k-Nearest Neighbours & k-Means Clustering

Ali Akbar Septiandri

December 9, 2017

untuk Astra Graphia IT

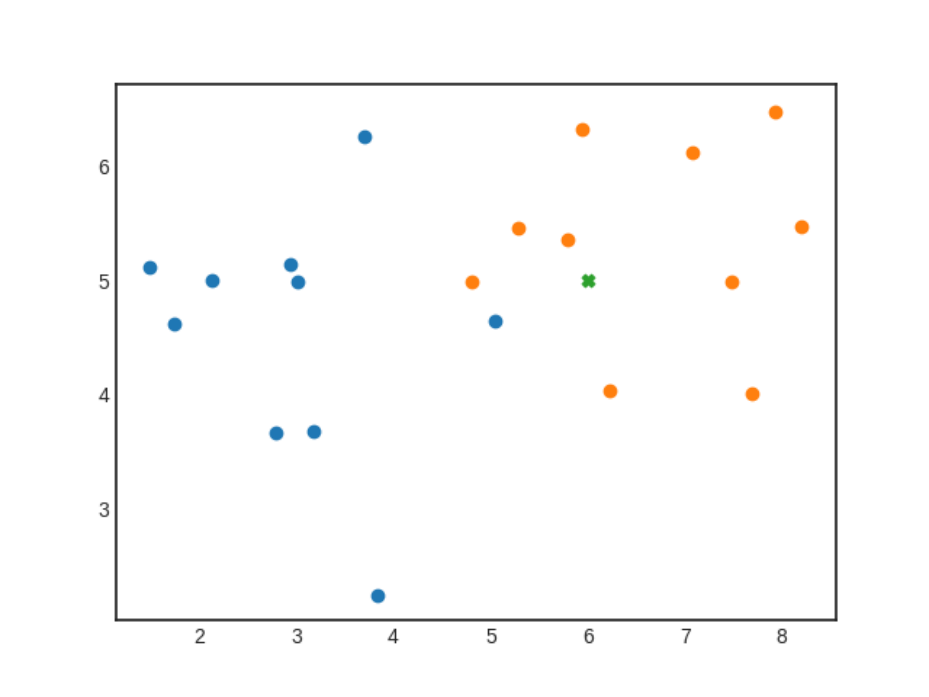
Daftar Isi

Bahan Bacaan

1. Witten, I. H., Frank, E., Hall, M. A., & Pal, C. J. (2016). Data Mining: Practical machine learning tools and techniques. Morgan Kaufmann. (Section 4.7, 4.8, & 7.1)
2. VanderPlas, J. (2016). Python Data Science Handbook. (In Depth: k-Means Clustering) `http://nbviewer.jupyter.org/github/jakevdp/PythonDataScienceHandbook/blob/master/notebooks/05.11-K-Means.ipynb`
3. "Klasifikasi: k-Nearest Neighbours." *Cerita Tentang Data*. 31 Agustus 2015. `https://tentangdata.wordpress.com/2015/08/31/klasifikasi-k-nearest-neighbours/`

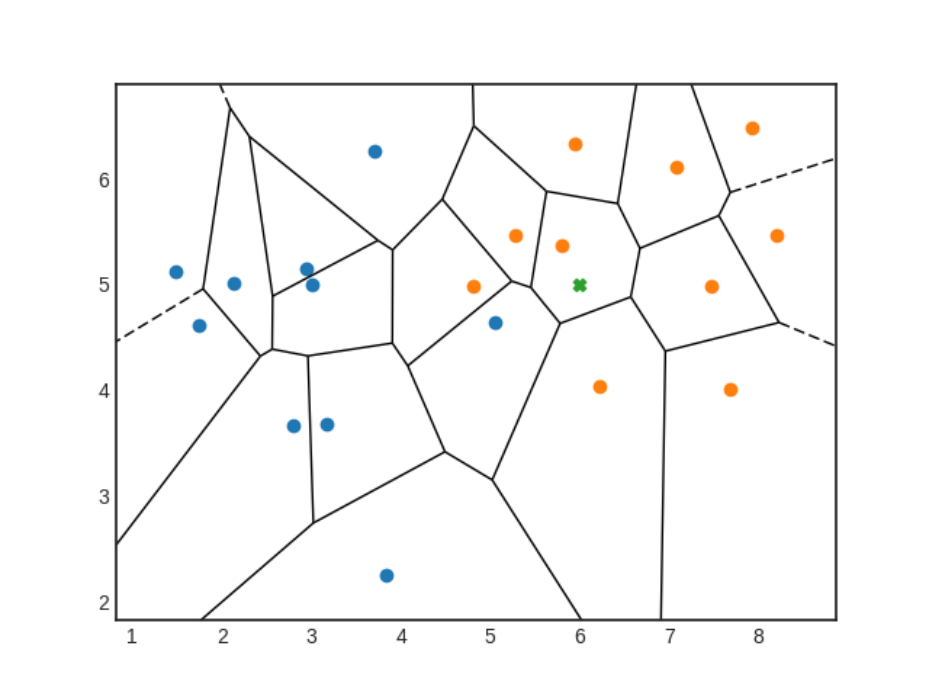
k-Nearest Neighbours

Intuisi



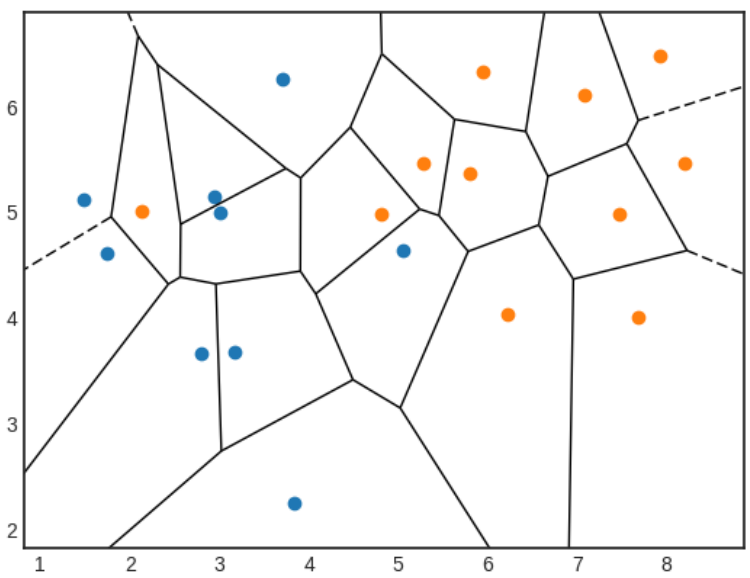
- Terdapat dua variabel: x_1, x_2
- Dua kelas: biru dan jingga
- Apa kelas dari *instance* tanda silang?

Klasifikasi Nearest-Neighbour



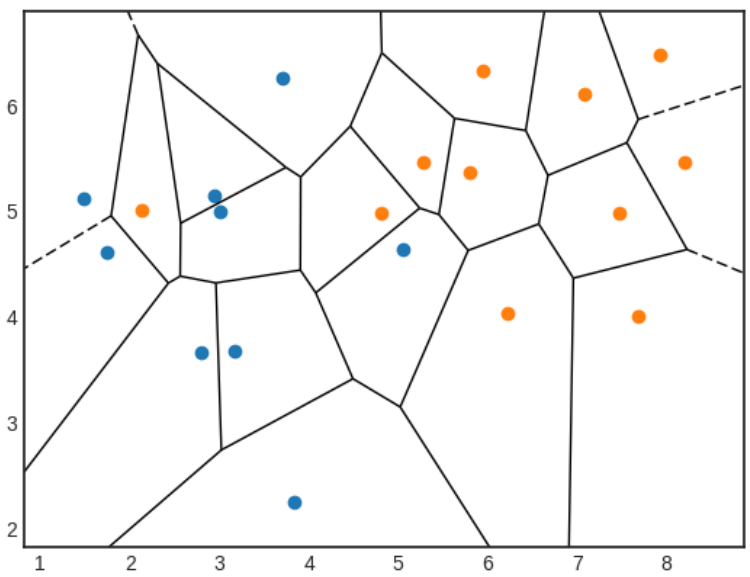
- Cari yang paling mirip, lalu gunakan kelas yang sama!
- *Voronoi tessellation*: membagi region dengan titik yang memiliki jarak yang sama dari dua contoh data latih
- Batas klasifikasi: non-linear

Pencilan



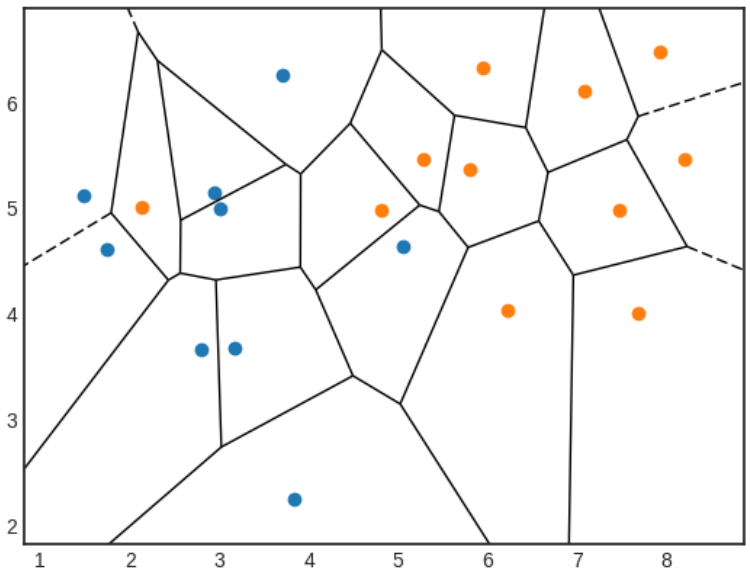
- Sensitif terhadap pencilan

Pencilan



- Sensitif terhadap pencilan
- Tidak ada $P(y|x)$

Pencilan



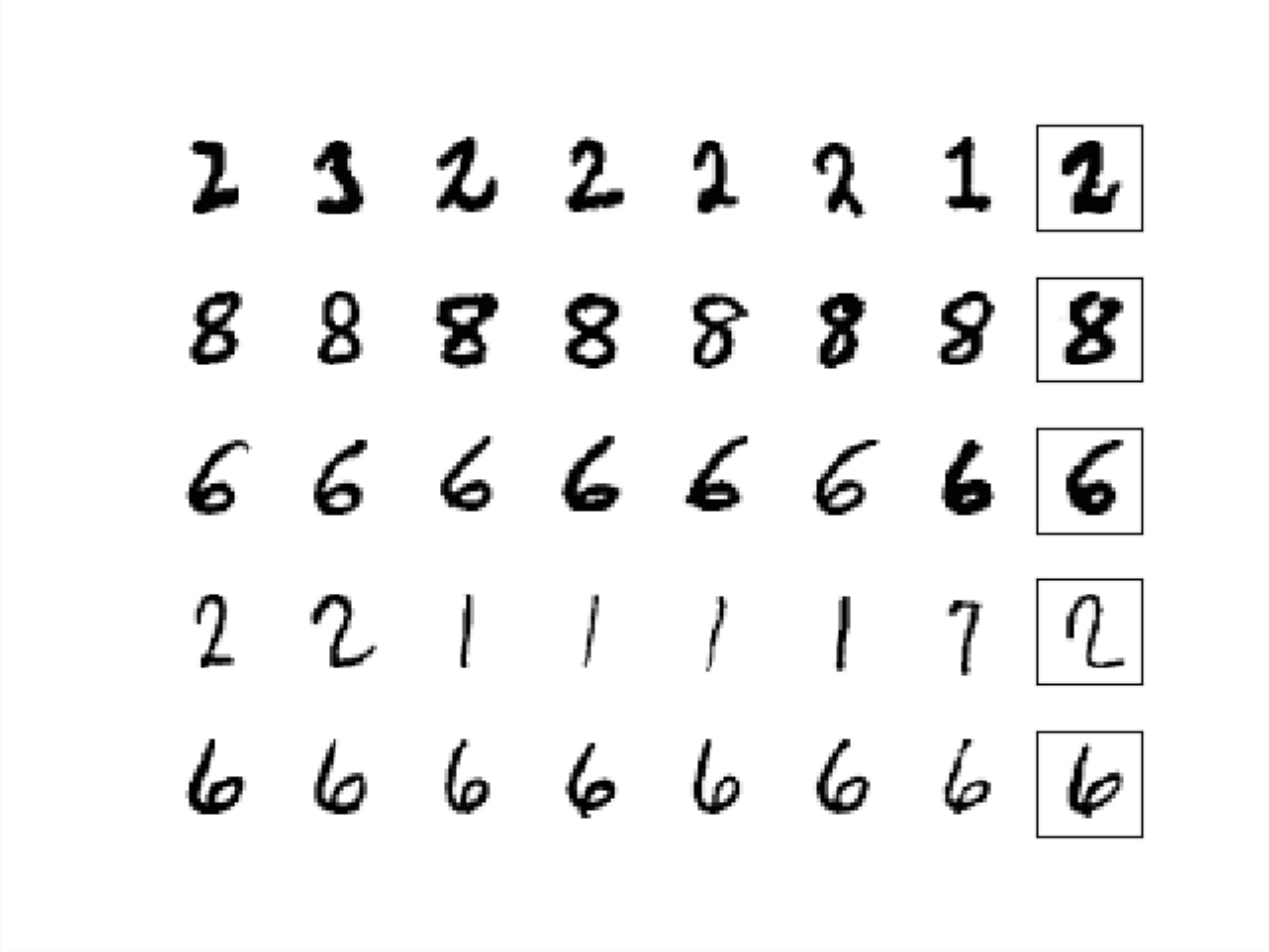
- Sensitif terhadap pencilan
- Tidak ada $P(y|x)$
- Tidak sensitif terhadap *class prior*

Perbaiki dengan menggunakan lebih dari satu tetangga (k-tetangga) terdekat!

Algoritma Klasifikasi

- Diketahui
  - data latih $\{x_i, y_i\}$
    - x_i: nilai atribut
    - y_i: label kelas
  - *instance* uji x
- Algoritma:
  1. Hitung jarak $D(x, x_i)$ untuk semua x_i
  2. Pilih k tetangga terdekat dengan labelnya
  3. $\hat{y} =$ mayoritas dari label tetangga terdekat

Klasifikasi k-NN

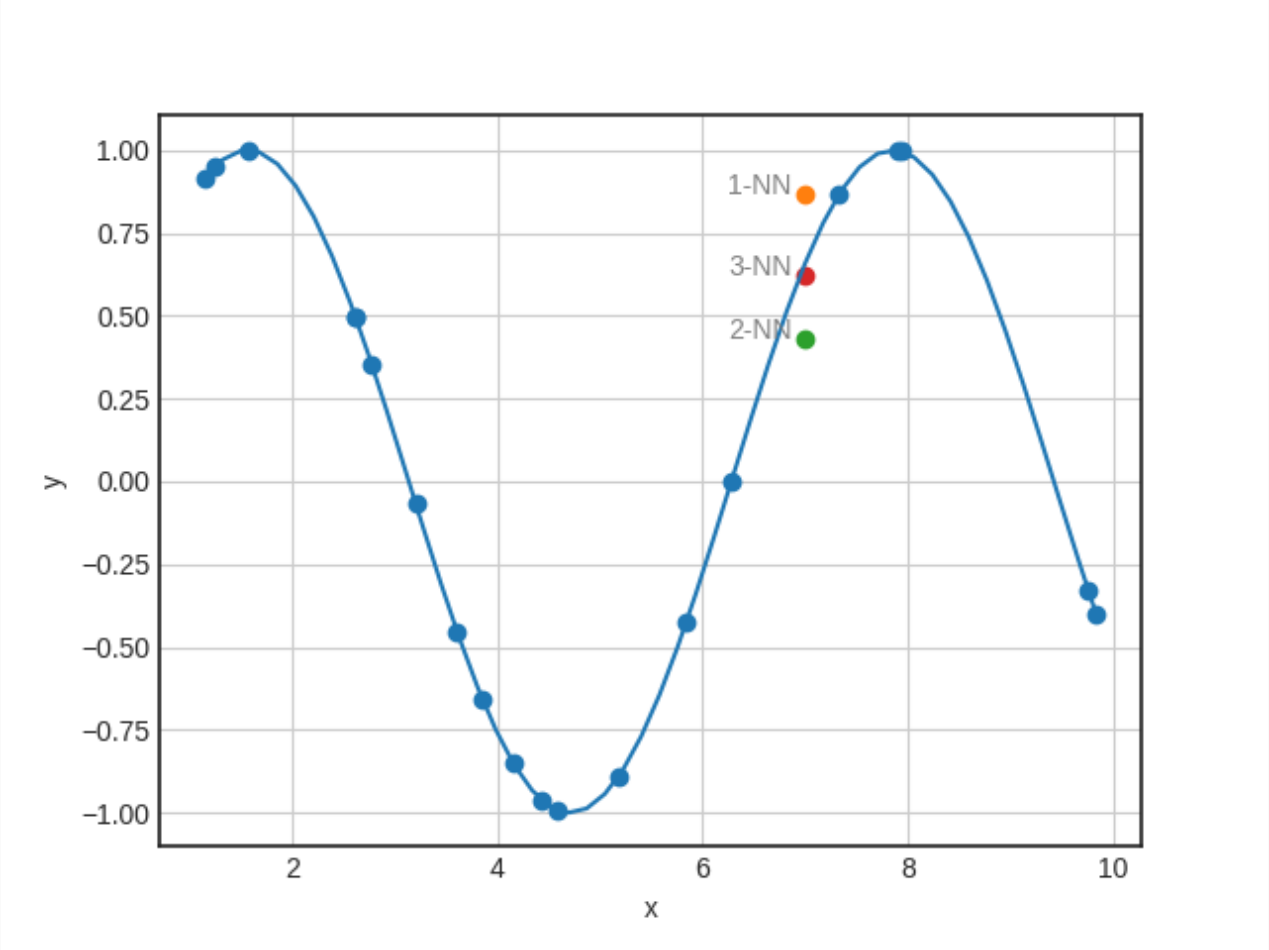


Gambar 1: 7-NN pada data MNIST dengan data uji di paling kanan

Algoritma Regresi

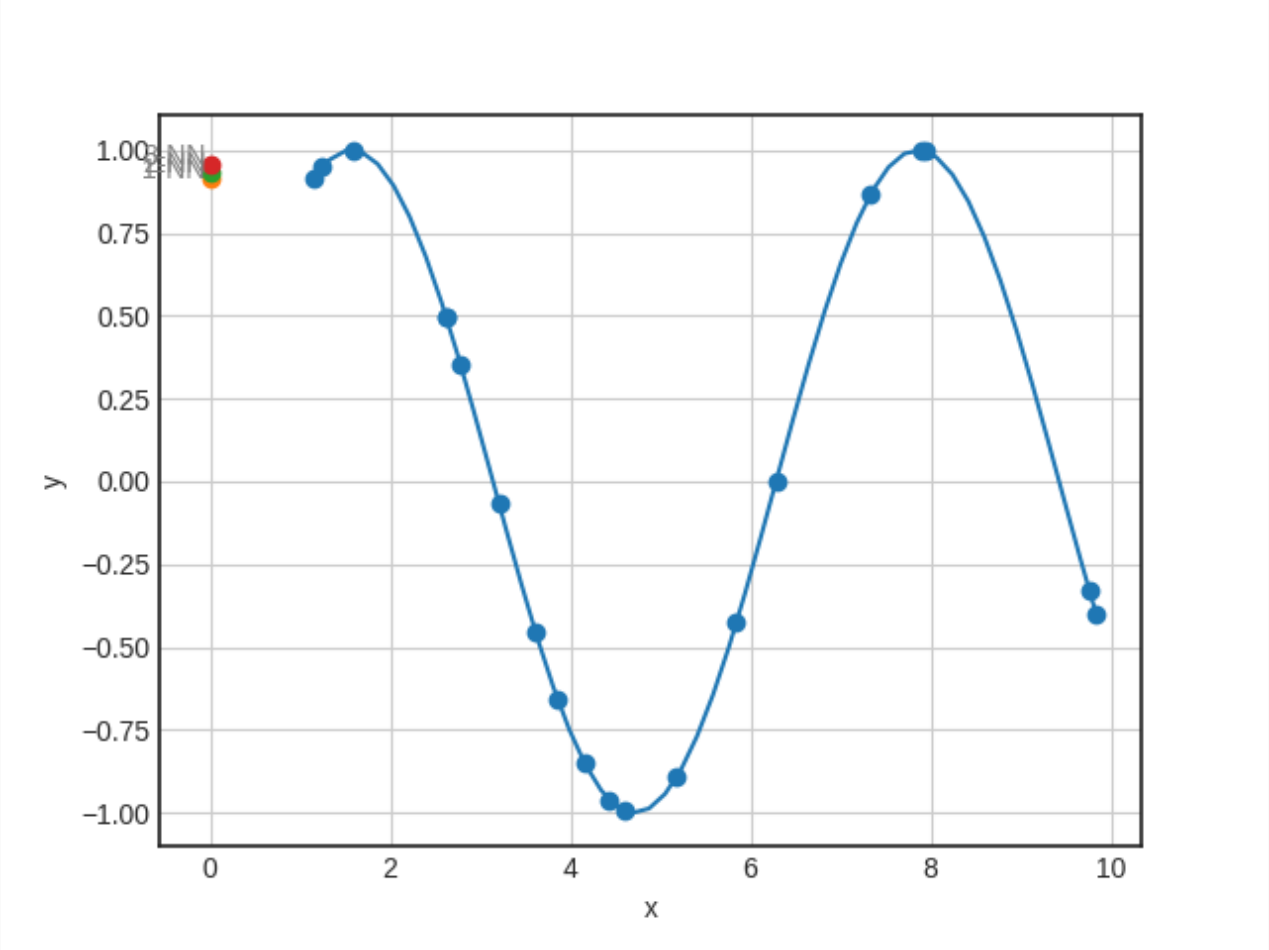
- Diketahui
  - data latih $\{x_i, y_i\}$
    - x_i: nilai atribut
    - y_i: nilai numerik sebenarnya
  - *instance* uji x
- Algoritma:
  1. Hitung jarak $D(x, x_i)$ untuk semua x_i
  2. Pilih k tetangga terdekat dengan labelnya
  3. $\hat{y} = f(x) = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^{k} y_{ij}$ (nilai rata-rata)

Regresi k-NN



Gambar 2: Interpolasi dengan $\{1,2,3\}$-NN

Regresi k-NN



Gambar 3: Ekstrapolasi dengan {1,2,3}-NN

Bagaimana cara memilih nilai k?

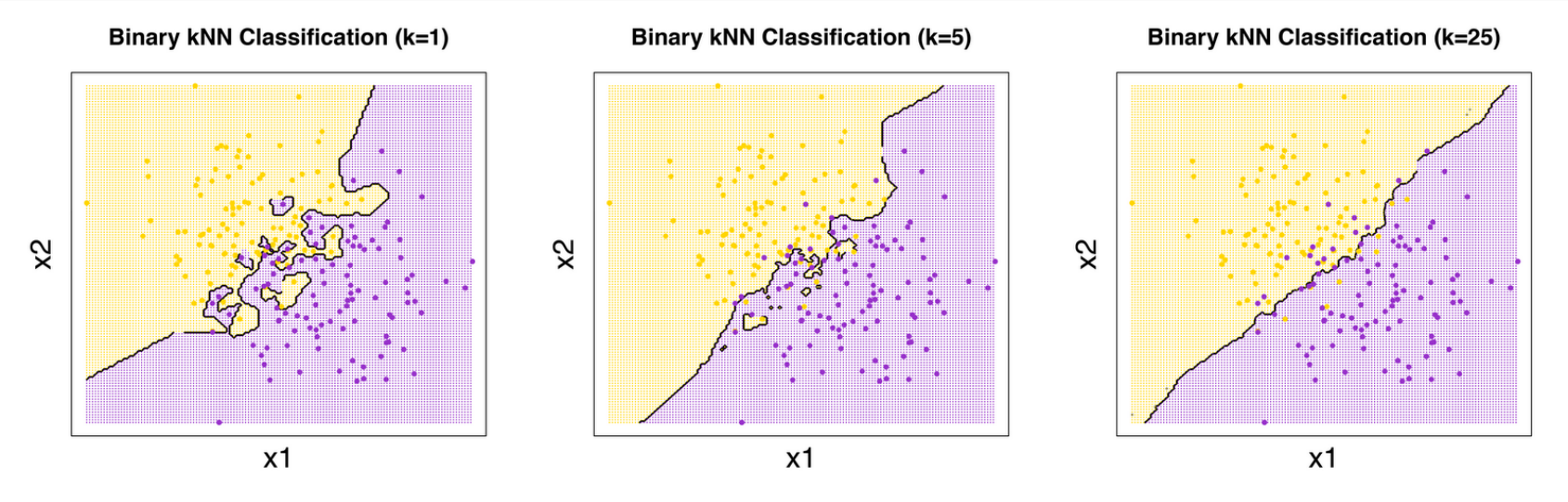
Memilih Nilai k

- Nilai yang besar $\rightarrow P(y)$
- Nilai yang kecil $\rightarrow$ terlalu variatif, batas keputusan yang tidak stabil

Memilih Nilai k

- Nilai yang besar $\rightarrow P(y)$
- Nilai yang kecil $\rightarrow$ terlalu variatif, batas keputusan yang tidak stabil
- **Solusi:** Gunakan data validasi!

Batas Keputusan



Gambar 4: Pengaruh nilai k pada batas keputusan [DeWilde, 2012]

Pengukuran Jarak

Minkowski distance (p-norm):

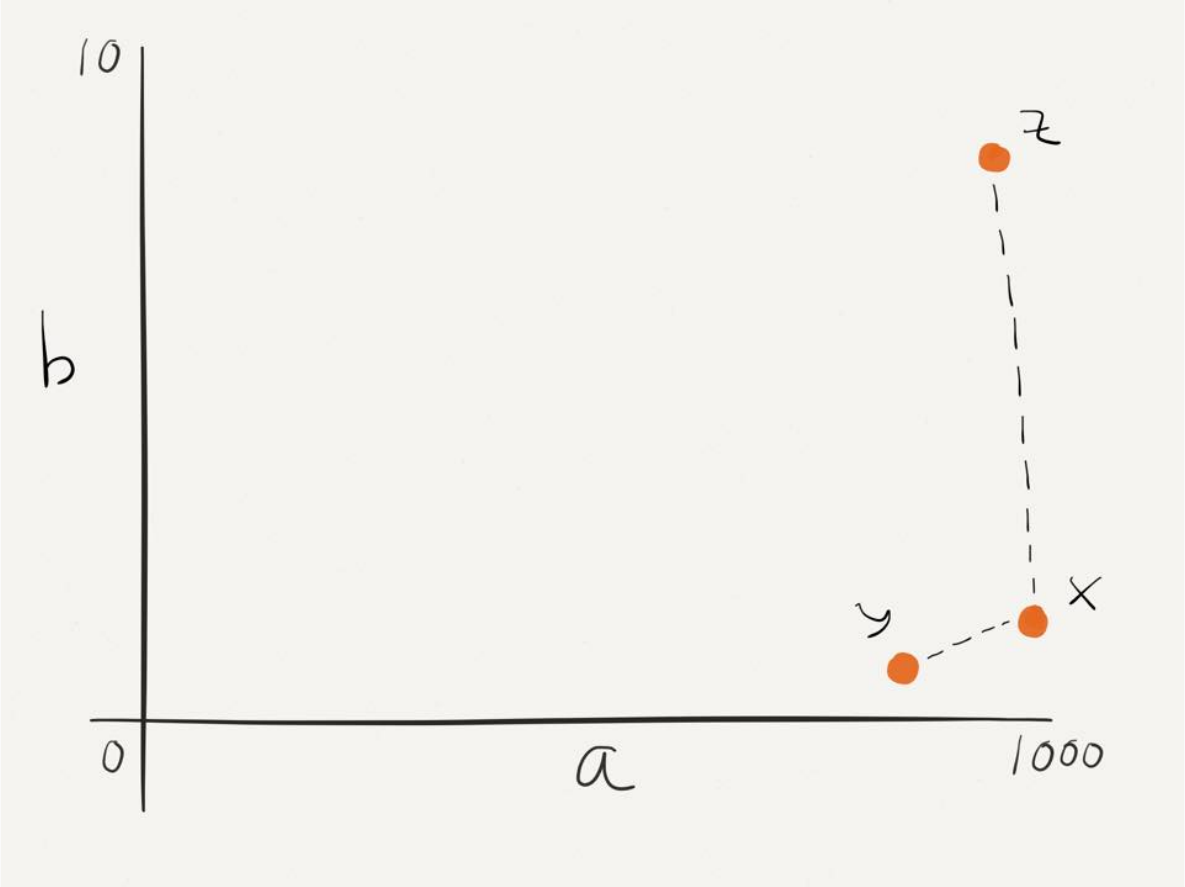
$$d([x_1, x_2, ..., x_n], [y_1, y_2, ..., y_n]) = \sqrt[r]{\sum_{i=1}^{n} |x_i - y_i|^r}$$

Catatan: Lihat kembali salindia minggu ketiga!

Isu

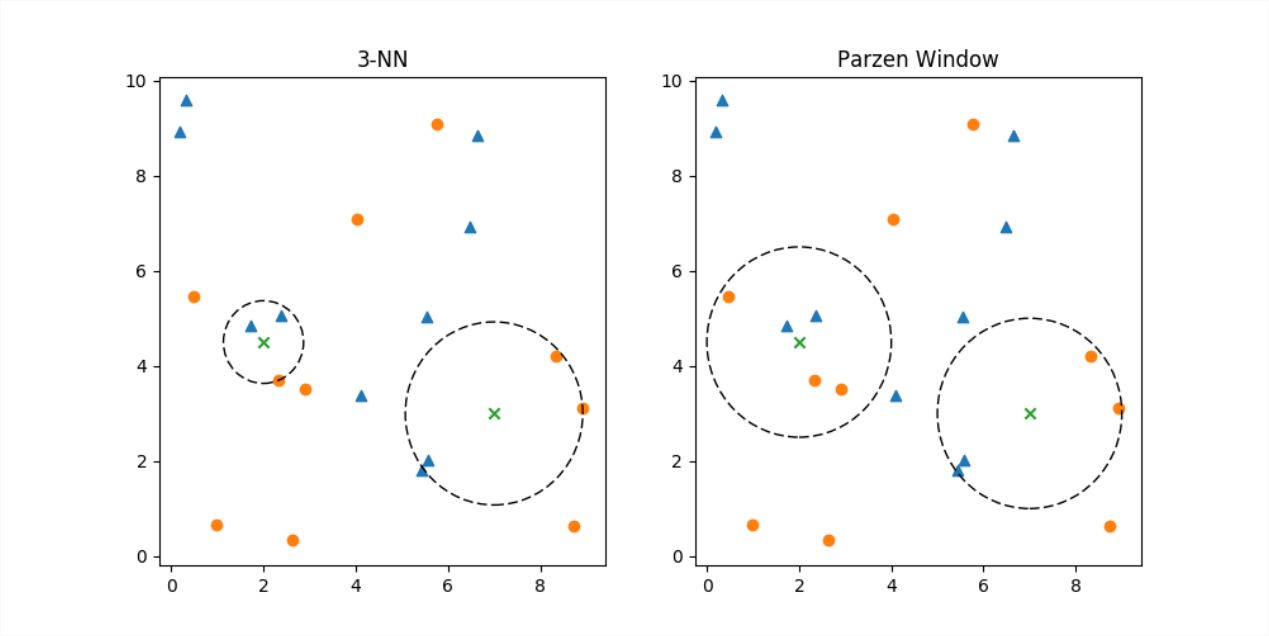
- Hasil seri:
  1. Gunakan jumlah k ganjil
  2. Acak, lemparan koin
  3. *Prior probability*
  4. 1-NN
- *Missing values:* **harus** diganti (*impute*)
- Rentan terhadap perbedaan rentang variabel

Perbedaan Rentang



Gambar 5: Perbedaan rentang variabel bisa mengacaukan klasifikasi k-NN [Wibisono, 2015]

k-NN vs Parzen Windows



Gambar 6: Perbedaan radius klasifikasi pada k-NN dan Parzen Windows

Pros & Cons

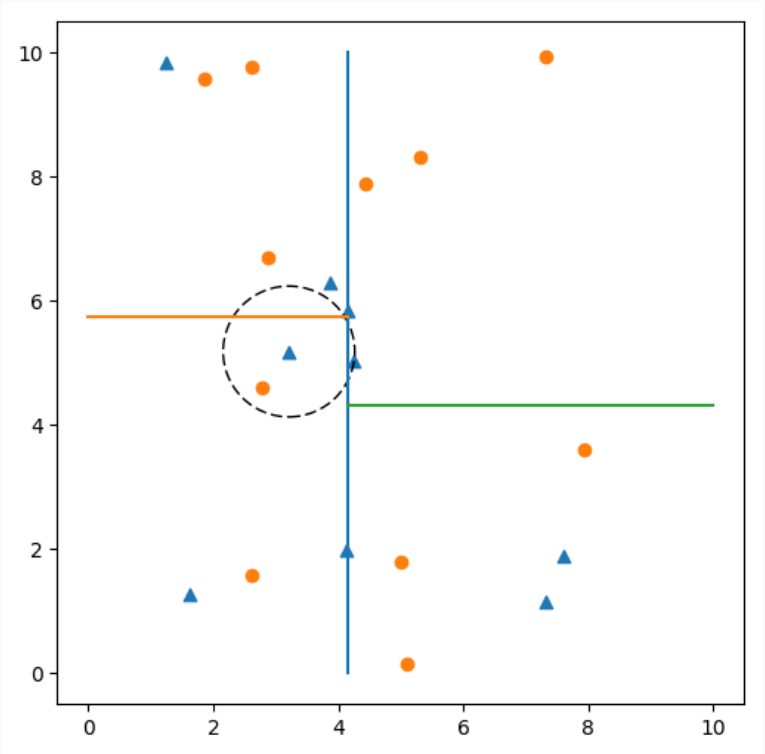
- Pros:
  - Tidak ada asumsi terhadap data, non-parametrik
  - *Asymptotically correct*
- Cons:
  - Harus mengganti nilai yang hilang
  - Sensitif terhadap kelas pencilan (data latih yang salah dilabeli)
  - Sensitif terhadap atribut yang irelevan
  - **Mahal secara komputasi** $O(nd)$

Mempercepat k-NN

- Pelatihan: $O(d)$, tetapi pengujian: $O(nd)$
- Mengurangi d: *dimensionality reduction*
- Mengurangi n: jangan bandingkan dengan **semua** data latih, i.e. cari $m \ll n$
  1. K-D trees
  2. Locality-sensitive hashing (LSH)
  3. Inverted lists

K-D Trees

Pilih dimensi secara acak, cari mediannya, pisahkan data, ulangi



Gambar 7: 3-NN dari semua data berbeda dengan 3-NN yang berada pada region yang sama

Locality-Sensitive Hashing (LSH)

- Hyperplanes acak $h_1 ... h_k$ yang membagi ruang menjadi 2^k region
- Bandingkan x hanya dengan data latih dalam region yang sama: lakukan *dot-product* $\rightarrow$ *hash-code*
- Ada kemungkinan tetangga dekat yang terlewat: ulangi lagi dengan $h_1 ... h_k$ yang berbeda

Inverted Lists

- Jika datanya berupa *bag-of-words*, matriksnya akan *sparse*
- Ide: buat daftar dokumen per atribut

Inverted Lists

D1: “send us your password” (s)
D2: “send us your review” (h)
D3: “review your password” (h)
D4: “review us” (s)
D5: “send your password” (s)
D6: “send us your account” (s)
Dokumen baru: “account review”

send $\rightarrow \{1, 2, 5, 6\}$
your $\rightarrow \{1, 2, 3, 5, 6\}$
review $\rightarrow \{3, 4\}$
account $\rightarrow \{6\}$
password $\rightarrow \{1, 3, 5\}$

k-Means Clustering

Clustering

- *Unsupervised learning*
- Subpopulasi apa yang ada dalam data?
- Apa kesamaan dari elemen di tiap subpopulasi?
- Bisa digunakan untuk menemukan pencilan

Jenis-jenis Clustering

- Tujuan:
  - Monothetic: *common property*
  - Polythetic: kemiripan data dengan pengukuran jarak
- Irisan:
  - Hard clustering
  - Soft clustering
- Flat vs hierarchical

Metode Clustering

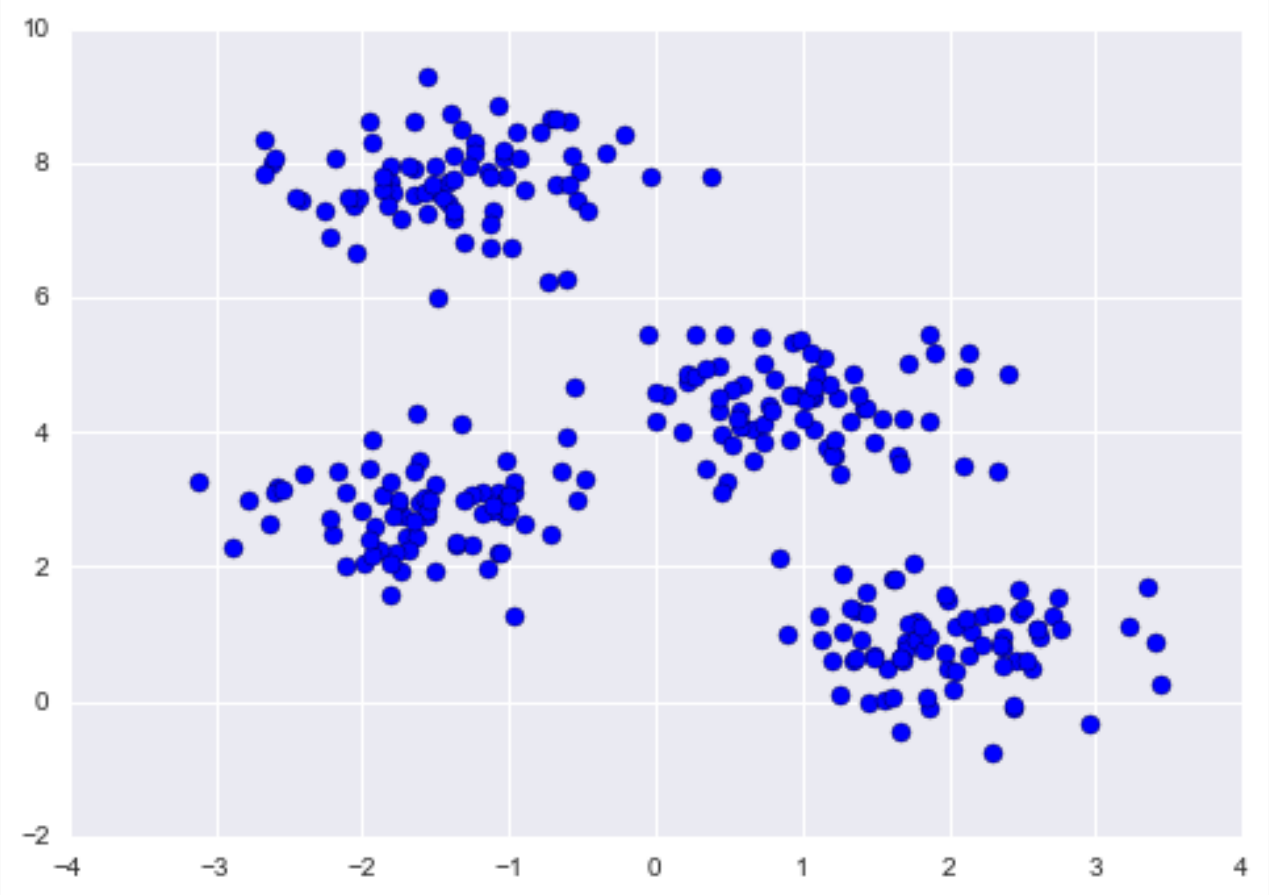
Metode *clustering* yang akan dibahas dalam pelatihan ini:

- K-D Trees: *monothetic, hard boundaries, hierarchical*
- k-Means: *polythetic, hard boundaries, flat*
- Gaussian mixtures (EM algorithm): *polythetic, soft boundaries, flat*
- Agglomerative clustering: *polythetic, hard boundaries, hierarchical*

k-Means

- Jumlah k ditentukan dari awal
- Tidak memerlukan label
- Menggunakan *centroid*, i.e. rata-rata nilai dari objek yang masuk dalam *cluster* tersebut
- Mencari *centroid* terdekat dari tiap objek

Contoh Data



Gambar 8: Contoh data dalam 2D [VanderPlas, 2016]

Hasil k-Means

Gambar 9: Setelah algoritma k-Means dijalankan [VanderPlas, 2016]

Algoritma: Expectation-Maximization

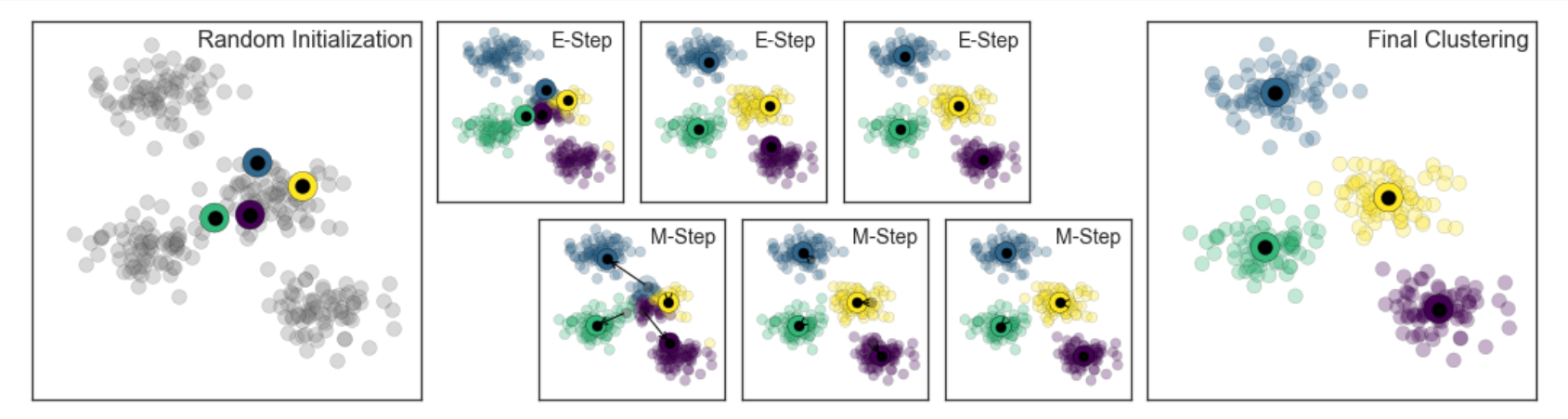
1. Inisialisasi k *centroid* secara acak
2. Ulangi hingga konvergen
   A. E-step: Masukkan tiap titik/objek ke *centroid* terdekat

$$\arg\min_j D(x_i, c_j)$$

   B. M-step: Ubah nilai *centroid* menjadi rata-rata dari tiap titik/objek

$$c_j(a) = \frac{1}{n_j} \sum_{x_i \to c_j} x_i(a), \text{for } a = 1..d$$

Visualisasi EM



Gambar 10: Konvergensi klaster tercapai hanya dalam tiga iterasi [VanderPlas, 2016]

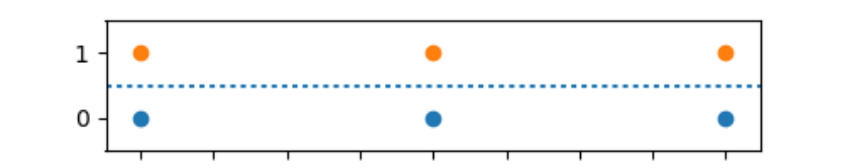
Perhatikan bahwa algoritma ini sangat bergantung pada inisialisasi *centroid*!

Properti dari k-Means

- Meminimalkan jarak agregat intra-klaster

$$V = \sum_{j} \sum_{x_i \to c_j} D(c_j, x_i)^2$$

- Konvergensi ke **minimum lokal**
- Poin yang berdekatan mungkin masuk ke klaster yang berbeda



Berapa nilai k yang optimal?

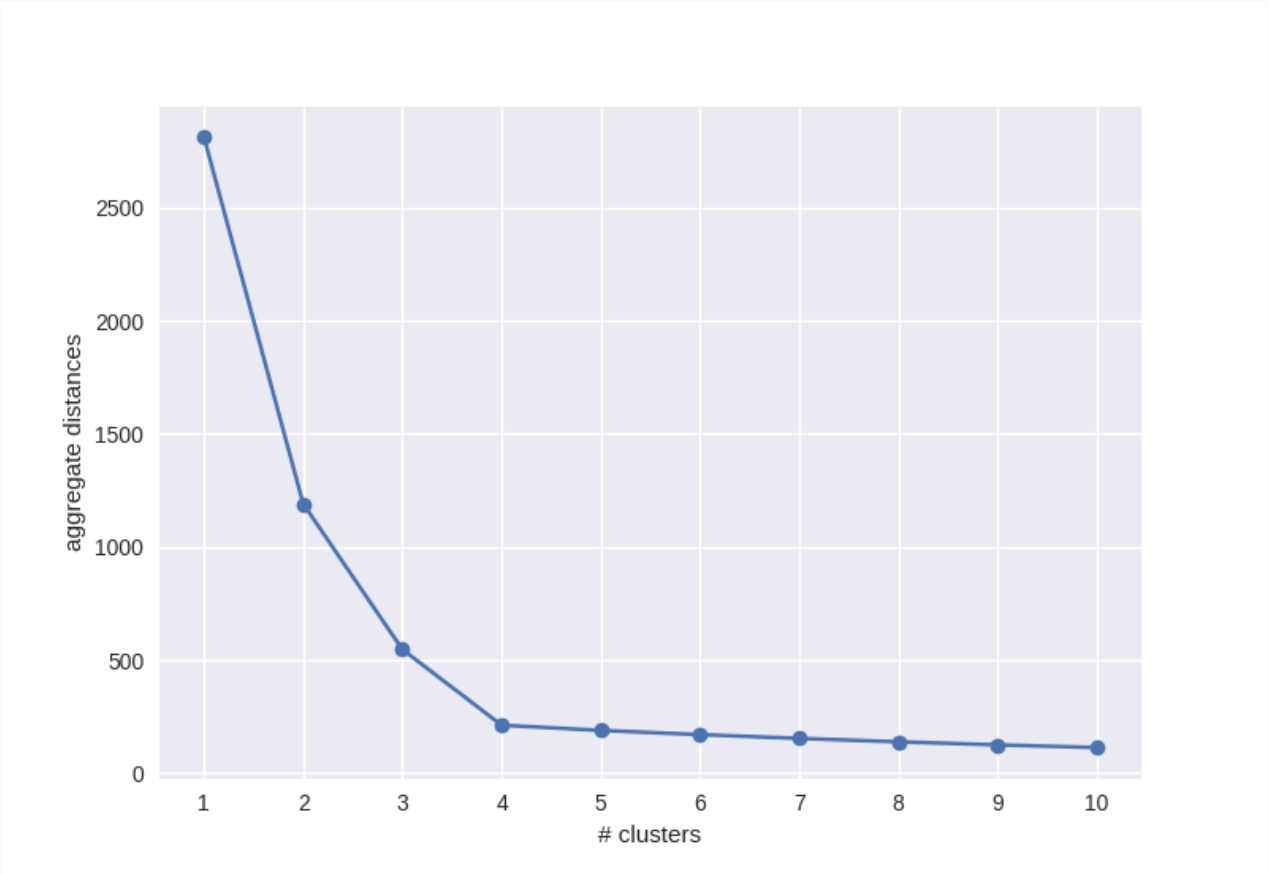
Menentukan Nilai k

- Gunakan label kelas, e.g. 10 untuk MNIST
- Gunakan V untuk menggambarkan *scree plot*

$$V = \sum_{j} \sum_{x_i \to c_j} D(c_j, x_i)^2$$

lalu gunakan *elbow method*, i.e. nilainya dapat dicari dengan menggunakan nilai optimal turunan kedua

Scree Plot



Gambar 11: Secara visual, scree plot menunjukkan nilai optimal $k = 4$

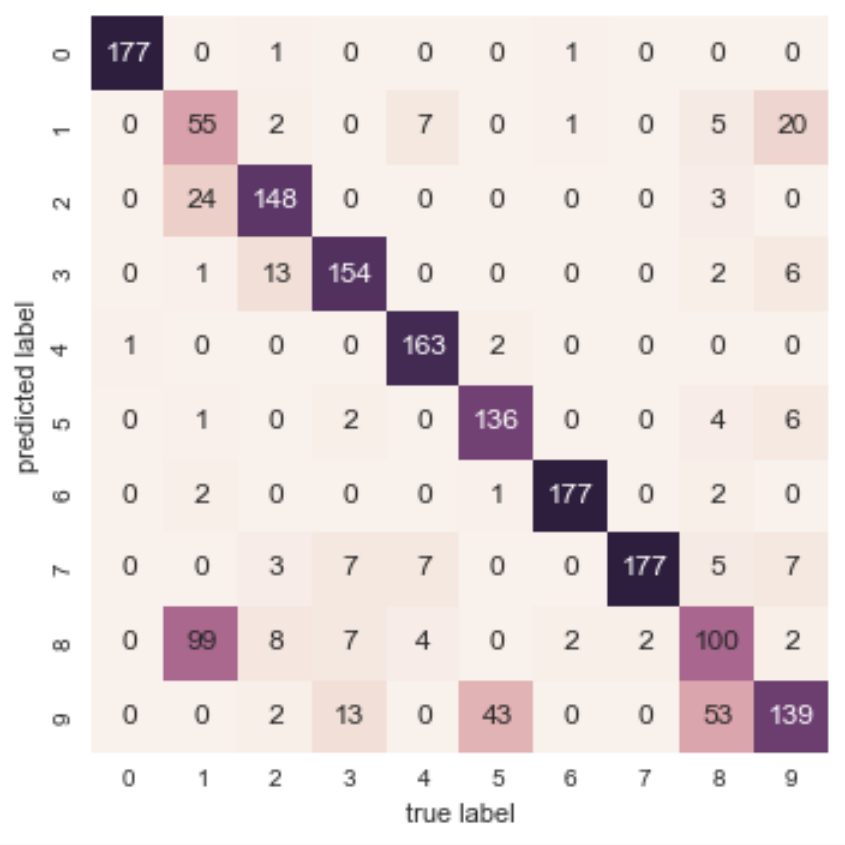
Evaluasi Klaster

- Ekstrinsik: untuk mengerjakan tugas lain
  - Representasi gambar dengan fitur berupa klaster
  - Menemukan pencilan
- Intrinsik: untuk diri sendiri
  - Memahami data – deskriptif
  - Klaster $\sim$ kelas, e.g. MNIST $\rightarrow$ 10 klaster
  - Perbandingan pasangan data dari klaster oleh manusia

Evaluasi Intrinsik: Klaster $\sim$ Kelas

- Klaster $c_1, c_2, ..., c_K$
- Kelas $R_1, R_2, ..., R_N$
- Cocokkan R_i dengan c_j, hitung akurasi atau F1
  - Bagaimana jika $N \neq K$?
  - Ada banyak cara, paling mudah dengan pendekatan *greedy*

Contoh Evaluasi Intrinsik



Gambar 12: Confusion matrix dari MNIST clustering [VanderPlas, 2016]

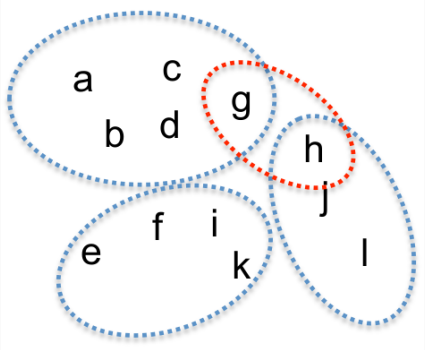
Contoh Evaluasi Intrinsik

	G1	G2	G3	G4	G5	G6
C1	1	**7**	0	1	4	0
C2	0	0	0	0	2	**7**
C3	0	0	**2**	0	0	0
C4	**3**	1	0	0	1	0

Gambar 13: Klaster karakter dalam Julius Caesar

Evaluasi Intrinsik: Perbandingan Antarpasangan

- Pasangan x_i, x_j apakah seharusnya berada dalam klaster yang sama?
- Hitung error, akurasi, F1
  - FN: pasangan x_i, x_j yang harusnya cocok, tapi berada dalam klaster yang lain (e,h)
  - FP: pasangan x_i, x_j yang harus tidak cocok, tapi berada dalam klaster yang sama (c,d)



Aplikasi Clustering

- Representasi gambar: *bag of cluster id* atau fitur lain (lihat [Coates, 2012])
- Kompresi gambar (lihat [VanderPlas, 2016])
- *Dimensionality reduction*

Salindia ini dibuat dengan
sangat dipengaruhi oleh Lavrenko (2014)

Referensi

Burton DeWilde (26 Oktober 2012)

Classification of Hand-written Digits (3)

http://bdewilde.github.io/blog/blogger/2012/10/26/classification-of-hand-written-digits-3/

Okiriza Wibisono (16 September 2015)

kNN: Perhitungan Jarak, serta Batasan dan Keunggulan

https://tentangdata.wordpress.com/2015/09/16/knn-perhitungan-jarak-serta-keunggulan-dan-batasan/

Referensi

Jake VanderPlas (2016)

In Depth: k-Means Clustering

`http://nbviewer.jupyter.org/github/jakevdp/PythonDataScienceHandbook/blob/master/notebooks/05.11-K-Means.ipynb`

Adam Coates & Andrew Y. Ng (2012)

Learning feature representations with k-means.

Neural networks: Tricks of the trade (pp. 561-580). Springer Berlin Heidelberg.

Terima kasih