Reconnaissance des formes et méthodes neuronales (RCP208)

Classification automatique par densité

Nicolas Audebert
(prenom.nom@cnam.fr)
http://cedric.cnam.fr/vertigo/Cours/ml/

Département Informatique
Conservatoire National des Arts & Métiers, Paris, France

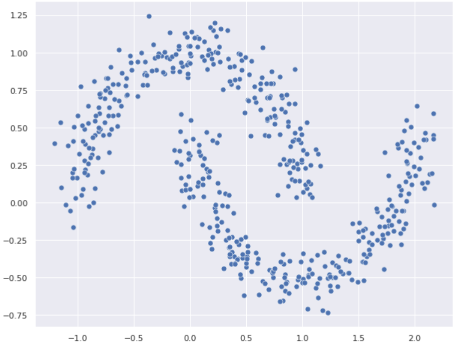
28 octobre 2022

Plan du cours

Quand k-means ne suffit plus...

Considérons un jeu de données $\mathcal{X} = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ de n observations bi-dimensionnelles.

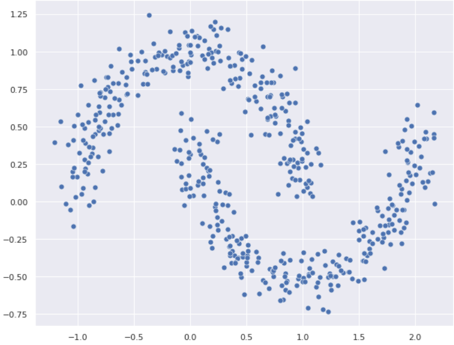
Comment partitionner ce jeu de données ?



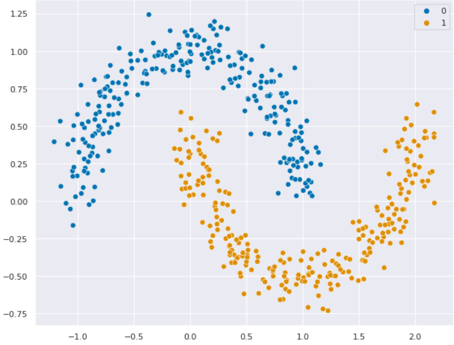
Quand *k*-means ne suffit plus...

Considérons un jeu de données $\mathcal{X} = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ de n observations bi-dimensionnelles.

Comment partitionner ce jeu de données ?



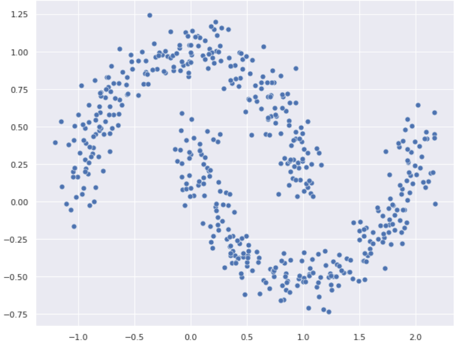
Une proposition “naturelle”.



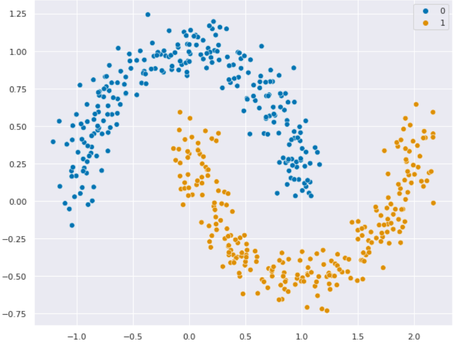
Quand k-means ne suffit plus...

Considérons un jeu de données $\mathcal{X} = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ de n observations bi-dimensionnelles.

Comment partitionner ce jeu de données ?



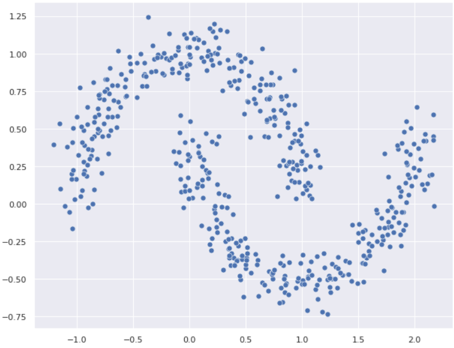
Une proposition “naturelle”.



Le partitionnement proposé ci-dessus semble être évident mais peut-on l’obtenir automatiquement ?

Hypothèses de k-means

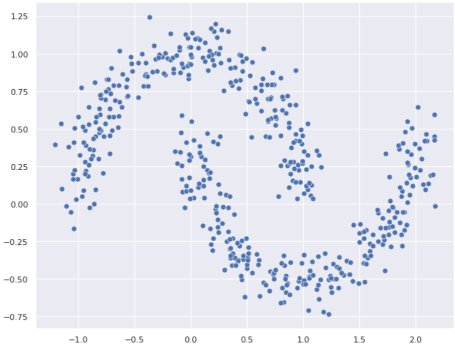
- Clusters symétriques = il n'y pas de direction privilégiée dans un groupe



Jeu de données $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^2$

Hypothèses de *k*-means

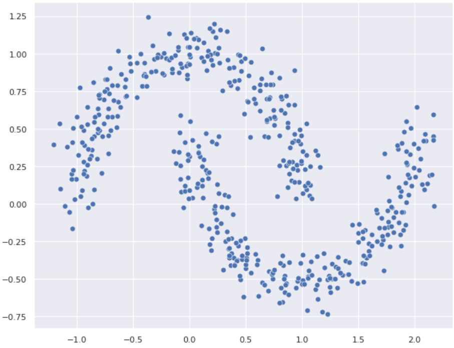
- Clusters symétriques = il n'y pas de direction privilégiée dans un groupe
- Compacts = les observations sont proches du centre de leur groupe



Jeu de données $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^2$

Hypothèses de k-means

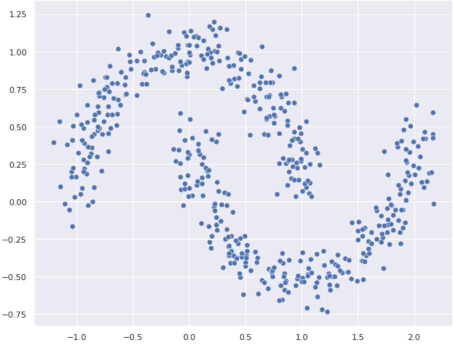
- Clusters symétriques = il n'y pas de direction privilégiée dans un groupe
- Compacts = les observations sont proches du centre de leur groupe
- Convexes = il n'y a pas de "trou" dans les groupes



Jeu de données $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^2$

Hypothèses de k-means

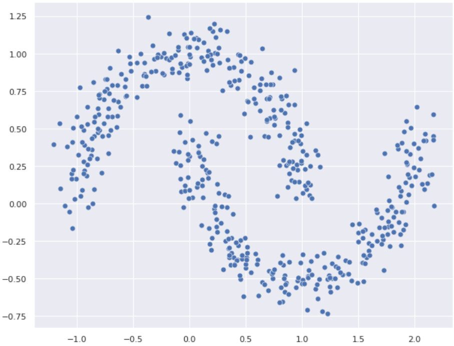
- Clusters symétriques = il n'y pas de direction privilégiée dans un groupe
- Compacts = les observations sont proches du centre de leur groupe
- Convexes = il n'y a pas de "trou" dans les groupes
- Linéairement séparables (deux à deux)



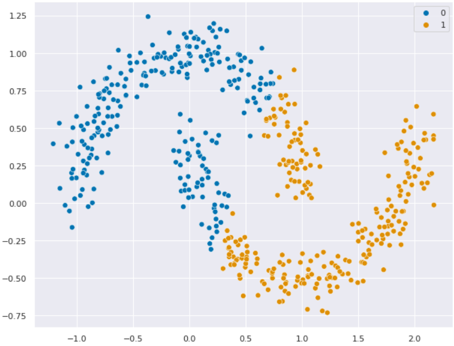
Jeu de données $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^2$

Hypothèses de k-means

- Clusters symétriques = il n'y pas de direction privilégiée dans un groupe
- Compacts = les observations sont proches du centre de leur groupe
- Convexes = il n'y a pas de "trou" dans les groupes
- Linéairement séparables (deux à deux)



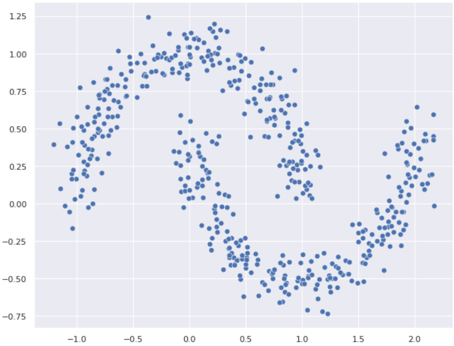
Jeu de données $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^2$



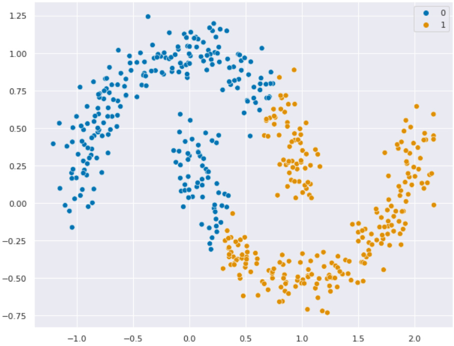
Application d'un k-means ($k = 2$)

Hypothèses de k-means

- Clusters symétriques = il n'y pas de direction privilégiée dans un groupe
- Compacts = les observations sont proches du centre de leur groupe
- Convexes = il n'y a pas de "trou" dans les groupes
- Linéairement séparables (deux à deux)



Jeu de données $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^2$



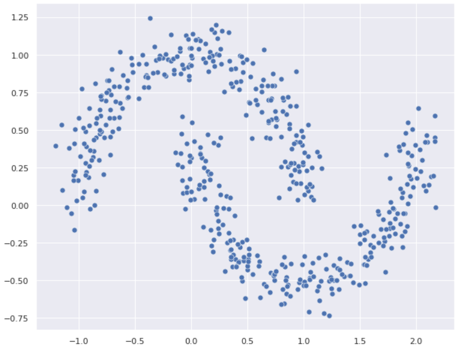
Application d'un k-means ($k = 2$)

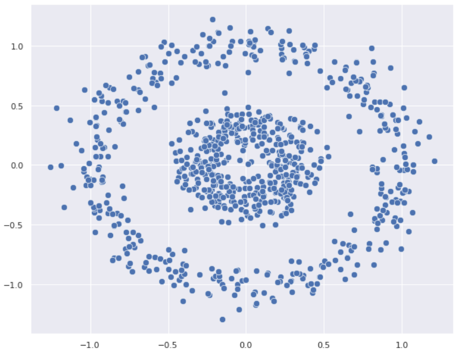
Échec...

Comment faire mieux ?

Ce qui pose problème :

- la non-convexité,

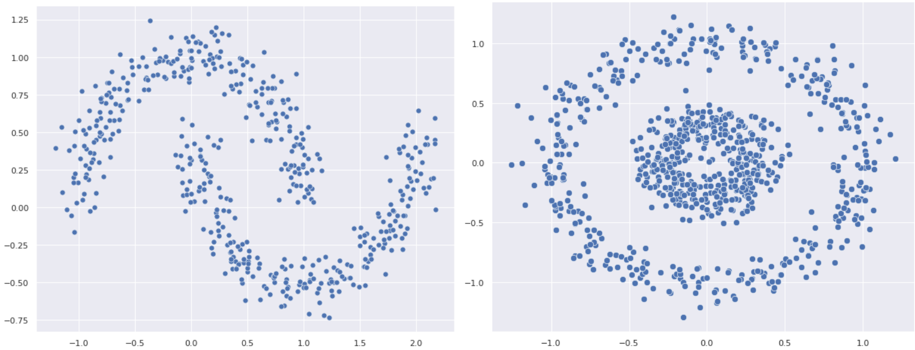




Comment faire mieux ?

Ce qui pose problème :

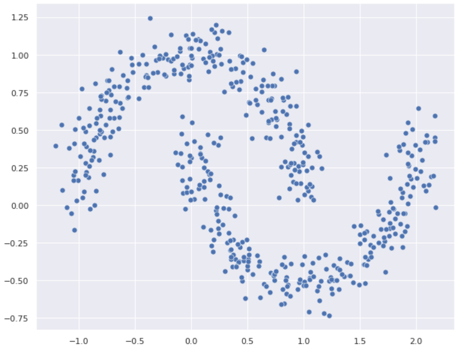
- la non-convexité,
- la non-linéarité.

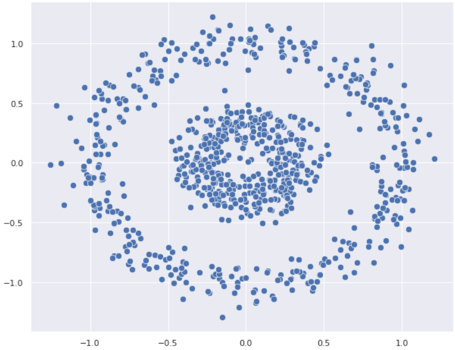


Comment faire mieux ?

Ce qui pose problème :

- la non-convexité,
- la non-linéarité.





Comment sait-on que deux points appartiennent au même groupe dans ces exemples ?

Plan du cours

Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise (DBSCAN)

DBSCAN est un algorithme de classification automatique (ou *partitionnement*) par densité introduit par [3].

Hypothèses de travail

- les groupes sont des îlots à forte densité,
  - beaucoup d'observations dans un petit espace
- séparés par des océans à faible densité.
  - peu de points dans un grand espace

Les données aberrantes

Les observations dans les zones à faible densité sont accidentelles (données aberrantes ou *outliers*).

Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise (DBSCAN)

DBSCAN est un algorithme de classification automatique (ou *partitionnement*) par densité introduit par [3].

Hypothèses de travail

- les groupes sont des îlots à forte densité,
  - beaucoup d'observations dans un petit espace
- séparés par des océans à faible densité.
  - peu de points dans un grand espace

Les données aberrantes

Les observations dans les zones à faible densité sont accidentelles (données aberrantes ou *outliers*).

Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise (DBSCAN)

DBSCAN est un algorithme de classification automatique (ou *partitionnement*) par densité introduit par [3].

Hypothèses de travail

- les groupes sont des îlots à forte densité,
  - beaucoup d'observations dans un petit espace
- séparés par des océans à faible densité.
  - peu de points dans un grand espace

Les données aberrantes

Les observations dans les zones à faible densité sont accidentelles (données aberrantes ou *outliers*).

Exemple-jouet

Taxonomie des observations selon DBSCAN

DBSCAN considère trois types de points selon les propriétés de leur voisinage.

Les points centraux (*core points*)

- ce sont les points qui se trouve au cœur d'un groupe
- leur voisinage doit contenir plus que m points

Les points frontière (*border points*)

- ce sont les points qui bordent un groupe
- ils sont voisins d'un point central mais ne sont pas centraux eux-mêmes

Les points aberrants (*noise points*)

- ce sont les points isolés
- ils ne sont ni centraux, ni frontière

Taxonomie des observations selon DBSCAN

DBSCAN considère trois types de points selon les propriétés de leur voisinage.

Les points centraux (*core points*)

- ce sont les points qui se trouve au cœur d'un groupe
- leur voisinage doit contenir plus que m points

Les points frontière (*border points*)

- ce sont les points qui bordent un groupe
- ils sont voisins d'un point central mais ne sont pas centraux eux-mêmes

Les points aberrants (*noise points*)

- ce sont les points isolés
- ils ne sont ni centraux, ni frontière

Taxonomie des observations selon DBSCAN

DBSCAN considère trois types de points selon les propriétés de leur voisinage.

Les points centraux (*core points*)

- ce sont les points qui se trouve au cœur d'un groupe
- leur voisinage doit contenir plus que m points

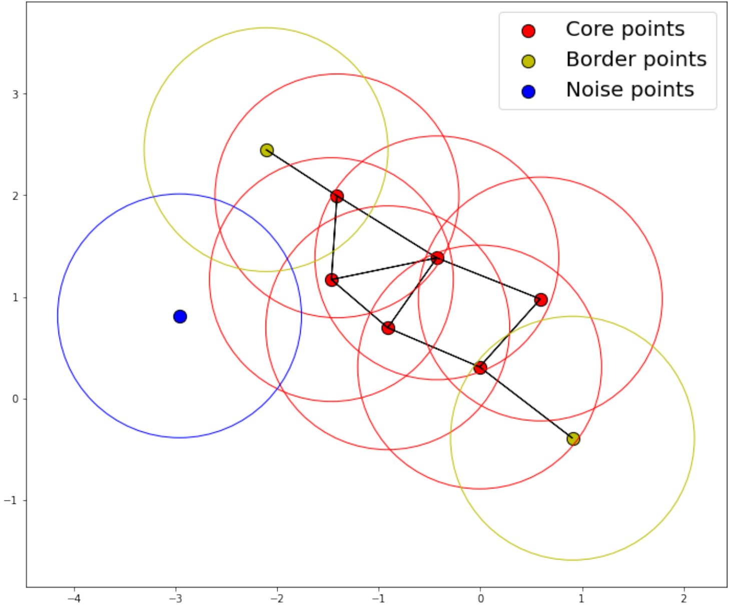
Les points frontière (*border points*)

- ce sont les points qui bordent un groupe
- ils sont voisins d'un point central mais ne sont pas centraux eux-mêmes

Les points aberrants (*noise points*)

- ce sont les points isolés
- ils ne sont ni centraux, ni frontière

Illustration des différents types de points



Algorithme

1. Choisir un point $x \in X$ pas encore visité
2. Marquer x comme visité
3. Calculer le ε-voisinage de X
4. Si le voisinage est dense (si le nombre de voisins est supérieur à un seuil) :
   - on assigne x à un nouveau cluster
   - pour chaque voisin x' de x
     - si le voisinage de x' est dense, on ajoute ses voisins à la liste
     - si x' n'a pas encore de groupe, on l'ajoute au cluster
5. Sinon, on marque x comme aberrant
6. Retour à 1 tant que tous les points n'ont pas été visités

Aspects théoriques

Quelles sont les propriétés mathématiques qui permettent à cette algorithme de réaliser un partitionnement par densité ?
Considérons un (E, d) un espace métrique, par exemple un espace vectoriel muni de la distance euclidienne. Soit $\mathcal{X} = \{x_1, \ldots, x_n\} \subset E$ un jeu de données de n d'observations.

Définition

On appelle ε-**voisinage** de x le sous-ensemble $V_\varepsilon(x) \subset \mathcal{X}$ tel que :

$$V_\varepsilon(x) = \{x' \in X | d(x, x') < \varepsilon\}$$

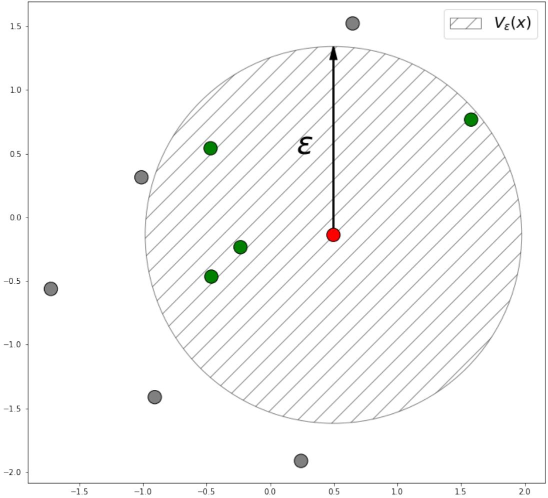
c'est-à-dire l'ensemble des observations qui sont à distance inférieure à ε de x.
Autrement dit, il s'agit des observations du jeu de données contenues dans la boule (ouverte) de rayon ε centrée sur x.

m-densité

Ce voisinage est *m*-**dense** s'il contient au moins m points.

Exemple

L'ε-voisinage ci-dessous est 4-dense : l'observation x (en rouge) possède 4 voisins (en vert) à distance inférieure à ε.



Accessibilité par densité

Accessibilité et accessibilité directe

Soient x et x' deux observations d'un jeu de données $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^p$.

x' est dit **directement accessible** par ε-densité depuis x si :

- le voisinage de x est dense ($|V_\varepsilon(x)| \geq m$),
- x' est dans le voisinage de x ($x' \in V_\varepsilon(x)$).

En généralisant, x' est **accessible** par ε-densité depuis x si il existe une suite $(y_1, \ldots, y_n)$ telle que :

- $y_1 = x$ et $y_n = x'$,
- pour tout i, y_{i+1} est *directement accessible* depuis y_i.

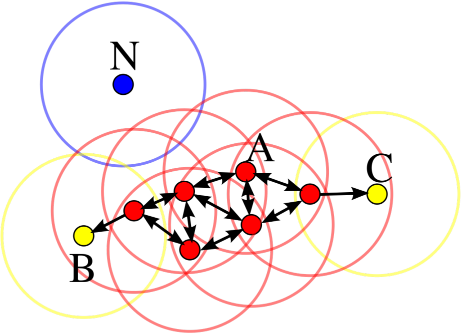
DBSCAN et le graphe d'accessibilité

Graphe d'accessibilité

Construction du graphe d'accessibilité :

1. les nœuds du graphe sont les points $x \in X$,
2. x et x' sont reliés par une arête orientée si x' est directement accessible depuis x.

x' est accessible depuis x s'il existe un chemin permettant d'aller de x à x' dans le graphe d'accessibilité.



Algorithme version graphe :

1. Identifier les points centraux
2. Calculer les composantes connectées du graphe réduit aux points centraux
3. Assigner chaque point frontière au cluster de son voisin le plus proche

Plan du cours

Quels paramètres pour DBSCAN ?

L'exécution de l'algorithme DBSCAN nécessite de régler deux paramètres :

- ε, la taille du voisinage et donc le rayon de la boule dans laquelle on peut passer d'un point à un autre sans changer de groupe,
- m, le nombre minimum de voisins pour qu'un voisinage soit qualifié de dense.

ε

- Si ε est trop faible, alors aucune observation n'est voisine d'aucune autre $\implies$ que des points aberrants.
- Si ε est trop grand, tous les points sont voisins entre eux $\implies$ un seul groupe qui recouvre toutes les observations.

m (ou `minVoisins`)

- Si m est faible, tous les voisinages sont denses : il suffit d'un seul voisin en commun pour relier deux groupes.
- Si m est grand, peu de voisinages sont denses : beaucoup de points seront frontière ou aberrants.

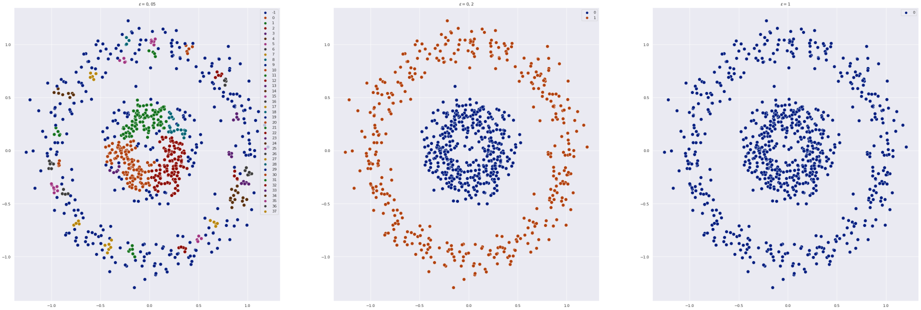
m (ou `minVoisins`)

Quel nombre de voisins minimum pour définir un voisinage dense ?

Heuristique pour le réglage de m

- $m = 2 \rightarrow$ classification ascendante hiérarchique
- par défaut, $m = 4$ ou $m = 5$ dans la plupart des implémentations…
- [3, 5] recommandent $m = 2 \cdot k$ avec k la dimensionalité des données

ε : la taille du voisinage



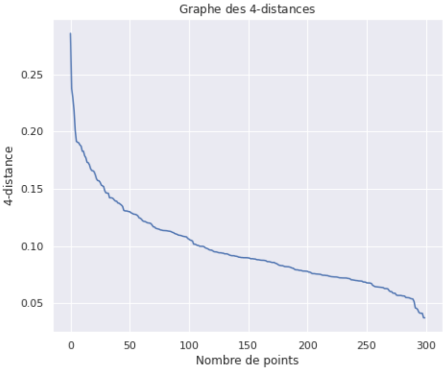
- ε trop faible : nombreux groupes de petite taille
- ε trop élevé : un unique groupe

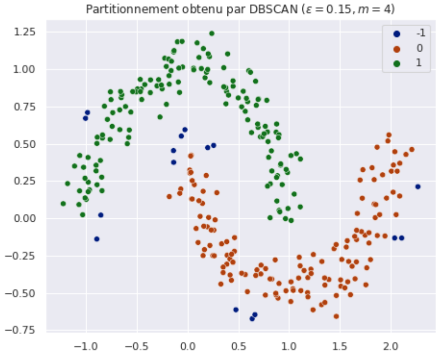
$\Longrightarrow$ **peut-on régler (semi-)automatiquement une valeur raisonnable pour ε ?**

ε : choix heuristique

Graphe des *k*-distances [6, 4]

- pour chaque point, quelle la distance à son k^{e}voisin ?
- tracer le graphe des *k*-distances par ordre décroissant





Heuristique : ε est à choisir de sorte à ne considérer que le sous-ensemble des voisins réels

- ordonnée du point de rupture de pente

Plan du cours

Intérêts de DBSCAN

- Robustesse aux donnés aberrantes
  - DBSCAN identifie automatiquement et retire les données aberrrantes durant le partitionnement. Cela permet de détecter les *outliers* mais également de ne pas contaminer la classification automatique (k-means est particulièrement sensible aux données aberrantes).
- Les groupes obtenus par DBSCAN ne sont pas nécessairement linéairement séparables
  - Réduit la contrainte sur la forme des groupes obtenus. Les groupes non convexes plus sur-partitionnés comme c'est le cas avec *k-means*.
- DBSCAN ne nécessite pas de préciser a priori le nombre de groupes cherchés.
  - Le nombre de groupes est estimé automatiquement à partir du nombre de composantes connectées par le graphe de l'accessibilité par densité.

Intérêts de DBSCAN

- Robustesse aux donnés aberrantes
  - DBSCAN identifie automatiquement et retire les données aberrrantes durant le partitionnement. Cela permet de détecter les *outliers* mais également de ne pas contaminer la classification automatique (k-means est particulièrement sensible aux données aberrantes).
- Les groupes obtenus par DBSCAN ne sont pas nécessairement linéairement séparables
  - Réduit la contrainte sur la forme des groupes obtenus. Les groupes non convexes plus sur-partitionnés comme c'est le cas avec *k-means*.
- DBSCAN ne nécessite pas de préciser a priori le nombre de groupes cherchés.
  - Le nombre de groupes est estimé automatiquement à partir du nombre de composantes connectées par le graphe de l'accessibilité par densité.

Intérêts de DBSCAN

- Robustesse aux donnés aberrantes
  - DBSCAN identifie automatiquement et retire les données aberrrantes durant le partitionnement. Cela permet de détecter les *outliers* mais également de ne pas contaminer la classification automatique (k-means est particulièrement sensible aux données aberrantes).
- Les groupes obtenus par DBSCAN ne sont pas nécessairement linéairement séparables
  - Réduit la contrainte sur la forme des groupes obtenus. Les groupes non convexes plus sur-partitionnés comme c'est le cas avec *k-means*.
- DBSCAN ne nécessite pas de préciser a priori le nombre de groupes cherchés.
  - Le nombre de groupes est estimé automatiquement à partir du nombre de composantes connectées par le graphe de l'accessibilité par densité.

Intérêts de DBSCAN

- Robustesse aux donnés aberrantes
  - DBSCAN identifie automatiquement et retire les données aberrrantes durant le partitionnement. Cela permet de détecter les *outliers* mais également de ne pas contaminer la classification automatique (k-means est particulièrement sensible aux données aberrantes).
- Les groupes obtenus par DBSCAN ne sont pas nécessairement linéairement séparables
  - Réduit la contrainte sur la forme des groupes obtenus. Les groupes non convexes plus sur-partitionnés comme c'est le cas avec *k-means*.
- DBSCAN ne nécessite pas de préciser a priori le nombre de groupes cherchés.
  - Le nombre de groupes est estimé automatiquement à partir du nombre de composantes connectées par le graphe de l'accessibilité par densité.

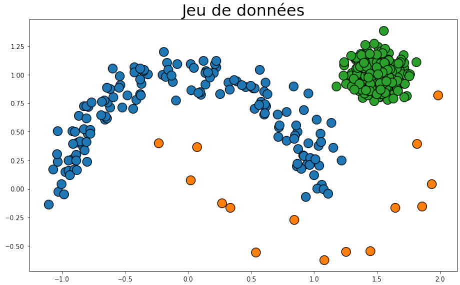
Intérêts de DBSCAN

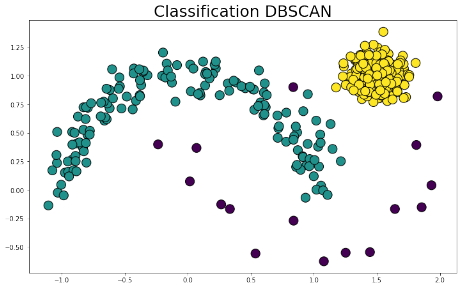
- Robustesse aux donnés aberrantes
  - DBSCAN identifie automatiquement et retire les données aberrrantes durant le partitionnement. Cela permet de détecter les *outliers* mais également de ne pas contaminer la classification automatique (k-means est particulièrement sensible aux données aberrantes).
- Les groupes obtenus par DBSCAN ne sont pas nécessairement linéairement séparables
  - Réduit la contrainte sur la forme des groupes obtenus. Les groupes non convexes plus sur-partitionnés comme c'est le cas avec *k-means*.
- DBSCAN ne nécessite pas de préciser a priori le nombre de groupes cherchés.
  - Le nombre de groupes est estimé automatiquement à partir du nombre de composantes connectées par le graphe de l'accessibilité par densité.

Intérêts de DBSCAN

- Robustesse aux donnés aberrantes
  - DBSCAN identifie automatiquement et retire les données aberrrantes durant le partitionnement. Cela permet de détecter les *outliers* mais également de ne pas contaminer la classification automatique (k-means est particulièrement sensible aux données aberrantes).
- Les groupes obtenus par DBSCAN ne sont pas nécessairement linéairement séparables
  - Réduit la contrainte sur la forme des groupes obtenus. Les groupes non convexes plus sur-partitionnés comme c'est le cas avec *k-means*.
- DBSCAN ne nécessite pas de préciser a priori le nombre de groupes cherchés.
  - Le nombre de groupes est estimé automatiquement à partir du nombre de composantes connectées par le graphe de l'accessibilité par densité.

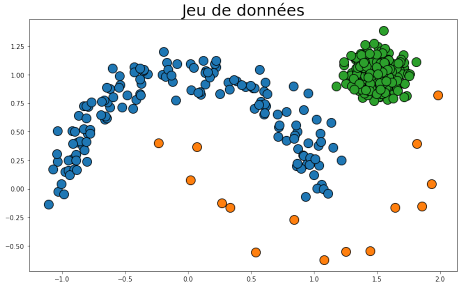
Limites de DBSCAN

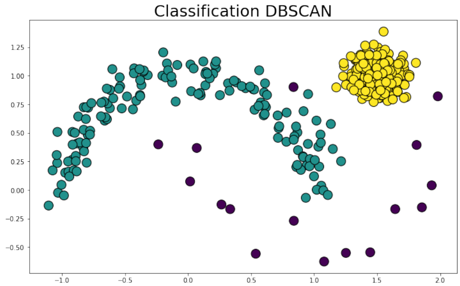




- DBSCAN considère que la densité est identique pour tous les groupes $\Longrightarrow$ impossible de trouver un unique seuil ε qui définit un voisinage adapté en cas de densité variable
- les données dans des régions à faible densité sont automatiquement éliminées en tant que données aberrantes $\Longrightarrow$ ce n'est pas toujours le cas...
- DBSCAN est une méthode *transductive* : le partitionnement est construit à partir du jeu de données et il n'est pas possible de classer un nouveau point sans refaire la classification entière.

Limites de DBSCAN





- DBSCAN considère que la densité est identique pour tous les groupes $\Longrightarrow$ impossible de trouver un unique seuil ε qui définit un voisinage adapté en cas de densité variable
- les données dans des régions à faible densité sont automatiquement éliminées en tant que données aberrantes $\Longrightarrow$ ce n'est pas toujours le cas...
- DBSCAN est une méthode *transductive* : le partitionnement est construit à partir du jeu de données et il n'est pas possible de classer un nouveau point sans refaire la classification entière.

Pour aller plus loin

- OPTICS [1]
  - Variante de DBSCAN qui considère une plage de valeurs possibles pour ε
  - Permet de détecter des groupes de densités différentes
  - Partitionnement hiérarchique
  - Disponible dans `scikit-learn`
- HDBSCAN [2]
  - Variante proche d'OPTICS mais diffère dans son choix de sélection des groupes
  - Autorise la classification de points nouveaux
  - `pip install hdbscan`

Références I

M. Ankerst, M. M. Breunig, H.-P. Kriegel, and J. Sander.
OPTICS : ordering points to identify the clustering structure.
28(2) :49–60.

R. J. G. B. Campello, D. Moulavi, and J. Sander.
Density-based clustering based on hierarchical density estimates.
In J. Pei, V. S. Tseng, L. Cao, H. Motoda, and G. Xu, editors, *Advances in Knowledge Discovery and Data Mining*, Lecture Notes in Computer Science, pages 160–172. Springer.

M. Ester, H.-P. Kriegel, J. Sander, and X. Xu.
A density-based algorithm for discovering clusters in large spatial databases with noise.
In *Proceedings of the Second International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, KDD'96, pages 226–231. AAAI Press.

H.-P. Kriegel, P. Kröger, J. Sander, and A. Zimek.
Density-based clustering.
1(3) :231–240.

J. Sander, M. Ester, H.-P. Kriegel, and X. Xu.
Density-based clustering in spatial databases : The algorithm GDBSCAN and its applications.
2(2) :169–194.

Références II

E. Schubert, J. Sander, M. Ester, H. P. Kriegel, and X. Xu.
DBSCAN revisited, revisited : Why and how you should (still) use DBSCAN.
42(3) :19 :1–19 :21.