



دانشکده علوم

بخش ریاضی

پایان نامه کارشناسی ارشد

در ریاضی کاربردی

**حل مسائل خوشه بندی با استفاده از بهینه سازی**

**شبیه سازی حرارتی**

توسط

**زهرة السادات ناظمی**

استاد راهنما:

**دکتر کورش زیارتی**

استاد مشاور:

**دکتر محمد باقراحمدی**

**دکتر عبدالعزیز عبدالهی**

شهریور ۱۳۸۸

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

به نام خدا

## اظہار نامہ

اینجانب زہرہ السادات ناظمی (۸۵۰۴۲۲) دانشجوی رشته‌ی ریاضی کاربردی گرایش تحقیق در عملیات دانشکده علوم اظہار می‌کنم کہ این پایان نامہ حاصل پژوهش خودم بودہ و در جاهایی کہ از منابع دیگران استفادہ کردہ‌ام، نشانی دقیق و مشخصات کامل آن را نوشتہ‌ام. همچنین اظہار می‌کنم کہ تحقیق و موضوع پایان نامہ‌ام تکراری نیست و تعہد می‌نمایم کہ بدون مجوز دانشگاه دستاوردهای آن را منتشر ننمودہ و یا در اختیار غیر قرار ندهم. کلیہ حقوق این اثر مطابق با آیین نامہ مالکیت فکری و معنوی متعلق بہ دانشگاه شیراز است.

نام و نام خانوادگی: زہرہ السادات ناظمی

۱۳۸۸/۶/۳۱

به نام خدا

## حل مسائل خوشه بندی با استفاده از بهینه سازی شبیه سازی حرارتی

به کوشش

زهره السادات ناظمی

پایان نامه

ارایه شده به تحصیلات تکمیلی دانشگاه شیراز به عنوان بخشی از فعالیت‌های

تحصیلی لازم برای اخذ درجه کارشناسی ارشد

در رشته‌ی

ریاضی کاربردی (تحقیق در عملیات)

از دانشگاه شیراز

شیراز

جمهوری اسلامی ایران

ارزیابی کمیته پایان نامه، با درجه : - - - - -

دکتر کورش زیارتی، استادیار دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر - - - - -

دکتر محمد باقر احمدی، استادیار دانشکده علوم، بخش ریاضی - - - - -

دکتر عبدالعزیز عبدالهی، دانشیار دانشکده علوم، بخش ریاضی - - - - -

شهریور ۱۳۸۸

## تقدیم به :

مادر عزیزم

پدر مهربانم

همسر فداکارم

و خواهران عزیزم

به پاس محبت‌های بی دریغشان

## سپاسگزاری

با تشکر از استاد محترم جناب آقای دکتر زیارتی که مرا در این امر مهم یاری نمودند و همچنین اساتید گرانقدر جناب آقای دکتر احمدی و دکتر عبدالهی که با راهنمایی های ارزنده خود مسیر را برای من هموار نمودند.

## چکیده

### حل مسائل خوشه بندی با استفاده از بهینه سازی شبیه سازی حرارتی

به کوشش

#### زهرة السادات ناظمی

خوشه بندی فرایندی است که در طی آن مجموعه‌ای از نمونه‌ها به خوشه‌هایی تقسیم می‌شوند که اعضای هر خوشه بیشترین شباهت را به یکدیگر داشته باشند و خوشه‌های مختلف با یکدیگر بیشترین تفاوت را داشته باشند. خوشه بندی یکی از تکنیک‌های داده کاوی و آنالیز داده متعارف می‌باشد. در خوشه بندی داده‌ها، در مسائل با اندازه داده بزرگتر رسیدن به حل بهینه مشکل‌تر می‌باشد و در نتیجه مدت زمان لازم برای رسیدن به حل‌های قابل قبول طولانی‌تر می‌شود. یکی از مهمترین تکنیک‌های خوشه بندی، خوشه بندی بر مبنای K-means می‌باشد. در این خوشه بندی نمونه‌ها به K خوشه تقسیم می‌شوند. اگر چه الگوریتم K-means راحت و در بسیاری از مسائل سریع می‌باشد، اما دو مشکل اساسی دارد، یکی حساسیت به فرض اولیه و دیگری قرارگرفتن در می‌نیمم محلی می‌باشد. اگر چه با استفاده از الگوریتم‌های K-harmonic means و Fuzzy K-means می‌توان مشکل حساسیت به فرض اولیه را برطرف کرد، اما همچنان مشکل قرار گرفتن در می‌نیمم محلی وجود دارد. در این تحقیق ما روشی را برای حل مشکل قرار گرفتن در می‌نیمم محلی بر مبنای تکنین شبیه سازی حرارتی ارائه داده‌ایم. K-means (KM) و K-harmonic means (KHM) و Fuzzy K-means (FKM) سه الگوریتمی می‌باشند که در این تحقیق برای تاثیر اثر الگوریتم شبیه سازی حرارتی بر روی خوشه بندی مورد استفاده قرار گرفته‌اند. این الگوریتم‌ها همگی از نوع الگوریتم‌های خوشه بندی بر مبنای مرکز می‌باشند.

شبیه سازی حرارتی همانطور که از نامش پیداست، روشی بر مبنای گرم شدن و دوباره سرد شدن فلزات و رسیدن به می‌نیمم انرژی ساختار کریستالی می‌باشد و به همین خاطر در بیشتر سیستم‌ها برای یافتن می‌نیمم مطلق استفاده می‌شود. این الگوریتم اولین بار بوسیله متروپولیس برای یافتن آرایش تعادلی مجموعه‌ای از اتمها در یک دمای خاص پیشنهاد شد. این الگوریتم از نوع الگوریتم‌های فرا ابتکاری می‌باشد. مزیت اصلی الگوریتم شبیه سازی حرارتی نسبت به بقیه روش‌های فرا ابتکاری همچون الگوریتم‌های جستجوی ممنوع، ژنتیک، شبکه‌های عصبی، بهینه‌سازی مورچه‌ای، توانایی آن در رهایی از می‌نیمم محلی می‌باشد. مساله‌ای که در حل مشکل الگوریتم‌های خوشه بندی می‌تواند موثر باشد.

ما الگوریتم پیشنهادی را بر روی چندین دسته از داده‌های متعارف و مشهور مانند Iris و Wine و Breast cancer اجرا کرده‌ایم و مشاهده کرده‌ایم که با استفاده از الگوریتم شبیه سازی حرارتی توانسته‌ایم مشکلات موجود در الگوریتم‌های خوشه بندی همچون مساله حساسیت به فرض اولیه و قرار گرفتن در می‌نیمم محلی را به خوبی برطرف کنیم و بتوانیم به می‌نیمم مطلق در مقدار تابع هدف دست یابیم.

## فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فصل اول.....	۱
کلیات طرح.....	۱
فصل دوم.....	۴
خوشه بندی.....	۴
۱-۲ خوشه بندی چیست؟ .....	۴
۲-۲ هدف خوشه بندی .....	۷
۳-۲ خوشه‌بندی در مقابل طبقه‌بندی .....	۷
۴-۲ یادگیری با نظارت در مقابل یادگیری بدون نظارت .....	۸
۵-۲ کاربرد خوشه بندی .....	۹
۶-۲ چالش‌های موجود در روش‌های خوشه‌بندی .....	۱۰
۷-۲ خوشه‌بندی در مقابل چندی‌سازی برداری .....	۱۲
۸-۲ روش‌های خوشه‌بندی .....	۱۳
۹-۲ روش‌های خوشه‌بندی سلسله مراتبی .....	۱۴
۱۰-۲ روش خوشه‌بندی میانگین K .....	۱۵
۱-۱۰-۲ مثالی برای روش خوشه‌بندی میانگین K .....	۱۷
۲-۱۰-۲ مزایای الگوریتم خوشه بندی میانگین K .....	۲۰
۳-۱۰-۲ مشکلات روش خوشه‌بندی میانگین K .....	۲۰
۱۱-۲ الگوریتم خوشه‌بندی LBG .....	۲۱
۱۲-۲ الگوریتم خوشه بندی K-HARMONIC-MEANS .....	۲۲
۱-۱۲-۲ میانگین هارمونی .....	۲۳
۲-۱۲-۲ تابع هدف K-Harmonic means .....	۲۴
۱۳-۲ الگوریتم خوشه بندی فازی .....	۲۵
۱-۱۳-۲ خوشه بندی فازی چیست؟ .....	۲۶

۲۹	.....	۲-۱۳-۲ الگوریتم خوشه‌بندی FCM
۳۳	.....	۳-۱۳-۲ مزایای الگوریتم خوشه‌بندی FCM
۳۴	.....	۴-۱۳-۲ معایب الگوریتم خوشه‌بندی FCM
۳۴	.....	۱۴-۲ خوشه‌بندی بر اساس چگالی
۳۷	.....	۱-۱۴-۲ الگوریتم خوشه‌بندی بر اساس چگالی DBSCAN:
۳۸	.....	۲-۱۴-۲ الگوریتم سلسله‌مراتبی خوشه‌بندی بر اساس چگالی OPTICS:
۳۹	.....	۳-۱۴-۲ مزایای خوشه‌بندی بر اساس چگالی
۳۹	.....	۱۵-۲ معیارهای کارایی خوشه‌بندی
۴۲	.....	۱۶-۲ شاخص دون
۴۳	.....	۱۷-۲ آزمایش و مقایسه کارایی شاخص‌های اعتبارسنجی
۴۷	.....	<b>فصل سوم</b>
۴۷	.....	<b>الگوریتم شبیه‌سازی حرارتی</b>
۴۷	.....	۱-۳ مقدمه
۴۸	.....	۲-۳ شبیه‌سازی حرارتی
۵۰	.....	۳-۳ شرح الگوریتم شبیه‌سازی حرارتی
۵۱	.....	۴-۳ نکاتی در مورد تعیین پارامترهای شبیه‌سازی حرارتی
۵۱	.....	۵-۳ بلوک دیاگرام الگوریتم شبیه‌سازی حرارتی
۵۲	.....	۶-۳ الگوریتم پایه‌ای شبیه‌سازی حرارتی
۵۳	.....	۷-۳ تغییرات اضافی جهت اجرای الگوریتم
۵۴	.....	۸-۳ پیاده‌سازی الگوریتم به وسیله نرم‌افزار MATLAB
۵۹	.....	۹-۳ نتایج بدست آمده از اجرای برنامه MATLAB
۶۰	.....	۱۰-۳ اثبات همگرایی شبیه‌سازی حرارتی
۶۰	.....	۱۱-۳ انگیزه
۶۲	.....	۱۲-۳ زنجیره‌های مارکوف
۶۴	.....	۱۳-۳ تعریف توزیع مانا
۶۵	.....	۱۴-۳ قضیه ۱

۶۷	..... ۱۵-۳ قضیه ۲. (قانون قوی اعداد بزرگ)
۶۷	..... ۱۶-۳ قضیه ۳. (قضیه حد مرکزی)
۶۸	..... ۱۷-۳ انتگرالگیری
۶۹	..... ۱۸-۳ الگوریتم مترو پلیس
۷۰	..... ۱۹-۳ بهینه سازی مطلق
۷۱	..... ۲۰-۳ قضیه ۴
۷۲	..... ۲۱-۳ قضیه ۵
۷۳	..... ۲۲-۳ اثبات همگرایی
۷۵	..... فصل چهارم
۷۵	..... حل مساله خوشه بندی با استفاده از الگوریتم شبیه سازی حرارتی
۷۵	..... ۱-۴ مقدمه
۷۶	..... ۲-۴ استفاده از شبیه سازی حرارتی در حل مساله خوشه بندی
۷۷	..... ۳-۴ نرمال سازی داده
۷۸	..... فصل پنجم
۷۸	..... نتایج الگوریتم پیشنهادی
۷۹	..... ۱-۵ مشاهده اثر الگوریتم شبیه سازی حرارتی بر روی خوشه بندی
۸۴	..... ۲-۵ نتایج الگوریتم شبیه سازی حرارتی بر روی خوشه بندی داده‌های متعارف
۹۱	..... ۳-۵ نتایج شاخص‌های ارزیابی خوشه بندی
۹۳	..... مراجع

## فهرست جداول

صفحه	عنوان
۳۳	جدول ۱ : معیارهای تشابه بر اساس توابع فاصله مختلف
۹۰	جدول ۲ : تابع هدف شش الگوریتم به ازای ۱۰ بار اجرای برنامه بر روی داده IRIS
۹۰	جدول ۳ : تابع هدف شش الگوریتم به ازای ۱۰ بار اجرای برنامه بر روی داده WINE
۹۱	جدول ۴ : تابع هدف شش الگوریتم به ازای ۱۰ بار اجرای برنامه بر روی داده BREAST CANCER
۹۲	جدول ۵ : شاخص دون برای الگوریتم‌های مختلف

## فهرست شکلها

عنوان	صفحه
شکل ۱: خوشه بندی نمونه های ورودی	۵
شکل ۲: خوشه بندی وسایل نقلیه [۵]	۶
شکل ۳: تفاوت طبقه بندی و خوشه بندی (الف طبقه بندی ب) خوشه بندی [۶]	۸
شکل ۴: تفاوت بین روش های بالا به پایین با روش های پایین به بالا [۱۰]	۱۵
شکل ۵: مثالی برای روش خوشه بندی میانگین K [۵]	۲۰
شکل ۶: شکل سمت چپ تابع میانگین هارمونی و شکل سمت راست تابع می نیمم [۱۴]	۲۳
شکل ۷: مجموعه داده پروانه ای [۱۷]	۲۷
شکل ۸: خوشه بندی فازی داده [۱۷]	۲۸
شکل ۹: توزیع یک بعدی نمونه ها [۱۸]	۳۱
شکل ۱۰: خوشه بندی کلاسیک نمونه های ورودی [۱۸]	۳۱
شکل ۱۱: خوشه بندی فازی نمونه ها [۱۸]	۳۲
شکل ۱۲: یک همسایگی برای P دارای چگالی نقاط ۵ [۷]	۳۵
شکل ۱۳: P در دسترس مستقیم چگالی Q قرار دارد. [۷]	۳۵
شکل ۱۴: P در دسترس چگالی Q قرار دارد. [۷]	۳۶
شکل ۱۵: P متصل چگالی Q است. [۷]	۳۶
شکل ۱۶: خوشه بندی بر اساس چگالی [۷]	۳۷
شکل ۱۷: مثالی از روش خوشه بندی DBSCAN [۷]	۳۸

- شکل ۱۸: سلسله مراتبی خوشه‌بندی براساس چگالی OPTICS [Y] ..... ۳۹
- شکل ۱۹: مجموعه داده‌های بکار رفته برای مقایسه کارایی شاخص‌های اعتبارسنجی خوشه‌ها [۱۹] ..... ۴۴
- شکل ۲۰: مقادیر مربوط به شاخص‌های اعتبار بر روی نتایج حاصل از خوشه‌بندی داده‌ها کاملاً مجزا [۱۹] ..... ۴۴
- شکل ۲۱: مقادیر مربوط به شاخص‌های اعتبار بر روی نتایج حاصل از خوشه‌بندی داده‌ها حلقوی [۱۹] ..... ۴۵
- شکل ۲۲: دو حالت خوشه‌بندی درست و نادرست داده‌های با شکل دلخواه [۱۹] ..... ۴۶
- شکل ۲۳: مقادیر شاخص‌های اعتبار بر روی نتایج حاصل از خوشه‌بندی داده‌ها با شکل دلخواه [۱۹] ..... ۴۶
- شکل ۲۴: بلوک دیاگرام الگوریتم شبیه‌سازی حرارتی [۴] ..... ۵۲
- شکل ۲۵: نمودار تابع F در بازه (10,10-) ..... ۵۴
- شکل ۲۶: تصویر تابع F بر روی صفحه (X<sub>1</sub>, X<sub>2</sub>) برای اجرای برنامه در مرحله اول ..... ۵۵
- شکل ۲۷: تصویر تابع F بر روی صفحه (X<sub>1</sub>, X<sub>2</sub>) برای اجرای برنامه در مرحله دوم ..... ۵۶
- شکل ۲۸: تصویر تابع F بر روی صفحه (X<sub>1</sub>, X<sub>2</sub>) برای اجرای برنامه در مرحله سوم ..... ۵۷
- شکل ۲۹: تصویر تابع F بر روی صفحه (X<sub>1</sub>, X<sub>2</sub>) برای اجرای برنامه در مرحله چهارم ..... ۵۸
- شکل ۳۰: تصویر تابع F بر روی صفحه (X<sub>1</sub>, X<sub>2</sub>) برای اجرای برنامه در مرحله پنجم ..... ۵۹
- شکل ۳۱: خوشه بندی با استفاده از الگوریتم KM ..... ۸۰
- شکل ۳۲: خوشه بندی با استفاده از الگوریتم SAKM ..... ۸۱
- شکل ۳۳: خوشه بندی با استفاده از الگوریتم KM در دو مرحله ..... ۸۲
- شکل ۳۴: خوشه بندی با استفاده از الگوریتم SAKM ..... ۸۳
- شکل ۳۵: نتایج تابع هدف شش الگوریتم بر روی داده IRIS ..... ۸۶
- شکل ۳۶: نتایج تابع هدف شش الگوریتم بر روی داده WINE ..... ۸۸
- شکل ۳۷: نتایج تابع هدف شش الگوریتم بر روی داده BREAST CANCER ..... ۸۹
- شکل ۳۸: نتایج شاخص دون به ازای الگوریتم‌های مختلف ..... ۹۲

## فصل اول

### کلیات طرح

ما در جهانی پر از داده زندگی می‌کنیم. هرروزه انسان‌ها با حجم وسیعی از اطلاعات روبه‌رو هستند که باید آنها را ذخیره سازی یا نمایش دهند. یکی از روش‌های حیاتی کنترل و مدیریت این داده‌ها، کلاس بندی<sup>۱</sup> و خوشه بندی<sup>۲</sup> داده‌های با خواص مشابه، درون مجموعه‌ای از دسته‌ها یا خوشه‌ها می‌باشد. امروزه، خوشه بندی نقش حیاتی در روش‌های بازیابی اطلاعات دارد. اساساً سیستم‌های خوشه بندی همراه با نظارت یا بدون نظارت هستند.

برخلاف کلاس بندی در خوشه بندی، گروه‌ها از قبل مشخص نمی‌باشند و همچنین معلوم نیست که بر حسب کدام خصوصیات گروه بندی صورت می‌گیرد. در نتیجه پس از انجام خوشه بندی باید یک فرد خبره خوشه‌های ایجاد شده را تفسیر کند و در بعضی مواقع لازم است که پس از بررسی خوشه‌ها بعضی از پارامترهایی که در خوشه بندی در نظر گرفته شده‌اند ولی بی‌ربط بوده یا اهمیت چندانی ندارند حذف شده و جریان خوشه بندی از اول صورت گیرد.

هدف نهایی خوشه بندی این است که داده‌های موجود را به چند گروه تقسیم کنند و در این تقسیم بندی، داده‌های گروه‌های مختلف باید حداکثر تفاوت ممکن را به هم داشته باشند و داده‌های موجود در یک گروه باید بسیار به هم شبیه باشند. در خوشه بندی از الگوریتم‌های متعددی استفاده می‌شود که هدف همه این الگوریتم‌ها رسیدن به جواب بهینه می‌باشد. [۱]

---

<sup>۱</sup> Classification  
<sup>۲</sup> Clustering

سیستم‌های پیچیده اجتماعی، تعداد زیادی از مسائل دارای طبیعت ترکیباتی<sup>۱</sup> را پیش روی قرار می‌دهند. مسیر کامیون‌های حمل و نقل باید تعیین شود، انبارها یا نقاط فروش محصولات باید جایابی شوند، شبکه‌های ارتباطی باید طراحی شوند، کانتینرها باید بارگیری شوند، رابط‌های رادیویی می‌بایست دارای فرکانس مناسب باشند، مواد اولیه چوب، فلز، شیشه و چرم باید به اندازه‌های لازم بریده شوند، از این دست مسائل بی‌شمارند. تئوری پیچیدگی به ما می‌گوید که مسائل ترکیباتی اغلب پلی‌نومیال<sup>۲</sup> نیستند. این مسائل در اندازه‌های کاربردی و عملی خود به قدری بزرگ هستند که نمی‌توان جواب بهینه آنها را در مدت زمان قابل پذیرش به دست آورد. با این وجود، این مسائل باید حل شوند و بنابراین چاره‌ای نیست که به جواب‌های زیر بهینه<sup>۳</sup> بسنده نمود به گونه‌ای که دارای کیفیت قابل پذیرش بوده و در مدت زمان قابل پذیرش به دست آیند.

چندین رویکرد برای طراحی جواب‌هایی با کیفیت قابل پذیرش تحت محدودیت زمانی قابل پذیرش پیشنهاد شده است. الگوریتم‌هایی هستند که می‌توانند یافتن جواب‌های خوب در فاصله مشخصی از جواب بهینه را تضمین کنند که به آنها الگوریتم‌های تقریبی می‌گویند. الگوریتم‌های دیگری نیز هستند که تضمین می‌دهند با احتمال بالا جواب نزدیک بهینه تولید کنند که به آنها الگوریتم‌های احتمالی گفته می‌شود. جدای از این دو دسته، می‌توان الگوریتم‌هایی را پذیرفت که هیچ تضمینی در ارائه جواب ندارند اما براساس شواهد و سوابق نتایج آنها، به طور متوسط بهترین تقابل کیفیت و زمان حل برای مسئله مورد بررسی را به همراه داشته‌اند. به این الگوریتم‌ها، الگوریتم‌های ابتکاری گفته می‌شود [۲]

الگوریتم‌های ابتکاری عبارتند از معیارها، روش‌ها یا اصولی برای تصمیم‌گیری بین چند گزینه خط‌مشی و انتخاب اثربخش‌ترین برای دستیابی به اهداف مورد نظر. الگوریتم‌های ابتکاری نتیجه برقراری اعتدال بین دو نیاز هستند: نیاز به ساخت معیارهای ساده و در همان زمان توانایی تمایز

---

<sup>۱</sup> combinatorial

<sup>۲</sup> polynomial

<sup>۳</sup> Sub optimal

درست بین انتخاب‌های خوب و بد. برای بهبود این الگوریتم‌ها از اواسط دهه هفتاد، موج تازه‌ای از رویکردها آغاز گردید. این رویکردها شامل الگوریتم‌هایی است که صریحاً یا به صورت ضمنی تقابل بین ایجاد تنوع جستجو (وقتی علائمی وجود دارد که جستجو به سمت مناطق بد فضای جستجو می‌رود) و تشدید جستجو (با این هدف که بهترین جواب در منطقه مورد بررسی را پیدا کند) را مدیریت می‌کنند. این الگوریتم‌ها فرا ابتکاری نامیده می‌شوند. از بین این الگوریتم‌ها می‌توان به موارد زیر اشاره کرد: [۳]

- شبیه‌سازی حرارتی<sup>۱</sup>
- جستجوی ممنوع<sup>۲</sup>
- الگوریتم‌های ژنتیک<sup>۳</sup>
- شبکه‌های عصبی مصنوعی<sup>۴</sup>
- بهینه‌سازی مورچه‌ای یا الگوریتم‌های مورچه<sup>۵</sup>

در این تحقیق ما از الگوریتم شبیه سازی حرارتی جهت مسائل خوشه بندی استفاده خواهیم کرد. [۴]

---

<sup>۱</sup> Simulated annealing (sa)

<sup>۲</sup> Tabu search (ts)

<sup>۳</sup> Genetic algorithms (ga)

<sup>۴</sup> Neural networks

<sup>۵</sup> Ant colony optimization (aco)

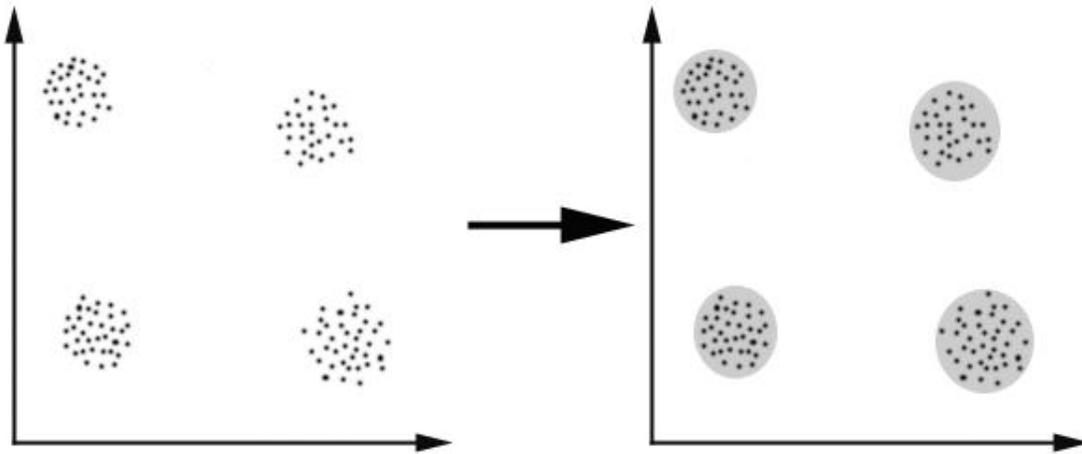
<sup>۶</sup> Clustering

## فصل دوم

### خوشه بندی

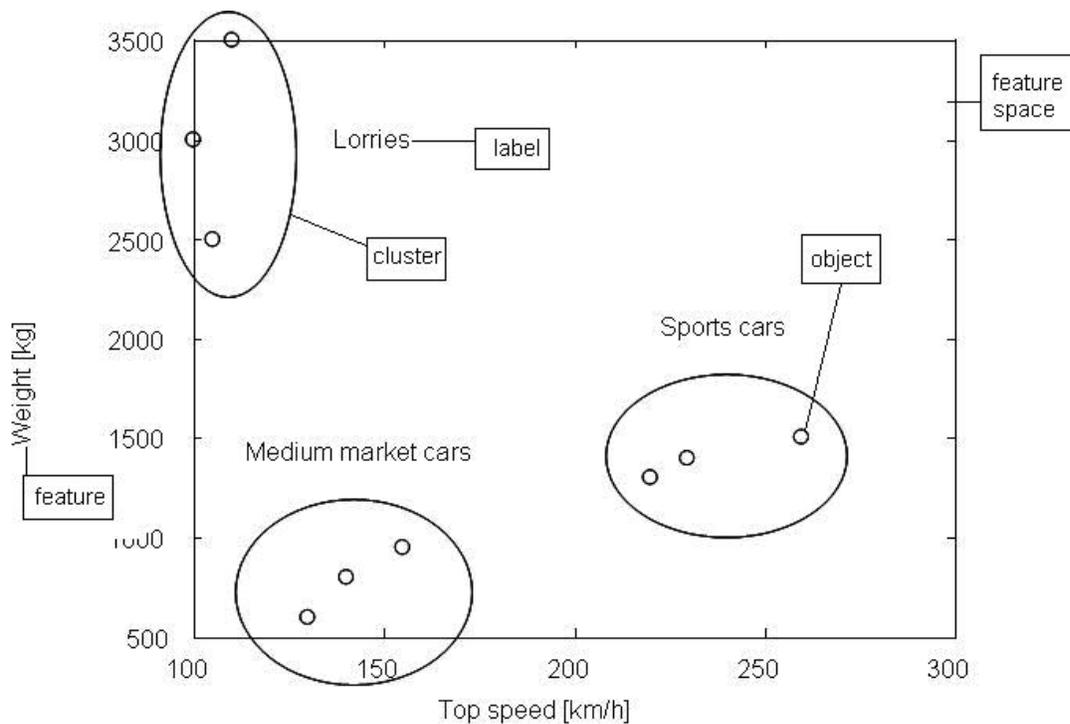
#### ۱-۲ خوشه بندی چیست؟

خوشه بندی یکی از شاخه‌های یادگیری بدون نظارت می‌باشد و فرآیند خودکاری است که در طی آن، نمونه‌ها به دسته‌هایی که اعضای آن مشابه یکدیگر می‌باشند تقسیم می‌شوند که به این دسته‌ها خوشه گفته می‌شود. بنابراین خوشه مجموعه‌ای از اشیاء می‌باشد که در آن اعضای مجموعه با یکدیگر مشابه بوده و با اشیاء موجود در خوشه‌های (مجموعه‌های) دیگر غیر مشابه می‌باشند. برای مشابه بودن می‌توان معیارهای مختلفی را در نظر گرفت. مثلاً می‌توان معیار فاصله را برای خوشه بندی مورد استفاده قرار داد و اشیائی را که به یکدیگر نزدیکتر هستند را به عنوان یک خوشه در نظر گرفت که به این نوع خوشه بندی، خوشه بندی مبتنی بر فاصله نیز گفته می‌شود. به عنوان مثالی از خوشه بندی، در شکل ۱ نمونه‌های ورودی در سمت چپ به چهار خوشه مشابه شکل سمت راست تقسیم می‌شوند. در این مثال هر یک از نمونه‌های ورودی به یکی از خوشه‌ها تعلق دارد و نمونه‌ای وجود ندارد که متعلق به بیش از یک خوشه باشد.



شکل ۱: خوشه بندی نمونه های ورودی

به عنوان یک مثال دیگر شکل ۲ را در نظر بگیرید. در این شکل هر یک از دایره های کوچک یک وسیله نقلیه (شیء) را نشان می دهد که با ویژگی های وزن و حداکثر سرعت مشخص شده اند. هر یک از بیضی ها یک خوشه می باشد و عبارت کنار هر بیضی برچسب آن خوشه را نشان می دهد. کل دستگاه مختصات که نمونه ها در آن نشان داده شده اند را فضای ویژگی می گویند.



شکل ۲: خوشه بندی وسایل نقلیه [۵]

همانطور که در شکل می بینید وسایل نقلیه به سه خوشه تقسیم شده اند. برای هر یک از این خوشه ها می توان یک نماینده در نظر گرفت، مثلاً می توان میانگین وسایل نقلیه باری را محاسبه کرد و به عنوان نماینده خوشه وسایل نقلیه باری معرفی نمود. در واقع الگوریتم های خوشه بندی اغلب بدین گونه اند که یک سری نماینده اولیه برای نمونه های ورودی در نظر گرفته می شود و سپس از روی میزان تشابه نمونه ها با این نماینده ها، مشخص می شود که نمونه به کدام خوشه تعلق دارد و بعد از این مرحله نماینده های جدید از روی نمونه های متعلق به خوشه محاسبه می شوند و دوباره نمونه ها با این نماینده ها مقایسه می شوند تا مشخص شود که به کدام خوشه تعلق دارند و این کار آنقدر تکرار می شود تا زمانی که نماینده های خوشه ها تغییری نکنند. [۵]

## ۲-۲ هدف خوشه بندی

هدف خوشه بندی یافتن خوشه‌های مشابه از اشیاء در بین نمونه‌های ورودی می‌باشد، اما چگونه می‌توان گفت که یک خوشه بندی مناسب است و خوشه بندی دیگر مناسب نیست؟ در واقع هیچ معیار مطلق برای بهترین خوشه بندی وجود ندارد بلکه این بستگی به مساله و نظر کاربر دارد که باید تصمیم بگیرد که آیا نمونه‌ها بدرستی خوشه بندی شده‌اند یا خیر. با این حال معیارهای مختلفی برای خوب بودن یک خوشه بندی ارائه شده است که می‌توانند کاربر را برای رسیدن به یک خوشه بندی مناسب راهنمایی کند که در قسمت معیارهای کارایی چند نمونه از این معیارها آورده شده است. یکی از مسایل مهم در خوشه بندی انتخاب تعداد خوشه‌ها می‌باشد. در بعضی از الگوریتم‌ها تعداد خوشه‌ها از قبل مشخص شده است و در بعضی دیگر خود الگوریتم تصمیم می‌گیرد که داده‌ها به چند خوشه تقسیم شوند.

## ۳-۲ خوشه‌بندی در مقابل طبقه‌بندی

خوشه بندی با طبقه بندی متفاوت است. در طبقه بندی نمونه‌های ورودی برچسب گذاری شده‌اند ولی در خوشه بندی نمونه‌های ورودی دارای برچسب اولیه نمی‌باشند و در واقع با استفاده از روشهای خوشه بندی است که داده‌های مشابه مشخص و بطور ضمنی برچسب گذاری می‌شوند. در بسیاری از موارد قبل از عملیات طبقه بندی داده‌ها، یک خوشه بندی روی نمونه‌ها انجام گرفته و سپس مراکز خوشه‌های حاصل را محاسبه می‌کنند و یک برچسب به خوشه‌ها نسبت می‌دهند و سپس عملیات طبقه بندی را برای نمونه‌های ورودی جدید انجام می‌دهند. در طبقه‌بندی هر داده به یک طبقه (کلاس) از پیشین مشخص شده تخصیص می‌یابد ولی در خوشه‌بندی هیچ اطلاعی از کلاس‌های موجود درون داده‌ها وجود ندارد و به عبارتی خود خوشه‌ها نیز از داده‌ها استخراج می‌شوند. در شکل زیر تفاوت بین خوشه‌بندی و طبقه‌بندی بهتر نشان داده شده است. [۶]