10

Clustering

> "Most of us cluster somewhere in the middle of most statistical distributions. But there are lots of bell curves, and pretty much everyone is on a tail of at least one of them. We may collect strange memorabillia or read esoteric books, hold unsual religious beliefs or wear odd-sized shoes, suffer rare diseases or enjoy obscure moveis."
>
> Virginia Postrel

Pada bab 4, kamu sudah mempelajari salah satu teknik *clustering* yang cukup umum yaitu K-means. Bab ini akan mengupas *clustering* secara lebih dalam. Kami sarankan kamu untuk membaca paper [36], walaupun relatif lama, tetapi paper tersebut memberikan penjelasan yang mudah dimengerti tentang *clustering*. Selain itu, kamu juga dapat membaca *paper* oleh Saad et al. [37].

Clustering adalah pengelompokkan data dengan sifat yang mirip. Data untuk *clustering* tidak memiliki label (kelas). Secara umum, algoritma *clustering* dapat dikategorikan menjadi dua macam berdasarkan hasil yang dinginkan [38]: (1) *partitional*, yaitu menentukan partisi sejumlah K dan (2) *hierarchical*, yaitu mengelompokan data berdasarkan struktur taksonomi. Contoh algoritma *partitional* adalah **K-means** pada subbab 10.1, sementara contoh algoritma *hierarchical* adalah **agglomerative clustering** pada subbab 10.2.

10.1 K-means, Pemilihan Centroid, Kemiripan Data

Algoritma K-means mengelompokkan data menjadi sejumlah K kelompok sesuai yang kita definisikan. Algoritma ini disebut juga sebagai *flat clustering*, artinya kelompok satu memiliki kedudukan sejajar dengan kelompok lainnya. Kita tinjau kembali tahapan-tahapan algoritma K-means sebagai berikut:

1. Tentukan sejumlah K kelompok yang kita inginkan.
2. Inisiasi **centroid** untuk setiap kelompok. Centroid ibarat seperti "ketua kelompok", yang merepresentasikan kelompok.
3. Hitung kedekatan suatu data terhadap *centroid*, kemudian masukkan data tersebut ke kelompok yang **centroid**-nya memiliki sifat terdekat dengan dirinya.
4. Pilih kembali centroid untuk masing-masing kelompok, yaitu dari anggota kelompok tersebut.
5. Ulangi langkah-langkah sebelumnya sampai tidak ada perubahan anggota untuk semua kelompok.

Perhatikan, ada dua hal penting pada algoritma K-means yaitu: (1) memilih centroid dan (2) Perhitungan kemiripan data. Pada bab 4, dijelaskan salah satu metode pemilihan centroid paling sederhana yaitu secara acak. Pada kenyataannya, inisiasi centroid untuk setiap kelompok/*cluster* dapat dilakukan secara acak; tetapi pada tahap berikutnya, secara umum centroid dipilih menggunakan nilai rata-rata/*mean*. Dengan demikian, centroid bisa saja merupakan suatu vektor yang tidak ada *entry*-nya di dataset.

Diberikan sekumpulan data $\mathbf{D} = \{\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \cdots, \mathbf{d}_N\}$; maka centroid c untuk *cluster* itu dihitung dengan persamaan 10.1,

$$\mathbf{c} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \sum_{e=1}^{F} \mathbf{d}_i[e] \tag{10.1}$$

yaitu nilai rata-rata setiap elemen *feature vector* untuk seluruh anggota *cluster* tersebut, dimana N adalah banyaknya anggota *cluster*, F adalah dimensi vektor, $\mathbf{d}_i$ adalah anggota ke-i dalam representasi *feature vector* dan $\mathbf{d}_{i[e]}$ melambangkan elemen ke-e pada vektor $\mathbf{d}_i$. Dengan ini, centroid secara umum bisa jadi tidak merupakan elemen anggota *cluster* (centroid bukan sebuah instans data).

Pada bab 4 dijelaskan salah satu metode perhitungan kemiripan data sederhana yaitu dengan menghitung banyaknya nilai atribut yang sama diantara dua *feature vector*. Selain metode tersebut, terdapat banyak perhitungan kemiripan data lainnya tergantung pada tipe, contohnya:

1. **Numerik**. Euclidean Distance, Manhattan Distance, Cosine Distance, dsb.
2. **Boolean**. Jaccard Dissimilarity, Rogers Tanimoto Dissimilarity, dsb.
3. **String**. Levenshtein Distance, Hamming Distance, dsb.

Perhitungan yang paling populer digunakan adalah ***cosine similarity*** [1] (kebetulan pada kebanyakan kasus kita bekerja dengan data numerik), didefinisikan pada persamaan 10.2, yaitu *dot product* antara dua vektor dibagi dengan perkalian *norm* kedua vektor.

$$\text{cosSim}(\mathbf{d}_i, \mathbf{d}_j) = \frac{\mathbf{d}_i \mathbf{d}_j}{\|\mathbf{d}_i\| \, \|\mathbf{d}_j\|} \tag{10.2}$$

Clusters yang terbentuk, nantinya dapat digunakan sebagai pengelompokkan untuk label klasifikasi. Seumpama $cluster_1$ dapat dianggap sebagai data untuk kelas ke-1, dst.

10.2 Hierarchical Clustering

Hierarchical clustering adalah teknik untuk membentuk pembagian bersarang (*nested partition*). Berbeda dengan K-means yang hasil *clustering*-nya berbentuk *flat* atau rata, *hierarchical clustering* memiliki satu *cluster* paling atas yang mencakup konsep seluruh *cluster* dibawahnya. Ada dua cara untuk membentuk *hierarchical clustering* [36]:

1. **Agglomerative**. Dimulai dari beberapa *flat clusters*; pada setiap langkah iterasi, kita menggabungkan dua *clusters* termirip. Artinya, kita harus mendefinisikan arti "kedekatan" dua *clusters*.

2. **Divisive**. Dimulai dari satu *cluster* (seluruh data), kemudian kita memecah belah *cluster*. Artinya, kita harus mendefinisikan *cluster* mana yang harus dipecah dan bagaimana cara memecahnya.

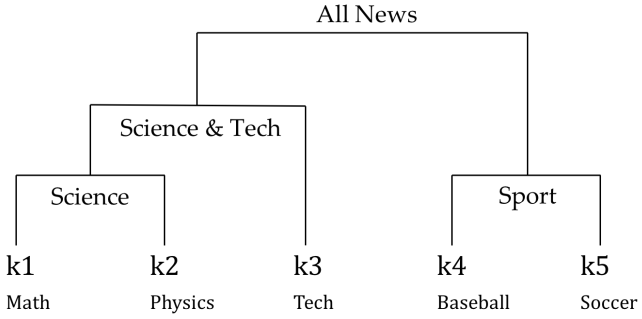
Sebagai contoh, algoritma *hierarchical clustering* menghasilkan struktur hirarkis seperti pada gambar 10.1 yang disebut **dendogram**. Dendogram melambangkan taksonomi, sebagai contoh taksonomi dokumen berita *sport*, dipecah menjadi *baseball* dan *soccer*.

Sejauh ini, teknik **agglomerative clustering** lebih populer, karena pendekatan ini bersifat *bottom-up*. Secara umum, pendekatan *bottom-up* memang relatif lebih populer dibanding pendekatan *top-down*. Langkah-langkah *agglomerative clustering* sebagai berikut:

1. Sediakan sejumlah K *clusters*. Kamu dapat menganggap satu instans data sebagai suatu *cluster*.
2. Gabung dua *clusters* paling mirip.
3. Ulangi langkah ke-2 sampai hanya satu *cluster* tersisa.

Perhatikan! untuk menggabungkan dua *clusters* termirip, kita membutuhkan definisi "mirip". Definisi tersebut dikuantifikasi dengan formula matematis (seperti definisi kemiripan data pada subbab 10.1). Perhitungan kemiripan *clusters* dapat dihitung dengan tiga metode [38] (untuk data numerik):

[1] `https://en.wikipedia.org/wiki/Cosine_similarity`



Gambar 10.1. Ilustrasi *hierarchical clustering*

1. ***Single Link***. Nilai kemiripan dua *clusters* **U** dan **V** dihitung berdasarkan nilai kemiripan **maksimum** diantara anggota kedua *clusters* tersebut[2].

$$\text{Sim}_{single-link}(\mathbf{U}, \mathbf{V}) = \max_{\mathbf{u}_i \in \mathbf{U}, \mathbf{v}_j \in \mathbf{V}} \text{cosSim}(\mathbf{u}_i, \mathbf{v}_j) \tag{10.3}$$

2. ***Complete Link***. Nilai kemiripan dua *clusters* dihitung berdasarkan nilai kemiripan **minimum** diantara anggota kedua *clusters* tersebut.

$$\text{Sim}_{complete-link}(\mathbf{U}, \mathbf{V}) = \min_{\mathbf{u}_i \in \mathbf{U}, \mathbf{v}_j \in \mathbf{V}} \text{cosSim}(\mathbf{u}_i, \mathbf{v}_j) \tag{10.4}$$

3. **UPGMA (*Average Link*)**. Nilai kemiripan dua *clusters* dihitung berdasarkan nilai kemiripan **rata-rata** diantara anggota kedua *clusters* tersebut.

$$\text{Sim}_{UPGMA}(\mathbf{U}, \mathbf{V}) = \frac{1}{|U|\,|V|} \sum_{\mathbf{u}_i \in \mathbf{U}, \mathbf{v}_j \in \mathbf{V}} \text{cosSim}(\mathbf{u}_i, \mathbf{v}_j) = \frac{\mathbf{c}^U \mathbf{c}^V}{|U|\,|V|} \tag{10.5}$$

   dimana $|U|$ adalah banyaknya data pada *cluster* **U** dan $\mathbf{c}^U$ adalah centroid untuk *cluster* **U**.

10.3 Evaluasi

Diberikan sekumpulan data $\mathbf{D} = \{\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \cdots, \mathbf{d}_N\}$ untuk suatu *cluster*. Saat tidak tersedianya informasi label/kelas untuk setiap data, kualitas hasil *clustering* dapat dihitung dengan tiga kriteria yaitu:

[2] *Cluster* dapat dianggap sebagai matriks karena merupakan kumpulan *feature vector*.

1. ***Intra-cluster similarity***, yaitu menghitung rata-rata kedekatan antara suatu anggota dan anggota *cluster* lainnya.

$$I = \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{d}_i \mathbf{d}_j, i \neq j} \text{cosSim}(\mathbf{d}_i, \mathbf{d}_j) \tag{10.6}$$

Perhitungan kedekatan antar tiap pasang anggota *cluster* sama halnya dengan menghitung *norm* dari centroid *cluster* tersebut, ketika centroid dihitung menggunakan *mean* (buktikan!).

$$I = \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{d}_i \mathbf{d}_j, i \neq j} \text{cosSim}(\mathbf{d}_i, \mathbf{d}_j) = \|\mathbf{c}\|^2 \tag{10.7}$$

Perhitungan ini dapat dinormalisasi sesuai dengan banyaknya anggota cluster

$$I' = \frac{\|\mathbf{c}\|^2}{N} \tag{10.8}$$

Semakin tinggi kemiripan anggota pada suatu *cluster*, semakin baik kualitas *cluster* tersebut.

2. ***Inter-cluster similarity***, yaitu menghitung bagaimana perbedaan antara suatu *cluster* dan *cluster* lainnya. Hal tersebut dihitung dengan *cosine similarity* antara centroid suatu *cluster* dan centroid dari seluruh data [37].

$$E = \sum_{k=1}^{K} N_k \frac{\mathbf{c}_k \mathbf{c}^{\mathbf{D}}}{\|\mathbf{c}_k\|} \tag{10.9}$$

dimana $\mathbf{c}_k$ adalah centroid *cluster* ke-k, $\mathbf{c}^{\mathbf{D}}$ adalah centroid (*mean*) dari seluruh data, N_k adalah banyaknya anggota *cluster* ke-k, dan K adalah banyaknya *clusters*. Semakin kecil nilai *inter-cluster similarity*, maka semakin baik kualitas *clustering*.

3. ***Hybrid***. Perhitungan *intra-cluster* dan *inter-cluster* mengoptimalkan satu hal sementara tidak memperdulikan hal lainnya. *Intra-cluster* menghitung keeratan anggota *cluster*, sementara *Inter-cluster* menghitung separasi antar *clusters*. Kita dapat menggabungkan keduanya sebagai *hybrid* (gabungan), dihitung dengan:

$$H = \frac{\sum_{k=1}^{K} I'_k}{E} = \frac{\sum_{k=1}^{K} \frac{\|\mathbf{c}_k\|^2}{N_k}}{\sum_{k=1}^{K} N_k \frac{\mathbf{c}_k \mathbf{c}^{\mathbf{D}}}{\|\mathbf{c}_k\|}} = \sum_{k=1}^{K} \frac{\|\mathbf{c}_k\|}{N_k^2 \mathbf{c}_k \mathbf{c}^{\mathbf{D}}} \tag{10.10}$$

Semakin besar nilai perhitungan *hybrid*, semakin bagus kualitas *clusters*.

Apabila terdapat informasi label/ kelas untuk setiap data, kita juga dapat menghitung kualitas algoritma *clustering* (perhatikan! tujuan pengukuran adalah kualitas algoritma) dengan **Entropy** dan **Purity**.

Soal Latihan

10.1. Intra-cluster Evaluation
Buktikan kebenaran persamaan 10.7.

10.2. Entropy
Bagaimana cara menghitung kualitas algoritma *clustering*, jika diberikan informasi label/ kelas setiap data menggunakan: (hint, baca [36])
(a) Entropy
(b) Purity

10.3. Kompleksitas
Hitunglah kompleksitas algoritma untuk:
(a) K-means
(b) Agglomerative Clustering
(c) Divisive Clustering

10.4. Kemiripan Data
Sebutkanlah contoh perhitungan kemiripan untuk data *string*. Bagaimana adaptasi perhitungan tersebut pada formula-formula yang sudah diberikan pada algoritma K-means dan agglomerative clustering.

10.5. Agglomerative vs Divisive Clustering
Menurut kamu, mengapa pendekatan *bottom-up* (agglomerative) lebih populer dibanding *top-down* (divisive)? Apa perbedaan kedua pendekatan tersebut (keuntungan dan kerugian masing-masing)?

10.6. Agglomerative Link
Jelaskan apa kelebihan dan kekurangan masing-masing metode perhitungan kemiripan cluster pada agglomerative clustering!