

Matematički praktikum *

prof. dr. sc. Rudolf Scitovski

prof. dr. sc. Kristian Sabo

doc. dr. sc. Danijel Grahovac

dr. sc. Matea Ugrica†

17. listopada 2020.

Sadržaj

1	Optimizacijski problem	1
2	Ilustrativni primjeri	2
2.1	Udaljenost točke do krivulje	3
2.2	Procjena parametara matematičkog modela	6
2.3	Procjena karakterističnih točaka broja zaraženih od Covid-19	11
2.3.1	Dnevni podaci	11
2.3.2	Kumulativni podaci	12
2.3.3	Prvi krug: Stanje 41. dana (5-4-2020)	13
2.3.4	Drugi krug: Stanje 25. dana (7-7-2020)	14
2.3.5	Treći krug: Stanje 62. dana (28-9-2020)	16
2.3.6	Četvrti krug: Stanje 15. dana (12-10-2020)	17
2.4	Fermat – Torricelli - Weberov problem	19

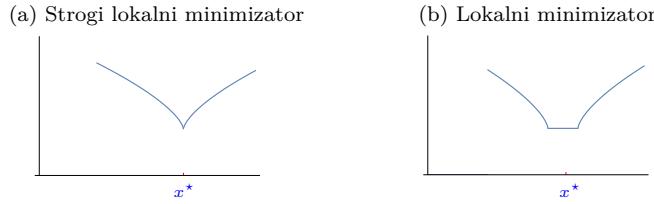
1 Optimizacijski problem

Definicija 1. [17] Kažemo da funkcija $f: \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$, $\mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^n$ u točki $x^* \in \mathcal{D}$ postiže lokalni minimum ako postoji okolina $\mathcal{O}(x^*)$ takva da je $f(x) \geq f(x^*)$ za sve $x \in \mathcal{O}(x^*) \cap \mathcal{D}$. Točku x^* 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^* točka strogog lokalnog minimuma ili strog i lokalni minimizator funkcije f ako postoji okolina $\mathcal{O}(x^*)$ takva da je $f(x) > f(x^*)$ za sve $x \in \mathcal{O}(x^*) \cap \mathcal{D} \setminus \{x^*\}$.



Slika 1: Lokalni minimizator i strog i lokalni minimizator

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

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

Točku $x^* \in \mathcal{D}$ 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

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

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

$$(i) \quad \max_{x \in \mathcal{D}} f(x) = -\min_{x \in \mathcal{D}} (-f(x)),$$

$$(ii) \quad \operatorname{argmax}_{x \in \mathcal{D}} f(x) = \operatorname{argmin}_{x \in \mathcal{D}} (-f(x)),$$

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 zadano eksplicitno kao $y = kx + \ell$ dana formulom:

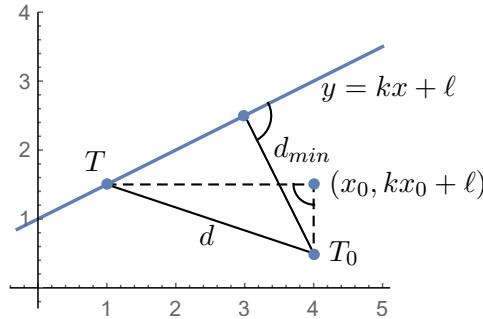
$$\min_{T \in p} \mathfrak{D}(T_0, T) = \frac{|y_0 - kx_0 - \ell|}{\sqrt{1+k^2}}.$$

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

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



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

Rješavanjem jednadžbe:

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

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

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

Nakon sređivanja dobivamo $f(x^*) = \frac{(y_0 - kx_0 - \ell)^2}{1+k^2}$, 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)

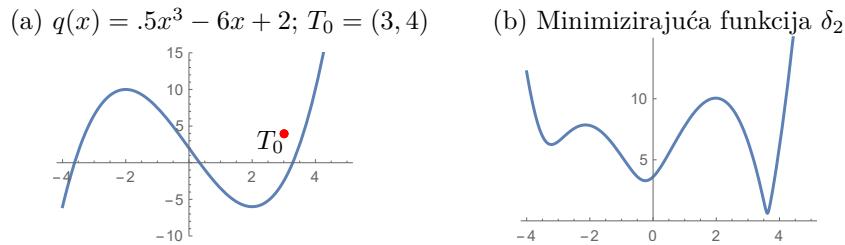
Treba izračunati ℓ_2 udaljenost točke $T_0 = (3, 4)$ do kubne parabole zadane funkcijom $q: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $q(x) = .5x^3 - 6x + 2$ (vidi Sliku 3a).

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

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

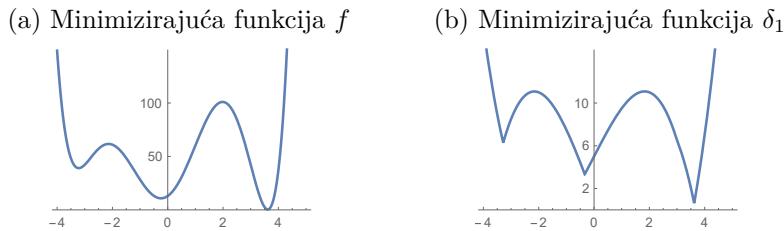


Slika 3: Euklidska udaljenost točke T_0 do kubne parabole q

Određivanje točke $T^* = (x^*, q(x^*))$ 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 eksplisitno.

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)

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



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

Primjer 3. (ℓ_1 -udaljenost točke do parbole)

Treba odrediti ℓ_1 -udaljenost točke $T_0 = (3, 4)$ do kubne parbole zadane funkcijom $q: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $q(x) = .5x^3 - 6x + 2$.

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)

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

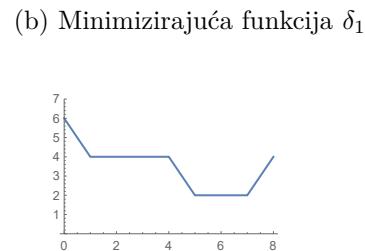
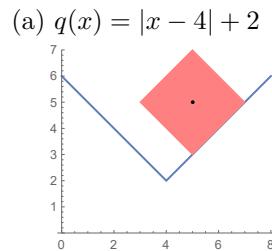
pa se određivanje udaljenosti točke T_0 do grafa funkcije q može interpretirati kao problem određivanja globalnog minimuma funkcije δ_1 definirane na \mathbb{R} . Dakle, i u ovom primjeru radi se o problemu jednodimenzionalne globalne minimizacije, ali ovaj puta minimizirajuća funkcija nije derivabilna.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

Zadatak 2. Kubna parola zadana je funkcijom $q: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $q(x) = .5x^3 - 6x + 2$.

- (a) Gdje treba postaviti točku $T_0 = (x_0, y_0)$ tako da funkcija $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $f(x) = (x - x_0)^2 + (q(x) - y_0)^2$ postigne svoj globalni minimum u barem dvije različite točke?
- (b) Gdje treba postaviti točku $T_0 = (x_0, y_0)$ tako da funkcija $\delta_1: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $\delta_1(x) = |x - x_0| + |q(x) - y_0|$ 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 $q: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $q(x) = |x - 4| + 2$ (vidi Sliku 5a).



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 $\delta_1^* = 2$, tj.

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

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 $q: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$. Definirajte problem određivanja udaljenosti točke T_0 do grafa funkcije q za slučaj LS-kvazimetričke funkcije $d_{LS}: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}_+$, $d_{LS}(x, y) = \|x - y\|_2^2$ i za slučaj ℓ_1 metričke funkcije $d_1: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}_+$, $d_1(x, y) = \|x - y\|_1$. 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 $\mathcal{A} = \{a^i = (x_i, y_i): i = 1, \dots, m\}$ u ravnini treba odrediti pravac u eksplicitnom obliku za koji se postiže najmanja suma kvadrata vertikalnih odstupanja.

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

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

postiže najmanju vrijednost, odnosno točka $(k^*, l^*) \in \underset{(k,l) \in \mathbb{R}^2}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^m (y_i - kx_i - l)^2$ 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 [8]) postoji jedinstveno rješenje.

Korištenjem svojstva linearnosti aritmetičke sredine, prema Primjeru 12, str.19, 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 12, str.19, dobivamo

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

gdje je

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

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

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 eksplisitnom 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 eksplisitnom obliku za koji se postiže najmanja suma apsolutnih vertikalnih odstupanja (Least Absolute Deviations (LAD)).

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

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

u točki (k^*, l^*) postiže najmanju vrijednost, odnosno globalni minimizator funkcije F_{LAD} je točka $(k^*, l^*) \in \underset{(k,l) \in \mathbb{R}^2}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^m w_i |y_i - kx_i - l|$. Primijetite da se ovdje radi o problemu globalne optimizacije nediferencijalne funkcije dviju varijabli. U radu [19] 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} ćemo jedan tako stršeći podatak (outlier) $y_m = 1$ (vidi Sliku 6). Korištenjem niže navedenog Mathematica-programa potražimo najbolji LAD i najbolji LS pravac.

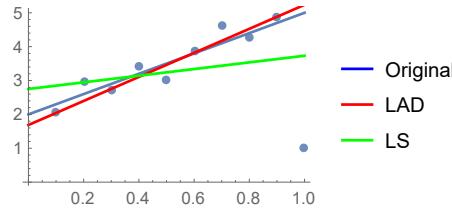
```
In[1]:= Am = 10; SeedRandom[7]; f[x_] := 3 x + 2
x = Table[i/10., {i, m}];
y = f[x] + Table[Random[NormalDistribution[0, .5]], {i, m}];
y[[m]] = 1;
pod = Table[{x[[i]], y[[i]]}, {i, m}]
slpod = ListPlot[pod, PlotStyle -> {PointSize[.03], Opacity[.9]}];
s1p = Plot[f[t], {t, 0, x[[m]]}];
(* Najbolji LAD pravac *)
min = NMinimize[Total[Abs[y - a x - b]], {a, b}];
{a1, b1} = {a /. min[[2]], b /. min[[2]]}
s1p1 = 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]]}
s1p2 = Plot[a1 t + b1, {t, 0, x[[m]]}, PlotStyle -> {Green},
    PlotLegends -> LineLegend[{Blue, Red, Green},
        {"Original", "LAD", "LS"}]];
s12 = Show[s1p1, s1p2, 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 [19] 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. (Najbolji TLS-pravac)

Za dani skup $\mathcal{A} = \{T_i = (x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2 : i = 1, \dots, m\}$ s odgovarajućim težinama $w_1, \dots, w_m > 0$ treba odrediti pravac p u ravnini tako da suma kvadrata euklidskih ℓ_2 udaljenosti točaka T_i do pravca p bude minimalna.

Općenito, pravac p je oblika $ax + by + c = 0$, $a^2 + b^2 \neq 0$, a euklidska udaljenost točke $T_i = (x_i, y_i)$ do pravca p zadana je s (vidi primjerice [11, 12])

$$d_2(T_i, p) = \frac{|ax_i + by_i + c|}{\sqrt{a^2 + b^2}}.$$

Pravac za koji je suma kvadrata euklidskih udaljenosti minimalna u literaturi se naziva „the best Total Least Squares Line” (TLS), a dobiva se kao rješenje sljedećeg nelinearnog problema globalne optimizacije:

$$\operatorname{argmin}_p \sum_{i=1}^m w_i d_{LS}(T_i, p) = \operatorname{argmin}_{a, b, c \in \mathbb{R}} \sum_{i=1}^m w_i \frac{(ax_i + by_i + c)^2}{a^2 + b^2}.$$

Opći pravac u ravnini možemo zapisati s

$$ax + by + c = 0, \quad a^2 + b^2 = 1,$$

pa se prethodni problem transformira na sljedeći problem uvjetnog ekstrema:

$$\underset{a^2+b^2=1}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^m w_i (ax_i + by_i + c)^2.$$

Osim toga, lako je pokazati da najbolji TLS-pravac mora proći centroidom podataka $c^* = (x_p, y_p)$ (vidi Zadatak 9), pa prethodni problem možemo još pojednostaviti

$$\underset{a^2+b^2=1}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^m w_i (a(x_i - x_p) + b(y_i - y_p))^2.$$

Ovdje se radi o problemu globalne optimizacije nelinearne, ali diferencijalne funkcije dviju varijabli s ograničenjima. U radu [16] ovaj problem rješava se traženjem svojstvenog vektora koji odgovara manjoj svojstvenoj vrijednosti odgovarajuće kovarijacijske matrice (vidi također [22]).

Zadatak 9. *Pokažite da najbolji TLS pravac prolazi centroidom skupa podataka.*

Primjer 9. (Najbolji OD-pravac)

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

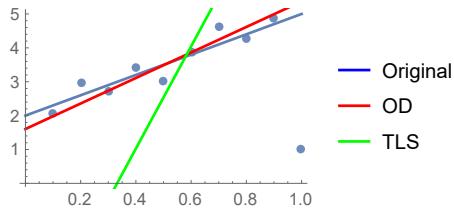
Pravac p je oblika $ax + by + c = 0$, $a^2 + b^2 = 1$. U literaturi se takav pravac naziva „the best Orthogonal Distance line” (OD), a rješenje je sljedećeg nelinearnog problema globalne optimizacije:

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

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

Primjer 10. 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 + 1 - y]/Sqrt[k^2 + 1]], {k, 1}];
{a1, b1} = {k /. min[[2]], 1 /. min[[2]]}
slp1 = Plot[a1 t + b1, {t, 0, x[[m]]}, PlotStyle -> {Red}];
(* Najbolji TLS pravac *)
min = NMinimize[Total[Abs[k x + 1 - y]^2/(k^2 + 1)], {k, 1}];
{a1, b1} = {k /. min[[2]], 1 /. min[[2]]}
slp2 = Plot[a1 t + b1, {t, 0, x[[m]]}, PlotStyle -> {Green},
PlotLegends -> LineLegend[{Blue, Red, Green},
 {"Original", "OD", "TLS"}]];
Print[Show[slp1, slp2, ImageSize -> Small]]
```



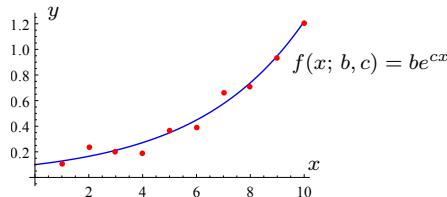
Slika 7: Rekonstrukcija pravca kao najboljeg OD i najboljeg TLS pravca

Rezultati su vidljivi na Slici 7. Primijetite da najbolji OD pravac ignorira outlier i vrlo dobro rekonstruira originalni pravac, dok suprotno tome, outlier jako utječe na najbolji TLS pravac.

Zadatak 10. Primijenite metodu sukcesivnih iteracija iz Primjera ?? za traženje najboljeg OD-pravca u eksplicitnom obliku.

Primjer 11. (Nelinearni problem najmanjih kvadrata)

Za dani skup $\mathcal{A} = \{a^i = (x_i, y_i) : i = 1, \dots, m\}$ treba odrediti optimalne parametre b^* i c^* eksponencijalne model-funkcije $f(t; b, c) = b e^{ct}$, tako da suma kvadrata izmjerjenih od teoretskih vrijednosti bude minimalna (vidi Sliku 8).



Slika 8: Podaci i najbolja LS-eksponencijalna model-funkcija

LS-optimalni parametri b^* i c^* eksponencijalne model-funkcije $f(t; b, c) = b e^{ct}$ mogu ali i ne moraju postojati (vidi [8]). Ako postoje, odredit ćemo ih tako da potražimo globalni minimizator funkcije

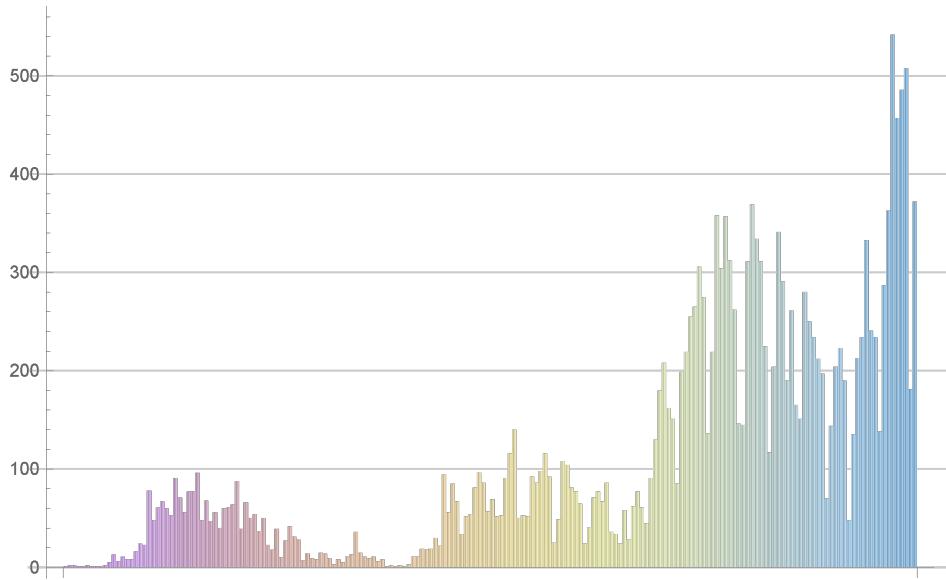
$$F(b, c) = \sum_{i=1}^m (b e^{cx_i} - y_i)^2,$$

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

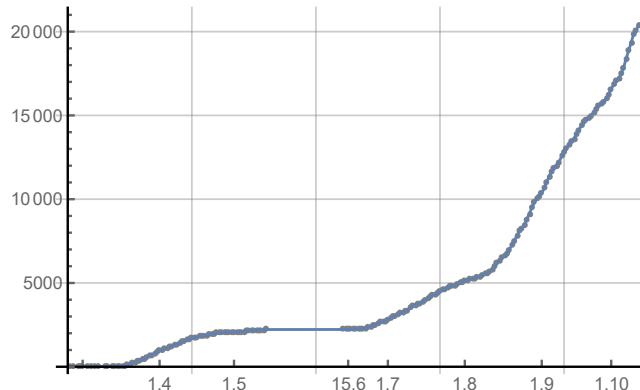
Kao što smo to uradili u slučaju traženja najboljeg pravca, i u slučaju traženja „najbolje eksponencijalne funkcije” možemo primijeniti neki drugi pristup.

Brojne druge primjere optimizacijskih problema iz praktičnih istraživanja možemo naći kod [1, 2, 13, 18].

2.3 Procjena karakterističnih točaka broja zaraženih od Covid-19



Slika 9: Dnevni podaci o broju zaraženih od 25-2-2020 do 12-10-2020



Slika 10: 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 [10]

$$f(t; b, c, d) = b e^{-c(t-d)^2}, \quad b, c, d > 0, \quad (5)$$

čije su važne točke

- $I = (t_I, f(t_I))$, $t_I = \frac{-\sqrt{2}+2d\sqrt{c}}{2\sqrt{c}}$ – 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 [9] i Gompertzove model-funkcije [7]

Logistička model-funkcija

$$f(t; a, b, c) = \frac{a}{1 + b e^{-ct}}, \quad a, b, c > 0, \quad (6)$$

rješenje je diferencijalne jednadžbe (matematičkog modela)

$$y' = c y (a - y), \quad a, c > 0. \quad (7)$$

Točka infleksije i faze rasta definirane su prema [20].

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

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

Gompertzova model-funkcija

$$f(t; a, b, c) = e^{a - b e^{-ct}}, \quad a, b, c > 0, \quad (8)$$

rješenje je diferencijalne jednadžbe (matematičkog modela)

$$y' = c y \ln \left(\frac{e^a}{y} \right), \quad c > 0, a \in \mathbb{R}. \quad (9)$$

Točka infleksije i faze rasta definirane su prema [20].

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

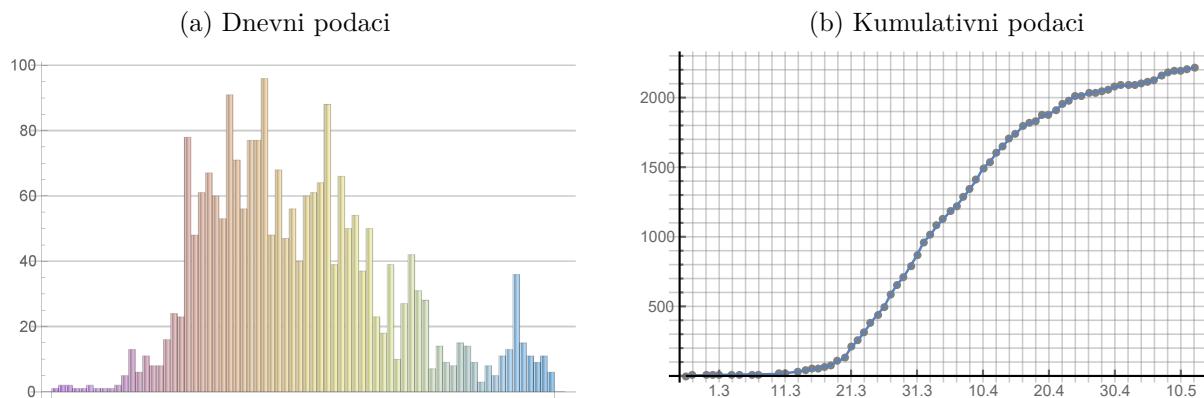
Parametri model-funkcija, točka infleksije i gornja asymptota određuju se na osnovi podataka (t_i, y_i) , $i = 1, \dots, r$, gdje su t_i trenuci (dani), a y_i broj zaraženih na dan t_i (ili kumulativni broj zaraženih do tog dana). Parametri se određuju rješavanjem nelinearnog problema najmanjih kvadrata [21]

$$\underset{a,b,c \in \mathbb{R}_+}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^r (y_i - f(t_i; a, b, c))^2. \quad (10)$$

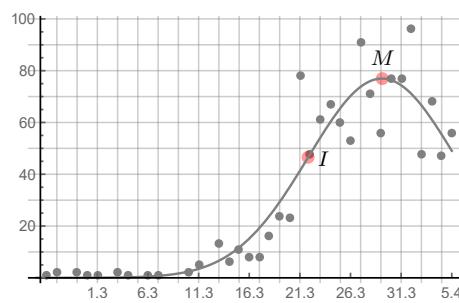
Ovaj problem možemo riješiti primjenom *Mathematica*-modula `NonlinearModelFit` [23].

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

Dnevni podaci – Gaussova model-funkcija



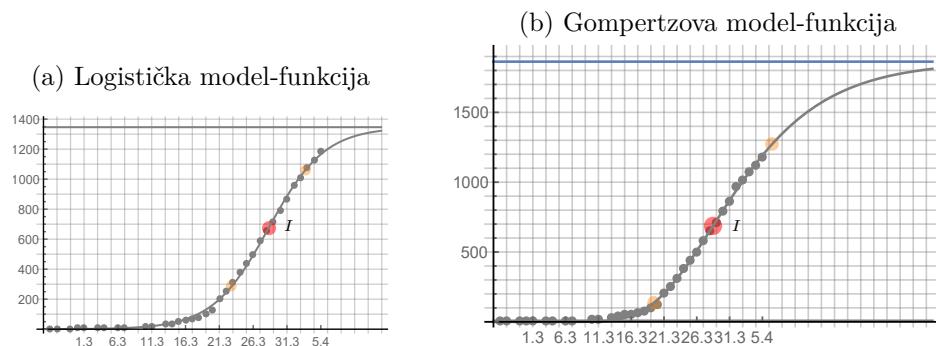
Slika 11: Podaci o broju zaraženih (1. dan odgovara 25-2-2020)



Slika 12: Gaussova model-funkcija (1. dan odgovara 25-2-2020)

Karakteristične točke: $I = (27, 47) \approx (22-3-2020, 47)$, $M = (35, 77) \approx (30-3-2020, 77)$

Kumulativni podaci – Logistička i Gompertzova model-funkcija



Slika 13: Modeli-funkcija sa zasićenjem (1. dan odgovara 25-2-2020)

Logistička: $I = (34, 674) \approx (29-3-2020, 674)$, $A = 1347$

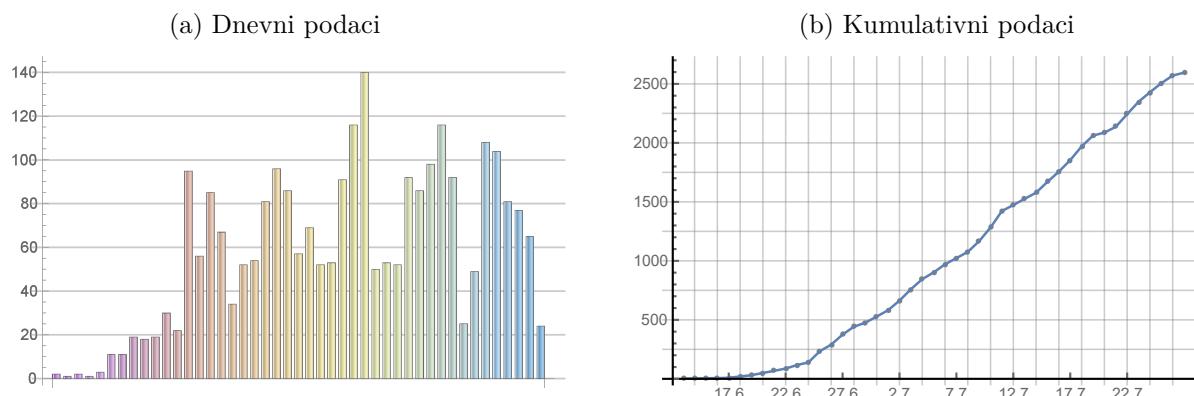
Gompertzova: $I = (34, 686) \approx (29-3-2020, 686)$, $A = 1864$

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

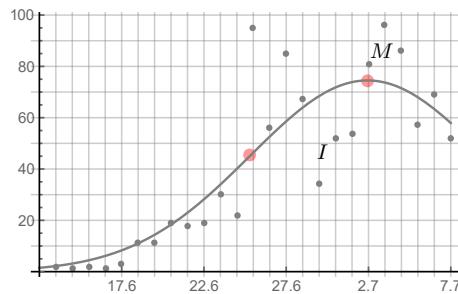
Tablica 1: Faze rasta (kumulativnog) broja zaraženih osoba (granice su crvene točke)

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

Dnevni podaci – Gaussova model-funkcija

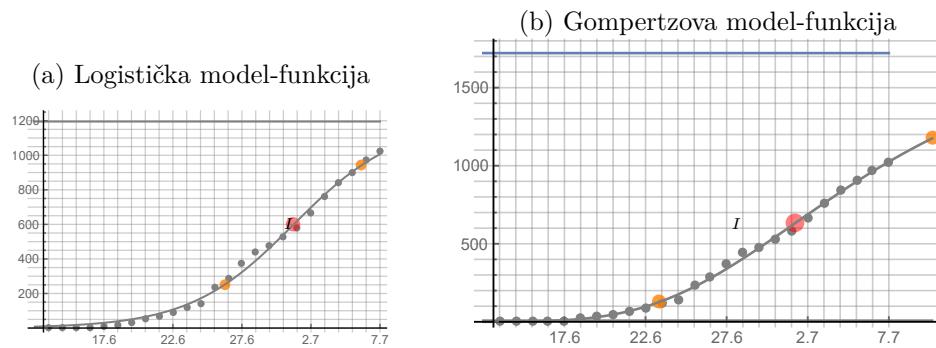


Slika 14: Podaci o broju zaraženih (1. dan odgovara 13-6-2020)



Slika 15: 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



Slika 16: Modeli-funkcija sa zasićenjem (1. dan odgovara 13-6-2020)

Logistička: $I=(1-7-2020, 598)$, $A = 1196$

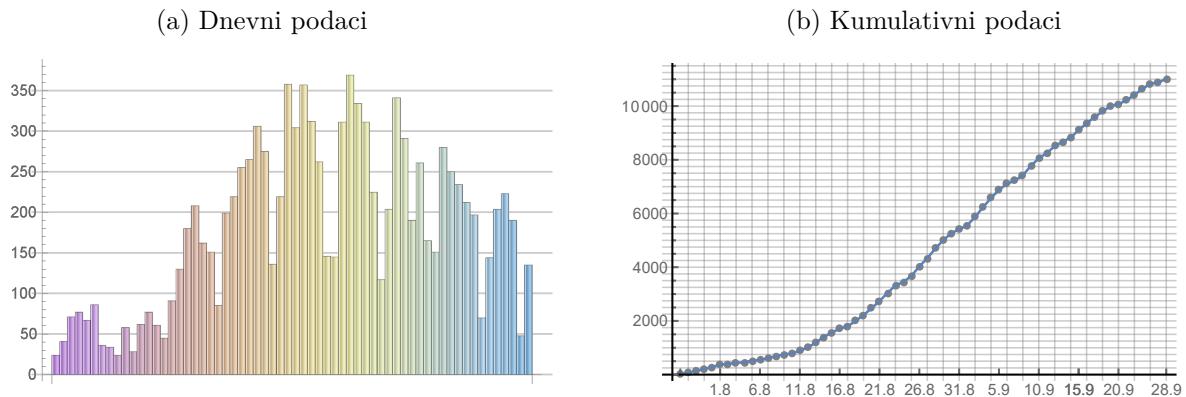
Gompertzova: $I=(2-7-2020, 634)$, $A = 1722$

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 -

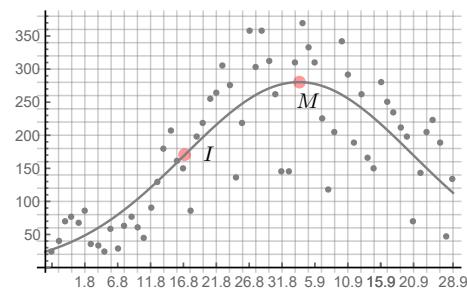
Tablica 2: Faze rasta (kumulativnog) broja zaraženih osoba (granice su crvene točke)

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

Dnevni podaci – Gaussova model-funkcija

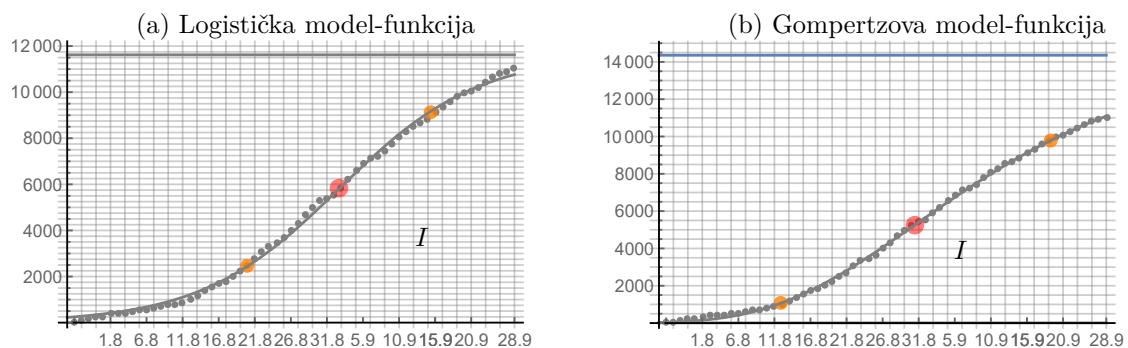


Slika 17: Podaci o broju zaraženih (1. dan odgovara 27-7-2020)



Slika 18: Gaussova 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



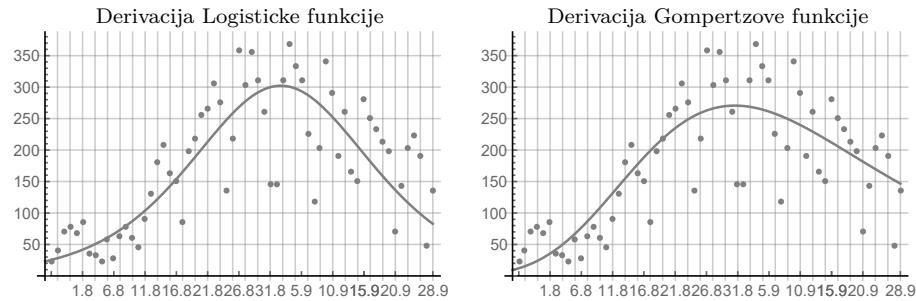
Slika 19: Modeli-funkcija sa zasićenjem (1. dan odgovara 27-7-2020)

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
Intenzivni rast	21.8	-	15.9	13.8
Usporavanje	15.9	-	20.9	20.9

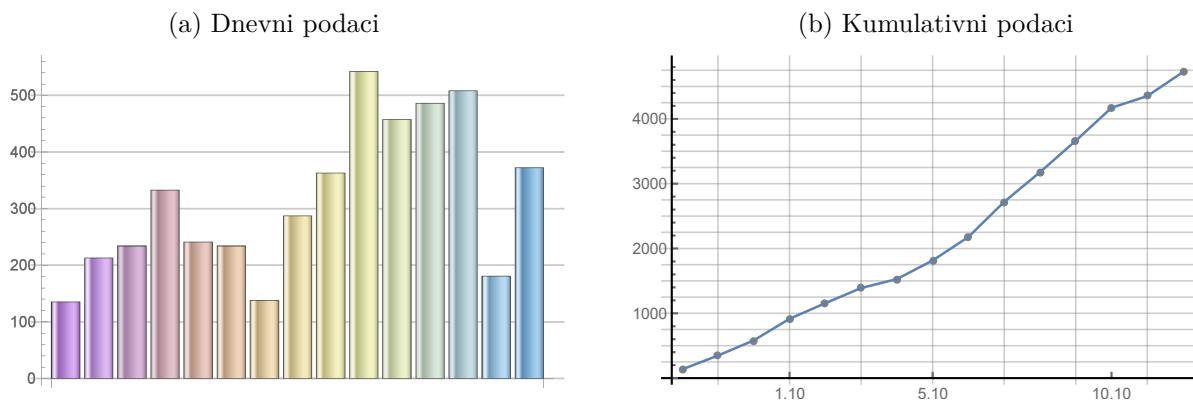
Tablica 3: Faze rasta (kumulativnog) broja zaraženih osoba (granice su crvene točke)



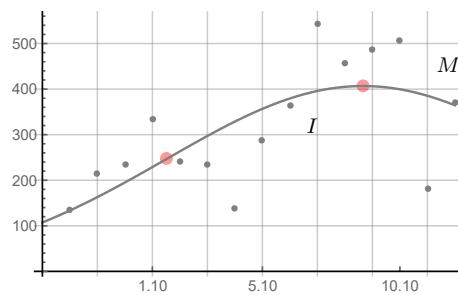
Slika 20: Derivacije model-funkcija s dnevnim podacima

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

Dnevni podaci – Gaussova model-funkcija

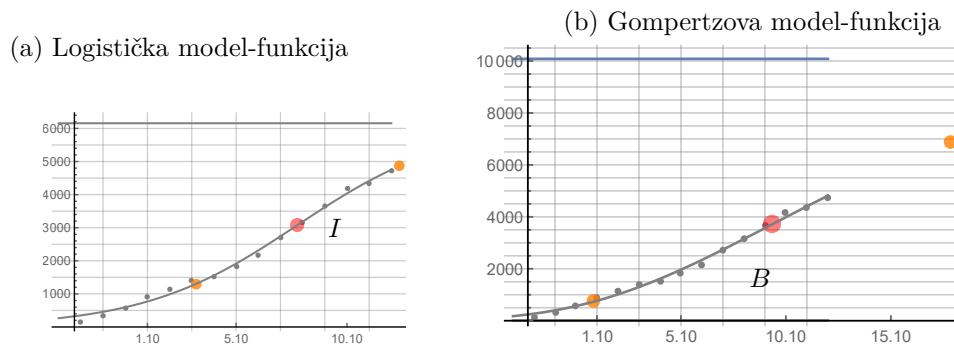


Slika 21: Podaci o broju zaraženih (1. dan odgovara 28-9-2020)



Slika 22: Gausova model-funkcija (1. dan odgovara 28-9-2020)
 Karakteristične točke: **I=(2-10-2020,247)**, **M=(9-10-2020,407)**

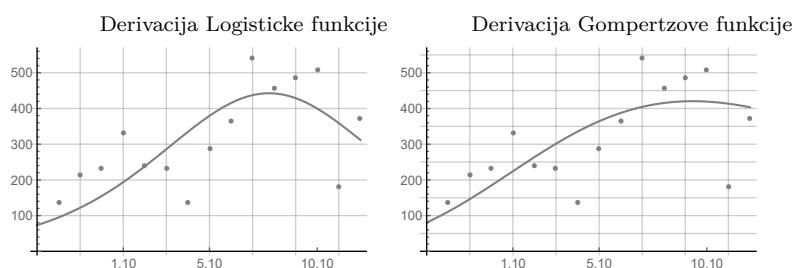
Kumulativni podaci – Logistička i Gompertzova model-funkcija



Slika 23: 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	28.9
Intenzivni rast	-	-
Usporavanje	4.10	1.10
	13.10	13.10
	-	-

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



Slika 24: Derivacije model-funkcija s dnevnim podacima

2.4 Fermat – Torricelli - Weberov problem

Primjer 12. (*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 $c^* = (c_1^*, \dots, c_n^*) \in \mathbb{R}^n$, za koju je težinska suma kvadrata euklidskih udaljenosti do točaka skupa \mathcal{A} minimalna.

Tražena točka c^* točka je u kojoj se postiže globalni minimum funkcije

$$F_{LS}(x) = \sum_{i=1}^m w_i \|x - a^i\|_2^2 = \sum_{i=1}^m w_i \sum_{s=1}^n (x_s - a_s^i)^2, \quad (11)$$

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

Zadatak 11. Pokažite da je $c^* = \frac{1}{W} \sum_{i=1}^m w_i a^i$, $W = \sum_{i=1}^m w_i$, jedinstvena točka globalnog minimuma funkcije $F_{LS} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, $F_{LS}(x) = \sum_{i=1}^m w_i \|x - a^i\|_2^2$. Izvedite dokaz najprije za $n = 1$, a nakon toga općenito.

Zadatak 12. 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

$$(a) \quad w_1 = \dots = w_5 = 1,$$

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

Primjer 13. (*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 $c^* = (c_1^*, \dots, c_n^*) \in \mathbb{R}^n$, za koju je težinska suma ℓ_1 -udaljenosti do točaka skupa \mathcal{A} minimalna.

Tražena točka c^* točka je u kojoj se postiže globalni minimum funkcije

$$F_1(x) = \sum_{i=1}^m w_i \|x - a^i\|_1 = \sum_{i=1}^m w_i \sum_{s=1}^n |c_s - a_s^i|, \quad (12)$$

odnosno točka $c^* \in \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^m w_i \|x - a^i\|_1$ 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 $c^* = \operatorname{med}(w_i, a^i)$ skupa \mathcal{A} (vidi [5, 19]). Što u ovom slučaju možete reći o jedinstvenosti globalnog minimuma?

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

Zadatak 13. Neka je $\mathcal{A} = \{y_1, \dots, y_m\} \subset \mathbb{R}$ skup podataka. Pokažite da je $c^* \in \operatorname{med}_{y_i \in \mathcal{A}} y_i$ točka globalnog minima funkcije $F_1: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+$, $F_1(x) = \sum_{i=1}^m |x - y_i|$.

Zadatak 14. Ako su $\varphi_i \in C(\mathbb{R})$, $i = 1, \dots, n$, konveksne funkcije za koje je

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

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

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

konveksna funkcija za koju vrijedi

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

Primijenite navedenu tvrdnju u svrhu određivanja medijana skupa točaka $\mathcal{A} = \{a^i \in \mathbb{R}^n : i = 1, \dots, m\}$.

Vrijedi li obrat navedene tvrdnje? Primjerice, ako je $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 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 15. Odredite medijan i težinski medijan skupa točaka s težinama iz Zadatka 12.

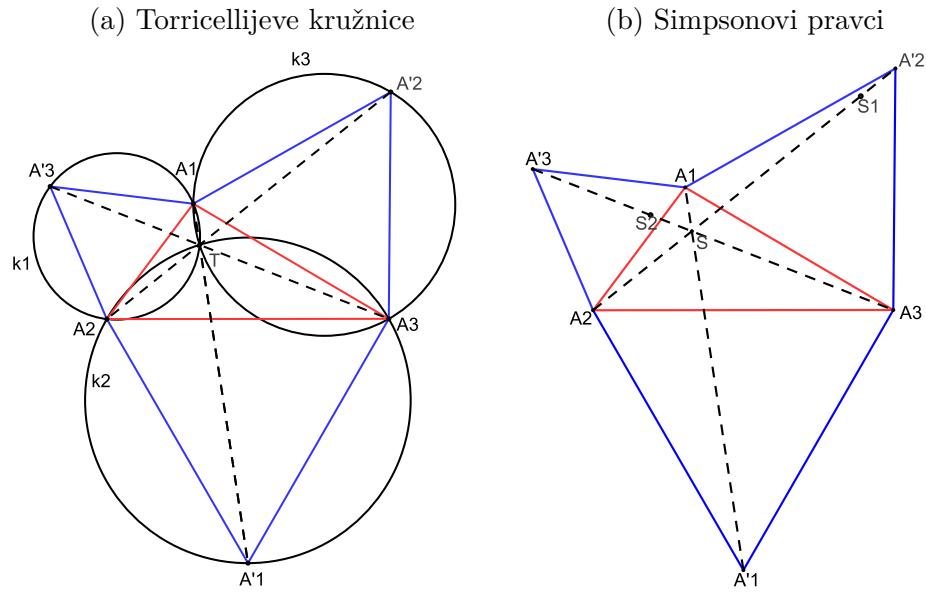
Primjer 14. (Geometrijski medijan skupa $\mathcal{A} \subset \mathbb{R}^n$)

Za dani 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 $c^* = (c_1^*, \dots, c_n^*) \in \mathbb{R}^n$, za koju je težinska suma euklidskih udaljenosti do točaka skupa \mathcal{A} minimalna.

Tražena točka c^* točka je u kojoj se postiže globalni minimum funkcije

$$F_2(x) = \sum_{i=1}^m w_i d_2(x, a^i) = \sum_{i=1}^m w_i \|x - a^i\|_2 = \sum_{i=1}^m w_i \sqrt{\sum_{s=1}^n (x_s - a_s^i)^2}, \quad (13)$$

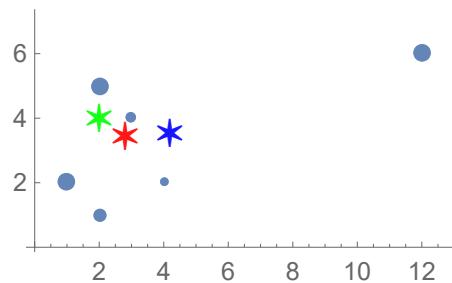
odnosno točka $c^* \in \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^m w_i \|x - a^i\|_2$ je globalni minimizator funkcije F_2 .



Slika 25: Fermat – Torricelli – Weberov problem: geometrijski medijan

Točka c^* zove se **težinski geometrijski medijan** skupa \mathcal{A} i općenito se ne može eksplisitno izračunati. U literaturi ovaj problem može se naći pod nazivom „Fermat–Torricelli–Weberov problem” (vidi primjerice [3]). Najpoznatiji algoritam za traženje geometrijskog medijana skupa \mathcal{A} poznati je *Weiszfeldov algoritam* iz 1936. godine [6]. Specijalno, geometrijski medijan triju točaka u ravnini može se geometrijski dobiti [14] na presjeku tzv. Torricellijevih kružnica (vidi Sliku 25a) ili na presjeku tzv. Simpsonovih pravaca (vidi Sliku 25b).

Primjer 15. *Promatrajmo skup podataka $\mathcal{A} = \{a^i = (x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2 : i = 1, \dots, m\}$ s težinama $w_1, \dots, w_m > 0$. Podaci su prikazani plavim kružićima na Slici 26, pri čemu je veličina kružića koji prikazuje podatak a^i određena njegovom težinom w_i . Treba odrediti reprezentant skupa \mathcal{A} kao težinski centroid (11), težinski medijan (12) i težinski geometrijski medijan (13). Među podacima uočava se i jedan jako stršeći podatak (outlier) koji je smješten relativno daleko od ostalih podataka.*

Slika 26: 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 26: 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 26 upravo težinski geometrijski medijan (crvena zvjezdica).

Zadatak 16. Neka je $\mathcal{A} = \{a^i \in \mathbb{R}^n : i = 1, \dots, m\}$ skup podataka. Problem traženja geometrijskog medijana skupa \mathcal{A} svodi se na rješavanje sljedećeg problema globalne optimizacije

$$\underset{x \in \mathbb{R}^n}{\operatorname{argmin}} F_2(x), \quad F_2(x) = \sum_{i=1}^m \|x - a^i\|_2. \quad (14)$$

(a) Na što se svodi rješavanje problema (14) u slučaju $n = 1$?

(b) Napišite funkciju F_2 iz (14) za $n = 2$. Za taj slučaj definirajte iterativni postupak (prijmom Metode jednostavnih iteracija ili Newtonove metode - vidi t.??, str.??) koji će konvergirati prema geometrijskom medijanu skupa \mathcal{A} .

Zadatak 17. Za skup podataka $\mathcal{A} = \{a^i \in \mathbb{R} : i = 1, \dots, m\}$ 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 $p \rightarrow \infty$, G_p u limesu prelazi u funkciju

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

Pokažite da se minimum funkcije G_∞ postiže u točki $x^* = \frac{1}{2}(\min_{i=1, \dots, m} a^i + \max_{i=1, \dots, m} a^i)$.

Zadatak 18. Za skup podataka $\mathcal{A} = \{a^i \in \mathbb{R} : i = 1, \dots, m\}$ 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 $p \rightarrow 0$, H_p u limesu prelazi u funkciju

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

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

Zadatak 19. 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 jednak je vjerojatan.

- 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?
- Gdje treba čekati lift ako želimo da udaljenost koju ćemo prijeći u najgorem slučaju bude minimalna?
- Kako bismo uočili dolazak lifta, za pretpostaviti je da moramo biti 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 16. (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 $1 \leq k \leq m$ nepraznih disjunktnih podskupova (klastera) π_1, \dots, π_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.

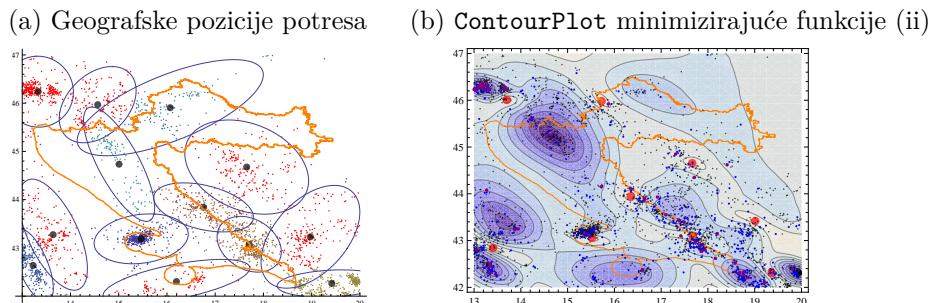
Internu kompaktnost i međusobnu dobru razdvojenost klastera možemo definirati kao jedan od sljedeća dva problema globalne optimizacije:

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

gdje su $c(\pi_1), \dots, c(\pi_k)$ centri klastera π_1, \dots, π_k zadani s

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

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



Slika 27: Seizmološka aktivnost na širem području Republike Hrvatske od 1900. godine – vidi: <http://earthquake.usgs.gov/earthquakes/eqarchives/epic/>.

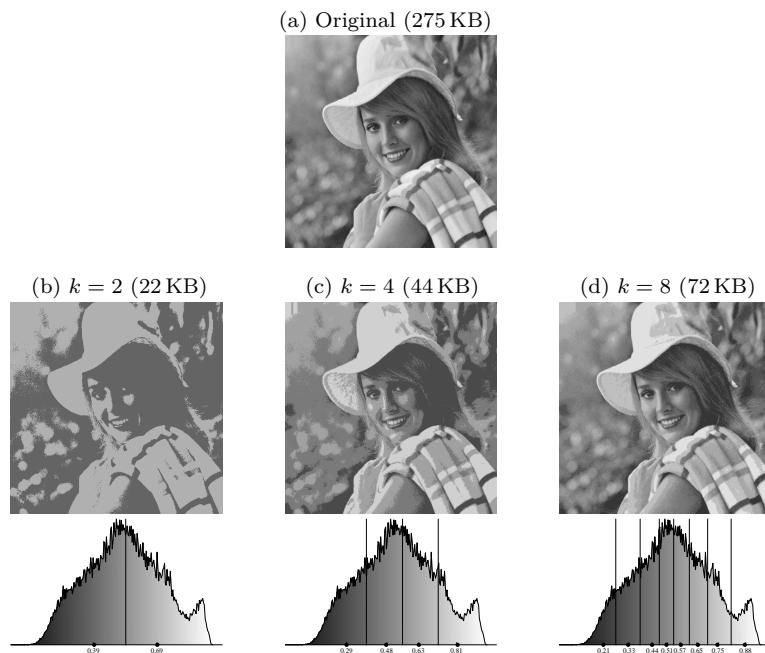
Na Slici 27a prikazane su točke u širem području Republike Hrvatske [15] u kojima se od 1900. godine dogodio potres magnitude ≥ 3 , a na Slici 27b prikazan je ContourPlot odgovarajuće minimizirajuće funkcije za spomenute podatke.

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

Zadatak 20. Pokažite da je funkcija $g: [0, 11] \times [0, 11] \rightarrow \mathbb{R}$, $g(y_1, y_2) = -\frac{1}{5}(y_1^2 + y_2^2) + 2y_1y_2 \cos y_1 \cos y_2$ [4] simetrična. Primjenom programskog sustava Mathematica nacrtajte njezin graf i ContourPlot. Ispitajte lokalne i globalne ekstreme ove funkcije.

Primjer 17. (Segmentacija crno-bijele slike)

Neka je $\mathcal{A} = \{a^i \in [0, 1] : i = 1, \dots, 262\,144\}$ skup (konačni niz) realnih brojeva koji predstavljaju tonove (gray levels) točaka poznate crno-bijele slike „Elaine“ veličine 512×512 (Slika 28)a.



Slika 28: 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 pridružiti 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 28b-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] Z. DREZNER, H. W. HAMACHER, *Facility Location: Applications and Theory*, Springer, 2004.
- [4] 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.
- [5] C. GURWITZ, *Weighted median algorithms for l_1 approximation*, BIT, **30**(1990) 301–310.
- [6] C. IYIGUN, A. BEN-ISRAEL, *A generalized Weiszfeld method for the multi-facility location problem*, Operations Research Letters, **38**(2010) 207–214.
- [7] D. JUKIĆ, G. KRALIK, R. SCITOVSKI, *Least squares fitting gompertz curve*, J. Comput. Appl. Math., **169**(2004) 359–375.
- [8] D. JUKIĆ, R. SCITOVSKI, *Existence of optimal solution for exponential model by least squares*, J. Comput. Appl. Math., **78**(1997) 317–328.
- [9] D. JUKIĆ, R. SCITOVSKI, *Solution of the least squares problem for logistic function*, J. Comput. Appl. Math., **156**(2003) 159–177.
- [10] D. JUKIĆ, R. SCITOVSKI, *Least squares fitting Gaussian type curve*, Appl. Math. Comput., **167**(2005) 286–298.
- [11] D. JUKIĆ, R. SCITOVSKI, *Matematika I*, Odjel za matematiku, Sveučilište u Osijeku, 2017, <http://www.mathos.unios.hr/index.php/odjel/nasa-izdanja?getBook=707>.
- [12] D. JUKIĆ, R. SCITOVSKI, Š. UNGAR, *The best total least squares line in r^3* , In: I. AGANOVIĆ, T. HUNJAK, R. SCITOVSKI, editors, *Proceedings of the 7th International Conference on Operational Research KOI98*, volume 13, 1993, 311–316.
- [13] L. LIBERTI, *Introduction to Global Optimization*, LIX, École Polytechnique, 2008.
- [14] D. J. MAŠIREVIĆ, S. MIODRAGOVIĆ, *Geometric median in the plane*, Elemente der Mathematik, **70**(2015) 21–32.
- [15] 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.
- [16] Y. NIEVERGELT, *Total least squares: state-of-the-art regression in numerical analysis*, SIAM Review, **36**(1994) 258–264.

- [17] J. M. ORTEGA, W. C. RHEINBOLDT, *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*, SIAM, Philadelphia, 2000.
- [18] K. V. PRICE, R. M. STORN, J. A. LAMPINEN, *Differential Evolution: A Practical Approach to Global Optimization*, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 2005.
- [19] K. SABO, R. SCITOVSKI, *The best least absolute deviations line – properties and two efficient methods*, ANZIAM Journal, **50**(2008) 185–198.
- [20] R. SCITOVSKI, *Problemi najmanjih kvadrata. Financijska matematika*, Ekonomski fakultet, Elektrotehnički fakultet, Sveučilište u Osijeku, 1993.
- [21] 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>.
- [22] N. TRUHAR, *Numerička linearna algebra*, Odjel za matematiku, Sveučilište u Osijeku, 2010.
- [23] I. WOLFRAM RESEARCH, *Mathematica*, Wolfram Research, Inc., Champaign, Illinois, 2016, version 11.0 edition.