TUBES ML

13515055 | Rizky Faramita 13515064 | Tasya 13515140 | Francisco Kenandi Cahyono

Data Handling

```
In [6]: from sklearn import datasets
   iris = datasets.load_iris().data
   target = datasets.load_iris().target
```

Public Library & Importing Libraries

```
In [7]:
        from sklearn.metrics.pairwise import euclidean distances, manhattan distances
        import numpy as np
        def calculateEucledianDistance(data):
            return euclidean_distances(data)
        def calculateManhattanDistance(data):
            return manhattan distances(data)
        def eucledianDistance(a,b):
            dist = 0
            for i in range(len(a)):
                 dist += np.power((a[i]-b[i]),2)
            return np.sqrt(dist)
        def manhattanDistance(a,b):
            dist = 0
            for i in range(len(a)):
                 dist += abs(a[i]-b[i])
            return dist
        def checkWithScikit(customLabel,scikitLabel):
            if len(customLabel) == len(scikitLabel):
                 same = True
                 for i in range(len(customLabel)):
                     if (customLabel[i] != scikitLabel[i]):
                         print("Oops, it's different.")
                         same = False
                         break
                 if same:
                     print("Yes, it's the same!!")
            else:
                 print("Oops, it's different.")
        def calculatePurity(true_label,predicted_label,ncluster):
            n = len(true label)
            temp sum = 0
            for i in range(ncluster):
                 n label = [0,0,0]
                for j in range(len(predicted_label)):
                     if predicted_label[j] == i:
                         if true label[j] == 0:
                             n label[0]+=1
                         elif true label[j] == 1:
                             n label[1]+=1
                         elif true label[j] == 2:
                             n_{abel[2]+=1}
                temp sum += max(n label)
            return (1/n * (temp_sum))
```

K-MEANS

K-Means merupakan salah satu metode *clustering* yang sensitif terhadap nilai inisialisasi. Pada

metode ini, banyaknya kluster yang ingin dibuat sudah diketahui sejak awal.

Pada dasarnya, akan diinisialisasi sentroid awal untuk masing-masing kluster. Kemudian, dihitung jarak dari setiap data ke setiap sentroid yang ada. Data tersebut akan dimasukkan ke dalam suatu klulster yang sentroidnya paling dekat dengan data. Kemudian, akan dihitung kembali sentroid setiap kluster dengan cara menghitung *mean*-nya.

Langkah di atas akan diulang secara terus-menerus sehingga tidak terjadi perubahan sentroid ketika perhitungan *mean*.

Pseudocode:

- Masukkan banyak kluster yang ingin dibuat dan pilih sentroid awal untuk masing-masing kluster.
- 2. Ulangi: Masukkan (ulang) setiap data ke dalam kluster terdekat, kemudian *update* sentroid setiap kluster dengan cara menghitung *means*-nya.
- 3. Berhenti ketika sentroid dari setiap kluster tidak ada yang berubah.

Kompleksitas dari algoritma K-Means adalah O(nkt) dengan t adalah jumlah iterasi, k adalah banyaknya kluster, dan n adalah banyaknya data yang ingin dikluster.

```
In [37]: # KMeans Function Implementation
         # calculate Euclidean distance
         def euclDistance(vector1, vector2):
             return sqrt(sum(power(vector2 - vector1, 2)))
         # init centroids with random samples
         def initCentroids(dataSet, k):
             numSamples, dim = dataSet.shape
             centroids = zeros((k, dim))
             for i in range(k):
                  index = int(random.uniform(0, numSamples))
                  centroids[i, :] = dataSet[index, :]
             return centroids
         # k-means cluster
         def kmeans(dataSet, k):
             numSamples = dataSet.shape[0]
             clusterAssment = mat(zeros((numSamples, 2)))
             clusterChanged = True
             ## step 1: init centroids
             centroids = initCentroids(dataSet, k)
             while clusterChanged:
                  clusterChanged = False
                 ## for each sample
                 for i in range(numSamples):
                      minDist = 100000.0
                      minIndex = 0
                      ## for each centroid
                      ## step 2: find the centroid who is closest
                      for j in range(k):
                          distance = euclDistance(centroids[j, :], dataSet[i, :])
                          if distance < minDist:</pre>
                              minDist = distance
                              minIndex = j
                      ## step 3: update its cluster
                      if clusterAssment[i, 0] != minIndex:
                          clusterChanged = True
                          clusterAssment[i, :] = minIndex, minDist**2
                 ## step 4: update centroids
                 for j in range(k):
                      pointsInCluster = dataSet[nonzero(clusterAssment[:, 0].A == j)[0]]
                      centroids[j, :] = mean(pointsInCluster, axis = 0)
                 model = []
                 for c in clusterAssment[:,0]:
                     model = append(model, c)
             return model
         # OUR KMEANS
         kmeans custom = kmeans(iris, 3)
```

```
print("Clustering with custom KMeans")
print(kmeans_custom)
print()
# SCIKIT'S KMEANS
kmeans_sklearn = KMeans(n_clusters=3, init='k-means++', n_init=10, max_iter=300,
         verbose=0, random_state=None, copy_x=True, n_jobs=1, algorithm='a
print("Clustering with sklearn's KMeans:")
print(kmeans_sklearn)
print()
# Calculate Purity
print("Purity custom KMeans: ", calculatePurity(target, kmeans custom, 3))
print("Purity scikit's KMeans: ", calculatePurity(target, kmeans_sklearn, 3))
Clustering with custom KMeans
2. 2. 2. 2. 1. 2. 1. 1. 1. 1. 2. 1. 1. 1. 1. 1. 1. 2. 2. 1. 1. 1. 1. 2.
1. 2. 1. 2. 1. 1. 2. 2. 1. 1. 1. 1. 1. 2. 1. 1. 1. 1. 2. 1. 1. 2. 1.
1. 1. 2. 1. 1. 2.]
Clustering with sklearn's KMeans:
2 0]
Purity custom KMeans: 0.886666666666667
```

Purity scikit's KMeans: 0.8933333333333334

K-MEDOIDS

K-Medoids pada dasarnya mirip dengan K-Means. Letak perbedaan K-Medoids dengan K-Means terletak pada update sentroid. Jika pada K-Means cara meng-update sentroid tiap kluster adalah dengan menghitung means dari kluster tersebut, namun ada K-Medoids akan diambil satu data untuk menggantikan salah satu sentroid yang ada. Dengan cara ini, K-Medoids lebih rigid terhadap pencilan (outliers) dibandingkan K-Means.

Karena pemilihan data random memiliki banyak kemungkinan, biasanya K-Medoids akan berhenti setelah beberapa data yang dipilih menghasilkan kluster dengan error yang lebih besar.

Pseudocode:

- 1. Masukkan banyak kluster yang ingin dibuat dan pilih sentroid awal untuk masing-masing kluster.
- 2. Ulangi: Masukkan (ulang) setiap data ke dalam kluster terdekat, kemudian update sentroid setiap kluster dengan cara memilih salah satu data random untuk menggantikan sentroid yang sudah ada.

3. Berhenti ketika *error* yang dihasilkan minimal atau banyaknya data *random* yang ditemukan untuk menggantikan sentroid lainnya tidak menghasilkan *error* yang lebih kecil melebihi *threshold*.

```
In [45]: # KMedoids Function Implementation
         from numpy import *
         # calculate Manhattan distance
         def manhatDistance(vector1, vector2):
             return sum(fabs(vector2 - vector1))
         # init centroids with random samples
         def initCentroids(dataSet, k):
             numSamples, dim = dataSet.shape
             centroids = zeros((k, dim))
             for i in range(k):
                  index = int(random.uniform(0, numSamples))
                  centroids[i, :] = dataSet[index, :]
             return centroids
         def updateCentroids(dataSet, k, centroids, clusterAssment):
             clust = int(random.uniform(0,k))
             numSamples = dataSet.shape[0]
             idx = int(random.uniform(0, numSamples))
             while clusterAssment[idx, 0] != clust:
                  idx = int(random.uniform(0, numSamples))
             centroids[clust,:] = dataSet[idx, :]
             return centroids
         # k-medoids cluster
         def kmedoids(dataSet, k):
             numSamples = dataSet.shape[0]
             clusterAssment = mat(zeros((numSamples, 2)))
             clusterChanged = True
             ## step 1: init centroids
             centroids = initCentroids(dataSet, k)
             error = 0
             while clusterChanged:
                  clusterChanged = False
                  ## for each sample
                 for i in range(numSamples):
                     minDist = 100000.0
                      minIndex = 0
                      ## for each centroid
                      ## step 2: find the centroid who is closest
                      for j in range(k):
                          distance = manhatDistance(centroids[j, :], dataSet[i, :])
                          if distance < minDist:</pre>
                              minDist = distance
                              minIndex = j
                      ## step 3: update its cluster
                      if clusterAssment[i, 0] != minIndex:
                          clusterChanged = True
                          clusterAssment[i, :] = minIndex, minDist
                  ## step 4: update centroids
                  new error = sum(clusterAssment[:, 1])
```

```
if new error < error:</pre>
         clusterChanged = False
         error = new_error
      else:
         centroids = updateCentroids(dataSet,k,centroids,clusterAssment)
     model = []
     for c in clusterAssment[:,0]:
         model = append(model, c)
   return model
# OUR KMEDOIDS
kmedoids custom = kmedoids(iris, 3)
print("Clustering with custom KMedoids:")
print(kmedoids custom)
print()
# SCIKIT'S KMEDOIDS
from pyclustering.cluster import kmedoids
kmedoids sklearn init = kmedoids.kmedoids(iris, [0,50,100],ccore='True')
kmedoids sklearn init.process()
kmedoids sklearn model = kmedoids sklearn init.get clusters()
i = 0
kmedoids sklearn = np.arange(150)
for c in kmedoids_sklearn_model:
   for cj in c:
      kmedoids sklearn[cj] = i
print("Clustering with scikit's KMedoids:")
print(kmedoids sklearn)
print()
# Calculate Purity
print("Purity custom KMedoids: ", calculatePurity(target, kmedoids custom, 3))
print("Purity scikit's KMedoids: ", calculatePurity(target, kmedoids sklearn, 3))
Clustering with custom KMedoids:
1. 1. 1. 1. 2. 1. 2. 2. 2. 2. 1. 2. 2. 2. 1. 2. 1. 1. 2. 2. 2. 2. 1.
2. 1. 2. 1. 2. 2. 1. 1. 2. 2. 2. 2. 2. 1. 1. 2. 2. 2. 1. 2. 2. 2. 1. 2.
2. 2. 1. 2. 2. 1.]
Clustering with scikit's KMedoids:
2 2 1 1 2 2 2 2 1 2 1 2 1 2 1 2 2 1 1 2 2 2 2 2 1 1 2 2 2 2 1 2 2 2 1 2 2 2 1 2
2 1]
Purity custom KMedoids: 0.893333333333334
Purity scikit's KMedoids: 0.9
```

DBSCAN

DBSCAN adalah algoritma yang termasuk ke dalam Density-based Clustering. Oleh karena itu, definisi kluster adalah daerah padat dalam ruang data yang dipisahkan oleh daerah dengan kepadatan objek yang lebih rendah. Sebuah area dapat disebut sebagai sebuah kluster apabila pada daerah tersebut terdapat data paling sedikit MinPts (didefinisikan pada awal klustering). *High density* adalah apabila di area dengan jari-jari epsilon, terdapat paling sedikit data sebanyak MinPts (epsilon didefinisikan di awal juga).

Sebuah data disebut *core* data apabila di sekeliling data tersebut (dengan jari-jari epsilon) terdapat minimal MinPts banyak data. *Border* data adalah data yang bukan *core* namun data tersebut masih terletak di dekat *core* data. *Outlier* adalah data yang terpisah dari data-data lain atau yang sering disebut juga sebagai pencilan.

Pseudocode:

Algoritma dimulai dengan sembarang data D, kemudian mencari tetangga-tetangga di sekitar D yang dapat dicapai (yaitu masih dicakup pada jari=jari sebesar epsilon). a. Jika D adalah sebuah *core*, iterasi ini akan menghasilkan sebuah kluster. b. Jika D adalah sebuah *border*, tidak akan terbentuk kluster baru dan algoritma ini akan menghitung data lain dari kumpulan data yang ingin dilakukan klustering.

```
# DBSCAN Function Implementation
class customDBSCAN:
    def init (self,data,e,minPts,distanceFunction):
        self.data = data
        self.e = e
        self.num data = len(self.data)
        self.minPts = minPts
        self.labels = []
        self.cores = {}
        for x in range(len(self.data)):
            self.labels.append(-1)
        if distanceFunction == 'eucledian':
            self.distanceMatrix = calculateEucledianDistance(self.data)
        elif distanceFunction == 'manhattan':
            self.distanceMatrix = calculateManhattanDistance(self.data)
    def findCores(self):
        for i in range(self.num data):
            temp_cluster = []
            for j in range(self.num data):
                if (self.distanceMatrix[i][j] <= self.e and i != j):</pre>
                    temp_cluster.append(j)
            if(len(temp cluster) >= self.minPts):
                self.cores[i] = temp_cluster
    def dfs dbscan(self,dict type data,current label):
        if(self.labels[dict type data] == -1):
            self.labels[dict_type_data] = current_label
            if dict type data in self.cores:
                for i in self.cores[dict type data]:
                    self.dfs dbscan(i,current label)
    def fit(self):
        label = -1
        self.findCores()
        for k,v in self.cores.items():
            if (self.labels[k] == -1):
                label += 1
            self.dfs dbscan(k,label)
```

```
In [16]:
      # MAIN
      distanceFunction = 'eucledian'
      epsilon = 1
      minPts = 17
      # OUR DBSCAN
      db = customDBSCAN(iris,epsilon,minPts,distanceFunction)
      db.fit()
      print("Clustering with custom DBSCAN: ")
      print(db.labels)
      print()
      # SCIKIT'S DBSCAN
      from sklearn.cluster import DBSCAN
      clustering = DBSCAN(eps=epsilon, min samples=minPts).fit(iris)
      print("Clustering with scikit's DBSCAN: ")
      print(clustering.labels )
      print()
      # Compare custom DBSCAN with SCIKIT's
      print("Compare with scikit:")
      checkWithScikit(db.labels,clustering.labels_)
      print()
      # Calculate Purity
      print("Purity custom DBSCAN: ", calculatePurity(target,db.labels,len(set(db.label
      print("Purity scikit's DBSCAN: ", calculatePurity(target,clustering.labels ,3))
      Clustering with custom DBSCAN:
      Clustering with scikit's DBSCAN:
                    0
                         0
                       0
                               0
                                 0
                                   0
                                          0
                0
                  0
                    0
                      0
                         0
                           0
                             0
                               0
                                 0
                                   0
                                     0
                                        0
                                          0
                                            0
                                                0
        0
                1
                  1
                    1
                      1
                        1
                           1
                             1
                               1
                                 1 1 1
                                       1
                                         1
                                            1
                                                1
              1
                1 1 1
                      1
                         1
                             1
                               1
                                 1 1 1 1
                                         1
        1
                1
                  1
                    1
                      1
                         1
                           1
                             1
                               1
                                 1
                                   1
                                     1
                                        1
                                          1
                                            1
                                              1
                                                1
              1
                1
                  1
                    1
                      1
                         1
                           1
                            1 -1
                                 1
                                   1
                                     1
                                        1
                                          1
                                            1
                                              1
                                                1
        1
          1
                  1]
        1
          1
             1
                1
            1
      Compare with scikit:
      Yes, it's the same!!
      Purity custom DBSCAN: 0.666666666666667
      Purity scikit's DBSCAN: 0.666666666666667
```

AGGLOMERATIVE

Agglomerative merupakan salah satu metode hierarchical clustering. Pada dasarnya, hierarchical

clustering ini ada dua macam, yaitu top-down (dari satu kluster besar dipecah menjadi kluster-kluster kecil, disebut juga Divisive Clustering) dan bottom-up (dari banyak kluster kecil dijadikan satu kluster besar yang anggotanya adalah semua data yang ada, disebut Agglomerative Clustering). Sama seperti K-Means dan DBSCAN, Agglomerative juga butuh banyaknya kluster secara eksplisit dinyatakan ketika ingin melakukan klustering. Hal ini disebabkan oleh metode Agglomerative akan melakukan iterasi secara terus-menerus hingga membentuk satu kluster besar apabila tidak ada threshold banyaknya kluster yang harus dibuat. Dengan adanya batasan banyaknya kluster yang harus dibuat, maka algoritma ini akan berhenti hingga banyak kluster yang dibuat sudah sesuai dengan keinginan pengguna.

Dalam satu iterasi, metode Agglomerative hanya akan menggabungkan satu data ke dalam kluster terdekat dengan dirinya. Cara perhitungan jarak pada algoritma ini ada 4 macam:

- Single: jarak antarkluster adalah jarak terdekat antara salah satu objek dari kedua kluster tersebut.
- Complete: jarak antarkluster adalah jarak terjauh antara salah satu objek dari kedua kluster tersebut.
- Average: jarak antarkluster adalah rata-rata jarak terdekat antara setiap data dari kedua kluster.
- 4. Average group: jarak antara kedua sentroid (means) dari kedua kluster.

Pseudocode:

- 1. Algoritma dimulai dengan adanya kluster kecil yang banyaknya sesuai dengan banyaknya data (satu kluster hanya berisi satu data).
- 2. Cari jarak minimal berdasarkan salah satu algoritma jarak yang sudah dijelaskan di atas, gabungkan kluster dengan jarak paling dekat.
- 3. Update matriks jarak dengan menghitung jarak antara kluster baru ke kluster-kluster lainnya.
- 4. Ulang step 2 dan 3 hingga kluster yang ada sama dengan kluster yang diinginkan atau sampai terbentuk satu kluster besar.

```
In [17]: | #CUSTOM AGGLOMERATIVE
         class customAgglomerative:
             def init (self,data,n cluster,linkage='single',distanceFunction='eucledian
                 self.data = data
                 self.n cluster = n cluster
                 if linkage == 'single':
                     self.linkage = self.singleLinkage
                 elif linkage == 'complete':
                     self.linkage = self.completeLinkage
                 elif linkage == 'average':
                     self.linkage = self.averageLinkage
                 elif linkage == 'average group':
                     self.linkage = self.averageGroupLinkage
                 if distanceFunction == 'eucledian':
                     self.distanceFunction = eucledianDistance
                 elif distanceFunction == 'manhattan':
                     self.distanceFunction = manhattanDistance
                 self.distances = {}
                 #clusters = list of tuples
                 self.clusters = [(idx,)for idx in range(len(self.data))]
                 #label of each data's cluster
                 self.labels = []
                 for i in range(len(self.data)):
                     self.labels.append(i)
             def fit(self):
                 while len(self.clusters)>self.n cluster:
                     a = 0
                     b = 0
                     clusterDistance = np.inf
                     for i in range(len(self.clusters)):
                         for j in range(i+1, len(self.clusters)):
                             temp clusterDistance = self.getLinkageDistance(self.clusters[
                             if temp clusterDistance < clusterDistance:</pre>
                                  a,b,clusterDistance = i,j,temp_clusterDistance
                     self.clusters[a] = self.clusters[b]
                     del self.clusters[b]
                 for i in range(len(self.clusters)):
                     for j in self.clusters[i]:
                         self.labels[j] = i
                 return self.labels
             def getLinkageDistance(self,clust1,clust2):
                 dist = self.distances.get((clust1,clust2))
                 if dist == None:
```

```
dist = self.distances.get((clust2,clust1))
    if dist == None:
        self.distances[(clust1,clust2)] = self.linkage(self.data,clust1,clust
        dist = self.distances.get((clust1,clust2))
    return dist
def singleLinkage(self,nodes,clust1,clust2,distance function=eucledianDistance
    dist = np.inf
    for i in clust1:
        for j in clust2:
            dist = min(dist,distance function(nodes[i],nodes[j]))
    return dist
def completeLinkage(self,nodes,clust1,clust2,distance function=eucledianDista
    dist = -np.inf
    for i in clust1:
        for j in clust2:
            dist = max(dist,distance function(nodes[i],nodes[j]))
    return dist
def averageLinkage(self,nodes,clust1,clust2,distance function=eucledianDistan
   dist = 0
    for i in clust1:
        for j in clust2:
            dist += distance_function(nodes[i],nodes[j])
    return dist / (len(clust1)*len(clust2))
def averageGroupLinkage(self,nodes,clust1,clust2,distance_function=eucledianD
    dist = 0
   mean1 = []
   mean2 = []
   for i in clust1:
        for j in nodes[i]:
            mean1[i]+=j
        mean1[i]= mean1[i]/len(nodes)
   for i in clust2:
        for j in nodes[i]:
            mean2[i]+=j
        mean2[i]= mean2[i]/len(nodes)
    return distance function(mean1, mean2)
```

```
In [20]: from sklearn.cluster import AgglomerativeClustering
       distanceFunction = 'eucledian'
       linkage = 'complete'
       n clusters = 4
       scikitClustering = AgglomerativeClustering(linkage = 'complete', n clusters = n cl
       scikitClustering.fit(iris)
       agl = customAgglomerative(iris,n_clusters,linkage,distanceFunction)
       print("Clustering with custom Agglomerative:")
       print(agl.fit())
       print()
       print("Clustering with scikit's Agglomerative:")
       print(scikitClustering.labels_)
       print()
       # Compare custom DBSCAN with SCIKIT's
       print("Compare with scikit:")
       checkWithScikit(agl.labels,scikitClustering.labels )
       print()
       # Calculate purity
       print("Purity:")
       print(calculatePurity(target,agl.labels,n clusters))
       print("Purity custom Agglomerative: ", calculatePurity(target,agl.labels,n_cluste
       print("Purity scikit's Agglomerative: ", calculatePurity(target,scikitClustering.
       Clustering with custom Agglomerative:
       1, 2, 1, 2, 1, 2, 1, 2, 2, 2, 2, 1, 2, 1, 2, 1, 2, 1, 2, 1, 1, 1, 1, 1, 1,
       1, 2, 2, 2, 2, 1, 2, 1, 1, 1, 2, 2, 2, 1, 2, 2, 2, 2, 2, 1, 2, 2, 1, 1, 3, 1,
       1, 3, 2, 3, 1, 3, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 3, 3, 1, 1, 1, 3, 1, 1, 3, 1, 1, 1, 3,
       Clustering with scikit's Agglomerative:
       1\ 1\ 1\ 1\ 1\ 2\ 2\ 2\ 1\ 2\ 1\ 1\ 1\ 2\ 2\ 2\ 1\ 2\ 2\ 2\ 2\ 1\ 1\ 3\ 1\ 1\ 3\ 2\ 3\ 1\ 3\ 1
        1 1]
       Compare with scikit:
       Yes, it's the same!!
       Purity:
       0.84000000000000001
       Purity custom Agglomerative: 0.8400000000000001
       Purity scikit's Agglomerative: 0.8400000000000001
```

Implementasi ke Dataset Iris

Implementasi dataset Iris ke fungsi buatan DBSCAN dan Agglomerative menunjukkan hasil clustering yang sama dengan fungsi bawaan dari sklearn. Oleh karena itu, perhitungan kinerja berupa purity juga menunjukkan nilai yang sama. Pada fungsi buatan KMeans dan KMedoids, terdapat perbedaan nilai pada purity yang diakibatkan oleh terpilihnya centroid awal secara random. Namun, berdasarkan pengujian yang dilakukan, perbedaan nilai purity tersebut rata-rata kurang dari 0,5.

Pembagian Tugas

13515055 | Rizky Faramita - KMeans, KMedoids 13515064 | Tasya - Agglomerative 13515140 | Francisco Kenandi Cahyono - DBSCAN