Uniwersytet Jagielloński
Wydział Matematyki i Informatyki

Piotr Helm
Nr albumu: 1132708

Analiza algorytmów budowania coresetu dla problemu K-means

Praca licencjacka
na kierunku Informatyka Analityczna

Praca wykonana pod kierunkiem
dr Iwona Cieślik
Instytut Informatyki Analitycznej

Kraków, wrzesień 2020

Streszczenie

W pracy przedstawimy stan wiedzy na temat budowania coresetów w kontekście problemu k-means. W szczególności omówimy techniki konstrukcji coresetów takie jak geometryczna dekompozycja oraz losowe próbkowanie z [13].

Celem pracy jest implementacja technik budowania coresetów oraz przeprowadzenie eksperymentów, które zbadają jakość uzyskanych coresetów [13] [5]. W tym celu porównamy wyniki działania algorytmu Lloyd'a rozwiązującego problem k-means na całym zbiorze danych z jego działaniem na uzyskanych różnymi metodami coresetach.

0. Spis treści

1. Wstęp

More is more to jedna z podstawowych doktryn związanych z szeroko rozumiałym Big Data. Więcej danych to więcej informacji, które analizujemy licząc na poznanie ukrytych zależności. W erze Big Data skalowalność rozwiązań jest szczególnie ważna, dlatego celem wielu naukowców jest dostarczenie kompromisu pomiędzy szczegółowością informacji a wymaganiami pamięciowymi. Tutaj warto zwrócić uwagę na dużą wartość takich rozwiązań w praktycznych zastosowaniach.

Sketch-and-solve to popularny paradygmat, który zakłada separacje algorytmu agregującego dane od właściwego algorytmu analizującego. Główną ideą jest redukcja danych tak aby rozmiar zbudowanego zbioru nie były zależny od rozmiaru wejściowych danych lub tylko *trochę* od nich zależał. Następnie aplikowany jest właściwy algorytm, który jest mniej zależy od początkowego rozmiaru danych. W rezultacie wykonuje swoją pracę szybciej, a niekiedy nawet lepiej. Dodatkową zaletą jest fakt, że w większości przypadków nie jest konieczna modyfikacja algorytmu analizującego.

Niestety w kontekście tego paradygmatu największym wyzwaniem jest znalezienie kompromisu pomiędzy stratą jakości danych a ich rozmiarem. To jak określamy charakterystykę ważnych informacji jest ściśle zależne od aplikacji danych. Coresety są strukturą algorytmiczną, która ma na celu indentyfikacje takich cech oraz określenie akceptowalnego kompromisu dla różnych funkcji celu.

Mówiąc ogólniej, mamy na wejściu zbiór danych $A \subset U$, gdzie U oznacza jakieś uniwersum, zbiór potencjalnych rozwiązań C pewnego problemu oraz funkcję celu $f : P(U) \times C \to \mathbb{R}_{\geq 0}$, gdzie $P(U)$ oznacza zbiór potęgowy dla uniwersum. Chcemy znaleźć istotnie mniejszy zbiór danych $S \subset U$, dla którego dla każdego potencjalnego rozwiązania $c \in C$ daje wartość $f(S, c)$ *dobrze* aproksymujące $f(A, c)$. A dokładniej:

$$|f(A, c) - f(S, c)| < \epsilon f(A, c)$$

gdzie $\epsilon > 0$.

Algorytmy budujące coresety są aplikowalne do wielu problemów klasteryzacji. W tej pracy skupimy się na konstrukcjach dla problemu k-means, który należy do klasy problemów *NP-trudnych* [1]. Najpopularniejszym algorytmem heurystycznym dla tego problemu jest algorytm Lloyd'a [11]. Z uwagi na to, że złożoność algorytmu istotnie zależy od rozmiaru wejściowych danych, jest on idealnym kandydatem do optymalizacji poprzez odpowiednią konstrukcję coresetu.

W rozdziale 3 opiszemy budowę *lightweight coresetu* z pracy [5]. Następnie, w rozdziale 4 przedstawimy konstrukcję *coresetu* bazującą na geomtrycznej dekompozycji problemu korzystając z badań [13] W ostatnim, 5 rozdziale omówimy przeprowadzone eksperymenty dla zaimplementowanych konstrukcji coresetów oraz porównamy ich wyniki.

2. Notacja i niezbędne definicje

W tej pracy przyjmujemy, że działamy w przestrzeni euklidesowej w skończonym wymiarze $d > 0$.

Definicja 2.1. Niech $x = (x_1, \ldots, x_d) \in \mathbb{R}^d$. *Normą typu* l_2 nazywamy odwzorowanie $\|\cdot\| : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ określone wzorem:

$$\|x\|_2 = \|x\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{d} x_i^2}$$

Załóżmy, że mamy dany konkretny problem optymalizacyjny.

Definicja 2.2. *α-aproksymacją* dla problemu optymalizującego nazwiemy wielomianowy algorytm, który dla każdej instancji problemu minimalizacyjnego oblicza rozwiązanie, którego wartość spełnia:

$$A \leq \alpha \cdot OPT$$

gdzie A jest wartością obliczonego rozwiązania, a OPT jest wartością optymalnego rozwiązania. Zmienną α nazywamy *współczynnikiem aproksymacji*. Analogicznie możemy zdefiniować *α-aproksymacja* dla instancji problemu maksymalizacyjnego, gdzie wartość A obliczonego rozwiązania spełnia:

$$A \geq \frac{1}{\alpha} \cdot OPT$$

Definicja 2.3. *Centroidem* dla skończonego zbioru punktów $x_1, \ldots, x_k \in \mathbb{R}^d$ nazywamy:

$$C = \frac{x_1 + \cdots + x_k}{k}$$

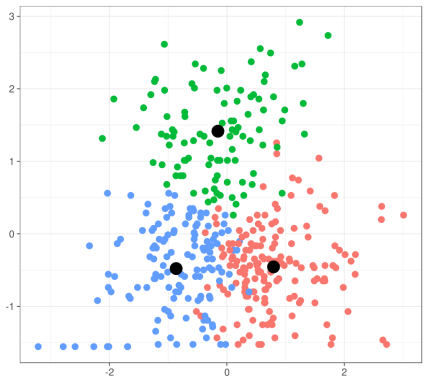
2.1. K-means

Zacznijmy od zdefiniowania problemu, dla którego będziemy analizować konstrukcje coresetów.

Definicja 2.4. *Problem k-means.* Niech X będzie skończonym zbiórem punktów z $\mathbb{R}^d$. Dla danego X chcemy znaleźć zbiór $k \in \mathbb{N}$ punktów $Q \subset \mathbb{R}^d$, który minimalizuje funkcję $\phi_X(Q)$ zdefiniowaną następująco:

$$\phi_X(Q) = \sum_{x \in X} d(x, Q)^2 = \sum_{x \in X} \min_{q \in Q} ||x - q||^2$$

Definicja 2.4 zakłada, że działamy w przestrzeni euklidesowej. Uogólnioną wersję można zdefiniować analogicznie, zamieniając d na odpowiednią funkcję miary w danej przestrzeni.



Rysunek 2.1: Przykład interpretacji problemu k-means. Czarne punkty to centroidy, które stanowią zbiór Q optymalizujący funkcję ϕ.

Problem k-means jest jednym w elementarnych problemów machine learningu. Używamy go m.in w data miningu, segmentacji obrazu czy klasyfikcji danych.

Definicja 2.5. *Problem k-means - wersja ważona.* Niech X_w będzie skończonym zbiórem punktów z $\mathbb{R}^d$ oraz niech w będzie funkcją $w : X_w \to \mathbb{R}_{\geq 0}$. Dla danego X_w oraz funkcji w chcemy znaleźć zbiór $k \in \mathbb{N}$ punktów $Q \subset \mathbb{R}^d$, który minimalizuje funkcję $\phi_{X_w}(Q)$ zdefiniowaną następująco:

$$\phi_{X_w}(Q) = \sum_{x \in X_w} w(x) d(x, Q)^2$$

Wartość funkcji ϕ dla optymalnego rozwiązania oznaczamy $\phi^k_{opt}(X)$ lub OPT. W pracy często będziemy korzystać ze stwierdzenia *optymalne rozwiązanie*, które oznacza k elementowy zbiór C_{opt}, dla którego wartość funkcji ϕ jest zminimalizowana. Funkcję ϕ w literaturze nazywamy błędem kwantyzacji.

Definicja 2.6. *Klasterem* nazywamy skończony zbioru punktów $x_1, \ldots, x_k \in \mathbb{R}^d$, które łączy pewna wspólna cecha. W naszym kontekście wspólną cechą bedzie przyporządkowanie do tego samego centroidu.

2.2. Coreset

To jak definujemy coreset ściśle zależy od problemu, który optymalizujemy. Zacznijmy od podstawowej definicji coresetu dla problemu K-means.

Definicja 2.7. (ϵ, k)*-aproksymacja zbioru centroidów.* Niech X będzie skończonym zbiórem punktów z $\mathbb{R}^d$. Skończony zbiór $A \subset \mathbb{R}^d$ nazywamy (ϵ, k)-aproksymacją zbioru centroidów, gdzie $\epsilon \in (0, 1)$ oraz $k \in \mathbb{N}$, jeżeli istnieje k elementowy podzbiór $C \subseteq A$, dla którego zachodzi:

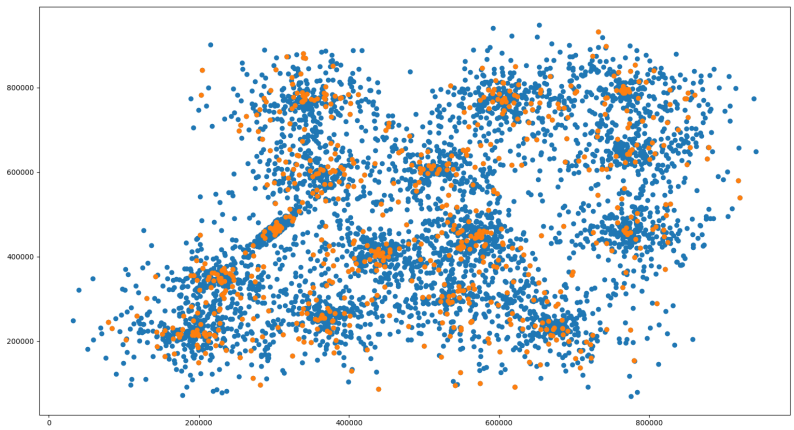
$$|\phi_X(C_{opt}) - \phi_X(C)| \leq \epsilon \phi_X(C_{opt})$$

gdzie C_{opt} optymalizuje wartość funkcji ϕ.

Definicja 2.8. *Coreset.* Niech X będzie skończonym zbiórem punktów z $\mathbb{R}^d$ oraz niech $Q \subset \mathbb{R}^d$ będzie dowolnym zbiorem rozmiaru co najwyżej $k \in \mathbb{N}$. Skończony zbiór $C \subset \mathbb{R}^d$ nazywamy (ϵ, k) coresetem, gdzie $\epsilon \in (0, 1)$, jeżeli zachodzi:

$$|\phi_X(Q) - \phi_C(Q)| \leq \epsilon\phi_X(Q)$$

Zauważmy, że taka definicja daje nam bardzo moce gwarancje teoretyczne. Wartość funkcji $\phi_C(Q)$ aproksymuje $\phi_X(Q)$ ze współczynnikiem aproksymacji równym $(1 + \epsilon)$ dla dowolnego zbioru k kandydatów Q na rozwiązanie problemu k-means. Jest to na tyle istotne, że w literaturze odróżnimy taką wersję nazywając ją *strong coresetem*. Definicja 2.8 jest wariantem ciągłym, czyli punkty należące do coresetu są dowolnymi punktami przestrzeni, w szczególności nie muszą należeć do zbioru X. W praktyce stosuje się wariant dyskretny, który zakłada, że $C \subseteq X$.



Rysunek 2.2: Pomarańczowe punkty tworzą coreset dla zbioru niebieskich punktów. Parametry: $k = 15$, $\epsilon = 0.1$, $n = 15000$.

Definicja 2.9. *Coreset - weak (w wariancie dyskretnym).* Niech X będzie skończonym zbiorem punktów z $\mathbb{R}^d$. Niech $C \subseteq X$ oraz A jest (ϵ, k)-aproksymacją zbioru centroidów dla zbioru X, gdzie $\epsilon \in (0, 1)$. Jeżeli, dla każdego $k \in \mathbb{N}$ elementowego podzbióru $Q \subseteq A$ zachodzi:

$$|\phi_X(Q) - \phi_C(Q)| \leq \epsilon\phi_X(Q)$$

to parę (C, A) nazwiemy słabym coresetem.

3. Lightweight Coreset

Budowa coresetów w kontekście problemu *k-means* ma bardzo długo historię. Za przełomową pracę uznaje się [12], która jako pierwsza przedstawia algorytm aproksymujący ze współczynnikiem aproksymacji równym $(1+\epsilon)$, budujący coreset dla problemu k-means.

Wyróżnia się trzy techniki budowania coresetów:

- Geometryczna dekompozycja problemu.
- Losowe próbkowanie zbioru.
- Zawansowane metody algebraiczne.

Pierwsza i trzecia technika cechuje się mocnymi gwarancjami teoretycznymi. Niestety większość rozwiązań jest mało praktyczna i kosztowna czasowo. Losowe próbkowanie w praktyce daje bardzo przyzwoite wyniki jednak bardzo często nie daje nam żadnej gwarancji odnośnie optymalności rozwiązania. Autorzy pracy [5] zaproponowali rozwiązanie o nazwie *lightweight coreset*, które w swoich założeniach ma łączyć:

- Prostą implementacje.
- Gwarancje teoretyczne.
- Szybkie działanie oparte na próbkowaniu zbioru danych.

3.1. Lightweight coreset

Zacznijmy od wprowadzenia definicji *lightweight coresetu*.

Definicja 3.1. *Lightweight coreset dla problemu K-means.* Niech $\epsilon > 0$ oraz $k \in \mathbb{N}$. Niech X bedzie n elementowym zbiórem punktów z $\mathbb{R}^d$ wraz ze średnią $\mu(X) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$. Zbiór $C \subset \mathbb{R}^d$ jest (ϵ, k) lightweight coresetem jeżeli dla dowolnego zbioru $Q \subset \mathbb{R}^d$ o mocy co najwyżej k zachodzi:

$$|\phi_X(Q) - \phi_C(Q)| \leq \frac{\epsilon}{2}\phi_X(Q) + \frac{\epsilon}{2}\phi_X(\mu(X))$$

Jak możemy zauważyć definicja (3.1) trochę się różni od (2.8). Notacje *lightweight* coresetu możemy interpretować jako relaksację gwarancji teoretycznych zdefiniowanych w (2.8). Wprowadza ona oprócz błędu multiplikatywnego, błąd addytywny. Nieformalnie, składnik $\frac{\epsilon}{2}\phi_X(Q)$ pozwala na odpowiednie skalowanie błędu aproksymacji dla funkcji ϕ, jest on tożsamy z błędem aproksymacji coresetu zdefiniowanego w 2.8. Druga część $\frac{\epsilon}{2}\phi_X(\mu(X))$ odpowiada za skalowalność rozwiązania zgodnie ze zmianą wariancji na danych. Przez skalowalność rozumiemy zmianę rozmiaru danych, mocy zbiorów.

Głowną motywacją stojącą za konstrukcjami coresetów jest to, żeby rozwiązanie obliczone na tym zbiorze było konkurencyjne z rozwiazaniem optymalnym dla całego zbioru danych. Dlatego w konkeście *lightweight* udowodnimy następujące twierdzenie.

Twierdzenie 3.1. *[5] Niech $\epsilon \in (0, 1]$. Niech X będzie skończonym zbiorem danych z $\mathbb{R}^d$ oraz niech C będzie (ϵ, k) lightweight coresetem dla X. Optymalne rozwiązanie problemu K-means dla X oznaczamy Q_X^*. Optymalne rozwiązanie problemu K-means dla C oznaczamy Q_C^*. Dla takich założeń zachodzi:*

$$\phi_X(Q_C^*) \leq \phi_X(Q_X^*) + 4\epsilon\phi_X(\mu(X))$$

Dowód. Zgodnie z własnością lightweight coresetu otrzymujemy:

$$\phi_C(Q_X^*) \leq (1 + \frac{\epsilon}{2})\phi_X(Q_X^*) + \frac{\epsilon}{2}\phi_X(\mu(X))$$

oraz

$$\phi_C(Q_C^*) \geq (1 - \frac{\epsilon}{2})\phi_X(Q_C^*) - \frac{\epsilon}{2}\phi_X(\mu(X))$$

Wiemy z definicji, że $\phi_C(Q_C^*) \leq \phi_C(Q_X^*)$ oraz $1 - \frac{\epsilon}{2} \geq \frac{1}{2}$. A więc:

$$\phi_X(Q_C^*) \leq \frac{1 + \frac{\epsilon}{2}}{1 - \frac{\epsilon}{2}}\phi_X(Q_X^*) + \frac{\epsilon}{1 - \frac{\epsilon}{2}}\phi_X(\mu(X))$$

$$\leq (1 + 2\epsilon)\phi_X(Q_X^*) + 2\epsilon\phi_X(\mu(X))$$

Zauważając, że:

$$\phi_X(Q_X^*) \leq \phi_X(\mu(X))$$

dowodzimy tezę twierdzenia. □

Twierdzenie 1 dowodzi, że kiedy wartość ϵ maleje koszt optymalnego rozwiązania otrzymanego na zbiorze C zbiega do kosztu rozwiązania otrzymanego na całym zbiorze danych.

3.2. Konstrukcja

Opisana w tym podrozdziale konstrukcja lightweight coresetu oparta jest na próbkowaniu z uwzględnieniem ważności danego punktu. Niech q będzie dowolnym rozkładem prawdopodobieństwa na zbiorze X oraz niech $Q \subset R^d$ będzie dowolnym potencjalnym zbiorem rozwiązań mocy k. Wtedy funkcję ϕ możemy zapisać jako:

$$\phi_X(Q) = \sum_{x \in X} q(x) \frac{d(x,Q)^2}{q(x)}$$

Wynika z tego, że funkcja ϕ może być aproksymowana poprzez wylosowanie m punktów z X korzystając z q i przypisując im wagi odwrotnie proporcjonalne do q. W szczególności musimy zagwarantować, jednostajność wyboru dowolnego zbioru k punktów Q z odpowiednim prawdopodobieństwem $1 - \delta$, gdzie $\delta \in (0, \frac{1}{2}]$. Funkcja q może mieć wiele form, autorzy [5] rekomendują postać:

$$q(x) = \frac{1}{2}\frac{1}{|X|} + \frac{1}{2}\frac{d(x,\mu(X))^2}{\sum_{x' \in X} d(x',\mu(X))^2}$$

Algorithm 1

procedure LIGHTWEIGHT
$\mu \leftarrow$ średnia dla X
for $x \in X$ **do**
$q(x) = \frac{1}{2}\frac{1}{|X|} + \frac{1}{2}\frac{d(x,\mu(X))^2}{\sum_{x' \in X} d(x',\mu(X))^2}$
$C \leftarrow$ próbka m ważonych punktów z X, gdzie każdy punkt x ma wagę $\frac{1}{mq(x)}$ oraz jest wylosowany z prawdopodobieństwem $q(x)$
return lightweight coreset C

Pierwszy składnik rozkładu q to rozkład jednostajny, który zapewnia, że każdy punkt jest wylosowany z niezerowym prawdopodobieństwem. Drugi składnik uwzględnia kwadrat odległości punktu od średniej $\mu(X)$ dla całego zbioru. Intuicyjnie, punkty, które są daleko od średniej $\mu(X)$ mogą mieć istotny wpływ na wartość funkcji ϕ. Musimy więc zapewnić, odpowiednią częstotliwość wyboru takich punktów. Jak pokazuje pseudokod, implementacja takiej konstrukcji jest całkiem prosta. Algorytm przechodzi przez zbiór danych jedynie dwukrotnie, a jego złożoność to $O(nd)$, gdzie n to rozmiar wejściowych danych, d to wymiar przestrzeni. Warto zwrócić uwagę na to, że nie mamy zależności od k co jest kluczowe w konkeście praktyczności takiego rozwiązania.

3.3. Analiza

W tym podrozdziale pokażemy, że zaproponowany w poprzedniej części algorytm oblicza lightweight coreset dla odpowiedniego m.

Twierdzenie 3.2. *[5] Niech $\epsilon > 0$, $\delta > 0$ oraz $k \in \mathbb{N}$. Niech X będzie skończonym zbiór punktów z $\mathbb{R}^d$ oraz $C \subseteq X$ to zbiór zwracany przez algorytm dla:*

$$m \geq c\frac{dk\log k + \log\frac{1}{\delta}}{\epsilon^2}$$

gdzie c jest stałą. Wtedy z prawdopodobieństwem co najmniej $1 - \delta$ zbiór C jest (ϵ, k) lightweight coresetem dla X.

Dowód. Zaczniemy od ograniczenia $q(x)$ dla każdego punktu $x \in X$. W tym celu definiuje funkcję:

$$f(Q) = \frac{1}{2|X|}\phi_X(Q) + \frac{1}{2|X|}\phi_X(\mu(X))$$

gdzie $\mu(X)$ to średnia zbioru X oraz dowodnimy następujący lemat.

Lemat 1. *[5] Niech X będzie skończonym zbiórem punktów z $\mathbb{R}^d$ wraz ze średnią $\mu(X)$. Dla każdego $x \in X$ oraz $Q \subset \mathbb{R}^d$ zachodzi:*

$$\frac{d(x,Q)^2}{f(Q)} \leq \frac{16d(x,\mu(X))^2}{\frac{1}{|X|}\sum_{x' \in X} d(x',\mu(X))^2} + 16$$

Dowód. Z nierówności trójkąta oraz z faktu, że $(|a| + |b|)^2 = 2a^2 + 2b^2$, otrzymujemy

$$d(\mu(X),Q)^2 \leq 2d(x,\mu(X))^2 + 2d(x,Q)$$

Uśrednienie dla wszystkich $x \in X$, implikuje:

$$\begin{aligned} d(\mu(X),Q)^2 &\leq \frac{2}{|X|}\sum_{x \in X} d(x,\mu(X))^2 + \frac{2}{|X|}\sum_{x \in X} d(x,Q) \\ &= \frac{2}{|X|}\phi_X(\mu(X)) + \frac{2}{|X|}\phi_X(Q) \end{aligned}$$

To implikuje, że dla każdego $x \in X$ oraz $Q \subset \mathbb{R}$ zachodzi:

$$d(x,Q)^2 \leq 2d(x,\mu(X))^2 + 2d(\mu(X),Q)$$

$$\leq 2d(x,\mu(x))^2 + \frac{4}{|X|}\phi_X(\mu(X)) + \frac{4}{|X|}\phi_X(Q)$$

Dzieląc powyższą nierówność przez wyżej zdefiniowaną funkcję $f(Q)$ dostajemy:

$$\begin{aligned} \frac{d(x,Q)^2}{f(Q)} &\leq \frac{2d(x,\mu(x))^2 + \frac{4}{|X|}\phi_X(\mu(X)) + \frac{4}{|X|}\phi_X(Q)}{\frac{1}{2|X|}\phi_X(Q) + \frac{1}{2|X|}\phi_X(\mu(X))} \\ &\leq \frac{2d(x,\mu(x))^2 + \frac{4}{|X|}\phi_X(\mu(X))}{\frac{1}{2|X|}\phi_X(\mu(X))} + \frac{\frac{4}{|X|}\phi_X(Q)}{\frac{1}{2|X|}\phi_X(Q)} \\ &\leq \frac{16d(x,\mu(X))^2}{\frac{1}{|X|}\sum_{x' \in X} d(x',\mu(X))^2} + 16 \end{aligned}$$

co kończy dowód lematu. □

Powyższy lemat implikuje, że stosunek pomiędzy kosztem kontrybucji $d(x,Q)^2$ jednego punku $x \in X$ a $f(Q)$ jest ograniczony dla każdego $Q \subseteq X$ przez:

$$s(x) = \frac{16d(x,\mu(X))^2}{\frac{1}{|X|}\sum_{x' \in X} d(x',\mu(X))^2} + 16$$

Niech $S = \frac{1}{|X|}\sum_{x\in X} s(x)$. Zauważmy, że:

$$S = \frac{1}{|X|}\sum_{x\in X} s(x) = \frac{1}{|X|}\sum_{x\in X}\Big(\frac{16d(x,\mu(X))^2}{\frac{1}{|X|}\sum_{x'\in X} d(x',\mu(X))^2} + 16\Big)$$

$$= \frac{1}{|X|}\sum_{x\in X}\Big(\frac{16d(x,\mu(X))^2}{\frac{1}{|X|}\sum_{x'\in X} d(x',\mu(X))^2}\Big) + \frac{1}{|X|}\sum_{x\in X} 16$$

$$= \frac{16\sum_{x\in X} d(x,\mu(X))^2}{\sum_{x'\in X} d(x',\mu(X))^2} + 16 = 32$$

dla każdego zbioru X. Dzięki temu możemy zapisać rozkład q jako:

$$q(x) = \frac{1}{2}\frac{1}{|X|} + \frac{1}{2}\frac{d(x,\mu(X))^2}{\sum_{x'\in X} d(x',\mu(X))^2} = \frac{s(x)}{S|X|}$$

dla każdego $x \in X$. Teraz zdefinujmy funkcję:

$$g_Q(x) = \frac{d(x,Q)^2}{f(Q)s(x)}$$

dla każdego $x \in X$ oraz $Q \subset \mathbb{R}^d$. Zauważmy, że dla dowolnego zbioru $Q \subset \mathbb{R}^d$ zachodzi:

$$\phi_X(Q) = \sum_{x\in X} d(x,Q)^2 = S|X|f(Q)\sum_{x\in X}\frac{s(x)}{S|X|}\frac{d(x,Q)^2}{f(Q)s(x)}$$

$$= S|X|f(Q)\sum_{x\in X} q(x)g_Q(x)$$

Następnie podstawiamy z definicji wartości oczekiwanej:

$$\mathbb{E}_q[g_Q(x)] = \sum_{x\in X} q(x)g_Q(x)$$

dzięki temu przekształcamy ostatnie równanie:

$$\phi_X(Q) = S|X|f(Q)\mathbb{E}_q[g_Q(x)]$$

Następnym krokiem jest ograniczenie wartości $\mathbb{E}_q[g_Q(x)]$. Autorzy [5] nie dowodzą wprost tego ograniczenia, powołując się na inne prace [10]. Dowód jest bardzo skompilowany i wykracza tematyką istotnie poza ramy tej pracy, więc go pomijamy. Korzystamy z finalnego ograniczenia:

$$|\mathbb{E}_q[g_Q(x)] - \frac{1}{|C|}\sum_{x\in X} g_X(x)| \leq \frac{\epsilon}{32}$$

Powyższe ograniczenie jest prawdziwe z prawdopodobieństwem $1-\delta$ dla dowolnego $Q \subset \mathbb{R}^d$ o rozmiarze nie większym niż k. Mnożąc obie strony nierówności przez $32|X|f(Q)$ otrzymujemy:

$$|32|X|f(Q)\mathbb{E}_q[g_Q(x)] - \frac{32|X|f(Q)}{|C|}\sum_{x\in X} g_X(x)| \leq \epsilon|X|f(Q)$$

Niech (C, u) będzie ważonym zbiorem, gdzie dla każdego $x \in C$ definujemy funkcję $u(x) = \frac{1}{|C|q(x)}$. Wynika z tego, że:

$$\frac{32|X|f(Q)}{|C|} \sum_{x \in X} g_X(x) = \sum \frac{1}{|C|q(x)} d(x, Q)^2$$

$$= \sum u(x) d(x, Q)^2 = \phi_C(Q)$$

A więc otrzymujemy:

$$|32|X|f(Q)\mathbb{E}_q[g_Q(x)] - \phi_C(Q)| \leq \epsilon |X| f(Q)$$

$$|\phi_Q(Q) - \phi_C(Q)| \leq \frac{\epsilon}{2}\phi_X(Q) + \frac{\epsilon}{2}\phi_X(\mu(X))$$

co kończy dowód twierdzenia 3.2.

□

4. Geometryczna Dekompozycja

W tej części pracy przedstawimy konstrukcję budowy coresetu bazującą na geometrycznej dekompozycji problemu. Punktem wyjścia były badania [13], na których bazuje opisany w podrozdziale 4.4 algorytm. Zgodnie z nimi budowa coresetu w kontekście problemu K-means to wieloetapowy proces, który jest sekwencją algorytmów z prac: [8] [9] [4] [13]. W rozdziale przyjmujemy następujący porządek analizy konstrukcji:

- W sekcjach 4.1, 4.2, 4.3 opiszemy konstrukcje pomocnicze pochodzące z prac: [8], [9], [4].
- W sekcji 4.4 opiszemy właściwy algorytm z pracy [13].

4.1. Algorytm Gonzalez'a

Pierwszy algorytm, który opiszemy to *Farthest point algorithm* z pracy [8]. Jest to pierwszy algorytm aproksymacyjny rozwiązujących problem k-centrów ze współczynnikiem aproksymacji równym 2. Jego złożoność to $O(nk)$, gdzie n jest liczbą punktów danych na wejściu.

Na potrzeby tego rozdziału wprowadzimy kilka definicji.

Definicja 4.1. Niech *G = (V, E, W)* będzie ważonym nieskierowanym grafem ze zbiorem wierzchołków V, krawędzi E oraz funkcją $W : E \to \mathbb{R}^+$ przyporządkowującą wagi krawędziom. W tym rozdziale utożsamiamy wagi z dystansem pomiędzy dwoma punktami.

Definicja 4.2. Podział zbioru wierzchołków na $k \in \mathbb{N}$ zbiorów $B_1, \ldots, B_k$, nazywamy *k-splitem.*

Definicja 4.3. Zbiory B_i podziału k-split nazywamy *klastrami.*

Dla każdego k-splitu defninujemy funkcję celu $f : B_1, \ldots, B_k \to \mathbb{R}_{\geq 0}$. W tym rozdziale zakładamy, że funkcją celu jest $max(M_1, \ldots, M_k)$, gdzie M_i to największa waga krawędzi pomiędzy dowolnymi dwoma punktami z B_i.

Definicja 4.4. *Problem klastrowania.* Dla danego grafu G, funkcji celu f oraz $k \in \mathbb{N}$ znaleźć k-split, dla którego funkcja f jest zminimalizowana. Dla przykładu: znaleźć k-split $(B_1^*, \ldots, B_k^*)$ taki, że

$$f(B_1^*, \ldots, B_k^*) = min\{f(B_1, \ldots, B_k) | (B_1, \ldots, B_k) \text{ to } \textit{k-split} \text{ dla } G \}$$

Niech $S \subset \mathbb{R}^d$ będzie zbiorem, który chcemy podzielić na k klastrów oraz niech T będzie podzbiorem S. Zakładamy, że $|S| > k$ ponieważ w przeciwnym przypadku problem podziału jest trywialnie rozwiązywalny.

Definicja 4.5. Zbiór T nazywamy $(k+1)$ kliką wysokości h jeżeli moc zbioru T jest równa $k+1$ oraz odległość pomiędzy parą dwóch rożnych punktów jest równa co najmniej h.

Niech $OPT(S)$ oznacza optymalne rozwiązanie problemu k-centrów dla zbioru S. Udowodnimy teraz następujący lemat, który jest potrzebny w dowodzie ograniczającym współczynnik aproksymacji algorytmu.

Lemat 2. *[8] Jeżeli w zbiorze S istnieje $(k+1)$ klika wysokości h, to $OPT(S) \geq h$.*

Dowód. Kilka ma $k+1$ elementów, zatem co najmniej 2 z nich wylądują w jednym klastrze. W takim razie waga krawędzi pomiędzy tymi punktami to co najmniej h co implikuje, że $OPT(S) \geq h$. □

Algorytm Gonzaleza podziału na k klastrów składa się z fazy inicjalizującej oraz $k-1$ faz powiększających. W fazie inicjalizującej wszystkie elementy są przypisana do zbioru B_1, który jest pierwszym klasterm. Jeden z elementów tego zbioru oznaczamy jako (t_1) - środek klastra B_1. Wybór tego elementu jest losowy. Podczas j fazy powiększającej, niektóre elementy z istniejącego podziału na klastry $B_1, \ldots, B_j$ trafiają do nowego zbioru B_{j+1}. Dodatkowo jeden z elemntów nowego zbioru będzie oznaczony jako (t_{j+1}) - środek klastra B_{j+1}. Budowę zbioru B_{j+1} rozpoczynamy od wyboru punktu v, który należy do jednego ze zbiorów $B_1, \ldots, B_j$ oraz jego odległość do środka klastra, do którego należy jest największa spośród wszystkich punktów z $B_1, \ldots, B_j$. Taki punkt będzie oznaczony jako (t_{j+1}), czyli jest środkiem klastra B_{j+1}. Każdy punkt, dla którego dystans do v jest nie większy niż dystans do środka klastru, w którym się znajduje zostaje przeniesiony do B_{j+1}.

Algorithm 2

Niech T będzie szukanym zbiorem k-centrów.
Dla każdego punktu $p \notin T$, algorytm trzyma $neighbor(p)$, czyli najbliższy punkt w T dla p oraz $dist(p)$, czyli odległość od punktu p do $neighbor(p)$.
procedure FARTHEST POINT ALGORITHM
  $T \leftarrow \emptyset$
  $dist(p) \leftarrow \infty$ for all $p \in S$
  while $|T| \leq k$ **do**
    $D \leftarrow max\{dist(p) | p \in S - T\}$
    wybierz v z $S - T$ tak, aby $dist(v) = D$
    add v to T
    zaktualizuj $neighbor(p)$ oraz $dist(p)$ dla każdego $p \in S - T$
return T

Powyższy algorytmy buduje jakiś k-split. Teraz pokażemy, że dla takiego k-splitu wartość funkcji celu $f(S)$ jest ograniczona przez $2 \cdot OPT(S)$.

Niech $v \in B_j$ oraz $1 \leq j \leq k$ będzie wierzchołkiem, którego odległość do

(t_j) jest maksymalna. Niech h będzie tą odległością. Ponieważ dla zbioru wag krawędzi zachodzi nierówność trójkąta to:

$$W(E(x,y)) \leq W(E(x,t_i)) + W(E(y,t_i)) \leq 2h$$

gdzie t_i to centrum klastra dla punktów $x, y \in B_i$. A więc możemy ograniczyć wartość naszej funkcji celu przez $f(S) \leq 2h$. Ponieważ v nigdy nie zostało wybrane na centrum klastra to wiemy, że $W(t_i, t_j) \geq h$ dla $i \neq j$. Niech $T = \{t_1, \ldots, t_k, v\}$. Z definicji wiemy, że T jest $(k+1)$ kliką wagi h, więc z lematu 2, $OPT(S) \geq h$. A więc ograniczenie wartości funkcji celu to $f(S) \leq 2h \leq 2 \cdot OPT(S)$.

4.2. Konstrukcja kraty wykładniczej

W tym podrozdziale omówimy część pracy [9]. Tematem pracy są konstrukcje algorytmów dla problemów k-means oraz k-median. W kontekście problemu k-means autorzy zaproponowali algorytm rozwiązujący problem k-means bazujący na budowaniu coresetu, który uzyskuje lepszą złożoność od [12]. Schemat konstrukcji jest następujący:

- Obliczmy szybką ale niedokładną aproksymację dla problemu k-means z pewną dużą wartością k.
- Obliczoną aproksymację przekształcamy w (ϵ, k) coreset używając kraty wykładniczej.

4.2.1. Szybka aproksymacja dla problemu K-means.

Zacznijmy od pierwszej części. Dokładniej, udowodnimy następujące twierdzenie.

Twierdzenie 4.1. *[9] Dla danego zbioru n punktów $P \subset \mathbb{R}^d$ oraz parametru $k \in \mathbb{N}$ możemy obliczyć zbiór X o mocy $O(k \log^3 n)$, dla którego*

$$\phi_P(X) \leq 32\phi^k_{opt}(P)$$

Czas działania algorytmu to $O(n)$ dla $k = O(n^{\frac{1}{4}})$ oraz $O(n \log(k \log n))$ w przeciwnym przypadku.

Niech $P \subset \mathbb{R}^d$ będzie danym na wejściu zbiórem k punktów. Chcemy szybko obliczyć aproksymację dla problemu K-means na tym zbiorze, gdzie k będzie rzędu $O(k \log^3 n)$.

Definicja 4.6. *Złe/dobre punkty.* Dla zbioru punktów X, punkt $p \in P$ nazywamy *złym* jeżeli

$$d(p, X) \geq 2d(p, C_{opt})$$

gdzie C_{opt} jest zbiórem punktów realizującym $\phi^k_{opt}(P)$. Punkt jest *dobry* jeżeli nie jest zły.

Na początku opiszemy procedurę, która dla danego P, wyznacza zbiór punktów X oraz zbiór $P^{'} \subset P$. Zbiór $P^{'}$ będzie zawierać *dobre* punkty dla zbioru X.

Konstrukcję zbioru X zaczynamy od obliczenia 2-aproksymacji problemu k-centrów dla zbioru P. Niech obliczony zbiór centrów to V. Taką aproksymację dla $k = O(n^{\frac{1}{4}})$ możemy obliczyć w czasie $O(n)$ oraz dla $k = \Omega(n^{\frac{1}{4}})$ w czasie $O(n \log k)$ [7]. Niech L będzie promieniem takiej aproksymacji, czyli największą odległością pomiędzy centrem a punktem $p \in P - V$. Ponieważ [7] bazuje na [8] to dystans pomiędzy dowolną parą punktów z V to conajmniej L. To implikuje następujące ograniczenia:

$$\left(\frac{L}{2}\right)^2 \leq \phi^k_{opt}(V) \leq \phi^k_{opt}(P) \leq nL^2$$

Następnym krokiem konstrukcji jest wylosowanie $\rho = \gamma k \log^2 n$ punktów ze zbioru P. Niech wylosowane punkty to Y, gdzie γ jest stałą, która wynika z analizy, którą zaraz przeprowadzimy. Finalnie, $X = Y \cup V$ będzie zbiorem centrów klastów. Dla $\rho > n$ przyjmujemy $X = P$.

Konstrukcja zbioru X jest stosunkowo prosta. Dużo cięższym zadaniem jest zbudowanie zbioru $P^{'}$, który jest zbiorem *dobrych* punktów dla X.

4.2.2. Konstrukcja zbioru dobrych punktów dla X.

Rozpatrzmy zbiór C_{opt}, który jest optymalnym zbiorem centrów dla problemu K-means w kontekście P. Dla każdego $c_i \in C_{opt}$ tworzymy kulę b_i o środku w c_i. Każda taka kula będzie zawierać $\eta = \frac{n}{20k \log n}$ punktów z P. Jeżeli γ jest odpowiednio duże to z wysokim prawdopodobieństwem w każdym b_i jest przynajmniej jeden punkt z X. Dokładniej:

$$X \cap b_i \neq \emptyset \text{ dla } i = 1 \ldots k$$

Niech P_{bad} będzie zbiorem złych punktów P w kontekście zbioru X. Załóżmy, że dla każdego b_i istnieje punkt $x_j \in X$, który $x_j \in b_i$. Zauważmy, że dla każdego punktu $p \in P \setminus b_i$, dla którego x_j jest centerm mamy $||px_j|| \leq ||pc_i||$. W szczególności takie punkty są *dobre*, dla c_i będącymi optymalnymi centrami dla tych punktów. Zatem z wysokim prawdopodobieństwem jedyne *złe* punkty będą w kulach b_i dla $i = 1, \ldots, k$. To implikuje, że z wysokim prawdopodobieństwem liczba złych punktów w P dla zbioru X to co najwyżej $\beta = k\eta = \frac{n}{20 \log n}$.

W takim razie złych punktów nie jest dużo. Mimo tego bezpośrednie wyznaczenie tych punktów jest skomplikowane. Autorzy pracy [9] budują zbiór $P^{'}$ tak aby koszt złych punktów w $P^{'}$ był jak najmniejszy. Koszt w tym kontekście oznacza to jaki wkład ma punkt w wartość $\phi_{P'}(X)$. Dla każdego punktu w P obliczamy najbliższego sąsiada w X. Niech $r(p) = d(p, X)$ dla każdego punktu $p \in P$. Teraz podzielimy P na zbiory według następującej formuły:

$$P[a, b] = \{p \in P \mid a \leq r(p) \leq b\}$$

A dokładniej:

$$P_0 = P\Big[0, \frac{L}{4n}\Big]$$
$$P_\infty = P\Big[2Ln, \infty\Big]$$
$$P_i = P\Big[\frac{2^{i-1}L}{n}, \frac{2^i L}{n}\Big]$$

dla $i = 1, \ldots, M$, gdzie $M = 2\lceil \lg n \rceil + 3$. Taki podział możemy wykonać w czasie linowym. Niech P_α będzię ostatnim zbiorem, który zawiera więcej niż $2\beta = \frac{n}{10 \log n}$. Szukany zbiór zdefiniujemy następująco:

$$P^{'} = V \cup \bigcup_{i \leq \alpha} P_i$$

gdzie $|P^{'}| \geq \frac{n}{2}$ oraz $\phi_{P'}(X) = O(\phi_{P'}(C_{opt}))$. Teraz udowodnimy, że faktycznie tak zdefiniowane $P^{'}$ spełnia powyższe założenia.

Dowód. Moc zbioru $P^{'}$ jest na pewno równa conajmniej $\Big(n - |P_\infty| - M\frac{n}{10 \log n}\Big)$. Zauważmy, że $P_\infty \subseteq P_{bad}$ oraz $|P_{bad}| \leq \beta$. A więc:

$$|P^{'}| \geq n - \frac{n}{20 \log n} - M\frac{n}{10 \log n}$$
$$= n - \Big(\frac{n}{10 \log n}\Big)\Big(M + \frac{1}{2}\Big)$$
$$= n - \Big(\frac{n}{10 \log n}\Big)\Big(2\lceil \lg n \rceil + 3 + \frac{1}{2}\Big)$$
$$\geq \frac{n}{2}$$

Jeżeli $\alpha > 0$, to $|P_\alpha| \geq 2\beta = \frac{n}{10 \log n}$. Teraz chcemy oszacować jaką kontrybucję w $P^{'}$ mają złe punkty. Z uwagi na to jak budujemy $P^{'}$ w najgorszym przypadku wszystkie złe punkty będą w P_α. Wtedy takie punkty będą miały największy wpływ na funkcję ϕ. Niech $Q^{'} = P_\alpha \backslash P_{bad}$. Dla dowolnego punktu z $p \in P^{'} \cap P_{bad}$ oraz $q \in Q^{'}$, mamy $d(p, X) \leq 2d(q, X)$. Dodatkowo $|Q^{'}| > |P_{bad}|$, a więc:

$$\phi_{P' \cap P_{bad}}(X) \leq 4\phi_{Q'}(X) \leq 16\phi_{Q'}(C_{opt}) \leq 16\phi_{P'}(C_{opt})$$

Teraz możemy wyprowadzić następujące ograniczenie:

$$\phi_{P'}(X) = \phi_{P' \cap P_{bad}}(X) + \phi_{P' \backslash P_{bad}}(X)$$
$$\leq 16\phi_{P'}(C_{opt}) + 4\phi_{P'}(C_{opt}) = 20\phi_{P'}(C_{opt})$$

Jeżeli $\alpha = 0$, to dla dowolnego punktu $p \in P^{'}$ mamy:

$$(d(p, X))^2 \leq n\Big(\frac{L}{4n}\Big)^2 \leq \frac{L^2}{4n}$$

Zatem:

$$\phi_{P'}(X) \leq \frac{L^2}{4} \leq \phi_V(C_{opt}) \leq \phi_{P'}(C_{opt})$$

gdzie $V \subseteq P^{'}$. □

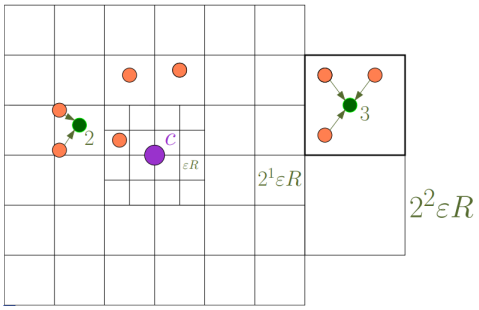
Powyższa analiza dowodzi poprawności konstrukcji dla zbiorów X i $P^{'}$. Podsumowując otrzymujemy zbiór X o mocy $O(k \log^2 n)$ oraz zbiór $P^{'}$, dla którego mamy $\phi_{P'}(X) \leq 32\phi_{P'}(C_{opt})$. Czas działania tego algorytmu to $O(n)$ dla $k = O(n^{\frac{1}{4}})$ oraz $O(n \log(k \log n))$ w przeciwnym przypadku. Aby otrzymać taką złożoność kluczowe jest szybkie obliczanie najbliższych sąsiadów. Autorzy proponują [2].

Wróćmy teraz do twierdzenia 4.1, które zostało zdefiniowane na początku podrozdziału 4.2. Powyżej zdefiniowaną procedurę powtarzamy dla zbioru $P_1 = P \setminus P^{'}$. Analogicznie otrzymamy zbiór $P_1^{'}$ oraz X_1. Kolejny raz aplikujemy procedurę na zbiorze $P_2 = P \setminus (P^{'} \cup P_1^{'})$. Ponieważ za każdym razem zbiór P_i zmieniejsza się o połowę to taki proces zakończy się po $O(\log n)$ powtórzeniach. Finalnie otrzymamy zbiór $X \cup X_1 \dots X_i$ o mocy $O(k \log^3 n)$, dla którego $\phi_P(X) \leq 32\phi_P(C_{opt})$. Złożoność pozostanie taka sama, czyli $O(n)$ dla $k = O(n^{\frac{1}{4}})$ oraz $O(n \log(k \log n))$ w przeciwnym przypadku.

4.2.3. Krata wykładnicza.

Przejdzmy teraz do kluczowej części tego podrozdziału, czyli konstrukcji kraty wykładniczej. Niech $P \subset \mathbb{R}^d$, $|P| = n$ oraz niech $A = \{x_1, \dots, x_m\}$ będzie zbiorem punktów, dla którego zachodzi $\phi_P(A) \leq c\phi_{opt}^k(P)$, gdzie c jest stałą. Nasze A otrzymamy z konstrukcji opisanej w 4.2.1 dla $k = O(kpoly \log n)$, gdzie $poly \log n = \bigcup_{c \geq 1} O(\log^c n)$.

Niech $R = \sqrt{\frac{\phi_P(A)}{cn}}$ będzie dolnym ograniczeniem dla $R_{opt}^{\phi}(P,k) = \sqrt{\frac{\phi_{opt}(P,k)}{n}}$ Niech P_i będzie podzbiorem punktów z P, dla których punkt $x_i \in A$ jest dla niech najbliższym sąsiadem. Dla dowolnego $p \in P_i$, mamy $||px_i|| \leq \sqrt{xn}R$, ponieważ $||px_i||^2 \leq \phi_P(A)$ dla $i = 1, \dots, m$.



Rysunek 4.1: Krata wykładnicza, gdzie $c = x_i$.

Kolejnym krokiem będzie budowa kraty wykładniczej wokół każdego punktu x_i oraz nałożenie jej na zbiór P. Niech $Q_{i,j}$ będzie kwatratem o boku długości $R2^j$ o środku w punkcie x_i dla $j = 0, \dots, M$, gdzie $M = \lceil 2 \lg(cn) \rceil$, który jest równoległy do osi układu współrzednych dla danej przestrzeni. Następnie, niech $V_{i,0} = Q_{i,0}$ oraz niech $V_{i,j} = Q_{i,j} \setminus Q_{i,j}$ dla $j = 0, \dots, M$. Kolejnym krokiem będzie przekształcenie $V_{i,j}$ w kratę, której komórki będą długości $r_j = \frac{\epsilon R 2^j}{10cd}$ oraz niech G_i oznacza wynikową kratę wykładniczą dla $V_{i,0}, \dots, V_{i,M}$. Mając

G_i obliczamy dla każdego punktu z P_i komórkę, do której należy. Dla każdej niepustej komórki z kraty wybieramy losowy punkt z P_i, który będzie jej reprezentantem. Do takiego punktu przypisujemy wagę, która bedzie równa liczbie punktów z komórki, dla której jest reprezentantem. Po przejściu całej kraty otrzymamy zbiór S_i takich punktów. Definujemy $S = \bigcup_i S_i$, który jest (ϵ, k) coresetem. Zauważmy, że $|S| = O\Big(\frac{|A| \log n}{(c\epsilon)^d}\Big)$, ponieważ każda krata ma $\log n$ poziomów, a każdy poziom stałą liczbę komórek.

4.3. Heurystyka single swap

W tym podrozdziale opiszemy heurystykę single swap [4], która jest przykładem techinki *local search*. Algorytm przedstawi konstrukcję $(25 + \epsilon)$ aproksymacji dla problemu K-means, która zakłada, że na wejściu dostajemy zbiór kandydatów na centra C oraz zbiór n punktów $P \subset \mathbb{R}^d$. Autorzy powołują się na pracę [12], którą zastąpimy pracą [9] z uwagi na lepsze gwarancje teoretyczne. Korzystając z podrozdziału 4.2, w którym przedstawiliśmy [9], obliczamy zbiór C.

Heurystyka *single swap* działa poprzez wybranie początkowego zestawu k centrów S ze zbioru kandydatów na centra C, a następnie wielokrotnej próbie ulepszenia rozwiązania poprzez usunięcie jednego środka $s \in S$ i zastąpienie go innym centerm $s^{'} \in C - S$. Niech $S^{'} = S - \{s\} \cup \{s^{'}\}$ będzie nowym zbiorem centrów. Jeżeli $\phi_{S'}(C_{opt}) \leq \phi_S(C_{opt})$ to zastępujemy zbiór S zbiorem $S^{'}$, w przeciwnym przypadku S pozostaje bez zmian. W praktyce taki proces powtarzamy do momentu, kiedy $|\phi_{S'}(C_{opt}) - \phi_S(C_{opt})| < \epsilon$. Formalnie możemy udowodnić, że dla $\epsilon > 0$, po wielomianiwej liczbie wykonań takiej procedury algorytm zakończy swoje działanie. Autorzy nie dowodzą tego wprost ale powołują się na pracę [3].

Dla uproszczenia zakładamy, że algorytm kończy się kiedy pojedyńcza wymiana elementów s, $s^{'}$ nie poprawia wyniku. Taki zbiór centrów nazwiemy *1-stable*.

Definicja 4.7. Zbiór nazywamy *1-stable*, jeżeli:

$$\Delta(S - \{s\} \cup \{c\}) \leq \Delta(S)$$

dla dowolnych $s \in S$ oraz $c \in C_{opt}$.

Dodatkowo wprowadźmy notację:

$$\Delta(S) = \Delta_P(S) = \sum_{q \in P} \Delta(q, s_q) = \sum_{q \in P} d(q, s_q)^2$$

gdzie s_q to najbliższy punkt dla q w S oraz $P \subset \mathbb{R}^d$.

Definicja 4.8. Niech $N_S(s)$ oznacza sąsiedzctwo punktu s, czyli zbiór punktów z P, dla których punkt s jest najbliżej spośród punktów z S.

W ramach tego podrozdziału udowodnimy następujące twierdzenie.

Twierdzenie 4.2. *[9] Niech S będzie zbiorem k centrów spełniającym własność 1-stable oraz niech C_{opt} będzie optymalnym zbiorem k centrów. Wtedy zachodzi następującą nierówność:*

$$\Delta(S) \leq 25\Delta(C_{opt})$$

Lemat 3. *[9] Dla danego skończonego podzbioru S punktów z $\mathbb{R}^d$, niech c będzie centroidem dla S. Wtedy dla dowolnego $c' \in \mathbb{R}^d$, $\Delta(S, c') = \Delta(S, c) + |S|\Delta(c, c')$.*

Dowód. Z definicji $\Delta(S, c')$ otrzymujemy:

$$\Delta(S, c') = \sum_{u \in S} \Delta(u, c') = \sum_{u \in S} (u - c')(u - c')$$

$$= \sum_{u \in S} ((u - c) + (c - c'))((u - c) + (c - c'))$$

$$= \sum_{u \in S} ((u - c)(u - c)) + 2((u - c)(c - c')) + ((c - c')(c - c'))$$

$$= \Delta(S, c) + 2\Big((c - c') \sum_{u \in S} (u - c)\Big) + |S|((c - c')(c - c'))$$

$$= \Delta(S, c) + |S|\Delta(c, c')$$

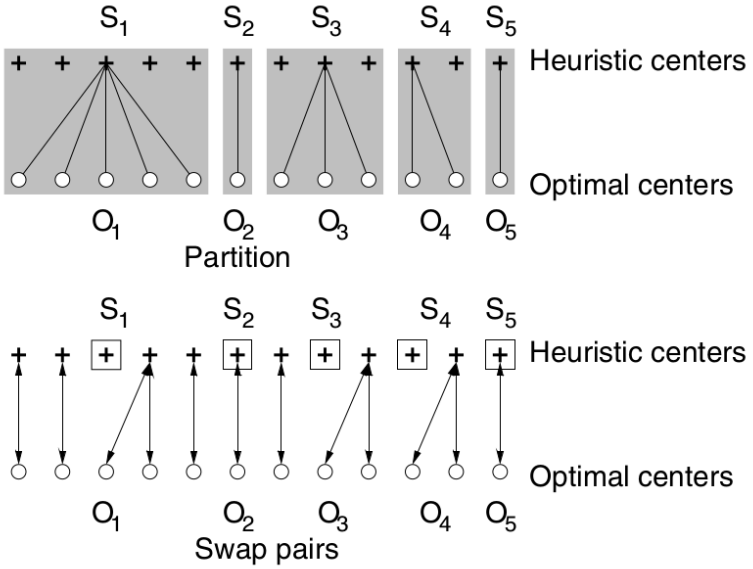
Ostanie przejście korzysta z faktu, że jeżeli c jest centroidem S to z definicji zachodzi $\sum_{u \in S}(u - c) = 0$. □

Dla każdego optymalnego $c \in C_{opt}$ wyznaczamy s_c, czyli najbliższe heurestyczne centrum z S dla c. W takim kontekście powiemy, że c jest *schwytane* przez s_c. Tutaj warto zaznaczyć, że każde optymalne centrum jest schwytane przez jedno heurystyczne centrum, ale każde heurystyczne centrum może być schwytane przez kilka optymalnych centrów. Heurystyczne centrum nazwiemy *samotnym* jeżeli nie jest schwytane przez żadne optymalne centrum.

Dowód. Dowód twierdzenia zaczniemy od zdefniowania podziału S oraz C_{opt} na zbiory $S_1, \ldots, S_r$ oraz $O_1, \ldots, O_r$ dla pewnego r, gdzie $|S_i| = |O_i|$ dla $i = 1, \ldots, r$.

Dla każdego heurystycznego centrum s_i, które schywało jakąś liczbę $m \geq 1$ optymalnych centrów, tworzymy zbior S_i, który będzie zawierał s_i oraz dowolne $m - 1$ osamotnionych heurystycznych centrów. Analogicznie, zbior O_i będzie zawierał wszystkie optymalne centra schwytane przez s_i. Rysunek 4.2 obrazuje tak zdefiniowany podział.

Następnie będziemy chcieli zdefiniować *swap pary*. Dla każdego podziału $|S_i| = |O_i| = 1$, tworzymy z nich parę. Dla każdego podziału, który zawiera więcej schwytanych centrów, czyli $|S_i|, |O_i| \geq 1$, tworzymy pary między osamotnionymi heurystycznymi centrami a optymalnymi centrami. Każde optymalne centrum jest związane z jednym heurystycznym oraz każde osamotnione centrum jest przyporządkowane co najwyżej dwóm optymalnym centrom. Centra łaczymy dowolnie. Rysunek 4.2 przedstawia przykładowe swap pary.



Rysunek 4.2

Teraz chcielibyśmy znaleźć ograniczenie górne na zmianię funkcji Δ po skorzystaniu ze swap pary (s, o). Zaczniemy od obliczenia najbliższych centrów z $S - \{s\} \cup \{o\}$ dla punktów z P. Dla punktów $p \in P$, które należą do $N_O(o)$ zmiana Δ będzie następująca:

$$\sum_{q \in N_O(o)} (\Delta(q, o) - \Delta(q, s_q))$$

Każde $q \in N_S(s) \setminus N_O(o)$ straciło przypisane mu centrum s zatem punkt q musi otrzymać nowe centrum. Niech o_q będzie oznaczało najbliższe centrum dla punktu q. Skoro $q \notin N_O(o)$ to $o_q \neq o$, zatem s nie schwytało o_q. A więc po skorzystaniu ze swap pary, s_{o_q}, najbliższe heurystyczne centrum dla o_q nadal istnieje. Zmiana Δ po wyborze nowych centrów jest co najwyżej równa:

$$\sum_{q \in N_S(s_i) \setminus N_O(o_i)} (\Delta(q, s_{o_q}) - \Delta(q, s))$$

Na tym etapie dowodu koniecznie będzie wprowadzenie dwóch lematów.

Lemat 4. *[9] Niech S będzie zbiorem k centrów spełniającym własność 1-stable oraz niech C_{opt} będzie optymalnym zbiorem k centrów. Wtedy zachodzi następującą nierówność:*

$$0 \leq \Delta(O) - 3\Delta(S) + 2R$$

gdzie, $R = \sum_{q \in P} \Delta(q, s_{o_q})$.

Dowód. Ponieważ S jest 1-stable to:

$$0 \leq \Delta(S) - \Delta(S - \{s\} \cup \{o\})$$

$$= \sum_{q \in N_O(o)} (\Delta(q,o) - \Delta(q,s_q)) + \sum_{q \in N_S(s) \setminus N_O(o)} (\Delta(q,s_{o_q}) - \Delta(q,s))$$

Aby rozszerzyć sumę na wszystkie możliwe swap pary zauważamy, że dla każdego optymalnego centrum, jest ono swapnięte tylko raz. Zatem każdy punkt q kontrybuuje w pierwszej sumie tylko raz. Po drugie zaważmy, że różnca w drugiej sumie jest zawsze niezerowa dlatego rozszerzając zakres sumowania mozemy tylko zwiększyć sumaryczny wynik.

$$0 \leq \sum_{q \in P} (\Delta(q,o_q) - \Delta(q,s_q)) + \sum_{q \in P} (\Delta(q,s_{o_q}) - \Delta(q,s_q))$$

$$0 \leq \sum_{q \in P} \Delta(q,o_q) - 3\sum_{q \in P} \Delta(q,s_q) + 2\sum_{q \in P} \Delta(q,s_{o_q})$$

$$0 \leq \Delta(C_{opt}) - 3\Delta(S) + 2R$$

□

Wcześniej zdefiniowane R nazywamy sumarycznym kosztem przepisania centrów. Korzystając z lematu 3 przekształcamy:

$$R = \sum_{o \in O} \sum_{q \in N_O(o)} \Delta(q,s_o) = \sum_{o \in O} \Delta(N_O(o), s_o)$$

$$= \sum_{o \in O} (\Delta(N_O(o), o) + |N_o(O)|\Delta(o,s_o)$$

$$= \sum_{o \in O} \sum_{q \in N_O(o)} (\Delta(q,o) + \Delta(o,s_o))$$

$$\leq \sum_{o \in O} \sum_{q \in N_O(o)} (\Delta(q,o) + \Delta(o,s_q))$$

$$= \sum_{q \in P} (\Delta(q,o_q) + \Delta(o_q,s_q))$$

gdzie ostatnia nierówność bazuje na fakcie, że dla każdego $q \in N_O(o)$ mamy $\Delta(o,s_o) \leq \Delta(o,s_q)$. Następnie korzystamy z nierówności trójkąta.

$$R \leq \sum_{q \in P} \Delta(q,o_q) + \sum_{q \in P} (d(o_q,q) + d(q,s_q))^2$$

$$= \sum_{q \in P} \Delta(q,o_q) + \sum_{q \in P} (d(o_q,q)^2 + 2d(o_q,q)d(q,s_q) + d(q,s_q)^2)$$

$$= 2\sum_{q \in P} \Delta(q,o_q) + \sum_{q \in P} \Delta(q,s_q) + 2\sum_{q \in P} d(o_q,q)d(q,s_q)$$

$$= 2\Delta(O) + \Delta(S) + 2\sum_{q \in P} d(o_q,q)d(q,s_q)$$

Lemat 5. *[9] Niech $\langle o_i \rangle$ oraz $\langle s_i \rangle$ będą ciągami liczb rzeczywistych, dla których zachodzi:*

$$\alpha^2 = \frac{\sum_i s_i^2}{\sum_i o_i^2}$$

dla pewnego $\alpha > 0$. Wtedy:

$$\sum_{i=1}^{n} o_i s_i \leq \frac{1}{\alpha} \sum_{i=1}^{n} s_i^2$$

Dowód. Z nierówności Schwarza:

$$\sum_{i=1}^{n} o_i s_i \leq \Big(\sum_{i=1}^{n} o_i^2 \Big)^{\frac{1}{2}} \Big(\sum_{i=1}^{n} s_i^2 \Big)^{\frac{1}{2}}$$

$$= \Big(\frac{1}{\alpha^2} \sum_{i=1}^{n} s_i^2 \Big)^{\frac{1}{2}} \Big(\sum_{i=1}^{n} s_i^2 \Big)^{\frac{1}{2}}$$

$$= \frac{1}{\alpha} \sum_{i=1}^{n} s_i^2$$

□

Niech o_i będzie ciągiem $d(q, o_q)$ oraz niech s_i będzie ciągiem $d(q, s_q)$ dla wszystkich $q \in P$. Z tego wynika, że błąd aproksymacji możemy przedstawić jako:

$$\alpha^2 = \frac{\Delta(S)}{\Delta(O)} = \frac{\sum_{q \in P} d(q, s_q)^2}{\sum_{q \in P} d(q, o_q)^2} = \frac{\sum_{i=1}^{n} s_i^2}{\sum_{i=1}^{n} o_i^2}$$

Korzystając z lematu 5:

$$R \leq 2\Delta(O) + \Delta(S) + 2 \sum_{q \in P} d(o_q, q) d(q, s_q)$$

$$\leq 2\Delta(O) + \Delta(S) + \frac{2}{\alpha} \sum_{q \in P} d(q, s_q)^2$$

$$= 2\Delta(O) + \Delta(S) + \frac{2}{\alpha} \Delta(S)$$

$$= 2\Delta(O) + \Big(1 + \frac{2}{\alpha} \Big) \Delta(S)$$

Z lematu 4 wiemy, że:

$$0 \leq \Delta(O) - 3\Delta(S) + 2R$$

$$= \Delta(O) - 3\Delta(S) + 2\Big(2\Delta(O) + \Big(1 + \frac{2}{\alpha} \Big) \Delta(S) \Big)$$

$$\leq 5\Delta(O) - \Big(1 - \frac{4}{\alpha} \Big) \Delta(S)$$

Powyższą nierówności możemy przekształcić do postaci:

$$\frac{5}{1 - \frac{4}{\alpha}} \geq \frac{\Delta(S)}{\Delta(O)} = \alpha^2$$

$$5 \geq \alpha^2\Big(1 - \frac{4}{\alpha}\Big)$$
$$0 \geq (\alpha - 5)(\alpha + 1)$$

To implikuje, że $\alpha \leq 5$, więc wcześniej zdefiniowany błąd aproksymacji możemy ograniczyć przez $\alpha^2 \leq 25$, co kończy dowód twierdzenia 4.2. □

4.4. Podsumowanie

W tej części przedstawimy algorytm budowania coresetu z [13]. Na początku obliczmy 10-aproksymację dla problemu K-means korzystając z pracy [4]. W części 4.3 opisaliśmy konstrukcję, której użyjemy w implementacji. Ma ona trochę większy błąd aproksymacji ale jak sami autorzy [13] stwierdzają w swojej pracy, nie ma to dużego znaczenia w kontekście całości. Dowolna aproksymacja o stałym błędzie może zostać użyta w tej metodzie. Na potrzeby analizy zakładamy, że obliczamy 10-aproksymację $C^{'}$ oraz dany na wejściu zbiór punktów $A \subset \mathbb{R}^d$ należy do przestrzeni Euklidesowej.

Geometryczna dekompozycja bazuje na dyskretyzacji punktów z A, czyli na zgrupowaniu ze sobą najbliższych punktów, a następnie zbudowaniu ważonego zbioru punktów S o zredukowanym rozmaiarze. Taką techinkę mogliśmy już zobaczyć w części 4.2, gdzie odpowiednio grupowaliśmy punkty w komórki kraty wykładniczej.

Praca [13] przedstawia inną technikę, która bazuje na budowaniu kul o wykładniczo rosnącym promieniu wokół każdego punktu z $C^{'}$. Będziemy znaczynać od promieni równych $\frac{1}{n}OPT$ a kończyć na $10OPT$, gdzie $OPT = \phi^k_{opt}(A)$ oraz n to moc zbioru A. Dla takich kul będziemy budować ϵ-pokrycie kuli.

Lemat 6. *[14] Niech U będzie sferą jednostkową w d-wymiarowej przestrzeni euklidesowej. Wtedy dla $0 < \epsilon < 1$, istnieje ϵ-pokrycie B o rozmiarze $\left(1 + \frac{2}{\epsilon}\right)^d$, czyli dla każdego punktu $p \in U$ zachodzi:*

$$\min_{b \in B} ||p - b|| \leq \epsilon$$

Niestety ale nie istnieją efektywne metody budowania takich ϵ-pokryć. My w analizie przyjmujemy, że $|B| = \epsilon^{-O(d)}$. Jako referenrencję jak zbudować taką konstrukcję autorzy sugureują analizę pracy [6]. Jest to problematyczne w kontekście implementacji jednak tą kwestię poruszymy w następnym rodziale. W pracy pod pojęciem *kula* rozmumiemy sferę w przestrzeni o wymiarze d.

Lemat 7. *[13] Niech a, b, c będą punktami z przestrzeni euklidesowej. Wtedy dla dowolnego $\epsilon \in (0, 1)$ zachodzi:*

$$\Big|\,||a - c||^2 - ||b - c||^2\,\Big| \leq \frac{12}{\epsilon}||a - b||^2 + 2\epsilon||a - c||^2$$

Lemat 8. *Niech A będzie zbiorem n punktów z $\mathbb{R}^d$, B^i będzie kulą o promieniu $r_i = \frac{2^i}{n}\sum_{x \in A}||x||^2$ oraz niech S^i będzie $\frac{\epsilon}{3}$-pokryciem kuli B^i. Zdefinujemy*

$S = \bigcup_{i=0}^{\log 10n} S^i$. *Wtedy:*

$$\sum_{x \in A} \min_{s \in S} ||x - s||^2 \leq \epsilon^2 \sum_{x \in A} ||x||^2$$

Dowód. Niech A_{close} będzie zbiorem punktów z kwadrtem normy euklidesowej równej co najwyżej $\frac{1}{n}\sum_{x \in A} ||x||^2$ oraz niech A_{far} będzie zbiorem pozostałych punktów. Ponieważ $|A_{close}| \leq n$, to:

$$\sum_{x \in A_{close}} \min_{s \in S^0} ||x - s||^2 \leq |A_{close}| \frac{1}{n} \frac{\epsilon^2}{9} \sum_{x \in A_{close}} ||x||^2 \leq \frac{\epsilon^2}{9} \sum_{x \in A_{close}} ||x||^2$$

Dla punktów ze zbioru A_{far}, rozpatrzmy punkt $x \in B^i \backslash B^{i-1}$ dla $i \in \{1, ..., \log 10n\}$. Zatem:

$$\min_{s \in S^i} ||x - s||^2 \leq \frac{\epsilon^2}{9} r_i^2 \leq \frac{4\epsilon^2}{9} r_{i-1}^2 \leq \frac{4\epsilon^2}{9} ||x||^2$$

Sumując po wszystkich punktach otrzymujemy:

$$\sum_{x \in A} \min_{s \in S} ||x - s||^2 \leq \frac{\epsilon^2}{9} \sum_{x \in A_{close}} ||x||^2 + \frac{4\epsilon^2}{9} \sum_{x \in A_{far}} ||x||^2 < \epsilon^2 \sum_{x \in A} ||x||^2$$

□

Taką analizę możemy zaaplikować do każdego punktu z C'.

Twierdzenie 4.3. *Dla dowolnego zbioru n punktów $A \subset \mathbb{R}^d$ z przestrzeni euklidesowej, istnieje coreset dla problemu k-means zawierający $O(k\epsilon^{-d} \log n)$ punktów, gdzie d to wymiar (skończny) przestrzeni.*

Dowód. Dla każdego z k center ze zbioru C' mamy $\log 10n$ kul o rożnych promieniach. Dla każdej takiej kuli o promieniu r obliczamy $\frac{\epsilon}{16}r$-pokrycie oraz dla każdego punktu $x \in A$, niech $B(x)$ będzie najbliższym punktem w sumie wszystkich pokryć kul. Z lematu 8 wynika, że:

$$\sum_{x \in A} ||x - B(x)||^2 \leq \left(\frac{\epsilon}{16}\right)^2 \cdot 10 \cdot OPT$$

Teraz, rozpatrzmy dowolny zbiór k center C:

$$\sum_{x \in A} \min_{c \in C} ||x - c||^2 - \sum_{x \in A} \min_{c \in C} ||B(x) - c||^2$$

$$\leq_{\text{lemat 7}} \frac{12}{\epsilon} \sum_{x \in A} ||x - B(x)||^2 + 2\epsilon \sum_{x \in A} \min_{c \in C} ||x - c||^2$$

$$\leq \frac{12}{\epsilon} \left(\frac{\epsilon}{16}\right)^2 \cdot 10 \cdot OPT + 2\epsilon \sum_{x \in A} \min_{c \in C} ||x - c||^2$$

$$\leq 2\epsilon \cdot OPT + 2\epsilon \sum_{x \in A} \min_{c \in C} ||x - c||^2$$

$$\leq 4\epsilon \sum_{x \in A} \min_{c \in C} ||x - c||^2$$

gdzie ostatnia nierówność zachodzi ponieważ $OPT \leq \sum_{x \in A} \min_{c \in C} ||x - c||^2$ dla dowolnego zbioru center C.

Skalując ϵ przez $\frac{1}{4}$ kończymy dowód. Rozmiar coresetu to $O(k\epsilon^{-d} \log n)$, ponieważ obliczamy $k \log 10n$ razy $(\frac{\epsilon}{64})$- pokrycie o rozmiarze $\epsilon^{-O(d)}$. □

5. Analiza Implementacji

TBA

6. Bibliografia

[1] Aloise, D., Deshpande, A., Hansen, P., and Popat, P. Np-hardness of euclidean sum-of-squares clustering. *Machine Learning 75* (05 2009), 245–248.

[2] Arya, S., Mount, D. M., Netanyahu, N. S., Silverman, R., and Wu, A. Y. An optimal algorithm for approximate nearest neighbor searching fixed dimensions. *J. ACM 45*, 6 (Nov. 1998), 891–923.

[3] Arya, V., Garg, N., Khandekar, R., Meyerson, A., Munagala, K., and Pandit, V. Local search heuristic for k-median and facility location problems. In *Proceedings of the Thirty-Third Annual ACM Symposium on Theory of Computing* (New York, NY, USA, 2001), STOC '01, Association for Computing Machinery, p. 21–29.

[4] Arya, V., Garg, N., Khandekar, R., Meyerson, A., Munagala, K., and Pandit, V. Local search heuristics for k-median and facility location problems. *SIAM J. Comput. 33* (2004), 544–562.

[5] Bachem, O., Lucic, M., and Krause, A. Scalable k-means clustering via lightweight coresets.

[6] Chazelle, B. *The Discrepancy Method: Randomness and Complexity.* Cambridge University Press, 2000.

[7] Feder, T., and Greene, D. Optimal algorithms for approximate clustering. In *Proceedings of the Twentieth Annual ACM Symposium on Theory of Computing* (New York, NY, USA, 1988), STOC '88, Association for Computing Machinery, p. 434–444.

[8] Gonzalez, T. F. Clustering to minimize the maximum intercluster distance. *Theor. Comput. Sci. 38* (1985), 293–306.

[9] Har-Peled, S., and Mazumdar, S. On coresets for k-means and k-median clustering. 291–300.

[10] Li, Y., Long, P. M., and Srinivasan, A. Improved bounds on the sample complexity of learning. *Journal of Computer and System Sciences 62*, 3 (2001), 516 – 527.

[11] Lloyd, S. Least squares quantization in pcm. *IEEE Transactions on Information Theory 28*, 2 (1982), 129–137.

[12] Matousek, J. On approximate geometric k-clustering.

[13] Munteanu, A., and Schwiegelshohn, C. Coresets-methods and history: A theoreticians design pattern for approximation and streaming algorithms. *Künstliche Intell. 32*, 1 (2018), 37–53.

[14] Pisier, G. *The Volume of Convex Bodies and Banach Space Geometry.* Cambridge Tracts in Mathematics. Cambridge University Press, 1989.