二次元データに対する k-means クラスタリングと Local Outlier Factor の C# 実装

大阪大学 工学部 電子情報学科 3 年 情報システム工学コース 08D23091 辻孝弥

2025年4月29日

目次

1	背景と目的	2
2	手法	2
2.1	処理フロー	2
2.2	Local Outlier Factor (LOF)	2
2.3	k-means クラスタリング	2
3	実装要点 (C#)	3
4	実験設定	3
4.1	データセット	3
4.2	パラメータ	3
5	結果	3
5.1	外れ値検出結果 (moon データセット)	3
5.2	k-means 収束状況	3
5.3	可視化結果	4
6	考察	5
7	まとめ	5

CSV 形式で与えられた最大 200 点の二次元データに対し,Local Outlier Factor (LOF) による外れ値 検出と k-means クラスタリングを単一の C# プログラムで逐次実行した手順と結果を報告する.本稿では実装の要点,入力・出力仕様,および実験ログの要約を整理し,将来の改善方針を示す.

1 背景と目的

外れ値検出とクラスタリングはデータ解析の根幹であり、両者は相互に影響を及ぼす.本プログラムは LOF によって外れ値を除いた後に k-means を適用することで、クラスタリング結果の安定化を図ることを目的としている.

2 手法

2.1 処理フロー

入力 二次元座標を格納した CSV (形式:x,y)

処理手順 1. CSV 読み込み

- 2. LOF の計算 (k=10)
- 3. 閾値 1.2 を超える点を外れ値とフラグ付け
- 4. k-means クラスタリング (クラスタ数 k はコマンドライン引数, 既定値 3)
- 5. 結果を CSV へ出力

出力 x, y, cluster_id, is_outlier

2.2 Local Outlier Factor (LOF)

スクリーンショットで示された定義に合わせ、点AのLOFは次式で与えられる:

$$LOF_k(A) := \frac{\sum_{B \in N_k(A)} \operatorname{lrd}_k(B) / |N_k(A)|}{\operatorname{lrd}_k(A)}.$$
 (1)

ここで $N_k(A)$ は A の k 近傍集合, $|N_k(A)|=k$, $\mathrm{Ird}_k(\cdot)$ は局所到達可能密度 (Local Reachability Density) である。

2.3 k-means クラスタリング

初期重心はランダムに抽出し、ユークリッド距離による割り当てと重心再計算を繰り返す。収束判定は

$$\max_{j} \left\| \mathbf{c}_{j}^{(t+1)} - \mathbf{c}_{j}^{(t)} \right\| < 10^{-8}$$

または 1000 反復に達した時点とした.ここで $\mathbf{c}_j^{(t)}$ は時刻 t におけるクラスタ j の重心 (centroid) であり,プログラム中の変数 centroid[j,*] に対応する。外れ値は重心計算から除外する.

アルゴリズム 1 外れ値除外付き重心計算 (抜粋)

```
1: for i \leftarrow 0 to N-1 do
2: if label[i] == k and is\_outlier[i] == false then
3: sum_x += data[i, 0];
4: sum_y += data[i, 1];
5: count += 1;
6: end if
7: end for
```

3 実装要点 (C#)

- 2 次元データは double[,] 配列で保持. 最大 200 行を想定.
- LOF 計算と k-means は同一ファイルで実装し、外部依存ライブラリは使用していない.
- 外れ値を除外して重心を計算する際のコード片をアルゴリズム 1 に示す.

4 実験設定

4.1 データセット

5種の人工データ (各 200 点) を使用した: moon, crater, square, three_island, two_island.

4.2 パラメータ

LOF は k = 10, 閾値 1.2, k-means はクラスタ数 k = 3 とし、最大 1000 反復で収束を判定した.

5 結果

5.1 外れ値検出結果 (moon データセット)

式 (1) に従い計算した LOF が 1.2 を超えた点は 7 個であり、表 1 に示す.

5.2 k-means 収束状況

初期重心をランダムに選択した場合,moon データセットでは 13 反復で収束した.各反復で外れ値 7 点は重心計算から除外された.

表 1 外れ値一覧 (LOF > 1.2)

No.	座標 (x, y)	LOF 値
1	(0.2082, 0.9957)	1.3159
2	(0.1641, 1.0172)	1.2992
3	(0.3043, 1.0289)	1.2795
4	(2.2251, 0.9604)	1.2248
5	(0.2126, 0.9937)	1.3193
6	(3.1527, 1.5360)	1.2000
7	(1.1774, 1.6019)	1.2411

5.3 可視化結果

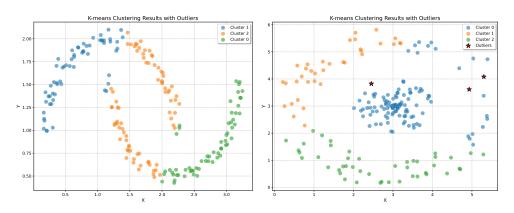


図 1 moon (左) と crater (右) のクラスタリング結果

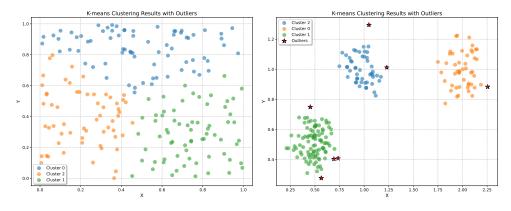


図 2 square (左) と three_island (右) のクラスタリング結果

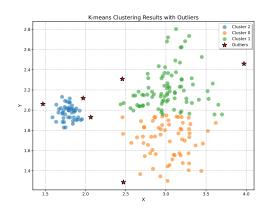


図3 two_island データセットのクラスタリング結果

6 考察

- 1. 式 (1) に基づき外れ値を除外しながら計算した重心 \mathbf{c}_j により,クラスタリングの安定性が向上した。
- 2. moon データセットのような非線形境界に対しては k-means の線形判別面が不利であり、今後は DBSCAN などの導入を検討する必要がある。

7 まとめ

本稿で示した C# プログラムは,LOF による外れ値検出と k-means クラスタリングを連続実行し,200 点のデータに対して 13 反復で収束したことを確認した。外れ値除去付き重心計算(変数 extttcentroid[j,*] が対応)がクラスタ分割の安定化に寄与することを示した。

今後は LOF 閾値の最適化,自動初期化手法(k-means++),および非線形クラスタリング手法の比較実装を課題とする。