Clustering

Tomasz Kulik

Streszczenie

W dokumencie przedstawiona została podstawowa analiza złożoności obliczeniowej problemu analizy skupień z ograniczeniami - znajdowania podziału zbioru na trzy podzbiory, w których odległość między każdą parą elementów danego zbioru jest ograniczona przez stałą. Omówione zostały również inne warianty ograniczeń i ich wpływ na przynależność problemów do poszczególnych klas złożoności obliczeniowych.

1 Wstęp

Grupowanie jest problemem optymalizacyjnym polegającym na podzieleniu zbioru danych wejściowych na zadaną liczbę rozłącznych podzbiorów minimalizując przy tym funkcję celu. Analiza skupień z ograniczeniami (z ang. Constrained Clustering) jest wariantem powyższego problemu, w którym wprowadza się dodatkowe ograniczenia na zadane pary elementów ze zbioru wejściowego. Przeanalizowany został problem podziału zbioru danych wejściowych na 3 rozłączne podzbiory tak, aby dla każdych dwóch elementów należących do danego podzbioru odległość między nimi była ograniczona z góry przez stałą. Praca ta skupiona jest zarówno na problemie znajdowania zbioru rozwiązań dopuszczalnych, tj. spełniających ograniczenia jak i na kwestii optymalizacyjnej.

2 Opis problemu

Dla danych wejściowych:

$$\begin{aligned} X &- \text{zbiór skończony} \\ B &- \text{stała} \\ d(x,y) &- \text{metryka na zbiorze X} \end{aligned} \tag{1}$$

należy wyznaczyć trzy rozłączne podzbiory zbioru X

$$\{X_1, X_2, X_3\} \tag{2}$$

gdzie

$$\forall_{x,y \in X_i}\ d(x,y) \leqslant B \tag{3}$$

Twierdzenie 1. *Problem podziału zbioru na trzy rozłączne podzbiory zachowując powyższe ograniczenia jest NP-zupełny.*

Dowód. Niech $G = (V, E)$ będzie grafem z problemu 3-kolorowania, gdzie V jest zbiorem wierzchołków, a E to zbiór krawędzi. Dodatkowo niech $G' = (V, E')$

będzie dopełnieniem grafu G, a każda z krawędzi $(x, y) \in E'$ niech oznacza spełnienie relacji $d(x, y) \leqslant B$ z problemu podziału na 3 rozłączne podzbiory z ograniczeniem odległości. Można zauważyć, że znalezienie takiego trójkolorowania grafu G - (X_1, X_2, X_3) skutkuje znalezieniem trzech rozłącznych pozbiorów wierzchołków w grafie G'. Każdy ze wspomnianych podzbiorów musi być kliką w grafie G', ponieważ w grafie G żaden z wierzchołków o tym samym kolorze nie mógł być połączony krawędzią. Z założenia w grafie G' istnienie krawędzi pomiędzy dwoma wierzchołkami oznacza spełnienie warunku odległości, co oznacza że odległość pomiędzy każdymi dwoma wierzchołkami w takich podzbiorach jest mniejsza od B. W rezultacie daje to trzy rozłączne podzbiory, które należało znaleźć.

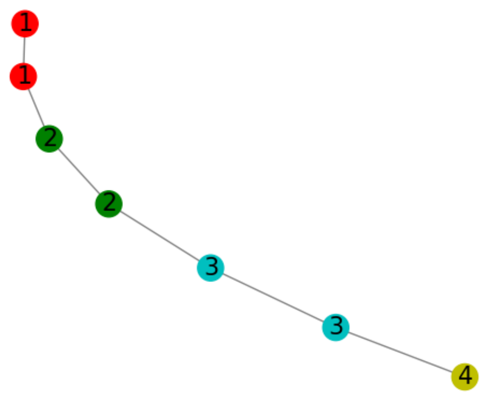
Z drugiej strony stwierdzenie, że graf G nie jest 3-kolorowalny implikuje brak możliwości podziału wierzchołków grafu G' na trzy podzbiory zachowując (3). To oznacza, że problem 3-kolorowania redukuje się w czasie wielomianowym do problemu, na którym skupia się ten referat. Powyższa redukcja dowodzi NP-zupełności. □

3 Przykłady

Poniżej znajdują się dwa przykłady działania algorytmu podziału wierzchołków grafu na 3 podzbiory. Krawędzie grafu oznaczają, że warunek odległości pomiędzy daną parą wierzchołków został spełniony i mogą (ale nie muszą) znajdować się w jednym klastrze. Jeśli krawędź nie wystąpiła pomiędzy wierzchołkami to znaczy, że ich odległość wykluczała znalezienie się w jednym klastrze. Innymi słowy w danym podzbiorze wynikowym pomiędzy wszystkimi jego wierzchołkami musi istnieć krawędź. Każdy taki podzbiór jest kliką.

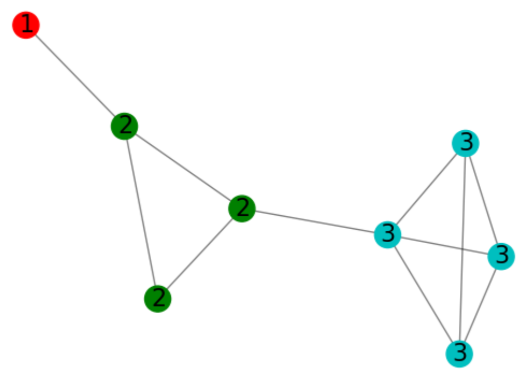
3.1 Negatywny przypadek

W tym przypadku nie jest możliwe znalezienie takich 3 rozłączych podzbiorów wierzchołków grafu. Najmniejsza liczba podzbiorów dla poniższego grafu wynosi 4.



3.2 Pozytywny przypadek

W grafice przedstawiono graf, którego węzły skutecznie podzielono na 3 rozłączne podzbiory. Łatwo zauważyć, że rozwiązanie tego problemu prowadzi do podzielenia grafu na trzy kliki.



4 Warianty

Istnieją również inne warianty ograniczeń jakie można nałożyć na elementy dzielonego zbioru. Są to między innymi:

- $CannotLink(x, y)$ - węzły x oraz y nie mogą przynależeć do tego samego klastra. Warto zauważyć, że problem trójpodziału zbioru ze względu na odległości można zamodelować przy pomocy tego ograniczenia. Wystarczy dla każdej pary (a, b) leżącej dalej niż B nałożyć $CannotLink(a, b)$. Stąd w ogólności problemy k-podziału z ograniczeniami $CannotLink$ są NP-zupełne.

- $MustLink(x, y)$ - węzły x oraz y ze zbioru X muszą znaleźć się w jednym klastrze.

- $\delta-Constraint$ - dla każdej pary (x, y) elementów zbioru X jeśli $d(x, y) < \delta$ to x i y muszą znaleźć się w jednym klastrze. Innymi słowy dla odpowiednio bliskich elementów należy nałożyć ograniczenie $MustLink$, a parametr δ wyznacza tą odległość.

- $\epsilon-Constraint$ - jeżeli w klastrze znajduje się więcej niż jeden węzeł to dla każdego węzła s w klastrze musi znajdować się przynajmniej jeden węzeł t, który spełnia warunki $\epsilon - neighbor$, tj. jeśli $d(s, t) \leqslant \epsilon$. Parafrazując, dany element s może przynależeć do podzbioru X_i tylko wtedy, gdy choć jeden inny element należący do X_i znajduje się w odległości co najwyżej δ od elementu s. Wyjątek stanowi jednoelementowy podzbiór, dla którego nie rozpatruje się tego warunku.

Tablica 1: Warianty problemu analizy skupień dla dancyh kombinacji ograniczeń

Kombinacja ograniczeń	Zadana liczba podzbiorów	Dowolna liczba podzbiorów
$CannotLink$	NP-zupełny	P
$MustLink$ i $\delta - Constraint$	P	P
$CannotLink$ i $\epsilon - Constraint$	NP-zupełny	P
$\delta - Constraint$ i $\epsilon - Constraint$	P	P
Wszystkie powyższe	NP-zupełny	NP-zupełny

5 Wariant optymalizacyjny

Powyżej przedstawiono wariant decyzyjny problemu analizy skupień. W celu zbadania wariantu optymalizacyjnego należy rozpatrzeć minimalizację parametru B, tj. wskazania takiej najmniejszej odległości pomiędzy elementami danego klastra, dla której zachodzi warunek podzielności na 3 rozłączne podzbiory.

$$min\ B \tag{4}$$

tak, aby spełnić ograniczenia:

$$\begin{cases} X_1 \cup X_2 \cup X_3 = X \\ X_1 \cap X_2 = X_1 \cap X_3 = X_2 \cap X_3 = \emptyset \\ \forall_{X' \in \{X_1, X_2, X_3\}}\ \forall_{x,y \in X'}\ d(x,y) \leqslant B \end{cases} \tag{5}$$

6 Bibliografia

[1] C. M. Emre. Feasibility Issues [W:] *Unsupervised Learning Algorithms*, Springer International Publishing AG, 2016.
[2] I. Davidson, S. S. Ravi. *Clustering With Constraints: Feasibility Issues and the k-Means Algorithm*, DOI: 10.1137/1.9781611972757.13, Źródło: DBLP, 2005.