聚类与KMeans

与分类、序列标注等任务不同，聚类是在事先并不知道任何样本标签的情况下，通过数据之间的内在关系把样本划分为若干类别，使得同类别样本之间的相似度高，不同类别之间的样本相似度低（即增大类内聚，减少类间距）。

聚类属于非监督学习，K均值聚类是最基础常用的聚类算法。它的基本思想是，通过迭代寻找K个簇（Cluster）的一种划分方案，使得聚类结果对应的损失函数最小。其中，损失函数可以定义为各个样本距离所属簇中心点的误差平方和：

$$J(c,\mu) = \sum_{i=1}^{M} ||x_i - \mu_{c_i}||^2$$

具体步骤

KMeans的核心目标是将给定的数据集划分成K个簇（K是超参），并给出每个样本数据对应的中心点。具体步骤非常简单，可以分为4步：

（1）数据预处理。主要是标准化、异常点过滤。

（2）随机选取K个中心

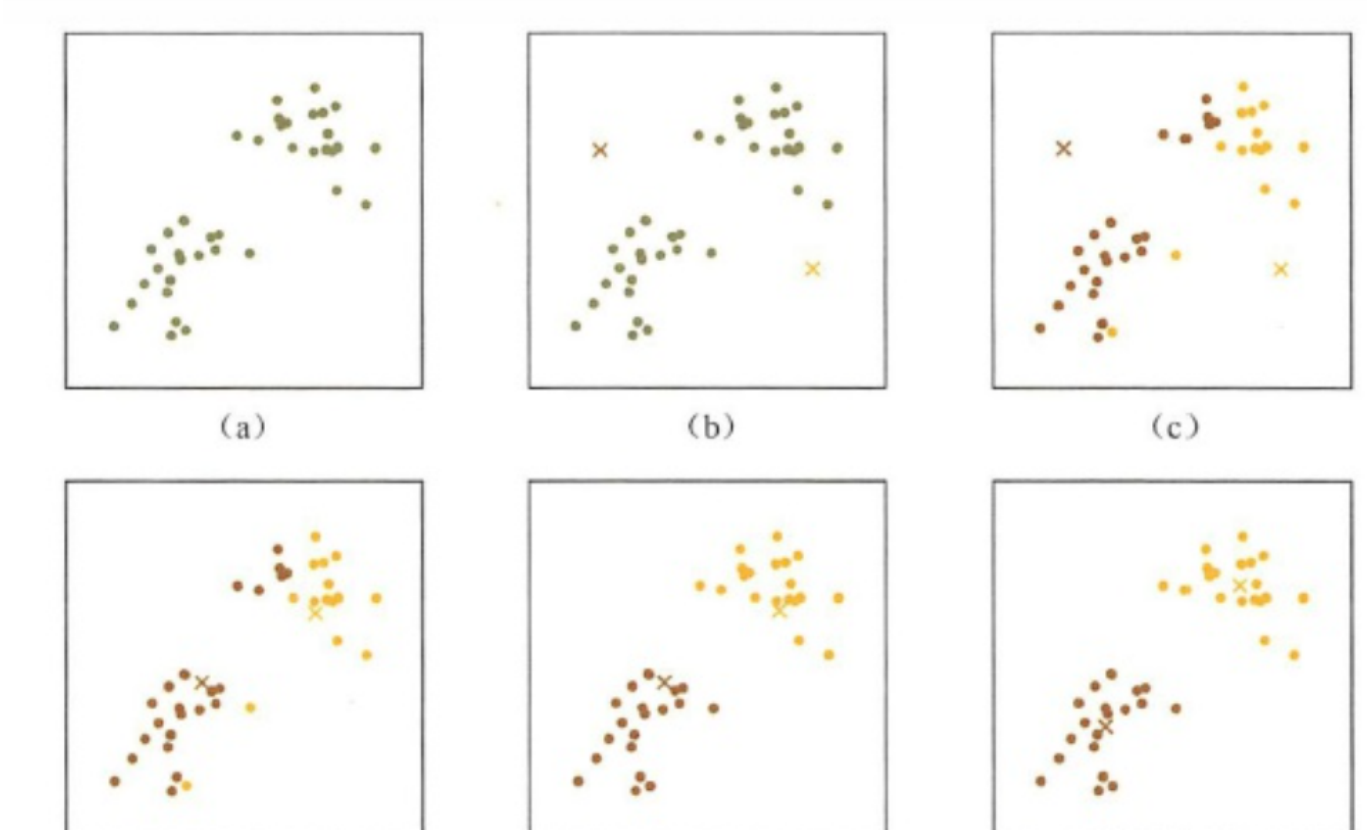
（3）定义损失函数J

（4）令t=0,1,2,... 为迭代步数，重复如下过程直到J收敛：

（4.1）对于每一个样本，将其分配到距离最近的中心

（4.2）对于每一个类中心k，重新计算该类的中心

KMeans最核心的部分就是先固定中心点，调整每个样本所属的类别来减少J；再固定每个样本的类别，调整中心点继续减小J。两个过程交替循环，J单调递减直到最（极）小值，中心点和样本划分的类别同时收敛。



优缺点与优化方法

KMenas的优点：

- 高效可伸缩，计算复杂度`O（NKt）`为接近于线性（N是数据量，K是聚类总数，t是迭代轮数）。
- 收敛速度快，原理相对通俗易懂，可解释性强。

KMeans也有一些明显的缺点：

- 受初始值和异常点影响，聚类结果可能不是全局最优而是局部最优。
- K是超参数，一般需要按经验选择
- 样本点只能划分到单一的类中

数据集处理

对数据集进行聚类，希望将其聚为3类，将数据集读取为Instances对象，创建SimpleKMeans对象，并setNumCluster(3)，通过setPreserveInstancesOrder(true);来保留顺序。考虑输出聚类的同时，输出每个数据分别被分进了哪个类。

运行结果

```
Final cluster centroids:
                           Cluster#
Attribute      Full Data          0          1          2
                 (600.0)    (149.0)    (250.0)    (201.0)
=============================================================
age               42.395    41.8658      47.06    36.9851
sex               FEMALE     FEMALE     FEMALE       MALE
region        INNER_CITY       TOWN INNER_CITY INNER_CITY
income       27524.0312 27313.8572 31400.3573 22858.5307
married              YES         NO        YES        YES
children               0          0          0          0
car                   NO         NO        YES         NO
save_act             YES        YES        YES         NO
current_act          YES        YES        YES        YES
mortgage              NO         NO         NO         NO
pep                   NO         NO         NO        YES
```

```
Instance 0 -> Cluster 2
Instance 1 -> Cluster 2
Instance 2 -> Cluster 1
Instance 3 -> Cluster 0
Instance 4 -> Cluster 1
Instance 5 -> Cluster 0
Instance 6 -> Cluster 2
Instance 7 -> Cluster 1
Instance 8 -> Cluster 1
Instance 9 -> Cluster 1
Instance 10 -> Cluster 0
Instance 11 -> Cluster 1
Instance 12 -> Cluster 0
Instance 13 -> Cluster 1
Instance 14 -> Cluster 2
Instance 15 -> Cluster 1
Instance 16 -> Cluster 0
Instance 17 -> Cluster 1
Instance 18 -> Cluster 1
Instance 19 -> Cluster 1
Instance 20 -> Cluster 2
```