k-Nearest Neighbours & k-Means Clustering

Ali Akbar Septiandri

August 9, 2017

Universitas Al Azhar Indonesia

Table of contents

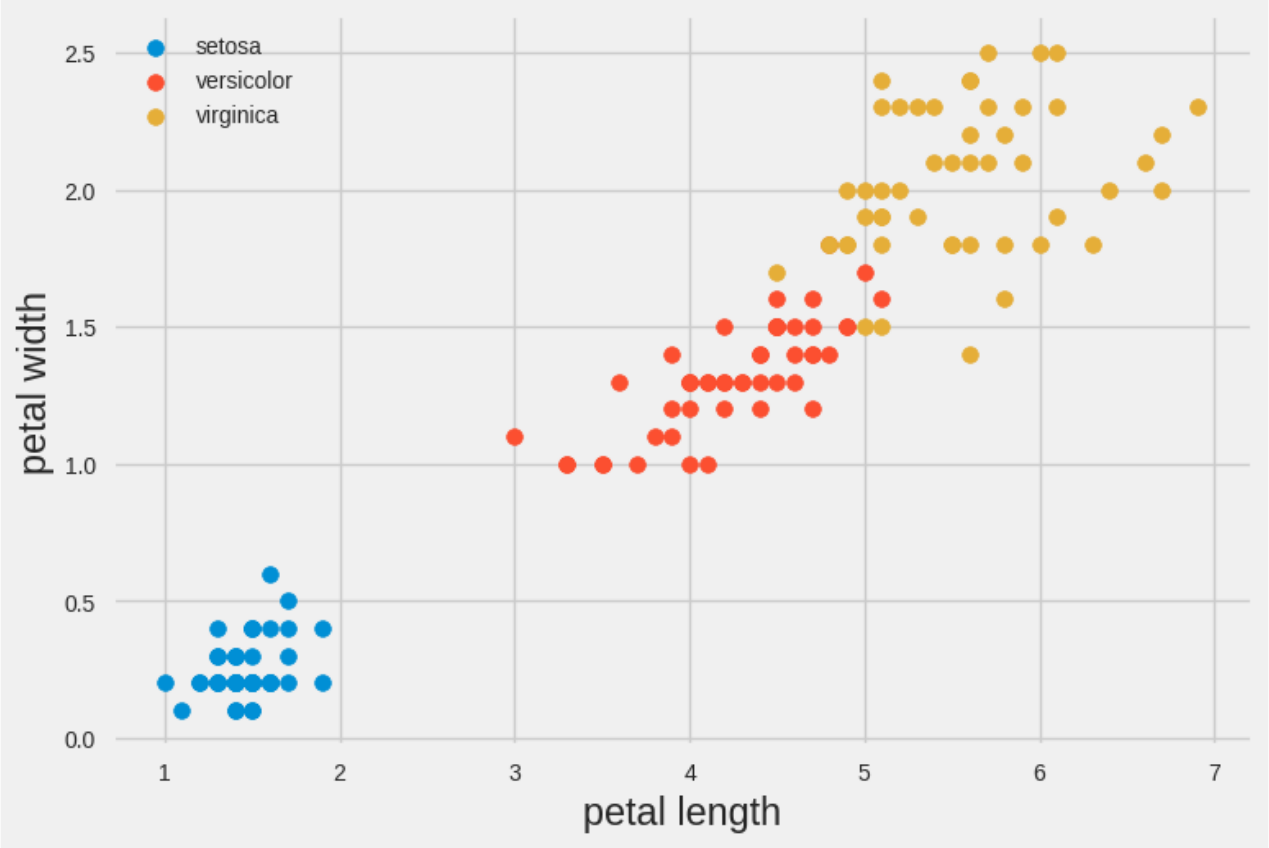
k-Nearest Neighbours

Deskripsi Dataset

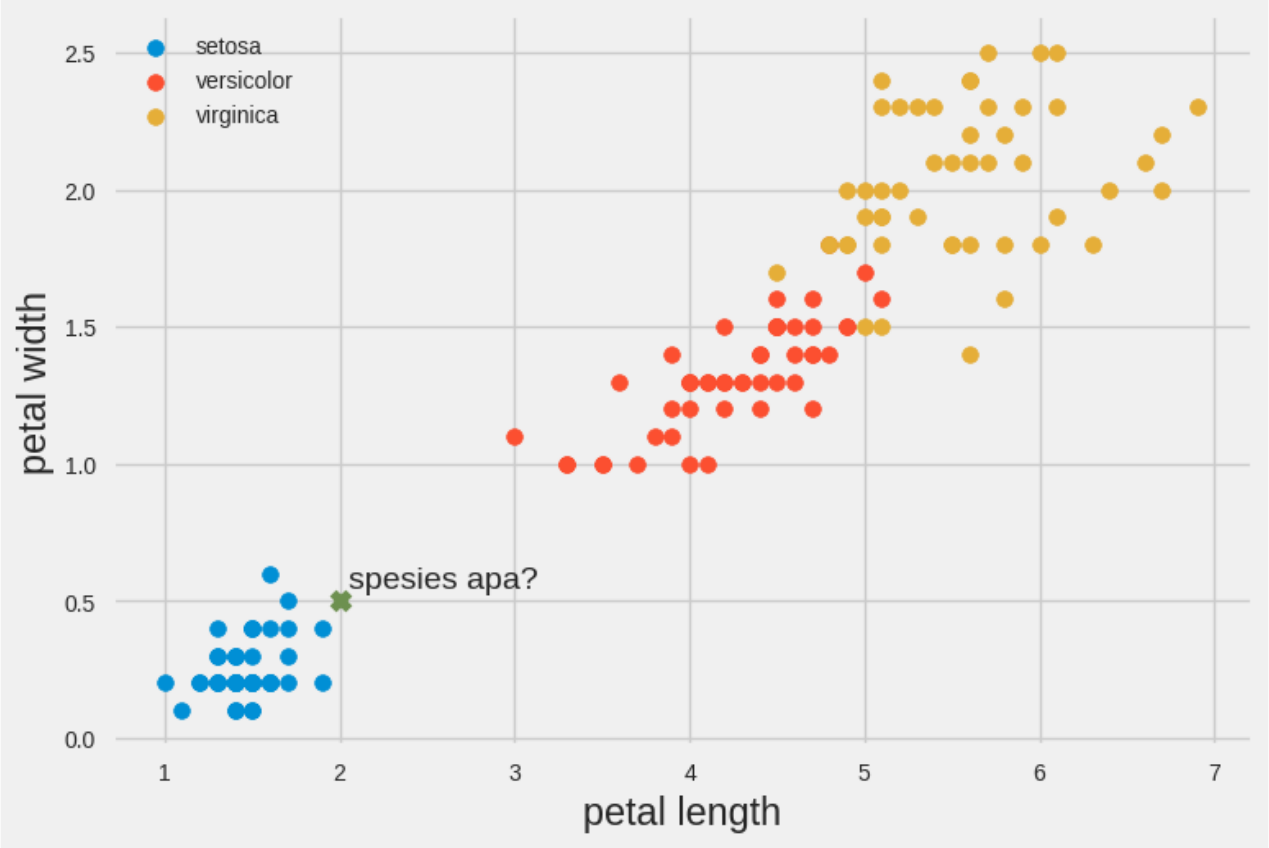
- Iris dataset
- Pembuat: R.A. Fisher (1936)
- `http://archive.ics.uci.edu/ml/`
- 4 atribut: sepal length, sepal width, petal length, petal width
- 3 label: Iris Setosa, Iris Versicolour, Iris Virginica

Figure 1: Tanaman Iris

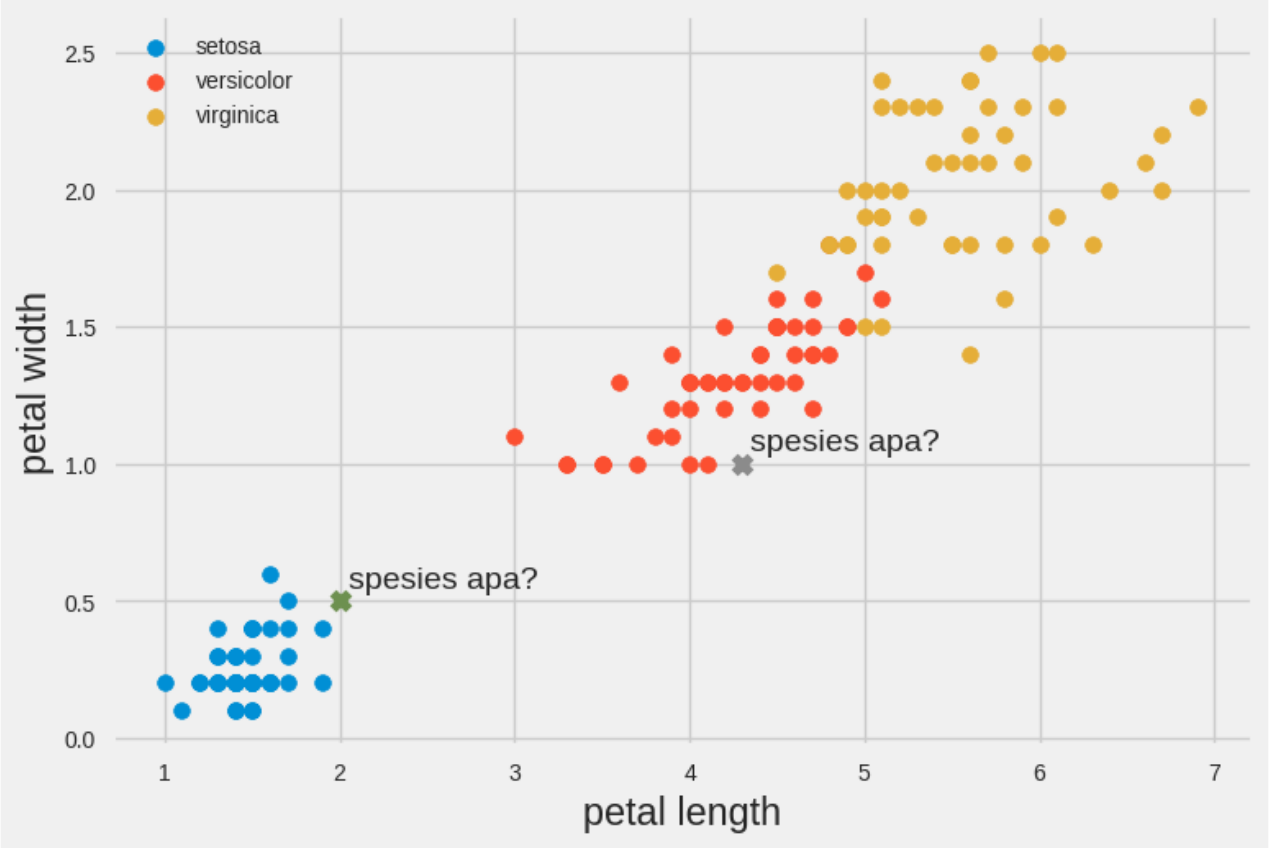
Iris Dataset



Data Baru


setosa
versicolor
virginica
spesies apa?
petal width
petal length
0.0
0.5
1.0
1.5
2.0
2.5
1
2
3
4
5
6
7

Data Baru


setosa
versicolor
virginica
spesies apa?
spesies apa?
petal width
petal length
0.0
0.5
1.0
1.5
2.0
2.5
1
2
3
4
5
6
7

Nearest Neighbour

- Mencari referensi dari tetangga terdekat

Nearest Neighbour

- Mencari referensi dari tetangga terdekat
- Apa definisi “terdekat”?

Nearest Neighbour

- Mencari referensi dari tetangga terdekat
- Apa definisi “terdekat”?
- Metode umum: **Euclidean distance**

Euclidean Distance

$$d([x_1, x_2, ..., x_d], [y_1, y_2, ..., y_d]) = \sqrt{\sum_{i=1}^{d} (x_i - y_i)^2}$$

Masalah

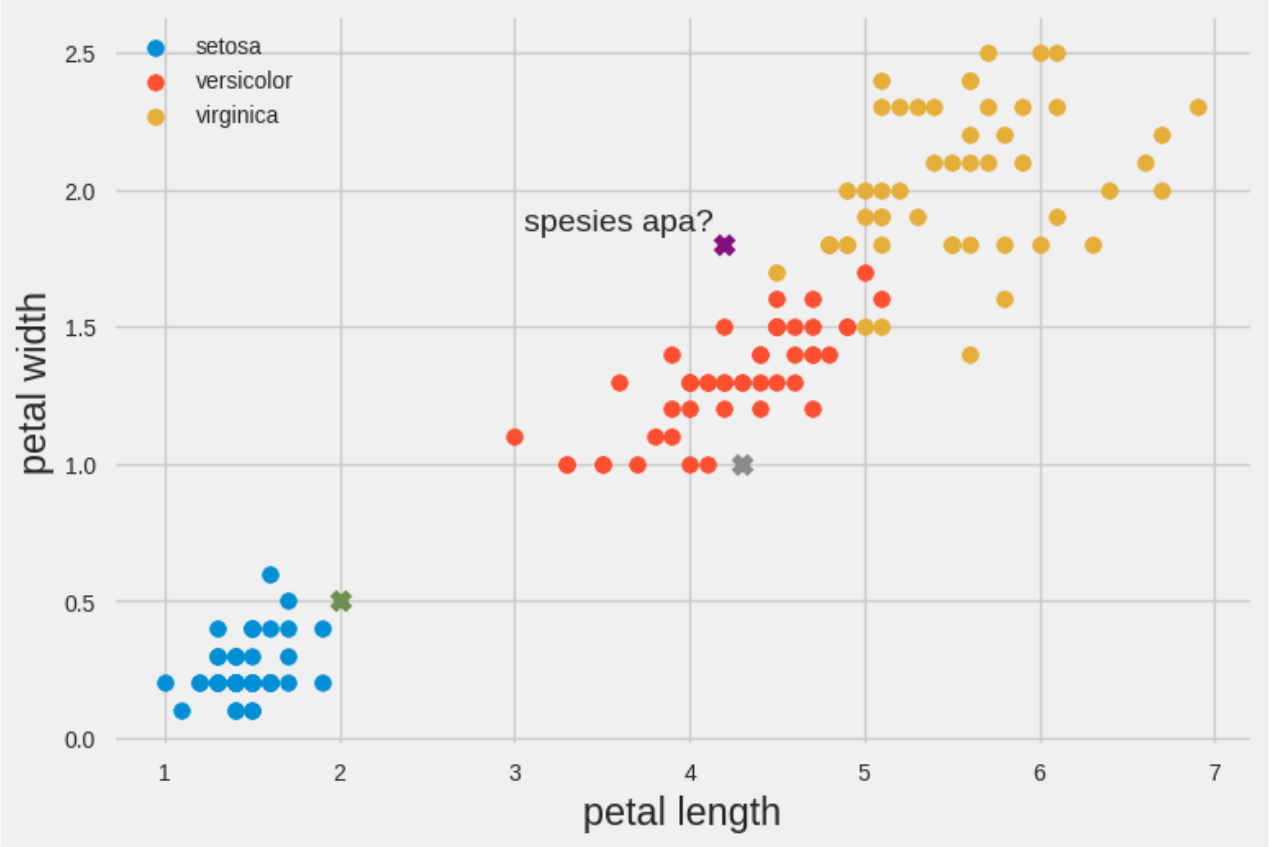


Figure 2: Seberapa yakin kita dengan referensi terdekat?

k-Nearest Neighbours

- Mencari referensi dari beberapa (k) tetangga terdekat

k-Nearest Neighbours

- Mencari referensi dari beberapa (k) tetangga terdekat
- Melihat label mayoritas dari tetangga terdekat

k-Nearest Neighbours

- Mencari referensi dari beberapa (k) tetangga terdekat
- Melihat label mayoritas dari tetangga terdekat
- Perhatikan bahwa harus dihitung jaraknya dengan semua data yang ada

k-Nearest Neighbours

- Mencari referensi dari beberapa (k) tetangga terdekat
- Melihat label mayoritas dari tetangga terdekat
- Perhatikan bahwa harus dihitung jaraknya dengan semua data yang ada
- Kompleksitas: $O(nd)$

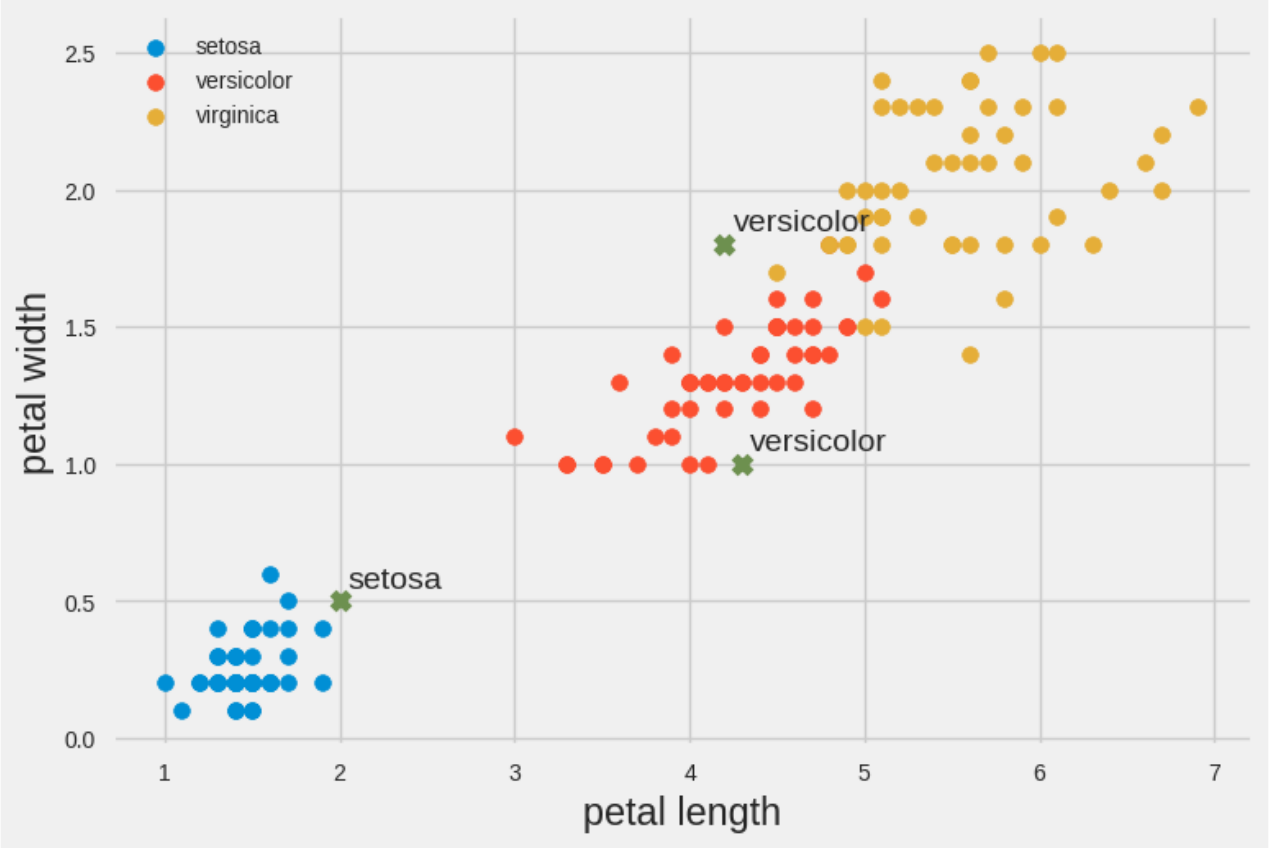
k-Nearest Neighbours

- Mencari referensi dari beberapa (k) tetangga terdekat
- Melihat label mayoritas dari tetangga terdekat
- Perhatikan bahwa harus dihitung jaraknya dengan semua data yang ada
- Kompleksitas: $O(nd)$
- *Tidak mungkin kita hitung sendiri!*

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

Prediksi


setosa
versicolor
virginica
versicolor
versicolor
setosa
petal width
petal length
0.0
0.5
1.0
1.5
2.0
2.5
1
2
3
4
5
6
7

Klasifikasi k-NN

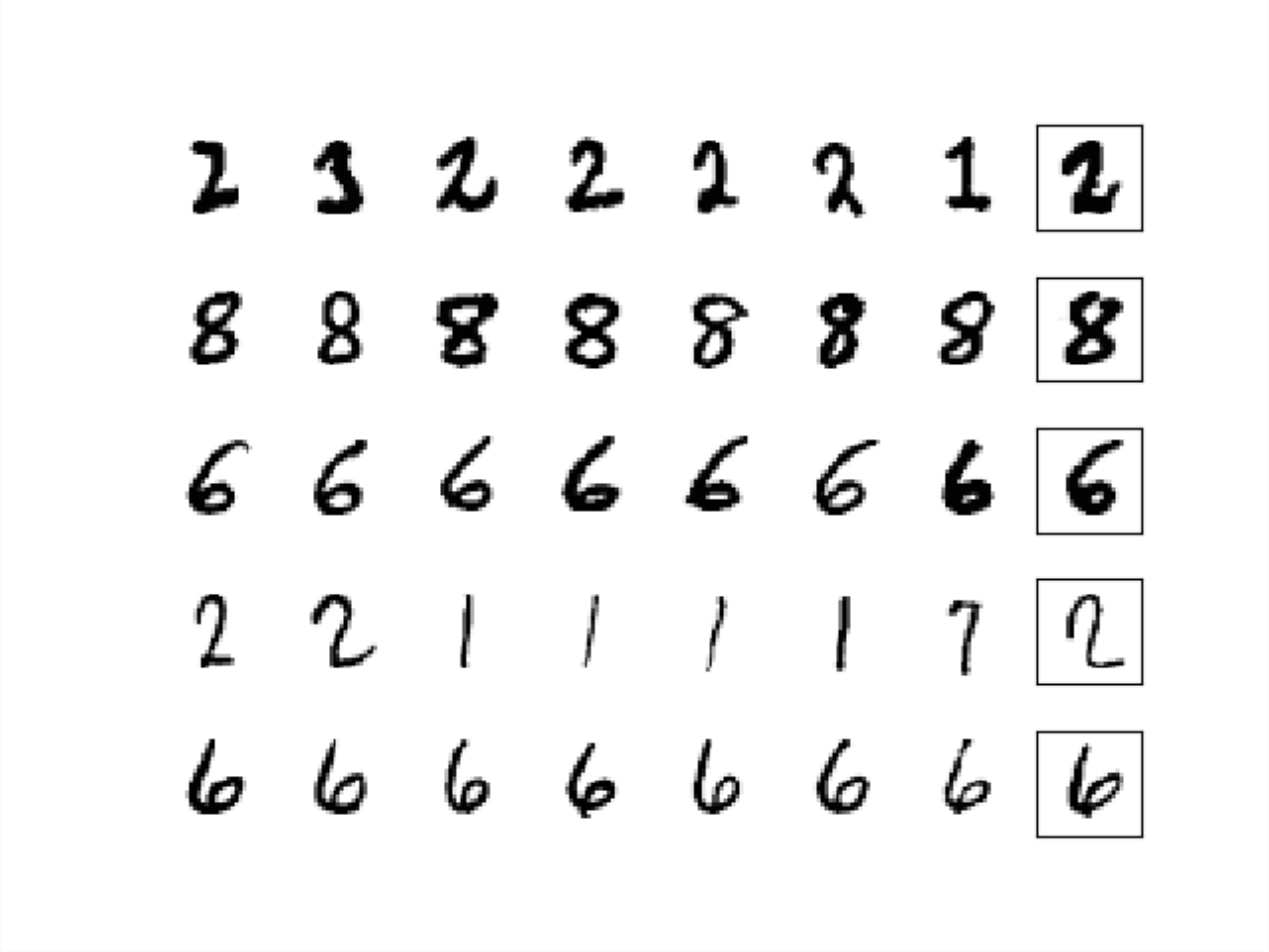


Figure 3: 7-NN pada data MNIST dengan data uji di paling kanan

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

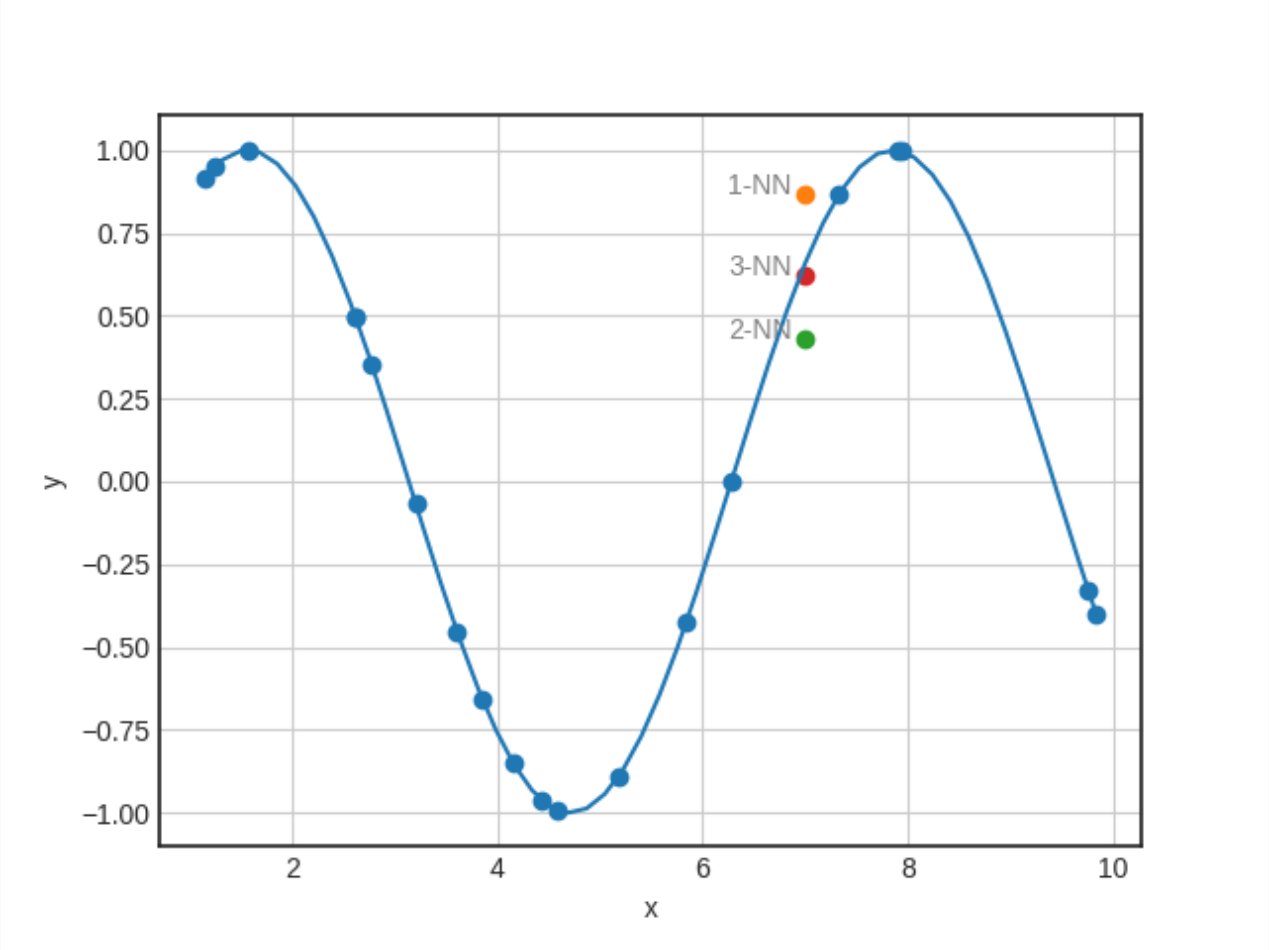


Figure 4: Interpolasi dengan $\{1,2,3\}$-NN

Regresi k-NN

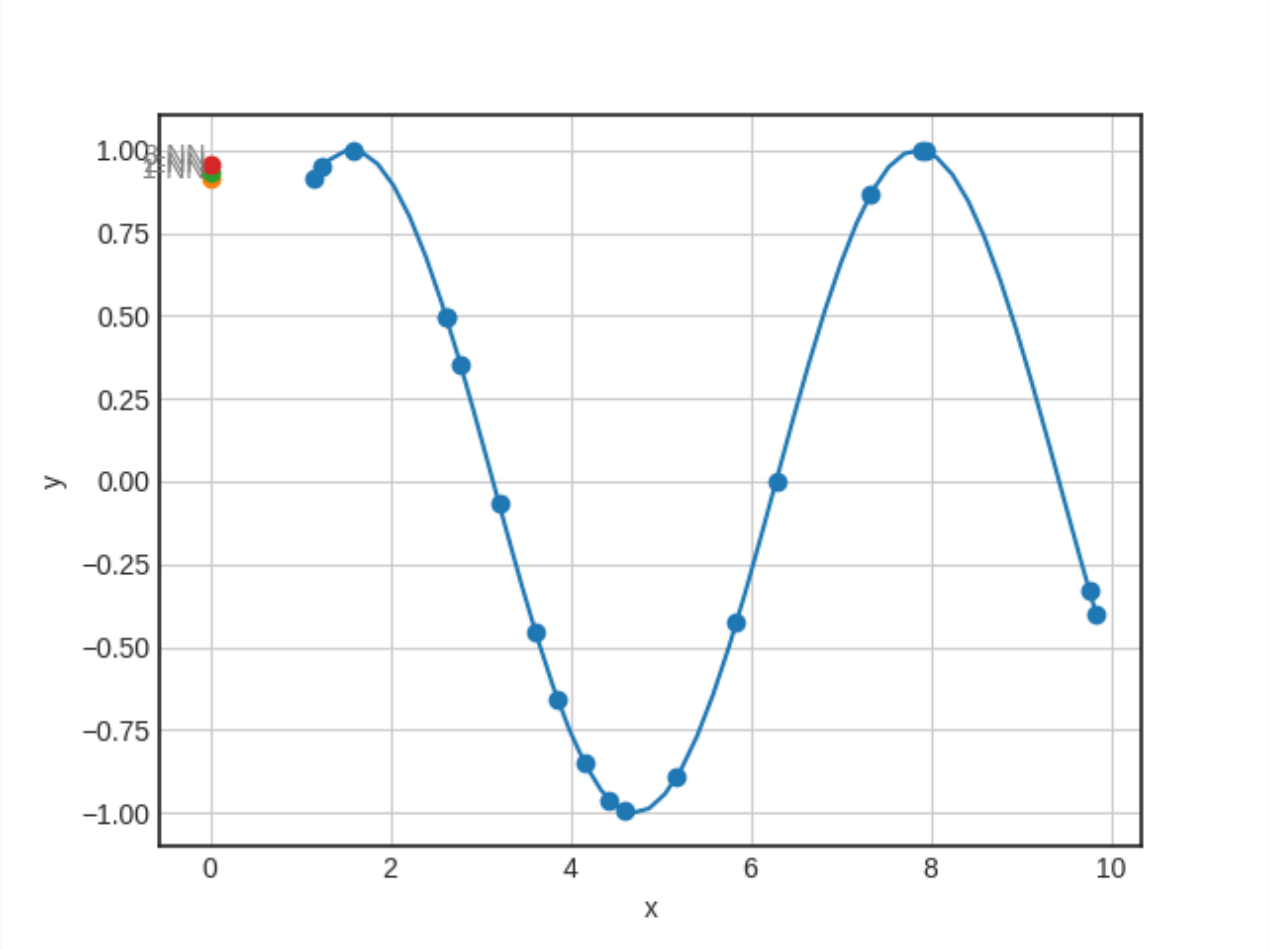


Figure 5: Ekstrapolasi dengan {1,2,3}-NN

Bagaimana cara memilih nilai k?

Memilih Nilai k

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

Memilih Nilai k

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

Batas Keputusan

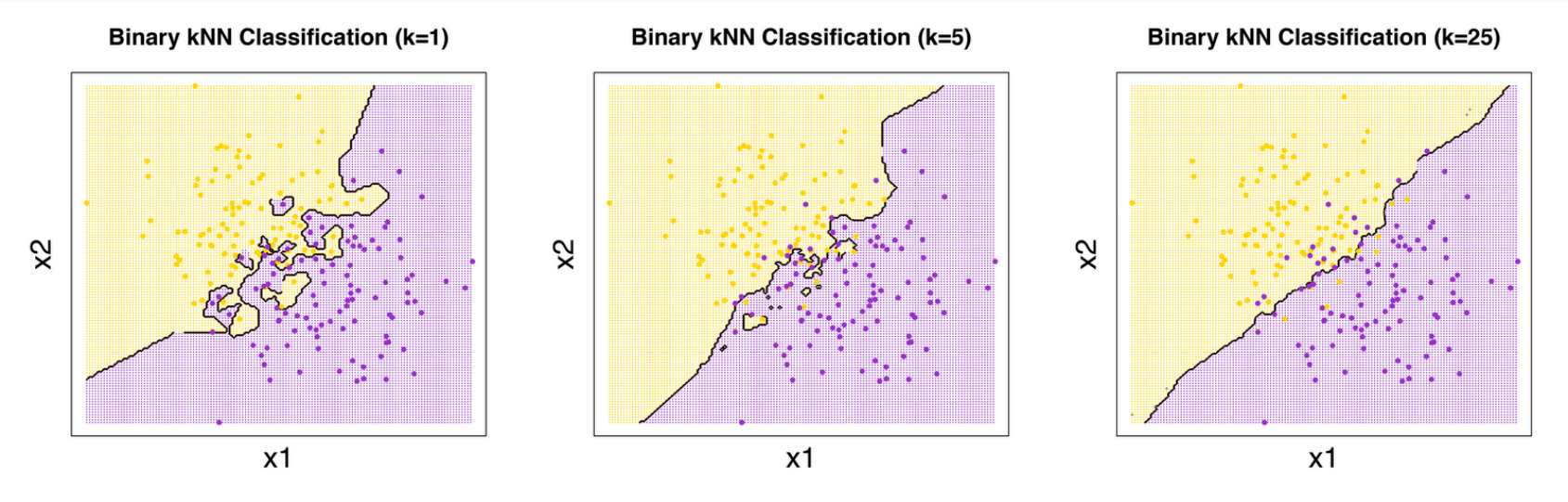


Figure 6: Pengaruh nilai k pada batas keputusan [DeWilde, 2012]

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

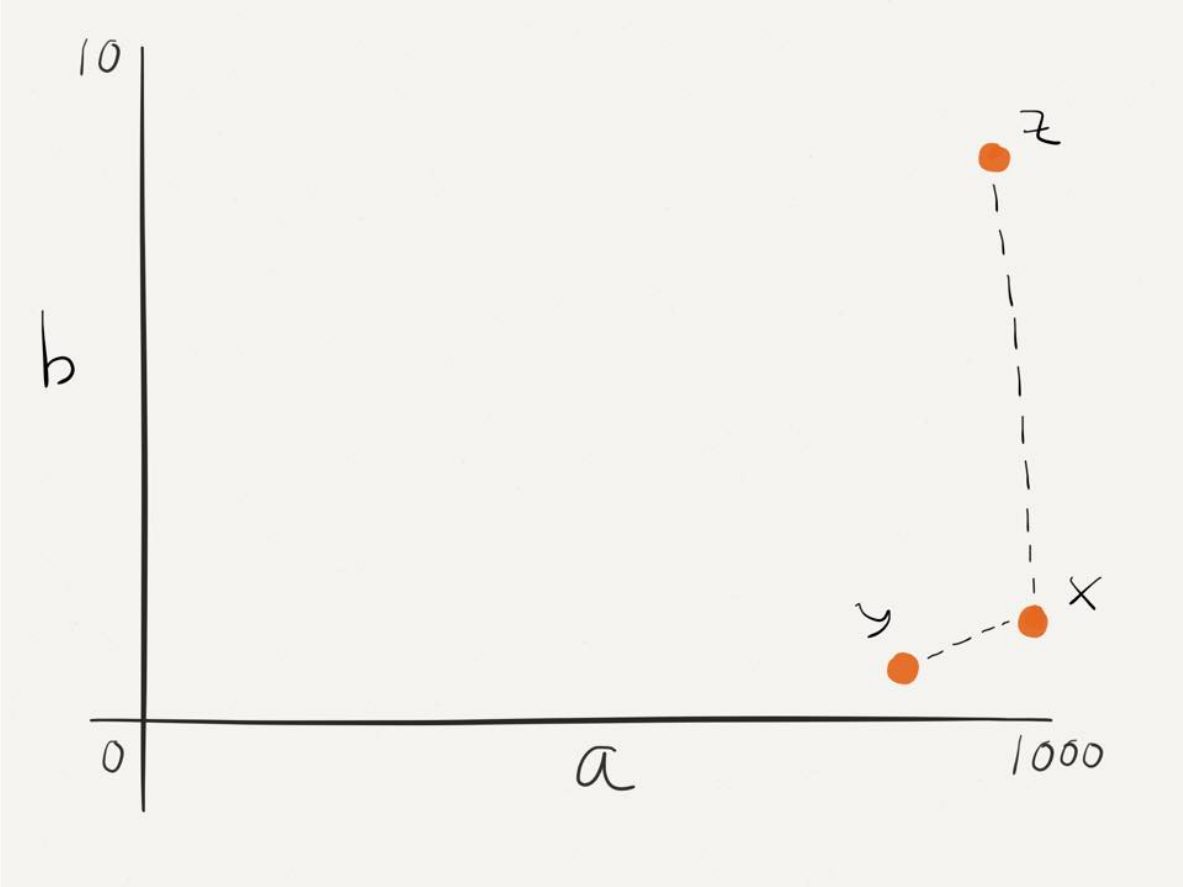


Figure 7: Perbedaan rentang variabel bisa mengacaukan klasifikasi k-NN [Wibisono, 2015]

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** $O(nd)$

k-Means Clustering

Clustering

- *Unsupervised learning*

Clustering

- *Unsupervised learning*
- Subpopulasi apa yang ada dalam data?

Clustering

- *Unsupervised learning*
- Subpopulasi apa yang ada dalam data?
- Apa kesamaan dari elemen di tiap subpopulasi?

Clustering

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

Contoh Data

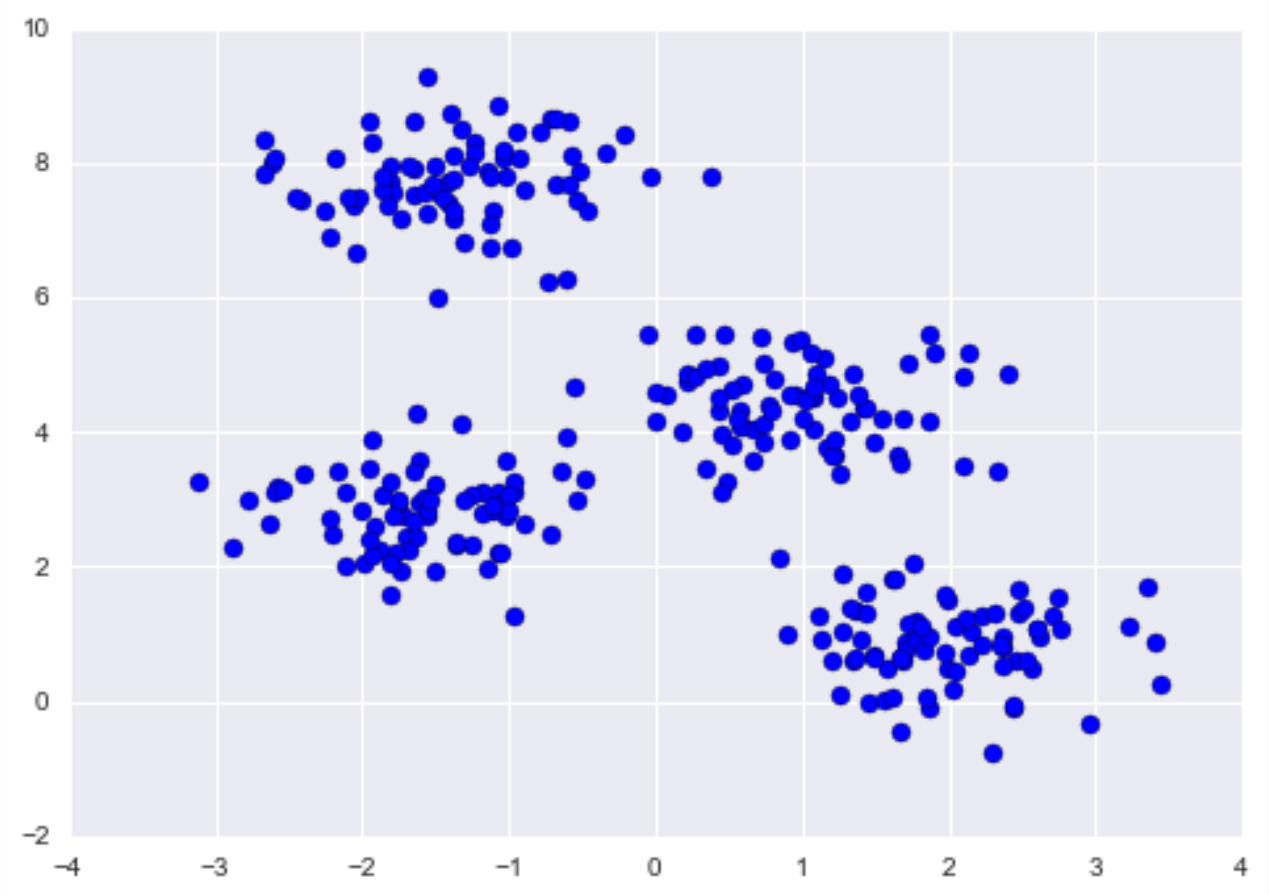


Figure 8: Contoh data dalam 2D [VanderPlas, 2016]

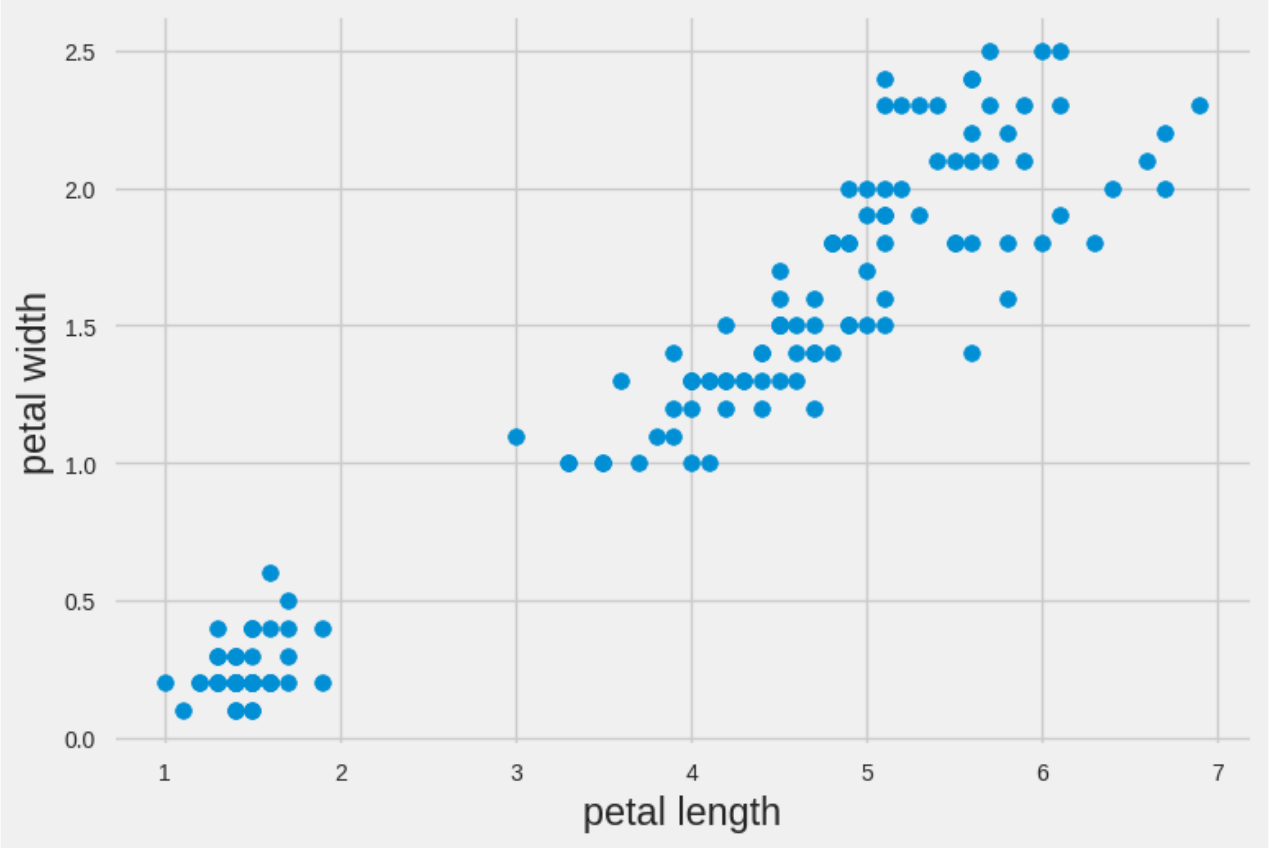
Subpopulasi

Figure 9: Subpopulasi dari algoritma k-Means [VanderPlas, 2016]

Tetangga dalam satu kompleks,
tanpa memedulikan kelasnya

Berapa jumlah subpopulasi (klaster)
yang ingin kita cari?

Data Iris



Klaster

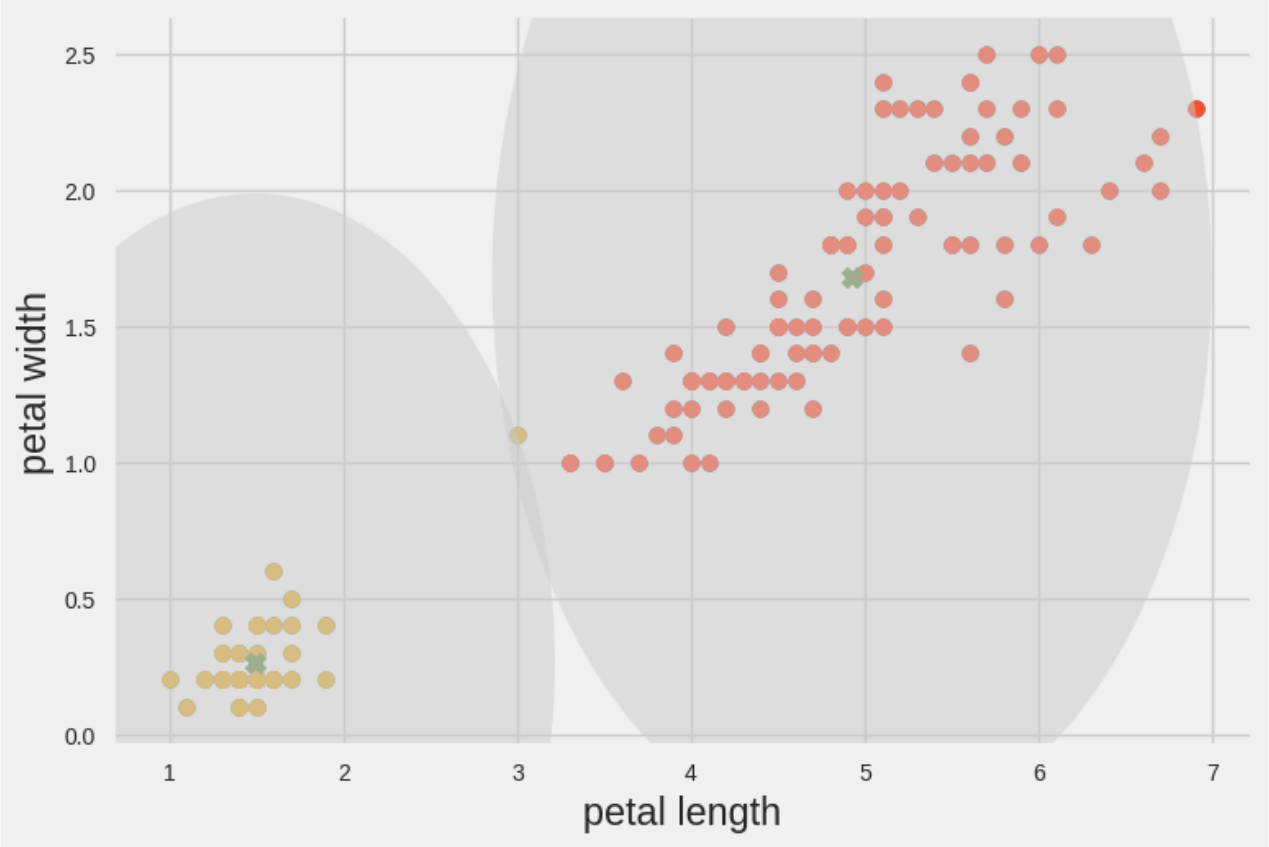


Figure 10: k-Means dengan $k = 2$

Klaster

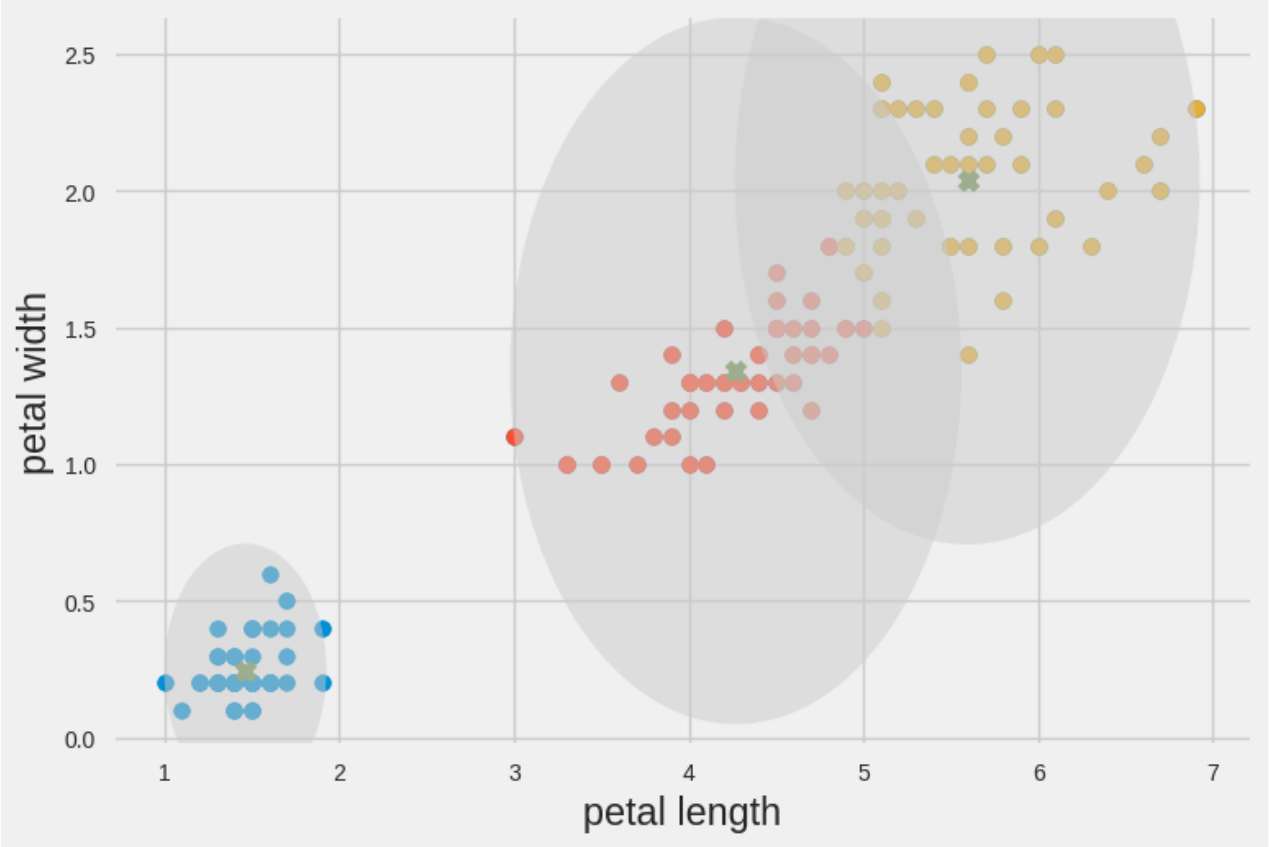


Figure 11: k-Means dengan $k = 3$

Klaster

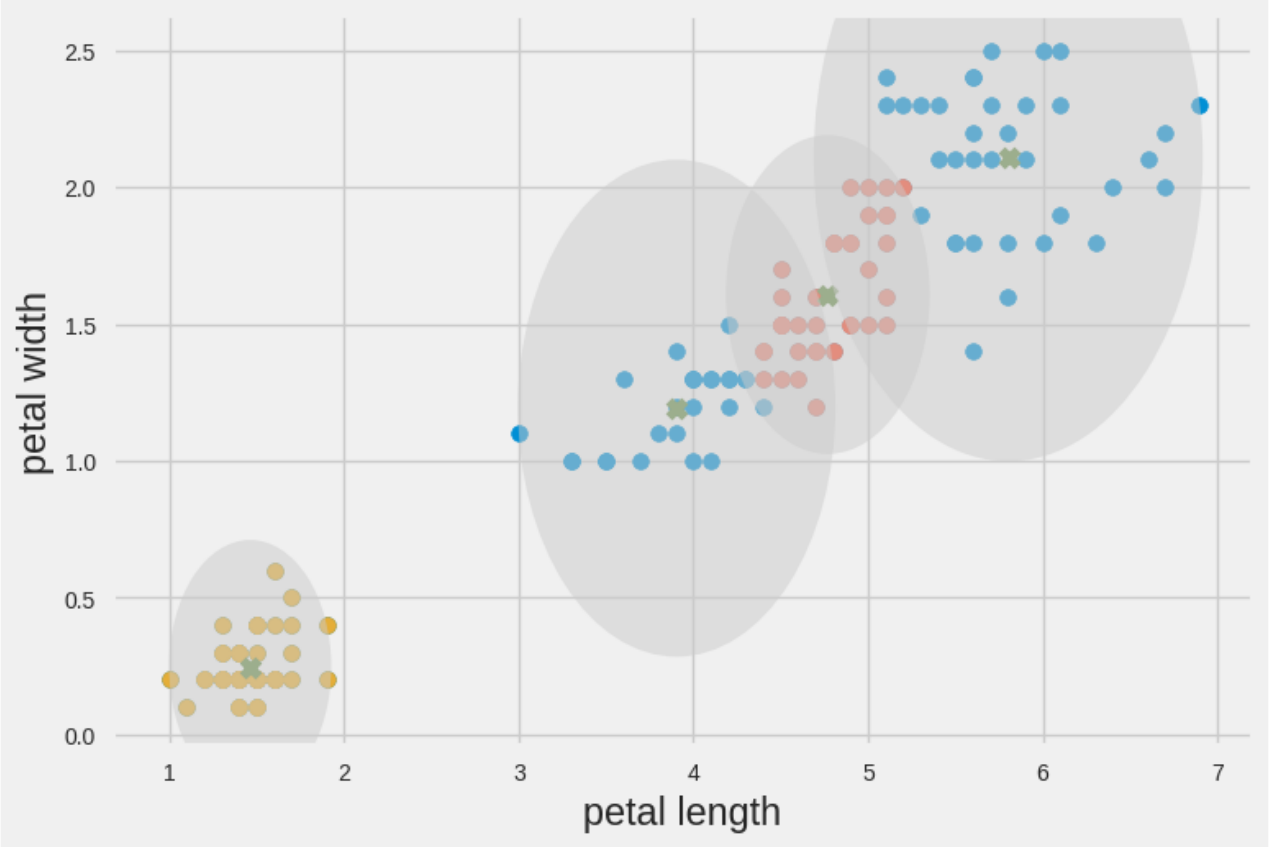


Figure 12: k-Means dengan $k = 4$

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

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

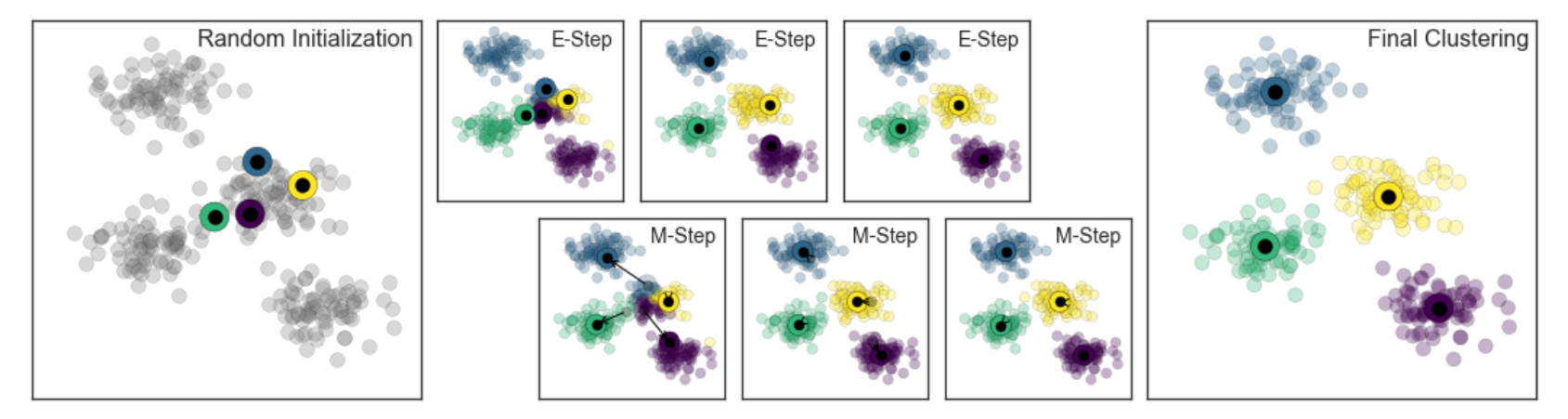


Figure 13: Konvergensi klaster tercapai hanya dalam tiga iterasi [VanderPlas, 2016]

Algoritma ini sangat bergantung pada inisialisasi *centroid*!

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

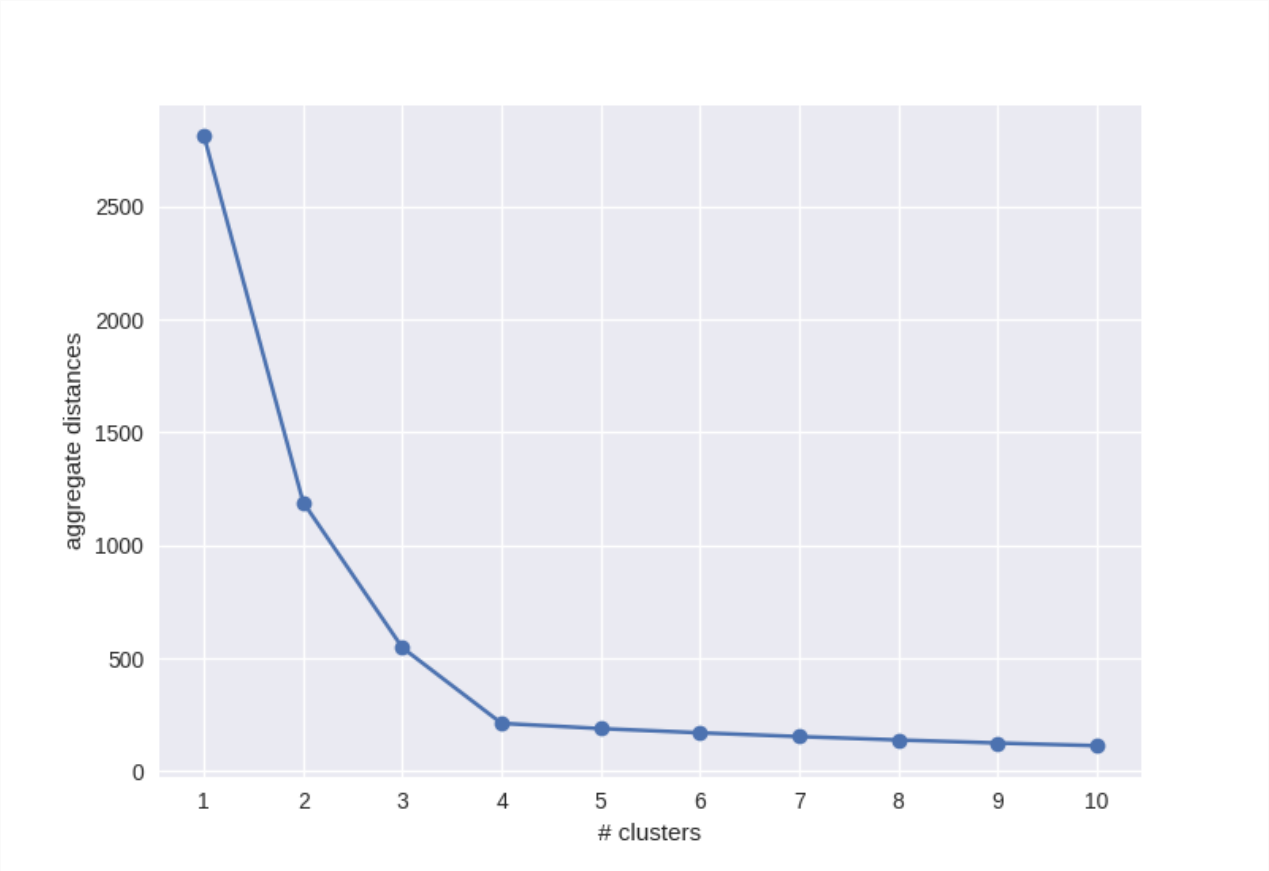


Figure 14: Secara visual, scree plot menunjukkan nilai optimal $k = 4$

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 akurasinya

Contoh Evaluasi Intrinsik

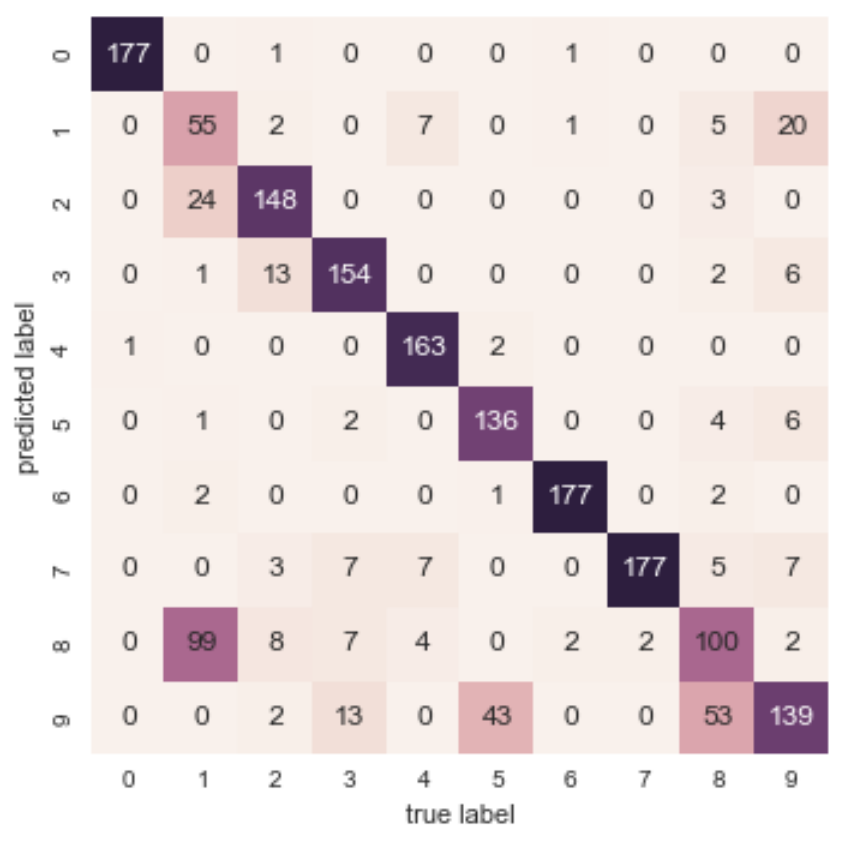


Figure 15: Confusion matrix dari MNIST clustering [VanderPlas, 2016]

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

Figure 16: Klaster karakter dalam Julius Caesar

Aplikasi Clustering

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

Summary

- k-Nearest Neighbours merupakan algoritma yang dapat dipakai untuk klasifikasi dan dan regresi
- Nilai k dalam algoritma k-NN perlu divalidasi
- k-NN bersifat non-parametrik
- *Clustering* merupakan salah satu tugas *unsupervised learning*, i.e. tidak memerlukan label
- Nilai k merupakan jumlah klaster dalam algoritma k-Means
- k-Means sangat bergantung pada inisialisasi centroid

Pertemuan berikutnya

- Metode carian
- Dynamic programming
- Model + states

References

- 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/
- Jake VanderPlas (2016)
  In Depth: k-Means Clustering
  http://nbviewer.jupyter.org/github/jakevdp/PythonDataScienceHandbook/blob/master/notebooks/05.11-K-Means.ipynb

References

Adam Coates & Andrew Y. Ng (2012)

Learning feature representations with k-means.

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

Thank you