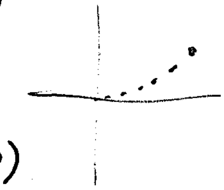
$\{x_K\}_{K\in\mathbb{N}} \subseteq \mathbb{R}^n$ $x_1, x_2, x_3, \dots\dots$ successione   <u>Es ①</u> $x_k = \left(1/k, 1/k^2\right)$

$\bar{x}$ limite di $\{x_K\}$ $\lim_{n\to+\infty} x_n = \bar{x}$, $x_n \xrightarrow[(n\to+\infty)]{} \bar{x}$ se

$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists \bar{K}$ t.c. $\|x_n - \bar{x}\|_2 \leq \varepsilon$ per ogni $K \geq \bar{K}$

$\downarrow$

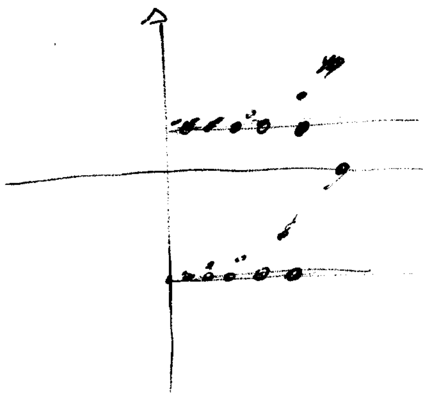
$\bar{x} = (0,0)$



In tal caso $\{x_K\}$ si dice (successione) <u>convergente</u>

- Il limite, se esiste, è unico

<u>Es 1</u> $x_k = \left((-1)^k + 1/k, [redacted]\right)$



Il limite non esiste!

$\downarrow$

sottosuccessione

$x_1, x_3, x_5, x_7 \dots\dots \to (0,-1)$

$x_2, x_4, x_6, \dots\dots \to (0,1)$

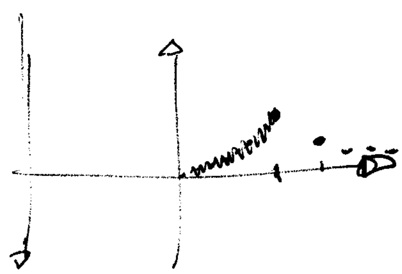
$\{x_{K_j}\}$ sottosuccessione di $\{x_K\}$

$(K_j = 2j-1, \quad K_j = 2j)$

<u>Altro es</u>: $K_j = 3j$

$x_3, x_6, x_9, \dots$ non converge

<u>Es 2</u> $x_k = \left(K[redacted], 1/k\right)$



Non ammette sottosuccessioni convergenti.

<u>Def</u> $\bar{x}$ si dice <u>punto di accumulazione</u> di $\{x_K\}$ se $\exists$ sottosuccessione $\{x_{K_j}\}_j$ t.c. $x_{K_j} \xrightarrow[j]{} \bar{x}$

(limit or cluster point)

<u>Teo</u> (Bolzano-Weierstrass)

$\{x_K\}_K \quad \exists M > 0$ t.c. $\|x_K\|_2 \leq M \quad \forall K \implies \{x_K\}$ ammette una sottosuccessione convergente

(Es 1 $\to M = \sqrt{2}$)

(Eq: $\forall \varepsilon > 0 \quad \forall K \in \mathbb{N} \quad \exists \bar{K} \geq K$ t.c. $\|x^{\bar{K}} - \bar{x}\| \leq \varepsilon$)

<u>INCIPIT</u> $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, \quad D \subseteq \mathbb{R}^n$

$\min \{ f(x) : x \in D \}$

Trovare $x^* \in \mathbb{R}^n$ tale che

- $x^* \in D$ (ammissibile)
- $f(x^*) \leq f(x) \ \forall x \in D$ (punto di minimo)

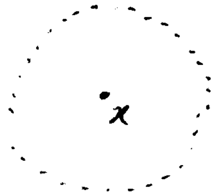
$\mathbb{R}^n$ con $\|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2\right)^{1/2}$ norma euclidea

$\downarrow$

$d(x,y) = \|x-y\|_2$ distanza

$x \in \mathbb{R}^n, \ \varepsilon > 0$

$$B(x,\varepsilon) = \{ y \in \mathbb{R}^n \mid \|y - x\|_2 < \varepsilon \}$$



Def $A \subseteq \mathbb{R}^n$ si dice APERTO se $\forall x \in A \ \exists \varepsilon > 0$ t.c. $B(x,\varepsilon) \subseteq A$

Def $x \in A$ è un punto interno di A se $\exists \varepsilon > 0$ t.c. $B(x,\varepsilon) \subseteq A$

A aperto $\equiv$ $A = \underbrace{\{\text{punti interni di } A\}}_{\text{parte interna} \ \to \ \text{int } A}$

Esempi: $B(x,\varepsilon)$, $]-1,1[$, $\mathbb{R}^n$, $\emptyset$

Proprietà

(i) A_α aperto $\Rightarrow \bigcup_\alpha A_\alpha$ aperto

(ii) A_i aperto $\Rightarrow \bigcap_{i=1}^{k} A_i$ aperto

Def $A \subseteq \mathbb{R}^n$ si dice CHIUSO se $\mathbb{R}^n \setminus A$ è aperto

Def $x \in A$ è un punto di chiusura di A se $\forall \varepsilon > 0 \quad B(x,\varepsilon) \cap A \neq \emptyset$

A chiuso $\equiv$ $A = \underbrace{\{\text{punti di chiusura di } A\}}_{\text{chiusura di } A}$

$\bar{A}$, $\mathrm{cl}(A)$

Proprietà

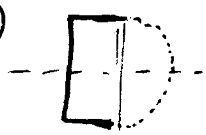
(i) A_i chiuso $\Rightarrow \bigcup_{i=1}^{k} A_i$ chiuso

(ii) A_α chiuso $\Rightarrow \bigcap_\alpha A_\alpha$ chiuso

Prop $A \subseteq \mathbb{R}^n$ è chiuso $\Leftrightarrow$ $\forall \{x_k\} \subseteq A$ t.c. $x_k \to \bar{x}$ risulta $\bar{x} \in A$

Esempi: $[-1,1]$, $\mathbb{R}^n$, $\emptyset$, $\{ y \in \mathbb{R}^n \mid \|y - x\|_2 \le \varepsilon \} = \overline{B(x,\varepsilon)}$

Esistono insiemi che non sono né aperti né chiusi:

(*) 

$$([-1,0] \times [-1,1]) \cup B(\underline{0}, 1) = A$$

$(-1-\varepsilon, 0) \in B((-1,0),\varepsilon) \ \forall \varepsilon \to A$ non è aperto

$x_k = (1 - 1/k, 0) \in A \qquad x_k \to (1,0) \notin A \to A$ non è chiuso

(con $n=1$ $[-1,1[$)

Def $A \subseteq \mathbb{R}^n$ si dice LIMITATO se

$\exists M>0$ t.c. $\|x\|_2 \le M \quad \forall x \in A$.
$(A \subseteq \overline{B(0,M)})$

Def $A \subseteq \mathbb{R}^n$ si dice COMPATTO se
A è chiuso e limitato

L'esempio ⊛ fornisce
A limitato ma non compatto.

$\overline{B(x,\varepsilon)}$ è compatto.

Teo (Bolzano-Weierstrass) Sia A compatto. Ogni successione contenuta in A ammette una sottosuccessione convergente: $\forall \{x_k\} \subseteq A \quad \exists \{x_{k_j}\}, \bar{x} \in A$ t.c. $x_{k_j} \xrightarrow[j]{} \bar{x}$.

(vedi Es 1 e Es 2)

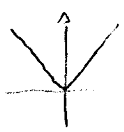
$A = [0,1] \times [-1,1]$

$f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ (estendere dal caso $n=1$ i concetti di: – continuità – derivabilità e i relativi risultati)

Def f si dice CONTINUA in $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ se
$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists \delta > 0$ t.c. $\|x - \bar{x}\|_2 \le \delta \Rightarrow |f(x) - f(\bar{x})| \le \varepsilon$

(f continua su A $\equiv$ continua in ogni $\bar{x} \in A$).

Prop f è continua in $\bar{x} \iff \forall \{x_k\}$ t.c. $x_k \to \bar{x}$ risulta $\lim_{k \to +\infty} f(x_k) = f(\bar{x})$.

Esempi: $f(x) = \|x\|_2$ ($n=1$ ) $\qquad f(x_1,x_2) = \sin(\pi x_1 x_2)$

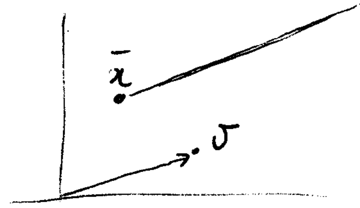
Teo (Weierstrass) Sia $A \subseteq \mathbb{R}^n$ compatto e $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ continua su A.
Allora f ammette massimo e minimo su A

dim $\ell := \inf\{f(x) : x \in A\} \in [-\infty, +\infty)$. Sia $f(x_k) \to \ell$ con $x_k \in A$
A compatto $\Rightarrow \exists \bar{x} \in A \ \exists x_{k_j} \to \bar{x}$; f continua $\Rightarrow f(x_{k_j}) \to f(\bar{x}) \Rightarrow f(\bar{x}) = \ell$
$\Rightarrow \ell \neq -\infty \Rightarrow f(\bar{x}) = \min\{f(x) : x \in A\}$

Esempi: $n=1$ $f(x) = e^{-x}$, $A = \mathbb{R}_+$  ; $f(x) = \begin{cases} \log x & x>0 \\ 0 & x \le 0 \end{cases}$ $A = [0,1)$ 

Derivate direzionali

$v \in \mathbb{R}^n \quad \|v\|_2 = 1 \qquad \{\bar{x} + tv \mid t \geq 0\}$



$n=1 \quad f:\mathbb{R} \to \mathbb{R} \quad \to \quad \lim_{t \to 0} \underbrace{[f(\bar{x}+t) - f(\bar{x})]/t}_{\text{rapporto incrementale}}$

$f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n : \quad [f(\bar{x}+tv) - f(\bar{x})]/t$

$\left(\begin{array}{l} \text{Eq: } g(t) = [f(\bar{x}+tv) - f(\bar{x})]/t \\ \text{è derivabile in } t=0 \end{array} \right)$

$\Updownarrow$

f si dice DERIVABILE in $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ nella direzione v se $\exists \lim_{t \to 0^+} [f(\bar{x}+tv) - f(\bar{x})]/t$

$\frac{\partial f}{\partial v}(\bar{x}) := \lim_{t \to 0^+} [f(\bar{x}+tv) - f(\bar{x})]/t$ si chiama DERIVATA $\underbrace{\text{DIREZIONALE}}_{\text{nella direzione } v}$

"one-sided directional derivative"

$t \to 0 \rightsquigarrow t \to 0^+$

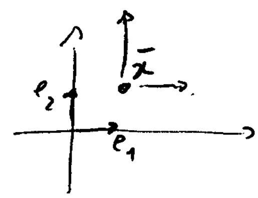
$f'(\bar{x}; v)$

Esempio: $f(x) = \|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^{1/2}$

$\bar{x} = 0 \quad [f(\bar{x}+tv) - f(\bar{x})]/t = \left(\sum_{i=1}^n t^2 v_i^2 \right)^{1/2} / t = |t| \left(\sum_{i=1}^n v_i^2 \right)^{1/2} / t = \left(\sum_{i=1}^n v_i^2 \right)^{1/2} = \|v\|_2 = 1$

f è derivabile in $\bar{x}=0$ in ogni direzione e $\cancel{\frac{\partial f}{\partial v}}(\bar{x})$ $f'(\bar{x}; v)$ $= \|v\|_2 = 1$ $\quad \frac{\partial f}{\partial v}$ non esiste!

Direzioni particolari: $e_i = (0, 0, \dots, 1, 0, \dots 0)$



$\frac{\partial f}{\partial e_i}(\bar{x}) \to \frac{\partial f}{\partial x_i}(\bar{x})$ DERIVATE PARZIALI

Nota: $\frac{\partial f(\bar{x})}{\partial x_i} = \lim_{t \to 0^+} [f(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_{i-1}, \bar{x}_i + t, \bar{x}_{i+1}, \dots \bar{x}_n) - f(\bar{x})]/t$

Esempio: $f(x_1, x_2) = \sin(\pi x_1 x_2) \qquad \frac{\partial f}{\partial x_1}(x) = \pi x_2 \cos(\pi x_1 x_2) \qquad \frac{\partial f}{\partial x_2}(x) = \pi x_1 \cos(\pi x_1 x_2)$

$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \pi x_2 \cos(\pi x_1 x_2) \\ \pi x_1 \cos(\pi x_1 x_2) \end{pmatrix}$

$\Uparrow$

Def $\nabla f(\bar{x}) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(\bar{x}), \frac{\partial f}{\partial x_1}(\bar{x}), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(\bar{x}) \right)^T$ si dice GRADIENTE di f in $\bar{x}$

$n=2$

$$f(x_1,x_2) = \begin{cases} \left(\dfrac{x_1^2 x_2}{x_1^4+x_2^2}\right)^2 & \text{se } (x_1,x_2)\neq(0,0) \\ ? & \text{se } (x_1,x_2)=(0,0) \end{cases}$$

$x_2 = \alpha x_1^2$: $f(x_1,\alpha x_1^2) = \left[\alpha x_1^4/(x_1^4+\alpha^2 x_1^4)\right]^2 = \alpha^2/(1+\alpha^2)^2$
$x_1 \neq 0$

f non è continua in $\bar{x}=(0,0)$: $f(1/k, 1/k^2) \equiv 1/4$, $f(1/k, 2/k^2) \equiv 4/25$

f ammette derivate direzionali in $\bar{x}=(0,0)$ in ogni direzione (ponendo $f(0,0)=0$):

$$[f(\bar{x}+tv)-f(\bar{x})]/t = \left[t^{\cancel{3}} v_1^2 v_2 / \cancel{t^2}(t^2 v_1^4+v_2^2)\right]^2/t = t\, v_1^4 v_2^2/(t^2 v_1^4+v_2^2)^2 \xrightarrow[t\to 0]{} 0$$

(nota $v_2=0 \to$ rapp incr $\equiv 0$)

<u>Differenza</u>: $\phi:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ derivabile in $\bar{x}$ $\Rightarrow$ ϕ continua in $\bar{x}$

<u>Def</u> $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ si dice DIFFERENZIABILE in $\bar{x}\in\mathbb{R}^n$ se esiste $L:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ lineare ($L(\alpha x+\beta y)=\alpha L(x)+\beta L(y)$ $\forall \alpha,\beta\in\mathbb{R}$ $\forall x,y\in\mathbb{R}^n$) tale che

$$f(\bar{x}+h) = f(\bar{x}) + L(h) + r_{\bar{x}}(h) \quad \text{per ogni } h\in\mathbb{R}^n$$

con $r_{\bar{x}}(h)/\|h\|_2 \longrightarrow 0$ per $\|h\|_2\to 0$ (eq: $[f(\bar{x}+h)-f(\bar{x})-L(h)]/\|h\|_2 \to 0$)

(f differenziabile su $A\subseteq\mathbb{R}^n$ $\equiv$ differenziabile in ogni $\bar{x}\in A$)

L si dice differenziale di f in $\bar{x}$

<u>Nota</u>: $L:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ lineare $\Leftrightarrow$ $\exists\, \ell\in\mathbb{R}^n$ t.c. $L(x)=\ell^T x$ per ogni $x\in\mathbb{R}^n$

<u>Prop</u> f differenziabile in $\bar{x}$ $\Rightarrow$ f continua in $\bar{x}$.

Prop f differenziabile in $\bar{x}$ $\Rightarrow$ f ammette derivata in $\bar{x}$ in ogni direzione v

dim $$\frac{\partial f}{\partial v}(\bar{x}) = \lim_{t\to 0} \frac{f(\bar{x}+tv)-f(\bar{x})}{t} = \lim_{t\to 0} \frac{L(tv)+r_{\bar{x}}(tv)}{t} = \lim_{t\to 0} \frac{tL(v)+r_{\bar{x}}(tv)}{t}$$

$$= L(v) + \lim_{t\to 0} \frac{r_{\bar{x}}(tv)}{t} = L(v) \quad \left(\|tv\|_2 = |t|, \text{ e } \frac{r_{\bar{x}}(tv)}{|t|} \to 0 \Rightarrow \frac{r_{\bar{x}}(tv)}{t} \to 0 \right)$$ ∎

Oss $v \in \mathbb{R}^n$ $(\|v\|_2 = 1)$ $\quad v = \sum_{i=1}^n v_i e_i$

$$\frac{\partial f}{\partial v}(\bar{x}) = L(v) = L\left(\sum_{i=1}^n v_i e_i\right) = \sum_{i=1}^n v_i L(e_i) = \sum_{i=1}^n v_i \frac{\partial f}{\partial x_i}(\bar{x}) = \nabla f(x)^T v$$

$$\to \frac{\partial f}{\partial v}(\bar{x}) = \nabla f(x)^T v \qquad \to \underline{L(v) = \nabla f(x)^T v}$$

Nota: queste relazioni richiedono f differenziabile in $\bar{x}$.

ES: NONDIF

$$f(x_1,x_2) = \begin{cases} x_1^2 x_2/(x_1^2+x_2^2) & \text{se } (x_1,x_2) \neq (0,0) \\ 0 & \text{se } (x_1,x_1) = (0,0) \end{cases}$$

$\bar{x} = (0,0)$

$$\frac{\partial}{\partial v} f(\bar{x}) = \lim_{t\to 0} \frac{t^3 v_1^2 v_2 / t^2(v_1^2+v_2^2)}{t} = v_1^2 v_2 \qquad (\text{poiché } \|v\|_2^2 = v_1^2+v_2^2 = 1)$$

In particolare $\frac{\partial f}{\partial x_1}(\bar{x}) = \frac{\partial f}{\partial x_2}(\bar{x}) = 0$ ma $\frac{\partial f}{\partial v}(\bar{x}) \neq 0$ per ogni altra direzione

Quindi $\frac{\partial f}{\partial v}(\bar{x}) \neq \nabla f(x)^T v = 0$

Teorema (differenziale totale) Sia $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ tale da ammettere derivate parziali in ogni $x \in B(\bar{x},\varepsilon)$ per qualche $\varepsilon > 0$. Allora

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} : B(\bar{x},\varepsilon) \to \mathbb{R} \text{ continue in } \bar{x} \Rightarrow f \text{ differenziabile in } \bar{x}$$

$$\left(x \mapsto \frac{\partial f}{\partial x_i}(x)\right)$$

Nell'esempio NONDIFF

$$\frac{\partial f}{\partial x_1}(x) = 2x_1 x_2^3/[x_1^2+x_2^2]^2 \quad x \neq (0,0)$$

$0 \neq x_1 = x_2 \to \frac{\partial f}{\partial x_1}(x) \equiv 1/2$ mentre $\frac{\partial f}{\partial x_1}(0,0) = 0$

Prop. $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ differenziabile in $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$, $\phi:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ derivabile in $f(\bar{x}) \in \mathbb{R}$.

Allora $\phi \circ f$ è differenziabile in $\bar{x}$ e $\nabla(\phi \circ f)(\bar{x}) = \phi'(f(\bar{x}))\, \nabla f(\bar{x})$.

Teorema (valor medio) Sia $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ differenziabile con continuità (ovvero $\nabla f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $x \mapsto \nabla f(x)$ è continua) su $\mathbb{R}^n$. Dati $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$, $h \in \mathbb{R}^n$, esiste $t \in (0,1)$ tale che

$$f(\bar{x}+h) = f(\bar{x}) + \nabla f(\underbrace{\bar{x}+th}_{})^T h$$

$x+th$ appartiene al segmento di estremi x e $x+h$

(ricordare il caso $\phi:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$: $\phi(t_1) = \phi(t_0) + \phi'(\xi)(t_1 - t_0)$ per un opportuno $\xi \in (t_1, t_0)$ (t_0,t_1))

FORMULA DI TAYLOR I° ORDINE

$f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ differenziabile

$$f(\bar{x}+h) = f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T h + r_{\bar{x}}(h) \quad \text{con} \quad r_{\bar{x}}(h)/\|h\|_2 \xrightarrow[\|h\|_2 \to 0]{} 0$$

(semplice riscrittura della definizione alla luce delle proprietà di pg 6).

(IPER)PIANO TANGENTE

$h = x - \bar{x}$, $h \approx 0 \to f(x) \approx f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T (x - \bar{x})$

$\{ (x, f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T (x-\bar{x})) \mid x \in \mathbb{R}^n \}$ equazione (iper)piano tangente al grafico di f nel punto $(\bar{x}, f(\bar{x}))$.

$\uparrow$

$\{ (x, f(x)) \mid x \in \mathbb{R}^n \}$

Matrice Jacobiana $F:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ $F = (f_1, \dots, f_m)$ $f_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

$$JF(x) = \begin{bmatrix} - \nabla f_1(x)^T - \\ \vdots \\ - \nabla f_m(x)^T - \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & & \\ \frac{\partial f_m(x)}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m(x)}{\partial x_n} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

Derivate di ordine superiore

f differenziabile in $\mathbb{R}^n \Rightarrow \exists\ \frac{\partial f}{\partial v}(x)$ per ogni $x \in \mathbb{R}^n$, $v \in \mathbb{R}^n$ con $\|v\|_2 = 1$

$\frac{\partial f}{\partial v} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ è una funzione → ammette derivate nelle varie direzioni ?

$x \mapsto \frac{\partial f}{\partial v}(x)$

$$\frac{\partial}{\partial w}\left(\frac{\partial f}{\partial v}\right)(\bar{x}) = \lim_{t \to 0} \left[\frac{\partial f}{\partial v}(\bar{x}+tw) - \frac{\partial f}{\partial v}(\bar{x})\right]/t$$

Limitiamoci alle derivate parziali: $w = e_i$, $v = e_j$ → $\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial f}{\partial x_j}\right) \rightsquigarrow \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$

$i=j \rightsquigarrow \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}$

Esempio di pg 4:

$\frac{\partial f}{\partial x_1}(x) = \pi x_2 \cos(\pi x_1 x_2)$ $\quad \frac{\partial f}{\partial x_2}(x) = \pi x_1 \cos(\pi x_1 x_2)$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}(x) = \pi \cos(\pi x_1 x_2) - \pi^2 x_1 x_2 \sin(\pi x_1 x_2) = \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(x)$$

$\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(x) = -\pi^2 x_2^2 \sin(\pi x_1 x_2)$ $\quad \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(x) = -\pi^2 x_1^2 \sin(\pi x_1 x_2)$

Teo (Schwartz / inversione ordine derivazione) Sia $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ tale che $\frac{\partial f}{\partial x_i \partial x_j}$ e $\frac{\partial f}{\partial x_j \partial x_i}$ esistano in ogni $x \in B(\bar{x}, \varepsilon)$ per qualche $\varepsilon > 0$ e siano continue in $\bar{x}$.

Allora $\frac{\partial f}{\partial x_i \partial x_j}(\bar{x}) = \frac{\partial f}{\partial x_j \partial x_i}(\bar{x})$.

Def

$$\nabla^2 f(\bar{x}) = \left\{ \frac{\partial f}{\partial x_i \partial x_j}(\bar{x}) \right\}_{\substack{i=1..n \\ j=1..n}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1^2}(\bar{x}) & \frac{\partial f}{\partial x_1 \partial x_2}(\bar{x}) & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_1 \partial x_n}(\bar{x}) \\ \vdots & & & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n \partial x_1}(\bar{x}) & \cdots & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_n^2}(\bar{x}) \end{bmatrix}$$

si dice MATRICE HESSIANA di f in $\bar{x}$.

Supponiamo che per ogni $i=1\dots n$, $j=1\dots n$ (f differenziabile 2 volte con continuità)

$\frac{\partial f}{\partial x_i \partial x_j}(x)$ esista per ogni $x\in\mathbb{R}^n$ e $\frac{\partial f}{\partial x_i \partial x_j}:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ sia continua su $\mathbb{R}^n$.

(↳ $\nabla^2 f(x)$ matrice simmetrica)

FORMULA DI TAYLOR CON RESTO

$$f(\bar{x}+h)=f(\bar{x})+\nabla f(\bar{x})^T h+\frac{1}{2}h^T\nabla^2 f(\bar{x}+th)\,h \quad \text{per qualche } t\in(0,1).$$

FORMULA DI TAYLOR II° ORDINE

$$f(\bar{x}+h)=f(\bar{x})+\nabla f(\bar{x})^T h+\frac{1}{2}\underbrace{h^T\nabla^2 f(\bar{x})\,h}+r_{\bar{x}}(h) \quad \text{con} \quad r_{\bar{x}}(h)/\|h\|_2^2 \xrightarrow[\|h\|_2\to 0]{} 0$$

$$\hookrightarrow h^T\nabla^2 f(\bar{x})\,h=\sum_{i=1}^n\sum_{j=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i\partial x_j}(\bar{x})\,h_i h_j$$

$$h=x-\bar{x}\approx 0:\quad f(x)\approx \underbrace{f(\bar{x})+\nabla f(\bar{x})^T(x-\bar{x})+\frac{1}{2}(x-\bar{x})^T\nabla^2 f(\bar{x})(x-\bar{x})}_{\text{approssimazione quadratica di } f \text{ vicino a } \bar{x}.}$$

— • — • — • —

Funzioni quadratiche $\quad Q\in\mathbb{R}^{n\times n},\ b\in\mathbb{R}^n,\ c\in\mathbb{R}$

$$f(x)=\frac{1}{2}x^TQx+b^Tx+c=\frac{1}{2}\sum_{k=1}^n\sum_{l=1}^n q_{kl}x_k x_l+\sum_{k=1}^n b_k x_k+c$$

Ipotesi: Q simmetrica ← non restrittiva: $q_{kl} \leftsquigarrow (q_{kl}+q_{lk})/2$

$$\frac{\partial f}{\partial x_j}(x)=\frac{1}{2}\Big[\sum_{l=1}^n q_{jl}x_l+\sum_{k=1}^n q_{kj}x_k\Big]+b_j=\frac{1}{2}\Big[\sum_{l=1}^n q_{lj}x_l+\sum_{k=1}^n q_{kj}x_k\Big]+b_j=$$

$$=\sum_{l=1}^n q_{jl}x_l+b_j=(Qx)_j+b_j \to \underline{\nabla f(x)=Qx+b}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_i\partial x_j}(x)=\frac{\partial}{\partial x_i}\Big(\frac{\partial f}{\partial x_j}(x)\Big)=\frac{\partial}{\partial x_i}\Big(\sum_{l=1}^n q_{jl}x_l+b_j\Big)=q_{ji}=q_{ij}\to \underline{\nabla^2 f(x)=Q}$$

$$f(x_1,x_2) = -x_1^4 - x_2^2$$

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} -4x_1^3 \\ -2x_2 \end{pmatrix} \qquad \nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} -12x_1^2 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix}$$

$$\bar{x} = (0, \overset{0.4}{-2/5}) \qquad \nabla f(\bar{x}) = \begin{pmatrix} 0 \\ -4/5 \end{pmatrix} \qquad \nabla^2 f(\bar{x}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix} \qquad f(\bar{x}) = -\frac{4}{25}$$

$$f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T (x-\bar{x}) + \frac{1}{2}(x-\bar{x})^T \nabla^2 f(\bar{x})(x-\bar{x}) =$$

$$= -\frac{4}{25} - \frac{4}{5}\left(x_2 + \frac{2}{5}\right) - 2\left(x_2 + \frac{2}{5}\right)^2 =$$

$$= -\frac{12}{25} - \frac{4}{5}x_2 - 2x_2^2 - \frac{8}{25} - \frac{8}{5}x_2 =$$

$$= \underbrace{-\frac{20}{25} - \frac{12}{5}x_2 - 2x_2^2}$$

Esempio

$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $D \subseteq \mathbb{R}^n$

(P) $\min \{ f(x) : x \in D \}$

max

" Trovare $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ tale che

- $\bar{x} \in D$ (ammissibilità)
- $f(\bar{x}) \leq f(x) \quad \forall x \in D$ (ottimalità) "

$\geq$

Classificazione

$D = \mathbb{R}^n$ ottimizzazione non vincolata (programmazione)

$D \subsetneq \mathbb{R}^n$ ottimizzazione vincolata $\longrightarrow$ D finito/numerabile $\to$ altrimenti "ott. continua"

$\downarrow$

ottimizzazione discreta $\begin{cases} D \subseteq \{0,1\}^n & \text{combinatoria} \\ D \subseteq \mathbb{Z}^n & \text{intera} \end{cases}$

fz. obiettivo $\begin{cases} f & \text{lineare} \\ f & \text{nonlineare} \end{cases}$

MNO: ottimizzazione non lineare non vincolata e vincolata (caso continuo)

Definizioni di ottimalità

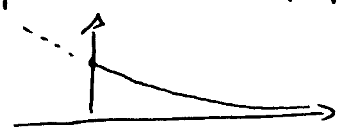
Def $\bar{x} \in \mathbb{R}$ si dice [PUNTO DI] MINIMO GLOBALE (max) di (P) se

- $\bar{x} \in D$
- $f(\bar{x}) \leq f(x) \quad \forall x \in D$ $(\geq)$

In tal caso $f(\bar{x})$ si dice valore ottimo di (P)

Valore ottimo esiste ma non esiste alcun punto di minimo: $f(x) = e^{-x}$ $D = \mathbb{R}_+$ $(D = \mathbb{R})$

(inteso come $\inf \{ f(x) : x \in D \}$) $\begin{cases} \bar{\ell} \leq f(x) \quad \forall x \in D \\ \ell \leq f(x) \ \forall x \in D \Rightarrow \ell \leq \bar{\ell} \end{cases}$

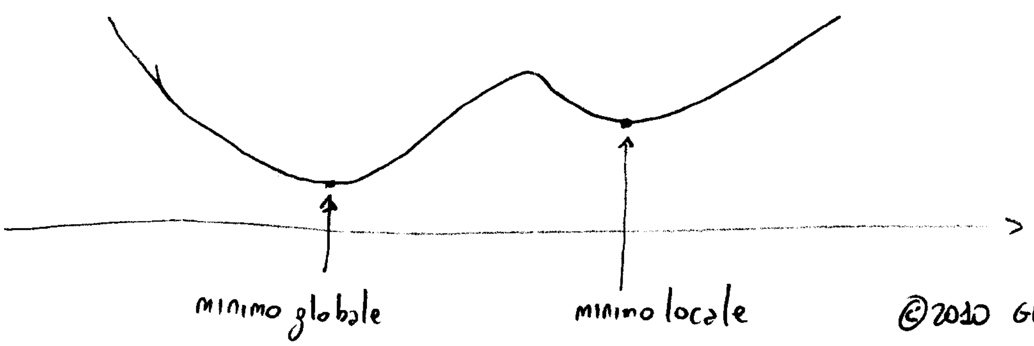


Valore ottimo non esiste: $f(x) = -x^2$, $D = \mathbb{R} \to f(x) \longrightarrow -\infty$ per $x \to \pm\infty$

Weierstrass: f continua, D compatto $\Rightarrow$ minimo [e massimo] esistono

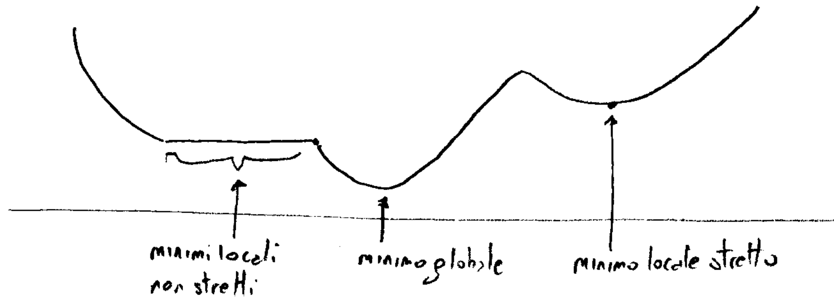
Def $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ si dice [PUNTO DI] MINIMO LOCALE di (P) se

- $\bar{x} \in D$
- $\exists \varepsilon > 0 : f(\bar{x}) \leq f(x) \quad \forall x \in D \cap B(\bar{x}, \varepsilon)$



Def $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ si dice [PUNTO DI] MINIMO LOCALE STRETTO di (P) se

- $\bar{x} \in D$
- $\exists \varepsilon > 0 \;:\; f(\bar{x}) < f(x) \quad \forall x \in D \cap B(\bar{x}, \varepsilon),\ x \neq \bar{x}$.

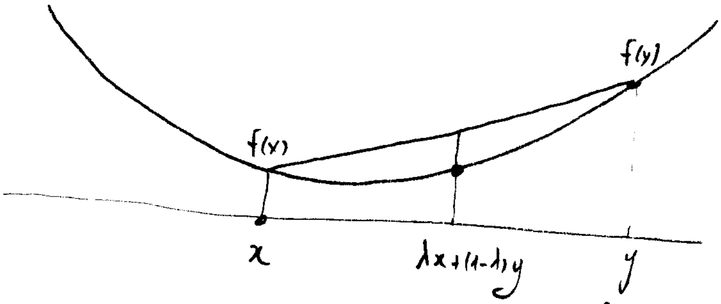


Ulteriore distinzione: ottimizzazione globale vs ottimizzazione locale

Def: $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ si dice CONVESSA se (f concava se $(-f)$ convessa)

$$f(\underbrace{\lambda x + (1-\lambda) y}_{\text{segmento } [x,y] \subseteq \mathbb{R}^n}) \leq \underbrace{\lambda f(x) + (1-\lambda) f(y)}_{\text{segmento } [f(x), f(y)] \subseteq \mathbb{R}}, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n \ \forall \lambda \in [0,1] \qquad (*)$$

f si dice strettamente convessa se (*) vale con $<$ al posto di $\leq$



Oss f è convessa

$$\Updownarrow$$

$$f\left(\sum_{i=1}^{k} \lambda_i x_i\right) \leq \sum_{i=1}^{k} \lambda_i f(x_i)$$

$\forall x_1, \ldots, x_k \in \mathbb{R}^n$, $\forall \lambda_i \geq 0$ con $\sum_{i=1}^{k} \lambda_i = 1$

Teorema Siano $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ convessa, $D \subseteq \mathbb{R}^n$ convesso. Allora ogni punto di minimo locale di (P) è un punto di minimo globale (LOCALE ≡ GLOBALE)

(vedi pg 6)

dim Sia $\bar{x} \in D$ minimo locale, supponiamo che non sia minimo globale:

$\exists x \in D \;:\; f(x) < f(\bar{x})$. Sia $x_\lambda = \lambda x + (1-\lambda)\bar{x}$ con $\lambda \in [0,1]$: $x_\lambda \in D$

$$f(x_\lambda) \underset{\text{convessità}}{\leq} \lambda f(x) + (1-\lambda) f(\bar{x}) < \lambda f(\bar{x}) + (1-\lambda) f(\bar{x}) = f(\bar{x})$$

$x_\lambda \xrightarrow[\lambda \to 0]{} \bar{x}$: $\forall \varepsilon > 0 \ \exists \bar{\lambda} \in [0,1]$ t.c. $x_{\bar{\lambda}} \in B(\bar{x}, \varepsilon)$ ed inoltre $f(x_{\bar{\lambda}}) < f(\bar{x})$

Quindi $\bar{x}$ non è un minimo locale (contraddizione)

Def $D \subseteq \mathbb{R}^n$ si dice CONVESSO se $\forall x,y \in D\ \forall \lambda \in [0,1]$: $\underbrace{\lambda x + (1-\lambda) y}_{\text{segmento } [x,y] \subseteq \mathbb{R}^n} \in D$

Oss $\mathbb{R}^n$ è convesso così come $\emptyset$

Teorema Siano $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ strettamente convessa, $D \subseteq \mathbb{R}^n$ convesso. Se (P) ammette un punto di minimo, allora è l'unico punto di minimo

dim Sia $\bar{x} \in D$ minimo (globale ≡ locale) di (P) e supponiamo che esista $\hat{x} \in D$ $\hat{x} \neq \bar{x}$ tale che $f(\hat{x}) = f(\bar{x})$. Sia $\lambda \in [0,1]$: $\lambda \hat{x} + (1-\lambda)\bar{x} \in D$ (convessità di D)

e $f(\lambda \hat{x} + (1-\lambda)\bar{x}) < \lambda f(\hat{x}) + (1-\lambda) f(\bar{x}) = \lambda f(\bar{x}) + (1-\lambda) f(\bar{x}) = f(\bar{x})$

Quindi $\bar{x}$ non è un minimo (globale ≡ locale) ← contraddizione ∎

[Ulteriore] distinzione : ottimizzazione convessa vs ottimizzazione non convessa

(D) **Prop 1** f convessa $\Rightarrow$ f continua (su $\mathbb{R}^n$)

(B) **Prop 2** Sia $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ convessa. Allora l'insieme di sottolivello

$$C_\alpha = \{ x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \leq \alpha \}$$

è convesso per ogni $\alpha \in \mathbb{R}$.

dim Sia $C_\alpha \neq \emptyset$ e siano $x, y \in C_\alpha$. Allora per ogni $\lambda \in [0,1]$ risulta

$$f(\lambda x + (1-\lambda) y) \leq \lambda f(x) + (1-\lambda) f(y) \leq \lambda \alpha + (1-\lambda)\alpha = \alpha$$

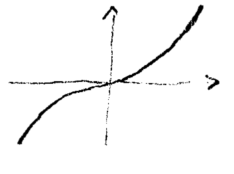
da cui $\lambda x + (1-\lambda) y \in C_\alpha$. ∎

Nota : l'implicazione opposta non vale

$n=1$ $f(x) = x^3$, $C_\alpha = \{ x \in \mathbb{R} \mid x^3 \leq \alpha \} = (-\infty, \sqrt[3]{\alpha}\,]$ ← convesso

↑

non convessa :



$x = -1$
$y: 1/2$
$\lambda = 1/3$

$\lambda x + (1-\lambda) y = -\frac{1}{3} + \frac{2}{3}\left(\frac{1}{2}\right) = 0$

$f(0) = 0 > \frac{1}{3} f(-1) + \frac{2}{3} f(1/2) = -\frac{1}{3} + \frac{2}{3}\frac{1}{8} = -\frac{1}{3} + \frac{1}{12} = -\frac{1}{4}$

(C) **Prop 3** Siano $f_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ convesse

(i) $\sum_{i=1}^{k} f_i$ è convessa (ii) $(\sup_{i \in I} f_i)(x) := \sup_{i \in I} f_i(x)$ è convessa (quale che sia I)

dim (i) ovvio (applicare la definizione ad ogni f_i e sommare membro a membro)

(ii) (caso I finito: $\exists$ k opportuno) $(\sup f_i)(\lambda x + (1-\lambda)y) = f_k(\lambda x + (1-\lambda)y) \leq \lambda f_k(x) + (1-\lambda) f_k(y) \leq \lambda (\sup f_i)(x) + (1-\lambda)(\sup f_i)(y)$ ∎

Teo 1 Sia $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ differenziabile (su $\mathbb{R}^n$). Allora

$$f \text{ è convessa } \Longleftrightarrow f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T (y-x) \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n$$

("il grafico di f sta sopra il piano tangente a f in $(x, f(x))$")

dim $\Rightarrow$) Sia $\lambda \in [0,1]$ qualsiasi, $x, y \in \mathbb{R}^n$

$$\lambda f(y) + (1-\lambda) f(x) \geq f(\lambda y + (1-\lambda)x) \to \lambda f(y) - \lambda f(x) \geq f(\lambda y + (1-\lambda)x) - f(x)$$

$$\to f(y) - f(x) \geq \frac{f(x + \lambda(y-x)) - f(x)}{\lambda} \xrightarrow[\lambda \to 0]{} \nabla f(x)^T (y-x)$$

$\Leftarrow$) Siano $\lambda \in [0,1]$, $x, y \in \mathbb{R}^n$:

① $f(x) - f(\lambda y + (1-\lambda)x) \geq \nabla f(\lambda y + (1-\lambda)x)^T [\lambda (x-y)]$

② $f(y) - f(\lambda y + (1-\lambda)x) \geq \nabla f(\lambda y + (1-\lambda)x)^T [(\lambda - 1)(x-y)]$

$(1-\lambda)$ ① $+ \lambda$ ② $\to (1-\lambda) f(x) + \lambda f(y) \geq (1-\lambda) f(\lambda y + (1-\lambda)x) + \lambda f(\lambda y + (1-\lambda)x) = f(\lambda y + (1-\lambda)x)$ ∎

Oss f differenziabile in $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ soltanto $+$ f convessa $\Rightarrow f(y) \geq f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T (y - x)$

Teo 2 Sia $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ differenziabile 2 volte (su $\mathbb{R}^n$). Allora

f è convessa $\Longleftrightarrow \nabla^2 f(x)$ è semidefinita positiva $\forall x \in \mathbb{R}^n$, ovvero $y^T \nabla^2 f(x) y \geq 0$ $\forall y \in \mathbb{R}^n$

dim $\Rightarrow$) Siano $x, y \in \mathbb{R}^n$ con $\|y\|_2 = 1$, $\lambda \in \mathbb{R}$:

$$f(x + \lambda y) - f(x) - \lambda \nabla f(x)^T y \geq 0 \quad \text{(teo 1)}$$

Taylor II° $\longrightarrow$ $\|$

$$\tfrac{1}{2} \lambda^2 y^T \nabla^2 f(x) y + r(\lambda y)$$

Quindi $\frac{1}{2} y^T \nabla^2 f(x) y + r(\lambda y)/\lambda^2 \geq 0$ $\quad \to \|\lambda y\|_2^2 = \lambda^2 \|y\|_2^2 = \lambda^2$

$$\downarrow \lambda \to 0$$

$\frac{1}{2} y^T \nabla^2 f(x) y$ $\qquad$ da cui $\quad y^T \nabla^2 f(x) y \geq 0$

$\Leftarrow$) Siano $x, y \in \mathbb{R}^n$:

$t \in (0,1)$ opportuno $\qquad$ ipotesi

$$f(y) - f(x) - \nabla f(x)^T (y-x) = \frac{1}{2} (y-x)^T \nabla^2 f(x + t(y-x)) (y-x) \geq 0$$

resto Taylor I°

Dal teo 1 segue che f è convessa ∎

Oss f differenziabile 2 volte in $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ soltanto + f convessa $\Rightarrow \nabla^2 f(\bar{x})$ semidefinita positiva

f concava : Teo 1 con $f(y) \leq f(x) + \nabla f(x)^T (y-x)$

Teo 2 con $\nabla^2 f(x)$ semidefinita negativa $(y^T \nabla^2 f(x) y \leq 0)$

f strettamente convessa : Teo 1 con $f(y) > f(x) + \nabla f(x)^T (y-x) \quad (y \neq x)$

Teo 2 $\to$ vale la parte necessaria con $\nabla^2 f(\bar{x})$ semidefinita positiva [e non definita positiva]

$\hookrightarrow \nabla^2 f(x)$ definita positiva $\Rightarrow f$ strettamente convessa $\qquad (y^T \nabla^2 f(x) y > 0 \quad \forall y \neq 0)$

(Esempio: $n=1$, $f(x) = x^4$ è strettamente convessa, ma $\nabla^2 f(0) = 0$ $[\nabla^2 f(x) = 12x^2]$)

Ⓐ Prop 4 Sia $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Allora

$$f \text{ convessa} \iff \underbrace{\text{epi}(f) := \{(x,t) \mid x \in \mathbb{R}^n, t \geq f(x)\}}_{\text{EPIGRAFICO di } f} \subseteq \mathbb{R}^{n+1} \text{ è convesso}$$

dim $\Rightarrow$) Siano $(x,t), (y,\tau) \in \text{epi}(f)$, $\lambda \in [0,1]$:

$$\lambda t + (1-\lambda)\tau \geq \lambda f(x) + (1-\lambda) f(y) \overset{\text{convessità}}{\geq} f(\lambda x + (1-\lambda) y),$$ da cui $(\lambda x + (1-\lambda) y, \lambda t + (1-\lambda)\tau) \in \text{epi}(f)$

$\Leftarrow$) Siano $x, y \in \mathbb{R}^n$, $\lambda \in [0,1]$: $\quad (x, f(x)), (y, f(y)) \in \text{epi}(f)$

epi(f) convesso $\Rightarrow (\lambda x + (1-\lambda) y, \lambda f(x) + (1-\lambda) f(y)) \in \text{epi}(f)$

ovvero $\lambda f(x) + (1-\lambda) f(y) \geq f(\lambda x + (1-\lambda) y)$ ∎

Prop Siano $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ convessa, $D \subseteq \mathbb{R}^n$ convesso. Allora, l'insieme dei punti di minimo di (P) è convesso

dim Siano $\bar{x}, \hat{x} \in D$ punti di minimo di (P): $f(\bar{x}) = f(\hat{x}) \leq f(x) \quad \forall x \in D$.

Sia $x_\lambda = \lambda \hat{x} + (1-\lambda)\bar{x}$ con $\lambda \in [0,1]$: $x_\lambda \in D$

$$f(x_\lambda) \leq \lambda f(\hat{x}) + (1-\lambda) f(\bar{x}) = \lambda f(\bar{x}) + (1-\lambda) f(\bar{x}) = f(\bar{x}) \leq f(x) \quad \forall x \in D$$ ■

Funzioni quadratiche e convessità

$Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$, Q simmetrica, $c \in \mathbb{R}$

$f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x + b^T x + c \quad \longrightarrow f$ diff. 2 volte: $\nabla^2 f(x) \equiv Q \quad \forall x$.

Dal teo 2 : f è convessa $\Leftrightarrow$ Q è semidefinita positiva
($\Leftrightarrow$ gli autovalori di Q sono tutti ≥ 0)

$\hookrightarrow$ Q definita positiva $\Rightarrow$ f è strettamente convessa

OTTIMIZZAZIONE NON VINCOLATA

$D = \mathbb{R}^n \longrightarrow$ (P) $\min \{ f(x) : x \in \mathbb{R}^n \}$ $\quad (f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R})$

Condizioni di ottimalità

Teo (cond. necessarie). Sia $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ un punto di minimo locale di (P).

a) Se f è differenziabile in $\bar{x}$, allora $\nabla f(\bar{x}) = 0$

b) Se f è differenziabile 2 volte in $\bar{x}$, allora $\nabla^2 f(\bar{x})$ è semidefinita positiva

dim Sia $\varepsilon > 0$ tale che $f(\bar{x}) = \min \{ f(x) : x \in B(\bar{x}, \varepsilon) \}$, e siano $d \in \mathbb{R}^n$ con $\|d\|_2 = 1$ e $t \leq \varepsilon$:

a) $$0 \leq f(\bar{x} + td) - f(\bar{x}) = t \nabla f(\bar{x})^T d + r(td)$$

da cui $0 \leq \nabla f(\bar{x})^T d + r(td)/t \xrightarrow[t \to 0]{} \nabla f(\bar{x})^T d$, ovvero $\nabla f(\bar{x})^T d \geq 0$

Analogamente, utilizzando la direzione $(-d)$ si ottiene $\nabla f(\bar{x})^T d \leq 0$

Quindi $\nabla f(\bar{x})^T d = 0 \quad \forall d \in \mathbb{R}^n$ (con $\|d\|_2 = 1$), da cui $\nabla f(\bar{x}) = 0$ $\left(\begin{array}{c} \text{considerare} \\ d = \nabla f(\bar{x}) \end{array} \right)$

b) $$0 \leq f(\bar{x} + td) - f(\bar{x}) = t \nabla f(\bar{x})^T d + \frac{1}{2} t^2 d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d + r(td)$$
$$= \frac{1}{2} t^2 d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d + r(td)$$

da cui $0 \leq d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d + r(td)/2t^2 \longrightarrow d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d$, ovvero $d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d \geq 0$

Quindi $d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d \geq 0 \quad \forall d \in \mathbb{R}^n$ (con $\|d\|_2 = 1$): $\nabla^2 f(\bar{x})$ è semidefinita positiva ∎

Teo (caso convesso) Sia f convessa e differenziabile su $\mathbb{R}^n$. Allora

$$\bar{x} \in \mathbb{R}^n \text{ è un punto di minimo di (P)} \iff \nabla f(\bar{x}) = 0$$

dim $\Rightarrow$) segue immediatamente dal teorema precedente

$\Leftarrow)$ f convessa $\to$ $f(y) \geq f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T (y - \bar{x})$ $\quad \forall y \in \mathbb{R}^n$

$\nabla f(\bar{x}) = 0 \to f(y) \geq f(\bar{x}) \quad \forall y \in \mathbb{R}^n \to \bar{x}$ punto di minimo di (P) $\blacksquare$

<u>Oss</u> Tutte le funzioni convesse differenziabili 2 volte verificano la condizione necessaria b) in ogni punto.

<u>Esempio</u> $n=2$ $\quad f(x_1, x_2) = (x_2 - x_1^2)(x_2 - 4x_1^2)$

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 16\,x_1^3 - 10\,x_1 x_2 \\ 2x_2 - 5\,x_1^2 \end{pmatrix}$$

$$\nabla f(x) = 0 \iff \begin{cases} 2x_2 = 5x_1^2 \\ 16\,x_1^3 = 10\,x_1 x_2 \end{cases} \iff \begin{cases} x_2 = 5/2\, x_1^2 \\ 16\,x_1^3 = 25\,x_1^3 \end{cases} \iff x_1 = x_2 = 0 \quad \leftarrow \bar{x} = (0,0)$$

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 48\,x_1^2 - 10\,x_2 & -10x_1 \\ -10x_1 & 2 \end{pmatrix} : \quad \nabla^2 f(\bar{x}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \text{ è semidefinita positiva}$$

(f non è convessa : $\nabla^2 f(10,11) = \begin{pmatrix} -10 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ non è semidefinita)

$\bar{x} = (0,0)$ non è un punto di minimo locale per f :

$P = \{ x \in \mathbb{R}^2 \mid x_2 = 2x_1^2 \}$ $\qquad f(x_1, 2x_1^2) = x_1^2(-2x_1^2) = -2x_1^4 < 0$ se $x_1 \neq 0$

f è negativa su $P \setminus \{\bar{x}\}$: $\quad x_k = (1/k, 2/k^2)$ $\quad x_k \to \bar{x}$ e $f(x_k) = -\dfrac{2}{k^4} < 0$

<u>Def</u> $\bar{x} \in \mathbb{R}$ si dice PUNTO STAZIONARIO per f se $\nabla f(\bar{x}) = 0$.

<u>Teo</u> (cond. sufficiente) Sia f differenziabile 2 volte in $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ e valga $\nabla f(\bar{x}) = 0$ ($\bar{x}$ punto stazionario). Se $\nabla^2 f(\bar{x})$ è definita positiva, allora $\bar{x}$ è un punto di minimo locale stretto di (P) ed inoltre esistono $\gamma > 0$ e $\delta > 0$ tali che

$$f(x) \geq f(\bar{x}) + \gamma \| x - \bar{x} \|_2^2 \qquad \forall x \in B(\bar{x}, \delta)$$

dim Sia $x \in \mathbb{R}^n$:

$$f(x) - f(\bar{x}) = \nabla f(\bar{x})^T (x-\bar{x}) + \frac{1}{2}(x-\bar{x})^T \nabla^2 f(\bar{x})(x-\bar{x}) + r(x-\bar{x}) \overset{\nabla f(\bar{x})=0}{=}$$

$$= \frac{1}{2}(x-\bar{x})^T \nabla^2 f(\bar{x})(x-\bar{x}) + r(x-\bar{x})$$

Sia $\lambda_{min} > 0$ il più piccolo autovalore di $\nabla^2 f(\bar{x})$ $(\to y^T \nabla^2 f(\bar{x}) y \geq \lambda_{min} \|y\|_2^2 \ \ \forall y \in \mathbb{R}^n)$

$$f(x) - f(\bar{x}) \geq \lambda_{min}/2 \ \|x-\bar{x}\|_2^2 + r(x-\bar{x})$$

$$[f(x) - f(\bar{x})]/\|x-\bar{x}\|_2^2 \geq \lambda_{min}/2 + r(x-\bar{x})/\|x-\bar{x}\|_2^2 \xrightarrow[x \to \bar{x}]{} \lambda_{min}/2$$

Sia $0 < \varepsilon < \lambda_{min}/2$: per la definizione di limite esiste $\delta > 0$ tale che

$$[f(x) - f(\bar{x})]/\|x-\bar{x}\|_2^2 \geq (\lambda_{min}/2 - \varepsilon) =: \gamma \quad \forall x \in B(\bar{x}, \delta)$$

da cui $f(x) \geq f(\bar{x}) + \gamma \|x-\bar{x}\|_2^2 \quad \forall x \in B(\bar{x}, \delta)$

Oss Risultati analoghi per i punti di massimo:

$$\max\{f(x) : x \in \mathbb{R}^n\} = -\min\{(-f)(x) : x \in \mathbb{R}^n\} \to \text{(semi)definita positiva}$$

$\updownarrow$

(semi)definita negativa

Oss Ad eccezione di quelle costanti, le funzioni convesse [differenziabili] non ammettono punti di massimo locale/globale su $\mathbb{R}^n$:

$\bar{x}$ massimo di $f \Rightarrow \nabla f(\bar{x}) = 0$ $\quad$ f convessa $+ \nabla f(\bar{x}) = 0 \Rightarrow \bar{x}$ minimo di f

ovvero massimo $\equiv$ minimo, cioè f è costante

Verifica alternativa

$\nabla f \equiv 0 \overset{\text{Taylor I ordine con resto}}{\Longrightarrow} f$ costante, $\quad$ sia $x \in \mathbb{R}^n$ tale che $\nabla f(x) \neq 0$:

$y(t) = t \nabla f(x) + x$

$$f \text{ convessa} \Rightarrow f(y(t)) \geq f(x) + \nabla f(x)^T (t \cdot \nabla f(x) + x - x) = f(x) + t \underbrace{\|\nabla f(x)\|_2^2}_{>0} \xrightarrow[t \to +\infty]{} +\infty$$

Oss Le funzioni quadratiche $(f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x + b^T x + c)$ non convesse non ammettono punti di minimo locale in quanto $\nabla^2 f(x) \equiv Q$ non è semidefinita positiva.

Alcuni legami con l'analisi numerica

→ Caso delle funzioni quadratiche

$$f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x + b^T x + c$$

$$\nabla f(x^*) = 0 \iff Q x^* = -b$$

ovvero

x^* punto stazionario per f $\iff$ x^* risolve il sistema lineare $Qx = -b$

→ In generale

$$\nabla f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n \qquad \left(\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right) \rightarrow \frac{\partial f}{\partial x_i} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \right)$$
$$x \mapsto \nabla f(x)$$

∇f non lineare : $\nabla f(x) = 0$ è un sistema di equazioni non lineari

$$\downarrow$$

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial x_1}(x) = 0 \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) = 0 \end{cases}$$

→ Condizioni secondo ordine

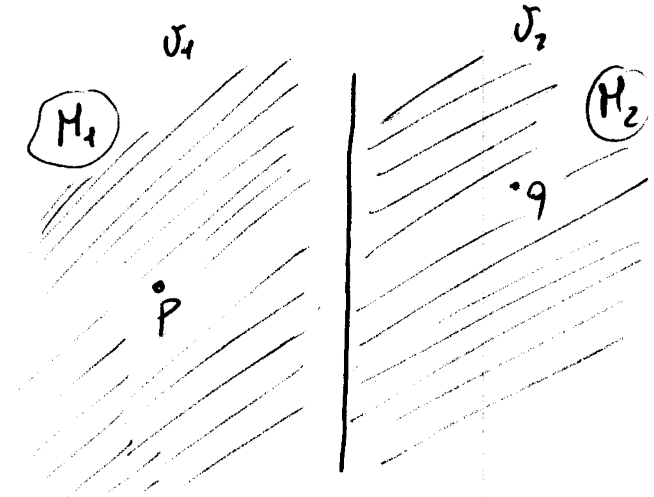
Verificare se $\nabla^2 f(\bar{x})$ è (semi)definita positiva/negativa richiede il calcolo del più piccolo/grande autovalore di $\nabla^2 f(\bar{x})$

(nota: nel caso quadratico la matrice $\nabla^2 f(x)$ è nota una volta nota la funzione)

Calcolo ∇f, $\nabla^2 f$:

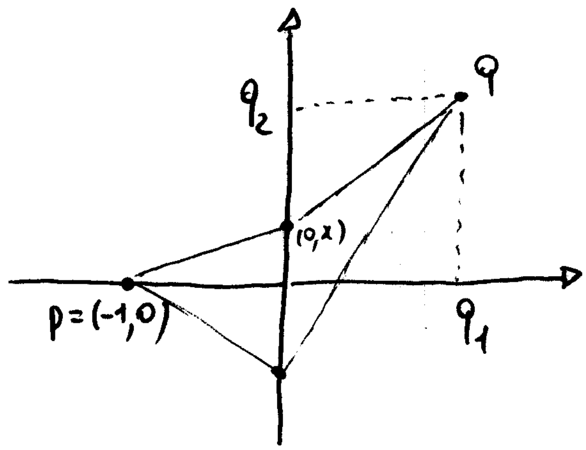
- differenze finite
- differenziazione automatica

Esempi di ottimizzazione non vincolata



Nel mezzo M_i ci si muove con velocità costante v_i, $i=1,2$.
Individuare il tragitto più veloce da p a q.

Modellazione: scegliere assi cartesiani t.c. l'asse delle ordinate coincida con la superficie (retta) di separazione tra M_1 e M_2 e l'asse delle ascisse passi per p; scegliere l'unità di misura in modo tale che $p=(-1,0)$ e l'orientamento degli assi t.c. $q_2>0$



Nei mezzi omogenei i tragitti più veloci sono segmenti, quindi basta determinare dove il tragitto attraversa l'asse delle ordinate: $(0,x)$ con x incognito

Tempo di percorrenza: $f(x) = \dfrac{\sqrt{1+x^2}}{v_1} + \dfrac{\sqrt{q_1^2+(q_2-x)^2}}{v_2}$

Il problema è quindi: $\min\{f(x) : x\in\mathbb{R}\}$

$$\nabla f(x) \; (= f'(x)) = \frac{x}{v_1\sqrt{1+x^2}} - \frac{q_2-x}{v_2\sqrt{q_1^2+(q_2-x)^2}}$$

$$\nabla f(x)=0 \quad \longleftrightarrow \quad \boxed{v_2\, x\sqrt{q_1^2+(q_2-x)^2} - v_1(q_2-x)\sqrt{1+x^2} = 0} \quad (*)$$

equazione non lineare (in una variabile)

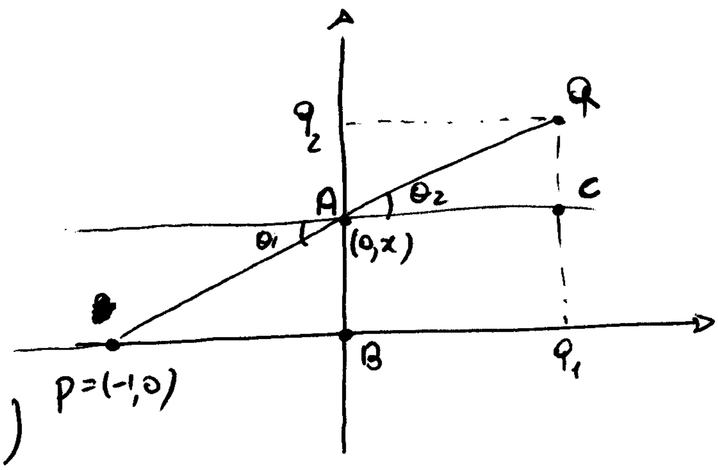
Es: f è convessa $\left(f(x) = \frac{1}{v_1}\|p-(0,x)\|_2 + \frac{1}{v_2}\|q-(0,x)\|_2 + \|\cdot\|_2 \text{ f.z. convessa} \right)$

L'equazione (*) può essere riscritta come
(nota che $x = q_2$ non risolve l'equazione)

$$\left(\frac{x}{\sqrt{1+x^2}}\right)\left(\frac{\sqrt{q_1^2+(q_2-x)^2}}{q_2-x}\right) = \frac{\sigma_1}{\sigma_2}$$

$\sigma_1/\sigma_2 > 0 \Rightarrow x/(q_2-x) \geq 0 \Rightarrow 0 \leq x < q_2$

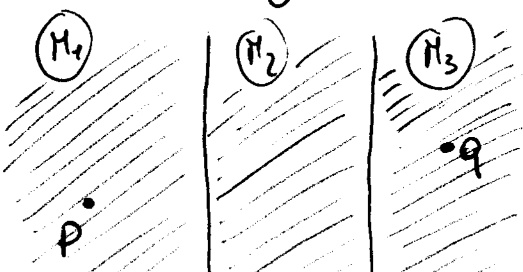
$$\underbrace{\left(\frac{\overline{AB}}{\overline{PA}}\right)}_{\sin\theta_1}\underbrace{\left(\frac{\overline{AQ}}{\overline{QC}}\right)}_{1/\sin\theta_2} = \sigma_1/\sigma_2$$

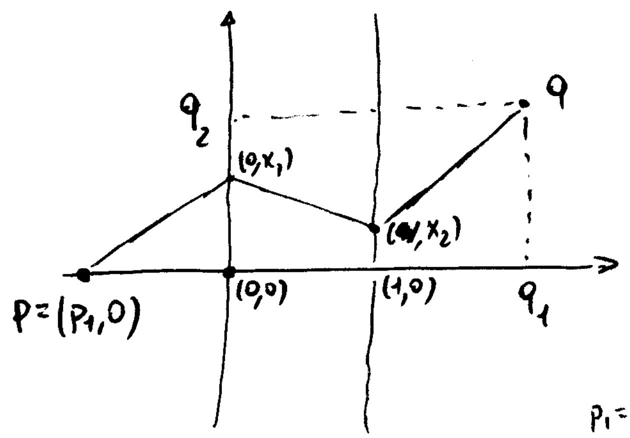


$$\frac{\sin\theta_1}{\sin\theta_2} = \frac{\sigma_1}{\sigma_2}$$ (legge della rifrazione) [Snell-Cartesio]

—— ∘ ——

Problema analogo con 3 mezzi:





$p_1 = -1$
$q_1 = 2$
$q_2 = 1$
$\sigma_1 = 5,\ \sigma_2 = 1$
$\sigma_3 = 2$

$$f(x_1,x_2) = \frac{\sqrt{p_1^2+x_1^2}}{\sigma_1} + \frac{\sqrt{1+(x_2-x_1)^2}}{\sigma_2} + \frac{\sqrt{(q_1-1)^2+(q_2-x_2)^2}}{\sigma_3}$$

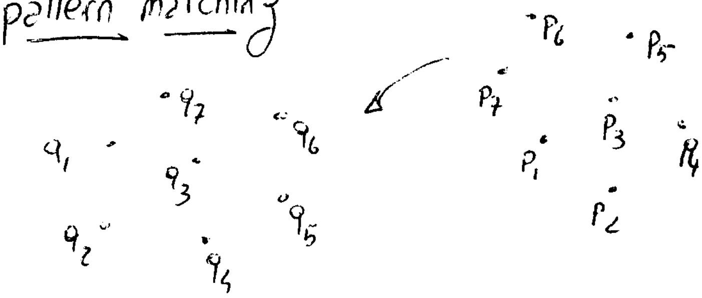
(Es: f è convessa)

$$\nabla f(x) = 0 \longleftrightarrow \begin{cases} \dfrac{\partial f}{\partial x_1}(x_1,x_2) = \dfrac{x_1}{\sigma_1\sqrt{p_1^2+x_1^2}} - \dfrac{x_2-x_1}{\sigma_2\sqrt{1+(x_2-x_1)^2}} = 0 \\[2ex] \dfrac{\partial f}{\partial x_2}(x_1,x_2) = \dfrac{x_2-x_1}{\sigma_2\sqrt{1+(x_2-x_1)^2}} - \dfrac{x_2^2}{\sigma_3\sqrt{(q_1-1)^2+(q_2-1)^2}} = 0 \end{cases}$$

Sistema di 2 equazioni non lineari (in 2 variabili)

Point pattern matching

$n=2$



Quanto sono "simili" i due insiemi di punti $q_1, q_2, \dots, q_k \in \mathbb{R}^2$ e $p_1, p_2, \dots, p_k \in \mathbb{R}^2$?

Applicazioni: visione e grafica computerizzata, astronautica (mappe stellari e posizione + orientazione di satelliti), biologia/chimica/farmacologia (allineamento di strutture proteiche, individuazione di frammenti molecolari con proprietà curative), registrazione di immagini, impronte digitali, perizie calligrafiche .....

"similitudine = rotazione + omotetia + traslazione"

rotazione $\longrightarrow A(\theta) = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}, \ \theta \in \mathbb{R}$

omotetia $\longrightarrow \eta \in \mathbb{R}$, traslazione $\longrightarrow d = (d_1, d_2) \in \mathbb{R}^2$

$$\mathbb{R}^2 \ni p_i \longmapsto \eta A(\theta) p_i + d$$

Misura di quanto differiscono i due insiemi dopo la trasformazione per similitudine "θ, η, d"

$$f(\eta, \theta, d_1, d_2) = \min_{\delta \in \mathcal{P}} \sum_{i=1}^{k} \| \eta A(\theta) p_{\delta(i)} + d - q_i \|_2^2 , \quad \mathcal{P} = \{\text{permutazioni di } 1, 2, \dots, k\}$$

$$\boxed{\min \{ f(\eta, \theta, d_1, d_2) \ : \ \eta, \theta, d_1, d_2 \in \mathbb{R} \}}$$

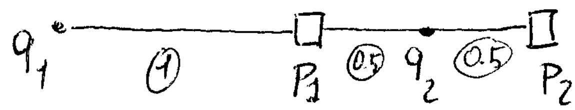
$|\mathcal{P}| = k! \to$ il computo di f è oneroso; inoltre f può non essere differenziabile

In alcune applicazioni l'unica numerazione dei punti valida per la similitudine è nota a priori e non è necessario considerare le permutazioni $\longrightarrow \hat{f}(\eta, \theta, d_1, d_2) = \sum_{i=1}^{k} \| \eta A(\theta) p_i + d - q_i \|_2^2$

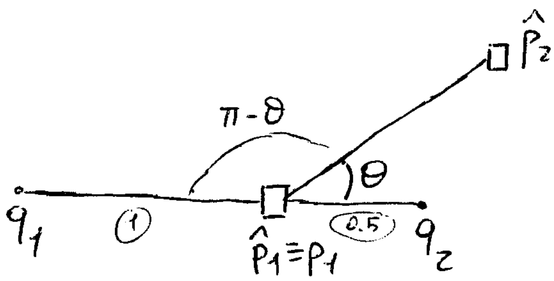
$\min \{ \hat{f}(\eta, \theta, d_1, d_2) \ : \ \eta, \theta, d_1, d_2 \in \mathbb{R} \}$ è un pb di MINIMI QUADRATI NONLINEARI

È possibile estendere il problema al caso di insiemi di cardinalità diversa

Esempio di f non differenziabile : $k=2$ $\quad q_1=(-1,0)$, $q_2=(1/2,0)$, $p_1=(0,0)$, $p_2=(1,0)$



Consideriamo una rotazione di angolo θ fissando quindi $\bar{\eta}=1$, $\bar{d}_1=\bar{d}_2=0$



$$\hat{p}_i = \bar{\eta} A(\theta) p_i + \bar{d} \quad (= A(\theta) p_i)$$

Permutazione identica : $\begin{array}{l} 1 \to 1 \\ 2 \to 2 \end{array}$

$$\|\hat{p}_1 - q_1\|_2^2 = 1 \qquad \|\hat{p}_2 - q_2\|_2^2 \overset{\text{teo(Carnot)}}{=} \|\hat{p}_1 - q_2\|_2^2 + \|\hat{p}_1 - \hat{p}_2\|_2^2 - 2\|\hat{p}_1 - q_2\|_2 \|\hat{p}_1 - \hat{p}_2\|_2 \cos\theta =$$
$$= 1/4 + 1 - \cos\theta = 5/4 - \cos\theta$$

misura associata alla permutazione : $\|\hat{p}_1 - q_1\|_2^2 + \|\hat{p}_2 - q_2\|_2^2 = 9/4 - \cos\theta$

Permutazione "inversione" : $\begin{array}{l} 1 \to 2 \\ 2 \to 1 \end{array}$

$$\|\hat{p}_2 - q_1\|_2^2 \underset{\text{teo(Carnot)}}{=} 1 + 1 - 2\cos(\pi - \theta) = 2 + 2\cos\theta, \quad \|\hat{p}_1 - q_2\|_2^2 = 1/4$$

misura associata alla permutazione : $\|\hat{p}_2 - q_1\|_2^2 + \|\hat{p}_1 - q_2\|_2^2 = 9/4 + 2\cos\theta$

Pertanto $f(\bar{\eta}, \theta, \bar{d}_1, \bar{d}_2) = \min\{ 9/4 - \cos\theta,\ 9/4 + 2\cos\theta \} =: g(\theta)$

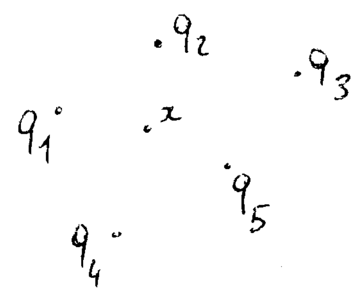
Siano $\bar{\theta} = \pi/2$ e $v = (0,1,0,0)$: non esiste $\frac{\partial}{\partial v} f(\bar{\eta}, \bar{\theta}, \bar{d}_1, \bar{d}_2)$ in quanto g non è derivabile in $\pi/2$. Infatti

$$\lim_{t \to 0^+} \frac{f(\bar{\eta}, \bar{\theta}+t, \bar{d}_1, \bar{d}_2) - f(\bar{\eta}, \bar{\theta}, \bar{d}_1, \bar{d}_2)}{t} = \lim_{t \to 0^+} \frac{g(\bar{\theta}+t) - g(\bar{\theta})}{t} = \lim_{t \to 0^+} \frac{2\cos(\bar{\theta}+t)}{t} \overset{\text{Hôpital}}{=} \lim_{t \to 0^+} -2\sin(\bar{\theta}+t) = -$$

$$\lim_{t \to 0^-} \frac{f(\bar{\eta}, \bar{\theta}+t, \bar{d}_1, \bar{d}_2) - f(\bar{\eta}, \bar{\theta}, \bar{d}_1, \bar{d}_2)}{t} = \lim_{t \to 0^-} \frac{g(\bar{\theta}+t) - g(\bar{\theta})}{t} = \lim_{t \to 0^-} \frac{-\cos(\bar{\theta}+t)}{t} = \lim_{t \to 0^-} \sin(\bar{\theta}+t) = 1$$

Localizzazione di servizi ("facility location")

Scegliere il luogo $x \in \mathbb{R}^n$ dove dislocare una "attività" che serva k luoghi $q_1, q_2, \dots, q_k \in \mathbb{R}^n$ prefissati nel "miglior modo possibile" (ad esempio, la dislocazione di una antenna il cui segnale raggiunga i punti dati con la "migliore" intensità)



Applicazioni: logistica, selezione di parametri in statistica, errori di misurazione, disegno di reti

Possibili funzioni obiettivo da minimizzare:

$$f_1(x) = \sum_{i=1}^{k} \|q_i - x\|_2$$ pb di Weber ($n=2, k=3 \to$ punto di Fermat $\to$ albero di Steiner)

$$f_2(x) = \sum_{i=1}^{k} \|q_i - x\|_2^2$$ pb del centroide di $q_1, q_2, \dots, q_k$

$$f_3(x) = \max \{ \|q_i - x\|_2^2 : i=1,\dots,k \}$$ pb del centro di Chebyshev (centro della palla chiusa di raggio minimo che contiene tutti i punti $q_1, q_2, \dots, q_k$)

f_1, f_2, f_3 sono funzioni convesse, ma

$x \longmapsto \|q_i - x\|_2$ non è differenziabile in $x = q_i$ (e quindi f_1 non è differenziabile nei punti $q_1, q_2, \dots, q_k$)

f_3 può essere non differenziabile in quei punti $x \in \mathbb{R}^n$ per cui esistono $\bar{i} \neq \bar{j}$ tali che

$$\max_{i=1..k} \{ \|q_i - x\|_2^2 \} = \|q_{\bar{i}} - x\|_2^2 = \|q_{\bar{j}} - x\|_2^2$$ (esempio: $n=1$, $\max\{x^2, (x-2)^2\}$ per $x=1$)

Il problema del centroide può essere risolto esplicitamente:

$$\nabla f_2(x) = 2 \sum_{i=1}^{k} (q_i - x)$$

$$\nabla f_2(\bar{x}) = 0 \iff \bar{x} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} x_i \leftarrow \text{centroide}$$

Introduzione di "pesi" nella funzione obiettivo

$$\hat{f}_1(x) = \sum_{i=1}^{k} m_i \|q_i - x\|_2$$

$$m_i \geq 0$$

$$\hat{f}_2(x) = \sum_{i=1}^{k} m_i \|q_i - x\|_2^2$$

Applicazioni: in demografia, con m_i la popolazione del luogo i, per individuare il "centro di una popolazione"

$\hat{f}_1 \to$ "media geometrica" $\to$ punto di Fermat $\equiv$ punto/luogo di tempo aggregato di viaggio minimo

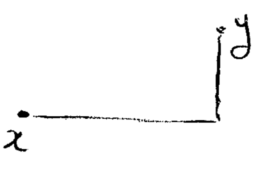
$\hat{f}_2 \to$ centroide: $\nabla \hat{f}_2(x) = 2 \sum_{i=1}^{k} m_i (q_i - x)$

$$\nabla \hat{f}_2(\bar{x}) = 0 \iff \bar{x} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{k} m_i} \sum_{i=1}^{k} m_i q_i$$

(individua anche il centro di massa di K punti materiali i di massa m_i e coordinate q_i)

È possibile considerare norme diverse da quella euclidea, in particolare $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$ che dà origine alla distanza "Manhattan" $d_M(x,y) = \|x-y\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i - y_i|$

(che considera "spostamenti" ortogonali nel misurare la distanza)



Altri problemi di localizzazione contemplano la dislocazione di più "attività di servizio".

Metodi per l'ottimizzazione non vincolata

$$(P) \quad \min\{ f(x) : x \in \mathbb{R}^n \} \qquad (f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R})$$

METODI ITERATIVI

$$x^0, x^1, x^2, \dots, x^k, \dots\dots$$

Ricerca dei punti stazionari: $\nabla f(x^*) = 0$ (ipotesi minimale: f diff.)

Convergenza
- $\exists \bar{k}$ t.c. $\nabla f(x^{\bar{k}}) = 0$ (FINITEZZA)
- $\exists \lim x^k = x^*$ e $\nabla f(x^*) = 0$
- Tutti i punti di accumulazione di $\{x^k\}$ sono stazionari
- Almeno un punto di accumulazione di $\{x^k\}$ è stazionario

- DI DISCESA: $f(x^0) > f(x^1) > f(x^2) > \dots > f(x^k) > \dots\dots$

$$[\ f(x^{k+1}) < f(x^k)\ ]$$

("discesa non monotona": $\exists m \in \mathbb{N}$ t.c. $f(x^{k+m}) < f(x^k)$)

- DI RICERCA MONODIMENSIONALE ('line search'):

$$x^{k+1} = x^k + \underbrace{t_k}_{\text{passo di spostamento}} \overbrace{d^k}^{\text{direzione di spostamento}} \qquad (t_k \in \mathbb{R},\ d^k \in \mathbb{R}^n)$$

Come scegliere t_k e d^k in modo t.c. il metodo sia di discesa?

$\bar{x}$ punto non stazionario, cioè $\nabla f(\bar{x}) \neq 0$

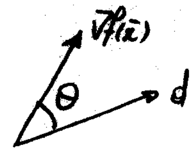
$$f(\bar{x}+td) - f(\bar{x}) = t\,\nabla f(\bar{x})^T d + r(td) \qquad \lim_{t \to 0} \frac{f(\bar{x}+td) - f(\bar{x})}{t} = \nabla f(\bar{x})^T d$$

se $\nabla f(\bar{x})^T d < 0$, allora $f(\bar{x}+td) < f(\bar{x})$ se t è suff.nte piccolo

Per rendere (asintoticamente) massima la decrescita, conviene scegliere $d \in \mathbb{R}^n$ tale che $\nabla f(\bar{x})^T d$ sia minimo:

$$(P_d) \qquad \min \{ \nabla f(\bar{x})^T d \ : \ \|d\|_2 = 1 \}$$

Il vincolo $\|d\|_2 = 1$ è fondamentale, altrimenti $\nabla f(\bar{x})^T d < 0 \Rightarrow \nabla f(\bar{x})^T (td) \xrightarrow[t \to +\infty]{} -\infty$



$\nabla f(\bar{x})^T d = \| \nabla f(\bar{x}) \|_2 \, \|d\|_2 \cos\theta$, dove θ è l'angolo compreso tra $\nabla f(\bar{x})$ e d (nota: per f e $\bar{x}$ fissati, $\theta = \theta(d)$)

$\nabla f(\bar{x})^T d = \| \nabla f(\bar{x}) \|_2 \, \|d\|_2 \cos\theta = \| \nabla f(\bar{x}) \|_2 \cos\theta \ \rightarrow$ (P_d) può essere riscritto nella forma $\quad \| \nabla f(\bar{x}) \|_2 \min \{ \cos\theta \ : \ \|d\|_2 = 1 \}$, il cui minimo si ottiene quando $\cos\theta = -1$, ovvero per $\theta = \pi \ \rightarrow$ da cui $\bar{d} = -\nabla f(\bar{x}) / \|\nabla f(\bar{x})\|$

["il gradiente è la direzione di massima crescita" / "l'opposto del gradiente è la direzione di massima decrescita"]

METODO DEL GRADIENTE

ipotesi: f differenziabile con continuità

$$d^k = -\nabla f(x^k) \quad \rightsquigarrow \quad x^{k+1} = x^k - t_k \nabla f(x^k)$$

Scelta (ideale) per il passo di spostamento

$$t_k \in \arg\min \{ f(x^k - t \nabla f(x^k)) \ : \ t \geq 0 \} \qquad \textbf{RICERCA ESATTA}$$

$$\left(\text{ovvero } f(x^{k+1}) \leq f(x^k - t \nabla f(x^k)) \quad \forall t \geq 0 \right)$$

(in un generico algoritmo 'line search': $t_k \in \arg\min \{ f(x^k + t d^k) : t \geq 0 \}$)

METODO DEL GRADIENTE ESATTO (più estesamente: "con ricerca esatta")

1) Scegliere $x^0 \in \mathbb{R}^n$; $k=0$
2) Se $\nabla f(x^k)=0$, allora STOP
3) Calcolare $t_k \in \operatorname{argmin}\{f(x^k - t\nabla f(x^k)) : t \geq 0\}$
4) $x^{k+1} = x^k - t_k \nabla f(x^k)$
5) $k=k+1$ e ritornare a 2)

Prop 1 Il metodo del gradiente esatto è un metodo di discesa

dim $\varphi(t) := f(x^k - t\nabla f(x^k))$

$f(x^k) = \varphi(0) \geq \varphi(t_k) = f(x^{k+1})$ [per def. di t_k]

Supponiamo $\varphi(0) = \varphi(t_k)$: $t=0$ punto di minimo di φ su $t \geq 0$

φ è derivabile con continuità

$\varphi'(t) = \nabla f(x^k - t\nabla f(x^k))^T(-\nabla f(x^k))$ [*]

$\varphi'(0) = -\|\nabla f(x^k)\|_2^2 < 0$ (a meno che x^k non sia stazionario)

quindi φ è localmente decrescente in 0 : $\varphi(t) < \varphi(0)$ $\forall t \in [0,\bar{t})$ contraddizione

Pertanto $\varphi(0) > \varphi(t_k)$ e quindi $f(x^k) > f(x^{k+1})$ ■

Prop 2 Due direzioni successive del metodo del gradiente esatto sono ortogonali, ovvero $\nabla f(x^{k+1})^T \nabla f(x^k) = 0$

dim $0 = \varphi'(t_k) = \nabla f(x^{k+1})^T \nabla f(x^k)$ ■

[*] $\phi: \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$ derivabile in $\bar{t} \in \mathbb{R}$, $g: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ diff.bile in $\phi(\bar{t}) \in \mathbb{R}^n$ $\Rightarrow$ $g \circ \phi$ differenziabile in $\bar{t}$ e $(g\circ\phi)'(\bar{t}) = \nabla g(\phi(\bar{t}))^T \dot{\phi}(\bar{t})$ (dove $\dot{\phi} = (\phi_1', \dots, \phi_n')$, $\phi = (\phi_1, \dots, \phi_n)$, $\phi_i : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$)

Teorema (convergenza) Supponiamo che $\lim_{k\to+\infty} x^k = x^* \in \mathbb{R}^n$. Allora $\nabla f(x^*) = 0$

dim $0 = \nabla f(x^{k+1})^T \nabla f(x^k) \xrightarrow[k\to+\infty]{} \nabla f(x^*)^T \nabla f(x^*) = \|\nabla f(x)\|_2^2$

Quindi $\|\nabla f(x^*)\|_2 = 0$, da cui $\nabla f(x^*) = 0$ ∎

È possibile dimostrare che ogni punto di accumulazione di $\{x^k\}$ è stazionario.

La ricerca esatta nel caso quadratico

$f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x + b^T x + c$, $Q = Q^T \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$, $c \in \mathbb{R}$

$\nabla f(x) = Qx + b$.

Possiamo supporre che Q sia semidefinita positiva. Infatti, in caso contrario $\exists \bar{x} \in \mathbb{R}^n$ t.c. $\bar{x}^T Q \bar{x} < 0$ e $f(t\bar{x}) = \frac{1}{2} t^2 (\bar{x}^T Q \bar{x}) + t\, b^T \bar{x} + c \xrightarrow[t\to+\infty]{} -\infty$.

$\varphi(t) = f(x - t\nabla f(x))$, $\varphi'(t) = -\nabla f(x - t\nabla f(x))^T \nabla f(x) =$

(parabola se $\nabla f(x)^T Q \nabla f(x) > 0$)

$$= -[Q(x - t\nabla f(x)) + b]^T \nabla f(x) =$$
$$= -[Qx - tQ\nabla f(x) + b]^T \nabla f(x) =$$
$$= -[\nabla f(x) - t\, Q\nabla f(x)]^T \nabla f(x) =$$
$$= -\nabla f(x)^T \nabla f(x) + t\, \nabla f(x)^T Q \nabla f(x)$$

$\varphi'(t) = 0 \iff t = \nabla f(x)^T \nabla f(x) / (\nabla f(x)^T Q \nabla f(x))$ se $\nabla f(x)^T Q \nabla f(x) > 0$

(sempre ok se Q definita positiva)

se invece $\nabla f(x)^T Q \nabla f(x) = 0$, allora

$\varphi'(t) \equiv -\nabla f(x)^T \nabla f(x) = -\|\nabla f(x)\|_2^2 < 0$ da cui

$f(x - t\nabla f(x)) = \varphi(t) = -\|\nabla f(x)\|_2^2\, t + \text{cost.} \xrightarrow[t\to+\infty]{} -\infty$: f inf.nte illimitata

Criticità del metodo del gradiente esatto

- Gli spostamenti sono ortogonali tra loro: crea "rigidità" negli spostamenti quando si è vicini ad un punto stazionario ⤳ passi brevi e tante iterazioni

(Es: $f(x_1, x_2) = x_1^2 + 5x_2^2$)

La ricerca esatta nel caso quadratico (cont.)

Se Q è semidefinita positiva ma non definita positiva, non è detto che f sia inferiormente illimitata. Ad esempio se $b \equiv 0$, allora

$$\min \{ f(x) : x \in \mathbb{R}^n \} = c \quad \text{e} \quad \bar{x} = 0 \text{ è un punto di minimo.}$$

Più in generale, f ammette [un punto di] minimo (globale) se e solo se tutti gli autovettori relativi all'autovalore nullo di Q sono ortogonali al vettore b, ovvero $Qx = 0 \Rightarrow b^T x = 0$.

Esempio: $Q = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}$, $b = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$, $c = 0$

Gli autovalori di Q sono $\lambda_{max} = 5$ e $\lambda_{min} = 0$ e i relativi autovettori sono $\bar{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$ e $\hat{x} = \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \end{bmatrix}$. Nota $b^T \hat{x} = 0$

$$x \in \mathbb{R}^2 \rightarrow \quad x = \alpha \bar{x} + \beta \hat{x} \quad \text{con } \alpha, \beta \in \mathbb{R}$$

$$f(x) = f(\alpha \bar{x} + \beta \hat{x}) \underset{(Q\hat{x} = 0 \text{ e } b^T\hat{x} = 0)}{=} f(\alpha \bar{x}) = 25\alpha^2 + 5\alpha$$

$$\min \{ f(x) : x \in \mathbb{R}^2 \} = \min \{ 25\alpha^2 + 5\alpha : \alpha \in \mathbb{R} \} = -1/4$$

$\bar{\alpha} = -1/10$ punto di minimo

$$x = \bar{\alpha} \bar{x} = \begin{bmatrix} -1/10 \\ -1/5 \end{bmatrix} \text{ punto di minimo di } f$$

Algoritmo 'finito' per il caso quadratico strettamente convesso

$f(x) = \frac{1}{2}x^T Q x + b^T x + c \qquad Q = Q^T \in \mathbb{R}^{n\times n}$ definita positiva, $b \in \mathbb{R}^n$, $c \in \mathbb{R}$

Siano $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_{n-1} > 0$ gli autovalori di Q

$$\boxed{x^{k+1} = x^k - \frac{1}{\lambda_k}\nabla f(x^k)} \qquad k = 0, 1, \dots, n-1$$

L'algoritmo individua un punto stazionario (e quindi di minimo) in al più ~~n~~ passi.

Prop Esiste $j \leq n$ tale che $\nabla f(x^j) = 0$

dim Supponiamo $\nabla f(x^j) \neq 0$ per ogni $j < n$.

$$\nabla f(x^n) = Qx^n + b = Qx^{n-1} - \frac{1}{\lambda_{n-1}}Q\nabla f(x^{n-1}) + b = \nabla f(x^{n-1}) - \frac{1}{\lambda_{n-1}}Q\nabla f(x^{n-1}) =$$

$$= \left(I - \frac{1}{\lambda_{n-1}}Q\right)\nabla f(x^{n-1}).$$

Iterando il procedimento $(n-1)$ volte si ottiene: $\nabla f(x^n) = \prod_{j=0}^{n-1}\left(I - \frac{1}{\lambda_j}Q\right)\nabla f(x^0)$

Siano $u_0, u_1, \dots, u_{n-1} \in \mathbb{R}^n$ autovettori relativi a $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_{n-1}$ $(Qu_i = \lambda u_i)$ tali da costituire una base di $\mathbb{R}^n$. Allora $\nabla f(x^0) = \sum_{i=0}^{n-1}\alpha_i u_i$ per opportuni $\alpha_i \in \mathbb{R}$. Quindi:

$$\nabla f(x^n) = \left[\prod_{j=0}^{n-1}\left(I - \frac{1}{\lambda_j}Q\right)\right]\sum_{i=0}^{n-1}\alpha_i u_i = \sum_{i=0}^{n-1}\alpha_i\left(\prod_{j=0}^{n-1}\left(I - \frac{1}{\lambda_j}Q\right)u_i\right) =$$

$$= \sum_{i=0}^{n-1}\alpha_i\left[\underbrace{\prod_{j=0}^{n-1}\left(1 - \frac{1}{\lambda_j}\lambda_i\right)}_{=0}\right]u_i = 0$$

$j = i$

■

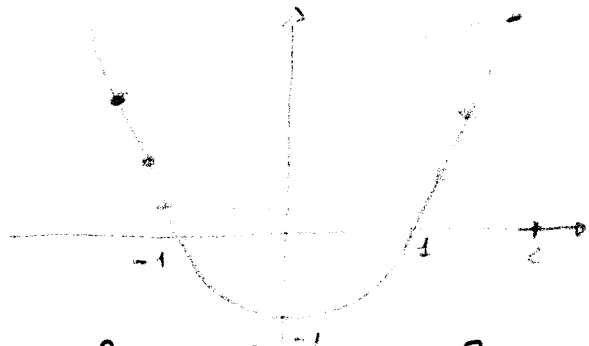
- La 'ricerca esatta' è computazionalmente onerosa: è un problema essa stessa di ottimizzazione ma monodimensionale $\leftarrow$ algoritmi richiedono criteri di STOP approx.
- La 'ricerca esatta' può condurre a passi molto brevi se la funzione ha curve di livello particolarmente "schiacciate" vicino ai punti stazionari (tipo la fz. "banana" di Rosenbrock $f(x_1,x_2)=100(x_2-x_1^2)^2+(1-x_1)^2$)

Possibili Direzioni di Discesa

$$d^k = -D_k \nabla f(x^k) \qquad \text{con } D_k \in \mathbb{R}^{n\times n} \text{ definita positiva}$$

(d^k è una direzione di discesa: $\nabla f(x^k)^T d^k = -\nabla f(x^k)^T D_k \nabla f(x^k) < 0$)

Garantire che il metodo sia di discesa può non essere sufficiente:



$n=1$, $f(x)=x^2-1$

$x^k = (-1)^k[2-k/(k+1)]$, $d^k = (-1)^{k+1}$

$f(x^k) = [2-k/(k+1)]^2 - 1 \xrightarrow[k\to+\infty]{} 1$

$f(x^{k+1}) < f(x^k)$ ma $x^{2k+1} \to -1$, $x^{2k} \to 1$ e $f(-1)=f(1)=0 > f(0)=-1$

Possibili Scelte per il Passo

1) Ricerca esatta: $t_k^{min} \in \arg\min\{f(x^k+td^k) : t \geq 0\}$
2) Minimizzazione limitata: $t_k \in \arg\min\{f(x^k+td^k) : t\in[0,T]\}$, $T>0$ fissato
3) Costante: $t_k = \bar{t}$ per qualche $\bar{t}>0$
4) Passi decrescenti: $t_k \downarrow 0$ con $\sum_{k=0}^{\infty} t_k = +\infty$ (ad es. $t_k = 1/k$)

Versioni approssimate di 1) $\rightsquigarrow$ RICERCA INESATTA

Siano $x^k \in \mathbb{R}^n$ e $d^k \in \mathbb{R}^n$ t.c. $\nabla f(x^k)^T d^k < 0$

Sia $\varphi(t) = f(x^k + t d^k)$: $\varphi'(t) = \nabla f(x^k + t d^k)^T d^k$

Per forzare la diminuzione del valore di f a partire da x^k lungo d^k (ovvero del valore di $\varphi(t)$) ad essere di una certa consistenza, si può imporre la CONDIZIONE DI ARMIJO:

$$\text{(AJO)} \quad f(x^k + t d^k) \leq f(x^k) + c_1 t \nabla f(x^k)^T d^k \qquad c_1 \in (0,1) \text{ fissato}$$

- Se f è inf.nte limitata, (AJO) impedisce il caso $t \to +\infty$ (altrimenti si avrebbe $f(x^k + t d^k) \xrightarrow[t \to +\infty]{} -\infty$ in quanto $\nabla f(x^k)^T d^k < 0$).
- Poiche' $\lim_{t \to 0} (f(x^k + t d^k) - f(x^k))/t = \varphi'(0) = \nabla f(x^k)^T d^k < 0$, dalla def. di limite segue che $\exists \bar{t}$ per cui (AJO) vale per ogni $t \in [0, \bar{t}]$ (si noti che $\nabla f(x^k)^T d^k < 0$ garantisce $\nabla f(x^k)^T d^k < c_1 \nabla f(x^k)^T d^k$)

Per evitare che il passo di spostamento sia eccessivamente piccolo (ciò è ammissibile per (AJO)), si può richiedere che $\varphi'(t)$ differisca sufficientemente da $\varphi'(0)$:

$$\text{(CUR)} \quad \nabla f(x^k + t d^k)^T d^k \geq c_2 \nabla f(x^k)^T d^k \qquad c_2 \in (c_1, 1) \text{ fissato}$$

Infatti $t \approx 0 \Rightarrow \nabla f(x^k + t d^k) \approx \nabla f(x^k)$ e quindi $\varphi'(t) = \nabla f(x^k + t d^k)^T d^k \approx \varphi'(0) = \nabla f(x^k)^T d^k$

Questa coppia di condizioni è nota come CONDIZIONI DI WOLFE:

$$\text{(AJO)} \quad f(x^k + t_k d^k) \leq f(x^k) + c_1 t_k \nabla f(x^k)^T d^k \qquad c_1 \in (0,1) \text{ fissato}$$

$$\text{(CUR)} \quad \nabla f(x^k + t d^k)^T d^k \geq c_2 \nabla f(x^k)^T d^k \qquad c_2 \in (c_1, 1) \text{ fissato}$$

<u>Oss</u>: il passo fornito dalla ricerca esatta verifica le condizioni di Wolfe (CUR)

$\varphi'(t_k^{min}) = 0$ e $\varphi'(0) < 0 \Rightarrow$ (CUR)

Sia t suff.nte piccolo da soddisfare (AJO): $f(x^k + t_k^{min} d^k) = \varphi(t_k^{min}) \leq \varphi(t) =$

(t_k^{min} p.to di minimo)

$= f(x^k + t d^k) \leq f(x^k) + c_1 t_* \nabla f(x^k)^T d^k$ [redacted]

(t soddisfa (AJO)) ma ciò non garantisce (AJO) per t_k^{min} (accade nella "pratica")

<u>Prop</u> Supponiamo che f sia inf. nte limitata. Allora esiste un intervallo (a,b) per cui entrambe le condizioni di Wolfe valgano per ogni $t \in (a,b)$.

<u>dim</u> Sia $\tau_1 := \sup \{ \tau \mid \text{(AJO) vale per ogni } t \in [0,\tau] \}$: $\tau_1 > 0$

f inf. nte limitata $\Rightarrow \tau_1 < +\infty$. Per il teo (valor medio) $\exists\, \tau_2 \in (0, \tau_1)$

t.c. $f(x^k + \tau_1 d^k) - f(x^k) = \tau_1 \nabla f(x^k + \tau_2 d^k)^T d^k$

Inoltre $f(x^k + \tau_1 d^k) - f(x^k) = c_1 \tau_1 \nabla f(x^k)^T d^k$ (se fosse $<$, per la permanenza del segno τ_1 non sarebbe il max dell'insieme). Quindi:

$$\nabla f(x^k + \tau_2 d^k)^T d^k = c_1 \nabla f(x^k)^T d^k > c_2 \nabla f(x^k)^T d^k \quad (c_2 > c_1 \text{ e } \nabla f(x^k)^T d^k < 0)$$

Poiché ∇f è continua, la disuguaglianza vale in un intorno I_1 di τ_2

$\tau_2 \in [0, \tau_1) \Rightarrow$ (AJO) vale in un intorno I_2 di τ_2

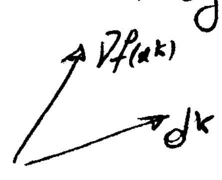
$\rightarrow I_1 \cap I_2$ è l'intervallo cercato ∎

METODI DEL 'GRADIENTE' CON RICERCA INESATTA

1) Scegliere $x^0 \in \mathbb{R}^n$; $k=0$
2) Se $\nabla f(x^k) = 0$, allora STOP
3) Scegliere $d^k \in \mathbb{R}^n$ tale che $\nabla f(x^k)^T d^k < 0$
4) Calcolare $t_k > 0$ che soddisfa (AJO) e (CUR) (condizioni di Wolfe)
5) $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$
6) $k = k+1$ e ritornare a 2)

3) + (AJO) $\Downarrow$ metodo di discesa

Siano $\{x^k\}$, $\{t_k\}$ e $\{d^k\}$ le successioni generate dall'algoritmo e sia θ_k l'angolo compreso tra $\nabla f(x^k)$ e d^k:



$$\nabla f(x^k)^T d^k = \|\nabla f(x^k)\|_2 \, \|d^k\|_2 \cos\theta_k$$

Lemma Supponiamo che

- f sia inf.nte limitata ($\exists M \in \mathbb{R}$ t.c. $f(x) \geq M \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$)
- ∇f sia Lipschitziana, ovvero $\exists L > 0$ tale che

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\|_2 \leq L \|x - y\|_2 \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n$$

Allora $\displaystyle\sum_{k=0}^{\infty} \cos^2\theta_k \|\nabla f(x^k)\|_2^2 < +\infty$.

dim Sottraendo $-\nabla f(x^k)^T d^k$ ad entrambi i membri di (CuR) si ottiene la disuguaglianza $(\nabla f(x^k + t_k d^k) - \nabla f(x^k))^T d_k \geq (c_2 - 1)\nabla f(x^k)^T d^k$.

$$(c_2 - 1)\nabla f(x^k)^T d^k = (c_2 - 1)\|\nabla f(x^k)\|_2 \|d^k\|_2 \cos\theta_k$$

$$\wedge\!|$$

$$(\nabla f(x^k + t_k d^k) - \nabla f(x^k))^T d^k \underset{\text{(dis. Schwarz)}}{\leq} \|\nabla f(x^k + t_k d^k) - \nabla f(x^k)\|_2 \|d^k\|_2 \underset{(\nabla f \text{ Lipschitziana})}{\leq} L\, t_k \|d^k\|_2^2$$

da cui $\displaystyle t_k \geq \frac{(c_2 - 1)}{L} \frac{\|\nabla f(x^k)\|_2}{\|d^k\|_2} \cos\theta_k > 0$ ($\cos\theta_k < 0$ e $c_2 < 1$)

Posti $f_{k+1} = f(x^k + t_k d^k)$ e $f_k = f(x^k)$, la condizione (AJO) si riscrive come

$$f_{k+1} \leq f_k + c_1 t_k \nabla f(x^k)^T d^k = f_k + c_1 t_k \underbrace{\|\nabla f(x^k)\|_2 \|d^k\|_2 \cos\theta_k}_{(<0 \text{ e })} \leq$$

$$\leq f_k - \underbrace{\boxed{c_1 \frac{(1 - c_2)}{L}}}_{c\,>\,0} \|\nabla f(x^k)\|_2^2 \cos^2\theta_k \longrightarrow f_{k+1} \leq f_k - c \|\nabla f(x^k)\|_2^2 \cos^2\theta_k$$

Iterando a ritroso la disuguaglianza si ottiene: $\displaystyle f_{k+1} \leq f_0 - c \sum_{j=0}^{k} \|\nabla f(x^j)\|_2^2 \cos^2\theta_j$

Quindi $\displaystyle\sum_{j=0}^{k} \|\nabla f(x^j)\|_2^2 \cos^2\theta_j \leq (f_0 - f_{k+1})/c \leq \underbrace{(f_0 - M)/c}_{\text{costante}}$

Per $k \to +\infty$ si ottiene $\displaystyle\sum_{j=0}^{\infty} \|\nabla f(x^j)\|_2^2 \cos^2\theta_j \leq (f_0 - M)/c < +\infty$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \|\nabla f(x^k)\|_2^2 \cos^2\theta_k < +\infty \implies \|\nabla f(x^k)\|_2^2 \cos\theta_k \xrightarrow[k\to+\infty]{} 0$$

Teorema (convergenza) Supponiamo che

- f sia inf.nte limitata
- ∇f sia Lipschitziana
- $\exists\, \delta > 0$ tale che $\cos\theta_k \leq -\delta \quad \forall k$

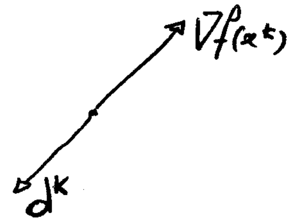
(equivalentemente: $\exists\, \sigma \in (0, \pi/2]$ t.c. $\theta_k \geq \pi/2 + \sigma$).

Allora ogni punto di accumulazione di $\{x^k\}$ è un punto stazionario.

dim Sia x^* un punto di accumulazione: $\exists \{x^{k_j}\}_j$ sottosuccessione t.c. $x^{k_j} \to x^*$

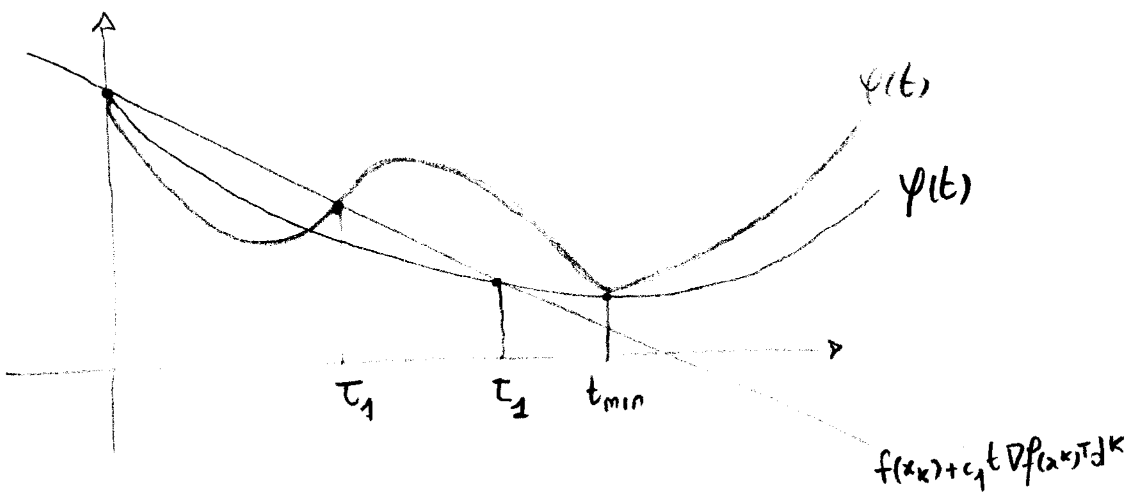
$$0 \xleftarrow[j\to+\infty]{} \cos^2\theta_{k_j} \|\nabla f(x^{k_j})\|_2^2 \geq \delta^2 \|\nabla f(x^{k_j})\|_2^2 \geq 0$$

da cui $\|\nabla f(x^*)\|_2 = \lim_{j\to+\infty} \|\nabla f(x^{k_j})\|_2 = 0$, ovvero $\nabla f(x^*) = 0$ ■



Nota: $d^k = -\nabla f(x^k) \implies \cos\theta_k \equiv -1 \quad (\theta_k = \pi)$

Esempi in cui la ricerca esatta non soddisfa (AJO)



IL METODO DI NEWTON

Metodo di Newton-Raphson per risolvere il sistema di equazioni

$$F(x) = 0 \qquad \text{con} \qquad F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$$

$$x^{k+1} = x^k - [JF(x^k)]^{-1} F(x^k)$$

dove $JF(x^k)$ è la matrice jacobiana di F in x^k.

<u>Teorema</u> (NR) Supponiamo che F sia differenziabile 2 volte (con continuità) e sia $x^* \in \mathbb{R}^n$ tale che $F(x^*) = 0$. Se $JF(x^*)$ è invertibile, allora $\exists \delta > 0$ tale che per ogni $x^0 \in B(x^*, \delta)$, $x^k \to x^*$ ed inoltre esiste $M > 0$ t.c.

$$\|x^{k+1} - x^*\|_2 \le M \|x^k - x^*\|_2^2 .$$

<u>Oss</u> Per la continuità di $JF : x \mapsto JF(x)$ e della fz. determinante, $JF(x^*)$ invertibile ($\det JF(x^*) \neq 0$) $\Rightarrow$ $JF(x)$ è invertibile ($\det JF(x) \neq 0$) in un intorno di x^*.

(P) $\{\min f(x) : x \in \mathbb{R}^n\}$ $\to$ applicare Newton-Raphson a $F = \nabla f$ per trovare punti stazionari di f: $\quad J(\nabla f)(x) = \nabla^2 f(x)$.

$d^k = -[\nabla^2 f(x^k)]^{-1} \nabla f(x^k)$ è una direzione di discesa se $\nabla^2 f(x^k)$ è definita positiva ma non in generale: Newton non è necessariamente un metodo di discesa e può convergere a punti stazionari, che siano punti di massimo.

<u>Nota</u>: se $\nabla^2 f(x)$ è definita positiva per ogni x, allora f è strettamente convessa.

Per garantire la discesa, si possono rafforzare le ipotesi: invertibile $\rightsquigarrow$ definita positiva

$\nabla^2 f(x^*)$ definita positiva $\Rightarrow$ $\nabla^2 f(x)$ definita positiva per ogni x in un intorno di x^*.

(continuità di $\nabla^2 f$ richiesta)

Se $x^k \to x^*$, allora x^k appartiene definitivamente a tale intorno, e quindi d^k è una direzione di decrescita per k sufficientemente grande (metodo definitivamente di discesa)

Teorema Supponiamo che f sia differenziabile 3 volte con continuità e sia $x^* \in \mathbb{R}$ un punto stazionario ($\nabla f(x^*)=0$) per cui $\nabla^2 f(x^*)$ è definita positiva. Allora $\exists \delta > 0$ tale che per ogni $x^0 \in B(x^*,\delta)$, $x^k \to x^*$ ed inoltre $\exists M > 0$ tale che

$$\| x^{k+1} - x^* \|_2 \leq M \, \| x^k - x^* \|_2^2$$

$$\left(x^{k+1} = x^k - [\nabla^2 f(x^k)]^{-1} \nabla f(x^k) \right)$$

Oss le ipotesi su x^* garantiscono che sia un punto di minimo locale

Nota 1: il metodo è di natura locale: la convergenza è garantita, ma esclusivamente se il punto di partenza x^0 è sufficientemente vicino a x^*; altrimenti il metodo potrebbe non convergere o convergere ad un punto di max locale.

Nota 2: il passo $t_k \equiv 1$ (si possono comunque applicare anche 'ricerche monodim' (line search))

Nota 3: Ad ogni iterazione è richiesto il calcolo della matrice hessiana $\nabla^2 f(x^k)$ e della sua inversa $\leftarrow$ computazionalmente oneroso $\rightsquigarrow$ metodi quasi-Newton: non $\nabla^2 f(x^k)$ ma una sua approssimazione, aggiornata iterazione per iterazione tramite formule che utilizzano il risultato dell'iterazione collegando le derivate seconde alla variazione del gradiente.

Altro punto di vista per la derivazione del metodo di Newton

$$f(x+d) \approx f(x) + \nabla f(x)^T d \rightsquigarrow d = -\nabla f(x) \quad (\to \text{sviluppo I ordine} \rightsquigarrow \text{metodo del gradiente})$$

Sviluppo II ordine: $f(x+d) \approx f(x) + \nabla f(x)^T d + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(x) d = m_2(d)$

$\nabla^2 f(x)$ semidefinita positiva $\Rightarrow m_2(d)$ convessa

$\nabla m_2(d) = \nabla f(x) + \nabla^2 f(x) d$; $\quad \nabla^2 f(x)$ definita positiva (invertibile) $\Rightarrow \left(\nabla m_2(d) = 0 \Leftrightarrow d = -[\nabla^2 f(x)]^{-1} \nabla f(x) \right)$

La direzione di Newton $-[\nabla^2 f(x)]^{-1} \nabla f(x)$ minimizza $m_2(d)$ se $\nabla^2 f(x)$ def. positiva.

Sviluppo I° ordine con resto esatto: $f(x+d) = f(x) + \nabla f(x)^T d + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(x+\tau d) d \qquad \tau \in (0,1)$ opp.

$m_2(d)$ sostituisce $\nabla^2 f(x+\tau d)$ con $\nabla^2 f(x)$: l'approssimazione è "accurata" per $\|d\| \ll 1$.

Se f è una funzione quadratica, allora $f \equiv m_2$ ed il metodo di Newton termina in una unica iterazione.

Verifica ulteriore: $f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x + b^T x$ con $Q = Q^T$ definita positiva.

$$f(x+d) = \frac{1}{2}(x+d)^T Q (x+d) + b^T(x+d) = \frac{1}{2} x^T Q x + b^T x + x^T Q d + b^T d + \frac{1}{2} d^T Q d$$

$$= \frac{1}{2} x^T Q x + b^T x + (Qx+b)^T d + \frac{1}{2} d^T Q d = f(x) + \nabla f(x)^T d + \frac{1}{2} d^T Q d = m_2(d)$$

$\nabla f(x) = Qx + b$, $\nabla^2 f(x) = Q$ $\quad (\rightarrow \nabla f(x) = 0 \leftrightarrow Qx = -b \leftrightarrow x = -Q^{-1} b)$.

$x^1 = x^0 - Q^{-1}(Qx^0 + b) = x^0 - x^0 - Q^{-1} b = -Q^{-1} b$ quale che sia $x^0 \in \mathbb{R}^n$

Nota 4: il teorema fornisce anche un risultato sulla VELOCITÀ DI CONVERGENZA:

$\|x^{k+1} - x^*\|_2 \le M \|x^k - x^*\|_2^2 \rightarrow$ il metodo di Newton ha convergenza superlineare di ordine 2

Ricorda: sia $x^k \rightarrow x^*$, con $x^k \ne x^*$ $\forall k$, e sia $p \ge 1$.

$$\lim_{k \to +\infty} (\sup) \frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|_2^p} = \gamma$$

- $p = 1$, $\gamma \in (0,1)$ convergenza lineare
- $p = 1$, $\gamma = 1$ convergenza sublineare
- $p > 1$ convergenza superlineare di ordine p

$\|x^{k+1} - x^*\|_2 \le \beta \|x^k - x^*\|_2^p$ con $\beta \in (0,1)$ $\rightarrow$ convergenza di ordine (almeno) p

VELOCITÀ DI CONVERGENZA DEL METODO DEL GRADIENTE ESATTO

Sia $\{x^k\}$ la successione generata dal metodo del gradiente esatto

Teo 1 Supponiamo che f sia differenziabile 2 volte con continuità, e che $x^k \rightarrow x^*$ con $\nabla^2 f(x^*)$ definita positiva. Allora

$$f(x^{k+1}) - f(x^*) \le \left[(\lambda_{max} - \lambda_{min})/(\lambda_{max} + \lambda_{min})\right]^2 (f(x^k) - f(x^*)),$$

dove $\lambda_{max} \ge \lambda_{min} > 0$ sono il più grande ed il più piccolo autovalore di $\nabla^2 f(x^*)$.

Teo 2 Supponiamo che f sia differenziabile con continuità e ∇f sia Lipschitziana, che f sia convessa e che l'insieme dei punti di minimo sia non vuoto e limitato. Allora

$$f(x^k) - \underbrace{f^*}_{\text{(valore ottimo)}} = o(1/k)$$

ovvero $\forall c > 0$ $\exists \bar{k}$ tale che $f(x^k) \le f^* + c/k$ $\forall k \ge \bar{k}$

I METODI DEL GRADIENTE CONIUGATO

- CASO LINEARE

Risolvere $Ax=b$ con $b\in\mathbb{R}^n$, $A=A^T\in\mathbb{R}^{n\times n}$ definita positiva tramite la minimizzazione della funzione quadratica convessa $f(x)=\frac{1}{2}x^TAx-b^Tx$ (in quanto risulta $\nabla f(x)=Ax-b$) modificando opportunamente la direzione di discesa del metodo del gradiente [esatto] ("coniugazione").

(HESTENES-STIEFEL 1952)

1) Scegliere $x^0\in\mathbb{R}^n$; $k=0$
2) Se $r_k=b-Ax_k=0$, allora STOP
3) $\beta_k=r_k^Tr_k/r_{k-1}^Tr_{k-1}$ se $k\geq 1$, $\beta_0=0$
4) $d_k=r_k+\beta_k d_{k-1}$ se $k\geq 1$, $d_0=r_0$ ⟵ coniugazione
5) $t_k=r_k^Tr_k/d_k^TAd_k$
6) $x_{k+1}=x_k+t_kd_k$
7) $k=k+1$ e ritornare a 2)

Oss $\boxed{r_k=-\nabla f(x_k)}$

Prop (i) $r_k^Tr_j=0$ $\quad j=0,1,\dots,k-1$ (ii) $d_k^TAd_{k-1}=0$ (iii) $r_k^Td_j=0$ $\quad j=0,1,\dots,k-1$

Oss (i) garantisce che il metodo è diretto: la convergenza si ottiene in max n iterazioni

La formula al passo 5) fornisce il passo di ricerca esatta, infatti se $\varphi_k(t)=f(x_k+td_k)$, risulta:

$$0=\varphi_k'(t_k)=\nabla f(x_k+t_kd_k)^Td_k=(Ax_k+t_kAd_k-b)^Td_k=$$

$$=(t_kAd_k-r_k)^Td_k=t_k\,d_k^TAd_k-r_k^Tr_k-\beta_k r_k^Td_{k-1}=t_k\,d_k^TAd_k-r_k^Tr_k$$

da cui $\quad 0=\varphi'(t_k) \iff t_k=r_k^Tr_k/d_k^TAd_k$

d_k è una direzione di discesa:

$$\nabla f(x_k)^T d_k = -r_k^T d_k = -r_k^T r_k - \beta_k r_k^T d_{k-1} = -r_k^T r_k < 0 \quad (\text{se } r_k \neq 0).$$

- <u>CASO NONLINEARE</u>

Applicare la tecnica di coniugazione per la minimizzazione di $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ non necessariamente quadratica (Fletcher-Reeves 1964)

<u>Idea base</u>: sostituire il residuo r^k con $-\nabla f(x^k)$

<u>Difficoltà</u>: non esiste una formula esplicita per la ricerca esatta, e nel caso di ricerca inesatta bisogna garantire che il metodo sia di discesa.

$$d^k = -\nabla f(x^k) + \beta_k d^{k-1} \quad : \quad \nabla f(x^k)^T d^k = -\|\nabla f(x^k)\|_2^2 + \beta_k \nabla f(x^k)^T d^{k-1}$$

Nel caso della ricerca esatta risulta $\nabla f(x^k)^T d^{k-1} = 0$ (infatti se $\varphi_{k-1}(t) = f(x^{k-1} + t d^{k-1})$, risulta $0 = \varphi_{k-1}'(t_{k-1}) = \nabla f(x^{k-1} + t_{k-1} d^{k-1})^T d^{k-1} = \nabla f(x^k)^T d^{k-1}$) e quindi il metodo è di discesa. Con la ricerca inesatta non c'è garanzia che $\nabla f(x^k)^T d^{k-1} \leq 0$. Ciò può essere ottenuto imponendo le <u>condizioni forti di Wolfe</u>:

$$(\text{AJO}) \qquad f(x^k + t d^k) \leq f(x^k) + c_1 t \nabla f(x^k)^T d^k$$

$$(\text{CUR1}) \qquad |\varphi_k'(t)| \leq c_2 |\varphi_k'(0)| \qquad\qquad (\varphi_k(t) = f(x^k + t d^k))$$

dove $0 < c_1 < c_2 < 1/2$. Nelle condizioni di Wolfe la condizione (AJO) è la medesima, mentre si richiede $c_2 < 1$ (invece di $c_2 < 1/2$) e la condizione di curvatura è

$$(\text{CUR}) \qquad \varphi_k'(t) \geq c_2 \varphi_k'(0).$$

Se d^k è una direzione di discesa, e quindi $\varphi_k'(0) = \nabla f(x^k)^T d^k < 0$, allora (CUR1) può essere riscritta come $-|\varphi_k'(t)| \geq -c_2 |\varphi_k'(0)| = c_2 \varphi_k'(0)$ e pertanto implica (CUR) essendo $\varphi_k'(t) \geq -|\varphi_k'(t)|$.

METODO DEL GRADIENTE CONIUGATO DI FLETCHER-REEVES

1) Scegliere $x^0 \in \mathbb{R}^n$; $k = 0$
2) Se $\nabla f(x^k) = 0$, allora STOP
3) $\beta_k = \nabla f(x^k)^T \nabla f(x^k) / \nabla f(x^{k-1})^T \nabla f(x^{k-1})$ se $k \geq 1$, $\beta_0 = 0$
4) $d^k = -\nabla f(x^k) + \beta_k d^{k-1}$ se $k \geq 1$, $d^0 = -\nabla f(x^0)$
5) Calcolare $t_k > 0$ che soddisfa (AJO) e (CUR1) (condizioni forti di Wolfe)
6) $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$
7) $k = k+1$ e ritornare a 2)

Ipotesi: f inferiormente limitata

Lemma Se i passi t_k soddisfano (CUR 1), allora il metodo genera direzioni d^k tali che

$$-\frac{1}{1-c_2} \leq \frac{\nabla f(x^k)^T d^k}{\|\nabla f(x^k)\|_2^2} \leq \frac{2c_2 - 1}{1-c_2}.$$

Oss $c_2 \in (0, \frac{1}{2})$ garantisce che $(2c_2 - 1)/(1-c_2) < 0$ (infatti $\ell(c) = (2c-1)/(1-c)$ è monotona crescente e $\ell(0) = -1$, $\ell(1/2) = 0$), quindi il metodo è di discesa e con dim analoga a quella di pagina 7 si può dimostrare che esiste un intervallo (a,b) in cui entrambe le condizioni (AJO) e (CUR1) valgono.

Supponendo che ∇f sia Lipschitziana, si può dimostrare $\sum_{k=0}^{\infty} \cos^2 \theta_k \|\nabla f(x^k)\|_2^2 < +\infty$ dove θ_k è l'angolo compreso tra $\nabla f(x^k)$ e $-d^k$ (opportuna modifica della dim. di pagina 8).

Teo (convergenza) Supponiamo che ∇f sia Lipschitziana. Allora $\liminf_{k \to +\infty} \|\nabla f(x^k)\|_2 = 0$

È una forma molto debole di convergenza: garantisce soltanto l'esistenza di una sottosuccessione $\{x^{k_j}\}_j$ tale che $\|\nabla f(x^{k_j})\|_2 \xrightarrow[j\to+\infty]{} 0$, mentre la sottosuccessione $\{x^{k_j}\}_j$ potrebbe non convergere. Ovviamente se $x^k \to x^*$, allora è un punto stazionario di f, ma se $x^{k_s} \xrightarrow[s\to+\infty]{} x^*$ per qualche sottosuccessione $\{x^{k_s}\}_s$ ma $x^k \not\to x^*$ (cioè x^* è un punto di accumulazione della successione ma non è l'unico) allora la stazionarietà di x^* non è garantita.

Nel metodo del gradiente (con ricerca esatta) risulta $\cos\theta_k = 1$ per ogni k, mentre nel metodo del gradiente coniugato (nonlineare) non è garantito che esista un qualche $\delta > 0$ per cui $\cos\theta_k \geq \delta$ per ogni k.

Esaminiamo il caso $\cos\theta_k \approx 0$:

$$0 \approx \cos\theta_k = -\frac{\nabla f(x^k)^T d^k}{\|\nabla f(x^k)\|_2 \|d^k\|_2} \overset{\text{lemma}}{\geqslant} \left(\frac{1-2c_2}{1-c_2}\right) \frac{\|\nabla f(x^k)\|_2}{\|d^k\|_2}$$

e quindi $\|\nabla f(x^k)\|_2 << \|d^k\|_2$. Inoltre $\cos\theta_k \approx 0$ rende molto probabile che si abbia $t_k \approx 0$ in quanto la direzione d^k è quasi ortogonale alla direzione di massima decrescita $-\nabla f(x^k)$: $t_k \approx 0 \Rightarrow x_{k+1} \approx x_k \Rightarrow \nabla f(x^{k+1}) \approx \nabla f(x^k)$

In questo caso abbiamo $\beta_{k+1} \approx 1$ e $\|\nabla f(x^{k+1})\|_2 \approx \|\nabla f(x^k)\|_2 << \|d^k\|_2$, e pertanto

$$d^{k+1} = -\nabla f(x^{k+1}) + \beta_{k+1} d^k \approx -\nabla f(x^{k+1}) + d^k \approx d^k$$

Quindi $\cos\theta_k \approx 0$ rende probabile che l'algoritmo produca una lunga sequenza di iterazioni poco utili

Tecnica di restart

Ogni $\bar{n}$ iterazioni porre $\beta_k = 0$, cioè effettuare un passo del metodo del gradiente con $d^k = -\nabla f(x^k)$. In questo modo si cancella la "memoria" delle direzioni precedenti (da cui "restart")

Oss Sia $\{x^{\bar{n}j}\}_j$ la sottosuccessione fornita da queste iterazioni. Poiche' $\cos^2\theta_{\bar{n}j} = 1$, risulta $\sum_{j=0}^{\infty} \|\nabla f(x^{\bar{n}j})\|_2^2 < +\infty$ e quindi $\|\nabla f(x^{\bar{n}j})\|_2 \xrightarrow[j\to+\infty]{} 0$

(analogamente nel caso in cui il "restart" non viene eseguito dopo un numero prefissato e costante di iterazioni --- in genere $\bar{n} \approx n$).

Variante di Polak-Ribiere (1969)

Nel caso lineare abbiamo

$$\beta_k = r_k^T r_k / r_{k-1}^T r_{k-1} \quad \text{ma anche} \quad \beta_k = r_k^T (r_k - r_{k-1}) / r_{k-1}^T r_{k-1}$$

poiche' $r_k^T r_{k-1} = 0$. Questa variante utilizza, per analogia, questa seconda formula per calcolare il coefficiente β_k:

$$\beta_k^{PR} = \nabla f(x^k)^T (\nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k-1})) / \nabla f(x^{k-1})^T \nabla f(x^{k-1})$$

Quindi, se $\nabla f(x^k) \approx \nabla f(x^{k-1})$, risulta $\beta_k^{PR} \approx 0$ e la tecnica di restart viene applicata (in maniera approssimata) automaticamente.

Non è possibile dimostrare alcun risultato di convergenza (se non in casi molto particolari [f fortemente convessa + ricerca esatta]) ed inoltre d^k potrebbe non essere una direzione di discesa.

Oss È possibile avere $\beta_k^{PR} < 0$, da cui la variante $\beta_k^{PR+} = \max\{\beta_k^{PR}, 0\}$ per cui con una opportuna variante delle condizioni forti di Wolfe è possibile dimostrare la convergenza del metodo nel caso generale.

Metodi senza derivate

(P) $\min\{f(x) : x \in \mathbb{R}^n\}$ ← metodi che richiedano soltanto il calcolo di valori della fz. obiettivo f.

Motivazioni:

- f non differenziabile

  oppure

- difficoltà nel calcolo delle derivate

Calcolo derivate

- Differenze finite (via sviluppi di Taylor)

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(x) = \frac{f(x+te_i) - f(x)}{t} + O(t) \qquad (r_x(t)/t \to 0)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(x) = \frac{f(x+te_i) - f(x-te_i)}{2t} + O(t^2)$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x) = \frac{f(x+te_i+te_j) - f(x+te_i) - f(x+te_j) + f(x)}{t^2} + O(t)$$

- Differenziazione automatica

  "Scomposizione fz. + regole differenziazione fz. composte"

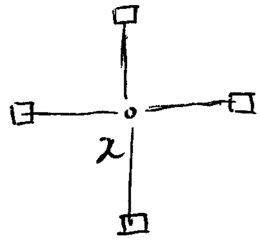
Consideriamo $\{e_1, \dots, e_n\} \subseteq \mathbb{R}^n$ la "base canonica" e $D = \{d_1, \dots, d_n, d_{n+1}, \dots, d_{2n}\}$

con $d_i = \begin{cases} e_i & 1 \le i \le n \\ -e_{i-n} & n+1 \le i \le 2n \end{cases}$

<u>Oss</u> Ogni $v \in \mathbb{R}^n$ è combinazione lineare a coefficienti non negativi dei vettori di D

$$v = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i e_i \text{ con } \alpha_i \in \mathbb{R} \Rightarrow v = \sum_{i=1}^{n} |\alpha_i| \hat{d}_i \quad \text{con } \hat{d}_i = \begin{cases} d_i \,(= e_i) & \text{se } \alpha_i > 0 \\ d_{i+n} & \text{se } \alpha_i < 0. \end{cases}$$

Idea: valutare f nei punti $\{x+td_i\}_{i=1..2n}$ per qualche fissato t; se si individua un valore migliore, iterare a partire dal nuovo punto, altrimenti diminuire t.



ALGORITMO DI RICERCA DIRETTA "A COMPASSO"

1) Scegliere $x^0 \in \mathbb{R}^n$, $t_0 > 0$; $k=0$, $\ell = 0$

2) Se esiste $d \in D$ tale che $f(x^k + t_k d) < f(x^k)$,

allora $x^{k+1} = x^k + t_k d$, $t_{k+1} = t_k$

altrimenti $x^{k+1} = x^k$, $t_{k+1} = t_k/2$, $\ell = \ell+1$, $z^\ell = x^k$, $t^\ell_i = t_k$

3) $k = k+1$ e ritornare a 2)

Nota: $\{z^\ell\}$ costituisce la sequenza delle iterazioni "fallimentari"

CRITERIO DI ARRESTO: $t_k \leq \delta$ per una tolleranza fissata $\delta > 0$.

Se la curva di sottolivello $L_f(x^0) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \leq f(x^0)\}$ è compatta, allora il passo di ricerca t_k viene aggiornato dopo un numero finito di iterazioni. Infatti la griglia $M_k = \{x_k + t_k(\sum_{i=1}^{2n} \mu_i d_i) : \mu_i \in \mathbb{Z}_+\}$ individua tutti i punti visitabili senza aggiornare il passo e $M_k \cap L_f(x^0)$ è un insieme finito poiché $L_f(x^0)$ è compatto.

Teo (convergenza). Sia f differenziabile su $\mathbb{R}^n$. Supponiamo che

- $L_f(x^0)$ sia compatto
- ∇f sia Lipschitziana (ovvero $\exists L > 0$ t.c. $\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\|_2 \leq L\|x-y\|$ $\forall x,y$),

allora $\lim_{\ell \to +\infty} \|\nabla f(z^\ell)\|_2 = 0$

dim Sia $v \in \mathbb{R}^n$ con $\|v\|_2 = 1$: $\quad v = \sum_{i=1}^{n} \gamma_i \hat{d}_i \quad$ con $\gamma_i \geq 0$.

$$1 = v^T v = \left(\sum_{i=1}^{n} \gamma_i \hat{d}_i\right)^T \left(\sum_{j=1}^{n} \gamma_j \hat{d}_j\right) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \gamma_i \gamma_j \hat{d}_i^T \hat{d}_j = \sum_{i=1}^{n} \gamma_i^2$$

quindi esiste k tale che $\gamma_k \geq 1/\sqrt{n}$. Inoltre $-(-\hat{d}_k)^T v = \hat{d}_k^T v = \gamma_k$.

Poiché $(-\hat{d}_k) \in D$, possiamo concludere: $\exists\, d \in D$ t.c. $-d^T v \geq 1/\sqrt{n}$.

Supponiamo $\nabla f(z^\ell) \neq 0$: $\quad v = \nabla f(z^\ell) / \|\nabla f(z^\ell)\|_2 \Rightarrow \exists\, d \in D$ t.c. $-\nabla f(z^\ell)^T d \geq \frac{\|\nabla f(z^\ell)\|_2}{\sqrt{n}}$

Poiché z^ℓ è ottenuto in una iterazione fallimentare, risulta $f(z^\ell + t_\ell d) \geq f(z^\ell)$ e dal teo(valor medio): $0 \leq f(z^\ell + t_\ell d) - f(z^\ell) = \nabla f(z^\ell + \gamma t_\ell d)^T d$ per $\gamma \in (0,1)$ opportuno.

Quindi:

$$0 \leq \frac{\|\nabla f(z^\ell)\|_2}{\sqrt{n}} \leq -\nabla f(z^\ell)^T d \leq [\nabla f(z^\ell + \gamma t_\ell d) - \nabla f(z^\ell)]^T d \leq$$ (dis. Schwarz)

$$\leq \|\nabla f(z^\ell + \gamma t_\ell d) - \nabla f(z^\ell)\|_2 \|d\|_2 \leq L \|\gamma t_\ell d\|_2 = L \gamma t_\ell \xrightarrow[\ell \to +\infty]{} 0$$

($\|d\|_2 = 1$, ∇f Lipschitziana) $\qquad$ ($t_{\ell+1} = t_0/2^\ell$) ■

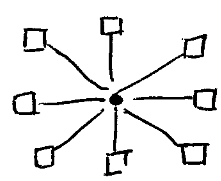
Cor Ogni punto di accumulazione di $\{z^\ell\}$ è un punto stazionario di f.

dim z^* punto di accumulazione $\Rightarrow \exists \{z^{\ell_j}\}$ sottosuccessione t.c. $z^{\ell_j} \to z^*$ e $\|\nabla f(z^{\ell_j})\|_2 \xrightarrow[j \to +\infty]{} \|\nabla f(z^*)\|_2$ per la continuità di ∇f e $\|\cdot\|_2$. Dal teo(convergenza) segue $\|\nabla f(z^*)\|_2 = 0$ e quindi $\nabla f(z^*) = 0$ per l'unicità del limite ■

Nota: Poiché $\{z^\ell\} \subseteq L_f(x^0)$, la compattezza di $L_f(x^0)$ garantisce l'esistenza di un punto di accumulazione.

Nel caso non differenziabile $\{z^\ell\}$ potrebbe convergere a punti "non stazionari".

Generalizzazioni dello schema algoritmico

- $D \supseteq \{\pm b_1, \pm b_2, \dots, \pm b_n\}$ con $\{b_1, \dots, b_n\} \subseteq \mathbb{R}^n$ base $\longrightarrow$ 
- possibilità di considerare D_k differenti per ciascuna iterazione

IL PROBLEMA DEI MINIMI QUADRATI

- MINIMI QUADRATI LINEARI

$$A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad b \in \mathbb{R}^m$$

(argmin coincidono)

$$\min \{ \|Ax - b\|_2 : x \in \mathbb{R}^n \} \equiv \min \{ \tfrac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2 : x \in \mathbb{R}^n \}$$

$$f(x) = \tfrac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2 = \tfrac{1}{2}(Ax - b)^T(Ax - b) = \tfrac{1}{2} x^T A^T A x - \underbrace{x^T A^T b}_{(A^T b)^T x} + b^T b$$

↳ funzione quadratica

$$\nabla f(x) = A^T A x - A^T b, \quad \nabla^2 f(x) = A^T A$$

$\nabla f(x) = 0 \iff A^T A x = A^T b$ sistema delle equazioni normali.

$$x^T \nabla^2 f(\bar{x}) x = x^T A^T A x = (Ax)^T A x = \|Ax\|_2^2 \geq 0$$

$\nabla^2 f(x)$ è semidefinita positiva per ogni x → f è una funzione convessa

punti di minimo ≡ punti stazionari ≡ soluzioni del sistema normale

Se A ha rango massimo, allora ($Ax = 0 \iff x = 0$) e quindi $\nabla^2 f(\bar{x})$ è definita positiva per ogni $\bar{x}$ → f è una funzione strettamente convessa → pb minimi quadrati ha una <u>unica</u> soluzione

Metodi risolutivi: decomposizione QR, SVD, gradiente coniugato (nonlineare)

$$f(x) = \tfrac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2 = \tfrac{1}{2} \left[(A_1 x - b_1)^2 + (A_2 x - b_2)^2 + \ldots + (A_m x - b_m)^2 \right]$$

- MINIMI QUADRATI NONLINEARI

$\min \{ f(x) : x \in \mathbb{R}^n \}$ dove $f(x) = \tfrac{1}{2} \sum_{j=1}^{m} r_j^2(x)$ con $r_j : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ fz. <u>nonlineari</u>

→ Specializzare i metodi dell'ottimizzazione non vincolata, sfruttando la specifica struttura della fz. obiettivo.

$\phi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $\phi(t) = t^2$: $\quad r_j^2(x) = \phi(r_j(x)) \to \nabla r_j^2(x) = \phi'(r_j(x)) \nabla r_j(x) = 2 r_j(x) \nabla r_j(x)$

$$\nabla f(x) = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{m} \nabla r_j^2(x) = \sum_{j=1}^{m} r_j(x)\,\nabla r_j(x) = J_R(x)^T R(x)$$

dove $R=(r_1,\dots,r_m):\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ e $J_R(x) = \begin{bmatrix} - \nabla r_1(x)^T - \\ - \nabla r_m(x)^T - \end{bmatrix}$ è la matrice Jacobiana di R.

$$[\nabla^2 f(x)]_{k\ell} = \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_k \partial x_\ell} = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_\ell}\right) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\sum_{j=1}^{m} r_j(x)\frac{\partial r_j(x)}{\partial x_\ell}\right) =$$

$$= \underbrace{\boxed{\sum_{j=1}^{m} \frac{\partial r_j(x)}{\partial x_k}\frac{\partial r_j(x)}{\partial x_\ell}}}_{[J_R(x)^T J_R(x)]_{k\ell}} + \sum_{j=1}^{m} r_j(x) \underbrace{\frac{\partial^2 r_j(x)}{\partial x_k \partial x_\ell}}_{[\nabla^2 r_j(x)]_{k\ell}}$$

$$J_R(x)^T J_R(x) = \begin{bmatrix} | & & | \\ \nabla r_1(x) & \cdots & \nabla r_m(x) \\ | & & | \end{bmatrix} \begin{bmatrix} - \nabla r_1(x)^T - \\ - \nabla r_m(x)^T - \end{bmatrix}$$

Quindi $$\nabla^2 f(x) = J_R(x)^T J_R(x) + \sum_{j=1}^{m} r_j(x)\,\nabla^2 r_j(x) \quad (*)$$

METODO DI NEWTON

La direzione di ricerca d_N^k è soluzione del sistema $\nabla^2 f(x^k)\, d = -\nabla f(x^k)$

Se $\nabla^2 f(x^k)$ è definita positiva, d_N^k è una direzione di discesa

METODO DI GAUSS-NEWTON

Idea: approssimare $\nabla^2 f(x^k)$ tralasciando i termini del secondo ordine in $(*)$ (se i residui r_j sono piccoli e/o sono funzioni "piatte" [$\|\nabla^2 r_j(x)\|_2$ è piccola], i termini del primo ordine dovrebbero "dominare" quelli del secondo).

Notazioni: $J_k = J_R(x^k)$ e $r_k = R(x^k) = (r_1(x^k),\dots,r_m(x^k))$

$$\nabla f(x^k) = J_k^T r_k\,, \quad \nabla^2 f(x^k) \simeq J_k^T J_k$$

La direzione di ricerca d_{GN}^k è soluzione del sistema $J_k^T J_k\, d = -J_k^T r_k$

- Se $\nabla f(x^k) \neq 0$, allora d_{GN}^k è una direzione di discesa

$$\nabla f(x^k)^T d_{GN}^k = (J_k^T r_k)^T d_{GN}^k = -(J_k^T J_k d_{GN}^k)^T d_{GN}^k = -(J_k d_{GN}^k)^T (J_k d_{GN}^k) = -\|J_k d_{GN}^k\|_2^2 < 0$$

infatti $J_k d_{GN}^k = 0 \Rightarrow J_k^T r_k = 0$ ovvero $\nabla f(x^k) = 0$

Quindi il metodo di Gauss-Newton è un metodo del gradiente

- $J_K^T J_K d = -J_K r_K$ è il sistema delle equazioni normali associato a $J_K d + r_K = 0$, ovvero d^K_{GN} risolve il problema dei minimi quadrati lineari

$$\min \left\{ \frac{1}{2} \| J_K d + r_K \|_2^2 \ : \ d \in \mathbb{R}^n \right\}$$

Altro punto di vista: $r_j(x^k + d) \approx r_j(x^k) + \nabla r_j(x^k)^T d$

$$f(x^k+d) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{m} r_j^2(x^k+d) \approx \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{m} \left(r_j(x^k) + \nabla r_j(x^k)^T d \right)^2 = \frac{1}{2} \| J_K d + r_K \|_2^2$$

d^K_{GN} si ottiene minimizzando questa approssimazione di $f(x^k+d)$ su $\mathbb{R}^n$.

La scelta del passo unitario (stile Newton) non garantisce convergenza → Ricerca (in)esatta

METODO DI GAUSS-NEWTON ("damped" GN)

1) Scegliere $x^0 \in \mathbb{R}^n$; $K=0$
2) Se $\nabla f(x^K) = 0$, allora STOP
3) Calcolare $d^K_{GN} \in \mathbb{R}^n$ soluzione di $J_K^T J_K d = -J_K r_K$ ← QR, SVD, gradiente coniugato
4) Calcolare $t_K > 0$ che soddisfa le condizioni di Wolfe
5) $x^{k+1} = x^k + t_K d^K_{GN}$
6) $K = K+1$ e ritornare a 2)

<u>Teorema</u> (convergenza) Supponiamo che

- $L_f(x^0) = \{ x \in \mathbb{R}^n : f(x) \le f(x^0) \}$ sia compatto
- r_j siano differenziabili con continuità per ogni $j = 1 \dots m$
- ∇f sia Lipschitziana
- $\exists\, \gamma > 0$ tale che $\| J_K z \|_2 \ge \gamma \| z \|_2 \quad \forall z \in \mathbb{R}^n \ \forall K$

Allora $\lim_{K \to +\infty} \| \nabla f(x^k) \|_2 = 0$

<u>dim</u> $J_R : x \longmapsto J_R(x)$ è continua, quindi anche $x \longmapsto \|J_R(x)\|_2$ è continua.

Poiche' $L_f(x^0)$ è compatto, esiste $\beta > 0$ tale che $\|J_R(x)\|_2 \leq \beta$ per ogni $x \in L_f(x^0)$ (teo (Weierstrass))

Sia θ_k l'angolo formato da $-\nabla f(x^k)$ e d^k_{GN}:

$$\cos\theta_k = \frac{-\nabla f(x^k)^T d^k_{GN}}{\|\nabla f(x^k)\|_2 \, \|d^k_{GN}\|_2} = \frac{\|J_k d^k_{GN}\|_2^2}{\|J_k^T r_k\|_2 \, \|d^k_{GN}\|_2} = \frac{\|J_k d^k_{GN}\|^2}{\|J_k^T J_k d^k_{GN}\|_2 \, \|d^k_{GN}\|_2} \geq$$

$$\geq \frac{\gamma^2 \|d^k_{GN}\|_2^2}{\beta^2 \|d^k_{GN}\|_2^2} = \frac{\gamma^2}{\beta^2} > 0 \qquad \left(\|J_k^T J_k d^k_{GN}\|_2 \leq \|J_k\|_2^2 \|d^k_{GN}\|_2 \leq \beta^2 \|d^k_{GN}\|_2 \right)$$

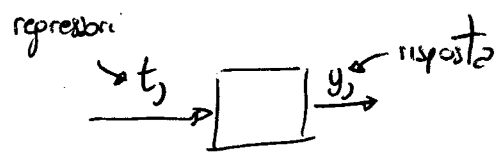
Per il lemma a pg ⑧ delle note sui metodi per l'ottimizzazione non vincolata

$$\sum_{k=0}^{\infty} \cos^2\theta_k \, \|\nabla f(x^k)\|_2^2 < +\infty, \text{ da cui } \|\nabla f(x^k)\|_2^2 \xrightarrow[k \to +\infty]{} 0 \qquad \blacksquare$$

<u>Nota 1</u>: $\|J_k z\|_2 \geq \gamma \|z\|_2 \ \forall k \ \forall z$ garantisce che i valori singolari delle matrici J_k sono uniformemente distanti da 0 ($z = v_i$ vettore singolare destro di $J_k \rightarrow \|z\|_2 = 1$ e $\|J_k z\|_2 = \sigma_i$ valore singolare corrispondente).

<u>Nota 2</u>: r_j differenziabili con continuità $\Rightarrow \|\nabla f(x) - \nabla f(y)\|_2 \leq L \|x - y\|_2 \ \forall x, y \in L_f(x^0)$ con $L > 0$ opportuna, ovvero ∇f è Lipschitziana su $L_f(x^0)$: il lemma continua a valere anche con questa restrizione a $L_f(x^0)$, quindi l'ipotesi ∇f Lips. può essere rimossa.

<u>Applicazione al data fitting</u>



Osservazioni 'sperimentali': (t_j, y_j) con $t_j \in \mathbb{R}^s$, $y_j \in \mathbb{R}$

Che relazione esiste tra t_j e y_j? $y_j \approx f(t_j)$ per qualche opportuna f?

$$\min \left\{ \tfrac{1}{2} \sum_{j=1}^{m} (y_j - f(t_j))^2 \;\middle|\; f \in F \right\}$$

F spazio 'funzionale' di ricerca: $F = \{ f(x; \cdot) : x = \underbrace{(x_1, \ldots, x_n)}_{\text{parametri}} \in \mathbb{R}^n \}$

$$\hookrightarrow \min \left\{ \tfrac{1}{2} \sum_{j=1}^{m} (y_j - f(x; t_j))^2 \;\middle|\; x \in \mathbb{R}^n \right\}$$

OTTIMIZZAZIONE VINCOLATA

(P) $\min\{f(x) : x \in X\}$, $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $X \subsetneq \mathbb{R}^n$

Condizioni di ottimalità (I^a parte)

f differenziabile, $X \subseteq \mathbb{R}^n$ "generico" insieme (convesso)

Se X è descritto tramite vincoli di disuguaglianza e/o di uguaglianza, i.e.

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid g_i(x) \le 0,\ i=1\ldots m,\ h_j(x) = 0,\ j=1\ldots p\}$$

con $g_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $h_j : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, la 'natura' delle funzioni vincolari può garantire la convessità di X:

Prop Se g_i sono convesse per $i=1\ldots m$ e h_j sono affini (cioè $h_j(x) = a_j^T x - b_j$ per opportuni $a_j \in \mathbb{R}^n$, $b_j \in \mathbb{R}$) per $j=1,\ldots,p$, allora X è convesso

dim Siano $x, y \in X$ e $\lambda \in (0,1)$:

$$g_i(\lambda x + (1-\lambda) y) \le \underbrace{\lambda g(x)}_{\le 0} + \underbrace{(1-\lambda) g(y)}_{\le 0} \le 0$$

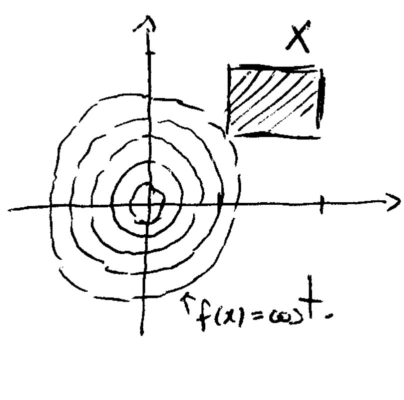
$$h_j(x) = a_j^T(\lambda x + (1-\lambda) y) - b_j = \lambda a_j^T x + (1-\lambda) a_j^T y - b_j =$$

$$= \lambda(a_j^T x - b_j) + (1-\lambda)(a_j^T y - b_j) = \lambda h_j(x) + (1-\lambda) h_j(y) = 0$$ ∎

Difficoltà: i punti stazionari di f potrebbero non appartenere a X

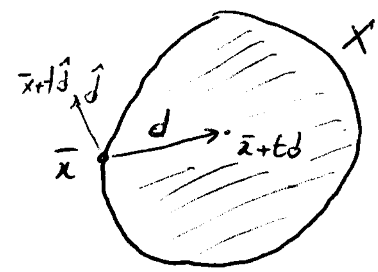
$n=2$ $f(x) = x_1^2 + x_2^2$, $X = [1,2] \times [1,2]$

$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{pmatrix} \to$ l'unico punto stazionario di f è $(0,0) \notin D$



Def $d \in \mathbb{R}^n$ si dice DIREZIONE AMMISSIBILE per X in $\bar{x} \in X$ se

$$\exists \bar{t} > 0 \quad \text{t.c.} \quad \bar{x} + td \in X \qquad \forall t \in [0, \bar{t}]$$



$$F(X, \bar{x}) := \{ d \in \mathbb{R}^n \mid \exists \bar{t} > 0 \ \text{t.c.} \ \bar{x} + td \in X \ \forall t \in [0, \bar{t}] \}$$

si dice CONO DELLE DIREZIONI AMMISSIBILI per X in $\bar{x}$.

Es: $F(X, \bar{x})$ è un cono $\quad (d \in F(X,\bar{x}),\ t > 0 \Rightarrow td \in F(X, \bar{x}))$

Oss Se $\bar{x}$ è un punto interno di X ($\bar{x} \in \operatorname{int} X$), allora $F(X, \bar{x}) = \mathbb{R}^n$

Teo (cond. necessaria) Sia $\bar{x}$ un punto di minimo locale di (P). Allora

$$\nabla f(\bar{x})^T d \geq 0 \qquad \forall d \in F(X, \bar{x}) \qquad (CN_F)$$

dim Sia $\varepsilon > 0$ tale che $f(\bar{x}) = \min \{ f(x) : x \in X \cap B(\bar{x}, \varepsilon) \}$ e sia $d \in F(X, \bar{x})$ con $\bar{t} > 0$ fornito dalla definizione. Considerando $t \leq \min \{ \frac{\varepsilon}{\|d\|_2}, \bar{t} \}$, risulta $\bar{x} + td \in X \cap B(\bar{x}, \varepsilon)$ e quindi $f(\bar{x}+td) - f(\bar{x}) \geq 0$, da cui

$$0 \leq [f(\bar{x}+td) - f(\bar{x})]/t = \nabla f(\bar{x})^T d + \frac{o(td)}{t} \xrightarrow[t \downarrow 0]{} \nabla f(\bar{x})^T d \ \text{ e quindi } \ \nabla f(\bar{x})^T d \geq 0 \qquad \blacksquare$$

Oss (i) Se $\nabla f(\bar{x}) = 0$, allora (CN_F) è verificata

(ii) Se $\bar{x} \in \operatorname{int} X$ è un punto di minimo locale di (P), allora $\nabla f(\bar{x}) = 0$.

Prop Siano X convesso e $\bar{x} \in X$. Allora

(i) $x - \bar{x}$ è una direzione ammissibile per X in $\bar{x} \in X$ per ogni $x \in X$.

(ii) Se $d \in F(X, \bar{x})$, allora esistono $\lambda \geq 0$, $x \in X$ tali che $d = \lambda (x - \bar{x})$

Cor Siano X convesso e $\bar{x} \in X$. Allora

$$F(X, \bar{x}) = \{ \lambda (x - \bar{x}) \mid \lambda \geq 0,\ x \in X \} =: \underset{\substack{\uparrow \\ \text{cono generato}}}{\text{cono}} (X - \bar{x})$$

dim prop

(i) Sia $t \in [0,1]$: $\bar{x} + t(x-\bar{x}) = (1-t)\bar{x} + t x \in X$ poiché X è convesso $\Rightarrow (x-\bar{x}) \in F(X,\bar{x})$

(ii) Sia $t > 0$ tale che $\bar{x} + t d \in X$.

Posto $x = \bar{x} + t d \in X$, risulta $d = 1/t\,(x - \bar{x})$. ∎

Teo Sia X convesso. Se $\bar{x} \in X$ è un punto di minimo locale di (P), allora

$$\nabla f(\bar{x})^T (x - \bar{x}) \geq 0 \quad \forall x \in X \qquad (CN_X).$$

Viceversa, se f è convessa e vale (CN_X), allora $\bar{x}$ è un punto di minimo
$(+\ \bar{x} \in X)$
(globale) di (P).

dim La prima parte segue immediatamente da teo (cond. necessaria) e prop (i).

Sia $x \in X$:

$$f(x) \underset{f \text{ convessa}}{\geq} f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T (x - \bar{x}) \underset{(CN_X)}{\geq} f(\bar{x})$$

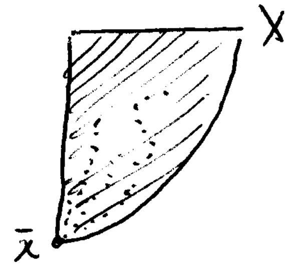
∎

Condizioni di ottimalità (II^a parte)

$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ differenziabile, $X \subseteq \mathbb{R}^n$ (non necessariamente convesso)

(P) $\min \{ f(x) \; : \; x \in X \}$

Idea per testare l'ottimalità locale di $\bar{x} \in X$: verificare che $f(\bar{x}) \leq f(x_n)$ con n suff.nte grande per ogni successione $\{x_n\} \subseteq X$ tale che $x_n \to \bar{x}$ e $x_n \neq \bar{x}$



$x_n = \bar{x} + t_n d_n$ con $t_n = \|x_n - \bar{x}\|_2$, $d_n = \dfrac{x_n - \bar{x}}{\|x_n - \bar{x}\|_2}$

$d_n \in B(0,1) \implies \exists\, d \in B(0,1)$ t.c. $d_n \to d$
$t_n \to 0^+$ (considerando una opportuna sottosuccessione)

<u>Def</u> (i) $\{x_n\}$ si dice SUCCESSIONE AMMISSIBILE per $\bar{x} \in X$ se $\begin{cases} x_n \in X, \; x_n \neq \bar{x} \quad \forall n \\ x_n \to \bar{x} \end{cases}$

(ii) $d \in \mathbb{R}^n$ si dice DIREZIONE LIMITE per X in $\bar{x}$ se esiste una successione ammissibile $\{x_n\}$ per $\bar{x} \in X$ tale che $x_n - \bar{x} / \|x_n - \bar{x}\|_2 \longrightarrow d$. (nota: $\|d\|_2 = 1$)

<u>Def</u> $T(X, \bar{x}) := \{ d \in \mathbb{R}^n \mid \exists\, t_n \to 0^+ \;\; \exists\, d_n \to d$ t.c. $\bar{x} + t_n d_n \in X \}$ si dice CONO TANGENTE (di Bouligand) di X in $\bar{x} \in X$

(cono tangente $\equiv$ direzioni limite e loro multipli, cioè il cono generato dalle direzioni limite)

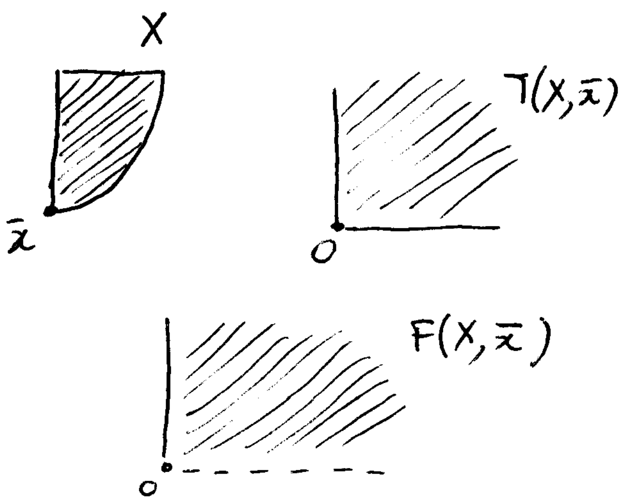
<u>Proprietà</u> 0) $\bar{x} \in \text{int}\, X \implies T(X, \bar{x}) = \mathbb{R}^n$

i) $T(X, \bar{x})$ è un cono chiuso

ii) $F(X, \bar{x}) \subseteq T(X, \bar{x})$ $\quad [d_n \equiv d]$
(cono delle direzioni ammissibili)

iii) X convesso $\implies X \subseteq \bar{x} + T(X, \bar{x})$

iv) X convesso $\implies T(X, \bar{x}) = \text{cl}\, F(X, \bar{x})$
chiusura



dim proprietà

i) Siano $d \in T(X,\bar{x})$, $\gamma > 0$: $\exists t_n \to 0^+, d_n \to d$ t.c. $\bar{x} + t_n d_n \in X$

Siano $\hat{t}_n = t_n/\gamma$ e $\hat{d}_n = \gamma d_n$. Risultano: $\hat{t}_n \to 0^+$ e $\hat{d}_n \to \gamma d$.

Inoltre $\bar{x} + \hat{t}_n \hat{d}_n = \bar{x} + t_n d_n \in X$. Quindi $\gamma d \in T(X,\bar{x})$ $\to$ $T(X,\bar{x})$ è un cono

Sia $\{d_n\} \subseteq T(X,\bar{x})$ t.c. $d_n \to d$ per un qualche $d \in \mathbb{R}^n$.

$d_n \in T(X,\bar{x}) \Rightarrow \exists t_k \xrightarrow[k\to+\infty]{} 0^+, e_k \xrightarrow[k\to+\infty]{} d_n$ t.c. $\bar{x} + t_k e_k \in X$

$$\left.\begin{matrix} t_k \to 0^+ \\ e_k \to d_n \end{matrix}\right\} \Rightarrow \exists \bar{k} \text{ tale che } \left\{\begin{matrix} \|e_k - d_n\|_2 \le 1/n \\ t_k \le 1/n \end{matrix}\right. \quad \forall k \ge \bar{k}.$$

Siano $\hat{t}_n = t_{\bar{k}}$ e $\hat{d}_n = e_{\bar{k}}$. Ovviamente $\bar{x} + \hat{t}_n \hat{d}_n \in X$ e $\hat{t}_n \to 0^+$.

$\|\hat{d}_n - d\|_2 \le \|\hat{d}_n - d_n\|_2 + \|d_n - d\|_2 \le 1/n + \|d_n - d\|_2 \xrightarrow[n\to+\infty]{} 0$ e quindi $\hat{d}_n \to d$

Pertanto $d \in T(X,\bar{x})$. $\longrightarrow$ $T(X,\bar{x})$ è chiuso

ii) Sia $d \in F(X,\bar{x})$: $\exists \bar{t} > 0$ t.c. $\bar{x} + td \in X$ $\forall t \le \bar{t}$.

Siano $d_n = d$ e $\{t_n\} \subseteq [0,\bar{t}]$ una qualsiasi successione per cui $t_n \to 0^+$.

Risulta $\bar{x} + t_n d_n = \bar{x} + t_n d \in X$, e quindi $d \in T(X,\bar{x})$

iii) Sia $x \in X$: $(x - \bar{x}) \in F(X,\bar{x})$ per la prop di pg ②.

Abbiamo $x = \bar{x} + (x - \bar{x}) \in \bar{x} + F(X,\bar{x})$. Quindi $X \subseteq \bar{x} + F(X,\bar{x}) \overset{ii)}{\subseteq} \bar{x} + T(X,\bar{x})$.

iv) Dalla ii) abbiamo $\mathrm{cl}\, F(X,\bar{x}) \subseteq T(X,\bar{x})$ poiché $T(X,\bar{x})$ è chiuso.

Sia $d \in T(X,\bar{x})$: $\exists t_n \to 0^+, d_n \to d$ t.c. $\bar{x} + t_n d_n \in X$

Sia $\gamma \in [0,1]$: $(1-\gamma)\bar{x} + \gamma(\bar{x} + t_n d_n) \in X$ per la convessità di X

$$(1-\gamma)\bar{x} + \gamma(\bar{x} + t_n d_n) = \bar{x} + \gamma t_n d_n$$

Quindi $\bar{x} + t d_n \in X$ $\forall t \in [0, t_n]$, da cui $d_n \in F(X,\bar{x})$.

Poiché $d_n \to d$, allora $d \in \mathrm{cl}\, F(X,\bar{x})$. Quindi $T(X,\bar{x}) \subseteq \mathrm{cl}\, F(X,\bar{x})$.

Teo (cond. necessarie) Sia $\bar{x} \in X$ un punto di minimo locale di (P). Allora

$$\nabla f(\bar{x})^T d \geq 0 \qquad \forall d \in T(X, \bar{x}). \qquad (CN_1)$$

dim Sia $\varepsilon > 0$ tale che $f(\bar{x}) = \min\{f(x) : x \in X \cap B(\bar{x}, \varepsilon)\}$, e sia $d \in T(X, \bar{x})$.
$d \in T(X,\bar{x}) \Rightarrow \exists t_n \to 0^+, d_n \to d$ t.c. $\bar{x} + t_n d_n \in X$. Poiche' $\bar{x} + t_n d_n \to \bar{x}$, risulta $\bar{x} + t_n d_n \in B(\bar{x}, \varepsilon)$ per n suff.nte grande. Quindi

$$0 \leq f(\bar{x} + t_n d_n) - f(\bar{x}) = t_n \nabla f(\bar{x})^T d_n + r(t_n d_n) \qquad \text{da cui}$$

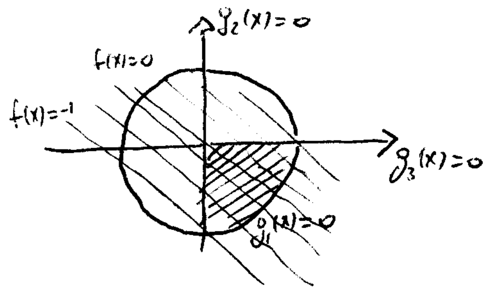
$$0 \leq [f(\bar{x} + t_n d_n) - f(\bar{x})]/t_n = \nabla f(\bar{x})^T d_n + r(t_n d_n)/t_n \xrightarrow[n \to +\infty]{} \nabla f(\bar{x})^T d, \text{ ovvero } \nabla f(\bar{x})^T d \geq 0 \quad \blacksquare$$

Oss Poiche' $F(X,\bar{x}) \subseteq T(X,\bar{x})$, se X è convesso e f è convessa, allora (CN_1) è anche condizione sufficiente. Inoltre $\bar{x} \in \text{int}\, X \Rightarrow (CN_1) \equiv (\nabla f(\bar{x}) = 0)$

Consideriamo adesso il caso in cui X sia espresso esplicitamente tramite vincoli di disuguaglianza: $X = \{x \in \mathbb{R}^n : g_i(x) \leq 0 \quad i = 1 \dots m\}$ con $g_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ $i = 1..m$ differenziabili

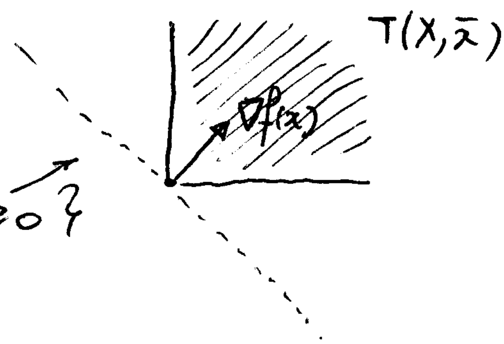
Esempio 1: $n = 2$, $m = 3$

$f(x) = x_1 + x_2$, $g_1(x) = x_1^2 + x_2^2 - 1$, $g_2(x) = -x_1$, $g_3(x) = x_2$



$\bar{x} = (0, -1)$ è punto di minimo (globale) di (P)

$\nabla f(\bar{x}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

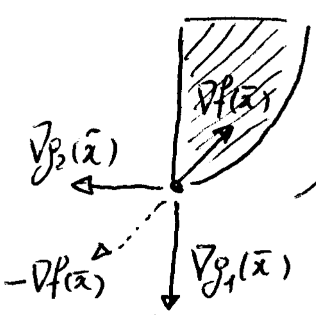


$T(X,\bar{x}) \subseteq \{d \in \mathbb{R}^2 \mid \underbrace{d_1 + d_2}_{\nabla f(\bar{x})^T d} \geq 0\}$

$g_1(\bar{x}) = 0 \to \nabla g_1(\bar{x}) = \begin{pmatrix} 0 \\ -2 \end{pmatrix}$

$g_2(\bar{x}) = 0 \to \nabla g_2(\bar{x}) = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$g_3(\bar{x}) < 0 \to$ poco "rilevante" per l'ottimalità locale di $\bar{x}$ (g_3 continua $\Rightarrow \exists \varepsilon > 0$ t.c. $g_3(x) < 0 \;\; \forall x \in B(\bar{x}, \varepsilon)$)



$\leadsto -\nabla f(\bar{x}) \in \text{cono}(\{\nabla g_1(\bar{x}), \nabla g_2(\bar{x})\})$

Linearizzazioni di X in $\bar{x} \in X$

$I(\bar{x}) := \{ i \mid g_i(\bar{x}) = 0 \}$ indici dei VINCOLI ATTIVI in $\bar{x}$

$L_{\leq}(X,\bar{x}) := \{ d \in \mathbb{R}^n \mid \nabla g_i(\bar{x})^T d \leq 0, \ i \in I(\bar{x}) \}$

$L_{<}(X,\bar{x}) := \{ d \in \mathbb{R}^n \mid \nabla g_i(\bar{x})^T d < 0, \ i \in I(\bar{x}) \}$

(nota: $g_i(x) \leq 0$ viene sostituito con la 'linearizzazione' [sviluppo Taylor I ordine]

$\underset{[\overset{\shortparallel}{0}]}{g_i(\bar{x})} + \nabla g_i(\bar{x})^T \underbrace{(x-\bar{x})}_{d} \leq 0$)

Prop Sia $\bar{x} \in X$. Allora $L_{<}(X,\bar{x}) \subseteq T(X,\bar{x}) \subseteq L_{\leq}(X,\bar{x})$

dim Sia $d \in L_{<}(X,\bar{x})$ e consideriamo $x_n = \bar{x} + t_n d$ per una qualsiasi successione $t_n \to 0^+$.

$i \notin I(\bar{x})$: $g_i(x_n) \to g_i(\bar{x}) < 0 \Rightarrow g_i(x_n) < 0$ per n suff.nte grande

$i \in I(\bar{x})$: $g_i(x_n) = g_i(\bar{x}) + t_n \nabla g_i(\bar{x})^T d + r(t_n d)$, da cui

$g_i(x_n)/t_n = \nabla g_i(\bar{x})^T d + r(t_n d)/t_n \to \nabla g_i(\bar{x})^T d < 0$ da cui $g_i(x_n) < 0$ per n suff.nte grande

Quindi $x_n \in X$, da cui $d \in T(X,\bar{x})$.

Sia $d \in T(X,\bar{x})$: $\exists\, t_n \to 0^+, d_n \to d$ tali che $\bar{x} + t_n d_n \in X$

$i \in I(\bar{x})$: $0 \geq [g_i(\bar{x}+t_n d_n) - g_i(\bar{x})]/t_n = \nabla g_i(\bar{x})^T d_n + \dfrac{r(t_n d)}{t_n} \longrightarrow \nabla g_i(\bar{x})^T d$

e quindi $\nabla g_i(\bar{x})^T d \leq 0$. Pertanto $d \in L_{\leq}(X,\bar{x})$ ■

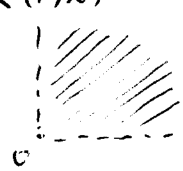
Nell'esempio 1:

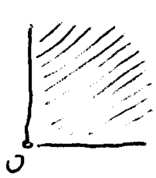
$I = \{1,2\}$, $L_{<}(X,\bar{x}) = \{ d \in \mathbb{R}^2 \mid -2d_2 < 0, \ -d_1 < 0 \} = \operatorname{int} \mathbb{R}^2_+$

$L_{\leq}(X,\bar{x}) = \{ d \in \mathbb{R}^2 \mid -2d_2 \leq 0, \ -d_1 \leq 0 \} = \mathbb{R}^2_+$

$T(X,\bar{x}) = \mathbb{R}^2_+ = L_{\leq}(X,\bar{x})$

$L_{<}(X,\bar{x})$





$L_{\leq}(X,\bar{x}) \overset{\shortparallel}{} T(X,\bar{x})$

Oss $L_{<}(X,\bar{x}) \subsetneq T(X,\bar{x})$

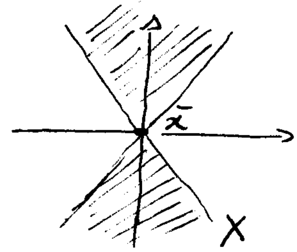
(perchè $L_{<}(X,\bar{x})$ è aperto e $T(X,\bar{x})$ è chiuso possono coincidere se e solo se coincidono con $\mathbb{R}^n$)

$L_{<}(X,\bar{x}) = \mathbb{R}^n \Downarrow I(\bar{x}) = \emptyset$

e $0 \in T(X,\bar{x})$

È possibile che risulti $T(X,\bar{x}) \subsetneq L_{\leq}(X,\bar{x})$:

$X = \{ x \in \mathbb{R}^2 \mid x_1^2 - x_2^2 \leq 0 \}$



$\bar{x} = \underline{0} \in \mathbb{R}^2$: $T(X,\bar{x}) = X$

$g_1(x) = x_1^2 - x_2^2 \to \nabla g_1(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ -2x_2 \end{pmatrix} \to \nabla g_1(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \to L_{\leq}(X,\bar{x}) = \mathbb{R}^2$.

Grazie all'inclusione $L_{<}(X,\bar{x}) \subseteq T(X,\bar{x})$ abbiamo:

$$\nabla f(\bar{x})^T d \geq 0 \quad \forall d \in T(X,\bar{x}) \Rightarrow \text{il sistema (S)} \begin{cases} \nabla f(\bar{x})^T d < 0 \\ \nabla g_i(\bar{x})^T d < 0, \quad i \in I(\bar{x}) \end{cases}$$

non ammette alcuna soluzione $d \in \mathbb{R}^n$

<u>Teorema</u> (dell'alternativa di Motzkin) Siano $a_k, b_i, c_j \in \mathbb{R}^n$ con $k \in I^<$, $i \in I^\leq$, $j \in I^=$ con $I^<, I^\leq, I^=$ insiemi finiti di indici con $I^< \neq \emptyset$. Allora, il sistema

$$\begin{cases} a_k^T d < 0, & k \in I^< \\ b_i^T d \leq 0, & i \in I^\leq \\ c_j^T d = 0, & j \in I^= \end{cases}$$

non ammette soluzione se e solo se il sistema

$$\begin{cases} \sum_{k \in I^<} \theta_k a_k + \sum_{i \in I^\leq} \lambda_i b_i + \sum_{j \in I^=} \mu_j c_j = 0 \\ \theta_k \geq 0, \ \lambda_i \geq 0, \ \mu_j \in \mathbb{R} \quad k \in I^<, i \in I^\leq, j \in I^= \end{cases}$$

ammette una soluzione in cui i θ_k non sono tutti nulli.

⌈ Teo di Gordan $\equiv (I^\leq = I^= = \emptyset)$

Lemma di Farkas $\equiv (|I^<| = 1, I^= = \emptyset)$ ⌋

Applicando questo teorema (versione Gordan) al sistema (S) con $\bar{x}$ punto di minimo locale di (P) [e quindi (S) non ammette soluzione], si ottiene che

$\exists\, \theta \geq 0,\ \lambda_i \geq 0$ con $i \in I(\bar{x})$ non tutti nulli per cui

$$\theta \nabla f(\bar{x}) + \sum_{i \in I(\bar{x})} \lambda_i \nabla g_i(\bar{x}) = 0$$

Ponendo $\lambda_i = 0$ per ogni $i \notin I(\bar{x})$, si ottiene:

Teo (Fritz John) Sia $\bar{x}$ un punto di minimo locale di (P). Allora esistono $\theta \geq 0$, $\lambda_i \geq 0$ con $i = 1, \dots, m$, non tutti nulli tali che

$$\left.\begin{array}{ll} \theta \nabla f(\bar{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(\bar{x}) = 0 & (FJ_1) \\ \lambda_i g_i(\bar{x}) = 0 \quad i = 1 \dots m & (FJ_2) \end{array}\right] (FJ)$$

(FJ_2) esprime condizioni di complementarità: il vincolo i è attivo in $\bar{x}$ oppure $\lambda_i = 0$

I λ_i vengono chiamati MOLTIPLICATORI DI LAGRANGE

Oss $\nabla f(\bar{x}) = 0 \implies$ (FJ) valgono con $\theta = 1$ e $\lambda_i = 0$ per ogni i

(FJ) possono valere con $\theta = 0$, ad esempio quando:

- $\nabla g_i(\bar{x}) = \underline{0}$ per ogni $i \in I(\bar{x})$ ma $\nabla f(\bar{x}) \neq \underline{0}$
- I vettori $\{\nabla g_i(\bar{x})\}_{i \in I(\bar{x})}$ sono linearmente dipendenti (con pesi non negativi).

Se le condizioni (FJ) valgono con $\theta = 0$, allora la funzione obiettivo non compare (e quindi non svolge alcun ruolo) nelle condizioni di ottimalità

Oss (FJ) valgono con $\theta = 0 \implies \{\nabla g_i(\bar{x})\}_{i \in I(\bar{x})}$ linearmente dipendenti.

$\Downarrow$

Teo (Karush-Kuhn-Tucker) Sia $\bar{x}$ un punto di minimo locale di (P) e supponiamo che i vettori $\{\nabla g_i(\bar{x})\}_{i \in I(\bar{x})}$ siano linearmente indipendenti. Allora esistono $\lambda_i \geq 0$ con $i = 1 \dots m$ tali che

$$\nabla f(\bar{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(\bar{x}) = 0 \qquad (KKT_1)$$

$$\lambda_i g_i(\bar{x}) = 0 \quad i = 1 \dots m \qquad (KKT_2)$$

Le condizioni di ottimalità KKT sono costituite dal sistema di equazioni e disequazioni (non lineari)

$$\nabla f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(x) = 0 \qquad (KKT_1)$$

$$\lambda_i g_i(x) = 0 \qquad i=1\dots m \qquad (KKT_2)$$

$$g_i(x) \le 0 \qquad i=1\dots m \qquad (KKT_3)$$

$$\lambda_i \ge 0 \qquad i=1\dots m \qquad (KKT_4)$$

(KKT_3), (KKT_4): "ammissibilità"

nelle incognite $x \in \mathbb{R}^n$, $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_m) \in \mathbb{R}^m$.

__Oss__ $\{\nabla g_i(\bar{x})\}_{i \in I(\bar{x})}$ linearmente indip $\Rightarrow$ i moltiplicatori λ_i sono unici

(infatti se $\bar{\lambda} = (\bar{\lambda}_1, \dots, \bar{\lambda}_m)$ e $\hat{\lambda} = (\hat{\lambda}_1, \dots, \hat{\lambda}_m)$ soddisfano (KKT_1), sottraendo un sistema di equazioni dall'altro si ottiene $\sum_{i=1}^{m} (\bar{\lambda}_i - \hat{\lambda}_i) \nabla g_i(\bar{x}) = 0$, da cui $\bar{\lambda}_i = \hat{\lambda}_i$ per ogni $i=1\dots m$ a causa della lineare indipendenza dei gradienti).

Le condizioni sui vincoli per cui (FJ) valgono con $\theta \neq 0$ si chiamano QUALIFICHE DEI VINCOLI. Altre qualifiche sono:

- SLATER: $\underset{i \in I(\bar{x})}{g_i \text{ convesse}}$ + $\exists\, \hat{x} \in \mathbb{R}^n$ tale che $g_i(\hat{x}) < 0$ $\quad i=1\dots m$
- MANGASARIAN-FROMOVITZ: $\exists d \in \mathbb{R}^n$ t.c. $\nabla g_i(\bar{x})^T d < 0$ $\quad i \in I(\bar{x})$ $\quad (\Leftrightarrow L_<(X,\bar{x}) \neq \emptyset)$.

__Esempio 2__: $n=2$, $m=2$

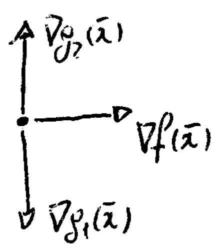
$f(x) = x_1 + x_2^2$, $g_1(x) = x_1^2 + (x_2-1)^2 - 1$, $g_2(x) = x_1^2 + (x_2+1)^2 - 1$ $\longrightarrow$ $X = \{(0,0)\}$

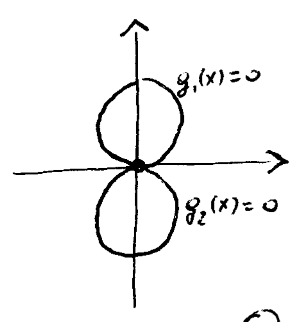
$\bar{x} = \begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}$ punto di minimo: $\nabla f(\bar{x}) = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $\nabla g_1(\bar{x}) = \begin{pmatrix}0\\-2\end{pmatrix}$, $\nabla g_2(\bar{x}) = \begin{pmatrix}0\\2\end{pmatrix}$

$I(\bar{x}) = \{1,2\}$

(KKT) non valgono in $\bar{x}$

(FJ) valgono con $\theta = 0$, $\lambda_1 = \lambda_2 > 0$





Le qualifiche dei vincoli non valgono: $\begin{cases} \nabla g_1(\bar{x}), \nabla g_2(\bar{x}) \text{ lin. dip.} \\ L_<(X,\bar{x}) = \emptyset \end{cases}$

- Vincoli lineari

$$X = \{ x \in \mathbb{R}^n \mid Ax \le b \} \quad \text{con } A = \begin{bmatrix} - a_1^T - \\ - a_m^T - \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \; b \in \mathbb{R}^m$$

In questo caso le condizioni KKT non richiedono alcuna qualifica dei vincoli

Prop Sia $\bar{x} \in X$. Allora $T(X, \bar{x}) = L_{\le}(X, \bar{x})$

dim Poiche' $\subseteq$ vale in generale, verifichiamo l'inclusione opposta

Sia $d \in L_{\le}(X, \bar{x}) = \{ \hat{d} \in \mathbb{R}^n \mid a_i^T \hat{d} \le 0, \; i \in I(\bar{x}) \}$ con $I(\bar{x}) = \{ i \mid a_i^T \bar{x} = b_i \}$

Verifichiamo che $\bar{x} + td \in X$ se t è suff.nte piccolo (da cui $d \in T(X, \bar{x})$).

$i \in I(\bar{x})$: $\quad a_i^T(\bar{x} + td) = a_i^T \bar{x} + t\, a_i^T d \le a_i^T \bar{x} = b_i$

$i \notin I(\bar{x})$ ma $a_i^T d \le 0$: $\quad a_i^T(\bar{x} + td) = \dots = a_i^T \bar{x} \le b_i$

$i \notin I(\bar{x})$ e $a_i^T d \le 0$: $\quad a_i^T(\bar{x} + td) \le b_i \iff t \le [b_i - a_i^T \bar{x}] / a_i^T d$

Quindi $\bar{x} + td \in X$ se $t \le \min \{ (b_i - a_i^T \bar{x}) / a_i^T d \mid i \notin I(\bar{x}), \; a_i^T d > 0 \}$ ■

Dalla prop segue immediatamente:

$$\nabla f(\bar{x})^T d \ge 0 \quad \forall d \in T(X, \bar{x}) \iff \text{il sistema} \begin{cases} \nabla f(\bar{x})^T d < 0 \\ \nabla g_i(\bar{x})^T d \le 0 \quad i \in I(\bar{x}) \end{cases} \text{non ammette alcuna soluzione } d \in \mathbb{R}^n$$

Pertanto le condizioni (KKT) si ottengono dal teo (Motzkin) [ponendo $\lambda_i = 0$ per $i \notin I(\bar{x})$] senza alcuna ipotesi di qualifica dei vincoli.

Condizioni KKT nella programmazione lineare

$$\max \{ cx : Ax \le b \} \equiv -\min \{ -cx : Ax \le b \}$$

(KKT_1) $\quad -c + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i a_i = 0$

(KKT_4) $\quad \lambda_i \ge 0 \quad i = 1..m$

] ammissibilità duale

(KKT_3) $\quad Ax \le b$] ammissibilità primale

(KKT_4) $\quad \underbrace{\lambda_i (b_i - a_i^T x) = 0 \quad i = 1..m}_{\text{scarti complementari}}$

Consideriamo adesso il caso in cui X sia descritto tramite <u>vincoli di disuguaglianza e di uguaglianza</u>: $X = \{x \in \mathbb{R}^n : g_i(x) \leq 0,\ i=1,\dots,m,\ h_j(x) = 0,\ j=1,\dots,p\}$ con $g_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $i=1,\dots,m$, $h_j : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $j=1,\dots,p$ differenziabili.

La trattazione è analoga (segue lo stesso schema), ma con alcune differenze

Oss Non è possibile la trattazione con $h_j(x) = 0 \equiv \begin{cases} h_j(x) \leq 0 \\ -h_j(x) \leq 0 \end{cases}$. Infatti in tal caso $L_<(X,\bar{x}) = \emptyset$, o equivalentemente il sistema (S) è impossibile in ogni $x \in \mathbb{R}^n$.

<u>Linearizzazioni di X in $\bar{x}$</u>

$$L_<(X,\bar{x}) = \{d \in \mathbb{R}^n \mid \nabla g_i(\bar{x})^T d < 0,\ i \in I(\bar{x}),\ \nabla h_j(\bar{x})^T d = 0,\ j=1\dots p\}$$

$$L_\leq(X,\bar{x}) = \{d \in \mathbb{R}^n \mid \nabla g_i(\bar{x})^T d \leq 0,\ i \in I(\bar{x}),\ \nabla h_j(\bar{x})^T d = 0,\ j=1\dots p\}$$

L'inclusione $T(X,\bar{x}) \subseteq L_\leq(X,\bar{x})$ si dimostra similmente al caso delle sole disuguaglianze, mentre l'inclusione $L_<(X,\bar{x}) \subseteq T(X,\bar{x})$ richiede l'ipotesi che $\{\nabla h_j(\bar{x})\}_{j=1\dots p}$ siano linearmente indipendenti [e la dimostrazione sfrutta il teorema della funzione implicita].

$$\nabla f(\bar{x})^T d \geq 0 \quad \forall d \in T(X,\bar{x}) \implies \begin{cases} \nabla f(\bar{x})^T d < 0 \\ \nabla g_i(\bar{x})^T d < 0 & i \in I(\bar{x}) \\ \nabla h_j(\bar{x})^T d = 0 \end{cases}$$

$(+\ \{\nabla h_j(\bar{x})\}_{j=1\dots p}$ lin. indip.$)$ — non ammette alcuna soluzione $d \in \mathbb{R}^n$

Teo (KKT) Sia $\bar{x}$ un punto di minimo locale di (P) e supponiamo che i vettori $\{\nabla g_i(\bar{x})\}_{i \in I(\bar{x})} \cup \{\nabla h_j(\bar{x})\}_{j=1\dots p}$ siano linearmente indipendenti. Allora esistono $\lambda_i \geq 0$ con $i=1,\dots,m$, $\mu_j \in \mathbb{R}$ con $j=1\dots p$ tali che

$$\nabla f(\bar{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(\bar{x}) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j \nabla h_j(\bar{x}) = 0 \qquad (\overline{KKT_1})$$

$$\lambda_i g_i(\bar{x}) = 0 \quad i=1\dots m \qquad (\overline{KKT_2})$$

Le condizioni di ottimalità KKT sono quindi costituite dal sistema di equazioni e disequazioni (non lineari):

$$\nabla f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(x) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j \nabla h_j(x) = 0 \qquad (\overline{KKT_1})$$

$$\lambda_i g_i(x) = 0 \qquad i=1\dots m \qquad (\overline{KKT_2})$$

$$g_i(x) \leq 0 \qquad i=1\dots m \qquad (\overline{KKT_3})$$

$$h_j(x) = 0 \qquad j=1\dots p \qquad (\overline{KKT_5})$$

$$\lambda_i \geq 0 \qquad i=1\dots m \qquad (\overline{KKT_4})$$

'ammissibilità'

nelle incognite $x \in \mathbb{R}^n$, $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_m) \in \mathbb{R}^m$, $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_p) \in \mathbb{R}^p$.

<u>Def.</u> $L(x, \lambda, \mu) := f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(x) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j h_j(x)$ si dice fz. LAGRANGIANA di (P) $\min \{ f(x) : g_i(x) \leq 0,\ i=1\dots m,\ h_j(x) = 0,\ j=1\dots p \}$.

<u>Oss</u> $(\overline{KKT_1}) \equiv \nabla_x L(x, \lambda, \mu) = 0$

Altre qualifiche dei vincoli

- SLATER: g_i convesse, $i \in I(\bar{x})$

$h_j(x) = a_j^T x - b_j$ (con $a_j \in \mathbb{R}^n$, $b_j \in \mathbb{R}$) — h_j affini, $j = 1..p$; $\{\nabla h_j(\bar{x})\}_{j=1..p}$ lin. indip. $\quad + \quad \exists\, \hat{x} \in \mathbb{R}^n$ tale che $\begin{cases} g_i(\hat{x}) < 0 & i = 1 \dots m \\ h_j(\hat{x}) = 0 & j = 1 \dots p \end{cases}$

- MANGASARIAN-FROMOVITZ: $\{\nabla h_j(\bar{x})\}_{j=1..p}$ lin. indip.

$\exists\, d \in \mathbb{R}^n$ tale che $\begin{cases} \nabla g_i(\bar{x})^T d < 0 & i \in I(\bar{x}) \\ \nabla h_j(\bar{x})^T d = 0 & j = 1..p \end{cases}$ $\quad (\Longleftrightarrow L_<(X, \bar{x}) \neq \emptyset)$.

Sufficienza delle condizioni KKT

Teo Siano f e g_i convesse con $i \in I(\bar{x})$ per qualche $\bar{x} \in X$ e siano h_j affini con $j = 1..p$ ($h_j(x) = a_j^T x - b_j$ per opportuni $a_j \in \mathbb{R}^n$, $b_j \in \mathbb{R}$).
Se esistono $\lambda_i \geq 0$, con $i = 1..m$, e $\mu_j \in \mathbb{R}$, con $j = 1..p$, tali che valgono $(\overline{KKT}_1)$ e $(\overline{KKT}_2)$, allora $\bar{x}$ è un punto di minimo (globale) di (P).

dim Sia $x \in X$ qualsiasi.

$$f(x) - f(\bar{x}) \underset{f \text{ convessa}}{\geq} \nabla f(\bar{x})^T (x - \bar{x}) \underset{(\overline{KKT}_1) + (\overline{KKT}_2)}{=} - \sum_{i \in I(\bar{x})} \lambda_i \nabla g_i(\bar{x})^T (x - \bar{x}) - \sum_{j=1}^{p} \mu_j \nabla h_j(\bar{x})^T (x - \bar{x}) \underset{\substack{g_i \text{ convessa} \\ \nabla h_j(x) = a_j}}{\geq}$$

$$\geq - \sum_{i \in I(\bar{x})} \lambda_i (g_i(x) - g_i(\bar{x})) - \sum_{j=1}^{p} \mu_j (a_j^T x - a_j^T \bar{x}) \underset{x, \bar{x} \in X \Rightarrow a_j x = a_j \bar{x} = b_j}{=} - \sum_{i \in I(\bar{x})} \lambda_i (g_i(x) - g_i(\bar{x})) =$$

$$\underset{(\overline{KKT}_2)}{=} - \sum_{i \in I(\bar{x})} \lambda_i g_i(x) \underset{\substack{x \in X \\ \lambda_i \geq 0}}{\geq} 0 \qquad \blacksquare$$

Metodi per l'ottimizzazione vincolata

(P) $\min \{ f(x) : x \in X \}$ $\quad (f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, \ X \subseteq \mathbb{R}^n)$

→ Metodi per X generico insieme

→ Metodi con X descritto esplicitamente tramite vincoli di disuguaglianza e/o uguaglianza

METODI DELLE DIREZIONI AMMISSIBILI

$X \subseteq \mathbb{R}^n$ generico insieme convesso, f differenziabile con continuità.

In questo contesto $\bar{x} \in X$ si dice STAZIONARIO per (P) se

X convesso

$$\nabla f(\bar{x})^T d \geq 0 \quad \forall d \in F(X, \bar{x}) \qquad (\equiv \nabla f(\bar{x})^T (x - \bar{x}) \geq 0 \ \forall x \in X)$$

Idea: cercare $d^k \in F(X, x^k)$ tale che $\nabla f(x^k)^T d < 0$ e $x^k + d^k \in X$

ricerca di $t_k \in (0, 1]$ che soddisfi la condizione di Armijo

$$\text{(AJO)} \quad f(x^k + t_k d^k) \leq f(x^k) + c_1 t \nabla f(x^k)^T d^k \quad \text{con } c_1 \in (0,1)$$

Oss X convesso $\Rightarrow$ $x^k + t_k d^k = (1 - t_k) x^k + t_k (x^k + d^k) \in X$

Oss $\exists \tau > 0$ tale che (AJO) vale per ogni $0 < t \leq \tau$

$$\left(\varphi_k(t) = f(x^k + t d^k) \ \rightarrow \ \varphi_k'(0) = \nabla f(x^k)^T d^k < 0 \right)$$

Procedura di Armijo (P.Ar)

1) Scegliere $\gamma \in (0,1)$; $t = 1$
2) Se t soddisfa (AJO), allora STOP $(t_k = t)$
3) $t = \gamma t$
4) Ritornare a 2)

Nota: $t_k = \gamma^s$ dove s è il numero di iterazioni della procedura.

METODI DELLE DIREZIONI AMMISSIBILI

1) Scegliere $x^0 \in X$; $k=0$
2) Se $\nabla f(x^k)^T d \geq 0$ per ogni $d \in F(X, x^k)$, allora STOP
3) Scegliere $d^k \in F(X, x^k)$ tale che $\nabla f(x^k)^T d^k < 0$ e $x^k + d^k \in X$
4) Calcolare $t_k \in (0,1]$ che soddisfa (AJO) tramite (P.Ar)
5) $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$
6) $k = k+1$ e ritornare a 2)

Prop 1 Supponiamo che X sia compatto. Allora $\lim_{k \to +\infty} \nabla f(x^k)^T d^k = 0$

dim $\{f(x^k)\}_k$ è una successione decrescente; f è inferiormente limitata su X in quanto f è continua e X compatto. Quindi $\{f(x^k)\}_k$ è convergente. Pertanto:

$$0 \xleftarrow[k \to +\infty]{} [f(x^k) - f(x^{k+1})] \overset{(AJO)}{\geq} -c_1 t_k \nabla f(x^k)^T d^k = c_1 t_k |\nabla f(x^k)^T d^k| \geq 0$$

da cui $\lim_{k \to +\infty} t_k |\nabla f(x^k)^T d^k| = 0$.

Supponiamo che $\limsup_{k \to +\infty} |\nabla f(x^k)^T d^k| = \eta > 0$ e sia $\{x^{k_j}\}_j$ una sottosuccessione tale che $|\nabla f(x^{k_j})^T d^{k_j}| \xrightarrow[j \to +\infty]{} \eta$. Allora risulta $t_{k_j} \to 0^+$. Poiché $\{x^{k_j}\} \subseteq X$ e $\{x^{k_j} + d^{k_j}\} \subseteq X$ ($\|d^{k_j}\|_2 = \|x - x^{k_j}\|_2 \leq \|x\|_2 + \|x^{k_j}\|_2$ per un opportuno $x \in X$), per la compattezza di X (modulo prendere un'opportuna sottosuccessione) abbiamo $x^{k_j} \to \bar{x}$ e $d^{k_j} \to \bar{d}$ per qualche $\bar{x} \in X$ e $\bar{d} \in \mathbb{R}^n$. Quindi $\nabla f(\bar{x})^T \bar{d} = -\eta < 0$.

Per la procedura di Armijo risulta $f(x^{k_j} + \frac{t_{k_j}}{\gamma} d^{k_j}) - f(x^{k_j}) > c_1 \frac{t_{k_j}}{\gamma} \nabla f(x^{k_j})^T d^{k_j}$.

Per il teo (valor medio) risulta $f(x^{k_j} + \frac{t_{k_j}}{\gamma} d^{k_j}) - f(x^{k_j}) = \frac{t_{k_j}}{\gamma} \nabla f(x^{k_j} + \tau_{k_j} d^{k_j})^T d^{k_j}$

per un opportuno $\tau_{k_j} \in [0, \frac{t_{k_j}}{\gamma}]$. Quindi $\nabla f(x^{k_j} + \tau_{k_j} d^{k_j})^T d^{k_j} > c_1 \nabla f(x^{k_j})^T d^{k_j}$

Passando al limite $j \to +\infty$, si ottiene $\nabla f(\bar{x})^T \bar{d} \geq c_1 \nabla f(\bar{x})^T \bar{d}$ cioè $(1-c_1)\nabla f(\bar{x})^T \bar{d} \geq 0$.

Poiché $\nabla f(\bar{x})^T \bar{d} < 0$, deve essere $c_1 > 1$ in contraddizione con la scelta di c_1.

Quindi, deve essere $\eta = 0$ da cui $\lim_{k \to +\infty} \nabla f(x^k)^T d^k = 0$ ∎

La dimostrazione continua a valere per ogni metodo in cui si abbia $f(x^{k+1}) \leq f(x^k + t_k^A d^k)$ (sfruttando le successioni $\{x^k\}$ e $\{d^k\}$ generate dall'algoritmo e la successione $\{t_k^A\}$).

passo di Armijo

In particolare la condizione (AJO) può essere sostituita con la regola della minimizzazione limitata $t_k \in \arg\min \{ f(x^k + t d^k) \; : \; t \in [0,1] \}$.

Domande: Come si può verificare la condizione di stazionarietà del passo 2?

Come si può individuare d^k?

→ Metodo di Frank-Wolfe (o del gradiente condizionato)

Metodo delle direzioni ammissibili in cui $d^k := \bar{x}^k - x^k$ dove

$$\bar{x}^k \in \arg\min \{ \nabla f(x^k)^T (x - x^k) \; : \; x \in X \} \; ^{*}$$

La verifica della stazionarietà è immediata: se $\nabla f(x^k)^T (\bar{x}^k - x^k) = 0$ (in particolare se $\bar{x}^k = x^k$), allora x^k è un punto stazionario. In caso contrario $\nabla f(x^k)^T d^k < 0$ e $x^k + d^k = \bar{x}^k \in X$, cioè d^k è la direzione cercata.

* (si ricordi: X convesso $\Rightarrow$ $F(X, x^k) = \{ \lambda (x - x^k) \; : \; x \in X, \lambda \geq 0 \}$)

Poiché $\nabla f(x^k)^T (x - x^k) = \nabla f(x^k)^T x - \nabla f(x^k)^T x^k$, risulta

$$\min \{ \nabla f(x^k)^T (x - x^k) \; : \; x \in X \} \equiv \min \{ \nabla f(x^k)^T x \; : \; x \in X \}$$

Oss Se X è un poliedro, questo problema è un problema di Programmazione Lineare (P.L.)

Teo (convergenza) Supponiamo che X sia compatto. Allora ogni punto di accumulazione x^* di $\{x^k\}$ è un punto stazionario di (P).

<u>dim</u> x^* punto di accumulazione $\Rightarrow \exists \{x^{k_j}\}_j$ t.c. $x^{k_j} \to x^*$. Poiché $\{d^{k_j}\}_j$ è una successione limitata per via della compattezza di X, (modulo prendere una opportuna sottosuccessione) abbiamo $d^{k_j} \to \bar{d}^*$ per qualche $\bar{d}^* \in \mathbb{R}^n$. Per la scelta di d^{k_j} risulta $\nabla f(x^{k_j})^T d^{k_j} \leq \nabla f(x^{k_j})^T (x - x^{k_j})$ per ogni $x \in X$ e passando al limite $j \to +\infty$ si ottiene $\nabla f(x^*)^T (x - x^*) \geq \underbrace{\nabla f(x^*)^T d^* = 0}_{\text{per la prop precedente}}$ ■

<u>Proiezione su un insieme convesso</u>

(PR_X) $\min \{ \|y - x\|_2 : x \in X \}$ con $X \subseteq \mathbb{R}^n$ convesso, $y \in \mathbb{R}^n$ fissato

$$(PR_X) \equiv \min \{ \tfrac{1}{2} \|y - x\|_2^2 : x \in X \}$$

$$f(x) = \tfrac{1}{2} \|y - x\|_2^2 = \tfrac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i)^2 \to \frac{\partial f}{\partial x_i}(x) = x_i - y_i$$

$\nabla f(x) = x - y \to \nabla^2 f(x) = I$ è definita positiva $\to f$ è strettamente convessa $\to$ il problema della proiezione (PR_X) ammette un'unica soluzione:

$P_X(y) := \operatorname{argmin} \{ \|y - x\|_2 : x \in X \}$ si dice PROIEZIONE di $y \in \mathbb{R}^n$ su X

<u>Teo</u> Sia $y \in \mathbb{R}^n$ fissato. Allora

(i) $x^* = P_X(y) \iff (y - x^*)^T (x - x^*) \leq 0 \ \forall x \in X$

(ii) $\|P_X(v) - P_X(z)\|_2 \leq \|v - z\|_2 \quad \forall v, z \in \mathbb{R}^n$

(<u>Oss</u> (ii) garantisce che la fz. proiezione $P_X : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ è continua ed è "non espansiva").

<u>dim</u> (i) $x^* \in X$ punto di minimo del pb. convesso (PR_X) $\iff \nabla f(x^*)^T (x - x^*) \ \forall x \in X$

$\iff (x^* - y)^T (x - x^*) \geq 0 \ \forall x \in X \iff (y - x^*)^T (x - x^*) \leq 0 \ \forall x \in X$

(ii) Siano $v^* = P_X(v)$ e $z^* = P_X(z)$. Possiamo supporre $v^* \neq z^*$ (altrimenti la disuguaglianza richiesta è banalmente verificata).

Per la (i) utilizzata con $x = z^*$ e v^*, e con $x = v^*$ e z^* risultano

$$(v - v^*)^T (z^* - v^*) \le 0$$
$$(z - z^*)^T (v^* - z^*) \le 0$$

Sommando membro a membro, si ottiene: $0 \ge (v - v^* - z + z^*)^T (z^* - v^*) =$

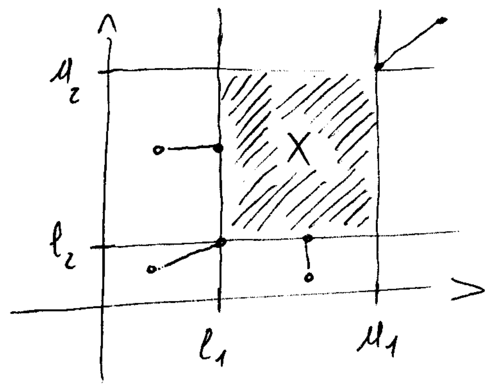
$= \|z^* - v^*\|_2^2 + (v - z)^T (z^* - v^*)$, da cui

$$\|z^* - v^*\|_2^2 \le (z - v)^T (z^* - v^*) \underset{\text{dis Schwarz}}{\le} \|z^* - v\|_2 \, \|z^* - v^*\|_2$$

e quindi $\|z^* - v^*\|_2 \le \|z - v\|_2$ ■

Esempi di proiezioni

- Vincoli di scatola



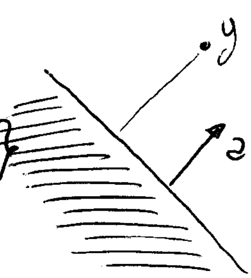
$X = \{x \in \mathbb{R}^n : \; l_i \le x_i \le u_i \quad i = 1..n\}$

$$\boxed{[P_X(y)]_i = \begin{cases} l_i & \text{se } y_i \le l_i \\ u_i & \text{se } y_i \ge u_i \\ y_i & \text{se } l_i < y_i < u_i \end{cases}}$$

$$(y - P_X(y))^T (x - P_X(y)) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - [P_X(y)]_i)(x_i - [P_X(y)]_i) = \sum_{i \in I_>} \underbrace{(y_i - u_i)}_{>0} \underbrace{(x_i - u_i)}_{\le 0} +$$

$$\sum_{i \in I_<} \underbrace{(y_i - l_i)}_{<0} \underbrace{(x_i - l_i)}_{\ge 0} \le 0 \quad \forall x \in X \qquad (I_> = \{i \mid y_i > u_i\}, \; I_< = \{i \mid y_i < l_i\})$$

- Unico vincolo lineare



$X_1 = \{x \in \mathbb{R}^n : \; a^T x = b\}$, $X_2 = \{x \in \mathbb{R}^n : \; a^T x \le b\}$, $a \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}$

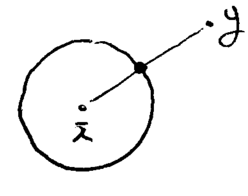
$\boxed{P_{X_i}(y) = y - \lambda_i a}$ con $\lambda_1 = (a^T y - b)/a^T a$, $\lambda_2 = \max\{0, \lambda_1\} = \frac{1}{a^T a} \max\{0, a^T y - b\}$

$$(y - [y - \lambda_i a])^T (x - [y - \lambda_i a]) = \lambda_i a^T (x - y + \lambda_i a) =$$

$$= \lambda_i (a^T x - a^T y) + \lambda_i^2 a^T a = \begin{cases} = (b - a^T y)(a^T y - b)/a^T a + (a^T y - b)^2 / a^T a = 0 & \forall x \in X_1 \\ \le \lambda_1 [(b - a^T y) + (a^T y - b)] = 0 & \forall x \in X_2 \end{cases}$$

- Sfera

$$X = \{x\in\mathbb{R}^n : \|x-\bar{x}\|_2 \le r\} = B(\bar{x}, r), \quad \bar{x}\in\mathbb{R}^n,\ r>0$$



$$P_X(y) = \bar{x} + \underbrace{\min\{\|y-\bar{x}\|_2,\ r\}}_{\lambda}\ \frac{y-\bar{x}}{\|y-\bar{x}\|_2}$$

Tramite una traslazione dell'origine possiamo supporre $\bar{x}=0$.

$$\|y\|_2\,(y-\lambda y/\|y\|_2)^T(x-\lambda y/\|y\|_2) = (\|y\|_2 y - \lambda y)^T(x-\lambda y/\|y\|_2) =$$

$$= (\|y\|_2-\lambda)\, y^T(x-\lambda y/\|y\|_2) = (\|y\|_2-\lambda)\,(y^Tx - \lambda\|y\|_2) \le \quad \text{dis Schwarz}$$

$$\le (\|y\|_2-\lambda)(\|y\|_2\|x\|_2 - \lambda\|y\|_2) = \|y\|_2(\|y\|_2-\lambda)(\|x\|_2-\lambda) \le 0$$

$$(\lambda<r \Rightarrow \lambda=\|y\|_2\ ;\quad \lambda=r \Rightarrow \|y\|_2\ge\lambda \text{ e } \|x\|_2\le\lambda).$$

→ **Metodo del gradiente proiettato**

Metodo delle direzioni ammissibili in cui $d^k = \bar{x}^k - x^k$ dove

$$\bar{x}^k = P_X(x^k - s_k\nabla f(x^k)) \quad \text{con } s_k>0.$$

Poichè $\bar{x}^k\in X$, abbiamo $x^k + d^k = \bar{x}^k \in X$.

Se $x^k \ne \bar{x}^k$ (cioè $d^k\ne 0$), allora d^k è una direzione di discesa

Poichè $\bar{x}^k$ è una proiezione, dalla caratterizzazione (i) con $x=x^k$ abbiamo

$$0 \ge (x^k - s_k\nabla f(x^k) - \bar{x}^k)^T(x^k-\bar{x}^k) = s_k\nabla f(x^k)^T(\bar{x}^k-x^k) + (x^k-\bar{x}^k)^T(x^k-\bar{x}^k) =$$

$$= s_k\nabla f(x^k)^Td^k + \|x^k-\bar{x}^k\|_2^2 \quad \text{da cui} \quad \nabla f(x^k)^Td^k \le -\tfrac{1}{s_k}\|x^k-\bar{x}^k\|_2^2 < 0$$

Se invece $\bar{x}^k = x^k$ (cioè $d^k=0$), allora x^k è un punto stazionario. Infatti:

Prop2 Sia $s>0$. Allora: x^* è un punto stazionario di (P) $\Leftrightarrow$ $P_X(x^*-s\nabla f(x^*)) = x^*$

dim $P_X(x^*-s\nabla f(x^*)) = x^* \overset{(i)}{\Leftrightarrow} (x^*-s\nabla f(x^*)-x^*)^T(x-x^*) \le 0 \quad \forall x\in X \Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow \nabla f(x^*)^T(x-x^*) \ge 0 \quad \forall x\in X$ ($\Leftrightarrow$ x^* stazionario) ∎

<u>Teo</u> (convergenza) Supponiamo che X sia compatto. Se $s_k \in [s, s']$ per ogni k per qualche $s, s' > 0$, allora ogni punto di accumulazione x^* di $\{x^k\}$ è un punto stazionario di (P).

<u>dim</u> x^* punto di accumulazione $\Rightarrow \exists \{x^{k_j}\}_j$ t.c. $x^{k_j} \to x^*$.

$$\| \bar{x}^{k_j} - x^{k_j} \|_2 = \| P_X(x^{k_j} - s_{k_j} \nabla f(x^{k_j})) - x^{k_j} \|_2 \overset{(ii)}{\leq} - s_{k_j} \nabla f(x^{k_j})^T d^{k_j} \leq -s \nabla f(x^{k_j})^T d^{k_j} \xrightarrow[j \to +\infty]{\text{Prop1}} 0$$

Modulo considerare un'opportuna sottosuccessione, $s_{k_j} \to \hat{s} \in [s, s']$. Quindi

$$0 = \lim_{j \to +\infty} \| P_X(x^{k_j} - s_{k_j} \nabla f(x^{k_j})) - x^{k_j} \|_2 = \| P_X(x^* - \hat{s} \nabla f(x^*)) - x^* \|_2$$

da cui, $x^* = P_X(x^* - \hat{s} \nabla f(x^*))$ e quindi x^* è stazionario (Prop 2) ■

Limitandosi a proiettare sulla regione ammissibile le iterazioni del metodo del gradiente si ottengo altri metodi di proiezione, che non ricadono però nello schema algoritmico dei metodi delle direzioni ammissibili:

1) Scegliere $x^0 \in \mathbb{R}^n$, $s > 0$; $k = 0$
2) Calcolare $x^{k+1} = P_X(x^k - s \nabla f(x^k))$
3) Se $x^{k+1} = x^k$, allora STOP
4) $k = k+1$ e ritornare a 2)

<u>Teo</u> (convergenza) Supponiamo che

- X sia compatto
- ∇f sia Lipschitziana con costante L $\left(\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\|_2 \leq L \|x - y\|_2 \ \forall x, y \in \mathbb{R}^n \right)$
- $0 < s < 2/L$

Allora ogni punto di accumulazione di $\{x^k\}$ è un punto stazionario di (P).

D'ora in avanti sia X descritto tramite vincoli di disuguaglianza e/o uguaglianza

ELIMINAZIONE DI VARIABILI

Alcuni vincoli di uguaglianza ($h_j(x)=0$) possono definire implicitamente i valori che una o più variabili possono assumere in funzione delle altre; l'eliminazione delle variabili "dipendenti" e dei relativi vincoli possono semplificare il pb.:

Esempio $(P_V)\ \min \{ x_1^2 + x_2^2 \ : \ x_1 + x_2 = 1 \}$

$$x_1 + x_2 = 1 \ \rightarrow \ x_2 = (1 - x_1) \ \rightarrow \ x_1^2 + x_2^2 = x_1^2 + (1-x_1)^2 = 2x_1^2 - 2x_1 + 1$$

$(P_{NV})\ \min \{ 2x_1^2 - 2x_1 + 1 \ : \ x_1 \in \mathbb{R} \}$

$$0 = \nabla(2x_1^2 - 2x_1 + 1) = 4x_1 - 2 \ \leftrightarrow \ x_1 = 1/2$$

Poiché $(2x_1^2 - 2x_1 + 1)$ è una fz. convessa, $\bar{x}_1 = 1/2$ risolve (P_{NV})

$\bar{x}_2 = (1 - \bar{x}_1) = 1/2 \ \rightarrow \ \bar{x} = (1/2, 1/2)$ risolve (P_V)

Infatti le condizioni KKT per (P_V) risultano essere

$$\left.\begin{matrix} \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{pmatrix} + \mu \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ x_1 + x_2 = 1 \end{matrix}\right| \rightarrow \begin{matrix} x_1 = x_2 = -\mu/2 \\ x_1 + x_2 = 1 \end{matrix} \ \rightarrow \ x_1 = x_2 = 1/2, \ \mu = -1$$

L'utilizzo non accorto di questa tecnica può portare ad errori:

$(P_V)\ \min \{ x_1^2 + x_2^2 \ : \ x_2^2 = (x_1 - 1)^3 \}$

$\downarrow$

$(P_{NV})\ \min \{ x_1^2 + (x_1 - 1)^3 \ : \ x_1 \in \mathbb{R} \}$ $\qquad x_1^2 + (x_1-1)^3 \longrightarrow -\infty$ se $x_1 \rightarrow -\infty$

Quindi (P_{NV}) è inferiormente illimitato, ma (P_V) non può esserlo in quanto la sua fz. obiettivo è non negativa su tutto $\mathbb{R}^2$. L'eliminazione del vincolo $x_2^2 = (x_1 - 1)^3$ ha causato l'eliminazione del vincolo $x_1 \geq 1$ in esso implicitamente contenuto.

- Vincoli lineari di uguaglianza

$$(P_V) \quad \min \{ f(x) \ : \ Ax = b \} \quad \text{con } f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, \ A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \ b \in \mathbb{R}^n$$

Ipotesi: $m \leq n$ e rango$(A) = m$

Non è restrittiva: in caso contrario il vincolo $\{Ax = b\}$ può essere inconsistente oppure alcune equazioni risultano ridondanti.

$$A = \begin{bmatrix} | & | & & | \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ | & | & & | \end{bmatrix}$$ si riordino $a_1, a_2, \dots a_n$ in modo tale che

(A_B è invertibile)

$A = [A_B \ A_N]$ con $A_B \in \mathbb{R}^{m \times m}$ e rango$(A_B) = m$, $A_N \in \mathbb{R}^{m \times (n-m)}$

Analogamente $x = (x_B, x_N)^T$. I valori delle variabili x_B sono funzione di quelli delle variabili x_N

$$[A_B \ A_N] \begin{bmatrix} x_B \\ x_N \end{bmatrix} = b \iff A_B x_B + A_N x_N = b \iff x_B = A_B^{-1} (b - A_N x_N)$$

e il problema (P_V) è equivalente al problema non vincolato

$$\min \{ f_R(x_N) \ : \ x_N \in \mathbb{R}^{n-m} \} \quad \text{dove } f_R(x_N) = f\left(\begin{matrix} A_B^{-1}(b - A_N x) \\ x_N \end{matrix} \right).$$

METODI DI PENALIZZAZIONE

- Penalizzazione esterna

Idea: ricondurre il problema ad una sequenza di problemi non vincolati, la cui funzione obiettivo penalizzi (in valore) in maniera crescente i punti non ammissibili per il problema originale.

Esempio $(P) \ \min \{ x_1^2 + x_2^2 \ : \ x_1 + x_2 - 1 = 0 \}$ $\quad \bar{x} = (1/2, 1/2)$ punto di minimo (globale)

Penalizzazione: $p_r(x) = x_1^2 + x_2^2 + r(x_1 + x_2 - 1)^2$ $\leftarrow$ p_r è convessa

$r > 0$

(P_r) $\min \{ x_1^2 + x_2^2 + r(x_1 + x_2 - 1)^2 \ : \ x \in \mathbb{R}^2 \}$

$$\nabla p_r(x) = 0 \iff \begin{cases} 2x_1 + 2r(x_1+x_2-1) = 0 \\ 2x_2 + 2r(x_1+x_2-1) = 0 \end{cases} \iff x_1 = x_2 = r/(1+2r)$$

$\bar{x}^r = (r/(1+2r), r/(1+2r))$ punto di minimo globale di (P_r) e $\bar{x}^r \xrightarrow[r \to +\infty]{} (1/2, 1/2)$

$$(P) \quad \min \{ f(x) : \underbrace{g_i(x) \le 0, \ i=1,\dots,m, \ h_j(x) = 0, \ j=1\dots p}_{x \in X} \}$$

$f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $g_i: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $h_j: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ differenziabili con continuità.

<u>Funzione di penalizzazione</u>: $p_r(x) := f(x) + r \sum_{i=1}^m g_i^{+2}(x) + r \sum_{j=1}^p h_j^2(x)$

dove $g_i^+(x) = \max\{0, g_i(x)\}$

<u>Oss</u> (i) $x \in X \Rightarrow p_r(x) = f(x)$, $x \notin X \Rightarrow p_r(x) \ge f(x)$

(ii) $r_1 \ge r_2 \Rightarrow p_{r_1}(x) \ge p_{r_2}(x) \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$

<u>Nota</u> g_i^+ può essere non differenziabile (nei punti $\hat{x}$ per cui $g_i(\hat{x}) = 0$), si veda ad esempio, $g_i(x) = x$ $(n=1)$, mentre g_i^{+2} è differenziabile e $\nabla(g_i^{+2}(x)) = 2 g_i^+(x) \nabla g_i(x)$ [nota che g_i^{+2} potrebbe non essere differenziabile 2 volte (nel caso che g_i^+ non sia differenziabile)].

(P_r) $\min \{ p_r(x) \ : \ x \in \mathbb{R}^n \}$

<u>Oss</u> (i) $p_r \equiv f$ su $X \Rightarrow$ il valore ottimo $\bar{v}$ di (P) è maggiore od uguale al valore ottimo $\bar{v}_r$ di (P_r) per ogni $r \ge 0$. Quindi $\bar{v} \ge \sup\{\bar{v}_r : r \ge 0\}$.

Inoltre $r_1 \ge r_2 \Rightarrow \bar{v}_{r_1} \ge \bar{v}_{r_2}$ e quindi $\sup\{\bar{v}_r : r \ge 0\} = \lim_{r \to +\infty} \bar{v}_r$

Prop Sia $r_k \uparrow +\infty$ e supponiamo che (P_{r_k}) ammetta un punto di minimo globale x^k per ogni k. Allora ogni punto di accumulazione di $\{x^k\}_k$ è un punto di minimo globale di (P).

Oss x^k ammissibile, cioè $x^k \in X$, $\Rightarrow$ x^k punto di minimo globale di (P)

Infatti: $\bar{v} \geq \bar{v}_{r_k} = p_{r_k}(x^k) \underset{x^k \in X}{=} f(x^k)$, da cui $\bar{v} = f(x^k)$ poiché x^k è ammissibile

Quindi, in genere, $\{x^k\}_k$ è costituita da punti non ammissibili, cioè 'esterni' alla regione ammissibile X (da cui il nome 'penalizzazione esterna').

x^k punto di minimo globale di (P_{r_k}) $\Rightarrow$ $\nabla p_{r_k}(x^k) = 0$

$$0 = \nabla p_{r_k}(x^k) = \nabla f(x^k) + \sum_{i=1}^{m} 2 r_k\, g_i^+(x^k) \nabla g_i(x^k) + \sum_{j=1}^{p} 2 r_k\, h_j(x^k) \nabla h_j(x^k)$$

$\lambda_i^k = 2 r_k\, g_i^+(x^k)$ e $\mu_j^k = 2 r_k\, h(x^k)$, $i=1..m$, $j=1..p$, sono moltiplicatori associati a x^k per il problema (P) (__Attenzione__: le altre condizioni KKT, cioè ammissibilità e complementarità in genere non sono soddisfatte $[\, g_i(x^k) > 0 \Rightarrow \lambda_i^k > 0\,]$)

__Nell'esempio__: $\mu^r = 2r(\bar{x}_1^r + \bar{x}_2^r - 1) = -2r/(1+2r) \xrightarrow[r \to +\infty]{} -1$ ← il moltiplicatore associato al punto di minimo $\bar{x} = (1/2, 1/2)$ del problema originale.

Teo Siano $r_k \uparrow +\infty$, $\tau_k \downarrow 0$ e $x^k \in \mathbb{R}^n$ tale che $\|\nabla p_{r_k}(x^k)\|_2 \leq \tau_k$. Ogni punto di accumulazione x^* di $\{x^k\}$ tale che $\{\nabla h_j(x^*)\}_{j=1..p} \cup \{\nabla g_i(x^*)\}_{i \in I(x^*)}$ siano linearmente indipendenti soddisfa le condizioni KKT insieme ai moltiplicatori

$$\lambda_i^* = \lim_{\ell \to +\infty} 2 r_{k_\ell}\, g_i^+(x^{k_\ell}) \qquad i=1...m$$

$$\mu_j^* = \lim_{\ell \to +\infty} 2 r_{k_\ell}\, h_j(x^{k_\ell}) \qquad j=1..p$$

dove $\{x^{k_\ell}\}_\ell$ è una sottosuccessione (qualsiasi) per cui $x^{k_\ell} \xrightarrow[\ell \to +\infty]{} x^*$.

Oss (i) x^* soddisfa le condizioni KKT $\Rightarrow$ x^* ammissibile per (P)

(ii) $\lambda_i^* > 0 \Rightarrow g_i(x^{k_\ell}) > 0$ definitivamente; $\mu_j^* \neq 0 \Rightarrow h_j(x^{k_\ell}) \neq 0$ def.nte.

La condizione $r_k \uparrow +\infty$ può essere sostituita da

$$\text{Se} \quad \sum_{i=1}^m g_i^+(x^k) + \sum_{j=1}^p h_j^2(x^k) \leq \theta \left(\sum_{i=1}^m g_i^+(x^{k-1}) + \sum_{j=1}^p h_j^2(x^{k-1}) \right), \begin{cases} \text{allora} & r_{k+1} = r_k \\ \text{altrimenti} & r_{k+1} = \beta r_k \end{cases}$$

con $\theta \in (0,1)$ e $\beta > 1$, ma la necessità di avere $r_k \to +\infty$ è intrinseca nel metodo: $g_i^+(x^{k_\ell}) \approx \lambda_i^* / 2r_{k_\ell}$, $h_j(x^{k_\ell}) \approx \mu_j^* / 2r_{k_\ell}$ $\to$ se $\lambda_i^* > 0$ oppure $\mu_j^* \neq 0$, è necessario avere $r_{k_\ell} \to +\infty$ per ottenere l'ammissibilità di x^*.

Difficoltà: $\nabla_r^2 p_r(x)$ può risultare mal condizionata per r grande.

Nell'esempio: $\nabla_r^2 p_r(x) = \begin{bmatrix} 2(1+r) & 2r \\ 2r & 2(1+r) \end{bmatrix}$ Gli autovalori sono $\lambda_1^r = 2$ e $\lambda_2^r = 2(1+2r)$ e $\binom{1}{-1}, \binom{1}{1}$ sono i corrispondenti autovettori $\lambda_2^r \xrightarrow[r \to +\infty]{} +\infty$

- Lagrangiana aumentata

$(P_{eq}) \quad \min \{ f(x) : h_j(x) = 0 \quad j = 1 \dots p \}$ (f, h_j differenziabili con continuità)

In questo contesto i vincoli di disuguaglianza $g_i(x) \leq 0$ vengono generalmente trasformati nei vincoli di uguaglianza $g_i(x) + s_i^2 = 0$ tramite variabili di scarto s_i.

Considerando una perturbazione dei vincoli della forma $h_j(x) = \delta_j$, la funzione di penalizzazione esterna diventerebbe:

$$f(x) + r \sum_{j=1}^p (h_j(x) - \delta_j)^2 = f(x) + \sum_{j=1}^p \underbrace{(-2r\delta_j)}_{\mu_j} h_j(x) + r \sum_{j=1}^p h_j^2(x) + \underbrace{r \sum_{j=1}^p \delta_j^2}_{\text{costante}}$$

Def $L_r(x, \mu) := f(x) + \sum_{j=1}^p \mu_j h_j(x) + r \sum_{j=1}^p h_j^2(x)$ si dice LAGRANGIANA AUMENTATA per (P_{eq}). $[L_r : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}]$

Oss $L_r(\cdot, \mu)$ è la funzione di penalizzazione esterna di

$$(PL_{eq}(\mu)) \quad \min \left\{ f(x) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j h_j(x) \ : \ h_j(x) = 0, \ j = 1 \dots p \right\}$$

dove $\mu \in \mathbb{R}^p$ è fissato, mentre L_r è la funzione lagrangiana di

$$(P_{eq}(r)) \quad \min \left\{ f(x) + r \sum_{j=1}^{p} h_j^2(x) \ : \ h_j(x) = 0 \ \ j = 1 \dots p \right\}$$

dove $r > 0$ è fissato. Sia $(PL_{eq}(\mu))$ che $(P_{eq}(r))$ sono problemi equivalenti a (P_{eq}).

Oss Se $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ e $\bar{\mu} \in \mathbb{R}^p$ soddisfano le condizioni KKT per (P_{eq}), allora $\bar{x}$ è un punto stazionario di $L_r(\cdot, \bar{\mu})$. Infatti:

$$\nabla_x L_r(\bar{x}, \bar{\mu}) = \nabla f(\bar{x}) + \sum_{j=1}^{p} \bar{\mu}_j \nabla h_j(\bar{x}) + 2r \sum_{j=1}^{p} h_j(\bar{x}) \nabla h_j(\bar{x}) \overset{KKT \Rightarrow h_j(\bar{x}) = 0}{=} \nabla f(\bar{x}) + \sum_{j=1}^{p} \bar{\mu}_j \nabla h_j(\bar{x}) \overset{(KKT_1)}{=} 0$$

(ciò non è in genere vero per la fz. di penalizzazione esterna: $\bar{x}$ ammissibile implica che $\nabla p_r(\bar{x}) = 0 \iff \nabla f(\bar{x}) = 0$)

Inoltre $(\bar{x}, \bar{\mu})$ è un punto stazionario di L_r, poiché $\dfrac{\partial L(\bar{x}, \bar{\mu})}{\partial \mu_j} = h_j(\bar{x}) = 0, \ j = 1 \dots p$.

Prop Siano $\{\mu^k\}_k \subseteq \mathbb{R}^p$ una successione limitata e $r_k \uparrow +\infty$, e supponiamo che

$$(P_{eq}(\mu^k)) \quad \min \left\{ L_{r_k}(x, \mu^k) \ : \ x \in \mathbb{R}^n \right\}$$

ammetta un punto di minimo globale x^k per ogni k. Allora ogni punto di accumulazione di $\{x^k\}_k$ è un punto di minimo globale di (P_{eq}).

Oss $\nabla_x L_r(x, \mu) = \nabla f(x) + \sum_{j=1}^{p} \underbrace{(\mu_j + 2r h_j(x))} \nabla h_j(x)$ suggerisce una tecnica di aggiornamento dei moltiplicatori

Teo Siano $\{\mu^k\}_k \subseteq \mathbb{R}^p$ limitata, $r_k \uparrow +\infty$, $\tau_k \downarrow 0$ e $x^k \in \mathbb{R}^n$ tale che $\| \nabla_x L_{r_k}(x^k, \mu^k) \|_2 \leq \tau_k$.
Allora ogni punto di accumulazione x^* di $\{x^k\}$ tale che $\{\nabla h_j(x^*)\}_{j=1 \dots p}$ siano

linearmente indipendenti soddisfa le condizioni KKT insieme ai moltiplicatori

$$\mu_j^* = \lim_{\ell \to +\infty} \mu_j^{k_\ell} + 2 r_{k_\ell} h_j(x^{k_\ell})$$

dove $\{x^{k_\ell}\}$ è una (qualsiasi) sottosuccessione per cui $x^{k_\ell} \xrightarrow[\ell \to +\infty]{} x^*$.

METODO DEI MOLTIPLICATORI

1. Scegliere $\delta \in (0,1)$, $\beta > 1$, $r_0 > 0$, $\mu^0 \in \mathbb{R}^p$; $viol = +\infty$, $k = 0$
2. Calcolare $x^k \in \operatorname{argmin} \{ L_{r_k}(x, \mu^k) : x \in \mathbb{R}^n \}$
3. Se $viol(x^k) := \max_{j=1 \dots p} |h_j(x^k)| = 0$, allora $\to$ STOP
4. Se $viol(x^k) > \delta\, viol$ $\begin{cases} \text{allora } r_{k+1} = \beta r_k \text{ e } \mu^{k+1} = \mu^k & (4a) \\ \text{altrimenti } r_{k+1} = r_k \text{ e } \mu_j^{k+1} = \mu_j^k + 2 r_k h_j(x^k) \quad j = 1 \dots p & (4b) \end{cases}$
5. $viol = viol(x^k)$, $k = k+1$ e ritornare a 2.

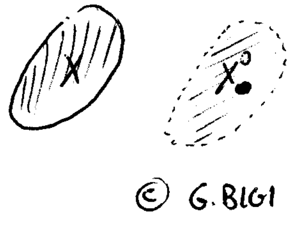
Oss (i) Se $viol(x^k) = 0$ (cioè x^k è ammissibile), allora $\nabla_x L_{r_k}(x^k, \mu^k) = 0$ (≈ 0) garantisce che x^k e μ^k soddisfano le condizioni KKT per (P_{eq})

(ii) L'aggiornamento (4a) può verificarsi al più un numero finito di volte consecutive { se la condizione di stop viene approssimata da $viol(x^k) \le \varepsilon$ per qualche tolleranza $\varepsilon > 0$ (altrimenti si avrebbe $\mu^k \equiv$ cost. def.nte, ma x^k non convergerebbe ad una soluzione ammissibile come garantito dai risultati precedenti).

• Penalizzazione interna : metodi barriera

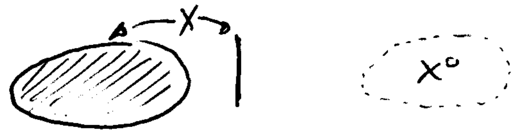
(P_{in}) $\min \{ f(x) : g_i(x) \le 0, \ i = 1 \dots m \}$ (f, g_i differenziabili con continuità)

Ipotesi: 1) $X^0 = \{ x \in \mathbb{R}^n : g_i(x) < 0 \ \ i = 1 \dots m \} \neq \emptyset$



2) $\forall x \in X \ \forall \varepsilon > 0 \ \exists y \in X^0 : \ \|y - x\|_2 \le \varepsilon$

L'ipotesi 2) richiede che ogni punto di $X \setminus X^0$ sia il limite di una opportuna successione di punti di X^0



Oss g_i convesse + vale 1) $\Longrightarrow$ vale 2).

Funzione barriera: fz. definita su X^0 che tende a $+\infty$ avvicinandosi a punti di $X \setminus X^0$

$B : X^0 \to \mathbb{R}$ t.c. $B(x) \geq 0 \quad \forall x \in X^0$ e $B(x) \to +\infty$ se $x \to \bar{x}$ per qualche $\bar{x} \in X \setminus X^0$.

Barriera inversa: $B(x) = -\sum_{i=1}^{m} 1/g_i(x)$

Barriera logaritmica: $B(x) = -\sum_{i=1}^{m} \log(-g_i(x))$

Oss In entrambi i casi: g_i convesse (su X^0) $\Longrightarrow$ B convessa (su X^0).

Idea dei metodi: $\varepsilon_k \downarrow 0$, $x^k \in \operatorname{argmin} \{ f(x) + \varepsilon_k B(x) \ : \ x \in X^0 \}$

Poiché X^0 è un insieme aperto, il problema (PB_ε) $\min \{ f(x) + \varepsilon B(x) \ : \ x \in X^0 \}$ è sostanzialmente un problema di ottimizzazione non vincolata: i punti di minimo soddisfano $\nabla (f(x) + \varepsilon B(x)) = 0$ e a partire da un punto di X^0 i metodi dell'ottimizzazione non vincolata, facendo attenzione alla scelta del passo, generano una sequenza di punti appartenenti a X^0 (da cui anche il nome di 'metodi del punto interno').

Oss f, g_i convesse $\Longrightarrow$ (PB_ε) è un problema convesso.

Esempi

$n=1$ $\quad (P_{in})$ $\min \{ x \ : \ 1 - x \leq 0 \}$ $\to$ $\bar{x} = 1$ punto di minimo globale di (P_{in})

(PB_ε) $\min \{ x - \varepsilon \log(x-1) \ : \ x > 1 \}$

$0 = \nabla(x - \varepsilon \log(x-1)) = 1 - \varepsilon/(x-1) \to x = 1 + \varepsilon \ (>1)$

$x(\varepsilon)$ è l'unico punto di minimo globale di (PB_ε) e $x(\varepsilon) \xrightarrow[\varepsilon \to 0^+]{} 1$

$n=2$ $\quad (P_{in}) \quad \min \left\{ \frac{1}{2} x_1^2 + \frac{1}{2} x_2^2 \ : \ 2 - x_1 \le 0 \right\}$ $\quad \bar{x}^* = (2,0)$ è l'unico punto di minimo globale di (P_{in})

Infatti le condizioni KKT per (P_{in}) risultano essere

$$\left.\begin{array}{l} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \lambda_1 (2 - x_1) = 0 \\ x_1 \ge 2, \ \lambda_1 \ge 0 \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{l} x_1 = \lambda_1 \\ x_2 = 0 \\ \lambda_1 (2 - x_1) = 0 \\ x_1 \ge 2, \ \lambda_1 \ge 0 \end{array}\right. \Rightarrow \left\{\begin{array}{l} x_1 = \lambda_1 \\ x_2 = 0 \\ \lambda_1 (2 - \lambda_1) = 0 \\ \lambda_1 \ge 2 \end{array}\right. \Rightarrow \left\{\begin{array}{l} x_1 = \lambda_1 = 2 \\ x_2 = 0 \end{array}\right.$$

$$(PB_\varepsilon) \quad \min \left\{ \frac{1}{2} x_1^2 + \frac{1}{2} x_2^2 - \varepsilon \log (x_1 - 2) \ : \ x_1 > 2 \right\}$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \nabla \left(\frac{1}{2} x_1^2 + \frac{1}{2} x_2^2 - \varepsilon \log (x_1 - 2) \right) = \begin{pmatrix} x_1 - \varepsilon / (x_1 - 2) \\ x_2 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \to x_1^2 - 2x_1 - \varepsilon = 0 \to x_1 = 1 \pm \sqrt{1+\varepsilon} \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\quad \Downarrow \\ \to x_2 = 0 \qquad\qquad\quad x_1 = 1 + \sqrt{1+\varepsilon} \end{array}$$

(poiché deve essere $x_1 > 2$)

$x(\varepsilon) = (1 + \sqrt{1+\varepsilon}, 0)$ è l'unico punto di minimo globale di (PB_ε)

ed inoltre $\quad x(\varepsilon) \xrightarrow[\varepsilon \downarrow 0]{} (2,0)$

Prop Ogni punto di accumulazione di $\{x^k\}_k$ è un punto di minimo globale di (P_{in}).

D'ora in avanti consideriamo il caso della barriera logaritmica, cioè

$$(PB_\varepsilon) \quad \min \left\{ q_\varepsilon(x) \ : \ x \in X^\circ \right\} \quad \text{con} \quad q_\varepsilon(x) = f(x) - \varepsilon \sum_{i=1}^{m} \log (-g_i(x))$$

Teo Supponiamo che

- f, g_i siano convesse
- l'insieme dei punti di minimo di (P_{in}) sia un insieme non vuoto e compatto.

Allora

(i) la successione $\{x^k\}_k$ ammette almeno un punto di accumulazione

(ii) $f(x^k) \to f^*$ e $q_{\varepsilon_k}(x^k) \to f^*$, dove f^* indica il valore ottimo di (P_{in}).

Legame con le condizioni KKT

Sia $x(\varepsilon)$ un punto di minimo locale di (PB_ε). Risulta

$$0 = \nabla q_\varepsilon(x(\varepsilon)) = \nabla f(x(\varepsilon)) - \varepsilon \sum_{i=1}^{m} \frac{1}{g_i(x(\varepsilon))} \nabla g_i(x(\varepsilon)) = \nabla f(x(\varepsilon)) + \sum_{i=1}^{m} \underbrace{\boxed{\frac{\varepsilon}{-g_i(x(\varepsilon))}}}_{\lambda_i(\varepsilon)} \nabla g_i(x(\varepsilon))$$

moltiplicatori associati a $x(\varepsilon)$ nel pb originale $\leftarrow$ $\lambda_i(\varepsilon)$

Sotto opportune ipotesi su un punto di minimo locale x^* di (P_{in}) (tra cui la lineare indipendenza dei vettori $\{\nabla g_i(x^*)\}_{i \in I(x^*)}$ [che garantisce l'unicità dei moltiplicatori]) è possibile dimostrare che in un opportuno intorno di x^* esiste un unico punto di minimo locale $x(\varepsilon)$ di (PB_ε) per ε sufficientemente piccolo e che $x(\varepsilon) \xrightarrow[\varepsilon \downarrow 0]{} x^*$ e $\lambda_i(\varepsilon) \xrightarrow[\varepsilon \downarrow 0]{} \lambda_i^*$ dove λ_i^* sono i moltiplicatori associati a x^*.

Nell'esempio con $n=2$ abbiamo $g_1(x) = 2 - x_1$ e quindi

$$\frac{\varepsilon}{-g_1(x(\varepsilon))} = \frac{\varepsilon}{\sqrt{1+\varepsilon} - 1} \xrightarrow[\varepsilon \downarrow 0]{} 2 \leftarrow \text{il moltiplicatore } \lambda_1 \text{ associato a } \bar{x}^* = (2,0).$$

$x(\varepsilon)$ e $\lambda_i(\varepsilon) = \varepsilon / -g_i(x(\varepsilon))$ soddisfano $\nabla f(x(\varepsilon)) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i(\varepsilon) \nabla g_i(x(\varepsilon)) = 0$ (per la scelta di $\lambda_i(\varepsilon)$), $g_i(x(\varepsilon)) \leq 0$ (poiché $x(\varepsilon) \in X^0$ [quindi in realtà $g_i(x(\varepsilon)) < 0$]) e quindi anche $\lambda_i(x(\varepsilon)) \geq 0$ [$\varepsilon > 0$] ma $\lambda_i(\varepsilon)(-g_i(x(\varepsilon))) = \varepsilon > 0$ mentre le condizioni KKT richiederebbero $\lambda_i(\varepsilon)(-g_i(x(\varepsilon))) = 0$.

Versione approssimata di KKT:

$$\nabla f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(x) = 0$$

$$g_i(x) + s_i = 0 \quad i = 1 \dots m$$

$$\lambda_i s_i = \varepsilon \quad i = 1 \dots m$$

$$\lambda_i, s_i \geq 0 \quad i = 1 \dots m$$

Metodi primali-duali del punto interno: risoluzione successiva di questo sistema nelle variabili (x, s, λ) per $\varepsilon \downarrow 0$ con opportune versioni del metodo di Newton-Raphson. Difficoltà: i vincoli di disuguaglianza; idea: considerare (x, s, λ) con $\lambda_i, s_i > 0$ e modificare la direzione di Newton del sistema di equazioni in modo da preservare queste proprietà di positività.

Metodi primali-duali per la programmazione lineare

$$(P)\quad \max\{c^T x \ : \ Ax \le b\} \qquad A = \begin{bmatrix} - a_1^T - \\ \vdots \\ - a_m^T - \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times n},\ b \in \mathbb{R}^n$$

$\downarrow$ pb. duale

$$(D)\quad \min\{b^T\lambda \ : \ A^T\lambda = c,\ \lambda \ge 0\}$$

$$(\hat{P})\quad \max\{c^T x \ : \ Ax + s = b,\ s \ge 0\}$$

Condizioni KKT

$$\boxed{\begin{array}{ll} A^T\lambda = c & \\ Ax \le b & \\ \lambda_i(b_i - a_i^T x) = 0 & i=1\dots m \\ \lambda_i \ge 0 & i=1\dots m \end{array}} \xrightarrow{s = b - Ax} \boxed{\begin{array}{ll} A^T\lambda - c = 0 & \\ Ax + s - b = 0 & \\ \lambda_i s_i = 0 & i=1\dots m \\ \lambda_i \ge 0,\ s_i \ge 0 & i=1\dots m \end{array}}$$

Condizioni KKT approssimate

$$\boxed{\begin{array}{ll} A^T\lambda - c = 0 & \\ Ax + s - b = 0 & \\ \lambda_i s_i = \varepsilon & i=1\dots m \\ \lambda_i \ge 0,\ s_i \ge 0 & i=1\dots m \end{array}}$$

$$\Updownarrow$$

$$\boxed{\begin{array}{c} F(x,s,\lambda) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \varepsilon e \end{bmatrix} \\ \lambda, s \ge 0 \end{array}}$$

Sia $F : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m$ data da

$$F(x,s,\lambda) = \begin{bmatrix} A^T\lambda - c \\ Ax + s - b \\ \Lambda S e \end{bmatrix}$$

con $\Lambda = \mathrm{diag}\{\lambda_1, \dots, \lambda_m\} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_m \end{bmatrix}$, $S = \mathrm{diag}\{s_1, \dots, s_m\}$, $e = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^m$

Il metodo di Newton-Raphson per la risoluzione di $F(x,s,\lambda) = 0$ fornisce la direzione $d = (d_x, d_s, d_\lambda)$ che risolve il sistema $JF(x,s,\lambda)\, d = -F(x,s,\lambda)$. (Nd)

Se (x,s) è ammissibile per $(\hat{P})$ con $s_i > 0$ $i=1\dots m$ e λ è ammissibile per (D) con $\lambda_i > 0$ $i=1\dots m$, il sistema (Nd) diventa

$$(Nd)\quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & A^T \\ A & I & 0 \\ 0 & \Lambda & S \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_x \\ d_s \\ d_\lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -\Lambda S e \end{bmatrix}$$

Affinche' $\begin{pmatrix} x' \\ s' \\ \lambda' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ s \\ \lambda \end{pmatrix} + \alpha \begin{pmatrix} d_x \\ d_s \\ d_\lambda \end{pmatrix}$ soddisfi la richiesta $\lambda_i' > 0$, $s_i' > 0$ $i=1\dots m$

è molto probabile che risulti $\alpha \ll 1$. <u>Idea</u>: sostituire $-\Lambda S e$ con $-\Lambda S e + \sigma\mu e$ dove $\mu = \sum_{i=1}^m \lambda_i s_i / m > 0$ e $\sigma \in [0,1]$ in modo che la direzione di Newton "punti" verso punti (x', s', λ') per cui $\lambda'_i s'_i \approx \sigma\mu > 0$.

METODO PRIMALE - DUALE

1. Scegliere (x^0, s^0, λ^0) tale che $Ax^0 + s^0 = b$, $A^T\lambda^0 = c$, $\lambda^0_i, s^0_i > 0$ $i=1..m$; $k=0$
2. Risolvere il sistema lineare

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & A^T \\ A & I & 0 \\ 0 & \Lambda^k & S^k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_x^k \\ d_s^k \\ d_\lambda^k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -\Lambda^k S^k e + \sigma_k \mu_k e \end{bmatrix}$$

dove $\Lambda^k = \operatorname{diag}\{\lambda_1^k, \dots \lambda_m^k\}$, $S^k = \operatorname{diag}\{s_1^k, \dots, s_m^k\}$, $\mu_k = \sum_{i=1}^m \lambda_i^k s_i^k / m$, $\sigma_k \in [0,1]$

3. Calcolare $\alpha^k > 0$ tale che $s_i^k + \alpha_k (d_s^k)_i$, $\lambda_i^k + \alpha_k (d_\lambda)_i^k > 0$ $i=1..m$.
4. Porre $(x^{k+1}, s^{k+1}, \lambda^{k+1}) = (x^k, s^k, \lambda^k) + \alpha_k (d_x^k, d_s^k, d_\lambda^k)$, $k=k+1$, e ritornare a 2.

- Penalizzazione interna/esterna

(P) $\min \{ f(x) : g_i(x) \le 0, i=1..m, h_j(x) = 0, j=1..p \}$

Si utilizzano le tecniche di penalizzazione interna per i vincoli di disuguaglianza e quelle di penalizzazione esterna per i vincoli di uguaglianza, costruendo la funzione di penalizzazione

$$f(x) - \varepsilon \sum_{i=1}^m \log(-g_i(x)) + r \sum_{j=1}^p h_j^2(x)$$

definita su $X^0 = \{x \in \mathbb{R}^n : g_i(x) < 0 \quad i=1...m\}$.