Qu'est-ce que le clustering ?

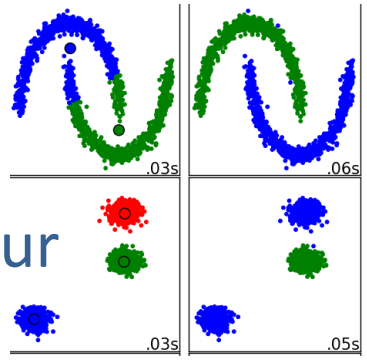
- analyse de clustering
  - regroupement des objets en clusters
- un cluster : une collection d'objets
  - similaires au sein d'un même cluster
  - dissimilaires aux objets appartenant à d'autres clusters
- classification non supervisée : pas de classes prédéfinies
- Applications typiques
  - afin de mieux comprendre les données
  - comme prétraitement avant d'autres analyses

Qu’est-ce qu’un bon clustering ?

- Une bonne méthode va produire des clusters dont les éléments ont
  - une forte similarité intra-classe
  - une faible similarité inter-classe
- La qualité d’un clustering dépend de la mesure de similarité
- La qualité d’une méthode peut aussi être mesurée par sa capacité à trouver quelques ou tous les motifs intéressants

Caractéristiques des méthodes de clustering

- Mise à l'échelle
- Capacité à gérer différents types d'attributs
- Découverte de clusters avec des formes arbitraires
- Besoin minimum de connaissances du domaine pour déterminer les paramètres
- Capacité à gérer le bruit et les exceptions
- Indifférent à l'ordre des données en entrée
- Nombre de dimensions
- Incorporation de contraintes par l'utilisateur
- Interprétabilité et utilisabilité



- Matrice de données

$$\begin{bmatrix} x_{11} & \dots & x_{1f} & \dots & x_{1p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{i1} & \dots & x_{if} & \dots & x_{ip} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{n1} & \dots & x_{nf} & \dots & x_{np} \end{bmatrix}$$

- Matrice de distance (ou dissimilarité)

$$\begin{bmatrix} 0 & & & & \\ d(2,1) & 0 & & & \\ d(3,1) & d(3,2) & 0 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \\ d(n,1) & d(n,2) & \dots & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

Similarité et dissimilarité

- Métrique de similarité/dissimilarité : exprimée en termes d'une fonction de distance, typiquement *d(i,j)*
- Fonction de distance dépend du type des données : binaires, nominales, ordinales ou continues
- Pondération des dimensions selon l'application et la sémantique des données
- Difficulté de définir « suffisamment similaires »
  - la réponse est très subjective

Types de données

- continue sur un intervalle
  - ex : poids, taille
- binaire
- nominale
  - ex : couleur
- ordinale
- à échelle variable
  - ex : croissance exponentielle des bactéries, durée de la radioactivité
- Mixte

Valeurs continues sur un intervalle, normalisation

- Normaliser les données : s'affranchir des unités de mesures
- écart absolu à la moyenne

$$s_f = \frac{1}{n}(|x_{1f} - m_f| + |x_{2f} - m_f| + ... + |x_{nf} - m_f|)$$

- Calculer la mesure normalisée (z-score)

$$z_{if} = \frac{x_{if} - m_f}{s_f}$$

- L'utilisation de l'écart absolu est plus robuste que celle de l'écart type

Valeurs continues sur un intervalle, Fonction de distance

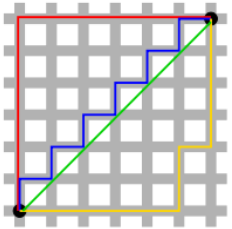
- Distance de Minkowski :

$$d(i,j) = \sqrt[q]{(|x_{i_1} - x_{j_1}|^q + |x_{i_2} - x_{j_2}|^q + \ldots + |x_{i_p} - x_{j_p}|^q)}$$

avec $i = (x_{i1}, x_{i2}, \ldots, x_{ip})$ et $j = (x_{j1}, x_{j2}, \ldots, x_{jp})$ deux objets à p dimensions, et q un entier positif

- si $q = 1$: distance de Manhattan

$$d(i,j) = |x_{i_1} - x_{j_1}| + |x_{i_2} - x_{j_2}| + \ldots + |x_{i_p} - x_{j_p}|$$



- si $q = 2$:distance euclidienne

$$d(i,j) = \sqrt{(|x_{i_1} - x_{j_1}|^2 + |x_{i_2} - x_{j_2}|^2 + \ldots + |x_{i_p} - x_{j_p}|^2)}$$

- Propriétés
  - $d(i,i) = 0$
  - $d(i,j) \geq 0$ (positive)
  - $d(i,j) = d(j,i)$ (symétrique)
  - $d(i,j) \leq d(i,k) + d(k,j)$ (inégalité triangulaire)

- Dissimilarité basée sur un coefficient de corrélation
  - Pearson, Spearman,
  - d(x,y) = 1 – corr(x,y)

- Distance de Canberra (~ Manhattan pondérée)
  - $d(p,q) = \sum_{i=1}^{n} \frac{|p_i - q_i|}{|p_i| + |q_i|}$
- Similarité = cosinus de l'angle formé par les 2 vecteurs
- Distance de Mahalanobis
  - Distance d'un point à un ensemble
    - *x* un vecteur/point
    - *S* Matrice de variance-covariance

$$D_M(x) = \sqrt{(x-\mu)^T S^{-1} (x-\mu)}.$$

- table de contingence

		Objet *j* = 1	Objet *j* = 0
Objet *i*	1	*a*	*b*
	0	*c*	*d*

- coefficient simple d'appariement (invariant, si la variable est symétrique)

$$d(i, j) = \frac{b + c}{a + b + c + d}$$

- coefficient de Jaccard (non invariant, si la variable est asymétrique)

$$d(i, j) = \frac{b + c}{a + b + c}$$

Dissimilarité de valeurs binaires

- Exemple

Nom	Sexe	Fièvre	Tousse	Test-1	Test-2	Test-3	Test-4
Jacques	M	O	N	P	N	N	N
Marie	F	O	N	P	N	P	N
Jean	M	O	P	N	N	N	N

- sexe est symétrique
- les autres sont asymétriques
- soit O et P = 1, et N = 0

$$d(jacques, marie) = \frac{0+1}{2+0+1} = 0.33$$

$$d(jacques, jean) = \frac{1+1}{1+1+1} = 0.67$$

$$d(jean, marie) = \frac{1+2}{1+1+2} = 0.75$$

Variables nominales

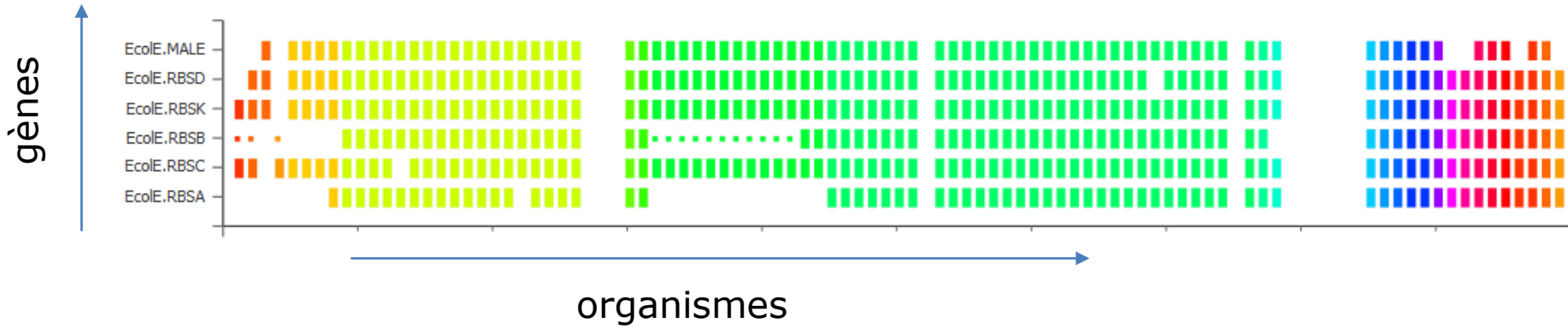
- généralisation des valeurs binaires : plus de 2 états
- méthode 1 : appariement simple
  - m : nombre d'appariements, p : nombre total de variables

$$d(i, j) = \frac{p - m}{p}$$

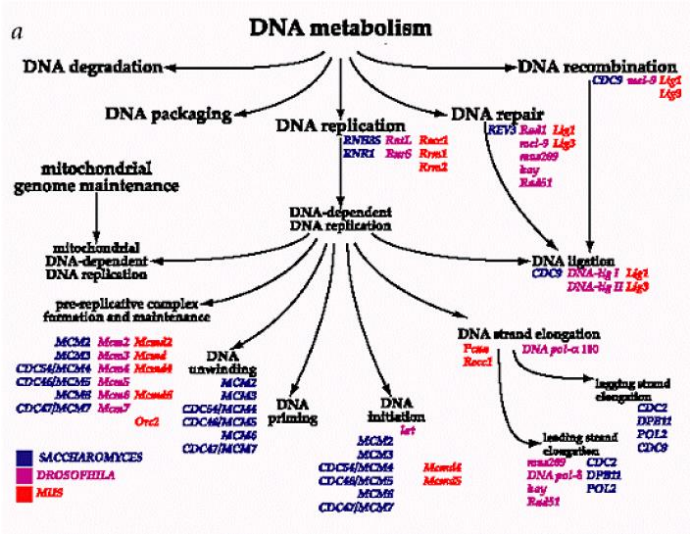
- méthode 2 : utiliser un grand nombre de variables binaires
  - création d'une variable binaire pour chacun des états d'une variable nominale
- Information mutuelle

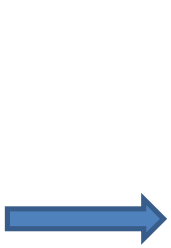
$$I(X;Y) = \sum_{y \in Y} \sum_{x \in X} p(x,y) \log \left(\frac{p(x,y)}{p(x)\,p(y)} \right),$$

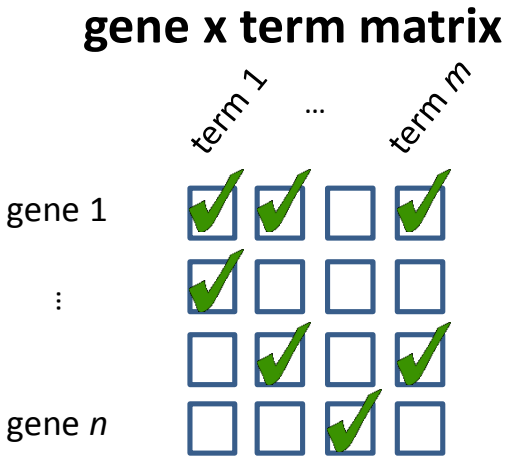
- Profils phylogénétiques



- Annotations, ex: Gene Ontology







Variable ordinale

- l'ordre est important : rang
- peut être traitée comme une variable continue sur un intervalle
  - remplace x_{if} par son rang $r_{if} \in \{1, \ldots, M_f\}$
  - transforme chaque variable sur [0,1] en remplaçant le *i*-ième objet de la *f*-ième variable

$$z_{if} = \frac{r_{if} - 1}{M_f - 1}$$

  - calcule la dissimilarité en utilisant les méthodes de valeurs continues sur un intervalle

à échelle variable

- mesure positive sur une échelle non linéaire, échelle exponentielle qui suit approximativement Ae^{BT} ou Ae^{-BT}
- Méthodes
  - les traiter comme des variables continues sur un intervalles : mauvais choix
  - appliquer une transformation logarithmique puis les traiter comme des variables continues sur un intervalle

$$y_{if} = log(x_{if})$$

  - les traiter comme des variables ordinales en traitant leur rang

Variables de type mixte

- Les objets peuvent être décrits avec tous les types de données
  - binaire symétrique, binaire asymétrique, nominale, ordinale, …

- Utilisation d'une formule pondérée pour combiner leurs effets

$$d(i, j) = \frac{\sum_{f=1}^{p} \delta_{ij}^{(f)} d_{ij}^{(f)}}{\sum_{f=1}^{p} \delta_{ij}^{(f)}}$$

Principales approches

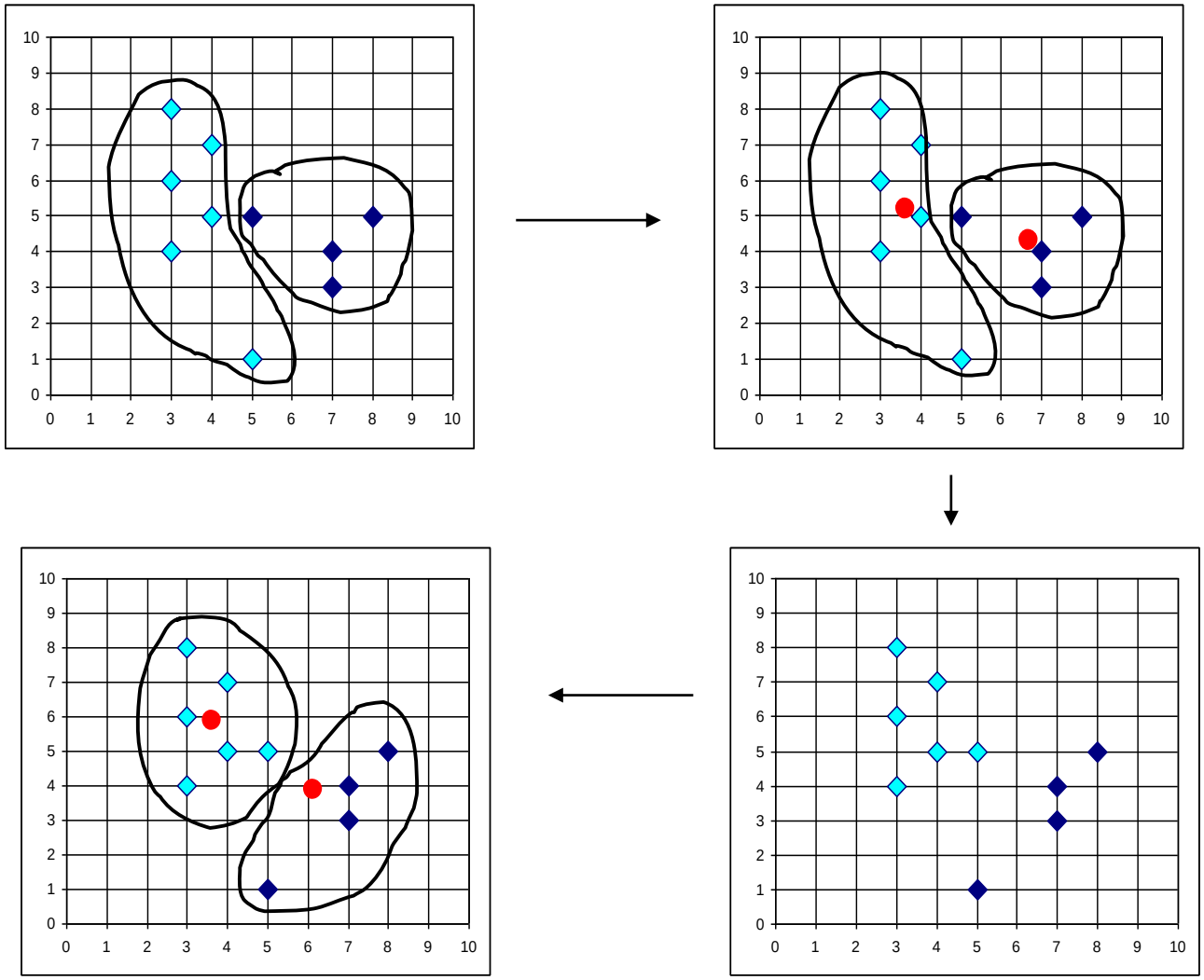
- partitionnement
  - partitionne les objets et évalue les partitions
- hiérarchique
  - décomposition hiérarchique d'ensembles d'objets
- densité
  - basée sur une fonction de densité ou de connectivité
- grille
  - basée sur une structure de granularité à plusieurs niveaux

Partitionnement

- Construire une partition de la base de données *D* contenant *n* objets en un ensemble de *k* clusters
- Etant donné *k*, trouvé une partition en *k* clusters qui optimisent le critère de partitionnement
  - Optimum global : traiter toutes les partitions exhaustivement
  - Heuristique : *k-means* ou *k-médoïdes*
    - *k-means* : chaque cluster est représenté par son centre
    - *k-médoïdes* ou *PAM (partition around medoids)* : chaque cluster est représenté par un des objets du cluster

- 4 étapes
  1. Partitionne les objets en *k* ensembles non vides
  2. Calcule le centroïde de chaque partition/cluster
  3. Assigne à chaque objet le cluster dont le centroïde est le plus proche
  4. boucle en 2, jusqu'à ce les clusters soient stables.

k-means, exemple



k-means. Remarques

- Avantages
  - Relativement efficace : *O(*tkn*)*, avec n le nombre d'objets, t le nombre d'itérations et en général t et k << n
  - Termine souvent sur un optimum local. L'optimum global peut être atteint en utilisant des techniques telles que les algorithmes génétiques
- Faiblesses
  - Utilisable seulement lorsque la moyenne est définie. Que faire dans le cas de données nominales ?
  - Besoin de spécifier k à l'avance
  - Ne gère pas le bruit et les exceptions
  - Ne trouve que des clusters de forme convexe

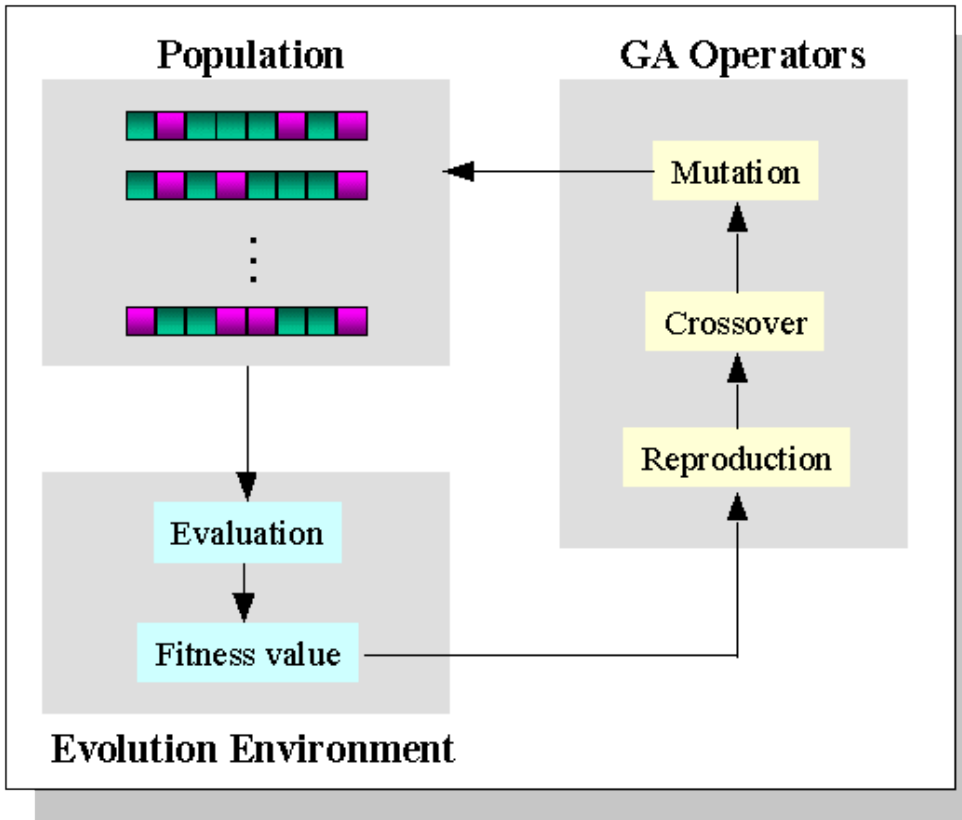
Algorithme génétique

- Individu (0011…100)= solution. Fonction endocage/décodage
- Sélection : score de fitness
- Reproduction. Ex : tirage aléatoire (avec remise) avec probabilité d'être tirée qui dépend du score de fitness
- Opération de crossing over et de mutation

- Paramètres :
  - nombre d'invidus dans la population
  - taux de mutation et de crossing over
  - fonction d'évaluation
  - nombre de générations ou seuil sur le score de fitness

- Variantes :
  - fonction de fitness qui évolue

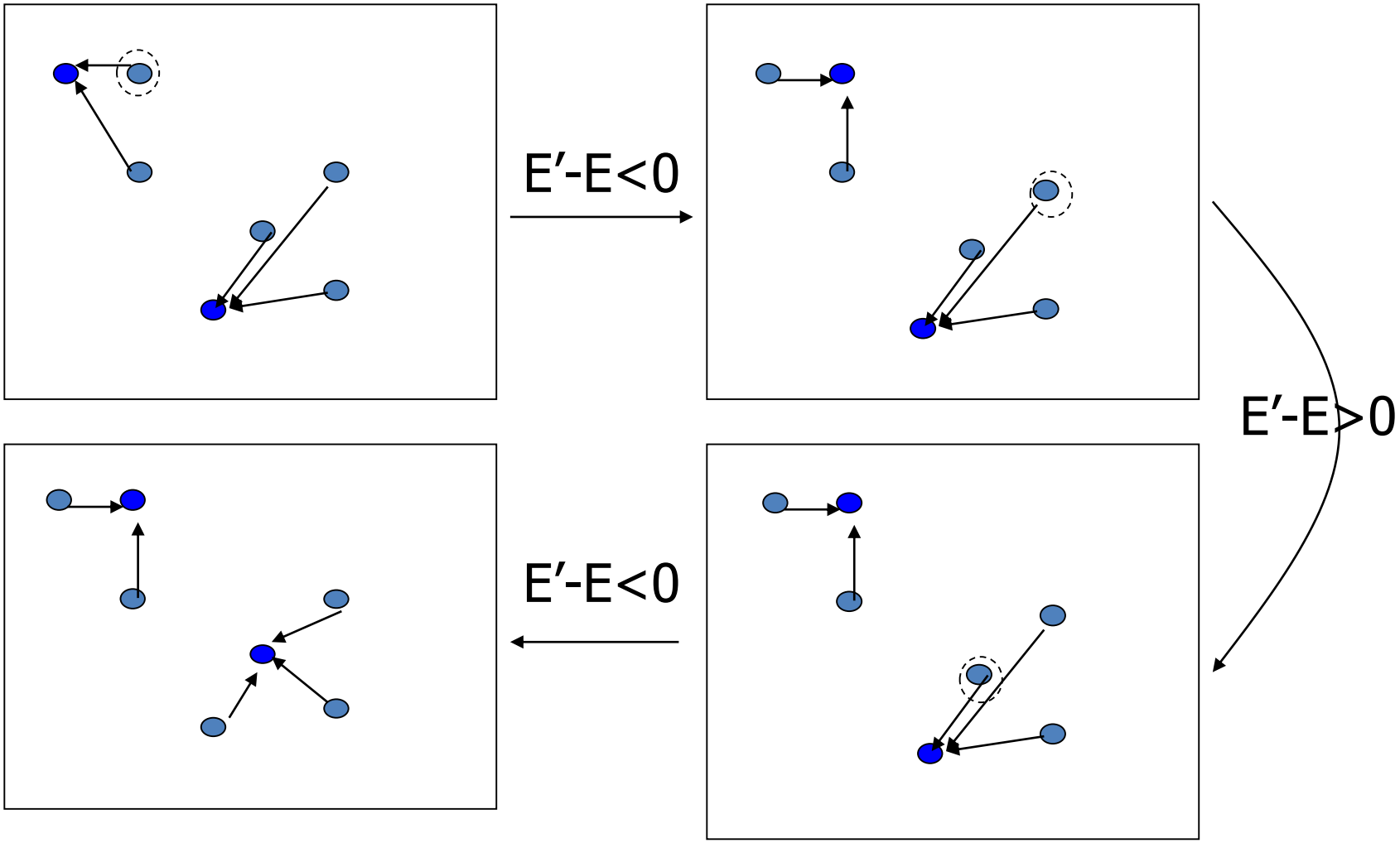
- Voir aussi
  - programmation génétique



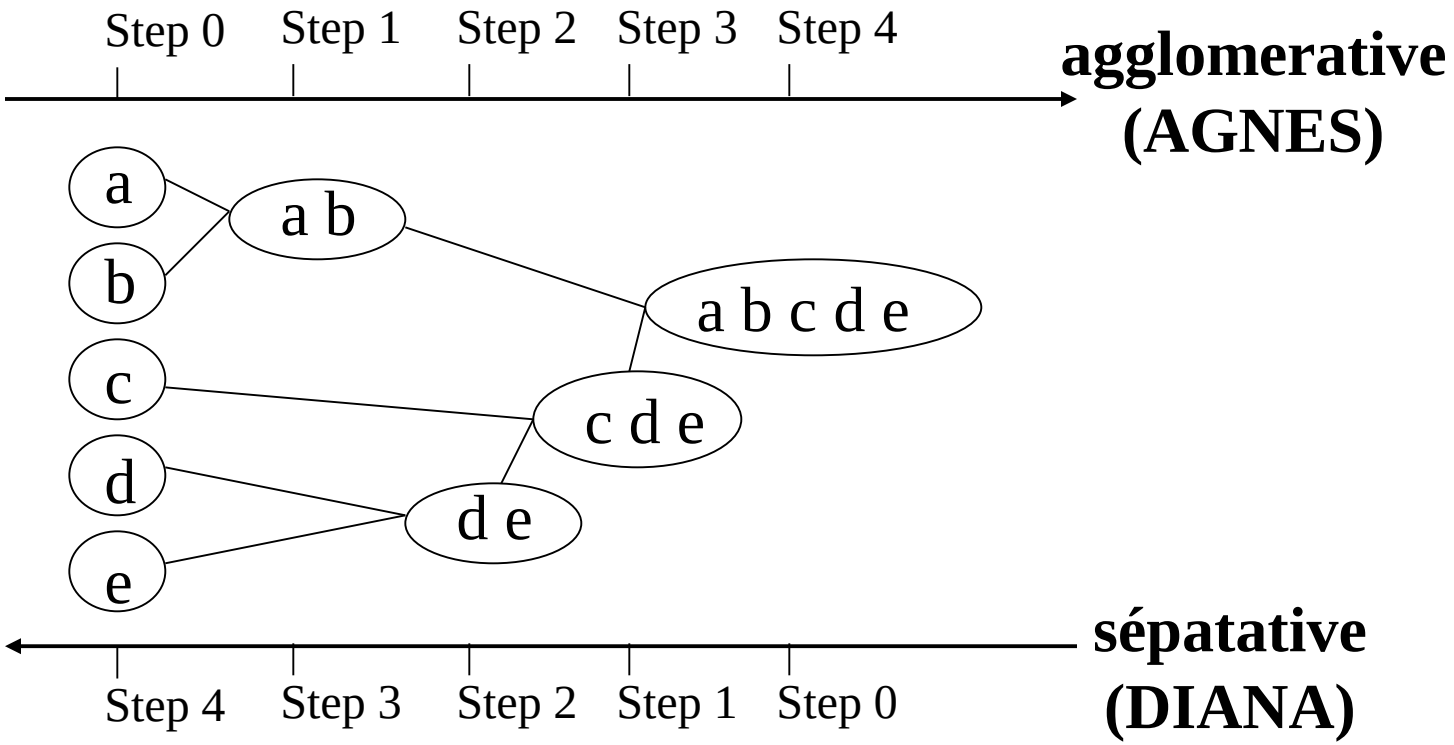
k-médoïdes

- Trouve des représentants, appelés médoïdes, dans les clusters
- PAM
  - médoïde : l'objet d'un cluster pour lequel la distance moyenne à tous les autres objets du cluster est minimale
  - critère d'erreur : $$E = \sum_{i=1}^{k} \sum_{p \in C_i} d(p, m_i)^2$$
- Algorithme
  1. Sélectionner *k* objets arbitrairement
  2. Assigner le reste des objets au médoïde le plus proche
  3. Sélectionner un objet non médoïde et échanger si le critère d'erreur peut être réduit
  4. Répéter 2 et 3 jusqu'à ne plus pouvoir réduire le critère d'erreur

PAM. Exemple

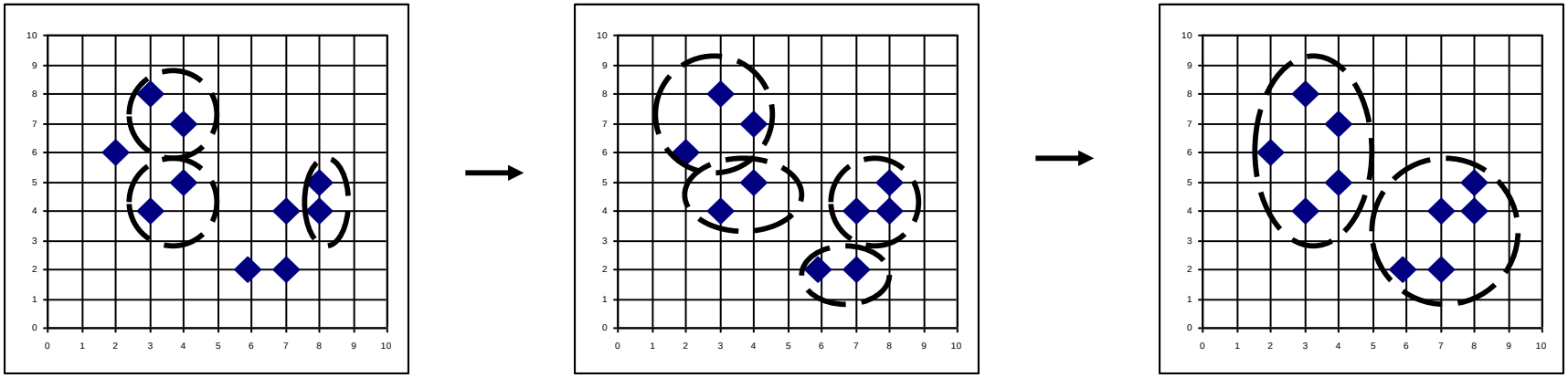


- Utilisation d'une matrice de distance : ne nécessite pas de spécifier le nombre de clusters



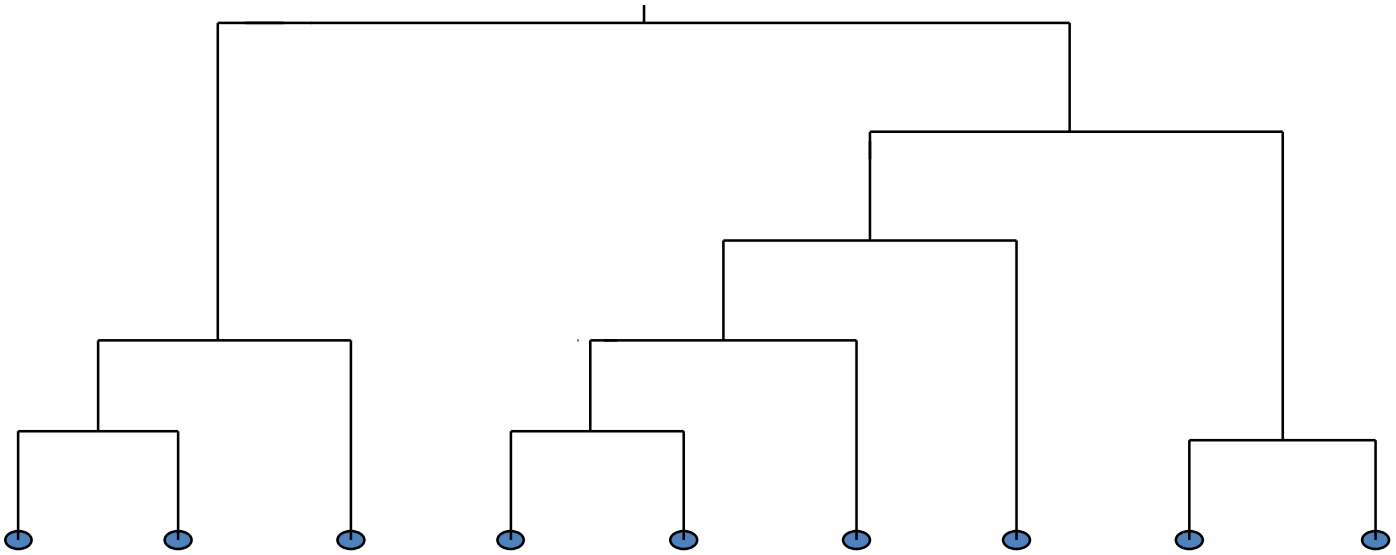
AGNES (Agglomerative Nesting)

- Utilise une matrice de dissimilarité
- Fusionne les nœuds les moins dissimilaires



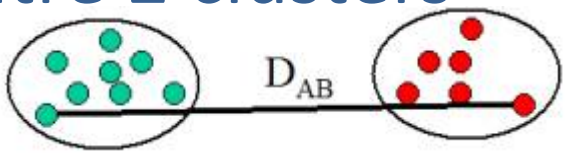
Un dendrogramme illustre comment les clusters sont fusionnés hiérarchiquement

- Décompose les données en plusieurs niveaux imbriqués de partitionnement
- Un clustering est obtenu en coupant le dendogramme au niveau choisi

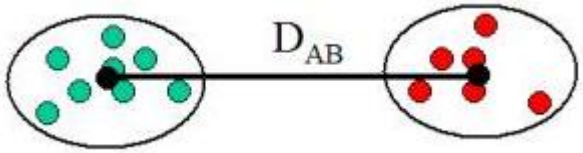


Mesures de similarité entre 2 clusters

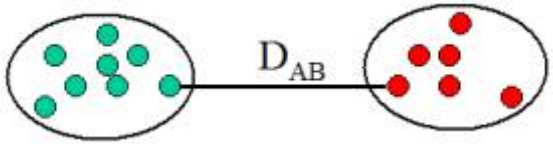
- complete linkage
  - plus petite similarité/plus grande distance entre toutes les paires d'éléments entre 2 clusters



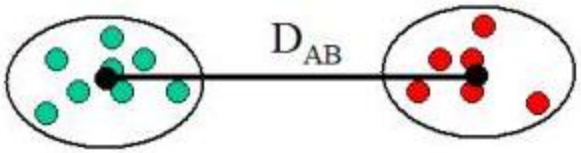
- average linkage
  - similarité moyenne entre les paires de d'éléments



- single linkage
  - plus grande similarité/plus petite distance entre 2 éléments de 2 clusters



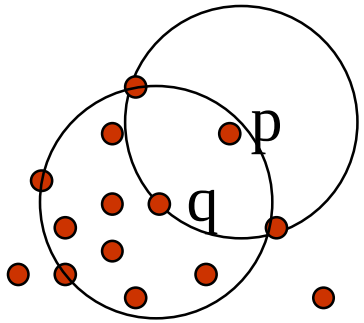
- centroïde
  - distance entre les centroïdes des clusters



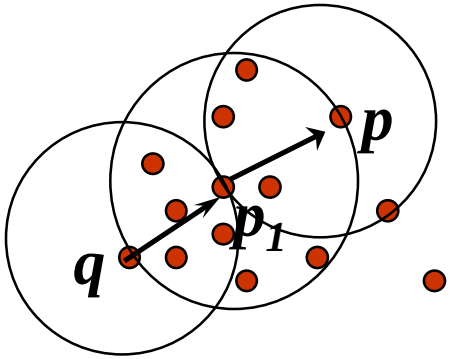
- Ward
  - distance = augmentation de la distance au carré au centroïde en fusionnant 2 clusters

Méthodes basées sur la densité

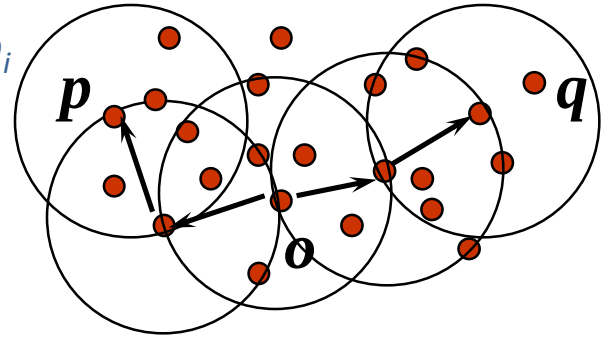
- Principales caractéristiques
  - Cluster de forme arbitraire
  - Gestion du bruit
  - Besoin d'un paramètre de densité comme critère d'arrêt
- 2 paramètres
  - Eps : rayon maximal de voisinage
  - MinPts : nombre minimal de points dans le voisinage défini par Eps



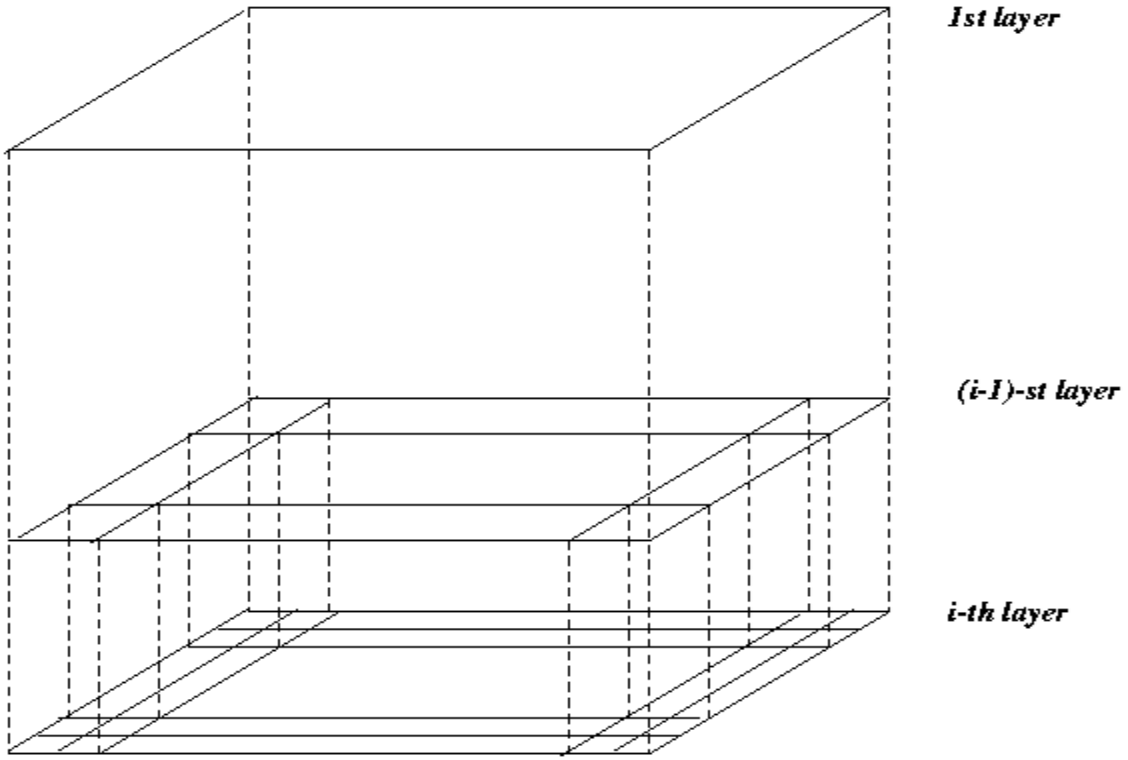
- $N_{Eps}(p) : \{ q \in D \mid dist(p,q) \leq Eps\}$
- un point *p* est **directement atteignable** d'un point *q* si
  - *p* appartient à $N_{Eps}(q)$
  - $|N_{Eps}(q)| \geq MinPts$



- un point *p* est **atteignable** d'un point *q* si
  - il existe une chaîne de points $p_1, \ldots, p_n$ telle que $p_1=q$ et $p_n=p$ et que les p_{i+1} sont directement atteignables des p_i
- un point *p* est **connecté** à un point *q* si
  - il existe un point *o* tel que *p* et *q* sont atteignables depuis *o*

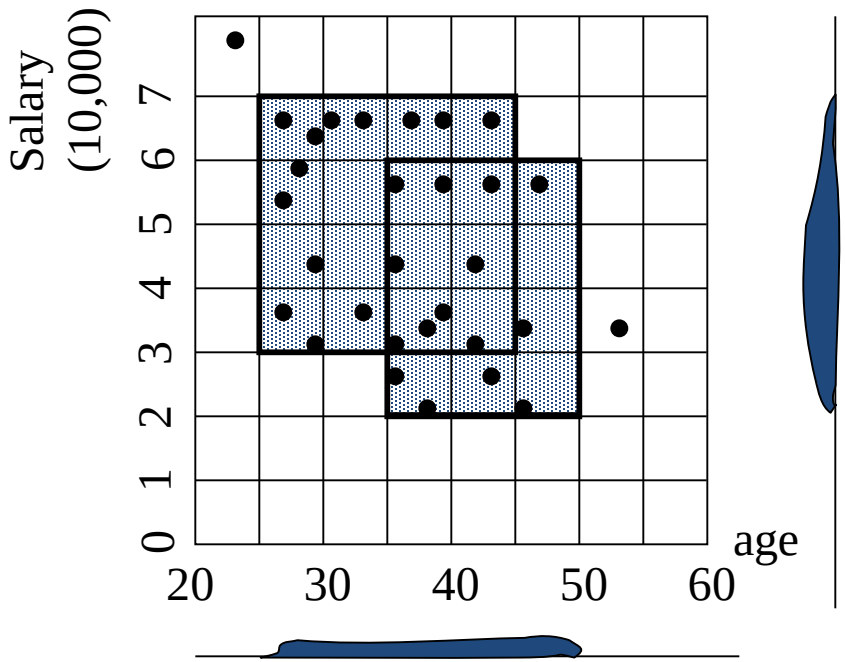


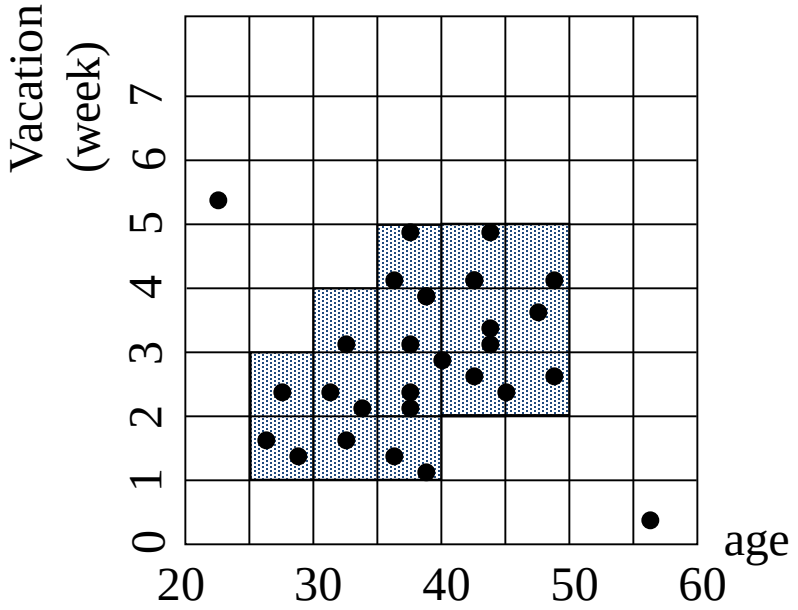
- Utilisation d'une grille à des résolutions multiples comme structure de données
- L'espace est divisé en cellules rectangulaires



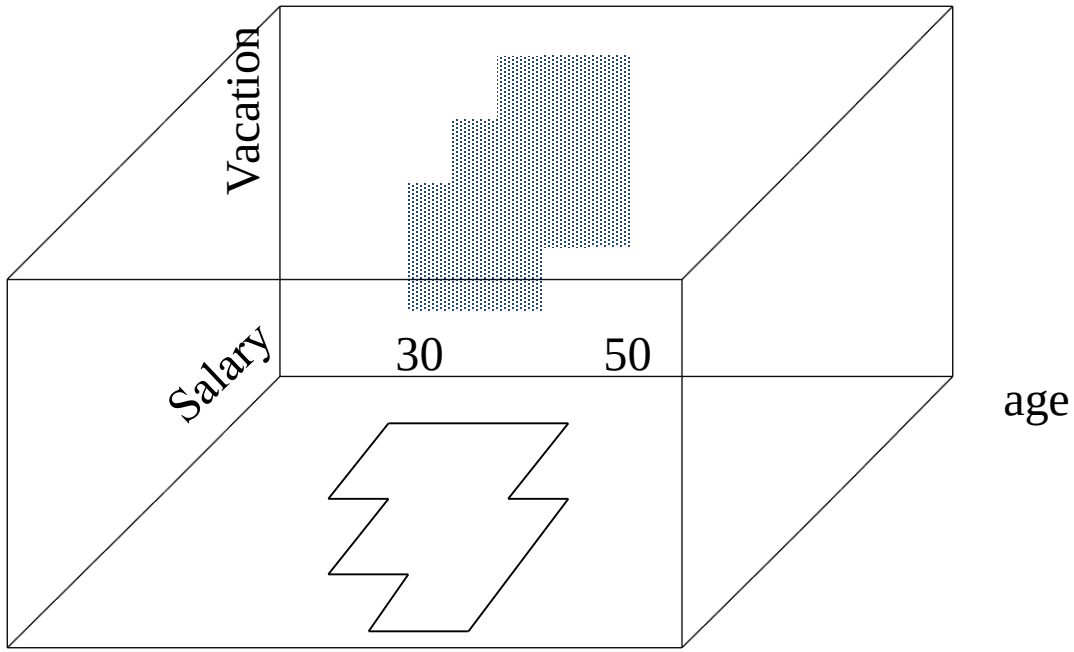
Méthodes basées sur une grille

- Chaque cellule de niveau i est divisée en un certain nombre de cellules plus petites au niveau i+1
- Informations statistiques calculées et stockées à chaque niveau
- Approche descendante
- Suppression des cellules non pertinentes pour les itérations suivantes
- Répéter le processus jusqu'à atteindre le niveau le plus bas
- Avantages
  - parallélisable, mise à jour incrémentale
  - *O(k)*, où *k* est le nombre de cellule au plus bas niveau
- Faiblesse
  - les bords des clusters sont soit horizontaux soit verticaux, pas de diagonale !

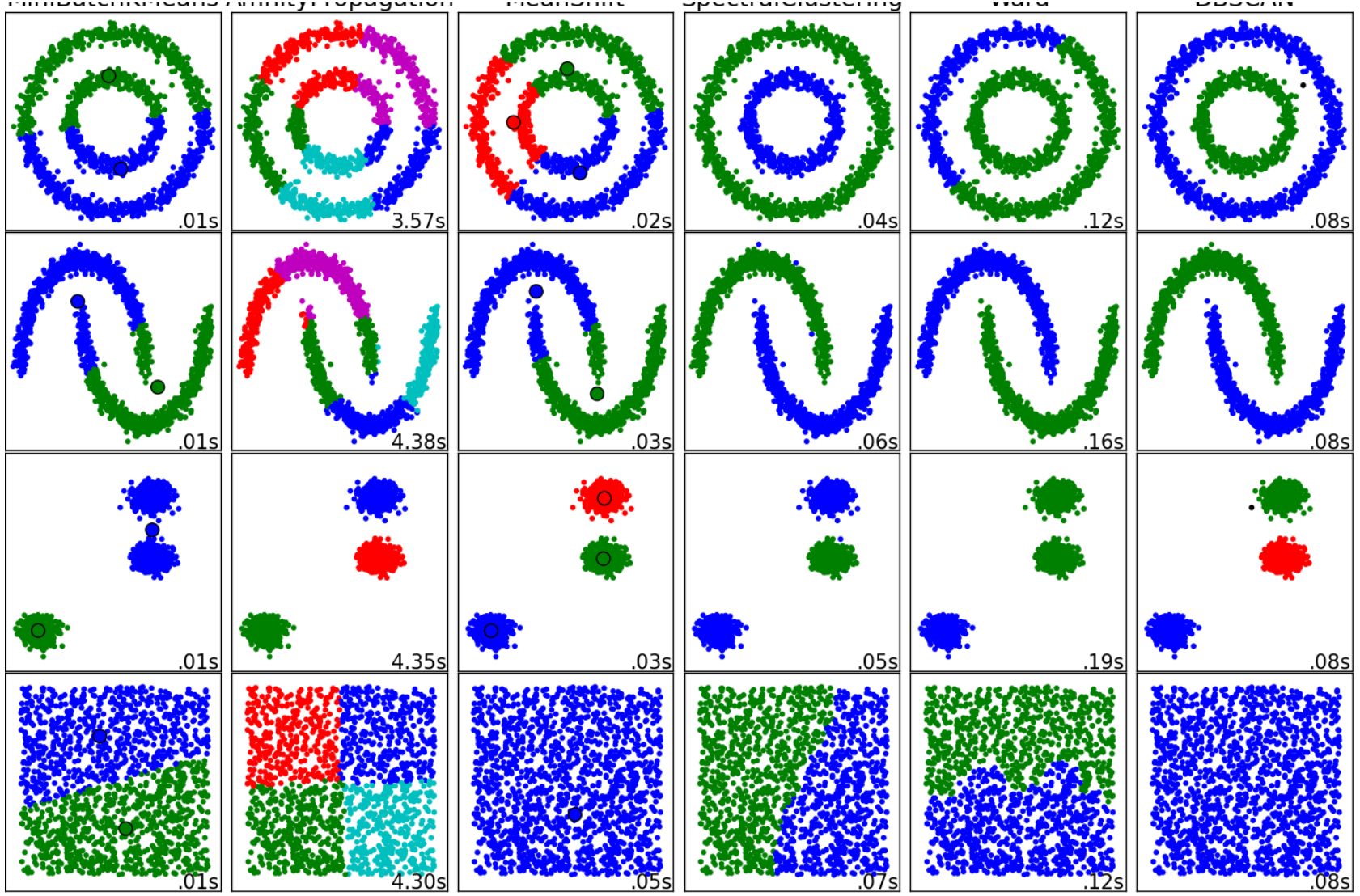

Salary
(10,000)
0 1 2 3 4 5 6 7
20 30 40 50 60
age


Vacation
(week)
0 1 2 3 4 5 6 7
20 30 40 50 60
age

$\tau = 3$


Vacation
Salary
30
50
age

Illustration



- Existe-t-il une structure en clusters des données ?
- Quel est le nombre correct de clusters ?
- Mesure de qualité du partitionnement
- Comparaison du partitionnement à une classification existante
- Comparaison de 2 partitionnements

Mesure de qualité

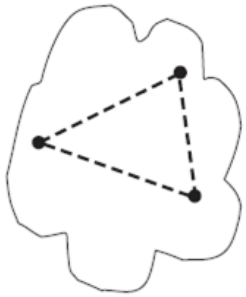
- Non supervisée
  - À partir des données
  - Cohésion
  - Séparation
- Supervisée
  - Par rapport à des classes connues
- Relative
  - Comparaison des résultats obtenus
    - Avec différentes méthodes
    - Avec différents paramètres

- Généralement de la forme :

$$overall\ validity = \sum_{i=1}^{K} w_i\ validity(C_i).$$

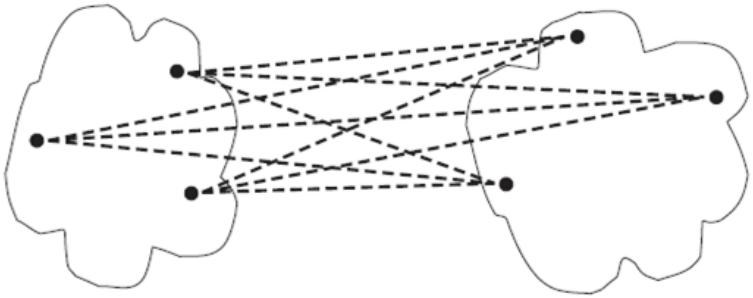
- Cohésion

$$cohesion(C_i) = \sum_{\substack{\mathbf{x} \in C_i \\ \mathbf{y} \in C_i}} proximity(\mathbf{x}, \mathbf{y})$$



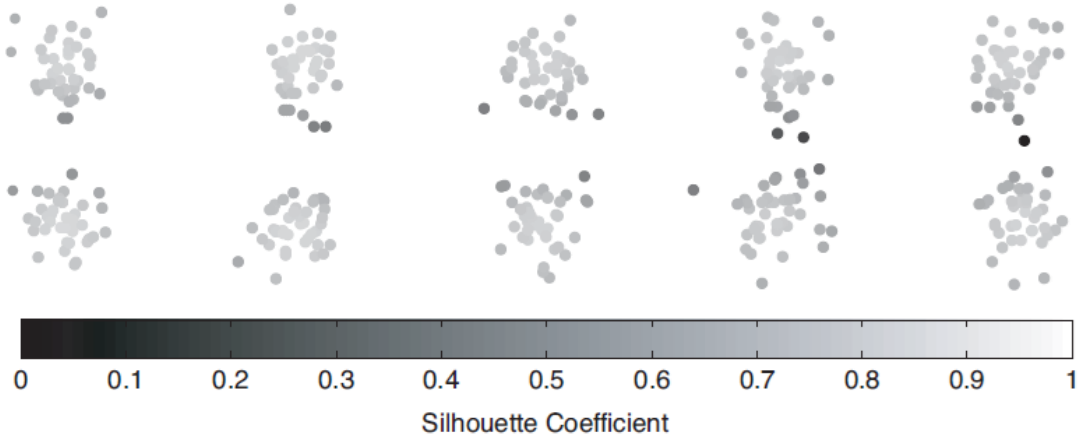
- Séparation

$$separation(C_i, C_j) = \sum_{\substack{\mathbf{x} \in C_i \\ \mathbf{y} \in C_j}} proximity(\mathbf{x}, \mathbf{y})$$

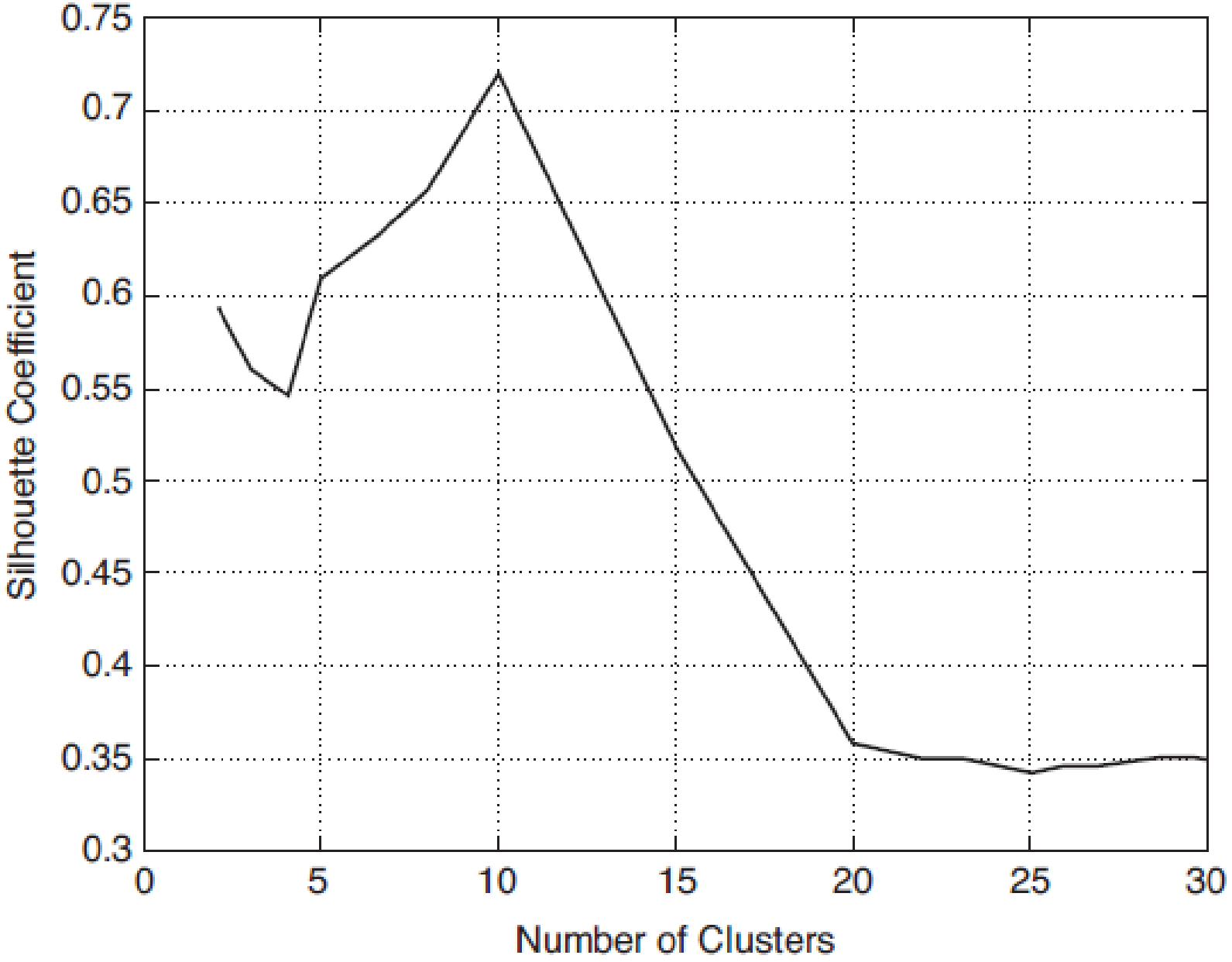


Mesure de qualité non supervisée

- Coefficient de silhouette
  - Pour le i-ème objet
    - a_i = distance moyenne aux objets du cluster
    - b_i = min des distances moyennes de l'objet aux objets d'un autre cluster
    - $s_i = (b_i - a_i)/ \max(a_i, b_i)$
  - Pour un cluster : moyenne des coefficients des objets du cluster
  - Pour le partitionnement : moyenne des coefficient de tous les objets



Nombre de clusters



Existe-t-il une structure en clusters ?

- Motivation : *k*-means trouvera toujours *k* clusters
- Statistique de Hopkins
  - Principe:
    - génération de *p* objets aléatoirement
    - échantillon de *p* objets
    - u_i et w_i les distances au plus proche voisin

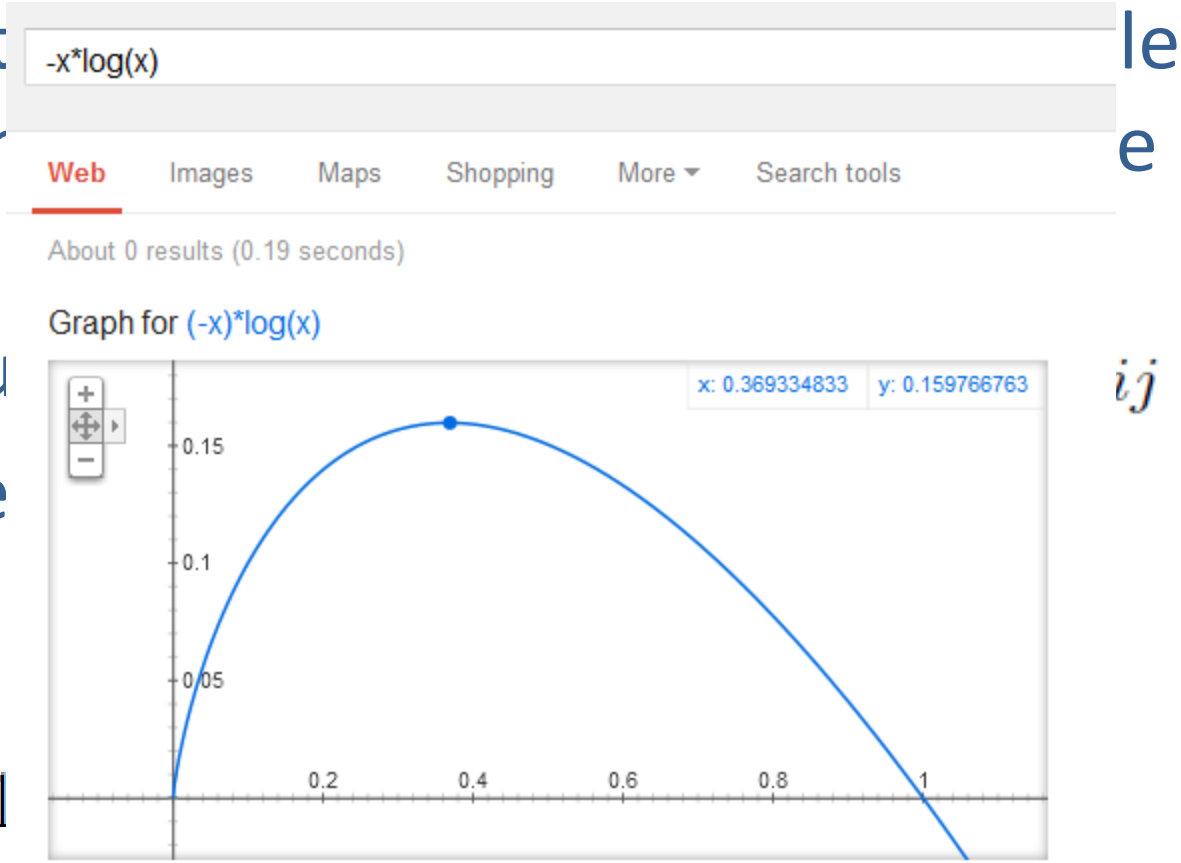
$$H = \frac{\sum_{i=1}^{p} w_i}{\sum_{i=1}^{p} u_i + \sum_{i=1}^{p} w_i}$$

    - H = 0 : $u_i >> w_i$: structure en clusters
    - H > 0.5 : $u_i \sim w_i$ ou $u_i << w_i$: distribution régulière des objets : pas de clusters

Mesure de qualité supervisée : entropie

- Entropie : chaque cluster contient des objets de la même classe
  - Pij = m_{ij}/m_i : probabilité qu'un membre du cluster i appart le du cluster i et r e j dans le cluste
  - Entropie du clu ij
  - Entropie totale des clusters

$$e = \sum_{i=1}^{K}$$



Mesure de qualité supervisée

- Pureté : les clusters contiennent des objets d'une seule classe

$$p_i = \max_j p_{ij}, \qquad purity = \sum_{i=1}^{K} \frac{m_i}{m} p_i.$$

- Précision : fraction d'un cluster consistant à des objets d'une classe spécifiée
- Recall : propension d'un cluster à contenir tous les objets d'une classe spécifiée
- Mesure F : combinaison des 2 précédentes = propension d'un cluster à contenir à la fois tous les objets d'une classe et seulement les objets de cette classe

$$F(i,j) = (2 \times precision(i,j) \times recall(i,j))/(precision(i,j) + recall(i,j))$$

Point	p1	p2	p3	p4	p5
p1	1	1	1	0	0
p2	1	1	1	0	0
p3	1	1	1	0	0
p4	0	0	0	1	1
p5	0	0	0	1	1

Point	p1	p2	p3	p4	p5
p1	1	1	0	0	0
p2	1	1	0	0	0
p3	0	0	1	1	1
p4	0	0	1	1	1
p5	0	0	1	1	1

- Mesure de distance sur des variables binaires
  - coefficient simple d'appariement

$$d(i, j) = \frac{b + c}{a + b + c + d}$$

  - coefficient de Jaccard

$$d(i, j) = \frac{b + c}{a + b + c}$$

		Objet *j*	
		1	0
Objet *i*	1	*a*	*b*
	0	*c*	*d*