МИНОБРНАУКИ РОССИИ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
«ЛЭТИ» ИМ. В.И. УЛЬЯНОВА (ЛЕНИНА)
Кафедра математического обеспечения и применения ЭВМ

ОТЧЕТ

по лабораторной работе №7

по дисциплине «Статистические методы обработки экспериментальных данных»

Тема: Кластерный анализ. Метод поиска сгущений.

Студентка гр. 7381 _____ Алясова А.Н.

Студент гр. 7381 _____ Кортев Ю.В.

Преподаватель _____ Середа А.-В.И.

Санкт-Петербург

2021

Цель работы.

Освоение основных понятий и некоторых методов кластерного анализа, в частности, метода поиска сгущений.

Основные теоретические положения.

Метод поиска сгущений является еще одним итеративным методом кластерного анализа.

Основная идея метода заключается в построении гиперсферы заданного радиуса, которая перемещается в пространстве классификационных признаков в поисках локальных сгущений объектов.

Метод поиска сгущений требует, прежде всего, вычисления матрицы расстояний (или матрицы мер сходства) между объектами и выбора первоначального центра сферы.

В алгоритме поиска сгущений сначала выбирается начальный центр первого кластера. Выбор такого объекта может быть произвольным, а может основываться на предварительном анализе точек и их окрестностей. В рассматриваемом случае, центры выбираются вручную.

Как правило, на первом шаге центром сферы служит объект (точка), в ближайшей (заданной) окрестности которого расположено наибольшее число соседей. На основе заданного радиуса сферы (R) определяется совокупность точек внутри этой сферы, и для них вычисляются координаты центра (вектор средних для попавших в сферу значений признаков).

Когда очередной пересчет координат центра сферы приводит к такому же результату, как и на предыдущем шаге, перемещение сферы прекращается, а точки, попавшие в нее, образуют кластер, и из дальнейшего процесса кластеризации исключаются.

Перечисленные процедуры повторяются для всех оставшихся точек. Работа алгоритма завершается за конечное число шагов, и все точки оказываются распределенными по кластерам. Число образовавшихся кластеров заранее неизвестно и сильно зависит от заданного радиуса сферы.

Для оценки устойчивости полученного разбиения целесообразно повторить процесс кластеризации несколько раз для различных значений радиуса сферы, изменяя каждый раз радиус на небольшую величину.

Существуют различные способы выбора начального радиуса сферы. В частности, если обозначить через d_{ij} расстояние между i-м и j-м объектами, то в качестве нижней границы значения радиуса сферы можно выбрать минимальное из таких расстояний, а в качестве верхней границы - максимальное:

$$R_{min} = \min_{i,j} d_{ij};$$

$$R_{max} = \max_{i,j} d_{ij}.$$

Тогда, если начинать работу алгоритма с

$$R = R_{min} + \delta;\ \delta > 0$$

и при каждом его повторении увеличивать значение δ на некоторую величину, то в конечном итоге можно найти значения радиусов, которые приводят к устойчивому разбиению на кластеры.

Следует отметить следующие существенные при реализации метода поиска сгущений моменты:

1. В случае разномасштабности квалификационных признаков необходимо проведение их нормировки перед началом работы метода;
2. Возможны два варианта реализации метода. Один из них не предполагает изменения заданного значения радиуса сферы до завершения кластеризации, а другой — предполагает изменение этого радиуса в процессе кластеризации при начале построения очередной сферы;
3. В отличие от метода k-средних метод поиска сгущений не требует задания количества кластеров, на которые предполагается разбить исходное множество объектов;
4. Качество полученного в результате применения метода итогового разбиения на кластеры оценивается, как и в методе k-средних, с помощью введенных на предыдущей лекции критериев качества разбиения F_1, F_2, F_3.

5. Получение в результате кластеризации пересекающихся кластеров (наличие спорных объектов) в принципе является неудовлетворительным результатом. На практике в этом случае необходимо скорректировать процесс, либо выбрать другой метод кластеризации.

После завершения многомерной классификации необходимо оценить полученные результаты. Для этой цели используются специальные характеристики – функционалы качества. Наилучшим разбиением считается такое, при котором достигается экстремальное (минимальное или максимальное) значение выбранного функционала качества.

В качестве таких функционалов могут быть использованы:

1. Сумма квадратов расстояний до центров кластеров

$$F_1 = \sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{N_k} d^2(X_i^{(k)}, X^{(k)}) \Rightarrow \min$$

2. Сумма внутрикластерных расстояний между объектами

$$F_2 = \sum_{k=1}^{K} \sum_{X_i, X_j \in S_k} d^2(X_i, X_j) \Rightarrow \min$$

3. Сумма внутрикластерных дисперсий

$$F_3 = \sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{N_k} \sigma_{ij}^2 \Rightarrow \min$$

Здесь σ - дисперсия *j*-й переменной в *k*-м кластере.

Оптимальным следует считать разбиение, при котором сумма внутрикластерных (внутригрупповых) дисперсий будет минимальной.

Судить о качестве разбиения позволяют и некоторые простейшие приемы. Например, можно сравнивать средние значения признаков в отдельных кластерах (группах) со средними значениями в целом по всей совокупности объектов. Если групповые средние существенно отличаются от общего среднего значения, то это может являться признаком хорошего разбиения.

Постановка задачи.

Дано конечное множество из объектов, представленных двумя признаками (в качестве этого множества принимаем исходную двумерную выборку, сформированную ранее в лабораторной работе №4). Выполнить разбиение исходного множества объектов на конечное число подмножеств (кластеров) с использованием метода поиска сгущений. Полученные результаты содержательно проинтерпретировать.

Порядок выполнения работы

1. Нормализовать множество точек, отобразить полученное множество.
2. Реализовать алгоритм поиска сгущений, отобразить полученные кластеры, выделить каждый кластер разным цветом, отметить центроиды.
3. Проверить чувствительность метода к погрешностям. Сделать выводы.
4. Сравнить с методами из лабораторной работы №6. Сделать выводы.

Выполнение работы.

1. Нормализовать множество точек, отобразить полученное множество.

Исследуемая выборка представлена в табл. 1.

Таблица 1

№	nu	E	№	nu	E	№	nu	E	№	nu	E	№	nu	E
1	480	153,3	25	408	110,0	49	405	103,6	73	465	127,7	97	487	146,0
2	510	129,4	26	331	74,1	50	434	140,4	74	390	108,1	98	532	158,7
3	426	119,0	27	467	113,0	51	344	86,8	75	463	129,2	99	330	71,1
4	482	139,9	28	545	145,3	52	415	119,7	76	468	128,9	100	438	134,1
5	393	103,2	29	396	83,8	53	463	136,7	77	488	134,1	101	593	187,4
6	510	162,3	30	351	102,9	54	475	143,6	78	443	137,4	102	445	124,7
7	403	123,9	31	503	148,5	55	463	144,9	79	505	155,8	103	518	154,0
8	506	158,4	32	402	120,8	56	392	82,7	80	395	109,1	104	496	141,7
9	393	122,8	33	542	146,1	57	452	140,5	81	474	132,5	105	473	136,4
10	442	115,4	34	437	124,3	58	504	143,8	82	490	139,9	106	522	154,5
11	411	112,9	35	453	119,5	59	443	122,9	83	396	90,1	107	547	154,7
12	514	153,6	36	386	105,8	60	461	138,6	84	362	97,9	108	560	169,8
13	525	156,5	37	434	122,3	61	340	85,1	85	566	175,7	109	412	127,8
14	543	155,4	38	418	118,4	62	438	134,9	86	418	109,3	110	444	130,0
15	412	116,3	39	391	107,5	63	523	148,7	87	502	132,5	111	437	121,8
16	449	124,5	40	399	100,0	64	416	120,5	88	500	155,5	112	462	138,8
17	482	136,4	41	486	139,4	65	483	143,4	89	359	71,9	113	438	122,2
18	569	157,4	42	421	124,2	66	440	128,5	90	443	135,7	114	406	110,1
19	484	147,5	43	496	143,1	67	423	131,1	91	421	118,0	115	413	106,7
20	472	134,2	44	463	121,2	68	386	95,5	92	433	128,2	116	458	121,7
21	453	124,2	45	508	159,0	69	321	86,1	93	514	174,6	117	408	117,0
22	422	117,9	46	419	105,3	70	433	131,5	94	320	72,6			
23	320	64,5	47	434	108,7	71	351	89,0	95	406	113,8			
24	547	164,4	48	440	126,7	72	481	148,3	96	465	140,9			

Отображение исходной выборки представлено на рис. 1.

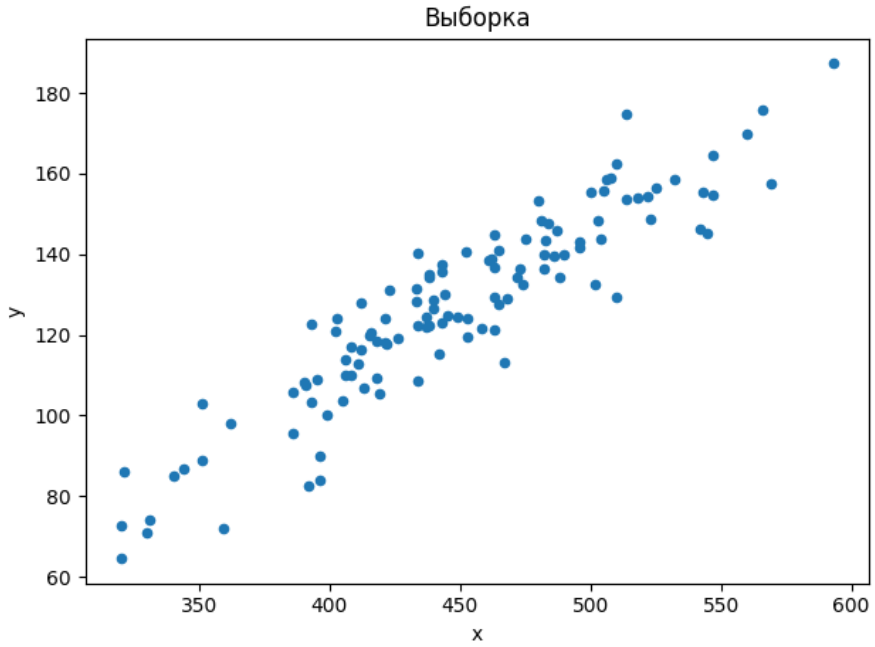


Рисунок 1 – Исходная выборка

Нормализация координат точек определяется по формуле:

$$x_i = \frac{x_i - x_{min}}{x_{max} - x_{min}}$$

Отображение нормализованной выборки представлено на рис. 2.

Рисунок 2 – Нормализованная выборка

2. Реализовать алгоритм поиска сгущений, отобразить полученные кластеры, выделить каждый кластер разным цветом, отметить центроиды.

Реализуем алгоритм поиска сгущений. Отобразим полученные кластеры, выделим каждый кластер разным цветом, отметим центроиды.

Определим нижнюю и верхнюю границы радиуса сферы:

$$R_{min} = mind_{ij} = 0{,}017641244975881643;$$

$$R_{max} = maxd_{ij} = 6{,}92484244887299.$$

Выберем из промежутка [0,017641244975881643; 6,92484244887299] радиус $R = 1{,}2000000476837158$.

Запустим алгоритм:

Формирование 1го кластера представлено на рис. 3.

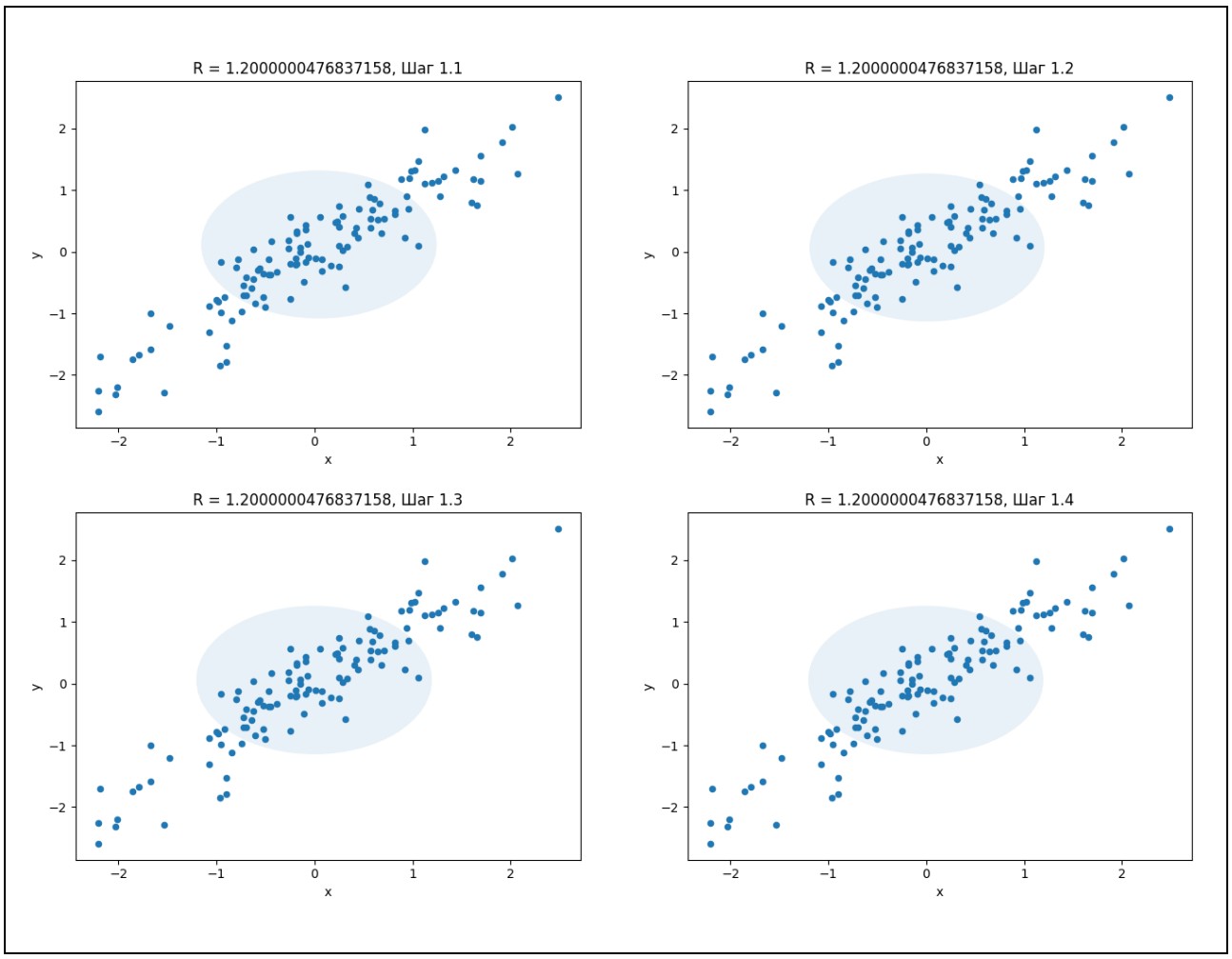


Рисунок 3

Формирование 2го кластера представлено на рис. 4.

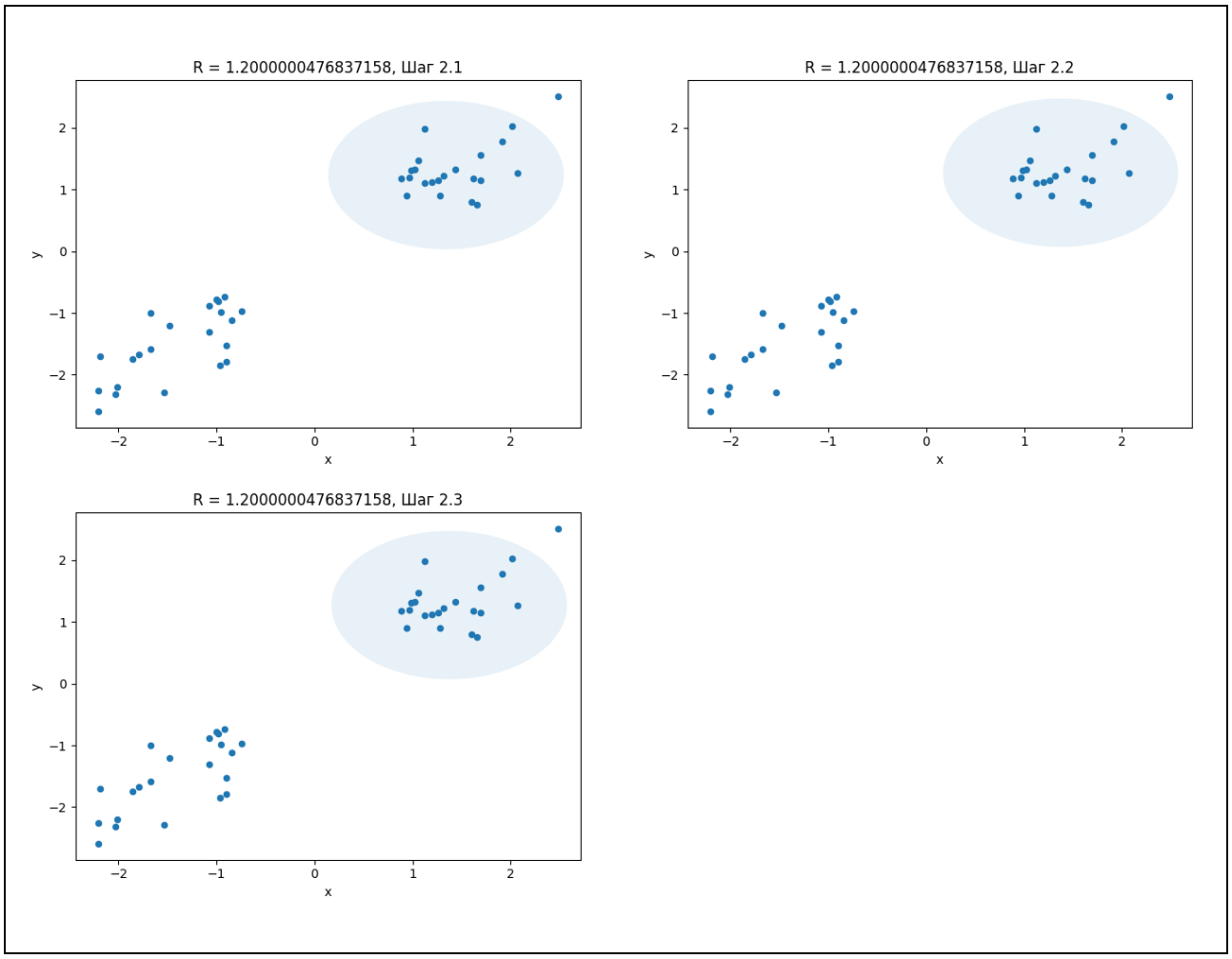


Рисунок 4

Формирование 3го кластера представлено на рис. 5-6.

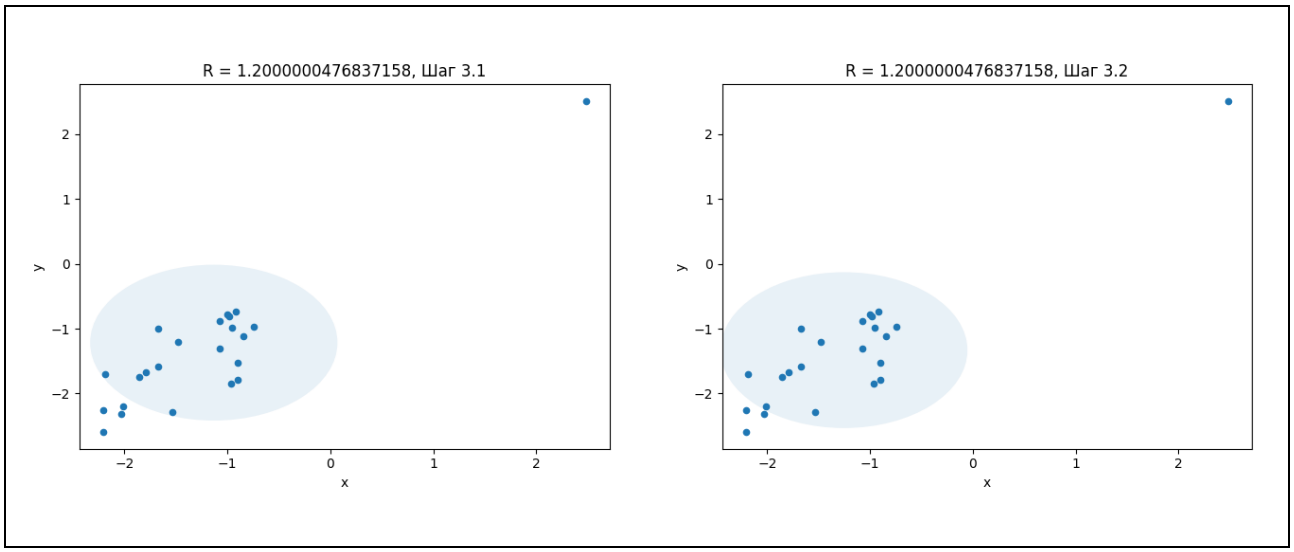


Рисунок 5

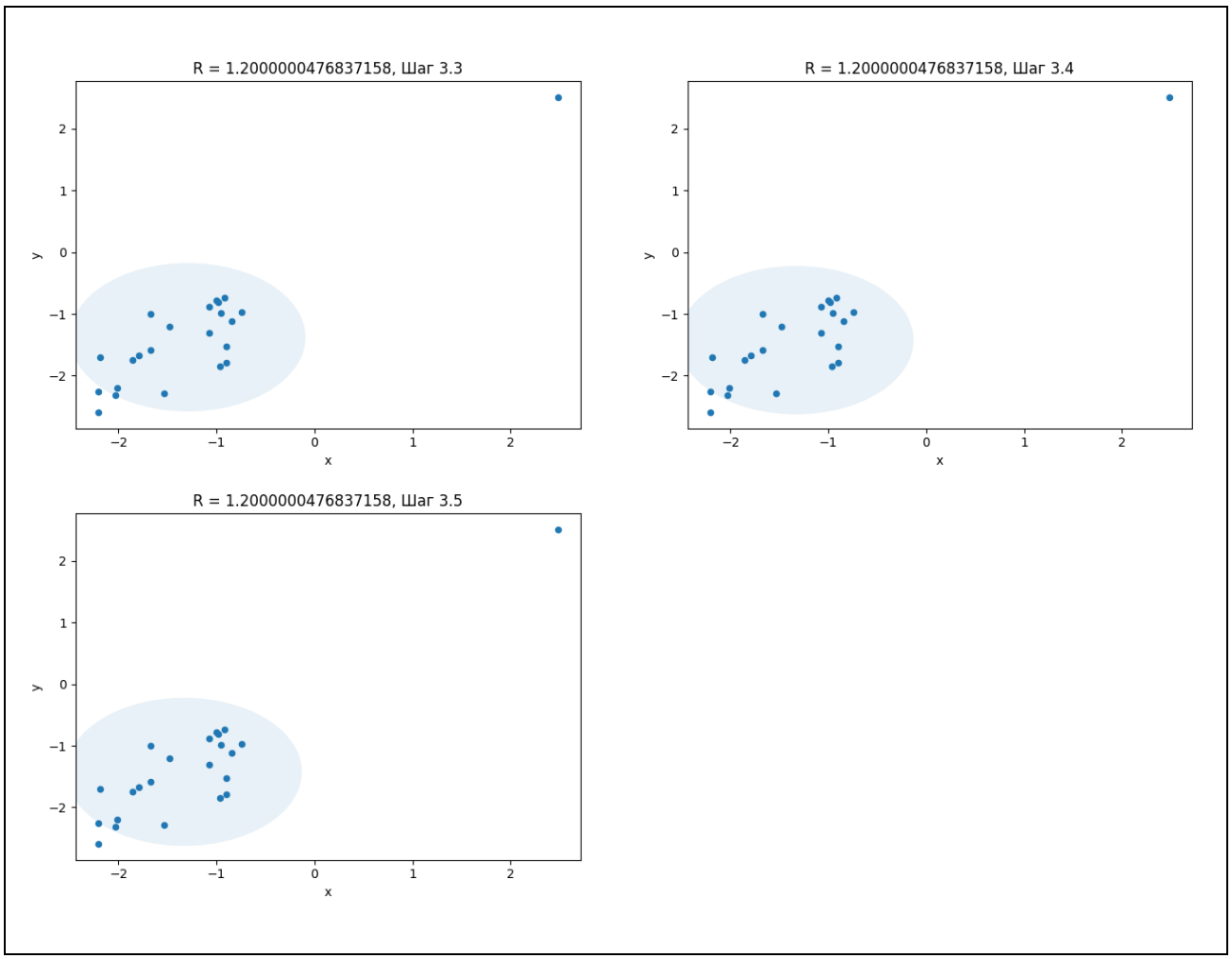


Рисунок 6

Формирование 4го кластера представлено на рис. 7.

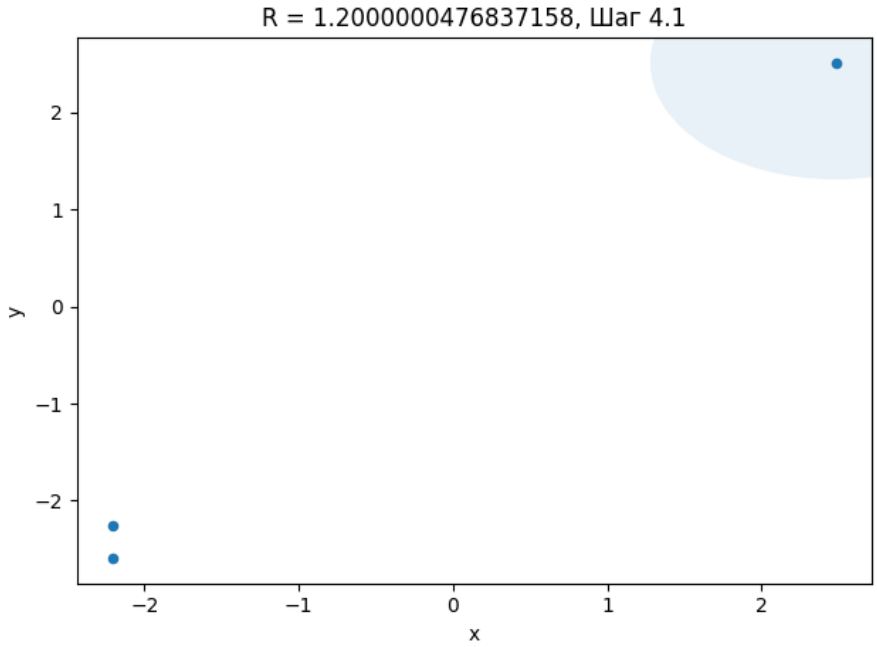


Рисунок 7

Формирование 5го кластера представлено на рис. 8.

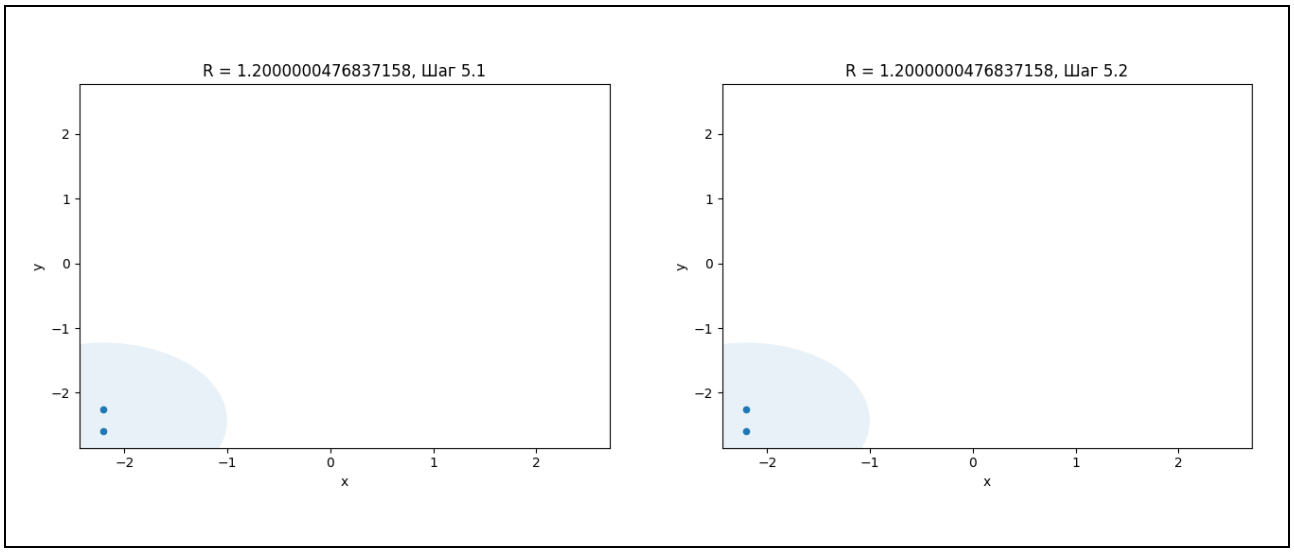


Рисунок 8

Результат кластеризации представлен на рис. 9.

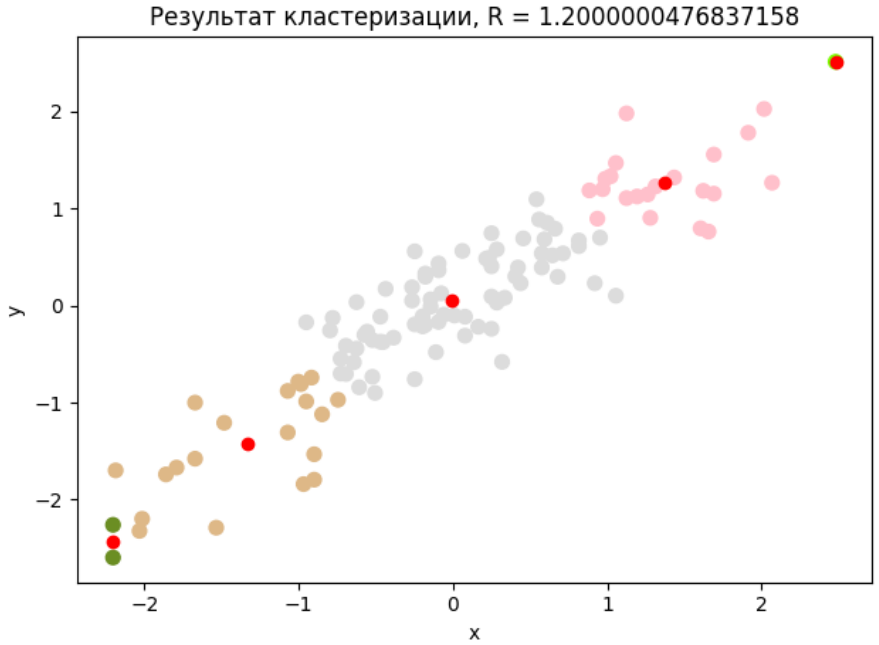


Рисунок 9

Таблица 2

Номер кластера	Центр кластера	Количество элементов в кластере
1	(-0,004243736116897832 ; 0,05696773691479348)	73

2	(1,3728603917013382 ; 1,269402589075278)	21
3	(-1,3296908010805915 ; -1,423519995425545)	20
4	(2,4783418922683094 ; 2,5082120327432573)	1
5	(-2,2024006799255216 ; -2,4269556447966085)	2

3. Проверить чувствительность метода к погрешностям. Сделать выводы.

Формирование 1го кластера с погрешностями представлено на рис. 10.

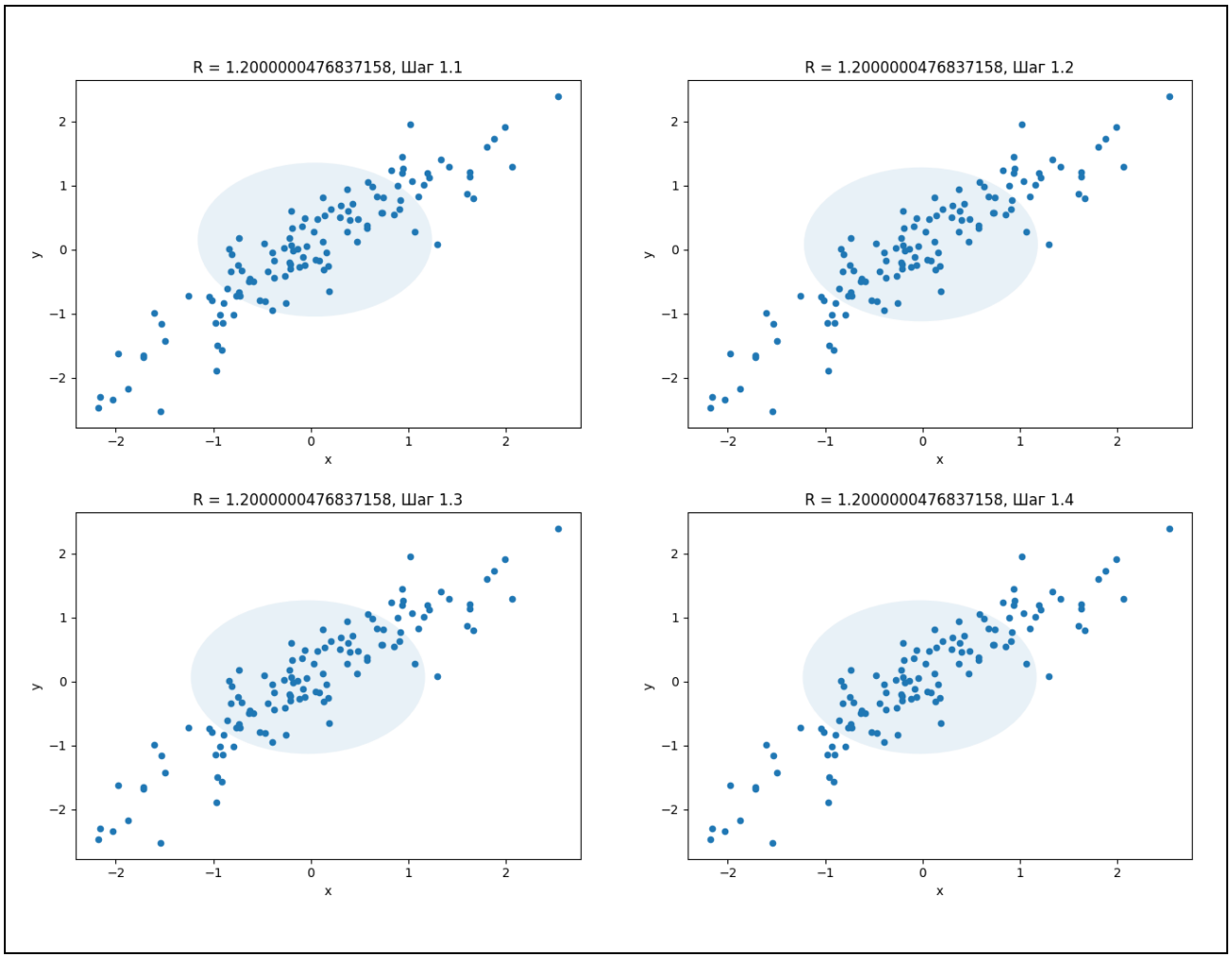


Рисунок 10

Формирование 2го кластера с погрешностями представлено на рис. 11.

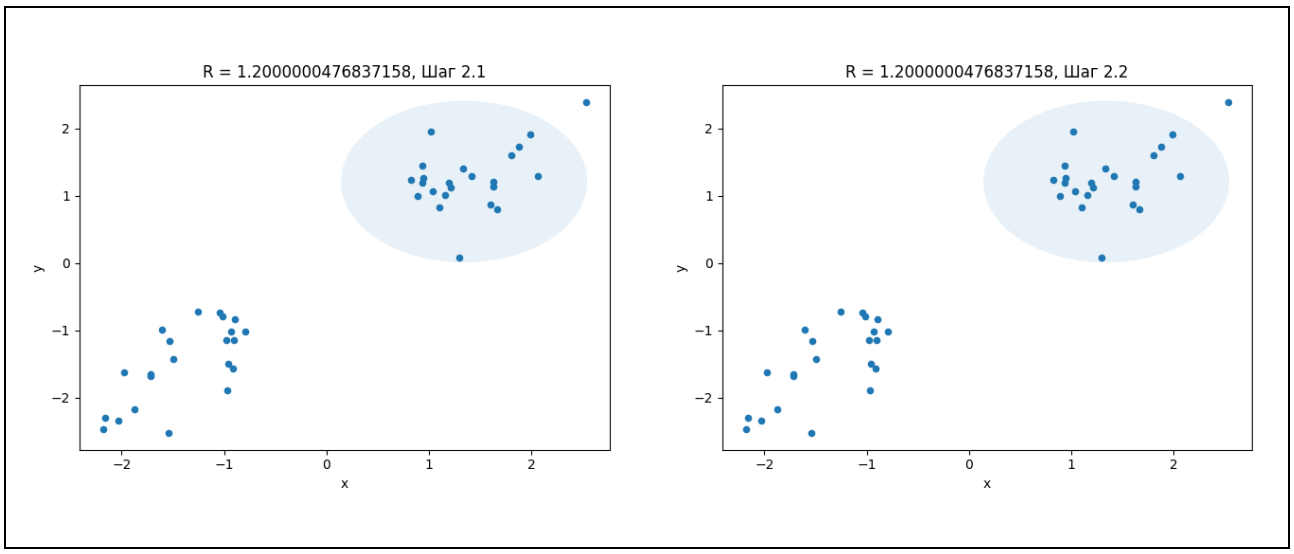
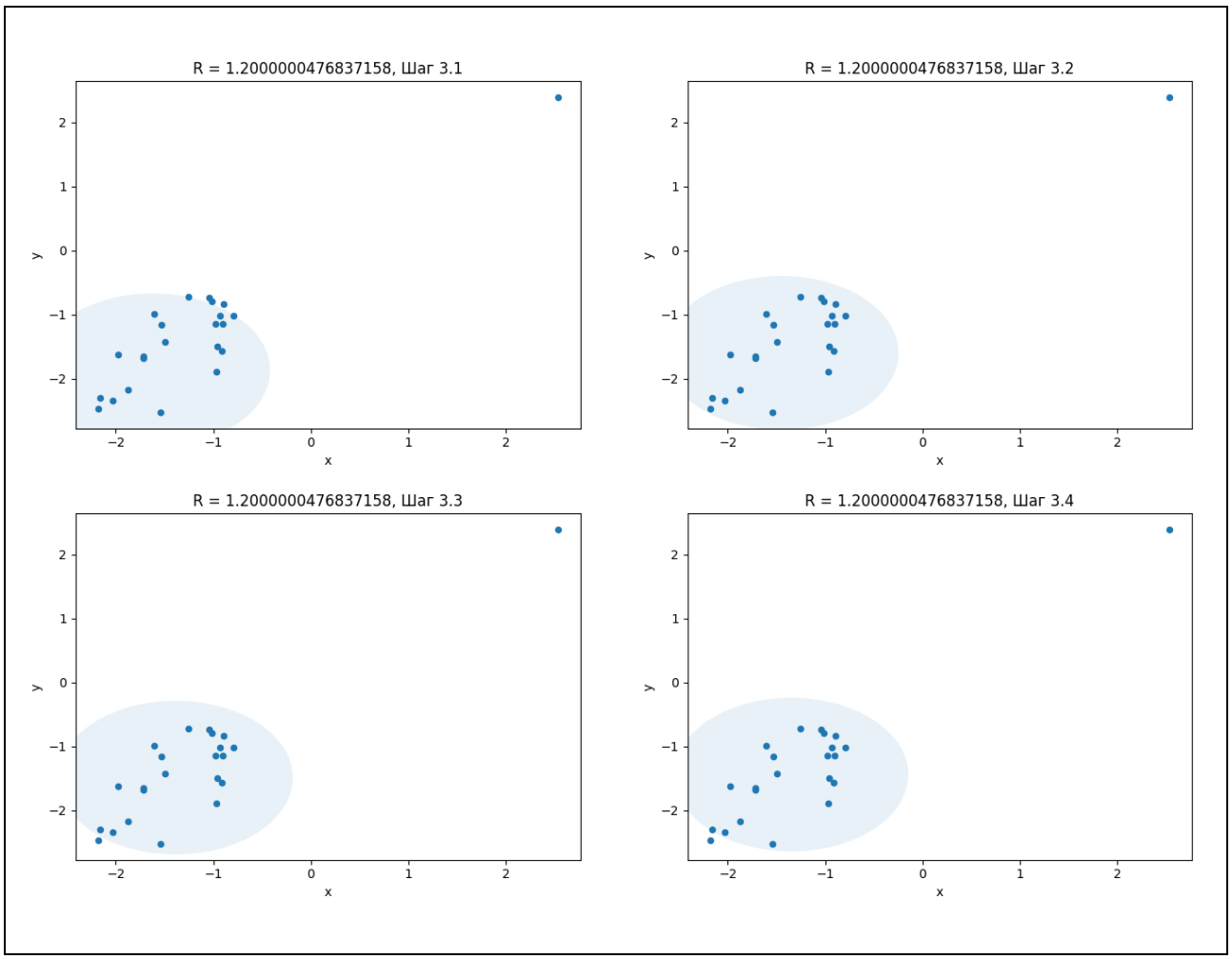


Рисунок 11

Формирование 2го кластера с погрешностями представлено на рис. 12.



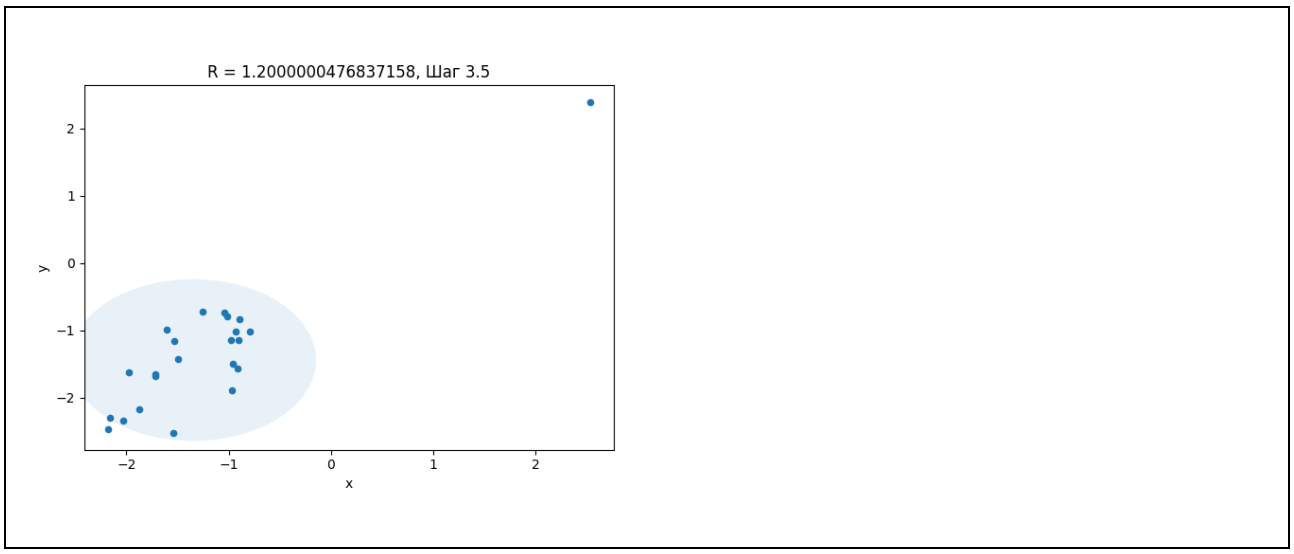


Рисунок 12

Формирование 2го кластера с погрешностями представлено на рис. 13.

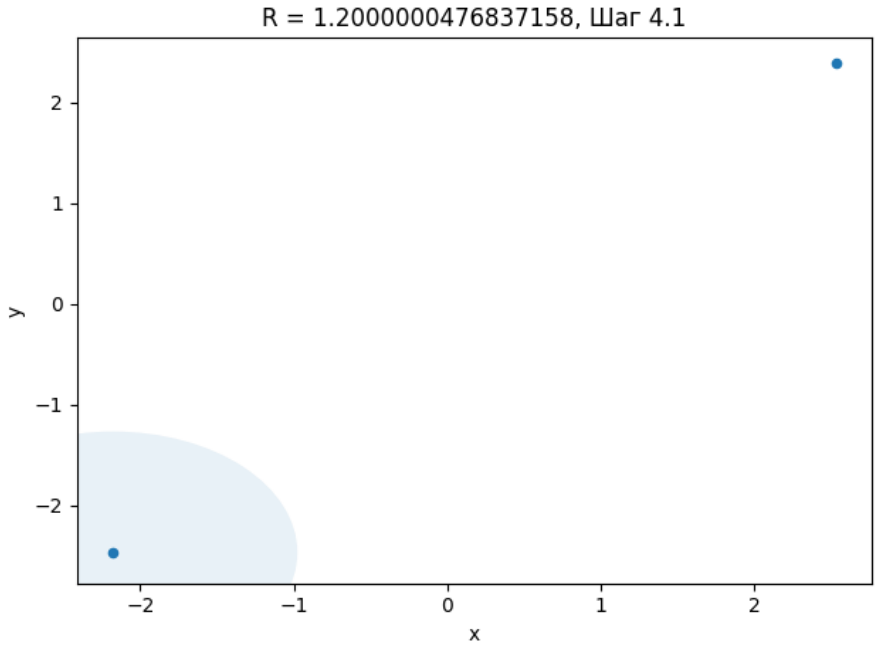


Рисунок 13

Формирование 5го кластера с погрешностями представлено на рис. 14.

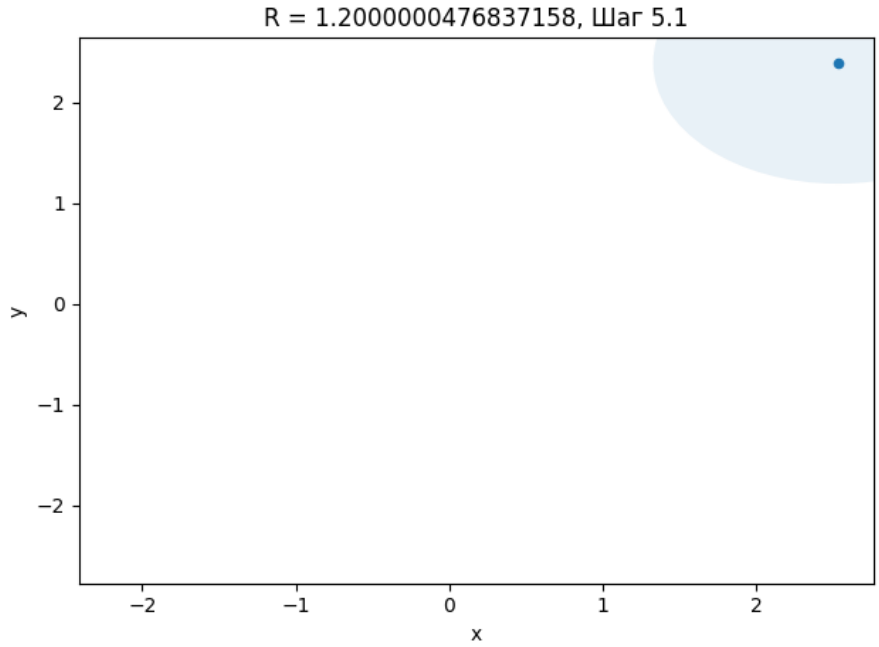


Рисунок 14

Результат кластеризации с погрешностями представлен на рис. 15.

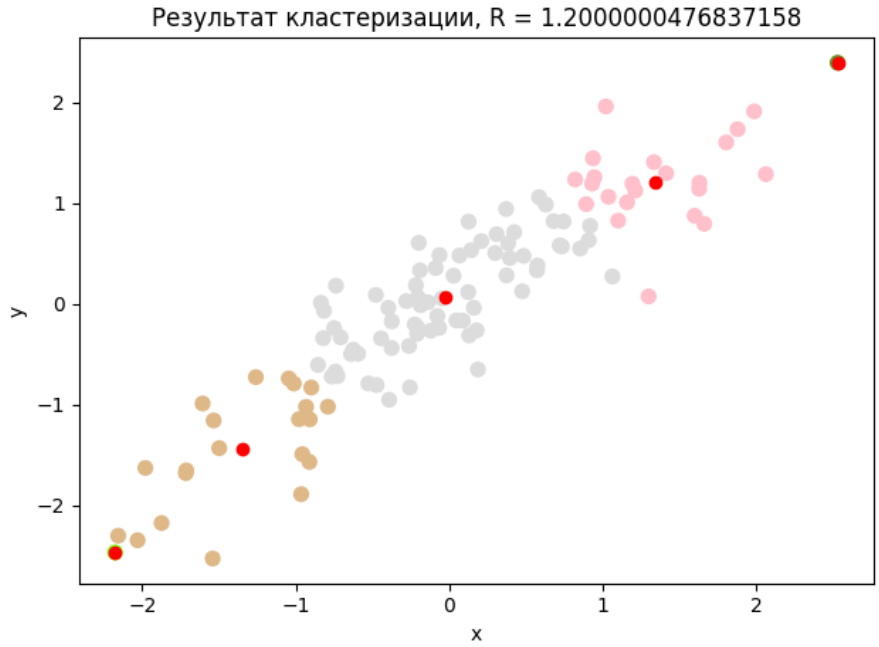


Рисунок 15

Таблица 3

Номер кластера	Центр кластера	Количество элементов в кластере
1	(-0,0294042169854218 ; 0,06868813095241261)	72
2	(1,342186825428838 ; 1,210104850517267)	22

3	(-1,34686405930226 ; -1,4401333952484419)	21
4	(-2,1754394392808516 ; -2,465932878978102)	1
5	(2,528303696654842 ; 2,393057608215714)	1

Для определения чувствительности метода поиска сгущений к погрешностям посчитаем функционалы качества:

1. Сумма квадратов расстояний до центров кластеров

$$F_1 = \sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{N_k} d^2(X_i^{(k)}, X^{(k)}) \Rightarrow \min$$

2. Сумма внутрикластерных расстояний между объектами

$$F_2 = \sum_{k=1}^{K} \sum_{X_i, X_j \in S_k} d^2(X_i, X_j) \Rightarrow \min$$

3. Сумма внутрикластерных дисперсий

$$F_3 = \sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{N_k} \sigma_{ij}^2 \Rightarrow \min$$

Здесь σ - дисперсия j-й переменной в k-м кластере.

Для метода поиска сгущений рассчитаем функционалы качества:

$$F_1 = 48{,}53866925870642;$$

$$F_2 = 2787{,}410088967963;$$

$$F_3 = 0{,}6349798737150777;$$

Для метода поиска сгущений с учетом погрешностей рассчитаем функционалы качества:

$$F_1 = 52{,}70766744762952;$$

$$F_2 = 2950{,}8819090345137;$$

$$F_3 = 0{,}662939621275543;$$

На основании этого можем сделать вывод, что метод несильно, но чувствителен к погрешностям, так как значения функционалов качества с учетом погрешностей возросли.

4. Сравнить с методом из лабораторной работы №6. Сделать выводы.

Для сравнения с методом k-средних возьмем значения функционалов качества при количестве кластеров $k = 5$ из лабораторной работы №6.

Таблица 4

Метод	**Количество кластеров k**	F_1	F_2	F_3
k-средних	5	0,9685	25,2083	0,0226
поиска сгущений	5	48,5387	2787,4101	0,6350

Визуальное представление работы двух методов:

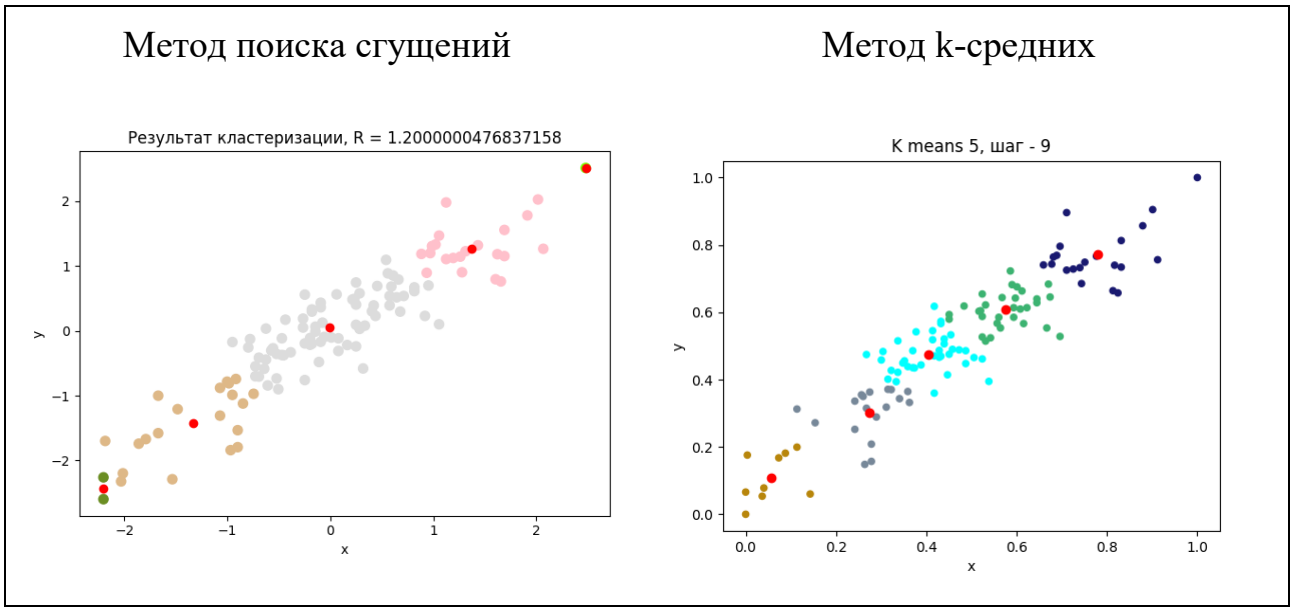


Рисунок 16

Рассмотрим результаты работы двух методов на рис. 16. Визуальная разница довольно большая. В данном случае алгоритм k-средних показал себя лучше так, как максимальное расстояние между точками в его кластерах меньше, чем у метода поиска сгущений. Сравним значения функционалов качества для данных разбиений (табл. 4). Аналогичный вывод можно сделать для сравнения по функционалам качества: метод k-средних лучше показал себя для исходных данных.

Выводы.

Таким образом, были освоены основные понятия кластерного анализа. С помощью алгоритма поиска сгущений исходная выборка была разбита на 5 кластеров. Метод поиска сгущений несильно, но чувствителен к погрешностям. При сравнении исследуемого метода с методом k-средних метод поиска сгущений оказался хуже для исходных данных.

По результатам работы, можно заметить, что алгоритм требует значительное количество итераций, также заранее неизвестно количество получаемых кластеров, оно зависит от выбранного радиуса.

ПРИЛОЖЕНИЕ А
ИСХОДНЫЙ КОД

```
import numpy as np
import sys
import math
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.colors as colors
import random
from itertools import combinations
from scipy.spatial import distance


random.seed(5)
np.random.seed(5)
df = pd.read_csv('sample.csv', header=None)
df.columns = ['x', 'y']

ax = df.plot.scatter(x=0, y=1)
ax.set_title('Выборка')
plt.show()

df = (df - df.mean(axis=0)) / df.std(axis=0)
noise = np.random.normal(0, 0.1, [len(df), 2])

df = df + noise

ax = df.plot.scatter(x=0, y=1)
ax.set_title('Нормализованная выборка')
xlim = ax.get_xlim()
ylim = ax.get_ylim()
plt.show()

distances = distance.cdist(df, df)
distances = set(distances.flatten().tolist()) - {0}
R_min = min(distances)
R_max = max(distances)


def plot_step(step_points, circle, title):
    ax = step_points.plot.scatter(x=0, y=1)
    ax.set_title(title)
    ax.set_xlim(xlim)
```

```
    ax.set_ylim(ylim)
    c = plt.Circle(circle, R, alpha=0.1)
    ax.add_patch(c)
    plt.show()


points = df.copy()
R = np.float32(1.2) # 0.8
i = 0
df['Clusters'] = 0
while len(points):
    circle = points.iloc[:, :2].sample(1)
    j = 0
    while True:
        prev_circle = circle

        points_in_circle = points.apply(lambda x: np.linalg.norm(x - cir-
cle) <= R, axis=1)
        circle = points[points_in_circle].mean(axis=0)
        plot_step(points, circle, 'R = {}, Шаг {}.{}'.format(R.round(1),
i + 1, j + 1))
        j += 1
        if ((circle - prev_circle).abs() < 0.0001).all().all():
            break

    points_in_circle = points.apply(lambda x: np.linalg.norm(x - circle)
<= R, axis=1)
    df.loc[points_in_circle.index, 'Clusters'] = points_in_circle * i
    points = points[~ points_in_circle]
    i += 1

list_colors = np.array([name for name, col in colors.CSS4_COL-
ORS.items()])
np.random.shuffle(list_colors)
ax = df.plot.scatter(x=0, y=1, c=list_colors[df['Clusters']], s=50)
for c in range(i):
    circle = df[df['Clusters'] == c].iloc[:, :2].mean(axis=0)
    ax.scatter(circle[0], circle[1], c='red')
ax.set_title('Результат кластеризации, R = {}'.format(R.round(1)))
plt.show()

f1 = []
f2 = []
f3 = []
```

```
for c in range(i):
    if np.isnan(df[df['Clusters'] == c].iloc[:, :2].var().mean()):
        continue
    circle = df[df['Clusters'] == c].iloc[:, :2].mean(axis=0)
    cluster_dists = []
    f3.append(df[df['Clusters'] == c].iloc[:, :2].var().mean())
    for comb in combinations(df[df['Clusters'] == c].iloc[:,
:2].to_numpy(), 2):
        cluster_dists.append(np.linalg.norm(comb[0] - comb[1]) ** 2)
    f2.append(sum(cluster_dists))
    f1.append(sum(np.linalg.norm(df[df['Clusters'] == c].iloc[:, :2] -
circle, axis=1) ** 2))
f2 = sum(f2)
f3 = sum(f3)
f1 = sum(f1)

print('R = {}:\nF1 = {}\nF2 = {}\nF3 = {}'.format(R, f1, f2, f3))

rows = []
for centroid_id in range(i):
    centroid = df[df['Clusters'] == centroid_id].iloc[:, :2]
    rows.append([centroid_id + 1, '({} : {})'.format(*(cen-
troid.mean(axis=0))), len(centroid)])

res = pd.DataFrame(rows, columns=['Номер кластера', 'Центр кластера',
'Количество элементов в кластере'])
res.to_csv('Таблица.csv', index=False)

print('R_min = {}\nR_max = {}'.format(R_min, R_max))
```