

Computer Science Department

University of Verona

A.A. 2016-17

## **Pattern Recognition**

**Unsupervised classification -  
validation**

# Sommario

- Definizione di validazione del clustering
- Validazione di gerarchie
- Validazione di partizioni
- "Clustering tendency"

# Definizione

- Validazione del clustering: insieme di procedure che valutano il risultato di un'analisi di clustering in modo quantitativo e oggettivo
  - Differente dalla validazione "soggettiva": data dal particolare contesto applicativo, con l'utilizzo della conoscenza a priori sul problema (intesa anche come "interpretazione dei risultati")
  - In questa parte: validazione "oggettiva": misura quantitativa della capacità della struttura trovata di spiegare i dati (indipendentemente dal contesto)

# Indici di validità

Gli indici possono essere diversi a seconda della struttura analizzata (del tipo di clustering)

- Gerarchie: risultato degli algoritmi gerarchici
  - Possiamo anche voler valutare una gerarchia esistente, ad esempio un modello teorico
- Partizioni: risultato degli algoritmi partizionali
  - Si può valutare una partizione esistente derivante da informazioni di categoria

# Indici di validità

## Tipi di indici:

- Criteri esterni:
  - misurano le performance di un clustering andando a confrontare informazioni a priori
  - Esempio: etichette già note a priori
- Criteri interni:
  - Misurano le performance di un clustering utilizzando solo i dati (completamente non supervisionato)
- Criteri relativi:
  - Confronta due risultati di clustering

# Indici di validità

NOTA: differenza tra criterio e indice

- Indice: misura statistica che viene utilizzata per testare la validità
- Criterio: strategia con cui un clustering viene validato

TIPICAMENTE:

- Nel caso di criteri interni o esterni, si va a vedere se il valore di un indice è particolarmente “grande” o particolarmente “piccolo”

# Questioni principali

- Definizione di un indice:
  - Deve avere senso anche da un punto di vista intuitivo
  - Deve essere basato su una solida teoria
  - Deve essere facilmente calcolabile

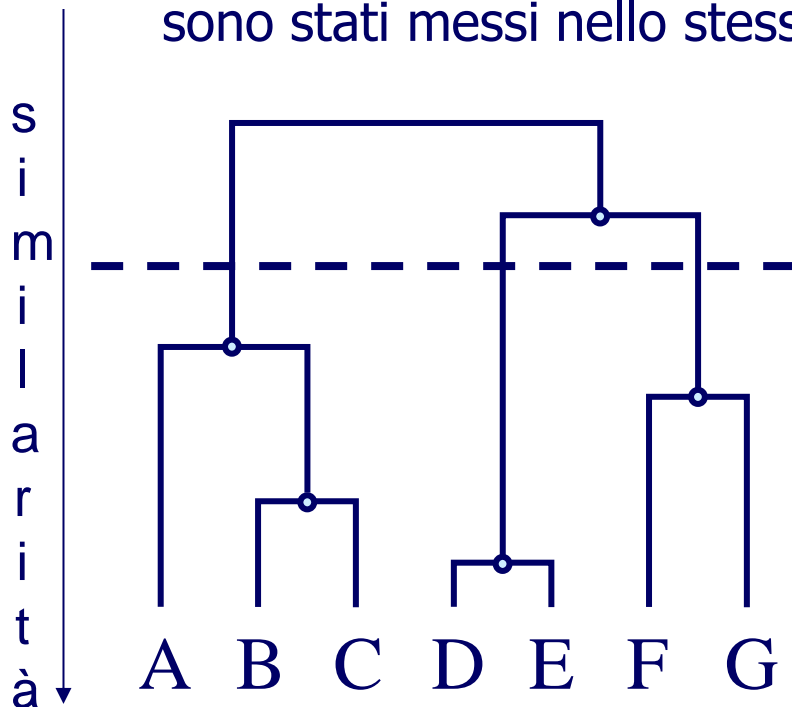
# Indici di validità per gerarchie

- Criteri esterni: verificare se una gerarchia (dendrogramma) calcolata per un dato insieme di dati corrisponde alla gerarchia attesa
- Approccio tipico (Hubert's  $\Gamma$  statistics)
- Nota: questo problema di validazione non ha ricevuto un grande interesse, in quanto è piuttosto difficile avere una gerarchia "vera" con cui confrontare il clustering



# Criteri interni

- Rispondono alle seguenti domande:
  - Una gerarchia fitta bene i dati su cui è stata calcolata?
  - Ci si può fidare di un determinato risultato di clustering gerarchico?
- Un esempio: CPCC (Cophenetic correlation coefficient)
  - cophenetic distance: il livello di un dendrogramma dove due oggetti sono stati messi nello stesso cluster per la prima volta



$$d_C(D, A) = 6$$

$$d_C(D, E) = 1$$

# Criteri interni

- la cophenetic distance misura quando sono simili due oggetti “dato l'albero” (cioè la misura di distanza espressa dall'albero)
- CPCC: coefficiente di correlazione normalizzato

$$CPCC = \frac{\frac{1}{M} \sum_{i,j} d(i,j)d_C(i,j) - m_D m_C}{\left[ \frac{1}{M} \sum_{i,j} d^2(i,j) - m_D \right]^{1/2} \left[ \frac{1}{M} \sum_{i,j} d_C^2(i,j) - m_C \right]^{1/2}} \quad (i,j) : 1 \leq i < j \leq n$$

$$m_D = \frac{1}{M} \sum_{i,j} d(i,j)$$

$$m_C = \frac{1}{M} \sum_{i,j} d_C(i,j)$$

⇒ misura la correlazione tra la distanza derivante dai dati e la distanza derivante dal dendrogramma che spiega i dati

⇒  $M = n(n-1)/2$ ,  $n$  numero di oggetti.

⇒ CPCC varia tra -1 e 1: più è vicino a 1 migliore è il clustering

# Indici di validità per partizioni

- Rispondono alle seguenti domande:
  - La partizione ha un buon match con le categorie?
  - Quanti cluster ci sono nel dataset?
  - Dove deve essere tagliato il dendrogramma?
  - Quale tra due partizioni date fitta meglio il dataset?

# Indici di validità per partizioni

Criteri esterni:

- Tipicamente si va a confrontare due partizioni:
  - Una deriva dal clustering
  - Una deriva dall'informazione a priori (etichette)
- Diversi indici Rand, Jaccard, Fowlkes and Mallows,  $\Gamma$  statistic

# Indici di validità per partizioni

- Idea: ho due partizioni U e V da confrontare
  - U: risultato del clustering
  - V: clustering "vero" (deriva dalle etichette note a priori)
- Definizione di due funzioni Indicatrici
  - $I_U(i,j)$  vale 1 se gli oggetti i e j sono nello stesso cluster secondo il clustering U
  - $I_V(i,j)$  vale 1 se gli oggetti i e j sono nello stesso cluster secondo il clustering V
- Definizione della "tabella di contingenza"

		$I_V$	
		1	0
$I_U$	1	a	b
	0	c	d

a = numero di coppie di oggetti che sono nello stesso gruppo in tutte e due le partizioni

# Indici di validità per partizioni

## Altre definizioni

- $m_1$  = numero di coppie nello stesso gruppo in U
  - $m_1 = a+b$
- $m_2$  = numero di coppie nello stesso gruppo in V
  - $m_2 = c+d$
- $M = a+b+c+d$

# Indici di validità per partizioni

I diversi indici sono definiti a partire da queste quantità

- Rand

$$\frac{a + d}{\binom{n}{2}}$$

- Jaccard

$$\frac{a}{a + b + c}$$

- Fowlkes & Mallows

$$\frac{a}{(m_1 m_2)^{1/2}}$$

- $\Gamma$  statistic

$$\frac{Ma - m_1 m_2}{(m_1 m_2 (M - m_1)(M - m_2))^{1/2}}$$

# Indici di validità per partizioni

## Criteri interni:

- Difficili da stimare: devono misurare il fitting tra una partizione data e il dataset
- Problema fondamentale: stimare il numero di clusters
- Molti metodi (esempio metodi di model selection per modelli probabilistici)
- Ma molte difficoltà:
  - Stima della baseline (campionamento di molti dataset + stima di un indice interno --- ma quale modello per campionare i dati?)
  - Gli indici interni dipendono strettamente dai parametri del problema:
    - Numero di features, numero di patterns, numero di clusters ...

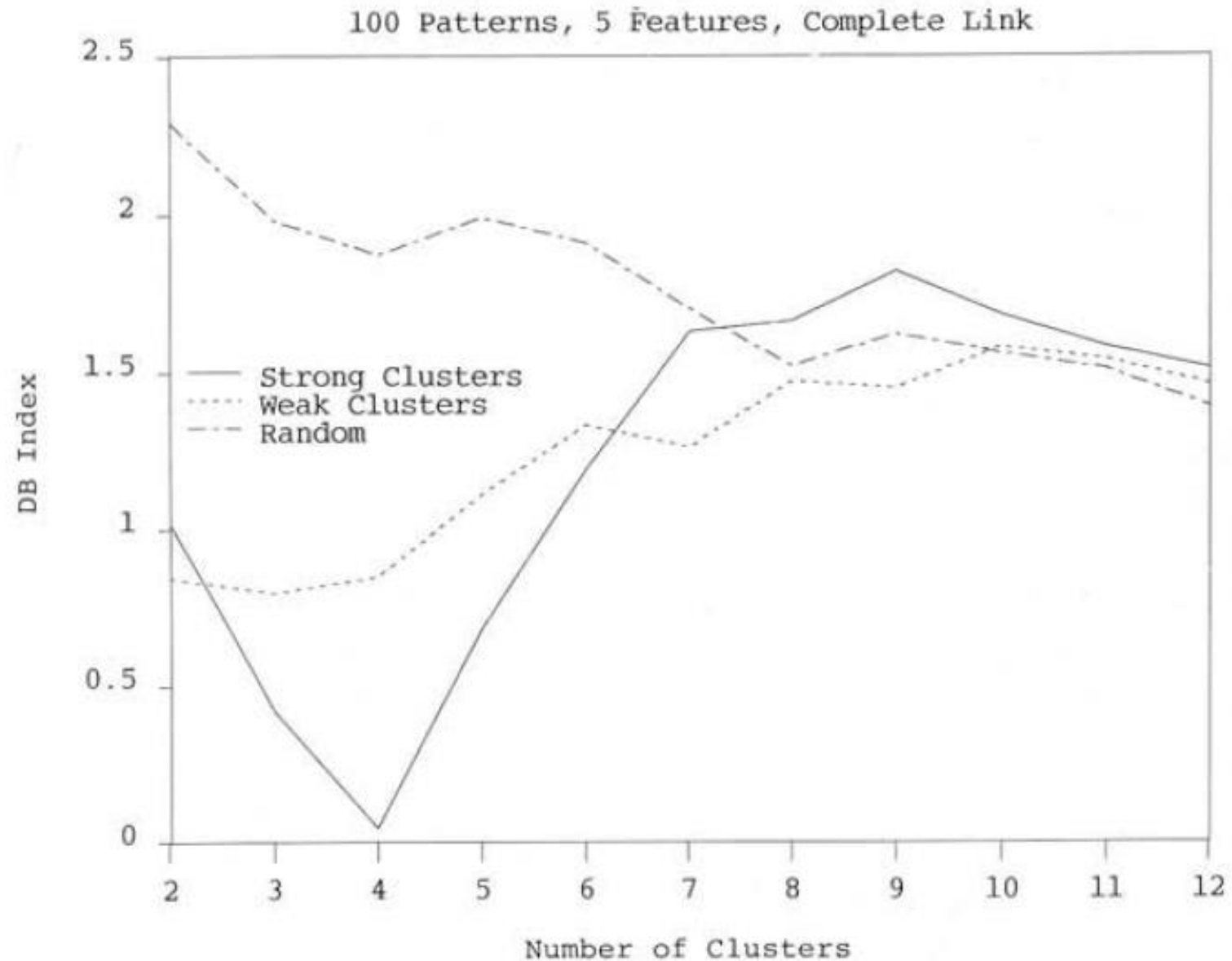


# Un particolare indice

L'indice di Davies-Bouldin (1979)

- Inizialmente utilizzato per decidere quando fermare un clustering sequenziale
- L'indice viene calcolato al variare del numero di clusters
- Il miglior clustering corrisponde al valore minimo
- (definizione alla lavagna)

Può anche essere utilizzato per determinare la presenza di una struttura di clustering



# Validità di singoli cluster

- Criteri basati su due proprietà:
  - Compattezza
  - Isolamento
- Compattezza: misura la coesione interna tra gli oggetti del cluster (quanto sono vicini tra di loro)
- Isolamento: misura la separazione tra un cluster e tutti gli altri pattern.
- Cluster valido: compatto e isolato.

Come misurare compattezza e isolamento?

Diversi indici complessi (vedi Cap 4.5 Libro Jain Dubes)

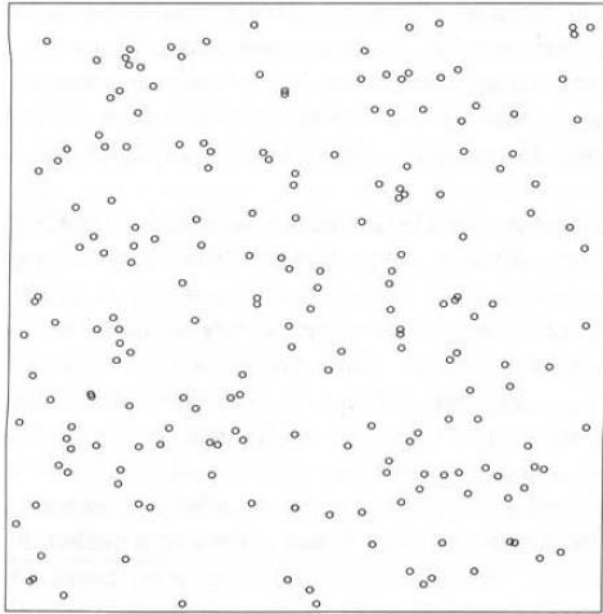
# Clustering tendency

- Problema: gli algoritmi di clustering producono sempre un output, indipendentemente dal dataset
- Definizione: identificare, senza effettuare il clustering, se i dati hanno una predisposizione ad aggregarsi in gruppi naturali
- Operazione preliminare cruciale:
  - Previene dall'applicare elaborate metodologie di clustering e di validazione a dati in cui i cluster sono sicuramente degli artefatti degli algoritmi di clustering

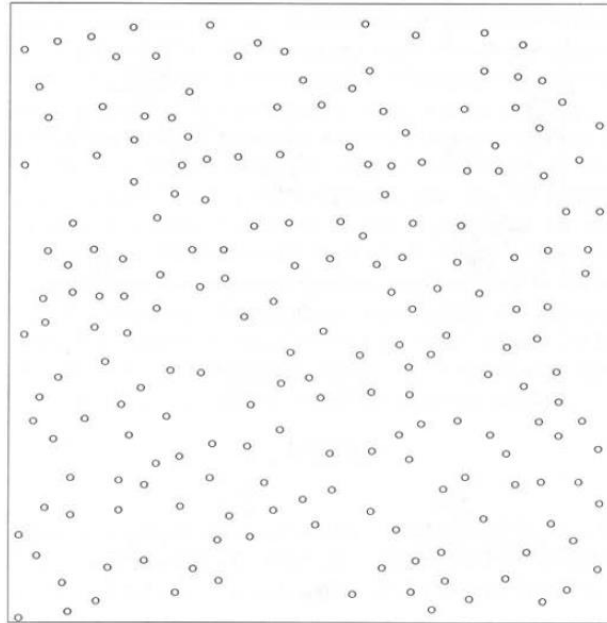
# Clustering tendency

- IDEA: studio dello spazio delle features in modo da identificare tre possibili situazioni:
  1. I pattern sono sistemati in modo casuale (spatial randomness)
  2. I pattern sono aggregati, cioè esibiscono una mutua attrazione
  3. I pattern sono spazati regolarmente, cioè esibiscono una mutua repulsione
- Nei casi 1 e 3 non ha senso effettuare il clustering

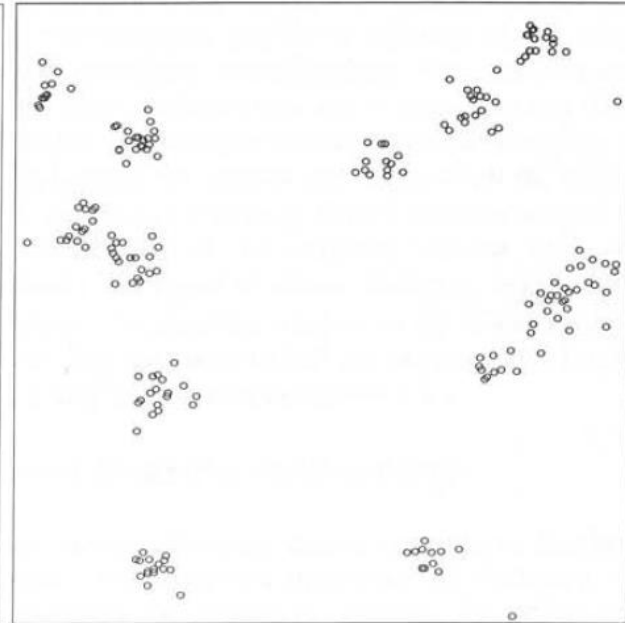
# Cluster tendency



random



regular



cluster

# Cluster tendency

IDEA: effettuare alcuni test in modo da determinare se esiste o meno una struttura (e.g. test per una distribuzione uniforme in una finestra detta sampling window)

ESEMPI:

- Scan tests:
  - Contare il numero di pattern presenti nella sottoregione più popolosa
  - Se il numero è inusualmente grande allora esiste un clustering
  - PROBLEMI: come definire le sottoregioni, cosa vuol dire "inusualmente grande"

# Cluster tendency

## ESEMPI

- Quadrat analysis:
  - Partizionare la sampling window in rettangoli di dimensione uguale
  - Contare il numero di punti in ogni rettangolo
  - In caso di distribuzione randomica, l'insieme di conteggi segue una distribuzione nota
  - La randomicità viene attestata con un test di similarità tra distribuzioni (e.g. il test del chi quadro)
  - PROBLEMI:
    - dimensione dei sottorettangoli (si può anche fare multiscala)
    - Funziona solo per un numero limitato di features (altrimenti la maggior parte dei rettangoli sono vuoti)