ТРУДЫ ИНСТИТУТА МАТЕМАТИКИ И МЕХАНИКИ УрО РАН

Том 21 № 3 2015

УДК 519.16+519.85

ПОЛИНОМИАЛЬНАЯ АППРОКСИМАЦИОННАЯ СХЕМА ДЛЯ ОДНОЙ ЗАДАЧИ РАЗБИЕНИЯ КОНЕЧНОГО МНОЖЕСТВА НА ДВА КЛАСТЕРА[1]

А. В. Долгушев, А. В. Кельманов, В. В. Шенмайер

Рассматривается NP-трудная в сильном смысле задача разбиения конечного множества точек евклидова пространства на два кластера заданных мощностей по критерию минимума суммы по обоим кластерам внутрикластерных сумм квадратов расстояний от элементов кластеров до их центров. Предполагается, что центр одного из искомых кластеров задан (без ограничения общности, в начале координат), а центр другого неизвестен и определяется как среднее значение по всем элементам, образующим этот кластер. Предложена полиномиальная аппроксимационная схема (PTAS).

Ключевые слова: кластерный анализ, евклидово пространство, NP-трудная задача, PTAS.

A. V. Dolgushev, A. V. Kel'manov, V. V. Shenmaier. Polynomial-time approximation scheme for a problem of partitioning a finite set into two clusters.

We consider the strongly NP-hard problem of partitioning a finite set of points of Euclidean space into two clusters of given cardinalities under the minimum criterion for the sum over the clusters of the intracluster sums of squared distances from elements of the cluster to its center. It is assumed that the center of one of the clusters is given (without loss of generality, at the origin). The center of the second cluster is unknown and is determined as the mean value over all elements in this cluster. A polynomial-time approximation scheme (PTAS) is provided.

Keywords: cluster analysis, Euclidean space, NP-hard problem, PTAS.

Введение

Предметом исследования работы является одна из NP-трудных в сильном смысле квадратичных задач би-разбиения конечного множества точек евклидова пространства. Цель исследования — обоснование полиномиальной приближенной схемы (PTAS) для ее решения.

Исследование мотивировано актуальностью задачи, в частности, в статистическом анализе данных, распознавании образов, компьютерной геометрии, а также в естественно-научных и технических приложениях, связанных с классификацией и интерпретацией наблюдаемых данных (см., например, [4; 9; 11–16; 18] и цитированные там работы).

К числу наиболее известных [2] задач анализа данных и распознавания образов относится задача MSSC (Minimum Sum-of-Squares Clustering) разбиения конечного множества точек евклидова пространства на заданное число кластеров по критерию минимума суммы по всем кластерам суммы квадратов внутрикластерных расстояний от элементов кластера до его геометрического центра (центроида), который определяется как среднее значение по всем элементам кластера. Двухкластерный — базовый — вариант задачи имеет следующую формулировку.

З а д а ч а Minimum Sum-of-Squares 2-Clustering (2-MSSC). Дано: конечное множество $\mathcal{X}$ точек из $\mathbb{R}^d$. Найти разбиение множества $\mathcal{X}$ на два непустых кластера $\mathcal{C}_1$ и $\mathcal{C}_2$ такое, что

$$\sum_{x\in\mathcal{C}_1}\|x-\overline{x}(\mathcal{C}_1)\|^2+\sum_{x\in\mathcal{C}_2}\|x-\overline{x}(\mathcal{C}_2)\|^2\to\min,$$

где $\overline{x}(\mathcal{C}_j)=1/|C_j|\sum\limits_{x\in\mathcal{C}_j}x$ — геометрические центры (центроиды) кластеров ($j=1,2$).

[1]Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты 13-07-00070, 15-01-00462 и 15-01-00976).

Геометрический смысл задачи ясен из ее формулировки. В статистической практике задача возникает при решении следующей задачи проверки гипотез. Имеется неоднородная выборка из двух d-мерных распределений. Соответствие элементов выборки распределению неизвестно. Требуется проверить гипотезу о том, что элементы этой выборки соответствуют двум гауссовским распределениям с неизвестными средними и одной и той же известной диагональной ковариационной матрицей с одинаковыми диагональными элементами.

Несмотря на полувековую известность задачи 2-MSSC, ее труднорешаемость установлена лишь несколько лет назад в [1]. В настоящей работе рассматривается близкая в постановочном плане, но не эквивалентная задача двухкластерного разбиения. В этой задаче так же, как и в задаче 2-MSSC, требуется разбить конечное множество точек евклидова пространства на два кластера по критерию минимума суммы по обоим кластерам внутрикластерных сумм. При этом одна из внутрикластерных сумм такая же, как и в задаче MSSC, т. е. это сумма квадратов расстояний от элементов кластера до неизвестного центроида $\overline{x}(\mathcal{C}_1)$, а другая — сумма квадратов расстояний от элементов кластера до заданного в произвольной точке желаемого центра. Без ограничения общности заданным центром может служить начало координат. Поэтому в целевой функции рассматриваемой ниже задачи вместо центроида $\overline{x}(\mathcal{C}_2)$ фигурирует центр 0 (см. следующий раздел). Кроме того, предполагается, что мощности кластеров заданы на входе.

Как и задача 2-MSSC, рассматриваемая задача индуцируется, в частности, проблемой проверки статистической гипотезы о том, что имеющаяся в распоряжении выборка неоднородна и содержит элементы, принадлежащие двум гауссовским распределениям с такими же (как в проблеме, порождающей задачу MSSC) свойствами ковариационных матриц. Отличие лишь в предположении о том, что у одного из распределений среднее предполагается равным нулю, а у другого — неизвестным. При этом известны размеры подвыборок, но соответствие их элементов распределению неизвестно. Содержательные проблемы из области помехоустойчивого анализа данных, которые также моделируют рассматриваемую задачу, можно найти, например, в [4; 9; 11; 14; 18].

Математическая формулировка задачи приведена в следующем разделе. Там же приведены характеристики существующих алгоритмов. Здесь лишь отметим, что из сильной NP-трудности задачи (см. следующий раздел), имеющей числовые входы, следует, что согласно [3; 17] для нее не существует ни точного полиномиального, ни точного псевдополиномиального алгоритмов, ни полностью полиномиальной приближенной схемы FPTAS, если $P \neq NP$. Поэтому представляет интерес выяснение вопроса аппроксимируемости задачи. В частности, актуален вопрос о построении схемы PTAS. В настоящей работе такая схема обоснована.

1. Формулировка задачи, известные и полученные результаты

Рассматриваемая задача, некоторые ее обобщения, а также полиномиально эквивалентная ей задача на максимум изучались в [4; 5; 7–18]. Задача имеет следующую формулировку.

Задача 1: Minimum Sum-of-Squares 2-Clustering with Given Center of One Cluster and Cluster Cardinalities. Дано: конечное множество $\mathcal{X}$ точек из $\mathbb{R}^d$ и натуральное число k. Найти разбиение множества $\mathcal{X}$ на два непустых кластера $\mathcal{C}$ и $\mathcal{X} \setminus \mathcal{C}$ такое, что

$$f(\mathcal{C}) = \sum_{x \in \mathcal{C}} \|x - \overline{x}(\mathcal{C})\|^2 + \sum_{x \in \mathcal{X} \setminus \mathcal{C}} \|x\|^2 \to \min,$$

где $\overline{x}(\mathcal{C}) = 1/|\mathcal{C}| \sum\limits_{x \in \mathcal{C}} x$ — геометрический центр (центроид) кластера $\mathcal{C}$ при ограничении $|\mathcal{C}| = k$.

Эта задача полиномиально эквивалентна [11] задаче Subset with the Longest Vector Sum (LVS) максимизации нормы суммы векторов подмножества заданной мощности, которая изучалась в [4;7;9;14–16]. Из указанной полиномиальной эквивалентности и результатов [14–16] о сложности задачи LVS следует, что задача 1 NP-трудна в сильном смысле. При этом в случае фиксированной размерности пространства задача 1 полиномиально разрешима за время $\mathcal{O}(d^2n^{2d})$, где n — мощность входного множества $\mathcal{X}$, что является следствием соответствующих результатов для задачи LVS [10].

К числу других, найденных к настоящему времени алгоритмических решений, относятся следующие. В [11] предложен 2-приближенный алгоритм, трудоемкость которого есть величина $\mathcal{O}(dn^2)$. В [18] предложен рандомизированный алгоритм, который в случае $k \geq \beta n$ для некоторого $\beta \in (0,1)$ при заданных относительной погрешности ε и вероятности несрабатывания алгоритма γ находит $(1+\varepsilon)$-приближенное решение задачи за время $\mathcal{O}(2^m d(m+n))$, где $m = \max\bigl(4/(\beta\gamma\varepsilon),\, 8/\beta \log(2/\gamma)\bigr)$, линейное по n и d при фиксированных значениях β, γ и ε. Там же найдены условия, при которых этот алгоритм асимптотически точен и имеет трудоемкость $\mathcal{O}(dn^2)$. В [5] для случая фиксированной размерности d и целочисленных координат точек построен точный псевдополиномиальный алгоритм, имеющий трудоемкость $\mathcal{O}(n(kD)^d)$, где D — максимальное абсолютное значение координат входных точек. Для случая, когда размерность пространства фиксирована, также существует и полностью полиномиальная приближенная схема (FPTAS) с трудоемкостью $\mathcal{O}(n^2(1/\varepsilon)^{d/2})$ [17].

Основной результат настоящей работы — схема PTAS для общего случая, когда размерность пространства не фиксирована (d принадлежит входу задачи). Предложенная схема позволяет решать задачу 1 с произвольной относительной погрешностью ε за время $\mathcal{O}(dn^{2/\varepsilon+1} \times (9/\varepsilon)^{3/\varepsilon})$. Представленные результаты получены путем развития подхода, предложенного в работе [19] при построении полиномиальной приближенной схемы для задачи поиска подмножества векторов.

2. Геометрические основы алгоритма

Положим

$$F(y,\mathcal{C}) = \sum_{x\in\mathcal{C}} \|x-y\|^2 + \sum_{x\in\mathcal{X}\setminus\mathcal{C}} \|x\|^2, \quad y \in \mathbb{R}^d, \quad \mathcal{C} \subseteq \mathcal{X}. \tag{1}$$

Тогда $f(\mathcal{C}) = F(\overline{x}(\mathcal{C}),\mathcal{C})$ и справедливы следующие свойства функции (1).

С в о й с т в о 1. Для произвольной точки $y \in \mathbb{R}^q$ и конечного множества $\mathcal{C} \subset \mathbb{R}^q$ имеет место равенство

$$F(y,\mathcal{C}) = f(\mathcal{C}) + |\mathcal{C}|\, \|y-\overline{x}(\mathcal{C})\|^2. \tag{2}$$

Действительно,

$$F(y,\mathcal{C}) = \sum_{x\in\mathcal{C}} \|x-\overline{x}(\mathcal{C})\|^2 - \sum_{x\in\mathcal{C}} 2\,\langle x-\overline{x}(\mathcal{C}), y-\overline{x}(\mathcal{C})\rangle + \sum_{x\in\mathcal{C}} \|y-\overline{x}(\mathcal{C})\|^2 + \sum_{x\in X\setminus\mathcal{C}} \|x\|^2,$$

где $\langle\cdot\,,\cdot\rangle$ — скалярное произведение. Но сумма первого и последнего слагаемого в полученном выражении равна $f(\mathcal{C})$, третье слагаемое равно $|\mathcal{C}|\,\|y-\overline{x}(\mathcal{C})\|^2$, а второе равно нулю в силу того, что $\sum_{x\in\mathcal{C}} x = |\mathcal{C}|\,\overline{x}(\mathcal{C})$.

С в о й с т в о 2. Для любого фиксированного подмножества $\mathcal{C}$ минимум функции $F(y,\mathcal{C})$ по y достигается в точке $y = \overline{x}\,(\mathcal{C})$ и равен $f(\mathcal{C})$.

Справедливость следует из (2).

Для произвольной точки $y \in \mathbb{R}^d$ определим множество $\mathcal{C}^y$, состоящее либо из k точек множества $\mathcal{X}$, имеющих наибольшие проекции на луч из начала координат в точку y, если эта точка не равна нулевому вектору, либо из произвольных k точек множества $\mathcal{X}$ — в противном случае.

С в о й с т в о 3. Для любой фиксированной точки $y \in \mathbb{R}^d$ минимум функции $F(y,\mathcal{C})$ по всем k-элементным подмножествам $\mathcal{C}$ достигается на подмножестве $\mathcal{C}^y$.

Справедливость свойства следует из равенства

$$F(y,\mathcal{C}) = \sum_{x\in\mathcal{X}} \|x\|^2 + k\,\|y\|^2 - 2\sum_{x\in\mathcal{C}}\langle x, y\rangle,$$

в правой части которого первые два члена — константы.

Свойство 2 показывает, что приближенное решение задачи 1 может быть найдено с помощью аппроксимации центроида $\overline{x}\,(\mathcal{C}^*)$ оптимального кластера $\mathcal{C}^*$ некоторой построенной специальным образом точкой y из $\mathbb{R}^d$. При этом в силу свойства 3 справедливо неравенство $F(y,\mathcal{C}^y) \le F(y,\mathcal{C}^*)$, и, следовательно, в соответствии с (2) абсолютная ошибка аппроксимации $F(y,\mathcal{C}^y) - f(\mathcal{C}^*)$ не превосходит величины $k\,\|y - \bar{x}(\mathcal{C}^*)\|^2$. Фактически, эти наблюдения показывают, что приближенное решение задачи 1 можно искать путем выбора наилучшего решения в семействе решений $\mathcal{C}^y$, построенных для точек y, принадлежащих некоторому конечному множеству — специально построенной сетке с шагом, определяющим погрешность решения.

Обозначим через

$$\varepsilon(y,\mathcal{C}) = \frac{F(y,\mathcal{C}) - f(\mathcal{C})}{f(\mathcal{C})}, \quad y\in\mathbb{R}^d, \quad \mathcal{C}\subseteq\mathcal{X}, \tag{3}$$

относительную погрешность приближения значения функции $f(\mathcal{C})$ значением функции $F(y,\mathcal{C})$.

Лемма 1. *Пусть y — произвольная точка пространства $\mathbb{R}^d$. Тогда для относительной погрешности аппроксимации оптимального значения $f(\mathcal{C}^*)$ значением $f(\mathcal{C}^y)$ на допустимом подмножестве имеет место оценка*

$$\frac{f(\mathcal{C}^y) - f(\mathcal{C}^*)}{f(\mathcal{C}^*)} \le \varepsilon(y,\mathcal{C}^*).$$

Доказательство. Действительно, в силу свойств 2 и 3 имеем $f(\mathcal{C}^y) \le F(y,\mathcal{C}^y) \le F(y,\mathcal{C}^*)$. Отсюда следует справедливость леммы.

Иными словами, относительная погрешность $\varepsilon(y,\mathcal{C}^*)$ приближения к оптимальному значению $f(\mathcal{C}^*)$ значения функции $F(y,\mathcal{C}^*)$ в некоторой точке y является верхней оценкой для относительной погрешности аппроксимации оптимального значения $f(\mathcal{C}^*)$ значением целевой функции $f(\mathcal{C}^y)$ на допустимом решении. Этот факт используется ниже при оценивании погрешности приближения (в теореме 2).

Лемма 2. *Пусть y — произвольная точка из $\mathbb{R}^d$ и $v = v(y,\mathcal{C})$ — ближайшая к центроиду $\overline{x}(\mathcal{C})$ точка, лежащая на одном из множества лучей, проведенных из y во все точки множества $\mathcal{C}$. Тогда для относительной погрешности приближения значения функции $f(\mathcal{C})$ значением функции $F(v,\mathcal{C})$ справедлива оценка*

$$\varepsilon(v,\mathcal{C}) \le \frac{\varepsilon(y,\mathcal{C})}{1+\varepsilon(y,\mathcal{C})}.$$

Доказательство. Для произвольной точки $z\in\mathbb{R}^d$ согласно определению величины $\varepsilon(z,\mathcal{C})$ и свойству 1 имеем

$$\varepsilon(z,\mathcal{C}) = \frac{|\mathcal{C}|\,\|z - \overline{x}(\mathcal{C})\|^2}{\sum\limits_{x\in\mathcal{C}} \|x - \overline{x}(\mathcal{C})\|^2 + \sum\limits_{x\in\mathcal{X}\setminus\mathcal{C}} \|x\|^2}.$$

Отсюда следует, что если из входа $\mathcal{X}$ задачи 1 исключить точки множества $\mathcal{X}\setminus\mathcal{C}$, то величина $\varepsilon(z,\mathcal{C})$ увеличится в c раз, где

$$c = 1 + \sum_{x\in\mathcal{X}\setminus\mathcal{C}} \|x\|^2 \Big/ \sum_{x\in\mathcal{C}} \|x - \overline{x}(\mathcal{C})\|^2$$

— константа, не зависящая от выбора точки z и превосходящая либо равная 1. Следовательно, отношение левой части доказываемого неравенства к правой при указанном исключении из множества $\mathcal{X}$ множества $\mathcal{X} \setminus \mathcal{C}$ не уменьшится. Поэтому достаточно доказать утверждение леммы для случая, когда $\mathcal{X} = \mathcal{C}$, и, следовательно, когда в соответствии с (1) имеет место равенство $F(y, \mathcal{C}) = \sum_{x\in\mathcal{C}} \|x - y\|^2$.

Продолжение доказательства далее аналогично доказательству, изложенному в [19], и приводится здесь ради полноты изложения.

Для упрощения выкладок выберем систему координат, в которой точка $\overline{x}(\mathcal{C})$ совпадает с началом координат O, а координатные оси повернуты таким образом, что точка y лежит на первой из них, т. е. $y = (y(1), 0, \dots, 0)$. Для определенности пусть $y(1) \geq 0$, а точка v находится в плоскости, образованной первой и второй координатными осями.

Поскольку точка O — центроид кластера $\mathcal{C}$, то среди его точек найдутся такие, что лежат в полупространстве $x(1) \leq 0$. Следовательно, луч yv пересекает гиперплоскость $x(1) = 0$ в некоторой точке $A = (0, a, 0, \dots, 0)$. При этом, если одно из чисел $y(1)$ или a равно нулю, то точка y совпадает с оптимальным решением $\overline{x}(\mathcal{C})$. Следовательно, утверждение леммы очевидно. Поэтому, не нарушая общности, будем предполагать, что $a > 0$ и $y(1) > 0$.

Заметим, что согласно выбору луча yv, все точки кластера $\mathcal{C}$ находятся вне конуса C, образованного лучом yv и $(d-1)$-мерным шаром радиуса a, находящимся в гиперплоскости $x(1) = 0$, с центром в начале координат.

Из равенства (2) и определения (3) имеем

$$\varepsilon(y, \mathcal{C}) = \frac{\|y\|^2\, k}{F(O, \mathcal{C})} = \frac{y(1)^2\, k}{F(O, \mathcal{C})}. \tag{4}$$

Из геометрических соображений следует

$$\varepsilon(v, \mathcal{C}) = \frac{\|v\|^2 k}{F(O, \mathcal{C})} = \frac{a^2\, y(1)^2}{a^2 + y(1)^2} \frac{k}{F(O, \mathcal{C})}. \tag{5}$$

Оценим величину $F(O, \mathcal{C})$. Применим для этого технику упрощений, заключающуюся в переходе к более простой геометрической структуре с сохранением оцениваемой величины. Заметим, что $F(O, \mathcal{C}) = F(O', \mathcal{C}')$, где $O' = (0, 0)$, а множество $\mathcal{C}'$ состоит из точек вида $x' = (x(1), \sqrt{\|x\|^2 - x(1)^2})$, где $x \in \mathcal{C}$. Действительно, каждая точка x' совпадает по первой координате с исходной точкой x, а вторая координата точки x' равна расстоянию от x до первой оси координат. Следовательно, $\|x'\| = \|x\|$.

Далее, в силу того, что $O' = (0, 0)$ и что среднее квадратов не меньше квадрата среднего, имеем $F(O', \mathcal{C}') \geq k\, \|x'\|^2$, где $x' = \overline{x}(\mathcal{C}')$. Но поскольку точки исходного кластера $\mathcal{C}$ лежат вне конуса C, то точки множества $\mathcal{C}'$ лежат над прямой, соединяющей точки $y' = (y(1), 0)$ и $A' = (0, a)$. Следовательно, точка x' также лежит над этой прямой. При этом, поскольку $x'(1) = 0$, имеем $\|x'\| \geq a$. Отсюда

$$F(O, \mathcal{C}) \geq k\, a^2. \tag{6}$$

Подставим оценку (6) в равенство (5). Имеем

$$\varepsilon(v, \mathcal{C}) \leq \frac{y(1)^2}{a^2 + y(1)^2}. \tag{7}$$

С другой стороны, объединяя равенства (4) и (5), получим

$$\varepsilon(v, \mathcal{C}) = \frac{a^2\, \varepsilon(y, \mathcal{C})}{a^2 + y(1)^2}. \tag{8}$$

Рассмотрим правые части выражений (7) и (8) как функции от аргумента a. Первая из них монотонно убывает от 1 до 0, вторая монотонно возрастает от 0 до $\varepsilon(y, \mathcal{C})$. Следовательно, наименьшее из значений этих двух функций будет максимально в точке их равенства, определяемой соотношением $y(1)^2 = a^2\,\varepsilon(y,\mathcal{C})$. Таким образом,

$$\varepsilon(v,\mathcal{C}) \le \frac{a^2\,\varepsilon(y,\mathcal{C})}{a^2 + a^2\,\varepsilon(y,\mathcal{C})} = \frac{\varepsilon(y,\mathcal{C})}{1+\varepsilon(y,\mathcal{C})}.$$

Лемма 2 доказана.

Теорема 1. *Пусть $\mathcal{C}$ — произвольное множество точек мощности k и натуральное число t не превосходит k. Тогда линейная оболочка одного из подмножеств $\mathcal{C}$ мощности t содержит точку x_t такую, что $\varepsilon(x_t,\mathcal{C}) \le 1/t$.*

Доказательство проводится индукцией по t.

База индукции: $t = 1$. Пусть точка x_1 — ближайшая к центру из всех точек множества $\mathcal{C}$. Тогда $F(\overline{x}(\mathcal{C}),\mathcal{C}) \ge k\,\|x_1 - \overline{x}(\mathcal{C})\|^2$. Следовательно,

$$F(x_1,\mathcal{C}) = F(\overline{x}(\mathcal{C}),\mathcal{C}) + k\,\|x_1 - \overline{x}(\mathcal{C})\|^2 \le 2F(\overline{x}(\mathcal{C}),\mathcal{C}).$$

Таким образом, $\varepsilon(x_1,\mathcal{C}) \le 1$.

Индуктивный переход. Рассмотрим в качестве точки x_{t+1} точку $x(x_t,\mathcal{C})$ из леммы 2. Заметим, что эта точка лежит в линейной оболочке $(t+1)$-й точки множества $\mathcal{C}$. При этом согласно лемме 2 имеем

$$\varepsilon(x_{t+1},\mathcal{C}) \le \frac{\varepsilon(x_t,\mathcal{C})}{1+\varepsilon(x_t,\mathcal{C})}.$$

По индукции $x_t \le 1/t$. Следовательно,

$$\varepsilon(x_{t+1},\mathcal{C}) = \frac{1}{1/\varepsilon(x_t,\mathcal{C}) + 1} \le \frac{1}{t+1}.$$

Теорема 1 доказана.

Замечание 1. Утверждение теоремы также справедливо, поскольку точка $\overline{x}(\mathcal{C})$ принадлежит линейной оболочке k точек из $\mathcal{C}$ и при этом $\varepsilon(\overline{x}(\mathcal{C}),\mathcal{C}) = 0 < 1/t$.

Замечание 2. Доказанная оценка относительной погрешности является достижимой при любых t.

Для того, чтобы убедиться в этом, достаточно рассмотреть в качестве множества $\mathcal{C}$ набор из k единичных орт пространства $\mathbb{R}^k$. Расстояние от начала координат $O = (0,\dots,0)$ до центра данного кластера равно величине $\sqrt{1/k}$. Отсюда и из равенства (2) получаем $f(\mathcal{C}) = F(O,\mathcal{C}) - k/k = k-1$.

С другой стороны, линейная оболочка любых t единичных орт находится на расстоянии $\sqrt{1/t}$ от начала координат. Следовательно, согласно неравенству треугольника расстояние от точки y_t до центра кластера не меньше величины $\sqrt{1/t} - \sqrt{1/k}$. Отсюда в силу равенства (2) имеем

$$F(x_t,\mathcal{C}) - f(\mathcal{C}) \ge k\,(1/t - 2/\sqrt{tk} + 1/k).$$

Таким образом,

$$\varepsilon(x_t,\mathcal{C}) \ge (1/t - 2/\sqrt{tk} + 1/k)\,/\,(1 - 1/k),$$

что стремится к величине $1/t$ с ростом k.

Фактически, теорема 1 показывает, что в совокупности линейных оболочек всех t-элементных подмножеств множества $\mathcal{X}$ найдется такая, что будет содержать точку, гарантирующую относительную погрешность аппроксимации не хуже, чем $1/t$. Этот факт используется ниже для построения аппроксимационной схемы.

3. Схема PTAS

Суть предлагаемого ниже сеточного подхода к построению схемы PTAS заключается в отыскании ограниченной области пространства, в которой находится точка x_t, являющаяся центроидом приближенного решения задачи 1 с относительной погрешностью $1/t$. Для отыскания этой области в линейной оболочке t-элементного подмножества точек множества $\mathcal{X}$ формируется $(t-1)$-мерная сетка (решетка) с шагом h и числом узлов s^{t-1}, где s — целочисленный параметр алгоритма, h — константа, вычисляемая на предварительном шаге алгоритма, исходя из следующих соображений.

Пусть $\mathcal{C}^*$ — оптимальный кластер, точки $x_1, \ldots, x_t$ последовательно построены с помощью леммы 2 применительно к множеству $\mathcal{C}^*$. Тогда из геометрических соображений имеем

$$\|x_t - \overline{x}(\mathcal{C}^*)\| \le \|x_1 - \overline{x}(\mathcal{C}^*)\| \le \sqrt{f(\mathcal{C}^*)/k}.$$

В полученном выражении величина $f(\mathcal{C}^*)$ неизвестна, но она может быть оценена сверху значением $f(\widehat{\mathcal{C}}) = \min\limits_{x \in \mathcal{X}} f(\mathcal{C}^x)$ целевой функции задачи 1 на 2-приближенном решении $\widehat{\mathcal{C}}$, полученном с помощью алгоритма, изложенного в [11] (перебором всех точек входного множества $\mathcal{X}$ в качестве допустимых центров искомого кластера). Отсюда

$$\|x_t - \overline{x}(\mathcal{C}^*)\| \le A, \tag{9}$$

где $A = \sqrt{f(\widehat{\mathcal{C}})/k}$. Таким образом, в силу неравенства треугольника для нахождения области, в которой находится точка x_t, достаточно анализировать окрестности радиуса $2A$ рассматриваемых t-элементных подмножеств. Этот радиус, как показано выше, можно вычислить на предварительном этапе алгоритма.

Пусть $\{z_1, \ldots, z_t\}$ — произвольный набор точек из $\mathcal{X}$. Рассмотрим $(t-1)$-мерную сетку на линейной оболочке точек из этого набора. В качестве центра сетки возьмем точку z_1, в качестве базиса сетки возьмем ортонормированный базис, получаемый по правилам линейной алгебры из точек $z_2 - z_1, \ldots, z_t - z_1$, а в качестве шага сетки возьмем величину

$$h = 4A/s = 4/s\sqrt{f(\widehat{\mathcal{C}})/k}, \tag{10}$$

где s — целочисленный параметр алгоритма. Заметим, что евклидов шар радиуса $2A$ покрывают не более, чем s^{t-1} ячеек построенной сетки. Поэтому для поиска ограниченной области, содержащей точку x_t, достаточно просмотреть s^{t-1} узлов сетки.

Оценим качество наилучшего сеточного решения, т. е. решения, получаемого путем аппроксимации точки x_t ближайшим узлом построенной сетки.

Лемма 3. *Пусть $\{z_1, \ldots, z_t\}$ — набор точек из $\mathcal{C}^*$, определенный в соответствии с леммой 2, в линейной оболочке которого лежит искомая точка x_t, y — ближайший к x_t узел построенной сетки. Тогда*

$$\varepsilon(y, \mathcal{C}^*) \le \varepsilon(x_t, \mathcal{C}^*) + 8\,\zeta(t,s), \tag{11}$$

где $\zeta(t,s) = \sqrt{t-1}/s + (t-1)/s^2$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. В $(t-1)$-мерном евклидовом пространстве расстояние от точки x_t до ближайшего узла y сетки с равномерным шагом h, очевидно, не превосходит величины $u = h/2\sqrt{t-1}$. Отсюда и из равенства (2) получаем

$$F(y, \mathcal{C}^*) - F(x_t, \mathcal{C}^*) \le k\,((a+u)^2 - a^2),$$

где $a = \|x_t - \overline{x}(\mathcal{C}^*)\|$.

Далее, в силу неравенства (9) имеем $a \le A$, следовательно,

$$(a+u)^2 - a^2 \le 2Au + u^2 = Ah\sqrt{t-1} + h^2/4(t-1) = 4A^2/s\sqrt{t-1} + 4A^2/s^2(t-1) = 4A^2\,\zeta(t,s).$$

Таким образом,

$$F(y,\mathcal{C}^*) - F(x_t,\mathcal{C}^*) \le 4k\,A^2\,\zeta(t,s) = 4f(\widehat{\mathcal{C}})\,\zeta(t,s).$$

Кроме того, из теоремы 1 следует, что $f(\widehat{\mathcal{C}}) \le 2f(\mathcal{C}^*)$. Поэтому

$$F(y,\mathcal{C}^*) - F(x_t,\mathcal{C}^*) \le 8f(\mathcal{C}^*)\,\zeta(t,s).$$

Поделив это выражение на $f(\mathcal{C}^*)$, получим (11).

Лемма доказана.

Приведем схематично пошаговую запись алгоритма.

А л г о р и т м $\mathcal{A}$.

Ш а г 1. Найдем 2-приближенное решение $\widehat{\mathcal{C}}$ задачи 1 и значение $f(\widehat{\mathcal{C}})$ целевой функции с помощью алгоритма, предложенного в [11]. Вычислим шаг h сетки по формуле (10).

Ш а г 2. Для каждого подмножества фиксированной мощности $t \in \{2,\dots,n\}$ входного множества $\mathcal{X}$ построим линейную оболочку и ее дискретную сетку с шагом h.

Ш а г 3. Для каждого узла y сетки, лежащего в шаре радиуса $2\sqrt{f(\widehat{\mathcal{C}})/k}$, построим подмножество $\mathcal{C}^y$.

Ш а г 4. По формуле (2) вычислим значение функции $F(y,\mathcal{C}^y)$.

Ш а г 5. В семействе решений, найденных на шагах 2, 3 и 4, выберем точку $\widehat{y}$ и подмножество $\widehat{\mathcal{C}}^y$, для которых значение функции минимально. Выбранное подмножество объявим решением задачи 1.

Теорема 2. *Алгоритм $\mathcal{A}$ находит приближенное решение задачи с относительной погрешностью $1/t + 8\,\zeta(t,s)$, где $\zeta(t,s) = \sqrt{t-1}/s + (t-1)/s^2$, за время $\mathcal{O}(dn^{t+1}s^{t-1})$.*

Д о к а з а т е л ь с т в о. В соответствии с пошаговой записью алгоритма $\mathcal{A}$ он заключается в переборе $n^t s^{t-1}$ кандидатов на роль центра искомого кластера и выборе среди этих кандидатов наилучшего. Согласно теореме 1 и леммам 1 и 3 такая последовательность вычислений приведет к решению, имеющему относительную погрешность $1/t + 8\,\zeta(t,s)$. Поскольку выбор k точек множества $\mathcal{X}$, имеющих наибольшие проекции на направление к локальному центру, занимает не более n операций (например, с помощью предложенного в [6] алгоритма поиска k-го наименьшего числа в массиве из n чисел), а все арифметические операции с точками линейно зависят от размерности пространства, трудоемкость алгоритма $\mathcal{A}$ оценивается величиной $O(dn^{t+1}s^{t-1})$.

Теорема 2 доказана.

З а м е ч а н и е 3. Арифметические операции над точками можно реализовать таким образом, что погрешность вычисления узлов сетки будет пренебрежительно мала по сравнению с шагом сетки и, следовательно, не повлияет на оценку относительной погрешности алгоритма.

Следствие 1. *При $t = 1$ алгоритм имеет относительную погрешность 1 (или, другими словами, относительную точность 2) и трудоемкость $O(dn^2)$, что совпадает с результатом, полученным в работе [11].*

Следствие 2. *В случае, когда $t = 2$, алгоритм имеет относительную погрешность $1/2 + \varepsilon$ и трудоемкость $O(dn^3/\varepsilon)$, $\varepsilon \in (0,1]$. В этом случае в качестве s достаточно взять величину $9/\varepsilon$.*

Следствие 3. *При $t = 2/\varepsilon$, где $\varepsilon > 0$, и $s = 9\,t^{3/2}$ алгоритм позволяет решать задачу 1 с относительной погрешностью ε за время $O(dn^{2/\varepsilon+1}(9/\varepsilon)^{3/\varepsilon})$.*

Действительно, при выбранном s имеем $\zeta(t,s) \le 1/(9t) + 1/(81t^2) \le 1/(8t)$. Следовательно, относительная погрешность алгоритма не превосходит величины $2/t = \varepsilon$. Оценка трудоемкости алгоритма следует из того, что $s^{t-1} = (9\,t^{3/2})^{t-1} \le (\,9\,(2/\varepsilon)^{3/2}\,)^{2/\varepsilon} \le (9/\varepsilon)^{3/\varepsilon}$. Таким образом, получена схема PTAS.

Заключение

В работе построена схема PTAS для NP-трудной в сильном смысле задачи би-разбиения конечного множества точек евклидова пространства на два кластера заданных мощностей по критерию минимума суммы по обоим кластерам сумм квадратов внутрикластерных расстояний от элементов кластеров до их центров при условии, что центр одного из искомых кластеров задан в начале координат, а центр другого неизвестен и определяется как среднее значение по всем элементам, образующим этот кластер.

Одним из направлений дальнейших исследований является изучение важного частного случая рассмотренной задачи, когда размерность пространства не фиксирована, но ограничена величиной $C \log n$, где C — некоторая константа. Актуальность этого случая объясняется тем, что размерность $\mathcal{O}(\log n)$ пространства является минимальной, при которой возможно существование n-элементного множества точек с координатами из фиксированного конечного набора значений. Вопрос о сложностном статусе задачи 1 в указанном случае открыт, и, возможно, для него существует полиномиальная приближенная схема с существенно меньшей трудоемкостью, чем построенная в настоящей работе схема для общего случая задачи.

Другим интересным вопросом является изучение близкой в постановочном плане задачи, в которой геометрический размер каждого кластера определяется не через суммарное квадратичное отклонение точек кластера от его центра, а через чебышевский радиус кластера, т. е. радиус минимальной сферы, охватывающей кластер.

И наконец, необходимо отметить, что несмотря на существование приближенной полиномиальной схемы для задачи 1, доказанное выше, для полиномиально эквивалентной ей задачи LVS — максимизации нормы суммы векторов подмножества заданной мощности — в общем случае до сих пор не известно не только схемы PTAS, но даже какого-либо приближенного полиномиального алгоритма с константной точностью. Иными словами, вопрос о принадлежности задачи LVS классу APX открыт.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. NP-hardness of Euclidean sum-of-squares clustering / D. Aloise, A. Deshpande, P. Hansen, P. Popat // Machine Learning. 2009. Vol. 75, no. 2. P. 245–248.
2. **Anil K., Jain K.** Data clustering: 50 years beyond k-means // Pattern Recognition Letters. 2010. Vol. 31. P. 651–666.
3. **Garey M.R., Johnson D.S.** Computers and intractability: a guide to the theory of NP-completeness. San Francisco: Freeman, 1979. 314 p.
4. A posteriori detecting a quasiperiodic fragment in a numerical sequence / E. Kh. Gimadi, A. V. Kel'manov, M. A. Kel'manova, S. A. Khamidullin // Pattern Recognition and Image Analysis. 2008. Vol. 18, no. 1. P. 30–42.
5. **Kel'manov A., Khandeev V.** An exact pseudopolynomial algorithm for a bi-partitioning problem // Optimization and Applications — OPTIMA-2014: Proc. V Intern. Conf. (Petrovac, Montenegro, September 28 – October 4.) Moscow: Dorodnicyn Computing Centre of RAS, 2014. P. 108–109.
6. **Wirth H.** Algorithms + Data Structures = Programs. New Jersey: Prentice Hall, 1976. 366 p. (Prentice-Hall Series in Automatic Computation.)
7. Задача отыскания подмножества векторов с максимальным суммарным весом / А. Е. Бабурин, Э. Х. Гимади, Н. И. Глебов, А. В. Пяткин // Дискрет. анализ и исслед. опер. 2007. Т. 14, № 1. С. 32–42.
8. **Гимади Э.Х., Глазков Ю.В., Рыков И.А.** О двух задачах выбора подмножества векторов с целочисленными координатами в евклидовом пространстве с максимальной нормой суммы размерности // Дискрет. анализ и исслед. опер. 2008. Т. 15, № 4. С. 30–43.
9. Апостериорное обнаружение в числовой последовательности квазипериодического фрагмента при заданном числе повторов / Э. Х. Гимади, А. В. Кельманов, М. А. Кельманова, С. А. Хамидуллин // Сиб. журн. индустр. математики. 2006. Т. 9, № 1(25). С. 55–74.
10. **Гимади Э.Х., Пяткин А.В., Рыков И.А.** О полиномиальной разрешимости некоторых задач выбора подмножеств векторов в евклидовом пространстве фиксированной размерности // Дискрет. анализ и исслед. опер. 2008. Т. 15, № 6. С. 11–19.

11. **Долгушев А.В., Кельманов А.В.** Приближенный алгоритм решения одной задачи кластерного анализа // Дискрет. анализ и исследование операций. 2011. Т. 18, № 2. С. 29–40.
12. **Кельманов А.В.** О сложности некоторых задач анализа данных // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2010. Т. 50, № 11. С. 2045–2051.
13. **Кельманов А.В.** О сложности некоторых задач кластерного анализа // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2011. Т. 51, № 11. С. 2106–2112.
14. **Кельманов А.В., Пяткин А.В.** О сложности одного из вариантов задачи выбора подмножества "похожих" векторов // Докл. АН. 2008. Т. 421, № 5. С. 590–592.
15. **Кельманов А.В., Пяткин А.В.** Об одном варианте задачи выбора подмножества векторов // Дискрет. анализ и исслед. опер. 2008. Т. 15, № 5. С. 20–34.
16. **Кельманов А.В., Пяткин А.В.** О сложности некоторых задач поиска подмножеств векторов и кластерного анализа // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2009. Т. 49, № 11. С. 2059–2067.
17. **Кельманов А. В., Хандеев В. И.** FPTAS для одной задачи двухкластерного разбиения множества векторов // Математическое программирование и приложения: тез. докл. XV Всерос. конф. / Ин-т математики и механики УрО РАН. Екатеринбург, 2015. С. 141.
18. **Кельманов А. В., Хандеев В. И.** Рандомизированный алгоритм для одной задачи двухкластерного разбиения множества векторов // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2015. Т. 55, № 2. С. 335–344.
19. **Шенмайер В. В.** Аппроксимационная схема для одной задачи поиска подмножества векторов // Дискрет. анализ и исслед. опер. 2012. Т. 19, № 2. С. 92–100.

Долгушев Алексей Владимирович
канд. физ.-мат. наук,
Новосибирский государственный университет
e-mail: dolgushev@math.nsc.ru

Поступила 27.04.2015

Кельманов Александр Васильевич,
д-р физ.-мат. наук,
зав. лабораторией
Институт математики СО РАН,
Новосибирский государственный университет
e-mail: kelm@math.nsc.ru

Шенмайер Владимир Владимирович
канд. физ.-мат. наук,
старший науч. сотрудник
Институт математики СО РАН
e-mail: shenmaier@mail.ru