Matematički praktikum *

prof. dr. sc. Rudolf Scitovski
prof. dr. sc. Kristian Sabo
doc. dr. sc. Danijel Grahovac
dr. sc. Matea Ugrica†

22. listopada 2020.

Sadržaj

1 Optimizacijski problem

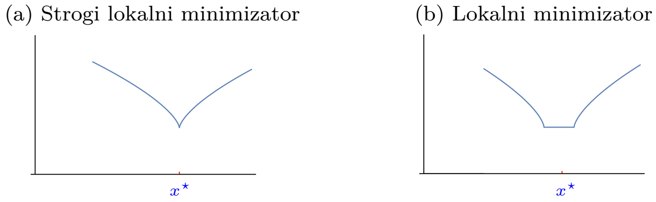
Definicija 1. [18] Kažemo da funkcija $f\colon \mathcal{D}\to\mathbb{R}$, $\mathcal{D}\subseteq\mathbb{R}^n$ u točki $x^\star\in\mathcal{D}$ postiže lokalni minimum ako postoji okolina $\mathcal{O}(x^\star)$ takva da je $f(x)\geq f(x^\star)$ za sve $x\in\mathcal{O}(x^\star)\cap\mathcal{D}$. Točku $x^\star$ zovemo točka lokalnog minimuma ili lokalni minimizator funkcije f.

---

*Matematički praktikum obavezni je predmet u zimskom semestru druge godine sveučilišnog Diplomskog studija matematike na smjerovima Financijska matematika i statistika i Računarstvo, te na petoj godini sveučilišnog Nastavničkog studija matematike i informatike (30 sati predavanja i 30 sati vježbi, 6 ECTS bodova)

† scitowsk@mathos.hr, ksabo@mathos.hr, dgrahova@mathos.hr, mugrica@mathos.hr

Kažemo da je $x^\star$ točka strogog lokalnog minimuma ili strogi lokalni minimizator funkcije f ako postoji okolina $\mathcal{O}(x^\star)$ takva da je $f(x) > f(x^\star)$ za sve $x \in \mathcal{O}(x^\star) \cap \mathcal{D} \setminus \{x^\star\}$.



Slika 1: Lokalni minimizator i strogi lokalni minimizator

Definicija 2. Kažemo da funkcija $f\colon \mathcal{D} \to \mathbb{R}$, $\mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^n$ u točki $x^\star \in D$ postiže globalni minimum na $\mathcal{D}$ ako je

$$f(x^\star) \le f(x), \quad \forall x \in \mathcal{D}.$$

Točku $x^\star \in \mathcal{D}$ zovemo točka globalnog minimuma ili globalni minimizator funkcije f na $\mathcal{D}$. Skup svih točaka globalnog minimuma funkcije f označavamo s

$$\operatorname*{argmin}_{x \in \mathcal{D}} f(x),$$

vrijednost

$$f(\hat{x}), \quad \text{za} \quad \hat{x} \in \operatorname*{argmin}_{x \in \mathcal{D}} f(x),$$

zovemo globalni minimum funkcije f na $\mathcal{D}$, a funkciju f nazivamo *minimizirajuća funkcija*.

Primjedba 1. Analogno definiciji globalnog minimuma može se definirati pojam *globalnog maksimuma* i *točka globalnog maksimuma* funkcije f, ali kako je

$$\begin{aligned} (i) \quad & \max_{x \in \mathcal{D}} f(x) = -\min_{x \in \mathcal{D}} \big(- f(x) \big), \\ (ii) \quad & \operatorname*{argmax}_{x \in \mathcal{D}} f(x) = \operatorname*{argmin}_{x \in \mathcal{D}} \big(- f(x) \big), \end{aligned}$$

dovoljno je proučavati samo problem globalnog minimuma.

2 Ilustrativni primjeri

Na početku navedimo nekoliko praktičnih primjera u kojima se pojavljuje problem traženja globalnog minimuma funkcije jedne ili više varijabli.

2.1 Udaljenost točke do krivulje

Primjer 1. *Pokažimo da je udaljenost točke $T_0 = (x_0, y_0)$ od pravca p zadanog eksplicitno kao $y = kx + \ell$ dana formulom:*

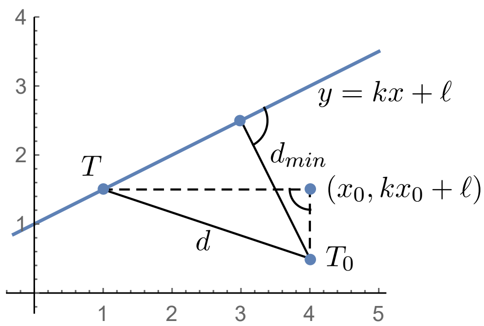
$$\min_{T\in p} \mathfrak{D}(T_0, T) = \frac{|y_0 - kx_0 - \ell|}{\sqrt{1+k^2}}.$$

Neka je $T = (x, y) = (x, kx + \ell)$ bilo koja točka s pravca $y = kx + \ell$. Označimo s d njenu udaljenost od točke T_0 (vidi *Sliku 2*). Primjenom Pitagorinog teorema na pravokutni trokut sa slike dobivamo:

$$d^2 := (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 = (x - x_0)^2 + (kx + \ell - y_0)^2.$$

Treba odrediti onu točku $(x^\star, kx^\star + \ell)$ pravca $y = kx + \ell$ za koju je d najmanje. U tu svrhu dovoljno je naći minimum kvadratne funkcije:

$$f(x) = d^2 = (x - x_0)^2 + (kx + l - y_0)^2.$$



Slika 2: Udaljenost točke T_0 do pravca $y = kx + \ell$

Rješavanjem jednadžbe:

$$f'(x) = 2(x - x_0) + 2k(kx + l - y_0) = 0$$

dobivamo jednu stacionarnu točku $x^\star = \frac{ky_0 - k\ell + x_0}{1+k^2}$. Budući da je $f''(x) = 2 + 2k^2 > 0$, zaključujemo da funkcija f u točki $x^\star$ postiže strogi lokalni minimum. Pri tome je:

$$f(x^\star) = (x^\star - x_0)^2 + (kx^\star + \ell - y_0)^2 = \left(\frac{ky_0 - k\ell + x_0}{1+k^2} - x_0\right)^2 + \left(k\frac{ky_0 - k\ell + x_0}{1+k^2} + \ell - y_0\right)^2.$$

Nakon sređivanja dobivamo $f(x^\star) = \frac{(y_0 - kx_0 - \ell)^2}{1+k^2}$, odakle je $d_{min} = \frac{|y_0 - kx_0 - \ell|}{\sqrt{1+k^2}}$.

Zadatak 1. *Odredi točku A na pravcu $x + 3y = 6$ koja je najbliža točki $T(-3, 1)$. Kolika je ta udaljenost?*

Primjer 2. *(Euklidska udaljenost točke do parabole)*
Treba izračunati ℓ_2 udaljenost točke $T_0 = (3,4)$ do kubne parabole zadane funkcijom $q\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $q(x) = .5x^3 - 6x + 2$ (vidi Sliku 3a).

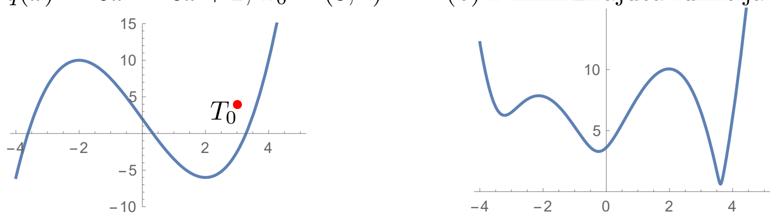
Primijetite da je ℓ_2 udaljenost točke $T_0 = (x_0, y_0)$ do neke točke $T = (x, q(x))$ na grafu funkcije q zadana s (vidi Sliku 3b)

$$\delta_2(x) = d_2(T_0, T) = \sqrt{(x - x_0)^2 + (q(x) - y_0)^2},$$

a udaljenost točke T_0 do grafa funkcije q zadana je s

$$d_2(T_0, q) = \min_{x \in \mathbb{R}} d_2(T_0, (x, q(x))) =: \min_{x \in \mathbb{R}} \delta_2(x).$$

(a) $q(x) = .5x^3 - 6x + 2$; $T_0 = (3,4)$ (b) Minimizirajuća funkcija δ_2



Slika 3: Euklidska udaljenost točke T_0 do kubne parabole q

Određivanje točke $T^\star = (x^\star, q(x^\star))$ na kojoj se postiže minimalna udaljenost točke T_0 do grafa funkcije q jedan je problem globalne optimizacije nelinearne derivabilne funkcije jedne varijable koja ima više od jednog lokalnog minimuma. Za razliku od problema iz Primjera **??**, ovaj problem općenito nije moguće riješiti eksplicitno.

Primijetite da je funkcija δ_2 neprekidno derivabilna na $\mathbb{R}$. Budući da je funkcija $x \mapsto \sqrt{x}$ monotono rastuća funkcija, naš se problem može svesti na rješavanje jednog nelinearnog problema najmanjih kvadrata (Least Squares Problem (LS)) koji se nadalje može svesti na određivanje globalnog minimuma sljedećeg polinoma 6-tog stupnja (vidi Sliku 4a)

$$f(x) = (x - x_0)^2 + (q(x) - y_0)^2. \tag{1}$$

(a) Minimizirajuća funkcija f (b) Minimizirajuća funkcija δ_1

Slika 4: LS i ℓ_1 udaljenost točke T_0 do parabole q

Primjer 3. *(ℓ_1-udaljenost točke do parabole)*
Treba odrediti ℓ_1-udaljenost točke $T_0 = (3,4)$ do kubne parabole zadane funkcijom $q\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $q(x) = .5x^3 - 6x + 2$.

Primijetite da je ℓ_1-udaljenost točke T_0 do neke točke $T = (x, q(x))$ na grafu funkcije q zadana s (vidi Sliku 4b)

$$d_1(T_0, T) = |x - x_0| + |q(x) - y_0| =: \delta_1(x),$$

pa se određivanje udaljenosti točke T_0 do grafa funkcije q može interpretirati kao problem određivanja globalnog minimuma funkcije δ_1 definirane na $\mathbb{R}$. Dakle, i u ovom primjeru radi se o problemu jednodimenzionalne globalne minimizacije, ali ovaj puta minimizirajuća funkcija nije derivabilna. Također, iz slike se može uočiti da ova funkcija ima tri lokalna minimuma od kojih je jedan ujedno i globalni minimum.

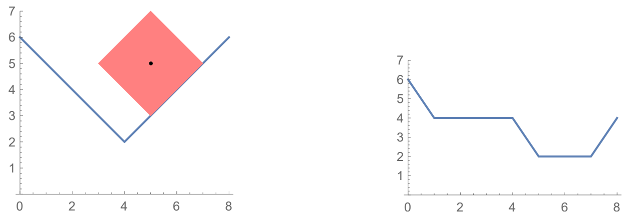
Zadatak 2. *Kubna parabola zadana je funkcijom $q\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $q(x) = .5x^3 - 6x + 2$.*

(a) Gdje treba postaviti točku $T_0 = (x_0, y_0)$ tako da funkcija $f\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $f(x) = (x - x_0)^2 + (q(x) - y_0)^2$ postigne svoj globalni minimum u barem dvije različite točke?

(b) Gdje treba postaviti točku $T_0 = (x_0, y_0)$ tako da funkcija $\delta_1\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $\delta_1(x) = |x - x_0| + |q(x) - y_0|$ postigne svoj globalni minimum u barem dvije različite točke?

Primjer 4. *(ℓ_1-udaljenost točke do grafa funkcije)*
Treba odrediti ℓ_1-udaljenost točke $T_0 = (5,5)$ do grafa funkcije $q\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $q(x) = |x-4|+2$ (vidi Sliku 5a).

(a) $q(x) = |x - 4| + 2$ (b) Minimizirajuća funkcija δ_1



Slika 5: ℓ_1 udaljenost točke $T_0 = (5,5)$ do funkcije $q(x) = |x - 4| + 2$

Slično kao u prethodnom primjeru, ℓ_1-udaljenost točke T_0 do neke točke $T = (x, q(x))$ na grafu funkcije q zadana je s (vidi Sliku 5)

$$d_1(T_0, T) = |x - x_0| + |q(x) - y_0| =: \delta_1(x).$$

Određivanje udaljenosti točke T_0 do grafa funkcije q može se također interpretirati kao problem određivanja globalnog minimuma funkcije δ_1 na $\mathbb{R}$. Dakle, i u ovom primjeru radi se o problemu jednodimenzionalne globalne minimizacije nederivabilne funkcije. Iz Slike 5b može se uočiti da minimizirajuća funkcija δ_1 ima beskonačno mnogo točaka globalnog minimuma, a vrijednost globalnog minimuma je $\delta_1^\star = 2$, tj.

$$\delta_1(x^\star) = 2,\ \forall x^\star \in \operatorname*{argmin}_{x\in\mathbb{R}} \delta_1(x) = [5,7].$$

Zadatak 3. *Kako će izgledati grafovi funkcije δ_1 iz prethodnog primjera ako je $T_0 = (4,4)$, $T_0 = (2,5)$ i $T_0 = (2,3)$?*

Zadatak 4. *Neka su točka T_0 i funkcija q zadane kao u prethodnom primjeru. Odredite ℓ_2 i ℓ_∞ udaljenost točke T_0 do grafa funkcije q.*

Zadatak 5. *Zadana je točka $T_0 = (x_0, y_0, z_0) \in \mathbb{R}^3$ i neprekidna funkcija $q\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$. Definirajte problem određivanja udaljenosti točke T_0 do grafa funkcije q za slučaj LS-kvazimetričke funkcije $d_{LS}\colon \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}_+$, $d_{LS}(x,y) = \|x-y\|_2^2$ i za slučaj ℓ_1 metričke funkcije $d_1\colon \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}_+$, $d_1(x,y) = \|x-y\|_1$. Nekom metodom minimizacije riješite problem ako je $T_0 = (1,2,3)$ i $q(x,y) = x^2+y^2$. Izradite odgovarajuće ilustracije primjenom programskog sustava* Mathematica.

2.2 Procjena parametara matematičkog modela

Primjer 5. *(Najbolji LS-pravac)*
Za dani skup $\mathcal{A} = \{a^i = (x_i, y_i)\colon i = 1,\dots,m\}$ u ravnini treba odrediti pravac u eksplicitnom obliku za koji se postiže najmanja suma kvadrata vertikalnih odstupanja.

Traženi je pravac najbolji LS-pravac $y = k^\star x + l^\star$, takav da funkcija

$$F_{LS}(k,l) = \sum_{i=1}^{m} (y_i - kx_i - l)^2 \tag{2}$$

postiže najmanju vrijednost, odnosno točka $(k^\star, l^\star) \in \operatorname*{argmin}_{(k,l)\in\mathbb{R}^2} \sum_{i=1}^{m} (y_i - kx_i - l)^2$ je globalni minimizator funkcije F_{LS}. Primijetite da se ovdje radi o problemu globalne optimizacije kvadratne funkcije dviju varijabli i da uz jednostavne uvjete na podatke (vidi primjerice [11]) postoji jedinstveno rješenje.

Korištenjem svojstva linearnosti aritmetičke sredine, prema Primjeru 14, str.23, vrijedi

$$\sum_{i=1}^{m} ((y_i - kx_i) - l)^2 \geq \sum_{i=1}^{m} ((y_i - kx_i) - (\bar{y} - k\bar{x}))^2,$$

gdje za zadani $k \in \mathbb{R}$, broj $\bar{y} - k\bar{x}$ predstavlja aritmetičku sredinu podataka $(y_i - kx_i)$, $i = 1,\dots,m$. Nadalje, rastavljanjem sume na dio u kojemu se pojavljuju apscise podataka x_i koje su jednake $\bar{x}$ i dio u kojemu se ovakve apscise ne pojavljuju te korištenjem ponovo Primjera 14, str.23, dobivamo

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{m} ((y_i - kx_i) - l)^2 &\geq \sum_{i=1}^{m} ((y_i - \bar{y}) - k(x_i - \bar{x}))^2 \\
&= \sum_{x_i = \bar{x}} (y_i - \bar{y})^2 + \sum_{x_i \neq \bar{x}} (x_i - \bar{x})^2 \left(\tfrac{y_i - \bar{y}}{x_i - \bar{x}} - k \right)^2 \\
&\geq \sum_{x_i = \bar{x}} (y_i - \bar{y})^2 + \sum_{x_i \neq \bar{x}} (x_i - \bar{x})^2 \left(\tfrac{y_i - \bar{y}}{x_i - \bar{x}} - k^\star \right)^2,
\end{aligned} \tag{3}$$

gdje je

$$k^\star = \frac{1}{\sum\limits_{x_k\neq\bar{x}}(x_k-\bar{x})^2}\sum_{x_i\neq\bar{x}}(x_i-\bar{x})^2\tfrac{y_i-\bar{y}}{x_i-\bar{x}} = \frac{1}{\sum\limits_{x_k\neq\bar{x}}(x_k-\bar{x})^2}\sum_{x_i\neq\bar{x}}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y}).$$

Optimalna vrijednost koeficijenta l tada je $l^\star = \bar{y} - k^\star\bar{x}$.

Zadatak 6. *Riješite prethodni problem uz pretpostavku da je svakom podatku a^i pridružena težina $w_i > 0$. Objasnite značenje formule* (3).

Upute: Promatrajte problem određivanja najboljeg težinskog pravca zadanog u eksplicitnom obliku koji prolazi centroidom podataka $(\bar{x},\bar{y})$. Koje točke podataka $T_i = (x_i, y_i)$ imaju veći, a koje manji utjecaj na optimalnu vrijednost parametra k?

Primjer 6. *(Najbolji LAD-pravac)*
Za dani skup $\mathcal{A} = \{a^i = (x_i, y_i) : i = 1,\dots,m\}$ s težinama $w_1,\dots,w_m > 0$ treba odrediti pravac u eksplicitnom obliku za koji se postiže najmanja suma apsolutnih vertikalnih odstupanja (Least Absolute Deviations (LAD)).

Traženi je pravac najbolji LAD-pravac $y = k^\star x + l^\star$, takav da funkcija

$$F_{LAD}(k,l) = \sum_{i=1}^{m} w_i|y_i - kx_i - l| \tag{4}$$

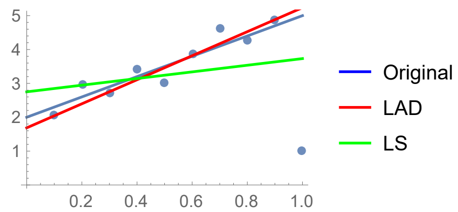
u točki (k^*, l^*) postiže najmanju vrijednost, odnosno globalni minimizator funkcije F_{LAD} je točka $(k^\star, l^\star) \in \operatorname*{argmin}\limits_{(k,l)\in\mathbb{R}^2} \sum\limits_{i=1}^{m} w_i|y_i - kx_i - l|$. Primijetite da se ovdje radi o problemu globalne optimizacije nediferencijalne funkcije dviju varijabli. U radu [20] navedene su dvije metode za rješavanje ovog problema.

Primjer 7. *Promatrajmo skup $\mathcal{A} = \{(x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2 : i = 1,\dots,m\}$. Podatke ćemo konstruirati na sljedeći način. Neka je $m = 10$, $x_i = i/10$, $y_i = f(x_i) + \varepsilon_i$, gdje je $f(x) = 3x + 2$, a ε_i pseudoslučajan broj generiran iz normalne distribucije s očekivanjem* 0 *i varijancom* 0.5. *U skup $\mathcal{A}$ uvest ćemo jedan jako stršeći podatak (outlier) $y_m = 1$ (vidi Sliku 6). Korištenjem niže navedenog* Mathematica*-programa potražimo najbolji LAD i najbolji LS pravac.*

```
In[1]:= Am = 10; SeedRandom[7] ; f[x_] := 3 x + 2
        x = Table[i/10., {i, m}];
        y = f[x] + Table[Random[NormalDistribution[0, .5]], {i, m}];
        y[[m]] = 1;
        pod = Table[{x[[i]], y[[i]]}, {i, m}]
        slpod = ListPlot[pod, PlotStyle -> {PointSize[.03], Opacity[.9]}];
        slp = Plot[f[t], {t, 0, x[[m]]}];
              (* Najbolji LAD pravac *)
        min = NMinimize[Total[Abs[y - a x - b]], {a, b}];
        {a1, b1} = {a /. min[[2]], b /. min[[2]]}
        slp1 = Plot[a1 t + b1, {t, 0, x[[m]]}, PlotStyle -> {Red}];
              (* Najbolji LS pravac *)
```

```
min = NMinimize[Total[Abs[y - a x - b]^2], {a, b}];
{a1, b1} = {a /. min[[2]], b /. min[[2]]}
slp2 = Plot[a1 t + b1, {t, 0, x[[m]]}, PlotStyle -> {Green},
            PlotLegends -> LineLegend[{Blue, Red, Green},
             {"Original", "LAD", "LS"}]];
sl2 = Show[slpod, slp, slp1, slp2, ImageSize -> Small]
```

Rezultati su vidljivi na Slici 6. Primijetite da najbolji LAD pravac ignorira outlier i vrlo dobro rekonstruira originalni pravac, dok suprotno tome, outlier jako utječe na najbolji LS pravac.



Slika 6: Rekonstrukcija pravca kao najboljeg LS i najboljeg LAD pravca

Zadatak 7. *Pokažite da se u Primjeru 6 ne može postupiti kao u Primjeru 5. Obrazložite svoju tvrdnju!*

Zadatak 8. *U radu [20] predložena je „Two Points Method" za rješavanje problema iz Primjera 6. Izradite* Mathematica-*modul za* Two Points Method *i testirajte ga na nekoliko primjera.*

Primjer 8. *(The best TLS-line in the plane)*
Given a data set $\mathcal{A} = \{a_i = (x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2 : i = 1, \dots, m\}$, one has to determine parameters of the line

$$ax + by + c = 0, \tag{5}$$

such that the sum of squares of orthogonal distances from points a_i to the line (5) *be minimal.*

In order that (5) defines a line, parameters a, b, and c have to satisfy $a^2 + b^2 \neq 0$, ensuring that at least one of the parameters a or b is nonzero. Dividing (5) by $\sqrt{a^2+b^2}$ and denoting $\alpha := \frac{a}{\sqrt{a^2+b^2}}$, $\beta := \frac{b}{\sqrt{a^2+b^2}}$, and $\gamma := \frac{c}{\sqrt{a^2+b^2}}$, the requirement becomes $\alpha^2 + \beta^2 = 1$. The line $\alpha x + \beta y + \gamma = 0$ satisfying $\alpha^2 + \beta^2 = 1$ is called a *normalized line*.

Because the distance between the point a_i to this line is $|\alpha x_0 + \beta y_0 + \gamma|$ (see Exercise 9(iii)), the problem of finding the optimal parameters of the sought `TLS`-line can be posed as the following `GOP` in $\mathbb{R}^3$:

$$\underset{\alpha,\beta,\gamma\in\mathbb{R}}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{m} (\alpha x_i + \beta y_i + \gamma)^2, \qquad \text{where} \qquad \alpha^2 + \beta^2 = 1. \tag{6}$$

The following lemma provides the means to reduce dimension of this `GOP` by one.

Lema 1. *Let $\mathcal{A} = \{a_i = (x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2 : i = 1, \dots, m\}$ be a data set with weights $w_i > 0$. The* **TLS**-*line passes through the centroid $(\bar{x}, \bar{y})$ of the data set $\mathcal{A}$, where*

$$\bar{x} = \tfrac{1}{W} \sum_{i=1}^{m} w_i x_i, \qquad \bar{y} = \tfrac{1}{W} \sum_{i=1}^{m} w_i y_i, \qquad W = \sum_{i=1}^{m} w_i.$$

Dokaz. Note that if the normalized line $\alpha x + \beta y + \gamma = 0$, $\alpha^2 + \beta^2 = 1$, passes through the centroid $(\bar{x}, \bar{y})$, then

$$\alpha(x - \bar{x}) + \beta(y - \bar{y}) = 0, \quad \text{where} \quad \alpha^2 + \beta^2 = 1. \tag{7}$$

Using (**??**) and linearity of the arithmetic mean,

$$\sum_{i=1}^{m} w_i \Big(\alpha x_i + \beta y_i - (-\gamma)\Big)^2$$
$$\geq \sum_{i=1}^{m} w_i \Big(\alpha x_i + \beta y_i - (\alpha \bar{x} + \beta \bar{y})\Big)^2 = \sum_{i=1}^{m} w_i \Big(\alpha(x_i - \bar{x}) + \beta(y_i - \bar{y})\Big)^2.$$

The equality holds true if and only if $\gamma = -\alpha\bar{x} - \beta\bar{y}$, i.e. among all normalized lines $\alpha x + \beta y + \gamma = 0$, $\alpha^2 + \beta^2 = 1$, the line (7) passing through the centroid of data, has the least possible weighted sum of squares of orthogonal deviations. □

Zadatak 9. *Let p, given by $\alpha x + \beta y + \gamma = 0$, $\alpha^2 + \beta^2 = 1$, be a normalized line in the plane, and let $T = (x_0, y_0) \in \mathbb{R}^2$ be an arbitrary point. Prove that*

(*i*) *$n_0 = (\alpha, \beta)$ is a unit normal vector to the line p;*

(*ii*) *the unit vector $u_0 = (\beta, -\alpha)$ determines the direction of the line p;*

(*iii*) *the Euclidean distance from the point T to the line p is given by*

$$d(T, p) = |\alpha x_0 + \beta y_0 + \gamma|; \tag{8}$$

(*iv*) *the orthogonal projection T_p of the point T onto the line p is given by*

$$T_p = \langle T, u_0 \rangle \, u_0 - \gamma \, n_0, \tag{9}$$

where $\langle \ , \ \rangle$ denotes the usual scalar product.

Zadatak 10. *Let $\mathcal{A} = \{a_i = (x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2 : i = 1, \dots, m\}$, be a data set with weights $w_i > 0$. The parameters $\hat{k}, \hat{\ell}$ of* the best LS-line *$y = \hat{k}x + \hat{\ell}$ are defined as the solution to the following* ***GOP*** *(see e.g. [4, 20]):*

$$\operatorname*{argmin}_{k,\ell \in \mathbb{R}} F_{LS}(k, \ell), \qquad F_{LS}(k, \ell) = \sum_{i=1}^{m} (y_i - k x_i - \ell)^2. \tag{10}$$

Does the solution to the problem (10) *always exist? Does the best* ***LS****-line pass through the data's centroid?*

Zadatak 11. *Let p be a line in the plane given by $y = kx + \ell$ and let $T = (x_0, y_0)$ be a point. Show that the Euclidean distance from T to the line p, and its orthogonal projection T_p, are given by*

$$d(T,p) = \frac{|kx_0 + \ell - y_0|}{\sqrt{k^2+1}}, \quad T_p = \tfrac{1}{k^2+1}(-k\ell + x_0 + ky_0,\ \ell + k(x_0 + ky_0)).$$

According to Lemma 1, looking for the best TLS-line of a given data set $\mathcal{A} = \{a_i = (x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2 : i = 1, \ldots, m\}$, in the form of (7), instead of solving the GOP (6), one can solve the GOP

$$\begin{aligned} &\operatorname*{argmin}_{\alpha,\beta\in\mathbb{R}} F(\alpha,\beta), \quad \text{with} \quad \alpha^2+\beta^2 = 1, \quad \text{where} \\ &F(\alpha,\beta) = \sum_{i=1}^m w_i \left[\alpha(x_i - \bar{x}) + \beta(y_i - \bar{y})\right]^2. \end{aligned} \tag{11}$$

Using

$$B := \begin{bmatrix} x_1 - \bar{x} & y_1 - \bar{y} \\ \vdots & \vdots \\ x_m - \bar{x} & y_m - \bar{y} \end{bmatrix}, \quad D = \operatorname{diag}(w_1, \ldots, w_m), \quad t = (\alpha, \beta), \tag{12}$$

the function F can be written as

$$F(\alpha,\beta) = \|\sqrt{D}\, B\, t\|^2, \quad \|t\| = 1. \tag{13}$$

Namely, $\|\sqrt{D}\, B\, t\|^2 = (\sqrt{D}\, B\, t)^T\, (\sqrt{D}\, B\, t) = t^T\, B^T D\, B\, t$, and since

$$\begin{aligned} B^T D\, B &= \begin{bmatrix} x_1 - \bar{x} & \cdots & x_m - \bar{x} \\ y_1 - \bar{y} & \cdots & y_m - \bar{y} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} w_1(x_1 - \bar{x}) & w_1(y_1 - \bar{y}) \\ \cdots & \cdots \\ w_m(x_m - \bar{x}) & w_m(y_m - \bar{y}) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \sum\limits_{i=1}^m w_i(x_i - \bar{x})^2 & \sum\limits_{i=1}^m w_i(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) \\ \sum\limits_{i=1}^m w_i(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) & \sum\limits_{i=1}^m w_i(y_i - \bar{y})^2 \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

we get

$$\begin{aligned} (\alpha,\beta)\,(B^T D\, B)\,(\alpha,\beta)^T &= (\alpha,\beta) \begin{bmatrix} \alpha \sum\limits_{i=1}^m w_i(x_i - \bar{x})^2 + \beta \sum\limits_{i=1}^m w_i(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) \\ \alpha \sum\limits_{i=1}^m w_i(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) + \beta \sum\limits_{i=1}^m w_i(y_i - \bar{y})^2 \end{bmatrix} \\ &= \alpha^2 \sum_{i=1}^m w_i(x_i - \bar{x})^2 + 2\alpha\beta \sum_{i=1}^m w_i(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) + \beta^2 \sum_{i=1}^m w_i(y_i - \bar{y})^2 \\ &= \sum_{i=1}^m w_i\big(\alpha(x_i - \bar{x}) + \beta(y_i - \bar{y})\big)^2 = F(\alpha,\beta). \end{aligned}$$

Zadatak 12. *Show that $B^T D\, B$ is a positive definite matrix if and only if the points (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, m$, are not collinear.*

According to [17], the following theorem holds true (for the necessary notions see [3, 4]).

Teorem 1. *The function F in* (11) *attains its global minimum at the unit eigenvector $t = (\alpha, \beta)^T$ corresponding to the smaller eigenvalue of the symmetric positive definite matrix $B^T D\, B$.*

Dokaz. Notice that $B^T DB \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ is a symmetric matrix. According to the theorem on diagonalization of such matrices (see e.g. [3]), there exist an orthogonal matrix V and a diagonal matrix $\Delta = \operatorname{diag}(\lambda_1, \lambda_2)$ such that $B^T D\, B = V\,\Delta\, V^T$. The numbers $\lambda_1 \geq \lambda_2 > 0$ are the (positive) eigenvalues, and columns of the matrix V correspond to eigenvectors of the matrix $B^T D\, B$.

For an arbitrary unit vector $t \in \mathbb{R}^2$ one has

$$\|\sqrt{D}\, B\, t\|^2 = (\sqrt{D}\, B\, t)^T\, (\sqrt{D}\, B\, t) = t^T\, B^T D\, B\, t = t^T\, V\,\Delta\, V^T t = s^T\,\Delta\, s,$$

where $s = V^T t$. Since the matrix V is orthogonal, $\|s\| = 1$, and therefore

$$\|\sqrt{D} B\, t\|^2 = s^T\,\Delta\, s = \sum_{i=1}^{2} \lambda_i\, s_i^2 \geq \lambda_2.$$

The latter inequality is the consequence of the fact that the minimum of a convex combination of several numbers is attained at the smallest of these numbers. It is not difficult to see that the equality takes place precisely when t is the unit eigenvector corresponding to the smallest (in our 2-dimensional case this means the smaller) eigenvalue of the matrix $B^T D\, B$. □

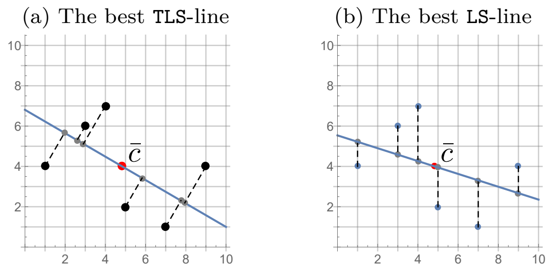
Zadatak 13. *Find the explicit formulas for eigenvalues of the matrix $B^T D\, B$.*

Primjer 9. *Let the data set $\mathcal{A}$ be given by*

w_i	1	1	1	1	1	1
x_i	1	3	4	5	7	9
y_i	4	6	7	2	1	4

Using the module `TLSline[]` one finds the data's centroid $\bar{c} = (\frac{29}{6}, 4)$ and matrices

$$B = \begin{bmatrix} -23/6 & 0 \\ -11/6 & 2 \\ -5/6 & 3 \\ 1/6 & -2 \\ 13/6 & -3 \\ 25/6 & 0 \end{bmatrix}, \quad D = \operatorname{diag}(1,1,1,1,1,1), \quad B^T D\, B = \begin{bmatrix} 245/6 & -13 \\ -13 & 26 \end{bmatrix}.$$



Slika 7: The best TLS-line and the best LS-line

Eigenvalues of the matrix $B^T D\, B$ are $\lambda_1 = 48.38$ and $\lambda_2 = 18.45$, and the unit eigenvector corresponding to the smaller eigenvalue is $t = (0.50,\ 0.86)$. Therefore the best TLS-line is given by $0.50\,x + 0.86\,y - 5.89 = 0$ i.e. $y = -0.65\,x + 6.85$, shown in Fig. 7a.

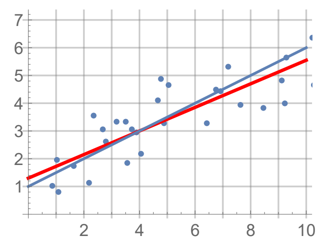
The best LS-line $y = -0.32\,x + 5.54$ for the same data set $\mathcal{A}$ (see Exercise 10), is shown in Fig. 7 b.

Primjedba 2. One can show (see e.g. [5]) that both, the best LS-line and the best TLS-line are very sensitive to the presence of outliers. The sensitivity increases with the distance of data points from the centroid.

The next example shows how one can define artificial data arising from some straight line. Later on, this is going to be used in applications.

Primjer 10. *Let p be the graph of the function $f(x) = 0.5\,x + 1$. For $m > 2$ let $x_i = a + i\frac{b-a}{m-1}$, $i = 0, 1, \ldots, m-1$, be equidistant points in the interval $[a, b]$. This defines the set $\tilde{\mathcal{A}} = \{a_i = (x_i, y_i) : y_i = f(x_i)\}$ of uniformly distributed points on the line p.*

Replacing each point of $\tilde{\mathcal{A}}$ by a random point with added noise from the bivariate normal distribution $\mathcal{N}(0, \sigma^2 I)$ with expectation $0 \in \mathbb{R}^2$ and covariance matrix $\sigma^2 I$, we obtain an artificial data set $\mathcal{A}$. Figure 8 shows the line p (blue), the data set $\mathcal{A}$, and the best TLS-line (red) derived from $m = 30$ equidistant points in $[0, 10]$ and $\sigma = 0.5$.



Slika 8: The artificial data set derived from the line $y = 0.5\,x + 1$

Using *Mathematica computation system*, such a data set $\mathcal{A}$ can be obtained in the following way:

```
In[1]:= f[x_] := .5 x + 1; a = 0; b = 10; m = 30; sigma = .5;
        x = Table[a + i (b - a)/(m - 1.), {i, 0, m - 1}];
        A = Table[{x[[i]], f[x[[i]]]}, {i, m}];
        Do[
            A[[i]] = RandomVariate[ MultinormalDistribution[A[[i]],
                       sigma IdentityMatrix[2]]]
            , {i, m}];
```

Primjer 11. *(Najbolji OD-pravac)*
Za dani skup podataka $\mathcal{A} = \{a^i = (x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2 \colon i = 1, \ldots, m\}$ s odgovarajućim težinama $w_1, \ldots, w_m > 0$ treba odrediti pravac p u ravnini tako da suma euklidskih ℓ_2 udaljenosti točaka T_i do pravca p bude minimalna.

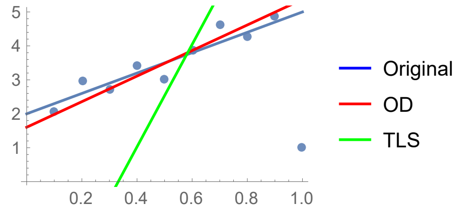
Pravac p je oblika $ax + by + c = 0$, $a^2 + b^2 = 1$. U literaturi se takav pravac naziva *„the best Orthogonal Distance line”* (OD), a rješenje je sljedećeg nelinearnog problema globalne optimizacije:

$$\begin{aligned}\operatorname*{argmin}_{p} \sum_{i=1}^{m} w_i d_2(T_i, p) &= \operatorname*{argmin}_{a,b,c\in\mathbb{R}} \sum_{i=1}^{m} w_i \frac{|ax_i + by_i + c|}{\sqrt{a^2 + b^2}} \\ &= \operatorname*{argmin}_{a^2+b^2=1} \sum_{i=1}^{m} w_i |ax_i + by_i + c|.\end{aligned}$$

Primijetite da se ovdje radi o problemu globalne optimizacije nelinearne nediferencijabilne funkcije triju varijabli s ograničenjima koji se općenito ne može eksplicitno riješiti.

Primjer 12. *Za podatke iz Primjera 7 potražit ćemo najbolji TLS i najbolji OD pravac. Pri tome ćemo koristiti niže navedeni* Mathematica-*program.*

```
In[1]:=             (* Najbolji OD pravac *)
        min = NMinimize[Total[Abs[k x + l - y]/Sqrt[k^2 + 1]], {k, l}];
        {a1, b1} = {k /. min[[2]], l /. min[[2]]}
        slp1 = Plot[a1 t + b1, {t, 0, x[[m]]}, PlotStyle -> {Red}];
                    (* Najbolji TLS pravac *)
        min = NMinimize[Total[Abs[k x + l - y]^2/(k^2 + 1)], {k, l}];
        {a1, b1} = {k /. min[[2]], l /. min[[2]]}
        slp2 = Plot[a1 t + b1, {t, 0, x[[m]]}, PlotStyle -> {Green},
                    PlotLegends -> LineLegend[{Blue, Red, Green},
                     {"Original", "OD", "TLS"}]];
        Print[Show[slpod, slp, slp1, slp2, ImageSize -> Small]]
```

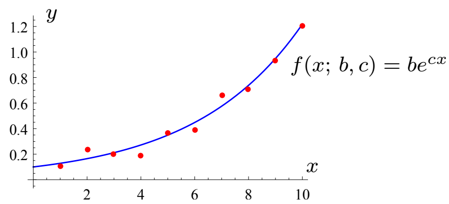


Slika 9: Rekonstrukcija pravca kao najboljeg OD i najboljeg TLS pravca

Rezultati su vidljivi na Slici 9. Primijetite da najbolji OD pravac ignorira outlier i vrlo dobro rekonstruira originalni pravac, dok suprotno tome, outlier jako utječe na najbolji TLS pravac.

Zadatak 14. *Primijenite metodu sukcesivnih iteracija iz Primjera* **??** *za traženje najboljeg OD-pravca u eksplicitnom obliku.*

Primjer 13. *(Nelinearni problem najmanjih kvadrata)*
Za dani skup $\mathcal{A} = \{a^i = (x_i, y_i) : i = 1, \ldots, m\}$ *treba odrediti optimalne parametre* $b^\star$ *i* $c^\star$ *eksponencijalne model-funkcije* $f(t; b, c) = b\,e^{ct}$*, tako da suma kvadrata izmjerenih od teoretskih vrijednosti bude minimalna (vidi Sliku 10).*



Slika 10: Podaci i najbolja LS-eksponencijalna model-funkcija

LS-optimalni parametri $b^\star$ i $c^\star$ eksponencijalne model-funkcije $f(t; b, c) = b\,e^{ct}$ mogu ali i ne moraju postojati (vidi [11]). Ako postoje, odredit ćemo ih tako da potražimo globalni minimizator funkcije

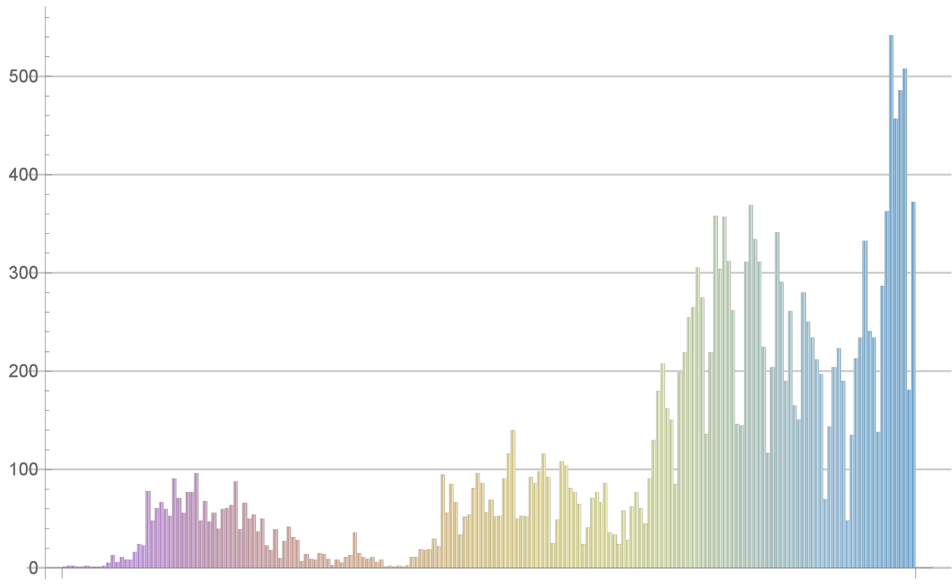
$$F(b, c) = \sum_{i=1}^{m} \left(b\,e^{cx_i} - y_i\right)^2,$$

tj. $(b^\star, c^\star) \in \underset{(b,c)\in\mathbb{R}^2}{\operatorname{argmin}} F(b, c)$. Primijetite da se u ovom slučaju radi o problemu minimizacije „glatke” (višestruko derivabilne) funkcije dviju varijabli.

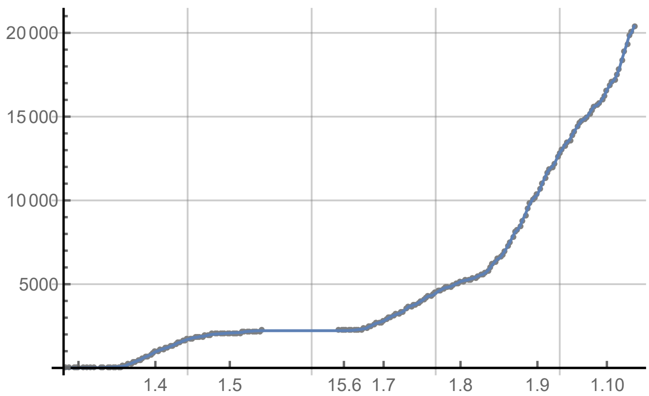
Kao što smo to uradili u slučaju traženja najboljeg pravca, i u slučaju traženja „najbolje eksponencijalne funkcije” možemo primijeniti neki drugi pristup.

Brojne druge primjere optimizacijskih problema iz praktičnih istraživanja možemo naći kod [1, 2, 14, 19].

2.3 Procjena karakterističnih točaka broja zaraženih od `Covid-19`



Slika 11: Dnevni podaci o broju zaraženih od 25-2-2020 do 12-10-2020



Slika 12: Kumulativni podaci o broju zaraženih od 25-2-2020 do 12-10-2020

2.3.1 Dnevni podaci

Dnevni podaci fitovat će se pomoću Gaussove model-funkcije [13]

$$f(t; b, c, d) = b\, e^{-c(t-d)^2}, \quad b, c, d > 0, \tag{14}$$

čije su važne točke

- $I = (t_I, f(t_I)), \quad t_I = \frac{-\sqrt{2}+2d\sqrt{c}}{2\sqrt{c}}$ – točka infleksije,
- $M = (d, f(d))$ – točka maksimuma.

Točka infleksije I predstavlja stanje zaraze u kojoj prestaje progresivni rast i počinje degrsivni rast zaraženih. Posebno je važan trenutak t_I u kome se to postiže.

Točka maksimuma M predstavlja vrhunac zaraze, a postiže se u trnutku $t = d$.

2.3.2 Kumulativni podaci

Kumulativni podaci fitovat će se pomoću Logističke model-funkcije [12] i Gompertzove model-funkcije [10]

Logistička model-funkcija

$$f(t; a, b, c) = \frac{a}{1 + b\, e^{-ct}}, \quad a, b, c > 0, \tag{15}$$

rješenje je diferencijalne jednadžbe (matematičkog modela)

$$y' = c\, y\, (a - y), \quad a, c > 0. \tag{16}$$

Točka infleksije i faze rasta definirane su prema [21].

- $I = (\frac{\ln b}{c}, \frac{a}{2})$ – točka infleksije,
- $y = a$ – gornja asimptota,
- Faze rasta: Pojavljivanje: $\langle 0, t_B \rangle$, Intenzivni rast: $\langle t_B, t_C \rangle$, Usporavanje: $\langle t_C, \infty \rangle$
  $t_B = \frac{1}{c} \ln\left(\frac{b}{2+\sqrt{3}}\right), \qquad t_C = \frac{1}{c} \ln\left(\frac{b}{2-\sqrt{3}}\right)$

Gornja asimptota (razina zasićenja) A predstavlja predvidivo maksimalni broj zaraženih.

Gompertzova model-funkcija

$$f(t; a, b, c) = e^{a - b\, e^{-c\, t}}, \quad a, b, c > 0, \tag{17}$$

rješenje je diferencijalne jednadžbe (matematičkog modela)

$$y' = c\, y\, \ln\left(\frac{e^a}{y}\right), \quad c > 0,\ a \in \mathbb{R}. \tag{18}$$

Točka infleksije i faze rasta definirane su prema [21].

- $I = (\frac{\ln b}{c}, e^{a-1})$ – točka infleksije,
- $y = e^a$ – gornja asimptota,
- Faze rasta: Pojavljivanje: $\langle 0, t_B \rangle$, Intenzivni rast: $\langle t_B, t_C \rangle$, Usporavanje: $\langle t_C, \infty \rangle$
  $t_B = \frac{1}{c} \ln\left(\frac{3-\sqrt{5}}{2} b\right), \qquad t_C = \frac{1}{c} \ln\left(\frac{3+\sqrt{5}}{2} b\right)$

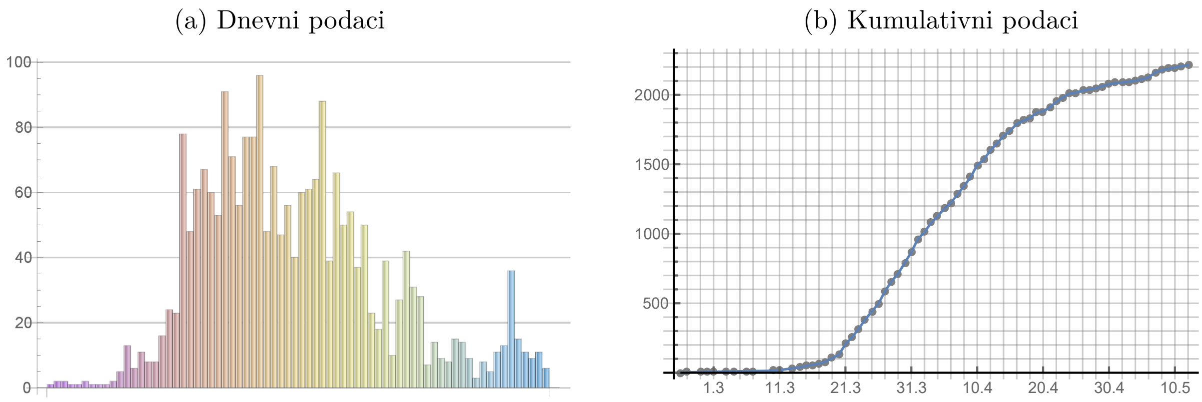
Parametri model-funkcija, točka infleksije i gornja asimptota određuju se na osnovi podataka (t_i, y_i), $i = 1, \ldots, r$, gdje su t_i trenuci (dani), a y_i broj zaraženih na dan t_i (ili kumulativni broj zaraženih do tog dana). Parametri se određuju rješavanjem nelinearnog problema najmanjih kvadrata [22]

$$\underset{a,b,c\in\mathbb{R}_+}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{r} (y_i - f(t_i; a, b, c))^2. \tag{19}$$

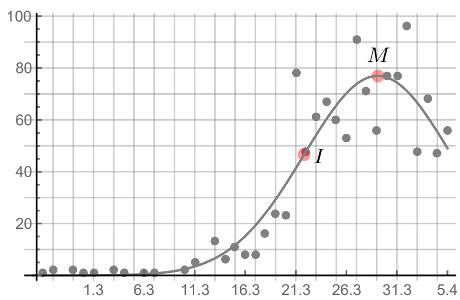
Ovaj problem možemo riješiti primjenom *Mathematica*-modula `NonlinearModelFit` [23].

2.3.3 Prvi krug: Stanje 41. dana (5-4-2020)

Dnevni podaci – Gaussova model-funkcija



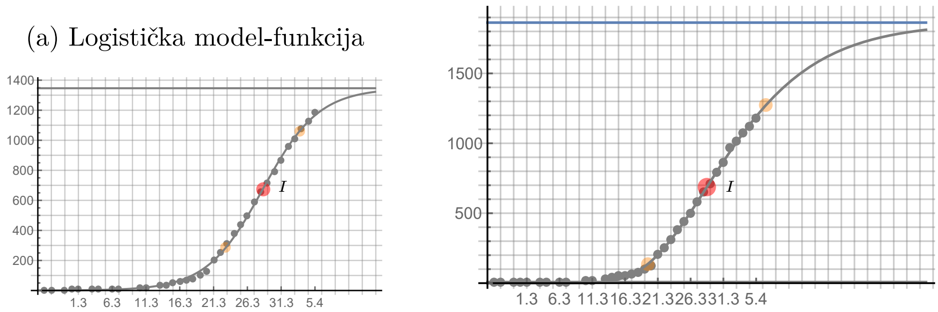
Slika 13: Podaci o broju zaraženih (1. dan odgovara 25-2-2020)



Slika 14: Gausova model-funkcija (1. dan odgovara 25-2-2020)
Karakteristične točke: $I = (27, 47)$ ≈**(22-3-2020,47),** $M = (35, 77)$ ≈**(30-3-2020,77)**

Kumulativni podaci – Logistička i Gompertzova model-funkcija

(a) Logistička model-funkcija (b) Gompertzova model-funkcija



Slika 15: Modeli-funkcija sa zasićenjem (1. dan odgovara 25-2-2020)
Logistička: $I = (34, 674) \approx$**(29-3-2020,674),** $A = 1\,347$
Gompertzova: $I = (34, 686) \approx$**(29-3-2020,686),** $A = 1\,864$

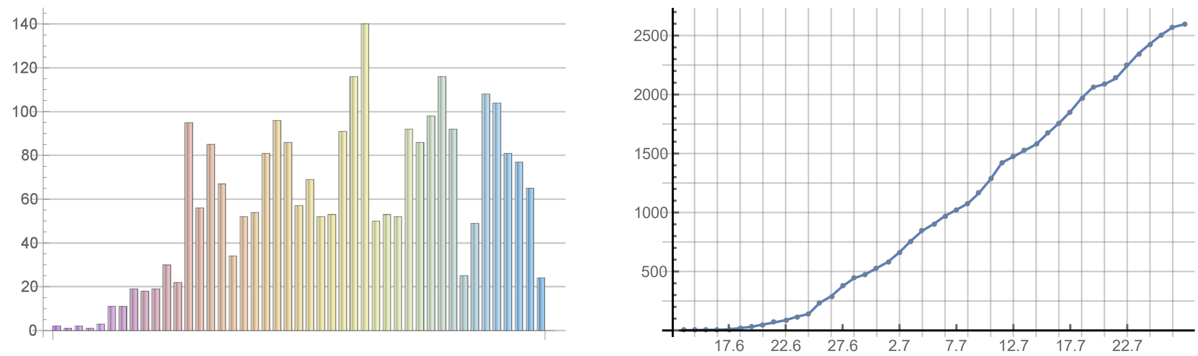
Faze rasta	Logistički model			Gompertzov model		
Pojavljivanje	25.2	—	23.3	25.2	—	20.3
Intenzivni rast	23.3	—	03.4	20.3	—	07.4
Usporavanje	03.4	—		07.4	—	

Tablica 1: Faze rasta (kumulativnog) broja zaraženih osoba (granice su crvene točke)

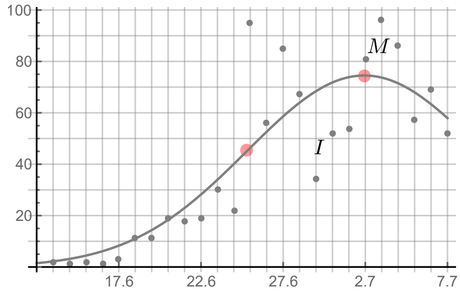
2.3.4 Drugi krug: Stanje 25. dana (7-7-2020)

Dnevni podaci – Gaussova model-funkcija

(a) Dnevni podaci (b) Kumulativni podaci



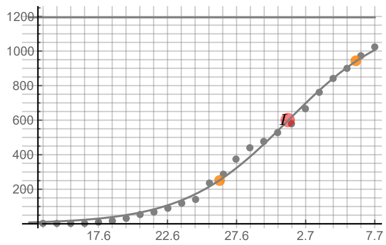
Slika 16: Podaci o broju zaraženih (1. dan odgovara 13-6-2020)



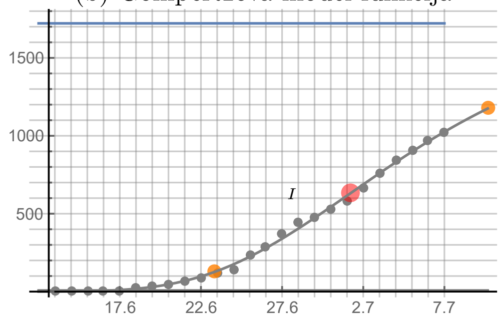
Slika 17: Gausova model-funkcija (1. dan odgovara 13-6-2020)
Karakteristične točke: **I=(25-6-2020,46), M=(2-7-2020,75)**

Kumulativni podaci – Logistička i Gompertzova model-funkcija

(a) Logistička model-funkcija



(b) Gompertzova model-funkcija



Slika 18: Modeli-funkcija sa zasićenjem (1. dan odgovara 13-6-2020)
Logistička: I=(1-7-2020,598), $A = 1\,196$
Gompertzova: I=(2-7-2020,634), $A = 1\,722$

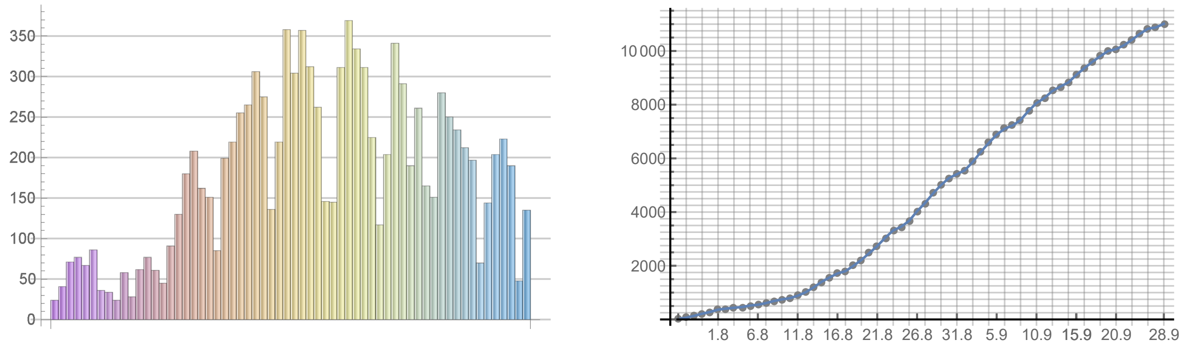
Faza	Logistički model	Gompertzov model
Pojavljivanje	13.6 - 26.6	13.6 - 26.6
Intenzivni rast	26.6 - 30.6	26.6 - 6.7
Usporavanje	30.6 -	6.7 -

Tablica 2: Faze rasta (kumulativnog) broja zaraženih osoba (granice su crvene točke)

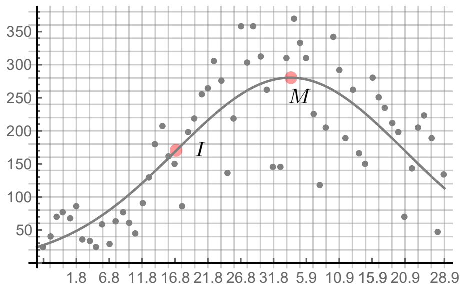
2.3.5 Treći krug: Stanje 62. dana (28-9-2020)

Dnevni podaci – Gaussova model-funkcija

(a) Dnevni podaci (b) Kumulativni podaci



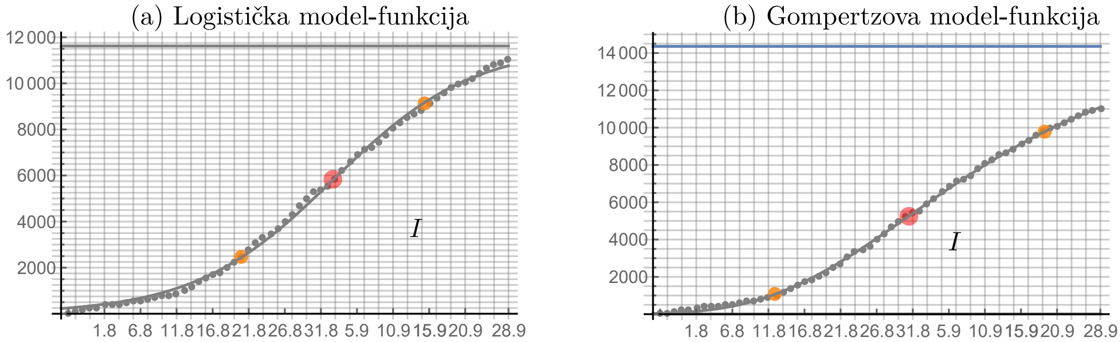
Slika 19: Podaci o broju zaraženih (1. dan odgovara 27-7-2020)



Slika 20: Gausova model-funkcija (1. dan odgovara 27-7-2020)
Karakteristične točke: **I=(16-8-2020,171), M=(2-9-2020,281)**

Kumulativni podaci – Logistička i Gompertzova model-funkcija

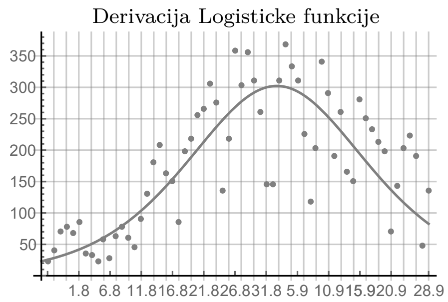
(a) Logistička model-funkcija (b) Gompertzova model-funkcija



Slika 21: Modeli-funkcija sa zasićenjem (1. dan odgovara 27-7-2020)
Logistička: I=(3-9-2020,5811), $A = 11621$
Gompertzova: I=(1-9-2020,5282), $A = 14357$

Faza	Logistički model			Gompertzov model		
Pojavljivanje	27.7	-	21.8	27.7	-	13.8
Intenzivni rast	21.8	-	15.9	13.8	-	20.9
Usporavanje	15.9	-		20.9	-	

Tablica 3: Faze rasta (kumulativnog) broja zaraženih osoba (granice su crvene točke)

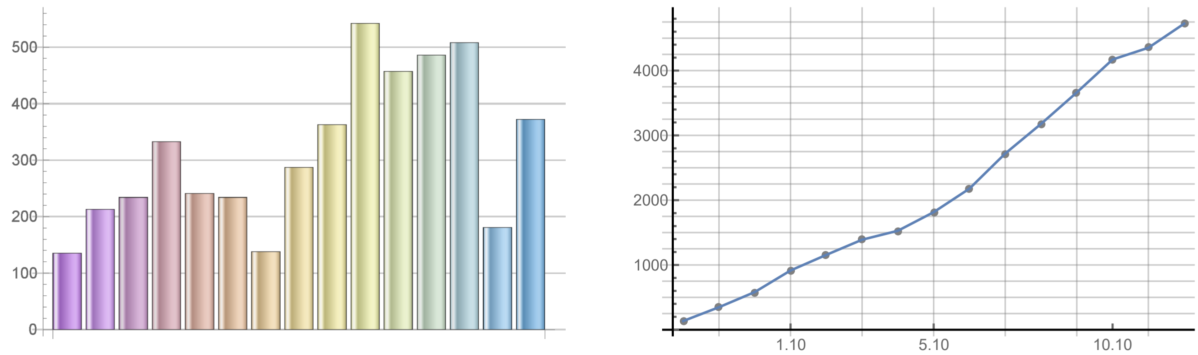


Slika 22: Derivacije model-funkcija s dnevnim podacima

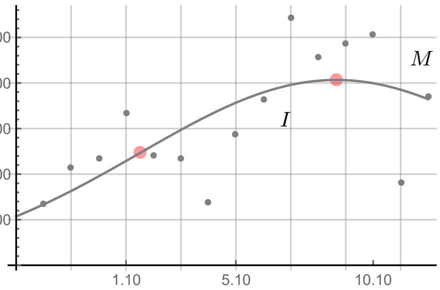
2.3.6 Četvrti krug: Stanje 15. dana (12-10-2020)

Dnevni podaci – Gaussova model-funkcija

(a) Dnevni podaci (b) Kumulativni podaci



Slika 23: Podaci o broju zaraženih (1. dan odgovara 28-9-2020)

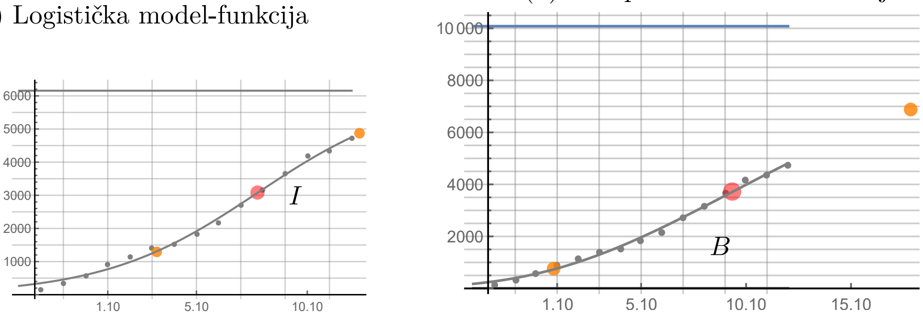


Slika 24: Gausova model-funkcija (1. dan odgovara 28-9-2020)
Karakteristične točke: **I=(2-10-2020,247), M=(9-10-2020,407)**

Kumulativni podaci – Logistička i Gompertzova model-funkcija

(a) Logistička model-funkcija

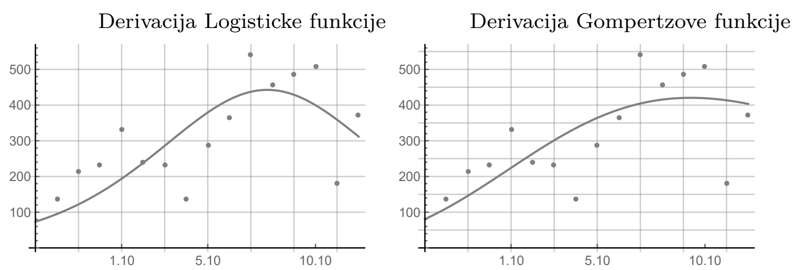
(b) Gompertzova model-funkcija



Slika 25: Modeli-funkcija sa zasićenjem (1. dan odgovara 28-9-2020)
Logistička: I=(8-10-2020,3079), $A = 6157$
Gompertzova: I=(10-10-2020,3710), $A = 10085$

Faza	Logistički model			Gompertzov model		
Pojavljivanje	28.9	-	4.10	28.9	-	1.10
Intenzivni rast	4.10	-	13.10	1.10	-	18.10
Usporavanje	13.10	-		18.10	-	

Tablica 4: Faze rasta (kumulativnog) broja zaraženih osoba (granice su crvene točke)



Slika 26: Derivacije model-funkcija s dnevnim podacima

2.4 Fermat – Torricelli - Weberov problem

Primjer 14. *(Centroid skupa $\mathcal{A} \subset \mathbb{R}^n$)*
Zadan je skup $\mathcal{A} = \{a^i \in \mathbb{R}^n : i = 1, \dots, m\}$ s odgovarajućim težinama $w_1, \dots, w_m > 0$. Treba pronaći točku $c^\star = (c_1^\star, \dots, c_n^\star) \in \mathbb{R}^n$, za koju je težinska suma kvadrata euklidskih udaljenosti do točaka skupa $\mathcal{A}$ minimalna.

Tražena točka $c^\star$ točka je u kojoj se postiže globalni minimum funkcije

$$F_{LS}(x) = \sum_{i=1}^{m} w_i \|x - a^i\|_2^2 = \sum_{i=1}^{m} w_i \sum_{s=1}^{n} (x_s - a_s^i)^2, \tag{20}$$

odnosno točka $c^\star \in \operatorname{argmin}\limits_{x \in \mathbb{R}^n} \sum\limits_{i=1}^{m} w_i \|x - a^i\|_2^2$ je globalni minimizator funkcije F_{LS}. Točku $c^\star$ zovemo centroid skupa $\mathcal{A}$[1]. U ovom slučaju radi se o problemu globalne optimizacije kvadratne funkcije više varijabli koji uvijek ima rješenje.

Zadatak 15. *Pokažite da je $c^\star = \frac{1}{W} \sum\limits_{i=1}^{m} w_i a^i$, $W = \sum\limits_{i=1}^{m} w_i$, jedinstvena točka globalnog minimuma funkcije $F_{LS} \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, $F_{LS}(x) = \sum\limits_{i=1}^{m} w_i \|x - a^i\|_2^2$. Izvedite dokaz najprije za $n = 1$, a nakon toga općenito.*

Zadatak 16. *Odredite težinski centroid skupa $\mathcal{A} = \{(0,1,2), (2,8,0), (-1,9,4), (1,6,5), (-2,8,3)\} \subset \mathbb{R}^3$ s težinama*

(a) $w_1 = \cdots = w_5 = 1$,

(b) $w_1 = 1$, $w_2 = 2$, $w_3 = 1$, $w_4 = 1$, $w_5 = 2$.

Primjer 15. *(Medijan skupa $\mathcal{A} \subset \mathbb{R}^n$)*
Zadan je skup $\mathcal{A} = \{a^i \in \mathbb{R}^n : i = 1, \dots, m\}$ s odgovarajućim težinama $w_1, \dots, w_m > 0$. Treba pronaći točku $c^\star = (c_1^\star, \dots, c_n^\star) \in \mathbb{R}^n$, za koju je težinska suma ℓ_1-udaljenosti do točaka skupa $\mathcal{A}$ minimalna.

Tražena točka $c^\star$ točka je u kojoj se postiže globalni minimum funkcije

$$F_1(x) = \sum_{i=1}^{m} w_i \|x - a^i\|_1 = \sum_{i=1}^{m} w_i \sum_{s=1}^{n} |c_s - a_s^i|, \tag{21}$$

odnosno točka $c^\star \in \operatorname{argmin}\limits_{x \in \mathbb{R}^n} \sum\limits_{i=1}^{m} w_i \|x - a^i\|_1$ je globalni minimizator funkcije F_1. U ovom slučaju radi se o problemu globalne optimizacije nediferencijabilne funkcije više varijabli koji uvijek ima rješenje.

Može se provjeriti da se globalni minimum postiže na težinskom medijanu $c^\star = \operatorname{med}(w_i, a^i)$ skupa $\mathcal{A}$ (vidi [8, 20]). Što u ovom slučaju možete reći o jedinstvenosti globalnog minimuma?

[1] U fizici se ovaj problem povezuje s problemom određivanja centra mase sustava čestica, a centroid se tada naziva težište tijela ili Steinerova točka.

Zadatak 17. *Neka je $\mathcal{A} = \{y_1, \ldots, y_m\} \subset \mathbb{R}$ skup podataka. Pokažite da je $c^\star \in \operatorname*{med}_{y_i \in \mathcal{A}} y_i$ točka globalnog minimuma funkcije $F_1 \colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}_+$, $F_1(x) = \sum\limits_{i=1}^{m} |x - y_i|$.*

Zadatak 18. *Ako su $\varphi_i \in C(\mathbb{R})$, $i = 1, \ldots, n$, konveksne funkcije za koje je*

$$\hat{c}_i = \operatorname*{argmin}_{x \in \mathbb{R}} \varphi_i(x), \quad i = 1, \ldots, n,$$

pokažite da je tada i funkcija $f \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$,

$$f(x_1, \ldots, x_n) = \varphi_1(x_1) + \cdots + \varphi_n(x_n),$$

konveksna funkcija za koju vrijedi

$$\operatorname*{argmin}_{x^n \in \mathbb{R}^n} f(x) = (\hat{c}_1, \ldots, \hat{c}_n)^T.$$

Primijenite navedenu tvrdnju u svrhu određivanja medijana skupa točaka $\mathcal{A} = \{a^i \in \mathbb{R}^n \colon i = 1, \ldots, m\}$.
Vrijedi li obrat navedene tvrdnje? Primjerice, ako je $f \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ konveksna (pa onda i neprekidna) nediferencijabilna funkcija i ako je $f(x_1, x_2) = \varphi_1(x_1) + \varphi_2(x_2)$, moraju li tada i funkcije φ_1, φ_2 biti konveksne (pa onda i neprekidne) funkcije? Izradite odgovarajuće primjere.

Zadatak 19. *Odredite medijan i težinski medijan skupa točaka s težinama iz Zadatka 16.*

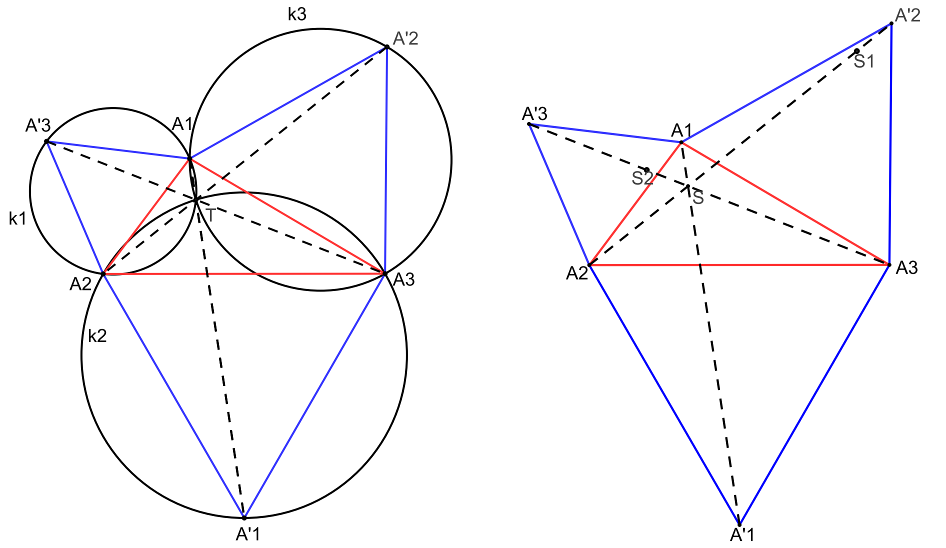
Primjer 16. *(Geometrijski medijan skupa $\mathcal{A} \subset \mathbb{R}^n$)*
Za dani skup $\mathcal{A} = \{a^i \in \mathbb{R}^n \colon i = 1, \ldots, m\}$ s odgovarajućim težinama $w_1, \ldots, w_m > 0$ treba pronaći točku $c^\star = (c_1^\star, \ldots, c_n^\star) \in \mathbb{R}^n$, za koju je težinska suma euklidskih udaljenosti do točaka skupa $\mathcal{A}$ minimalna.

Tražena točka $c^\star$ točka je u kojoj se postiže globalni minimum funkcije

$$F_2(x) = \sum_{i=1}^{m} w_i d_2(x, a^i) = \sum_{i=1}^{m} w_i \|x - a^i\|_2 = \sum_{i=1}^{m} w_i \sqrt{\sum_{s=1}^{n} (x_s - a_s^i)^2}, \tag{22}$$

odnosno točka $c^\star \in \operatorname*{argmin}\limits_{x \in \mathbb{R}^n} \sum\limits_{i=1}^{m} w_i \|x - a^i\|_2$ je globalni minimizator funkcije F_2.

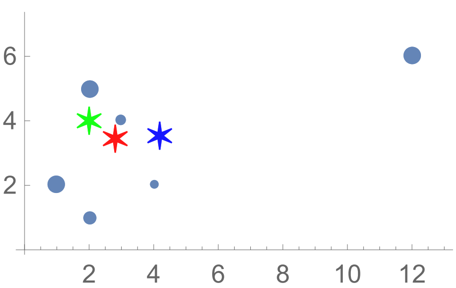
(a) Torricellijeve kružnice (b) Simpsonovi pravci



Slika 27: Fermat – Torricelli – Weberov problem: geometrijski medijan

Točka $c^\star$ zove se **težinski geometrijski medijan** skupa $\mathcal{A}$ i općenito se ne može eksplicitno izračunati. U literaturi ovaj problem može se naći pod nazivom „Fermat–Torricelli–Weberov problem" (vidi primjerice [6]). Najpoznatiji algoritam za traženje geometrijskog medijana skupa $\mathcal{A}$ poznati je *Weiszfeldov algoritam* iz 1936. godine [9]. Specijalno, geometrijski medijan triju točaka u ravnini može se geometrijski dobiti [15] na presjeku tzv. Torricellijevih kružnica (vidi Sliku 27a) ili na presjeku tzv. Simpsonovih pravaca (vidi Sliku 27b).

Primjer 17. *Promatrajmo skup podataka* $\mathcal{A} = \{a^i = (x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2 \colon i = 1, \ldots, m\}$ *s težinama* $w_1, \ldots, w_m > 0$. *Podaci su prikazani plavim kružićima na Slici 28, pri čemu je veličina kružića koji prikazuje podatak* a^i *određena njegovom težinom* w_i. *Treba odrediti reprezentant skupa* $\mathcal{A}$ *kao težinski centroid* (20)*, težinski medijan* (21) *i kao težinski geometrijski medijan* (22)*. Među podacima uočava se i jedan jako uvršćeni podatak (outlier) koji je smješten relativno daleko od ostalih podataka.*



Slika 28: Reprezentant skupa podataka $\mathcal{A}$: težinski centroid (plava zvjezdica), težinski medijan (zelena zvjezdica) i težinski geometrijski medijan (crvena zvjezdica)

Korištenjem niže navedenog *Mathematica*-programa odredit ćemo tražene reprezentante skupa $\mathcal{A}$.

```
In[1]:= (* Težinski medijan i težinska aritmetička sredina *)
        median = Median[WeightedData[podT, podW]]
        mean = Mean[WeightedData[podT, podW]]
                    (* Geometrijski medijan *)
        F[x_, y_] := Sum[podW[[i]] Norm[{x, y} - podT[[i]]], {i, m}]
        min = NMinimize[F[x, y], {x, y}];
        GM = {xGM = x /. min[[2]], yGM = y /. min[[2]]}
```

Rezultati su vidljivi na Slici 28: težinski centroid podataka označen je plavom zvjezdicom, težinski medijan zelenom, a težinski geometrijski medijan crvenom zvjezdicom. Primijetite da spomenuti outlier ima značajan utjecaj na težinski centroid, dok manji utjecaj ima na težinski medijan i težinski geometrijski medijan. Vizualno, čini se da je najbolji reprezentant skupa podataka $\mathcal{A}$ prikazanih na Slici 28 upravo težinski geometrijski medijan (crvena zvjezdica).

Zadatak 20. *Neka je $\mathcal{A} = \{a^i \in \mathbb{R}^n : i = 1, \ldots, m\}$ skup podataka. Problem traženja geometrijskog medijana skupa $\mathcal{A}$ svodi se na rješavanje sljedećeg problema globalne optimizacije*

$$\operatorname*{argmin}_{x\in\mathbb{R}^n} F_2(x), \qquad F_2(x) = \sum_{i=1}^{m} \|x - a^i\|_2. \tag{23}$$

(a) Na što se svodi rješavanje problema (23) *u slučaju $n = 1$?*

(b) Napišite funkciju F_2 iz (23) *za $n = 2$. Za taj slučaj definirajte iterativni postupak (primjenom* Metode jednostavnih iteracija *ili* Newtonove metode - *vidi t.**??**, str.**??**) koji će konvergirati prema geometrijskom medijanu skupa $\mathcal{A}$.*

Zadatak 21. *Za skup podataka $\mathcal{A} = \{a^i \in \mathbb{R} : i = 1, \ldots, m\}$ i za $p > 0$ definirajmo funkciju*

$$G_p(x) = \left(\sum_{i=1}^{m} |x - a^i|^p\right)^{\frac{1}{p}}.$$

Što je minimum funkcije G_p za $p = 1$ i $p = 2$? Kad $p \to \infty$, G_p u limesu prelazi u funkciju

$$G_\infty(x) = \max_{i=1,\ldots,m} |x - a^i|.$$

Pokažite da se minimum funkcije G_∞ postiže u točki $x^\star = \frac{1}{2}\big(\min\limits_{i=1,\ldots,m} a^i + \max\limits_{i=1,\ldots,m} a^i\big)$.

Zadatak 22. *Za skup podataka $\mathcal{A} = \{a^i \in \mathbb{R} : i = 1, \ldots, m\}$ i za $p > 0$ definirajmo funkciju*

$$H_p(x) = \sum_{i=1}^{m} |x - a^i|^p.$$

Što je minimum funkcije H_p za $p = 1$ i $p = 2$? Kad $p \to 0$, H_p u limesu prelazi u funkciju

$$H_0(x) = \sum_{i=1}^{m} \delta(x, a^i), \quad \textit{gdje je} \quad \delta(x, y) = \begin{cases} 1, & x \neq y, \\ 0, & x = y \end{cases}.$$

Pokažite da se minimum funkcije H_0 postiže za mod skupa $\mathcal{A}$ (podatak s najvećom frekvencijom u skupu $\mathcal{A}$).

Zadatak 23. *Pretpostavimo da čekamo jedan od tri lifta koji su raspoređeni duž jednog zida tako da je prvi udaljen od drugog jedan metar a drugi od trećeg tri metra. Dolazak svakog lifta jednako je vjerojatan.*

(a) Gdje treba čekati lift ako želimo da očekivana udaljenost koju ćemo prijeći do lifta bude minimalna? Što bi bio odgovor kada bi drugi i treći lift bili udaljeni 100 *metara?*

(b) Gdje treba čekati lift ako želimo da udaljenost koju ćemo prijeći u najgorem slučaju bude minimalna?

(c) Kako bismo uočili dolazak lifta, za pretpostaviti je da moramo biti na na nekoj udaljenosti od zida s vratima liftova, recimo jedan metar. Gdje treba čekati lift u ovom slučaju ako želimo da očekivana udaljenost koju ćemo prijeći do lifta bude minimalna?

Obrazložite kako bi se odgovori promijenili kad bi se razlikovale vjerojatnosti dolazaka liftova.

Primjer 18. *(Grupiranje podataka u k klastera)*
Zadan je skup $\mathcal{A} = \{a^i \in \mathbb{R}^n : i = 1, \dots, m\}$, a svakom njegovom elementu a^i pridružena je odgovarajuća težina $w_i > 0$. Skup $\mathcal{A}$ treba grupirati u $1 \le k \le m$ nepraznih disjunktnih podskupova (klastera) $\pi_1, \dots, \pi_k$. Pri tome elementi unutar nekog klastera trebaju biti što sličniji, a različiti klasteri što bolje razdvojeni. Kažemo da klasteri trebaju biti što kompaktniji i što bolje međusobno razdvojeni.

Internu kompaktnost i međusobnu dobru razdvojenost klastera možemo definirati kao jedan od sljedeća dva problema globalne optimizacije:

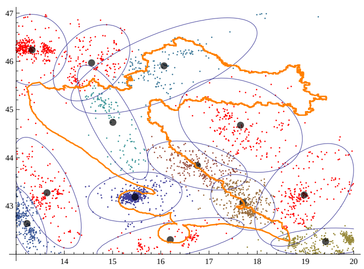
(*i*) $$\operatorname*{argmin}_{\{\pi_1,\dots,\pi_k\}} \mathcal{F}(\{\pi_1,\dots,\pi_k\}), \quad \mathcal{F}(\{\pi_1,\dots,\pi_k\}) = \sum_{j=1}^{k} \sum_{a^i \in \pi_j} w_i d(c(\pi_j), a^i),$$

gdje su $c(\pi_1), \dots, c(\pi_k)$ centri klastera $\pi_1, \dots, \pi_k$ zadani s

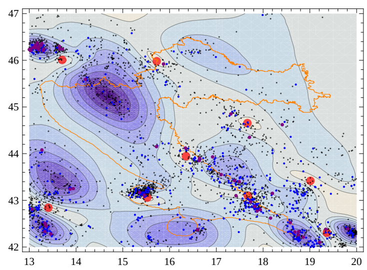
$c(\pi_j) \in \operatorname*{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} \sum_{a^i \in \pi_j} d(x, a^i)$, a $d\colon \mathbb{R}^k \times \mathbb{R}^k \to \mathbb{R}_+$ neka kvazimetrička funkcija;

(*ii*) $$\operatorname*{argmin}_{c_1,\dots,c_k} F(c_1,\dots,c_k), \qquad F(c_1,\dots,c_k) = \sum_{i=1}^{m} w_i \min_{1 \le j \le k} d(c_j, a^i).$$

(a) Geografske pozicije potresa



(b) `ContourPlot` minimizirajuće funkcije (ii)



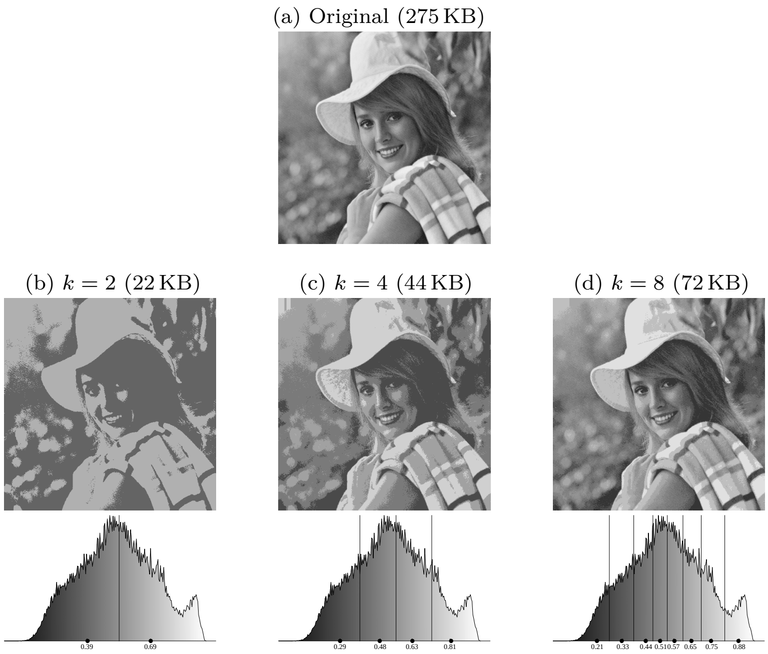
Slika 29: Seizmološka aktivnost na širem području Republike Hrvatske od 1900. godine – vidi: `http://earthquake.usgs.gov/earthquakes/eqarchives/epic/`.

Na Slici 29a prikazane su točke u širem području Republike Hrvatske [16] u kojima se od 1900. godine dogodio potres magnitude ≥ 3, a na Slici 29b prikazan je `ContourPlot` odgovarajuće minimizirajuće funkcije za spomenute podatke.

Primjedba 3. Primijetite da je $F\colon \mathbb{R}^{kn} \to \mathbb{R}_+$ općenito nediferencijabilna, nekonveksna simetrična funkcija od $k \times n$ nezavisnih varijabli. Kaže se da je funkcija $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ simetrična ako vrijedi $f(x_1, \ldots, x_n) = f(x_{i_1}, \ldots, x_{i_n})$, gdje je $(x_{i_1}, \ldots, x_{i_n})$ proizvoljna permutacija od $(x_1, \ldots, x_n)$. Primjerice, funkcija $f\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, $f(x_1, x_2) = x_1^2 - 2x_1x_2 + x_2^2$ je simetrična, ali $g\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, $g(x_1, x_2) = x_1^2 - x_2^2$ nije simetrična funkcija. Ako prethodno navedeni problem globalne optimizacije ima rješenje, onda postoji barem $k!$ različitih točaka globalnog minimuma.

Zadatak 24. *Pokažite da je funkcija* $g\colon [0, 11] \times [0, 11] \to \mathbb{R}$, $g(y_1, y_2) = -\frac{1}{5}(y_1^2 + y_2^2) + 2y_1y_2 \cos y_1 \cos y_2$ *[7] simetrična. Primjenom programskog sustava* Mathematica *nacrtajte njezin graf i* `ContourPlot`*. Ispitajte lokalne i globalne ekstreme ove funkcije.*

Primjer 19. *(Segmentacija crno-bijele slike)*
Neka je $\mathcal{A} = \{a^i \in [0, 1]\colon i = 1, \ldots, 262\,144\}$ *skup (konačni niz) realnih brojeva koji predstavljaju tonove (gray levels) točaka poznate crno-bijele slike „Elaine” veličine* 512×512 *(Slika 30)a.*



Slika 30: Originalna slika i njena segmentacija u 2, 4 ili 8 klastera.

Svakom podatku $a^i \in \mathcal{A}$ pridružena je težina $w_i = 1$. Skup $\mathcal{A}$ treba grupirati u 2, 4 i 8 klastera. Svakom klasteru pridružit ćemo njegov centroid, a nakon toga svim točkama klastera gray level koji ima taj centroid. Tako dobivamo rekonstruirane slike s 2, 4 i 8 tonova (vidi Slike 30b-d). U podnožju ovih slika prikazani su histogrami tonova originalne slike i vrijednosti odgovarajućih centroida.

Literatura

[1] C. Adjiman, S. Dallwig, C. Floudas, A. Neumaier, *A global optimization method, αBB, for general twice-differentiable constrained NLPs – I. Theoretical advances*, Computers and Chemical Engineering, **22**(1998) 1137–1158.

[2] I. P. Androulakis, C. D. Maranas, C. A. Floudas, *αBB: A global optimization method for general constrained nonconvex problems*, Journal of Global Optimization, **7**(1995) 337–363.

[3] L. Beilina, E. Karchevskii, M. Karchevskii, *Numerical Linear Algebra:Theory and Application*, Springer, 2017.

[4] N. Chernov, *Circular and linear regression: Fitting circles and lines by least squares*, volume 117 of *Monographs on Statistics and Applied Probability*, Chapman & Hall/CRC, London, 2010.

[5] Y. Dodge, J. Jurečková, *Adaptive Regression*, Springer, 2000.

[6] Z. Drezner, H. W. Hamacher, *Facility Location: Applications and Theory*, Springer, 2004.

[7] R. Grbić, E. K. Nyarko, R. Scitovski, *A modification of the DIRECT method for Lipschitz global optimization for a symmetric function*, Journal of Global Optimization, **57**(2013) 1193–1212.

[8] C. Gurwitz, *Weighted median algorithms for l_1 approximation*, BIT, **30**(1990) 301–310.

[9] C. Iyigun, A. Ben-Israel, *A generalized Weiszfeld method for the multi-facility location problem*, Operations Research Letters, **38**(2010) 207–214.

[10] D. Jukić, G. Kralik, R. Scitovski, *Least squares fitting gompertz curve*, J. Comput. Appl. Math., **169**(2004) 359–375.

[11] D. Jukić, R. Scitovski, *Existence of optimal solution for exponential model by least squares*, J. Comput. Appl. Math., **78**(1997) 317–328.

[12] D. Jukić, R. Scitovski, *Solution of the least squares problem for logistic function*, J. Comput. Appl. Math., **156**(2003) 159–177.

[13] D. Jukić, R. Scitovski, *Least squares fitting Gaussian type curve*, Appl. Math. Comput., **167**(2005) 286–298.

[14] L. Liberti, *Introduction to Global Optimization*, LIX, École Polytechnique, 2008.

[15] D. J. Maširević, S. Miodragović, *Geometric median in the plane*, Elemente der Mathematik, **70**(2015) 21–32.

[16] A. Morales-Esteban, F. Martínez-Álvarez, S. Scitovski, R. Scitovski, *A fast partitioning algorithm using adaptive Mahalanobis clustering with application to seismic zoning*, Computers & Geosciences, **73**(2014) 132–141.

[17] Y. Nievergelt, *Total least squares: state-of-the-art regression in numerical analysis*, SIAM Review, **36**(1994) 258–264.

[18] J. M. Ortega, W. C. Rheinboldt, *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*, SIAM, Philadelphia, 2000.

[19] K. V. Price, R. M. Storn, J. A. Lampinen, *Differential Evolution: A Practical Approach to Global Optimization*, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 2005.

[20] K. Sabo, R. Scitovski, *The best least absolute deviations line – properties and two efficient methods*, ANZIAM Journal, **50**(2008) 185–198.

[21] R. Scitovski, *Problemi najmanjih kvadrata. Financijska matematika*, Ekonomski fakultet, Elektrotehnički fakultet, Sveučilište u Osijeku, 1993.

[22] R. Scitovski, *Numerička matematika*, Odjel za matematiku, Sveučilište u Osijeku, 3, izdanje, 2015, `http://www.mathos.unios.hr/index.php/odjel/nasa-izdanja?getBook=541`.

[23] I. Wolfram Research, *Mathematica*, Wolfram Research, Inc., Champaign, Illinois, 2016, version 11.0 edition.