정렬된 1-차원 데이터의 k-구간 최소 WCSS 분할

문제 정의

정렬된 스칼라 데이터

$$x_1 \leq x_2 \leq \cdots \leq x_n \quad (x_i \in \mathbb{R})$$

를 k개의 연속 구간 C_1,\ldots,C_k 로 나누어

군집 내 제곱편차 합 (Within-Cluster Sum of Squares, WCSS)

$$\Phi = \sum_{m=1}^k \sum_{x \in C_m} (x - \mu_m)^2, \qquad \mu_m = rac{1}{|C_m|} \sum_{x \in C_m} x^k$$

을 최소화한다.

(크기 1인 군집의 분산은 0으로 정의한다.)

최적 분할은 구간 분할임

정리 (연속성):

위 문제의 전역 최적 해는 항상 각 군집이 지표 구간 $C-m=x-a-m, x-a-m+1, \ldots, x-b-m$ 형태이다.

증명 개요:

군집 평균을 $\mu-1 < \mu-2 < \cdots < \mu-k$ 로 두고,

교차 군집이 존재한다고 하자.

즉,
$$x-i, x-j \in C-p$$
 , $x-\ell \in C-q$ $(p < q)$ 이고

$$x_i < x_\ell < x_i$$

인 경우가 존재한다고 하자. 그러면

$$|x_\ell-\mu_p|<|x_\ell-\mu_q|$$

이 되어 최근접 평균 할당 조건

 $|x - \mu - C(x)| \le |x - \mu - C'|$ 을 위배하게 된다.

즉, 최적해에는 교차 군집이 존재할 수 없으며,

따라서 군집은 반드시 연속 구간이다. ■

동적 계획법 점화식

상태 정의

$$V(i,k) = \min \left(\mathrm{WCSS} | [x_1, \ldots, x_i]$$
를 k 개 구간으로 분할)

점화식

마지막 군집이 $x-t+1\sim x-i$ 라 하면, 앞쪽 $x-1\sim x-t$ 는 (k-1) 개 구간으로 최적으로 분할되어야 한다. $(\to$ 최적 부분 구조)

$$V(i,k) = \min_{t < i} \left(V(t,k-1) + ext{WCSS}(x_{t+1:i})
ight)$$

구현 메모

• 누적합 $S-1(j)=\sum -p \leq jx-p$, $S-2(j)=\sum -p \leq jx-p^2$ 를 미리 구해

$$ext{WCSS}(l,r) = S_2(r) - S_2(l-1) - rac{[S_1(r) - S_1(l-1)]^2}{r - l + 1}$$

으로 계산.

• 기본값:

$$V(0,0)=0,\quad V(i,1)= ext{WCSS}(1,i),\quad V(\cdot,\cdot)=\infty$$
 (불가능 상태)

- 복잡도:
 - \circ 단순 구현: $O(n^2k)$
 - \circ Divide-and-Conquer DP 사용시 O(nk) 가능

요약

- 1. 연속성 정리를 통해 탐색 공간을 구간 분할로 축소
- 2. 마지막 경계 t만 정하면 나머지는 부분 최적해 ightarrow **최적 부분 구조**
- 3. 위 점화식과 누적합 계산으로 효율적인 DP 구현 가능