining
Project

- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- $\varepsilon = 44$, $MinPts = 3$



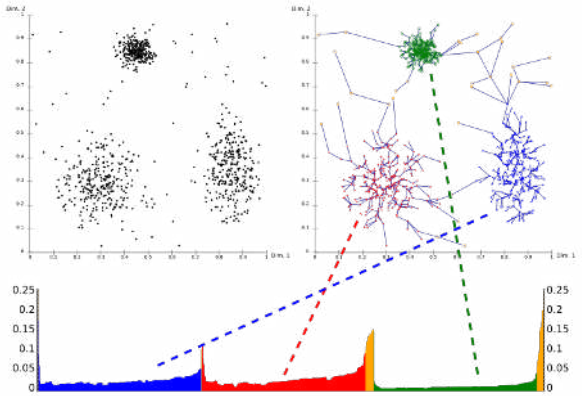


seedlist: -

CÔTE D'AZUR

OPTICS : illustration

AI for bio
J-P Comet
Introduction
Trees
Clustering
Objectifs
Partitionnement
k-means
GMM
Hiérarchiques
Algorithmes-densité
DBSCAN + OPTICS
Résumé
kNN
Bayes
SVM
NN
Evaluation
Data Mining
Project



La sortie de l'algorithme : liste ordonnée de point associés à leur plus petite reachability-distance.
⇒ diagramme appelé reachability-plot :
- axe x : position d'un point dans la liste ordonnée
- axe y la reachability-distance associée
Les points d'un même cluster ont une reachability-distance assez basse, les vallées du diagramme représentent donc les différents clusters du jeu de données. Plus les vallées sont profondes, plus les clusters sont denses.

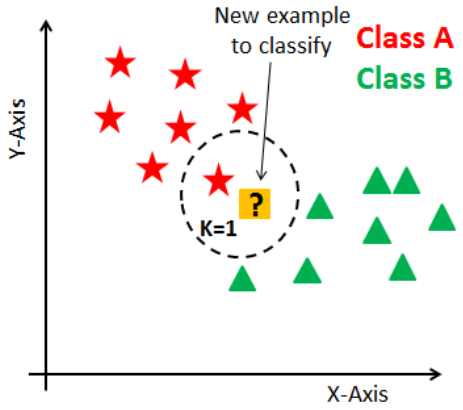
CÔTE D'AZUR

Résumé

AI for bio
J-P Comet
Introduction
Trees
Clustering
Objectifs
Partitionnement
k-means
GMM
Hiérarchiques
Algorithmes-densité
DBSCAN + OPTICS
Résumé
kNN
Bayes
SVM
NN
Evaluation
Data Mining
Project

- Le clustering groupe des objets en se basant sur leurs **similarités**.
- Le clustering possède plusieurs applications.
- La mesure de similarité peut être calculée pour **différents types** de données.
- La sélection de la **mesure de similarité** dépend des données utilisées et le type de similarité recherchée.
- Les méthodes de clustering peuvent être classées en :
  - Méthodes de partitionnement,
  - Méthodes hiérarchiques,
  - Méthodes à densité de voisinage
  - Méthodes par grilles
  - Méthodes mixtes, ...
- Plusieurs travaux de recherche sur le clustering en cours...
  - Passage à l'échelle : échantillonnage, optimisation, indexation, mixages, ...
  - Prise en compte de contraintes : connaissances utilisateur ou données / objectifs utilisateur
- Applications en perspective : Génomique, Environnement, ... Tout...
- Évaluation des clusters : Que signifie un "bon" cluster ?
  - intra-clusters : haut degré de similarité
  - Utilisation de la variance [1] ⇒ les clusters avec la variance la plus petite sont bons.
  - La taille du cluster est aussi importante, donc une approche alternative est d'utiliser la variance pondérée [2]

k Nearest Neighbours



Classification à base d'exemples représentatifs

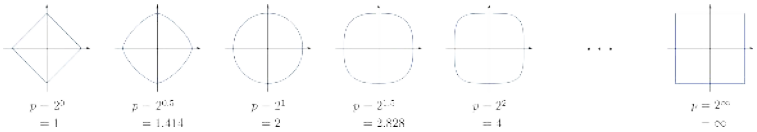
- Principe intuitif de l'algorithme des plus proches voisins (k nearest neighbors) :
  1. on stocke les exemples tels quels dans une table ;
  2. pour prédire la classe d'une donnée, on détermine les exemples qui en sont le plus proche ;
  3. de ces exemples, on déduit la classe ou on estime l'attribut manquant de la donnée considérée.
- Mesure de la dissimilarité entre deux données distantes.
  Mathématiquement parlant, une **distance** d est une application définie par :

$$\begin{array}{rccc} d & : & D \times D & \rightarrow & \mathbb{R}^+ \\ & & (x,y) & \rightarrow & d(x,y) \end{array}$$

  qui respecte les 3 propriétés suivantes $\forall (x,y,z) \in D^3$:
  1. non dégénérée : $d(x,y) = 0 \Leftrightarrow x = y$,
  2. symétrique : $d(x,y) = d(y,x)$,
  3. inégalité triangulaire : $d(x,z) \leq d(x,y) + d(y,z)$.
- Un espace de points muni d'une distance est un **espace métrique**.

Les distance les plus usuelles

- Les distances les plus classiques sont issues des normes de Minkowski. Elles concernent des données dont les attributs sont quantitatifs. Les plus classiques sont :
  1. distance euclidienne : $\delta(x_i, x_j) = \sqrt{\sum_{k=1}^{D} (x_{i,k} - x_{j,k})^2}$
     sensible aux valeurs éloignées de la moyenne / continument dérivable.
  2. distance de Manhattan : $\delta(x_i, x_j) = \sum_{k=1}^{D} |x_{i,k} - x_{j,k}|$
     Beaucoup moins sensible aux valeurs éloignées de la moyenne / pas dérivable en 0 ;
  3. la distance maximale : $\delta(x_i, x_j) = \max_{k \in \{1,\ldots,D\}} |x_{i,k} - x_{j,k}|$.
     Cette mesure est simplement le plus grand écart entre x_i et x_j.



- Dissimilarité.
  - Utiliser une distance n'est pas si simple que cela imposer l'inégalité triangulaire est souvent problématique.
  - On se contente alors d'une dissimilarité : application qui associe un réel positif à un couple de données et qui vérifie les deux propriétés de non dégénérescence et symétrie.
  - Ces deux propriétés sont assez faciles à respecter, même pour des attributs non quantitatifs.

- **Attribut numérique.**
  - la dissimilarité introduite plus haut s'applique immédiatement.
  - PB si l'ordre de grandeur des attributs à combiner n'est pas le même pour tous : les attributs d'ordre de grandeur les plus grands vont dominer.
    $\Rightarrow$ mettre à l'échelle les attributs. Si l'attribut a_i prend sa valeur dans $[min(a_i), max(a_i)]$, on utilise l attribut normalisé :

$$\hat{a_i} = \frac{a_i - min(a_i)}{max(a_i) - min(a_i)} \qquad \in [0,1]$$

  - lorsque certains attributs sont plus importants que d'autres, on peut donc pondérer les attributs en fonction de leur importance.
- **Attribut nominal et attribut ordinal.**
  - La dissimilarité est généralement définie par :
    - =0 si la valeur de l'attribut est la même,
    - =1 sinon.
  - cette définition n'est pas adaptée pour les attributs ordinaux.
    Ex : l'attribut "couleur" $\in$ {rouge, jaune, rose, vert, bleu, turquoise}.
    la dissimilarité entre "bleu" et "rouge" est plus grande qu'entre "rouge" et "jaune".
- **Valeur d'attribut manquante.**
  Si une valeur d'attribut est manquante dans une donnée, on considère généralement que la dissimilarité pour cet attribut est maximale.

kNN : algorithm

Nécéssite: 3 parameters : a set of exemples X, a new data $x \in D$ and $k \in \{1, ..., N\}$
Résultat : the predicted class of x

for *each example* $x_i \in X$ **do**
  compute the dissimilarity between x_i and x : $\delta(x_i, x)$
end
for $\kappa \in \{1, ..., k\}$ **do**
  $kNN[\kappa] \leftarrow argmin_{i \in \{1,...,N\}} \delta(x_i, x)$
  $\delta(x_i, x) \leftarrow +\infty$
end
determine the class of x from the classes of examples whose number is stocked in table *kNN*

Algorithm 1:

Prediction of the class associated to a a new data by the method « k Nearest Neighbours »

Choisir k

- Il n'y a pas de méthode particulière sinon qu'il faut choisir le k qui va bien pour les données que l'on a !
- on peut aussi prendre $k = N$ dans le cas où l'influence de chaque exemple est pondérée par sa dissimilarité avec la donnée à classer.
- Prendre k petit (1, 2 ou 3 par exemple) est aussi une bonne stratégie dans la pratique, beaucoup moins coûteuse en temps de calcul quand le nombre de données est grand.

Mesurer la similarité. on peut mesurer leur similarité et inverser le raisonnement par rapport à une dissimilarité (en particulier, dans l'algorithme, il suffit de remplacer l'argmin par un argmax).

- Notons $\overline{\delta}$ une fonction de similarité. En général, celle-ci doit respecter :
  - $\overline{\delta}(x, x)$ est maximal, voire infini ;
  - $\overline{\delta}(x, y) = \overline{\delta}(y, x), \forall (x, y)$
- Une fonction populaire respectant ces deux propriétés est la fonction normale :

$$\overline{\delta}(x, y) = e^{-\frac{\delta(x,y)}{2\sigma^2}}$$

où $\delta(x, y)$ est une certaine distance ou dissimilarité entre $x \in D$ et $y \in D$.
σ permet de régler le rayon d'influence de chaque donnée : plus σ est grand, plus ce rayon est grand.
Cette fonction porte aussi le nom de "fonction à base radiale".

Prédire la classe d'une donnée

Plusieurs stratégies sont envisageables. On suppose un problème de classification binaire et on définit classe$(x) = +1$ pour une donnée x positive, classe$(x) = -1$ si elle est négative.

- la classe majoritaire parmi les k plus proches voisins, soit :

$$classe(x) \leftarrow sgn \sum_{\kappa=1}^{\kappa=k} classe(kNN[\kappa]) \quad \text{avec} \quad sgn(x) = \begin{cases} +1 & si \quad x \leq 0 \\ -1 & si \quad x < 0 \end{cases}$$

  la somme est de signe positif s'il y a plus de positifs parmi les k plus proches voisins que de négatifs, et réciproquement.
- la classe majoritaire parmi les k plus proches en pondérant la contribution de chacun par l'inverse de sa dissimilarité à x, soit :

$$classe(x) \leftarrow sgn \sum_{\kappa=1}^{\kappa=k} f(\delta(x_{kNN[\kappa]}, x)) \times classe(kNN[\kappa]).$$

  f peut être choisie de différentes manières :
  - normale : $f(\delta) = e^{-\delta}$;
  - inverse : $f(\delta) = \frac{1}{\delta}$;
  - ...

Comme toujours en IA, toute autre solution est envisageable, à partir du moment où elle est cohérente avec les données et la définition de leurs attributs.