Optimalizace

1. Co a k čemu je optimalizace

Tom Werner

FEL ČVUT

Co je optimalizace v přirozeném jazyce?

Co na to slovník:

- **Latinsko-anglický slovník:**
  optimus (adj.) =
  - very good, best
  - excellent
  - most beneficial, most advantageous

- **Merriam-Webster dictionary:**
  optimization =
  - An act, process, or methodology of making something (such as a design, system, or decision) as fully perfect, functional, or effective as possible.
  - Specifically, the mathematical procedures (such as finding the maximum of a function) involved in this.

- **Business Dictionary:**
  optimization = Finding an alternative with the most cost effective or highest achievable performance under the given constraints, by maximizing desired factors and minimizing undesired ones.

Matematická optimalizace (= matematické programování)

Obecná formulace optimalizační úlohy: minimum reálné funkce na množině

- Dána **množina přípustných řešení** X a **účelová (cílová, kriteriální, …) funkce** $f\colon X \to \mathbb{R}$.
- Najdi minumum funkce f na množině X:

$$\min_{x \in X} f(x)$$

Matematická optimalizace (= matematické programování)

Obecná formulace optimalizační úlohy: minimum reálné funkce na množině

- Dána **množina přípustných řešení** X a **účelová (cílová, kriteriální, ...) funkce** $f\colon X \to \mathbb{R}$.
- Najdi minumum funkce f na množině X:

$$\min_{x \in X} f(x)$$

Názvosloví a značení:

- Funkce f **nabývá minima** na množině X v prvku $x^* \in X$, když $f(x^*) \le f(x)$ pro každé $x \in X$. x^* se nazývá **argument minima** funkce f na množině X.
- $f(x^*) = \min_{x \in X} f(x)$ se nazývá **minimální hodnota** f na X.
- $\operatorname{argmin}_{x \in X} f(x)$ je množina všech argumentů minima f na X.
- Také: prvky X jsou **přípustná řešení** úlohy, prvky množiny $\operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in X} f(\mathbf{x})$ jsou **optimální řešení** úlohy
- Analogicky pro **maxima**. Maxima a minima se dohromady nazývají **extrémy**.

Neformální dělení optimalizačních úloh

- **kombinatorická optimalizace**: X konečná (ale obvykle obrovská)
  ($X \subseteq \{0,1\}^n$ nebo X obsahuje permutace, textové řetězce, grafy, konfigurace Rubikovy kostky, ...).

- **spojitá optimalizace**: $X \subseteq \mathbb{R}^n$ nemá izolované body ("spojité proměnné")
  (hlavní náplň kursu)

- **variační počet**: X je množina (obvykle diferencovatelných) funkcí $\varphi\colon D \to \mathbb{R}$, kde $D \subseteq \mathbb{R}^n$ je pevné.
  Účelová funkce $f\colon X \to \mathbb{R}$ se pak nazývá **funkcionál**.

Příklad kombinatorické optimalizace: Problém obchodního cestujícího

Máme n měst. Mezi každou dvojicí měst i, j je silnice o známé délce $d(i, j) \geq 0$. Najdi nejkratší možnou trasu, která navštíví každé město právě jednou a vrátí se nazpět do výchozího města.

Příklad kombinatorické optimalizace: Problém obchodního cestujícího

Máme n měst. Mezi každou dvojicí měst i, j je silnice o známé délce $d(i, j) \geq 0$. Najdi nejkratší možnou trasu, která navštíví každé město právě jednou a vrátí se nazpět do výchozího města.

- X je množina všech permutací n prvků, tj. n-tic $(i_1, \ldots, i_n)$ kde $i_1, \ldots, i_n \in \{1, \ldots, n\}$ jsou různé
- Pro permutaci $(i_1, \ldots, i_n)$ je

$$f(i_1, \ldots, i_n) = \sum_{k=1}^{n-1} d(i_k, i_{k+1}) + d(i_n, i_1)$$

- (Když nějaká dvojice měst i, j není spojena silnicí, nastavíme $d(i, j)$ na velmi velké číslo.)
- NP-těžká úloha:
  - P$\neq$NP $\Rightarrow$ neexistuje algoritmus řešící NP-těžké úlohy v polynomiálním čase (velikosti úlohy, zde n).
  - teorie výpočetní složitosti (computational complexity theory)

Příklad spojité optimalizace: Bod na křivce nejbližší danému bodu

Najdi bod na kladné větvi hyperboly s rovnicí $xy = 1$, který je nejblíže bodu (x_0, y_0).

- $X = \{\, (x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid xy = 1,\ x \geq 0 \,\}$
- $f(x, y) = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - x_0)^2}$

Příklad variačního počtu: Nejkratší křivka spojující dva body

Najdi nejkratší křivku spojující dva dané body $(x_1, y_1), (x_2, y_2) \in \mathbb{R}^2$.

Příklad variačního počtu: Nejkratší křivka spojující dva body

Najdi nejkratší křivku spojující dva dané body $(x_1, y_1), (x_2, y_2) \in \mathbb{R}^2$.

- X je množina všech diferencovatelných funkcí (předpokládáme $x_1 \neq x_2$)

$$\varphi\colon [x_1, x_2] \to \mathbb{R}$$

  splňujících $\varphi(x_1) = y_1$ a $\varphi(x_2) = y_2$.

- Minimalizuj délku křivky

$$f(\varphi) = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{1 + \varphi'(x)^2}\, dx$$

  za podmínek $\varphi(x_1) = y_1$ a $\varphi(x_2) = y_2$.

- Řešením je afinní funkce. Grafem této funkce je úsečka procházející danými dvěma body.

Další klasické úlohy z variačního počtu:

- isoperimetrický problém (najdi uzavřenou rovinou křivku dané délky obepínající největší plochu)

- brachistochrona

- řetězovka

- optimální trajektorie chapadla robota za daných okrajových podmínek

Příroda optimalizuje

"Nothing takes place in the world whose meaning is not that of some maximum or minimum."
– Leonhard Euler

Fyzikální zákony často (vždy?) také v optimalizačním/variačním tvaru:

- systém v rovnováze je v lokálním minimu potenciální energie
- princip nejkratšího (přesněji: lokálně extrémního) času v optice (Fermat)
- princip nejmenšího účinku v klasické mechanice: systém se pohybuje ve stavovém prostoru mezi dvěma časy tak, že celkový účinek má minimální (přesněji: lokálně extrémní) hodnotu
- ...

Historie optimalizace

"Klasická" doba:

- infinitezimální počet, mat. analýza (Newton, Leibniz)
- variační počet (Newton, Leibniz, Euler)
- podmínky na volné lokální extrémy (Fermat)
- podmínky na lokální extrémy vázané rovnostmi (Lagrange)

Historie optimalizace

"Klasická" doba:

- infinitezimální počet, mat. analýza (Newton, Leibniz)
- variační počet (Newton, Leibniz, Euler)
- podmínky na volné lokální extrémy (Fermat)
- podmínky na lokální extrémy vázané rovnostmi (Lagrange)

Moderní optimalizace (po 2. světové válce s nástupem počítačů, důraz na algoritmy):

- lineární programování:
  - teorie, formulace (Kantorovič, Koopmans)
  - simplexová metoda (Dantzig)
  - dualita, teorie her (von Neumann)
- KKT podmínky na lok. extrémy vázané nerovnostmi (Karush-Kuhn-Tucker)
- moderní kombinatorická optimalizace:
  - řezy a toky v grafu (Ford, Fulkerson)
  - celočíselné lin. programování (Gomory, Chvátal), polyhedrální metody
- polynomiální algoritmus na LP (Chačian), algoritmy vnitřního bodu (Karmarkar)
- semidefinitní programování (SDP)

Viz např. `http://www.mitrikitti.fi/opthist.html`

Mnoho aplikací

- **ekonomie a finance:** minimální riziko, maximální zisk, nastavení cen, ...
- **logistika:** doprava, průmysl, zásobování, válka
- **řízení (control engineering):** výtahu, robota, vlaku, letadla, aktivní budovy, ...
- **rozvrhování a plánování (scheduling):** školní rozvrh, výrobní kroky, cesta mobilního robota, sled úkonů robotického manipulátoru, aircrew scheduling
- **floor planning:** návrh integrovaných obvodů (VLSI design) a plošných spojů
- **optimalizace kódu:** co nejmenší paměť, co nejrychlejší kód
- **routing:** IDOS, navigace v autě, návrh počítačové sítě, ...
- **pravděpodobnost a statistika:** princip maximální věrohodnosti, princip maxima entropie, regrese (modelování funkční závislosti náhodných proměnných), rozhodování za neurčitosti
- **počítačové vidění:** rekonstrukce scény z obrazů (multiview geometry), segmentace obrazu pomocí řezů v grafu (graph cuts), hledání tváří v obraze (AdaBoost), ...
- **inteligentní zpracování jiných signálů** (např. audio, EKG, EEG): separace zdrojů, auditory scene analysis, ...
- **rozpoznávání a strojové učení:** minimální trénovací chyba, nejjednodušší model
- **návrh mechanických struktur:** most, jeřáb, hák, křídlo letadla
- **molekulární modelování:** např. protein folding
- **teorie her**
- přiřazování radiových frekvencí v mobilní síti

Spojitá optimalizace

Obecná úloha spojité optimalizace

Zopakujme: $\min_{\mathbf{x} \in X} f(\mathbf{x})$

Zde $X \subseteq \mathbb{R}^n$ je množina všech řešení $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n)$ soustavy

$$g_i(x_1, \ldots, x_n) \leq 0, \quad i = 1, \ldots, m$$
$$h_i(x_1, \ldots, x_n) = 0, \quad i = 1, \ldots, \ell$$

kde $n, m, \ell \in \mathbb{N}$ a $f, g_1, \ldots, g_m, h_1, \ldots, h_\ell \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.

Obecná úloha spojité optimalizace

Zopakujme: $\min_{\mathbf{x} \in X} f(\mathbf{x})$

Zde $X \subseteq \mathbb{R}^n$ je množina všech řešení $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n)$ soustavy

$$g_i(x_1, \ldots, x_n) \leq 0, \quad i = 1, \ldots, m$$
$$h_i(x_1, \ldots, x_n) = 0, \quad i = 1, \ldots, \ell$$

kde $n, m, \ell \in \mathbb{N}$ a $f, g_1, \ldots, g_m, h_1, \ldots, h_\ell \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.

Úloha se zapisuje také jako

$$\begin{array}{rl} \min & f(x_1, \ldots, x_n) \\ \text{za podmínek} & g_i(x_1, \ldots, x_n) \leq 0, \quad i = 1, \ldots, m \\ & h_i(x_1, \ldots, x_n) = 0, \quad i = 1, \ldots, \ell \\ & x_1, \ldots, x_n \in \mathbb{R} \end{array}$$

nebo vektorově

$$\min\{\, f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n,\ \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0},\ \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \,\}$$

kde $\mathbf{g} \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ a $\mathbf{h} \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^\ell$.

Názvosloví

$$
\begin{aligned}
\min \quad & f(\mathbf{x}) \\
\text{za podmínek} \quad & g_i(\mathbf{x}) \leq 0, \qquad i = 1, \ldots, m \\
& h_i(\mathbf{x}) = 0, \qquad i = 1, \ldots, \ell \\
& \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n
\end{aligned}
$$

- $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n)$ jsou **proměnné** úlohy
- f je účelová funkce
- $g_i(\mathbf{x}) \leq 0$ a $h_i(\mathbf{x}) = 0$ jsou **omezující podmínky (omezení)**
- $g_i(\mathbf{x}) \leq 0$ jsou **omezení typu nerovnosti** a $h_i(\mathbf{x}) = 0$ jsou **omezení typu rovnosti**
- omezení (nerovnost) $g_i(\mathbf{x}) \leq 0$ je **aktivní** v bodě $\mathbf{x}$, jestliže $g_i(\mathbf{x}) = 0$
- prvky množiny X jsou **přípustná řešení** úlohy
- prvky množiny $\operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in X} f(\mathbf{x})$ jsou **optimální řešení** úlohy

Základní vlastnosti úlohy

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{x}) \\ \text{za podmínek} \quad & g_i(\mathbf{x}) \le 0, \quad i = 1, \ldots, m \\ & h_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \ldots, \ell \\ & \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

- Jaký je počet n proměnných? Jaký je počet m, ℓ omezení?
  - $m = \ell = 0$: **úloha bez omezení**, minimalizujeme f na $\mathbb{R}^n$
- Jaké jsou funkce f, g_i, h_i?
  - f chybí (= je konstantní): **úloha na přípustnost**
  - Jsou spojité? Jsou diferencovatelné? V kterých bodech nejsou?
  - Jsou afinní? (pak jde o **lineární program (LP)**)
  - Jsou to polynomy? (pak jde o **polynomiální optimalizaci**, spec. **kvadratický program (QP)**)
  - Jsou konvexní/konkávní? (Jsou-li f, g_i konvexní a h_i afinní, jde o **konvexní optimalizační úlohu**.)
- Jaká je množina X?
  - Je neprázdná (tj. je úloha **přípustná**)?
  - Je omezená? Je uzavřená/otevřená? Je konvexní?
- Má úloha optimální řešení?
  - Nemusí mít, např. funkce $f(x) = 1/x$ na intervalu $X = [0, +\infty)$ nemá minimum.
- Jak je úloha obtížná? Máme podezření, že je NP-těžká?

Obtížnost optimalizačních úloh

"Téměř všechny" optimalizační úlohy jsou NP-těžké (nebo hůř).

- "prokletí dimenzionality", "kombinatorická exploze", ...
- derivace obvykle nepomohou:
  - podmínka stacionarity vede na soustavu nelineárních (ne)rovnic
  - příliš mnoho stacionárních bodů / lokálních minim
- "Spojitá" formulace úloh zahrnuje i "kombinatorické" úlohy.

  Např. úloha (Maximum Cut)

$$\begin{aligned} \min \quad & \textstyle\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j \\ \text{za podmínek} \quad & x_i^2 = 1, \quad i = 1, \dots, n \\ & x_i \in \mathbb{R}, \quad i = 1, \dots, n \end{aligned}$$

  vypadá spojitě, ale množina X má 2^n izolovaných bodů.

Klíčová role konvexity: **konvexní úlohy** jsou obvykle "snadné"!

Konvexní optimalizační úlohy

- Množina $X \subseteq \mathbb{R}^n$ je **konvexní**, jestliže pro každé dva body $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in X$ a libovolné $\alpha \in [0, 1]$ platí
$$(1 - \alpha)\mathbf{x} + \alpha\mathbf{y} \in X.$$
- Funkce $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ je **konvexní** na konvexní množině $X \subseteq \mathbb{R}^n$, jestliže pro všechna $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in X$ a každé $\alpha \in [0, 1]$ platí
$$f((1 - \alpha)\mathbf{x} + \alpha\mathbf{y}) \leq (1 - \alpha)f(\mathbf{x}) + \alpha f(\mathbf{y}).$$

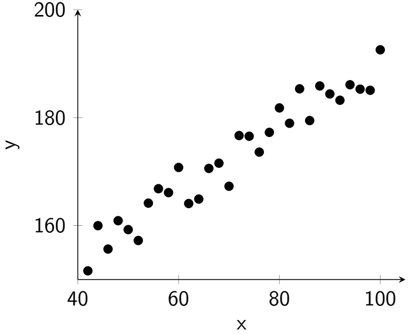
Věta

Je-li funkce f konvexní na konvexní množině X, pak každé lokální minimum funkce f na množině X je globální minimum funkce f na množině X.

Příklady úloh spojité optimalizace

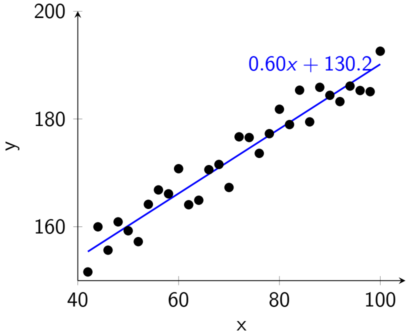
Odhadujeme funkční vztah váhy x [kg] a výšky y [cm] z m měření $(x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2$:

Hledáme přímku, která “co nejlépe” proloží dané body.



Lineární nejmenší čtverce: Prokládáme body přímkou

Odhadujeme funkční vztah váhy x [kg] a výšky y [cm] z m měření $(x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2$:
Hledáme přímku, která "co nejlépe" proloží dané body.

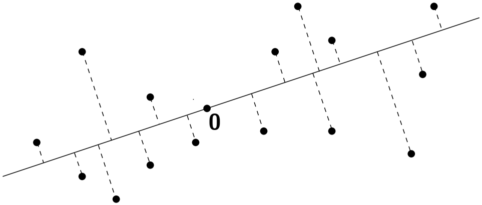


- Vztah má být lineární (přesněji afinní) funkce, tj. $y = \theta_1 + \theta_2 x$
- Formulace ve smyslu **nejmenších čtverců**: na množině $\mathbb{R}^2$ minimalizuj (bez omezení) funkci

$$f(\boldsymbol{\theta}) = f(\theta_1, \theta_2) = \sum_{i=1}^{m} (\theta_1 + \theta_2 x_i - y_i)^2 = \|\mathbf{A}\boldsymbol{\theta} - \mathbf{y}\|^2$$

  (součet čtverců **svislých** vzáleností bodů od přímky)
- f je konvexní kvadratická funkce dvou proměnných
- Řešení splňují **normální rovnice** $\mathbf{A}^T\mathbf{A}\boldsymbol{\theta} = \mathbf{A}^T\mathbf{y}$ (důkaz: derivacemi nebo lin. algebrou)

SVD: Prokládáme body přímkou/rovinou apod., ale jinak



- Dáno n bodů v $\mathbb{R}^m$, tvořící sloupce matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$
- Najdi podprostor dané dimenze $k < m$ tak, aby součet čtverců vzdáleností bodů k němu byl minimální.
- Řešení: pomocí spektrálního rozkladu matice $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$, tj. pomocí SVD matice $\mathbf{A}$
- Nejde nijak převést na řešení soustavy lineárních rovnic!

Lineární programování: optimální směs zeleniny

Pro 3 druhy zeleniny jsou dány měrné obsahy živin a minimální požadavky pro jednu přílohu oběda:

	Mrkev	*Bílé zelí*	*Okurka*	**Požadavek**
Vitamín A [mg/kg]	35	0.5	0.28	0.5 mg
Vitamín C [mg/kg]	60	300	80	15 mg
Vláknina [g/kg]	30	20	10	4 g
Cena [Kč/kg]	26	22	60	

Najdi hmotnosti zelenin, které splní výživové požadavky při minimální celkové ceně.

Lineární programování: optimální směs zeleniny

Pro 3 druhy zeleniny jsou dány měrné obsahy živin a minimální požadavky pro jednu přílohu oběda:

	Mrkev	*Bílé zelí*	*Okurka*	**Požadavek**
Vitamín A [mg/kg]	35	0.5	0.28	0.5 mg
Vitamín C [mg/kg]	60	300	80	15 mg
Vláknina [g/kg]	30	20	10	4 g
Cena [Kč/kg]	26	22	60	

Najdi hmotnosti zelenin, které splní výživové požadavky při minimální celkové ceně.

- Formulace problému (**lineární program**):

$$
\begin{array}{rl}
\min & 26x_1 + 22x_2 + 60x_3 \\
\text{za podmínek} & 35x_1 + 0.5x_2 + 0.28x_3 \geq 0.5 \\
& 60x_1 + 300x_2 + 80x_3 \geq 15 \\
& 30x_1 + 20x_2 + 10x_3 \geq 4 \\
& x_1, x_2, x_3 \geq 0
\end{array}
$$

- Optimální řešení je $x_1 \doteq 0.12$, $x_2 \doteq 0.03$, $x_3 = 0$ za cenu 3.59 Kč.

Lineární programování: optimální směs zeleniny

Pro 3 druhy zeleniny jsou dány měrné obsahy živin a minimální požadavky pro jednu přílohu oběda:

	Mrkev	*Bílé zelí*	*Okurka*	**Požadavek**
Vitamín A [mg/kg]	35	0.5	0.28	0.5 mg
Vitamín C [mg/kg]	60	300	80	15 mg
Vláknina [g/kg]	30	20	10	4 g
Cena [Kč/kg]	26	22	60	

Najdi hmotnosti zelenin, které splní výživové požadavky při minimální celkové ceně.

- Formulace problému (**lineární program**):

$$
\begin{array}{rl}
\text{min} & 26x_1 + 22x_2 + 60x_3 \\
\text{za podmínek} & 35x_1 + 0.5x_2 + 0.28x_3 \geq 0.5 \\
 & 60x_1 + 300x_2 + 80x_3 \geq 15 \\
 & 30x_1 + 20x_2 + 10x_3 \geq 4 \\
 & x_1, x_2, x_3 \geq 0
\end{array}
$$

- Optimální řešení je $x_1 \doteq 0.12$, $x_2 \doteq 0.03$, $x_3 = 0$ za cenu 3.59 Kč.
- Při požadavku $x_3 \geq 0.1$ (okurka!) je řešení $x_1 \doteq 0.097$, $x_2 \doteq 0.004$, $x_3 = 0.1$ za 8.62 Kč.

Těžiště

Jsou dána čísla $a_1, \dots, a_m \in \mathbb{R}$. Najdi minimum (na $\mathbb{R}$) funkce

$$f(x) = \sum_{i=1}^{m} (x - a_i)^2$$

- optimální řešení je **aritmetický průměr** $x^* = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} a_i$

Těžiště

Jsou dána čísla $a_1, \ldots, a_m \in \mathbb{R}$. Najdi minimum (na $\mathbb{R}$) funkce

$$f(x) = \sum_{i=1}^{m} (x - a_i)^2$$

- optimální řešení je **aritmetický průměr** $x^* = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} a_i$

Jsou dány body $\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$. Najdi minimum (na $\mathbb{R}^n$) funkce

$$f(\mathbf{x}) = f(x_1, \ldots, x_n) = \sum_{i=1}^{m} \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|^2$$

- f je kvadratická funkce n proměnných, je konvexní a diferencovatelná
- Rozpadá se na n nezávislých úloh:

$$f(x_1, \ldots, x_n) = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} (x_j - a_{ij})^2 = \sum_{j=1}^{n} \underbrace{\sum_{i=1}^{m} (x_j - a_{ij})^2}_{f_j(x_j)}$$

- optimální řešení je **těžiště** $\mathbf{x}^* = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \mathbf{a}_i$.

Medián, geometrický medián

Jsou dána čísla $a_1, \dots, a_m \in \mathbb{R}$. Najdi minimum (na $\mathbb{R}$) funkce

$$f(x) = \sum_{i=1}^{m} |x - a_i|$$

- f je konvexní po částech afinní funkce, není diferencovatelná v bodech a_i

Medián, geometrický medián

Jsou dána čísla $a_1, \ldots, a_m \in \mathbb{R}$. Najdi minimum (na $\mathbb{R}$) funkce

$$f(x) = \sum_{i=1}^{m} |x - a_i|$$

- f je konvexní po částech afinní funkce, není diferencovatelná v bodech a_i
- optimální řešení je **medián** čísel $a_1, \ldots, a_m$

Medián, geometrický medián

Jsou dána čísla $a_1, \dots, a_m \in \mathbb{R}$. Najdi minimum (na $\mathbb{R}$) funkce

$$f(x) = \sum_{i=1}^{m} |x - a_i|$$

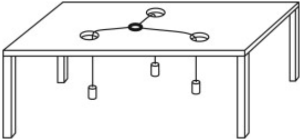
- f je konvexní po částech afinní funkce, není diferencovatelná v bodech a_i
- optimální řešení je **medián** čísel $a_1, \dots, a_m$

Fermat-Weberův problém:

Jsou dány body $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$. Najdi minimum (na $\mathbb{R}^n$) funkce

$$f(\mathbf{x}) = f(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^{m} \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|$$

- f je konvexní funkce n proměnných, není diferencovatelná v bodech $\mathbf{a}_i$
- optimální řešení se nazývá je **geometrický medián**



Varignon frame

Shlukování

Máme m bodů $\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$. Rozmísti dalších k bodů $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ tak, aby průměrná vzdálenost bodu $\mathbf{a}_i$ k nejbližšímu bodu $\mathbf{x}_j$ byla co nejmenší.

Shlukování

Máme m bodů $\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$. Rozmísti dalších k bodů $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ tak, aby průměrná vzdálenost bodu $\mathbf{a}_i$ k nejbližšímu bodu $\mathbf{x}_j$ byla co nejmenší.

- Minimalizujeme (bez omezení) funkci

$$f(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_k) = \sum_{i=1}^{m} \min_{j=1}^{k} \|\mathbf{a}_i - \mathbf{x}_j\|^2$$

- NP-těžká úloha.

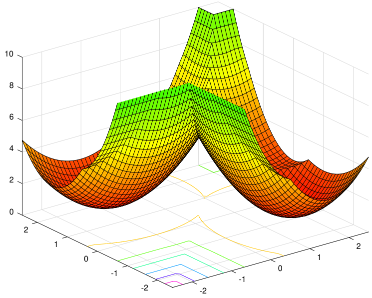
Máme m bodů $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$. Rozmísti dalších k bodů $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ tak, aby průměrná vzdálenost bodu $\mathbf{a}_i$ k nejbližšímu bodu $\mathbf{x}_j$ byla co nejmenší.

- Minimalizujeme (bez omezení) funkci

$$f(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k) = \sum_{i=1}^{m} \min_{j=1}^{k} \|\mathbf{a}_i - \mathbf{x}_j\|^2$$

- NP-těžká úloha.

Graf účelové funkce pro $n = 1$, $m = 3$, $k = 2$, $a_1 = -1$, $a_2 = 1$, $a_3 = 2$:



$$f(x_1, x_2) = \sum_{i=1}^{m} \min\{|a_i - x_1|^2, |a_i - x_2|^2\}$$