#### K-MEANS CLUSTERING

#### Ali Akbar Septiandri

Universitas Al-Azhar Indonesia aliakbars@live.com

May 19, 2020

#### SELAYANG PANDANG

1 Clustering

2 Algoritma

3 EVALUASI

#### Bahan Bacaan

- 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
- "Clustering dengan k-Means." Cerita Tentang Data. 14 November 2017. https://tentangdata.wordpress.com/ 2017/11/14/clustering-dengan-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

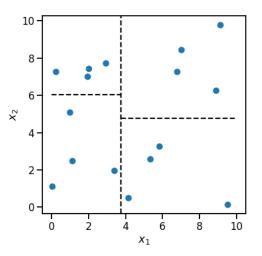
- Tujuan:
  - Monothetic: common property
  - Polythetic: kemiripan data dengan pengukuran jarak
- Irisan:
  - Hard clustering
  - Soft clustering
- Flat vs hierarchical

#### METODE CLUSTERING

#### Metode *clustering* yang akan dibahas dalam kuliah 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

#### CLUSTERING DENGAN K-D TREES

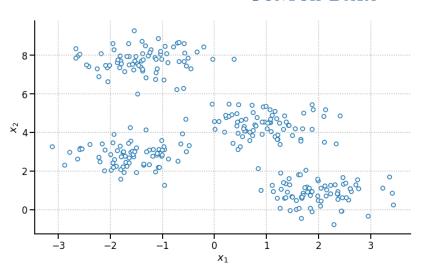


GAMBAR: Monothetic, hard boundaries, hierarchical

#### K-MEANS

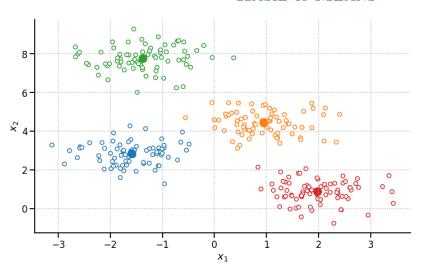
- Jumlah k ditentukan dari awal
- Tidak memerlukan label.
- Menggunakan *centroid*, i.e. rata-rata nilai dari objek yang masuk dalam *cluster* tersebut
- Mencari centroid terdekat dari tiap objek

#### CONTOH DATA



GAMBAR: Contoh data dalam 2D

#### HASIL K-MEANS

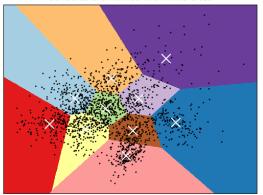


GAMBAR: Setelah algoritma k-Means dijalankan



### Hasil PCA + K-MEANS

K-means clustering on the digits dataset (PCA-reduced data) Centroids are marked with white cross



Gambar: PCA + k-Means pada MNIST (Pedregosa et al., 2011)

# Algoritma

# ALGORITMA: EXPECTATION-MAXIMIZATION

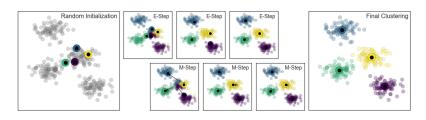
- 1 Inisialisasi k centroid secara acak
- 2 Ulangi hingga konvergen
  - A. E-step: Masukkan tiap titik/objek ke centroid terdekat

$$\arg\min_{j} D(x_i, c_j)$$

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

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

#### Visualisasi EM



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

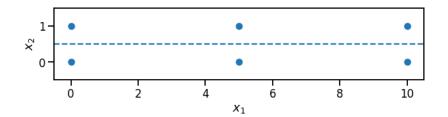
Perhatikan bahwa algoritma ini sangat bergantung pada inisialisasi centroid!

#### 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?

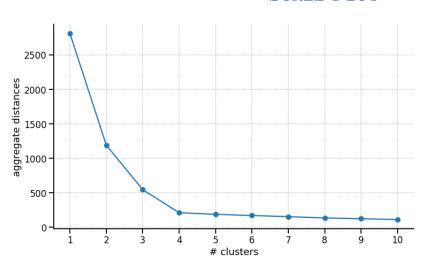
#### Menentukan Nilai k

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

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

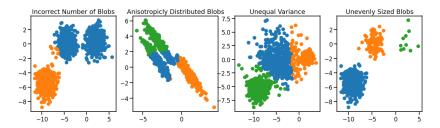
lalu gunakan *elbow method*, i.e. nilainya dapat dicari dengan menggunakan nilai optimal turunan kedua

#### Scree Plot



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

#### ASUMSI K-MEANS



GAMBAR: Tiga gambar pertama menunjukkan klaster yang tidak intuitif karena asumsi implisit k-Means (Roth, 2017)

# EVALUASI

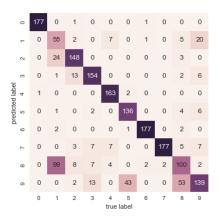
#### EVALUASI KLASTER

- 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  $N \neq K$ ?
  - $\bullet\,$ Ada banyak cara, paling mudah dengan pendekatan greedy

#### CONTOH EVALUASI INTRINSIK



GAMBAR: Confusion matrix dari MNIST clustering [VanderPlas, 2016]

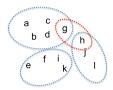
#### CONTOH EVALUASI INTRINSIK

	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: Klaster karakter dalam Julius Caesar

# EVALUASI INTRINSIK: PERBANDINGAN ANTARPASANGAN

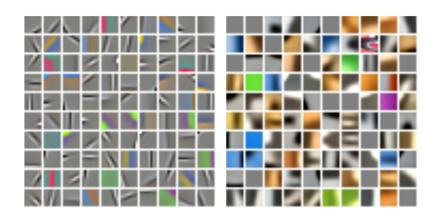
- Pasangan  $x_i, x_j$  apakah seharusnya berada dalam klaster yang sama?
- Hitung error, akurasi, F1
  - FN: pasangan  $x_i, x_j$  yang harusnya cocok, tapi berada dalam klaster yang lain (e,h)
  - FP: pasangan  $x_i, x_j$  yang harus tidak cocok, tapi berada dalam klaster yang sama (c,d)



#### Aplikasi Clustering

- Pemelajaran fitur [Coates, 2012]
- Kompresi gambar [VanderPlas, 2016]
- Sistem rekomendasi

#### APLIKASI: PEMELAJARAN FITUR



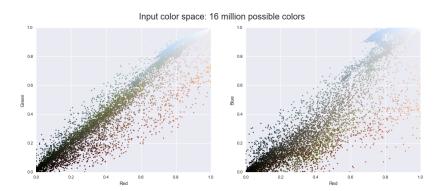
GAMBAR: Centroids dari CIFAR-10 dengan dan tanpa pemutihan [Coates, 2012]

#### APLIKASI: KOMPRESI GAMBAR



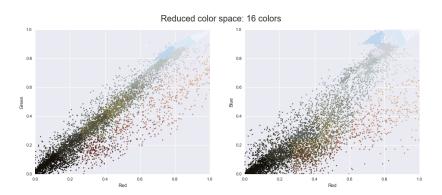
GAMBAR: Gambar yang akan dikompresi dengan *clustering* [VanderPlas, 2016]

#### KLASTER WARNA



Gambar: Clustering warna dengan kompresi [VanderPlas, 2016]

#### Klaster Warna



GAMBAR: Clustering warna dengan kompresi [VanderPlas, 2016]

#### HASIL KOMPRESI GAMBAR





GAMBAR: Kompresi dengan faktor hingga 1 juta dengan *clustering* [VanderPlas, 2016]

#### **IKHTISAR**

- Jenis metode clustering dibagi berdasarkan tiga atribut: tujuan, irisan, dan struktur
- 2 k-Means bekerja dengan algoritma EM untuk menghasilkan klaster yang diwakili oleh *centroid*
- 3 k-Means sangat tergantung dengan inisialisasi centroid
- 4 Ada asumsi implisit yang dibuat oleh k-Means
- **6** Klaster yang dibentuk dapat dievaluasi secara ekstrinsik dan intrinsik

Salindia ini dibuat dengan sangat dipengaruhi oleh Lavrenko (2014)

#### 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