# ${\bf Metodi}$ e Ottimizzazione di Big ${\bf Data}$ - Picciali

# Indice

1	Esempio di Dantling
2	Modello
	2.1 Modello Matematico       3         2.1.1 Problema di Dantzing - Modello       3
3	Big Data
	3.1 Caratteristiche
4	Data Mining
	4.1 Problemi Data Mining 4.1.1 Classificazione supervisionata 4.1.2 Classificazione non supervisionata 4.1.3 Regressione 4.2 Metodi del Data Mining (DM)
5	Problemi di ottimizzazione $R^n$ $\S$
	5.1 Problemi di ottimizzazione continua definisi su $\mathbb{R}^n$
6	Definizioni Fondamentali
	Norma di un vettore  Distanza  Intorno  RIEPIGOLO
7	Condizioni di Minimo
	7.1 Punto di minimo globale
С	orollario
	orollario
	7.5 Concavità
	7.6 Applicazioni convessità167.7 Derivata direzionale di $f$ in $x$ lungo direzion $d$ 137.7.1 Sviluppo di Taylor I ordine147.7.2 Sviluppo Taylor II ordine147.8 Segno di una matrice187.8.1 Matrice Hessiana187.8.2 Criterio dei minori di Nord-Ovest187.8.3 Segno di una matrice - Autovalori/Autovettori16
8	Condizioni di esistenza delle soluzioni
	8.1 Definizioni preliminari

9	Condizioni di ottimo per problemi non vincolati	19
	9.0.1 Direzione di discesa	
10	Condizioni di ottimo per problemi vincolati con insieme ammissibile	22
	<ul> <li>10.1 Condizioni di ottimo per problemi vincolati con insieme ammissibile convesso</li> <li>10.2 Problemi con vincoli lineari</li></ul>	23 25 26
11	Condizioni di Ottimo per problemi vincolati	27
	11.1 Condizioni di ottimo analitiche 11.1.1 Lagrangiana generalizzata 11.1.2 Condizioni necessarie di Fritz John 11.2 Condizioni di Qualificazione dei Vincoli o Condiziondi di Regolarità 11.2.1 Condizioni di qualificazione dei vincoli 11.2.2 Condizioni necessarie di KKT (Karush-Kuhn-Tucker) 11.2.3 Moltiplicatori di Lagrange 11.3 Problemi con vincoli di box 11.4 Condizioni Sufficienti KKT	28 28 28 29 30 31 33
<b>12</b>	Cenni sulla Teoria Statistica	34
	12.1 Teoria di Vapinil-Chervonenkis	35
13	Iperpiani Orientati	37
	13.1 Iperpiani con gap di tolleranza	
14	Teoria della Dualità	45
	14.1 Introduzione14.2 Dualità di Wolfe14.3 Programmazione Quadratica - Duale	45 46 48
15	SVM Lineari	50

# 1 Esempio di Dantling

Vogliamo assegnare 70 dipendenti a 70 mansioni, massimizzando la riuscita complessiva del lavoro.

Vogliamo in particolare assegnare:

- 1. Ogni dipendente a una mansione;
- 2. Ogni mansione ad un dipendente;

Se dovessimo enumerarli avremmo  $\rightarrow 70!$  possibilità NON CALCOLABILE

Per risolvere questa problematica occorre utilizzare un **approccio modellistico**. Esso può essere di due tipologie:

- 1. ad-hoc ground-rule approch: cioè delle persone di esperienza propongono una buona soluzione,ma questa non è ottima;
- 2. ricerca operativa;

# 2 Modello

Il **modello** è usato per inndicare una costruzione artificiale utile ad evidenziare delle proprietà specifiche di oggetti reali:

- 1. modelli reali concrete;
- 2. Astratti: modelli matematici che usano il simbolismo per mettere in evidenza le relazioni principali dell'oggetti;

Per ottenere un buon modello occorre:

- 1. Rappresentare il modello matematico che ritrae gli aspetti prinicipali del problema che stiamo studiando;
- 2. Determinare una soluzione ottima del modello o una sua buona approssimazione

### 2.1 Modello Matematico

Nel caso di un **modello matematico** occorre:

- 1. Avere una dettagliata descrizione verbale del problema;
- 2. Identificare le **variabili di decisione**, che rappresentano le grandezze controllabili e rappresentano le **incognite del problema**;
- 3. Esprimere quantitativamente i legami tra le variabili e le limitazione su quest'ultima e definiscono l'**insieme ammissibile**. Se il problema è ben formulato → l'insieme ammissibile è non vuota / non banale.;
- 4. Definire la funzione obiettivo da max o min.

Infine il problema è nella forma:

$$\min f(x)$$

$$x \in S$$

### 2.1.1 Problema di Dantzing - Modello

Applicando ciò che è stato detto in 2.1 e 2:

- 1. Variabile di decisione  $x_{ij} = \begin{cases} 1 \text{ se } i \text{ svolge il lavoro } j \\ 0 \text{ altrimenti} \end{cases}$ ,  $i, j = 1, \dots, 70$
- 2. Ogni dipendente svolge una mansione:

$$\sum_{j=1}^{70} x_{i,j} = 1$$
  $\forall i = 1, \dots, 70$ 

3. Ogni mansione un dipendente:

$$\sum_{i=1}^{70} x_{i,j} = 1$$
  $\forall j = 1, \dots, 70$ 

4. Il parametro  $c_{i,j}$  è la capacità del dipendente i di svolgere la mansione j:

$$\max \sum_{i=1}^{70} \sum_{j=1}^{70} c_{i,j} x_{i,j}$$

# 3 Big Data

I big data sono l'insieme di grandi quantità di dati mutevole, non calcolabile/esaminabile senza l'assistenza di un calcolatore da cui trarne informazioni.

### 3.1 Caratteristiche

Le caratteristiche dei big data sono:

- volume: dimensione del data set;
- velocità: velocità di generazione dei dati;
- varietà: quante tipologie di dati sono presenti;
- Varibailità: quanto sono consistenti i dati tra di loro;
- Complessità: in genere maggiore è la dimensione del dataset, maggiore è la sua complessità di gestione;

# 4 Data Mining

Il data mining consiste nell'estrazione di sapere e conoscenza dai big data. Si compone delle seguenti caratteristiche:

- estrazione: estrazione con tecniche analitiche di informazioni implicite;
- esplorazione e analisi: scoperta di pattern non evidenti.

Un **pattern** è un oggetto descritto da un insieme finito di attributi numerici. In pratica rappresenta una riga di un dataset mentre la feature una sua colonna.

Entrambe le caratteristiche dipendono fortemente dal dominio di applicazione di queste tecniche di estrazione, esplorazione e analisi di dati.

### 4.1 Problemi Data Mining

I problemi di data mining possono essere classificati in due macroaree:

- Classificazione: cioè l'appartenenza o meno di un oggetto in una classe.
  - supervisionata;
  - non supervisionata;
- Regressione: previsione di un valore specifico, le variabili di uscita sono onde continue;

### 4.1.1 Classificazione supervisionata

Nella **classificazione supervisionata** sono noti a priori, tra i dati di training e di set i pattern che rappresentano le diverse classi e si vuole determinare un modello matematica che definisca la classe di appartenenza.

### 4.1.2 Classificazione non supervisionata

Nella classificazione non supervisionata non sono noti a priori i pattern rappresentativi delle classi. Si vuole determinare il numero di classi di similitudine e un modello matematico che dato un pattern dello spazio delle caratteristiche, definisca la corrispondente classe di appartenenza.

### 4.1.3 Regressione

Nella **regressione** sono note coppie di pattern/target rappresentative di una funzione incognita a valori reali. Si vuole determinare una funzione analitica che approssima la funzione incognita.

# 4.2 Metodi del Data Mining (DM)

I metodi di DM sono i seguenti:

- Clustering;
- Reti Neurali:
- Super Vector Machine;
- Programmazione logica;
- Alberi di decisione;

# 5 Problemi di ottimizzazione $\mathbb{R}^n$

L'ottimizzazione (**programmazione matematica**) ha per oggetto lo studio di problemi di decsioni in cui si richiede di determinare i punti di minimo o di massimo din ubna funzione a valori reali in un insieme prefissato.

A tale scopo occore rappresentare il problema di ottimizzazione, a partire da un descrizione logica e qualitativa del problema di decisione, introducendo un opportuno modello matematico che sarà dotato di opportune **variabili** ( rappresentanti le incognite del nostro problema). Inoltre, occorre esprimere quantitativsamente i **legami** esistenti tra le variabili e le **limitazioni** da imporre sulle variabili, detti **vincoli**. L'insieme di quest'ultime costituisce l'**insieme ammissibile**  $S \subseteq X$ .

Se il problema è stato ben formulato l'insieme ammissibile non sarà vuoto.

Infine, sull'insieme ammissibile occerre definire la **funzione obiettivo** che si intende massimizzare o minimizzare, costituita da una funzione a valori reali:

$$f: S \to R$$

A partire dal modello matematico del problema di ottimizzazione 2.1, gli aspetti teorici dell'analisi possono riguardare:

- esistenza e unicità della soluzione ottima;
- caratterizzazione delle soluzioni ottime attraverso lo studio delle condizioni di ottimalità;
- stabilità delle soluzioni al variare dei parametri del modello o dei dati;

I problemi di ottimizzazione si possono classificare a seconda dello stazio delle variabili, della struttura dell'insieme ammissibile e delle ipotesi sulla funzioni obiettivo.

Una prima distinzione:

• problemi a dimensione infinita in cui la soluzione va cercata in uno spazio di funzioni i cui elementi possono essere vettori di funzioni di una o più varibili. Tra cui vi sono i problemi di Controllo Ottimo:

 problemi di ottimizzazione discreta in cui le variabili sono vincolate a essere numeri interi.

In particolare comprendono:

- o programazzione a numeri interi;
- ottimizzazione combinatoria;
- o ottimizzazione su reti.

;

• problemi **continui a dimensione finita** in cui lo spazio delle variabili è uno spazio lineare a dimensione finita  $\mathbb{R}^n$ .

# 5.1 Problemi di ottimizzazione continua definisi su $\mathbb{R}^n$

Nei problemi continui a dimensione finita, lo spazio delle variabile o **spazio delle feature**, è uno spazio lineare in  $\mathbb{R}^n$ . In particolare si ha un problema del tipo:

$$\min f(x)$$
$$x \in S \subseteq \mathbb{R}^n$$

 $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} :=$  funzione obiettivo

S :=insieme ammissibile

Questi problemi possono essere classificate in base alla struttura dell'insieme ammissibile e alle ipotesi sulla funzione obiettivo:

- Se  $S = \mathbb{R}^n$  si parla di **ottimizzazione non vincolata**;
- Se  $S \subset \mathbb{R}^n$  si parla di **ottimizzazione vincolata**. Il problema più comune di questa categoria è quello in cui S è descritto attraverso un **insieme finito di vincoli di uguaglianza** e disegueglianza:

$$S = \{x \in \mathbb{R}^n : g(x) \leq 0, h(x) = 0\}$$

In cui:  $g: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m \quad e \quad h: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^p$  vettori di funzioni assegnate.

Un'ulteriore classificazione può essere effettuata considerando le proprietà della funzione obiettivo e dei vincoli; si considera in particolare le proprietà di linearità, differenzia bilità, convessità.

Se guardiamo le proprietà di linearita, possiamo evidenziare:

- **problemi di Programmazione lineare** (PL): la funzione obiettivo è lineare e i vincoli sono espressi da un sistema di equazioni e disequazioni lineari;
- problemi di Programmazione non Lineare (PNL): in cui la funzione obiettivo o i vincoli non sono necessariamente lineare.

Se guardiamo le proprietà di differenziabilità i problemi differenziabili e non differenziabili.

Dal punto di vista della convessità, distinguiamo:

• **problemi di programmazione convessa**: sono problemi di minimo in cui la funzione obiettivo è convessa e l'insieme ammissibile è un insieme convesso;

• problemi non convessi: sono problemi che non rientrano nella prima categoria;

# 6 Definizioni Fondamentali

### Norma di un vettore

La **norma** è un'applicazione per cui:  $\|\cdot\|: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ .

Valgono le seguenti proprietà:

1. 
$$||x|| \geqslant 0$$
  $\forall x \in \mathbb{R}^n$ 

2. 
$$||x|| = 0 \iff x = 0_n$$

3. 
$$||x+y|| \le ||x|| + ||y|| \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n$$

4. 
$$\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\| \quad \forall \alpha \in \mathbb{R}, \forall x \in \mathbb{R}^n$$

Le norme più conosciute sono:

• norma p: $||x||_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}$ :

$$\circ$$
 p=1  $\rightarrow$ norma 1  $||x||_1 = \sum_{i=1}^p |x_i|$ 

$$\circ \quad \mathbf{p} \! = \! 2 \to \! \mathbf{norma} \, 2 \, (\mathbf{Euclidea}) \quad \|x\|_2 \! = \! \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$$

$$\circ$$
 p= $\infty$   $\rightarrow$  norma  $\infty$   $||x||_{\infty} = \max_{i=1,\ldots,n} |x_i|$ 

Tramite il concetto di norma si può definire il concetto di distanza, per arrivare in conclusione a definire il concetto di **intorno di un punto**.

#### Distanza

La distanza è definita come:  $d(x,y): \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 

Gode delle seguenti proprietà:

1. 
$$d(x,y) \geqslant 0 \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n$$

2. 
$$d(x, y) = 0 \iff x \equiv y$$

3. 
$$d(x, y) = d(y, x)$$
 simmetrico  $\forall x, y \in \mathbb{R}^n$ 

4. 
$$d(x,y) \leq d(x,z) + d(z,y) \quad \forall x, y, z \in \mathbb{R}^n$$

5. 
$$d(x, y) = ||x - y||$$

### Intorno

Un **intorno** di un punto  $x^*$  racchiude tutti i punto appartententi ad una sfera di raggio  $\rho$  e centrata in  $x^*$ . In altre parole:

$$B(x^*, \rho) = \{x \in \mathbb{R}^n : ||x - x^*|| \le \rho\}$$
 (sfera chiusa)

$$B(x^*, \rho) = \{x \in \mathbb{R}^n : ||x - x^*|| < \rho\}$$
 (sfera aperta)

### **RIEPIGOLO**

Sia S un sottoinsieme di  $\mathbb{R}^n$  e sia  $f: S \to \mathbb{R}$  una funzione a valori reali definita su S.

Il problema di ottimizzazione finita su  $\mathbb{R}^n$  può essere formulato come il problema di determinare un punto di minimo di f su S; in questa coso di può dire che S è l'**insieme ammissibile** e che f è la **funzione obiettivo**.

# <u>N.B.:</u>

Un problema di massimo si può semmpre ricondurre ad un problema di minimo cambiando il segno della funzione obiettimo:

$$\max f(x) \Longleftrightarrow -\min - f(x)$$

# 7 Condizioni di Minimo

# 7.1 Punto di minimo globale

Un punto  $x^* \in S$  è detto punto di **minimo globale** di f su S se:

$$f(x^*) \leqslant f(x) \quad \forall x \in S$$

e il valore  $f(x^*)$  è il minimo globale di f su S.

Si dice che  $x^* \in S$  è un punto di **minimo globale stretto** di f su S se:

$$f(x^*) < f(x) \quad \forall x \in S, x \neq x^*$$

### 7.2 Punto di minimo locale

Un punto  $x^* \in S$  è detto di **minimo locale** di f su S se esiste un intorno  $B(x^*, \rho)$  con  $\rho > 0$  tale che:

$$f(x^*) \leqslant f(x) \quad \forall x \in S \cap B(x^*, \rho)$$

Un punto  $x^* \in S$  è detto di **minimo locale stretto** se esiste un intorno  $B(x^*, \rho)$  con  $\rho > 0$  tale che:

$$f(x^*) < f(x) \quad \forall x \in S \cap B(x^*, \rho)$$

### 7.3 Punto di minimo locale isolato

Dato un punto  $x^*$  è un punto di **minimo locale isolato** quando è un punto di minimo locale, ma l'intorno non è totalmente contenuto in S.

### 7.4 Convessità

## Funzione convessa

Un funzione f(x) è **convessa** nell'insieme S se:

$$\forall x, y \in S \quad \forall \lambda \in [0, 1] \rightarrow f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y)$$

In cui:

•  $f(\lambda x + (1 - \lambda)y) :=$  segmento che connette x,y;

•  $\lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y) :=$  segmento che connette f(x) e f(y)

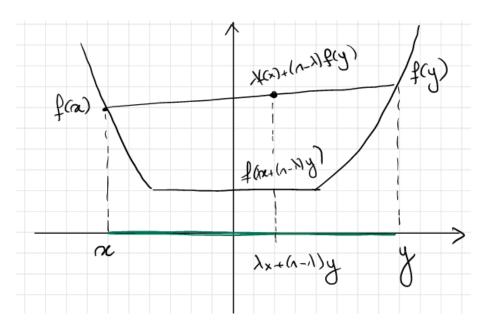


Figura 1.

Inoltre, f(x) è **strettamente convessa** su S se  $\forall x, y \in S, \forall \lambda \in [0, 1]$ :

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) < \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y)$$

Oss.:

Convessità  $\Rightarrow$  Esistenza di minimo

es.  $f(x)=e^x$ , è strettamente convessa su  $\mathbb{R}$ , ma non ammette minimo globale.

#### Insieme convessi

S è un **insieme convesso** se  $\forall x, y \in S \rightarrow \lambda x + (1 - \lambda)y \in S \quad \forall \lambda \in [0, 1]$ 

### Corollario

Se g(x) è convesso  $\rightarrow S: \{x \in \mathbb{R}: g(x) \leq 0\}$  è convesso

# Dimostrazione

Occorre dimostrare che  $\forall x, y \in S \quad \lambda x + (1 - \lambda)y \in S \quad \forall \lambda \in [0, 1]$ 

Quindi:

$$x,y\in S \to g(x)\leqslant 0,\,g(y)\leqslant 0 \to \lambda x + (1-\lambda)y\in S \land g(\lambda x + (1-\lambda)y\leqslant 0$$

Poiché gè convessa<br/>— $g(\lambda x + (1-\lambda)y) \leqslant \lambda g(x) + (1-\lambda)g(y)$ :

- $(1-\lambda) \geqslant 0$  poiché  $\lambda \in [0,1]$
- $g(y), g(x) \leq 0$  per ipotesi;

Quindi:

$$g(\lambda x + (1-\lambda)y) \leqslant \lambda g(x) + (1-\lambda)g(y) \leqslant 0 \to \lambda x + (1-\lambda)y \in S \to \textbf{Insieme convesso}$$

### Corollario

Se  $S_1, \ldots, S_n$  sono convessi  $\to S_1 \cap \cdots \cap S_n$  è convesso.

### **Dimostrazione**

$$x, y \in S_1 \Longleftrightarrow x, y \in S$$

Se 
$$S_i$$
 convesso  $\to \lambda x + (1 - \lambda)y \in S_i$   $\forall \lambda \in [0, 1] \ \forall i \longrightarrow \lambda x + (1 - \lambda)y \in S_i$   $i = 1, ..., n$   
 $\to \lambda x + (1 - \lambda)y \in S \to S$ è convesso

Inoltre:

- Se  $S = \{x \in \mathbb{R}^n : g_i(x) \leq 0 \quad i = 1, 2, \dots, n\}$  e  $g_i$  convessare  $i = 1, \dots, n \Longrightarrow S$  è convessa
- Se  $S = \{h(x) = 0\}$  è convesso  $\iff h(x)$  è lineare

### 7.5 Concavità

### Funzione concava

Una funzione  $f: \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$  è **concava** su S se -f(x) è convessa su S. In altre parole, se e solo se:

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \geqslant \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y) \quad \forall x, y \in S \quad \forall \lambda \in [0, 1]$$

Una funzione  $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$  è **strettamente concava** se -f(x) è strettamente convessa. In altre parole, se e solo se:

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) > \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y) \quad \forall x, y \in S \quad \forall \lambda \in [0, 1]$$

Una funzione lineare è sia concava che convessa.

### 7.6 Applicazioni convessità

Ricordiamo che il problema che vogliamo risolvere è del tipo:

$$\begin{cases} \min f(x) \\ x \in S \end{cases}$$

 ${\bf Ipotesi:}$ 

- 1. f convesso su S:  $\forall x, y \in S$   $f(\lambda x) + (1 \lambda)y \leq \lambda f(x) + (1 \lambda)f(y)$   $\forall \lambda \in [0, 1]$  (strattamente convesso $\longrightarrow f(\lambda x) + (1 \lambda)y \leq \lambda f(x) + (1 \lambda)f(y)$ )
- 2. S convesso  $\forall x, y \in S \quad \lambda x + (1 \lambda)y \in S \quad \forall \lambda \in [0, 1]$

**Proposizione 1.** se  $\begin{cases} \min f(x) \\ x \in S \end{cases}$ , f convessa su S e S convessa. Allora valgono le seguenti proposizioni:

- 1. Non  $\exists$  minimi locali non globali; [Non si assicura l' $\exists$  della soluzione];
- 2. L'insieme delle soluzioni ottime è un insieme convesso;

### Dimostrazione. (1)

Supponiamo che  $x^* \in S$  è un iminimo locale $\to \exists \rho > 0 t.c. f(x^*) \leqslant f(x) \ \forall x \in S \cap B(\rho, x^*)$ 

Considero un punto  $x \in S, x \notin B(x^*, \rho)$  e quest'ultimo non deve essere un punto di minimo globale:

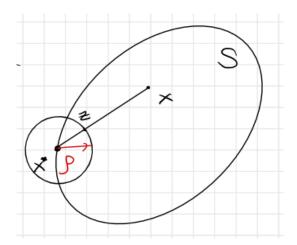


Figura 2.

In questa figura abbiamo rappresentato il nostro insieme S convesso e il punto di minimo globale  $x^*$  con il suo corrispettivo intorno. Inoltre, punto x soddisfa l'ipetesi cui sopra.

Poiché S è convesso  $\rightarrow$  il segmento  $[x^*, x]$  è contenuto in S. In paricolare è tale che:

$$\lambda x + (1 - \lambda)x^* \in S \quad \forall \lambda \in [0, 1]$$

Il punto z è quel punto che si trova nell'intorno di  $x^*$  e sul segmento che connette  $[x^*, x]$ . Allora:

$$z = \bar{\lambda}x + (1 - \bar{\lambda})x^* \in S \cap B(\rho, x^*)$$

Inoltre poiché  $x^*$  è pun punto di minimo:

$$f(x^*) \le f(z)$$
 dato che  $z \cap B(\rho, x^*)$ 

$$f(x^*) \leq f(\bar{\lambda}x + (1 - \bar{\lambda})x^*) \leq \bar{\lambda}f(x) + (1 - \bar{\lambda})f(x^*)$$
 poiché  $f$  convessa

Quindi:

$$f(x^*) \leqslant \bar{\lambda}f(x) + f(x^*) - \bar{\lambda}f(x^*)$$

$$f(x^*) \leqslant f(x) \quad \forall x \in S$$

Quindi abbiamo dimostrato che non se il problema è di minimizzazione, la funzione e l'insieme sono convessi, allora non esiste un minmo locale che non è globale.

Inoltre, se considerassinmo la convessità stretta otterremmo che  $x^*$  è l'**unico** punto di minimo globale.

# Dimostrazione. (2)

Se l'insieme S è convesso, definiamo  $X^* := \{$ insieme soluzioni globali $\}$ . I casi di interesse sono i seguenti:

- $X^* = \emptyset \rightarrow \text{Insieme convesso};$
- $X^* = \{x^*\} \rightarrow \text{Insieme convesso};$
- $|X^*| \ge 2$  ci sono almeno due soluzoni globali;

Nell'ultimo caso, supponiamo che  $x_1^*\!\in\! X^*, x_2^*\!\in\! X^*$  se sono soluzioi globali allora:

$$x_1^* \in S \to f(x_1^*) \leqslant f(x) \quad \forall x \in S$$

$$x_2^* \in S \longrightarrow f(x_2^*) \leqslant f(x) \quad \forall x \in S$$

Necessariamente se sono punti di minimo globali deve valere:

$$f(x_1^*) = f(x_2^*) = f^*$$

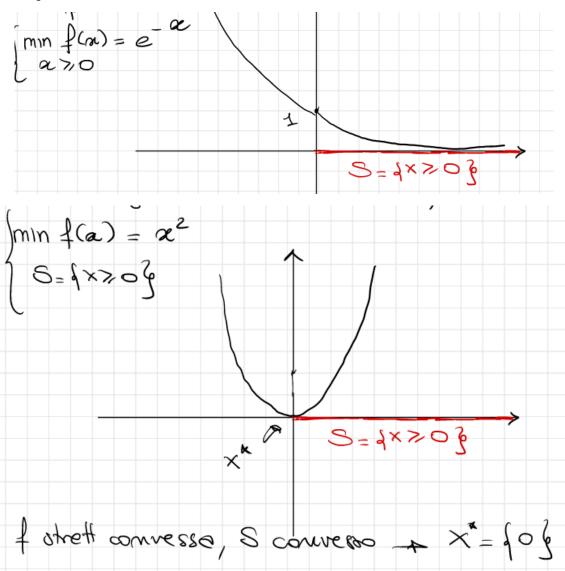
Inoltre S è convesso $\!\to\! \forall \lambda \in [0,1] \quad \lambda x_1^* + (1-\lambda) x_2^* \! \in \! S$ 

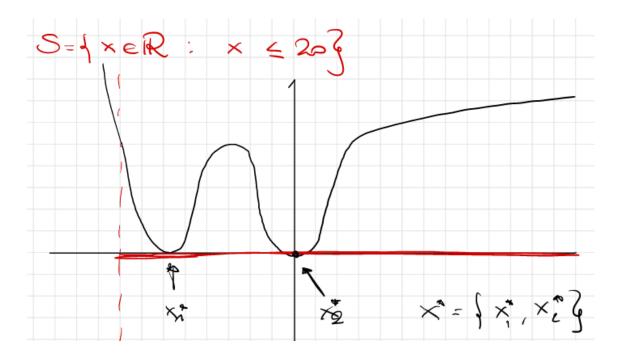
Poiché 
$$f$$
 convessa:  $f(\lambda x_1^* + (1-\lambda)x_2^*) \leq \lambda f(x_1^*) + (1-\lambda)f(x_2^*) = \lambda f^* + f^* - \lambda f^*$ 

$$f(\lambda x_1^* + (1 - \lambda)x_2^*) \leqslant f^*$$

Poiché  $f^*$  è ottimo globale per ipotesi $\to \lambda x_1^* + (1-\lambda)x_2^* \in X^* \to X^*$  è un insieme convesso.

### Esempio 2.





Le derivare servono a ottenere punti ottimali, per avere informazioni sulla crescenza e descrescenza delle funzioni, cioè ottenere un **andamento locale** della funzione ed infine per capire la **convessità** di una funzione.

# 7.7 Derivata direzionale di f in x lungo direzion d

In questo corso consideriamo funzioni  $f \in C^1$  che sono **continuamente differenziabili** e le sue derivate sono **funzioni continue**.

**Definizione 3.** Una derivata direzionale Df(x,d) se esiste:

$$\lim_{t \to 0} \frac{f(x+td) - f(x)}{t} = \mathrm{Df}(x,d)$$

Definizione 4. Definiamo la derivata parziale i-esima in d:

$$Df(x,e_i) \quad d = e_i = \begin{pmatrix} 0 \\ \dots \\ 1 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow i - \text{esima componente}$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_i} = \lim_{t \to 0} \frac{f(x_1, \dots, x_i + t, \dots, x_n) - f(x_i)}{t}$$

# Definizione 5. Gradiente di f(x)

Il gradiente di f(x) è un vettore colonna nella forma:

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

Corollario 6.

$$Se \ f \in C^1 \text{ su } S \to D \ f(x,d) = \nabla f(x)^T d = \left( \begin{array}{ccc} \frac{\partial f}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{array} \right) \left( \begin{array}{c} d_1 \\ \vdots \\ d_n \end{array} \right) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x)}{\partial x_i} \ d_i$$

Nota 7.

$$x^{T}y = \sum_{i=1}^{n} x_{i}y_{i} = ||x|| ||y|| \cos(\theta) \to x^{T}y \leqslant ||x|| ||y||$$

### 7.7.1 Sviluppo di Taylor I ordine

$$f(x+d) = f(x) + \nabla f(x)^T d + \alpha(x,d)$$

Il resto  $\alpha(x,d)$  è **trascurabile** poiché:

$$\lim_{\|d\|\downarrow 0} \frac{\alpha(x,d)}{\|d\|} = 0$$

Quindi se ||d|| è sufficientemente piccolo  $\rightarrow f(x+d) \approx f(x) + \nabla f(x)^T d$  è **lineare** 

### Proposizione 8. Convessità e derivara del primo ordine

$$f \in C^1 \ su \ S \ e \ f \ \grave{e} \ convessa \ su \ S \Longleftrightarrow \forall x, y \in S \quad f(y) \geqslant f(x) + \nabla f(x)^T (y-x)$$

Inoltre:

$$f \in C^1$$
 su  $S$  e  $f$  strettamente convessa su  $S \iff \forall x, y \in S$   $f(y) > f(x) + \nabla f(x)^T (y - x)$ 

### 7.7.2 Sviluppo Taylor II ordine

### Definizione 9. Matrice Hessiana

Una matrice  $\nabla^2 f(x)$  è una **matrice hessiana** se è simmetrica ed è nella sequente forma:

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial^2 x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_1} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial^2 x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial} & \dots & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial^2 x_n} \end{pmatrix}$$

Per esistere,  $f \in \mathbb{C}^2$ 

A questo punto possiamo introdurre lo sviluppo al II ordine di Taylor:

$$f(x+d) = f(x) + \nabla f(x)^T d + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(x) d + \beta(x,d)$$

Questo sviluppo è migliore dello sviluppo del primo ordine poiché tende a zero più velocemente. Infatti:

$$\lim_{\|d\|\downarrow 0} \frac{\beta(x,d)}{\|d\|^2} = 0$$

In pratica è più accurato in uno sppazio più grande.

# 7.8 Segno di una matrice

 $\textbf{Definizione 10.} \ \ (Semi) definita \ positiva/negativa$ 

Data una matrice  $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $Q = Q^T$ . Definiamo:

- $\quad \textit{Q semidefinita positiva: } Q \succcurlyeq 0 \Longleftrightarrow y^T Q \, y \geqslant 0 \quad \forall y \in \mathbb{R}^n$
- Q definita positiva: $Q \succ 0 \iff y^T Q \ y > 0 \quad \forall y \in \mathbb{R}^n$
- Q definita negativa: $Q \prec 0 \iff y^T Q \ y < 0 \quad \forall y \in \mathbb{R}^n$
- Q semidefinita negativa: $Q \preccurlyeq 0 \Longleftrightarrow y^T Q \ y \leqslant 0 \quad \forall y \in \mathbb{R}^n$
- Q indefinita  $\iff \exists y_1 \in \mathbb{R}^n : y_1^T Q y_1 > 0 \land \exists y_2 \in \mathbb{R}^n : y_2^T Q y_2 < 0$

### 7.8.1 Matrice Hessiana

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial^2 x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_1} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial^2 x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial} & \dots & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial^2 x_n} \end{pmatrix}$$

**Proposizione 11.** f(x) convessa su  $\forall x, y \in S$   $\lambda \in [0,1]$   $f(\lambda x + (1-\lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1-\lambda)f(y)$ 

**Proposizione 12.**  $f \in C^2 ef$  convessa su  $S \iff \nabla^2 f(x) \succcurlyeq 0 \forall x \in S$ 

Nota 13.

• Se si trova 1 punti per cui non vale 12, allora non si ha la convessità

# 7.8.2 Criterio dei minori di Nord-Ovest

Ipotizziamo  $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}, Q = Q^T$ 

**Definizione 14.** Minori di Nord-Ovest di ordine k

I minori di Nord-Ovest di ordine k sono quei minori ottenuti cancellando le ultime n-k righe e colonne.

 $Quindi\ se$ :

 $Q \succcurlyeq 0 \Longleftrightarrow$ tutti i minori di nord — ovest hanno determinante > 0 di ordine  $k = 1, \dots, n$ 

### **Definizione 15.** Matrice diagonale dominante

La matrice diagonale dominante è una condizione **sufficiente** di definita positività. In particolare date le ipotesi 7.8.2, si ha una matrice diagonale dominante se:

$$q_{\rm ii} > \sum_{j \neq i} |q_{\rm ij}| \quad \forall i$$

15

Nel caso in cui non è possibile determinare la semidefinita/definita positivià occore considerare i minori principali.

**Definizione 16.**  $Minori\ principali\ di\ ordine\ k$ 

I minori principali di ordine k sono tutti i minori che si appoggiano sulla diagonale eliminando n-k righe e colonne in tutti i modi possibili.

### Importante 17. Algoritmo segno di una matrice

- 1. Applico criterio di nord-ovest:
  - A) tutti i minori hanno determinante >0  $\longrightarrow$ STOP  $Q \succ 0$
  - B) Si ha un minore con determinante =0 Criterio minori principali:
    - i. tutti i minori principali hanno determinante  $\geqslant\! 0 \longrightarrow {\rm STOP} \longrightarrow Q \succcurlyeq 0$
    - ii. trovo minore con determinante <0:
      - a) se i minori principali hanno determinante >0 e un determinante <0

$$\longrightarrow$$
STOP  $\Longrightarrow Q$  indefinita

b) Ritorno al passo 1 considerando —Q per dedurne la (semi)definita negatività.

### 7.8.3 Segno di una matrice - Autovalori/Autovettori

Sia data una matrice  $Q = Q^T, Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ :

# Definizione 18. Autovalore, Autovettore

 $\lambda_i$  è un autovalore di Q con corrispondente autovettore  $u_i$  se:

$$Q u_i = \lambda_i u_i$$
  $i = 1, \ldots, n$   $||u_i|| = 1$ 

**Nota 19.**  $u_i^T u_j = 0$  gli autovettori sono ortogonali per autovalori diversi  $\lambda_i \neq \lambda_j$ 

Quindi:

$$Q = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i u_i u_i^T$$

Si ha che:

- Q semidefinita positiva $\iff \lambda_1, \dots, \lambda_n \geqslant 0 \ (y^T Q y \geqslant 0 \forall y \in \mathbb{R}^n \iff \lambda_{\min}(Q) \geqslant 0)$
- Q definita positiva $\iff \lambda_1, \dots, \lambda_n > 0 \ (y^T Q y > 0 \forall y \in \mathbb{R}^n \iff \lambda_{\min}(Q) > 0)$
- Q semidefinita negativa $\iff \lambda_1, \dots, \lambda_n \leq 0 \ (y^T Q y \leq 0 \ \forall y \in \mathbb{R}^n \iff \lambda_{\max}(Q) \leq 0)$
- Q definita negativo $\iff \lambda_1, \dots, \lambda_n < 0 \ (y^T Q y < 0 \forall y \in \mathbb{R}^n \iff \lambda_{\max}(Q) < 0)$
- Q indefinita  $\iff \exists \lambda_i > 0, \lambda_j < 0$

$$\lambda_{\min}(Q) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{x^T Q \, x}{\|x\|^2} := \mathbf{quoziente} \, \mathbf{di} \, \mathbf{Rayleigh}$$

La seguente formula permette di valurare la coercività:

$$x^T Q x \geqslant \lambda_{\min}(Q) ||x||^2$$

Esempio 20.

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

$$\frac{1}{2}x^{T}Qx = \frac{1}{2}\lambda_{\min}(Q)\|x\|^{2}$$

$$c^{T}x = \|x\| \|c\| \cos(\theta) \geqslant -\|x\| \|c\|$$

Quindi:

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

$$\geqslant \frac{1}{2} \lambda_{\min}(Q) ||x||^2 - ||x|| ||c||$$

$$= ||x|| \left(\frac{1}{2} \lambda_{\min}(Q) ||x|| - ||c||\right)$$

f(x) è coerciva  $\iff \lambda_{\min}(Q) > 0 \iff Q$  è definita positiva

### Importante 21.

Se  $Q \succ 0$ , f(x) è strettamente convessa, allora la soluzione esiste ed è unica su qualunque S chiuso e non vuoto.

# Teorema 22. Composizione Di Funzioni Convesse

Sia  $f(x) = \psi[g(x)]$  con g convessa e  $\psi$  convessa e non decrescente sul codominio di g(x). Allora:

f è convessa

# 8 Condizioni di esistenza delle soluzioni

Consideriamo il problema nella forma:

$$\begin{cases} \min f(x) \\ x \in S \end{cases}$$

# 8.1 Definizioni preliminari

# Definizione 23. Insieme aperto

Un insieme S è **aperto** se  $\forall x \in S, \exists B(x, \rho)$  aperta tutta contenuta in S.

# Definizione 24. Insieme chiuso

Un insieme S è **chiuse** se il suo complemento  $\mathbb{R}^n/S$  è aperto.

# Definizione 25. Insieme limitato

*Un insieme*  $S \ \hat{e} \ limitato \ se \ \exists M > 0 : \forall x \in S \qquad ||x|| \leqslant M.$ 

# Definizione 26. Insieme compatto

Un insieme S è compatto se è chiuso e limitato.

### 8.2 Esistenza del minimo

### Teorema 27. Teorema di Weierstrass

 $Se\ vogliamo\ \left\{ \begin{smallmatrix} \min f(x) \\ x \in S \end{smallmatrix} \right. \ e\ f\ continua\ e\ S\ compatta \longrightarrow \exists minimo\ (massimo)\ globale.$ 

Importante 28. Il teorema di Weierstrass fornisce condizioni solo sufficienti: se non è verificata non si può concludere nulla.

L'ipotesi di compattezza di S può essere rilassata, imponendo una condizione più stringente sulla f.

### Definizione 29. Insieme di Livello vincolato di f

Dato il problema di minimizzazione:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min f(x) \\ x \in S \end{array} \right.$$

Si definisce insieme di livello vincolato di f:

$$\mathcal{L}(\alpha) = \{x \in S : f(x) \leq \alpha\}$$
  $\alpha = f(x_0), x_0 \in S$  iniziale

# Teorema 30.

Se  $\exists x_0 : \mathcal{L}(f(x_0))$  compatto e f continua  $\Longrightarrow \exists una soluzione globale$ 

### Dimostrazione.

Se si considera il problema di minimizzazione  $\begin{cases} \min f(x) \\ x \in \mathcal{L}(\alpha) \end{cases}$ , vale il teorema di Weierstrass.

Quindi esiste una soluzione globale  $x^*$  tale che  $f(x^*) \leq f(x) \quad \forall x \in \mathcal{L}(f(x_0))$ .

Se:

$$x \notin \mathcal{L}(f(x_0))$$
, ma  $x \in S \to f(x) > f(x_0) \geqslant f(x^*) \to f(x^*) \leqslant f(x) \forall x \in \mathcal{L}(f(x_0)), \forall x \in S : x \notin \mathcal{L}(f(x_0)) \Longrightarrow f(x^*) \leqslant f(x) \quad \forall x \in S \longrightarrow x^* \text{ è un minimo globale.}$ 

## Definizione 31. Coercività di f

La funzione f si dice **coerciva** su S se comunque scelgo  $\{x_k\} \in S$  tale che:

$$\lim_{k\to\infty} ||x_k|| = \infty$$
  $e \lim_{k\to\infty} f(x_k) = \infty$ 

### Teorema 32.

f è coerciva su  $S \Longleftrightarrow$  tutti i suoi insiemi di livello sono compatti

### Teorema 33. Esistenza del minimo (Sufficiente)

Se si considera il problema di minimizzazione  $\begin{cases} \min f(x) \\ x \in S \end{cases}$  e la funzione f è continua e coerciva su S. Allora esiste la soluzione di minimo globale.

# Importante 34.

Se  $Q \succ 0$  ed f(x) è strettamente convessa allora la soluzione esiste ed è unica su qualunque S chiuso e non vuoto.

### Definizione 35. Termine di regolarizzazione

Sia dato il problema di minimizzazione 
$$\left\{ \min_{x \in S} f(x) \longrightarrow \min f(x) + \tau \|x - x_k\|^2 \quad \tau > 0 \right\}$$

### Nota 36.

• Il termine  $\tau ||x - x_k||$  rende coerciva la funzione e la convessifica rendendo il problema più semplice. Poiché la matrice Hessiana diventa costante.

# 9 Condizioni di ottimo per problemi non vincolati

Con riferimento ad un problema di minimizzazione del tipo:

$$\min f(x), \quad x \in S$$

una **condizione di ottimalità** è una condizione (  $\underline{\text{necessaria}},\underline{\text{sufficiente}},\underline{\text{necessaria}}$  e sufficiente) perché un punto  $x^*$  risulti una soluzione ottima locale o globale del problema.

### Importante 37. Condizioni necessarie

Una **condizione necessaria** può servire a restringre l'insieme in cui ricercare le soluzioni del problema necessario e a costruire algoritmi che soddisfino tali condizioni:

$$x^*$$
 minimo locale  $\in S \longrightarrow$  vale la condizione

Quindi forniscono **criteri di arresto** per gli algoritmi di risoluzioni e una indicazione su dove cercare l'ottimo.

# Importante 38. Condizioni sufficiente

Una **condizione sufficiente** può servere a dimostrare che un punto ottenuto sia una soluzione ottima, locale o globale, del problema.

vale la condizione 
$$\to x^*$$
 minimo locale  $\in S$ 

### Importante 39. Condizioni necessarie e sufficienti

Questo tipo di condizioni si hanno solamente nelle tipologie di problemi convessi.

$$x^*$$
 minimo globale  $\longleftrightarrow$  vale condizione

Da queste considerazioni possiamo trarne una rappresentazione insiemistica:

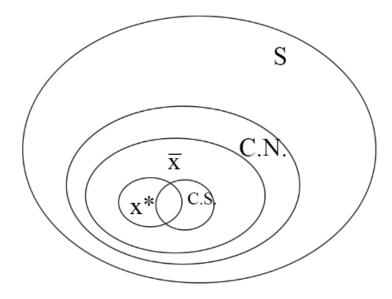


Figura 3.  $X^*$  insieme minimi globali,  $\overline{X}$  insieme minimi locali

Da cui possiamo evincere che, se la condizione necessaria è violata, il punto può essere escluso e che le condizioni suddicienti sono utilisi sole soddisfatte; in alternativa non si può concludere nulla dal problema.

#### 9.0.1 Direzione di discesa

L'idea è quella di definire una direzione di discesa in un punto x come un vettore  $d \in \mathbb{R}^n$  tale che, per tutti gli spostamenti sufficientemente piccoli lungo d, si ha una diminuzione stretta del valore di f rispetto al valore di x

### Definizione 40. Direzione di discesa

Sia  $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$  e  $x \in \mathbb{R}^n$ . Si dice che un vettore  $d \in \mathbb{R}^n$ ,  $d \neq 0$  è una direzione di discesa per f in x se esiste  $\bar{t} > 0$  tale che:

$$f(x+t d) < f(x)$$
  $\forall t \in (0, \bar{t}]$ 

In modo analgo si potrebbe definire una direzione di salita nel punto x se f aumenta strettamente per tutti gli spostamenti abbastanza piccoli lungo d

La direzione di discesa la si può caratterizzare tramite le <u>derivate direzionali</u> della funzione obiettivo. Infatti ricordiamo che la **derivata direzionale** è definita nel seguente modo:

$$D f(x,d) = \lim_{t \to 0} \frac{f(x+dt) - f(x)}{t}$$

# Proposizione 41. Derivata direzionale e direzione di discesa

Se  $f \in C^1$  continua e derivabile almeno una volta $\longrightarrow D f(x,d) = \nabla f(x)^T d$ . Quindi, per t sufficientemente piccolo, otteniamo:

1. 
$$\nabla f(x)^T d < 0 \longrightarrow f(x+td) - f(x) < 0 \longrightarrow d \ e \ di \ discesa$$
:

2. 
$$\nabla f(x)^T d > 0 \longrightarrow f(x+td) - f(x) > 0 \longrightarrow d \ e \ di \ salita;$$

3. 
$$\nabla f(x)^T d = 0 \longrightarrow f(x+td) - f(x) = 0 \longrightarrow ??????$$

# Teorema 42. Condizione di discesa del primo ordine (necessaria e sufficiente)

Se f convessa e  $C^1$ , d discesa  $\iff \nabla f(x)^T d < 0$ 

### Dimostrazione.

Prima implicazione:(⇐=)

Se  $\nabla f(x)^T d < 0$ , la direzione d è di discesa in quanto, per la definizione di derivata direzionale, per valori positivi sufficientemente piccoli di t, deve valere f(x+dt) - f(x) < 0.

Seconda Implicazione:  $(\Longrightarrow)$ 

Poniamo y = x + t d ed assumiamo che f sia convessa. Dalla definizione di convessità:

$$f(y) \ge f(x) + \nabla f(x)^T (y - x)$$
  

$$f(x + t d) \ge f(x) + t \nabla f(x)^T (y - x)$$
  

$$\ge f(x) + t \nabla f(x)^T d \ge f(x)$$

per cui  $\nabla f(x)^T d \ge 0$  implica  $f(x+t d) \ge f(x)$ . Tuttavia, se d è una direzione di discesa, deve necessariamente essere  $\nabla f(x)^T d < 0$ .

### Definizione 43. Segno derivata direzionale e antigradiente

Dal punto di vista geometrico, ricordando il concetto di angolo fra due vettori possiamo studiare il segno derivata direzionale:

$$\nabla f(x)^T d = \|\nabla f(x)\| \|d\| \cos(\theta)$$

Se:

$$-\theta > 90^{\circ} \longrightarrow \cos(\theta) < 0 \longrightarrow \nabla f(x)^{T} d < 0 \longrightarrow d \ e \ di \ discesa;$$

$$-\theta < 90^{\circ} \longrightarrow \cos(\theta) > 0 \longrightarrow \nabla f(x)^{T} d > 0 \longrightarrow d \ \dot{e} \ di \ salità$$

— Il caso "limite", cioè di massima discesa si ottiene con il cosiddetto antigradiente:

$$d = -\nabla f(x) \longrightarrow \theta = 180^{\circ} \longrightarrow \cos(\theta) = 1$$
è sempre di **discesa**

$$\nabla f(x)^T d = -\|\nabla f(x)\|^2 < 0$$

### 9.0.2 Direzioni a curvatura negativa in x

Se f è differenziabile due volte è possibile caratterizzare l'andamento di f lungo una direzione assegnata utilizzando anche le derivate seconde per stabilire le condizioni di ottimo del secondo ordine.

### Definizione 44. Direzione a curvatura negativa

Sia  $f: \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$  due volte continuamente differenziabile nell'intorno di un punto  $x \in \mathbb{R}^n$ . Si dice che un vettore  $d \in \mathbb{R}^n$ ,  $d \neq 0$  è una **direzione a curvatura negativa** per f in x se risulta:

$$d^T \nabla^2 f(x) d < 0$$

Nota 45. Una direzione a curvatura negativa è quindi tale che la derivata direzionale seconda è negativa in x, per cui diminuisce localmente la derivata direzionale del primo ordine.

### Teorema 46. Condizione di discesa del secondo ordine

Sia  $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$  due volte continuamente differenziabile nell'intorno di un punto  $x \in \mathbb{R}^n$  e dia  $d \in \mathbb{R}^n \neq 0$ . Supponiamo che risulti  $\nabla f(x)^T d = 0$ , e che d sia una direzione a curvatura negativa in x, ossia tale che  $d^T \nabla^2 f(x) d < 0$ . Allora d è una **direzione di discesa** per f in x.

### Dimostrazione.

Poiché f è differenziabile due volte, si ha:

$$f(x+td) = f(x) + t\nabla f(x) d + \frac{1}{2}t^2d^T \nabla^2 f(x) d + \beta(x,td)$$

In cui  $\beta$  è il resto:

$$\lim_{t \to 0} \frac{\beta(x, t\,d)}{t^2} = 0$$

Essendo per ipotesi  $\nabla f(x) d = 0$ , si può scrivere:

$$\frac{f(x+t\,d) - f(x)}{t^2} = \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(x) \, d + \frac{\beta(x,t\,d)}{t^2}$$

Poichè  $d^T \nabla^2 f(x) d < 0$  per definizione di curvatura negativa e  $\frac{\beta(x,t\,d)}{t^2} \to 0$  per  $t \to 0$ . Per valori sufficientemente piccoli di t, si ha che  $f(x+t\,d) - f(x) < 0$  e quindi d è una direzione di discesa.  $\square$ 

# 10 Condizioni di ottimo per problemi vincolati con insieme ammissibile

Il problema ce vogliamo risolvere è del tipo:

$$\min \quad f(x) \\ x \in S$$

cercando le direzioni di discesa ammissibile del problema, cioé che non violano le condizioni dettate da  $x \in S$ .

### Definizione 47. Direzione ammissibile

Sia S un sottoinsieme di  $\mathbb{R}^n$  e  $x \in S$ . Si dice che un vettore  $d \in \mathbb{R}^n$ ,  $d \neq 0$  è una **direzione** ammissibile per S in s se:

$$d \in \mathbb{R}^n$$
:  $\exists \overline{t} > 0 \quad x + t \, d \in S \quad \forall t \in (0, \overline{t}]$ 

### Proposizione 48. Condizione di ottimo necessaria di minimo locale

Sia  $x^* \in S$  un punto di minimo locale del problema:

$$\min f(x), x \in S;$$

allora non può esistere una direzione ammissibile in  $x^*$  che sia anche di discesa.

### Dimostrazione.

Per assurdo, se esistesse una direzione d che sia ammissibile e di discesa in  $x^*$ , allora in ogni intorno di  $x^*$  sarebbe possibile trovare un punto  $x^* + t d \in B(x^*, \rho)$  tale che:

$$f(x^* + t d) \leqslant f(x^*)$$

il che contraddisce l'ipotesi che  $x^*$  sia un punto di minimo globale.

Se f è differenziabile la condizione:

$$\nabla f(x)^T d < 0$$

è una condizione sufficiente perché d sia una direzione di discesa per f in x, otteniamo la condizione encessaria seguente.

## Proposizione 49. Condizione necessaria del primo ordine

Supponiamo che  $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$  sia continuamente differenziabile nell'intorno in un punto di minimo locale  $x^* \in S$  del problema:

$$\min f(x) \quad x \in S$$

Allora non può essitere una direzione ammissibile in d in  $x^*$  tale che:

$$\nabla f(x^*)^T d < 0$$

e quindi si ha:

$$\nabla f(x^*)^T d \geqslant 0 \quad \forall d \in \mathbb{R}^n \text{ ammissibile din } x^*$$

### Proposizione 50. Condizione necessaria del secondo ordine

Supponiamo che  $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$  sia due volte continuamente differenziiabile nell'intorno di un punto di minimo locale  $x^* \in S$  del problema:

$$\min f(x) \quad x \in S$$

Allora non può esistere una direzione ammissibile d in  $x^*$  tale che:

$$\nabla f(x^*)^T d = 0$$
  $d^T \nabla^2 f(x) d < 0$ 

e quindi si ha:

$$\forall d \text{ ammissibile tale che } \nabla f(x^*)^T d = 0 \quad d^T \nabla^2 f(x) d > 0$$

### Nota 51.

Non si ha l'uguaglianza poiché avremmo una direzione a curvatura negativa e quindi ammissibile nell'insieme.

# 10.1 Condizioni di ottimo per problemi vincolati con insieme ammissibile convesso

Se l'insieme ammissibile S è convesso, vogliamo caratterizzare le condizioni di ottimo. A tale scopo occorre caratterizzare le direzioni ammissibili.

# Proposizione 52. Direzione ammissibile (S convesso)

S convesso

$$\iff d = y - x \quad \text{per qualche } y \in S$$

d ammissibile in x

#### Dimostrazione.

Sia  $x \in S$  allora comunque si fissi  $y \in S$  tale che  $x \neq y$ , per la convessità di S si ha che:

$$\lambda y + (1 - \lambda)x \in S \quad \forall \lambda \in [0, 1]$$

$$x + \lambda(y - x) \in S \longrightarrow d = y - x \in S$$
 ammissibile

Al contrario se  $d \in \mathbb{R}^n \neq 0$  è una direzione ammissibile per S,in x esiste un punto  $y \in S$  ed uno scalare  $\lambda > 0$  tali che  $d = \lambda(y - x)$ .

## Proposizione 53. Condizione necessaria di minimo locale del primo ordine(S convesso)

Sia  $x^* \in S$  un punto di minimo locale del problema:

$$\min f(x) \quad x \in S$$

in cui  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  è un insieme convesso e supponiamo f sia continuamente differenziabile in un intorno di  $x^*$ . Allora si ha necessariamente:

$$\nabla f(x^*)^T (y - x^*) \geqslant 0 \quad \forall y \in S$$

### Proposizione 54. Condizione necessaria di minimo locale del secondo ordine (S convesso)

Sia  $x^* \in S$  un punto di minimo locale del problema:

$$\min f(x) \quad x \in S$$

in cui  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  è un insieme convesso e supponiamo f sia due volte continuamente differenziabile in un intorno di  $x^*$ . Allora si ha necessariamente:

$$\forall y \in S \quad \nabla f(x^*) \left( y - x^* \right) = 0 \rightarrow \left( y - x^* \right) \nabla^2 f(x) \left( y - x^* \right) \geqslant 0$$

Questo si riconduce alla ricerca dei punti di stazionarietà della funzione. Infatti:

• Se il punto è interno all'insieme S:

$$\nabla f(x^*)^T (y - x^*) \geqslant 0 \quad \forall y \in S$$



$$\nabla f(x^*) = 0$$

Questa condizione è detta di stazionarietà non vincolata.

• Se ci troviamo sul bordo dell'insieme S:

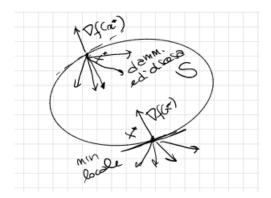


Figura 4.

Dipende poiché tutte le direzioni di discesa sono non ammissibili. In alto, se il cos>90 otteniamo direzioni ammissibili di discesa e non abbiamo minimo; in basso, se il cos>90 le direzioni di discesa non sono ammissibile ed otteniamo un minimo locale.

### Dimostrazione.

- $\implies$ )  $x^*$  minimo globale  $\to x^*$  minimo locale  $\to$  vale la C.N. del primo ordine;
- $\iff$ ) Poiché f convessa su  $S \quad \forall y \in S$

$$f(y) \geqslant f(x^*) + \nabla f(x)^T (y - x^*) \geqslant f(x^*)$$

In cui  $\nabla f(x)^T(y-x^*) \!\geqslant\! 0$  per ipotesi. Allora:

$$f(x^*) \leqslant f(y) \quad \forall y \in S \longrightarrow x^* \text{ minimo globale}$$

### Importante 55.

Se f strettamente convessa—minimo globale diventa unico

# 10.2 Problemi con vincoli lineari

$$\label{eq:section} \begin{aligned} \min \quad & f(x) \quad & A \in \mathbb{R}^{m \times n}, b \in \mathbb{R}^m \\ & A \, x \leqslant b \end{aligned}$$

Inoltre:

$$a_i^T x \leqslant b_i \quad i = 1, \dots, m; a^T$$
 righe di  $A$ 

Supponiamo  $\overline{x} \in S \longleftrightarrow a_i^T \overline{x} \leqslant b_i \quad i = 1, \dots, m$ 

### Definizione 56. Vincoli attivi nel punto

$$I(x) := \{i = 1, \dots, m : a_i^T x = b\}$$

Nota 57.

I vincoli attivi influenzano le direzioni ammissibili

# Proposizione 58. Direzioni ammissibili: disuguaglianze lineari

Sia  $x^*$  tale che  $a_i^T x^* \leq b_i$  con i = 1, ..., m. Allora un vettore non nullo  $d \in \mathbb{R}^n$  è una direzione ammissibile per S se e solo se:

$$a_i^T d \leqslant 0 \quad \forall i \in I(x^*)$$

#### Dimostrazione.

 $\Longrightarrow$ )Dati un vettore non nullo  $d \in \mathbb{R}^n$  e numero  $t \geqslant 0$  qualsiasi sufficientemente piccolo, il punto  $x^* + t d$  è ammissibile relativamente ai vincoli attivi in  $x^*$  se e solo se:

$$a_i^T(x^* + t d) = b_i + t a_i^T d \leq b_i \quad \forall i \in I(x^*)$$

Quindi se e solo se vale la proposizione 58.

 $\Leftarrow$ )Se vale  $a_i^T d \leq 0 \quad \forall i \in I(x^*), d$  è una direzione ammissibile anche per i vincoli non attivi. Infatti, essendo  $a_i^T x^* \leq b_i$  per  $i \notin I(x^*)$  si può assumere t sufficientemente piccolo da avere:

$$a_i^T(x^* + t d) \leqslant b_i \quad \forall i \notin I(x^*)$$

Quindi si può concludere che esiste un numero  $\bar{t} > 0$  tale che  $A(x^* + t d) \leq b \quad \forall t \in [0, \bar{t}]$ , ossia che d è una direzione ammissibile per S in  $x^*$ ,

Importante 59. L'insieme delle direzioni ammissibili è un poliedro.

Importante 60. Se ho vincoli soffisfatti all'uguaglianza la disequazione 58 viene soddisfatta all'uguaglianza.

# 10.3 Condizioni di ottimalità per problemi con vincoli di box

Sia  $x^*\!\in\!\mathbb{R}^n$  un punto di minimo locale del problema

$$\begin{cases} \min f(x) \\ l \leqslant x \leqslant u \end{cases}$$

In cui  $l_i < u_i$  i = 1,...,n. Allora, la condizione di stazionarietà del primo ordine è utile per calcolare il minimo locale  $x^*$ ; quindi, risulta:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \begin{cases} \geqslant 0 & \text{se } x_i^* = l_i \\ = 0 & \text{se } l_i < x_i^* < u_i \end{cases}$$
$$\leqslant 0 & \text{se } x_i^* = u_i$$

Nota 61. L'insieme appena descritto è un insieme chiuso e limitato, quindi compatto.

Grazie al teorema di Weierstrass 27 possiamo dedurre l'esistenza della soluzione.

A questo punto, dobbiamo discutere tre casistiche:

A) Se  $x_i^* = l_i$ , consideriamo la direzione  $d = e_i$ , in cui  $e_i$  è l'*i*-esimo asse coordinato. Ricordiamo che:

Il vincolo è attivo  $x_i^* = l_i \Longleftrightarrow a_i^T x \leqslant b_i \longrightarrow d$ ammissibile  $\Longleftrightarrow a_i^T d \leqslant 0$ 

Quindi segue necessariamente che l'unica direzione ammissibile è data da:

$$\nabla f(x^*)^T d = \frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} \geqslant 0$$



Figura 5. direzioni ammissibili

B) Se  $l_i < x_i^* < u_i$  le direzioni  $d = e_i, d = -e_i$  sono ammissibili e dalla proposizione si ottiene:

$$\nabla f(x^*)^T d = \frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} \geqslant 0; \nabla f(x^*)^T d = -\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} \geqslant 0$$

Da cui:

$$\nabla f(x^*)^T d = \frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} = 0$$

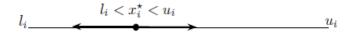


Figura 6. Direzioni ammissibili

C) Se  $x_i^* = u_i$ , si ha la direzione  $d = -e_i$  ammissibile per cui otteniamo che:

$$\nabla f(x^*)^T d = \frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} \leqslant 0$$



Figura 7.

# 11 Condizioni di Ottimo per problemi vincolati

Consideriamo i problemi con vincoli di eguaglianza e diseguaglianza del tipo:

$$\begin{cases} \min f(x) \\ g_i(x) \leq 0 & i = 1, \dots, n \\ h_j(x) = 0 & j = 1, \dots, p \end{cases}$$

### 11.1 Condizioni di ottimo analitiche

#### 11.1.1 Lagrangiana generalizzata

Prima di tutto vogliamo espiremere le condizioni di ottimo come estensione della regole dei moltiplicatori di Lagrange. A tale scopo, introduciamo i seguenti moltiplicatori:

- 1.  $\lambda_0$  associato alla funzione obiettivo;
- 2.  $\lambda_i$  associato ai vincoli di diseguaglianza;
- 3.  $\mu_j$  associato ai vincoli di eguaglianza;

Così facendo, possiamo definire la Lagrangiana generalizzata:

$$L(x,\lambda_0,\lambda,\mu) = \lambda_0 f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(x) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j h_j(x)$$

#### 11.1.2 Condizioni necessarie di Fritz John

### Teorema 62. Condizioni necessarie di Fritz John

 $Sia\ x^*\ un\ punto\ di\ minimo\ locale\ del\ problema:$ 

$$\begin{cases} \min f(x) \\ g(x) \le 0 \\ h(x) = 0 \end{cases}$$

e supponiamo che f, g, h siano continuamente differenziabili in un interno di  $x^*$ . Allora esistono moltiplicatori  $\lambda_0^* \in \mathbb{R}, \lambda^* \in \mathbb{R}^m, \mu^* \in \mathbb{R}^p$  tali che:

$$\begin{split} \nabla_x L(x^*,\lambda_0^*,\lambda^*,\mu^*) = 0 &= \lambda_0^* f(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* g_i(x^*) + \sum_{j=1}^p \mu_j^* h_j(x^*) := \textbf{Annullamento del gradiente} \\ \lambda_i^* g_i(x^*) &= 0 \quad i = 1,\dots,m \quad := \textbf{Condizione di complementarietà} \\ \lambda_0^*,\lambda^* &\geqslant 0; (\lambda_0^*,\lambda^*,\mu^*) \neq 0 := \textbf{Condizione di non negatività} \\ g_i(x^*) &\leqslant 0, h_j(x^*) = 0 := \textbf{Condizione di ammissibilità} \end{split}$$

# 11.2 Condizioni di Qualificazione dei Vincoli o Condiziondi di Regolarità

Dalla **condizone di negatività** si hanno due possibilità:

$$\lambda_0^* \geqslant 0 \rightarrow \begin{cases} \lambda_0^* = 0 \\ \lambda_0^* > 0 \end{cases}$$

Nel caso in cui  $\lambda_0^* = 0 \longrightarrow \exists \lambda^*, \, \mu^*$  t.c.:

$$\sum_{i=1}^{m} \lambda_i^* g_i(x^*) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j^* h_j(x^*) = 0$$
$$\lambda^* \geqslant 0, (\lambda^*, \mu^*) \neq 0$$
$$g_i(x^*) \leqslant 0 \quad h_i(x^*) = 0$$

Quindi la funzione oviettivo non è considerata: un qualunque punto  $x^*$  che soddisfa le condizioni di Fritz John è un candidato all'ottimo indipendentemente da  $f \longrightarrow$  è un punto particolare dell'insieme ammissibile: un **punto non regolare.** 

### 11.2.1 Condizioni di qualificazione dei vincoli

In questo ambito siamo interessati solo ai candidati per cui  $\lambda_0^* \neq 0$  poiché coinvolgono la nostra funzione obiettivo. Le **condizioni di qualificazione dei vincoli** sono delle condizioni sui vincoli che definiscono l'insieme ammissibile in  $x^*$  che se se sono soddisfatte, allora  $\lambda_0^* > 0$ :

### a) LICQ (Linear Indipendence Constraint Qualification)

 $x^*$ , candidato di minimo locale, soddisfa **LICQ** se per i vettori  $\nabla g_i(x^*)$  con  $i \in I(x^*) = \{i = 1, ..., n: g_i(x^*) = 0\}$  (insieme dei vincoli attivi) e  $\nabla h_j(x^*)$  j = 1, ..., p sono **linearmente** indipendenti allora  $\lambda_0^* \neq 0$ ;

Dimostrazione. Si suppone per assurdo che  $\lambda_0^* = 0 \rightarrow \text{la condizione di annullamento}$  della Lagrangiana diventa:

$$\sum_{i=1}^{m} \lambda_i^* g_i(x^*) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j^* h_j(x^*) = 0$$

Dalla complementarietà:

$$\lambda_i^* q_i(x^*) = 0 \quad i = 1, \dots, m$$

Quindi, se 
$$i \notin I(x^*) \iff g_i(x^*) < 0 \longrightarrow \lambda^* = 0, \mu^* = 0$$

Non viene soddisfatta la complementarietà.

Inoltre, se vale LICQ $\longrightarrow \nabla g_i(x^*)$   $i \in I(x^*)$  e  $\nabla h_j(x^*)$  sono <u>linearmente indipendenti</u>. Quindi l'unica soluzione è:

$$d_i = 0, i \in I(x^*) \mu^* = 0 \quad j = 1, ..., p$$
 **ASSURDO**

### b) Linearità dei vincoli di eguaglianza e concavità dei vincoli attivi in $x^*$

Supponiamo che i vincoli di eguaglianza siano lineari e che i vincoli di diseguaglianza attivi siano concavi nel punto  $x^*$ . In tali ipotesi è possibile trovar eun interno  $B(x^*, \rho)$  di  $x^*$  tale che, per ogni  $x \in B(x^*, \rho)$  si abbia:

$$h_i(x) = h_i(x^*) + \nabla h_i(x^*)^T (x - x^*) \quad i = 1, \dots p$$
  
 $q_i(x) \leq q_i(x^*) + \nabla q_i(x^*)^T (x - x^*) \quad i \in I(x^*)$ 

П

Un caso particolare è quando tutti i vincoli attivia in  $x^*$  siano lineari.

### c) Condizioni di qualificazione dei vincoli di Mangasarian-Fromovitz

Sia  $x^* \in S$  e supponiamo che g, h siano continuamente differenziabili in un intorno di  $x^*$ . Si dice che è soddisfatta in  $x^*$  la condizione di qualificazione dei vincoli di **Mangasarian-Fromovitz** se:

i. I gradienti dei vincoli di eguaglianza  $\{\nabla h_j(x^*), j=1,\ldots,p\}$  sono linearmente indipendenti;

ii. 
$$\nabla g_i(x^*)^T d < 0 \quad \forall i \in I(x^*) \quad \nabla h_i(x^*)^T d = 0 \quad \forall i = 1, \dots, p;$$

# d) Condizioni di Slater

Nelle **condizioni di Slater** consideriamo il caso in cui l'insieme ammissibile è definito attraverso vincoli convessi di diseguaglianza. Quindi:

Supponiamo che le funzioni  $g_i$  siano convesso e continuamente differenziabili su un insieme aperto convesso contenente l'insieme ammissibile:

$$S = \{ x \in \mathbb{R}^n : g(x) \leqslant 0 \}$$

Si dice che è la condizione di Slater è soddisfatta se esiste  $\hat{x} \in S$  tale che:

$$g(\hat{x}) < 0$$

Cioè che il punto  $\hat{x}$  sia interno all'insieme.

Se vale una di queste condizioni di qualificazione dei vincoli, allora  $\lambda_0^* > 0$  e il punto è un **punto** regolare.

### Importante 63.

Se  $\lambda_0^* > 0$ , si può asusmere  $\lambda_0^* = 1$  poiché equivale a  $(\lambda_0, \lambda, \mu) \to \left(1, \frac{\lambda}{\lambda_0}, \frac{\mu}{\lambda_0}\right)$ , lasciando invariato il problema. Inoltre, la Lagrangiana generalizzata diventa **Lagrangiana**:

$$L(x, \lambda, \mu) = 0 = f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(x) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j h_j(x)$$

## 11.2.2 Condizioni necessarie di KKT (Karush-Kuhn-Tucker)

Sia  $x^* \in S$  un punto di minimo locale e supponiamo che f, g, h siano continuamente differenziabili in un intorno di  $x^*$ . Supponiamo inoltre che ne punto  $x^*$  sia soddisfatta una delle condizioni di qualificazione dei vincoli. Allora esistono  $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$  e  $\mu^* \in \mathbb{R}^p$  tale che:

$$\nabla f(x^*) + \nabla g(x^*) \lambda^* + \nabla h(x^*) \mu^* = 0$$
$$g(x^*) \leqslant 0, h(x^*) = 0$$
$$\lambda^{*^T} g(x^*) = 0$$
$$\lambda^* \geqslant 0$$

### 11.2.3 Moltiplicatori di Lagrange

### Teorema 64. Teorema di Lagrange

Sia  $x^* \in S$  un punto di minimo locale del problema:

$$\min f(x)$$

$$h(x) = 0$$

e supponiamo che f, h siano continuamente differenziabili in un intorno di  $x^*$ . Supponiamo inoltre che nel punto  $x^*$  sia soddisfatta una delle condizioni di qualificazione dei vincoli.

Allora esiste  $\mu^* \in \mathbb{R}^p$  tale che:

$$\nabla f(x^*) + \nabla h(x^*) \ \mu^* = 0$$
$$h(x^*) = 0$$

Se vale il teorema, la ricerca dei punti che soddisfano le condizioni necessarie si riconduce alla ricerca delle soluzioni del sistema di n+p equazioni nelle n+p incogline  $(x,\mu)$ .

# 11.3 Problemi con vincoli di box

$$\begin{cases} \min f(x) & i = 1, \dots, n \\ l_i \leqslant x_i \leqslant u_i & i = 1, \dots, n \end{cases}$$

$$x_i - u_i \leqslant 0 \quad i = 1, \dots, n$$

Definiamo, inoltre, i moltiplicatori  $\hat{\lambda_i}$  e  $\lambda_i$ .

Essendo vincoli lineari, possiamo applicare le condizioni di KKT per ottenere condizioni necessarie di minimo locale. A tale scopo definiamo la Lagrangiana:

$$L(x, \hat{\lambda}, \lambda) = f(x) + \sum_{i=1}^{m} \hat{\lambda_i} (l_i - x_i) + \sum_{i=1}^{n} \lambda_i (x_i - u_i)$$

Scriviamo le condizioni di KKT:

(a)

(b)

$$\exists (\hat{\lambda}^{\star}, \lambda^{*}) \ t.c. \nabla L(x^{*}, \hat{\lambda}^{\star}, \lambda^{*}) = 0 = \nabla f(x^{*}) - \hat{\lambda}^{\star} + \lambda^{*}$$
$$\frac{\partial f(x^{*})}{\partial x_{i}} - \hat{\lambda}_{i}^{\star} + \lambda_{i}^{\star} = 0 \quad i = 1, \dots, n$$
$$\hat{\lambda}_{i}^{*}(l_{i} - x_{i}^{*}) = 0 \quad i = 1, \dots, n$$
$$\lambda_{i}^{*}(x_{i}^{*} - u_{i}) = 0 \quad i = 1, \dots, n$$

(c) 
$$\hat{\lambda}^{\star}, \lambda_i^* \geqslant 0 \quad i = 1, \dots, n$$

(d)

$$l_i \leqslant x_i^* \leqslant u_i$$

La condizione (d) si divide in:

$$\begin{cases} x_i^* = l_i(1) \\ l_i < x_i^* < u_i(2) \\ x_i^* = u_i(3) \end{cases}$$

(1) 
$$x_i^* = l_i$$

Se sostiuiamo (1) in (b) si ottiene che:  $\lambda_i^*=0$ . Inoltre in (a):

$$\frac{\partial f(x^*)}{\partial x} - \hat{\lambda_i}^* + \lambda_i^* = 0 \quad i = 1, \dots, n$$

Si ottiene:

$$\frac{\partial f(x^*)}{\partial x} = \hat{\lambda_i}^* \geqslant 0$$

(2) 
$$l_i < x_i^* < u_i$$

Se sostituiamo (2) in (b):

$$\hat{\lambda}_{i}^{*}(l_{i}-x_{i}^{*})=0 \quad i=1,\ldots n$$

$$\lambda_i^{\star}(x_i^* - u_i) = 0 \quad i = 1, \dots, n$$

$$(l_i - x_i^*) < 0 \longrightarrow \hat{\lambda}_i^* = 0$$

$$(x_i^* - u_i) < 0 \longrightarrow \lambda_i^* = 0$$

Inoltre in (a):

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x}^*)}{\partial \boldsymbol{x}} - \hat{\lambda_i}^* + \lambda_i^* = 0 \quad i = 1, \dots, n$$

$$\frac{\partial f(x^*)}{\partial x} = 0$$

(3) 
$$x_i^* = u_i$$

Se sostiuiamo (3) in (b) si ottiene che:  $\lambda_i^*=0$ . Inoltre in (a):

$$\frac{\partial f(x^*)}{\partial x} - \hat{\lambda_i}^* + \lambda_i^* = 0 \quad i = 1, \dots, n$$

Si ottiene:

$$\frac{\partial f(x^*)}{\partial x} = \hat{\lambda_i}^* \leqslant 0$$

$$\frac{\partial f(x^*)}{\partial x}\!\leqslant\!0$$

Ricapitolando siamo tornati al risultato precedente 10.3:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \begin{cases} \geqslant 0 & \text{se } x_i^* = l_i \\ = 0 & \text{se } l_i < x_i^* < u_i \\ \leqslant 0 & \text{se } x_i^* = u_i \end{cases}$$

### 11.4 Condizioni Sufficienti KKT

Le **condizioni di KKT** divengono condizoni sufficienti ( e necessarie se il punto p regolare) di minimo globale nell'ipotesi che f e g, siano funzioni convesse e che i vincoli di eguaglianza siano lineari.

### Teorema 65. Condizioni sufficienti(e necessarie) di KKT

Supponiamo che la funzione obiettivo f sia convessa, che le funzioni  $g_i$ , per  $i=1,\ldots,m$  siano convesse e che i vincoli di uguaglianza siano lineari, ossia: h(x) = Ax - b. Supponiamo inoltre che f,g,h siano continuamente differenziabili su un insieme aperto contenente l'insieme ammissibile. Allora, se esistono moltiplicatori  $\lambda^*$  e  $\mu^*$  tali che valogno le seguenti condizioni:

$$\nabla f(x^*) + \nabla g(x^*) \lambda^* + \nabla h(x^*) \mu^* = 0$$
$$g(x^*) \leqslant 0, h(x^*) = 0$$
$$\lambda^{*T} g(x^*) = 0$$
$$\lambda^* \geqslant 0$$

il punto  $x^*$  è un punto di minimo globale vincolato. Se inoltre f è strettamente convessa, allora  $x^*$  è l'unico punto di minimo globale vincolato.

#### Dimostrazione.

Osserviamo inanzitutto che l'insieme ammissibile è convesso e che f e g sono convesse e appartengono a  $C^1$ .

Considerato un qualunque punto x ammissibile, essendo  $\lambda^* \geqslant 0$ , si ha:

$$\begin{array}{ll} f(x) & \geqslant & f(x) + \lambda^{*T} g(x) + \mu^{*T} h(x) \\ h(x) & = & h(x^*) + \nabla h(x^*)^T (x - x^*) \\ g_i(x) & \geqslant & g_i(x^*) + \nabla g_i(x^*)^T (x - x^*) \end{array}$$

Da cui, essendo  $\lambda^* \geqslant 0$ :

$$\lambda^{*T}g_i(x) \geqslant \lambda^{*T}g_i(x^*) + \lambda^{*T}\nabla g_i(x^*)^T(x-x^*)$$

per la convessità di f:

$$f(x) \geqslant f(x^*) + \nabla f(x^*)^T (x - x^*)$$

Per dimostrare che  $x^*$  è minimo globale occorre dimostrare che  $f(x^*) \leq f(x) \quad \forall x$  ammissibile tale che  $g_i(x) \leq 0, h_i(x) = 0$ 

$$\begin{split} f(x) & \geqslant f(x) + \lambda^{*T} g(x) + \mu^{*T} h(x) \\ f(x) & \geqslant f(x^*) + \nabla f(x^*)^T (x - x^*) + \lambda^{*T} g_i(x^*) + \lambda^{*T} \nabla g_i(x^*)^T (x - x^*) + \mu^{*T} h(x^*) + \mu^{*T} \nabla h(x^*)^T (x - x^*) \\ & \geqslant f(x^*) + (\nabla f(x^*) + \lambda^{*T} \nabla g_i(x^*)^T + \nabla h(x^*) \mu^*) (x - x^*) = f(x^*) \end{split}$$

Quindi abbiamo dimostrato che:

$$f(x) \geqslant f(x^*) \quad \forall x \text{ ammissibile}$$

L'iter da seguire è il seguente:

- KKT se soddisfatta allora  $x^*$  è un candidato all'ottimo. Altrimenti:
  - $\circ$   $x^*$  è regolare:
    - Si, il punto viene scartato;
    - Verificao le condizioni di Fritz John con  $\lambda_0 = 0$ :
      - Si, allora è un candidato;
      - No, si scara il punto

### 12 Cenni sulla Teoria Statistica

Consideriamo un problema di classificazione binario supervisionato in cui, noto un data set di cui conosco le etichette, vogliamo trarne dei pattern "nascosti" all'interno dei dati. Quindi:

$$T = \{(x^i, y^i), x^i \in \mathbb{R}^n, y^i \in \{-1, 1\}, i = 1, \dots, l\}$$

### Ipotesi:

 $\exists$  una distribuzione di probabilità P(x, y) non nota che lega  $x \in y$ .

Inoltre, le osservazionid del training set siano state generate in maniera indipendente e identicamente distribuita secondo P(x, y)

### Tesi:

Vogliamo implementare una macchina di apprendimento che impari la relazione  $x \to y$ . Ciò equivale ad ottenre un modello  $f(\alpha): \mathbb{R}^n \to \{-1, 1\}$  con  $\alpha := \mathbf{parametro}$  modificabile.

La  $f(\alpha)$  è **deterministica** poiché, una volta fissato  $\alpha$ , ad ogni ingresso x fornisce un output y. Quello che dobbiamo fare è addrestare la macchina di apprendimento scegliendo il parametro  $\alpha$ .

A tale scopo occorre introdurre una misura che mi quantifica l'errore effettuato nella classificazione del test e minimizzarla. Questa misura viene detta **rischio effettivo**(coincide con il valore atteso E data la probabilità):

$$R(\alpha) = \int \frac{1}{2} |y - f(x, \alpha)| dP(x, y)$$

In cui:

- y è l'uscita reale;
- $f(x, \alpha)$  è l'uscita ottenuta dalla macchina;

Tuttavia il **rischio effettivo** non è calcolabile dato che abbiamo supposto che la distribuzione di probabilità non è nota. Un'alternativa viene data dal **rischio empirico**:

$$R_{\text{emp}}(\alpha) = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^{l} |y^i - f(x^i, \alpha)|$$

Occorre notare che abbiamo scorrelato il rischio dalla conoscenza della distribuzione di probabilità, ma l'abbiamo legata ai dati del nostro training set e quindi è una misura che possiamo calcolare.

### Nota 66.

In generale non vi è una relazione tra rischio empirico e rischio effettivo.

Inoltre, se confrontassimo due rischi empirici di due macchine diverse anche se possono avere lo stesso valore si potrebbero comportare in maniera diversa in presenta di dati del test set.

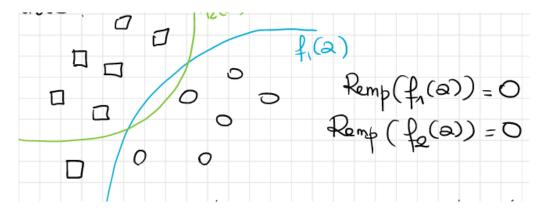


Figura 8. Confronto tra due rischi empirici

# 12.1 Teoria di Vapinil-Chervonenkis

Sia  $\eta \in [0, 1]$  con probabilità  $1 - \eta$  vale la seguente diseguaglianza:

$$R(\alpha) \leqslant R_{\text{emp}} + \sqrt{\frac{h \log\left(\frac{2l}{h}\right) - \log\left(\frac{\eta}{4}\right)}{l}}$$

In cui definiamo la VC Confidence:

$$VCC = \sqrt{\frac{h \log\left(\frac{2l}{h}\right) - \log\left(\frac{\eta}{4}\right)}{l}}$$

essa dipende da  $\eta, l, h$ . L'ultimo parametro è detto **VC Dimension** e misura la capacità di classificazione di una macchina  $f(\alpha)$ .

Quindi il termine a sinistra è composto da una media pesata degli errori del training set più la VC Confidenze che dipende dalla complessità della macchina, dal numero di feauture e da  $\eta$ , costituendo così un upper-bound per l'errore reale.

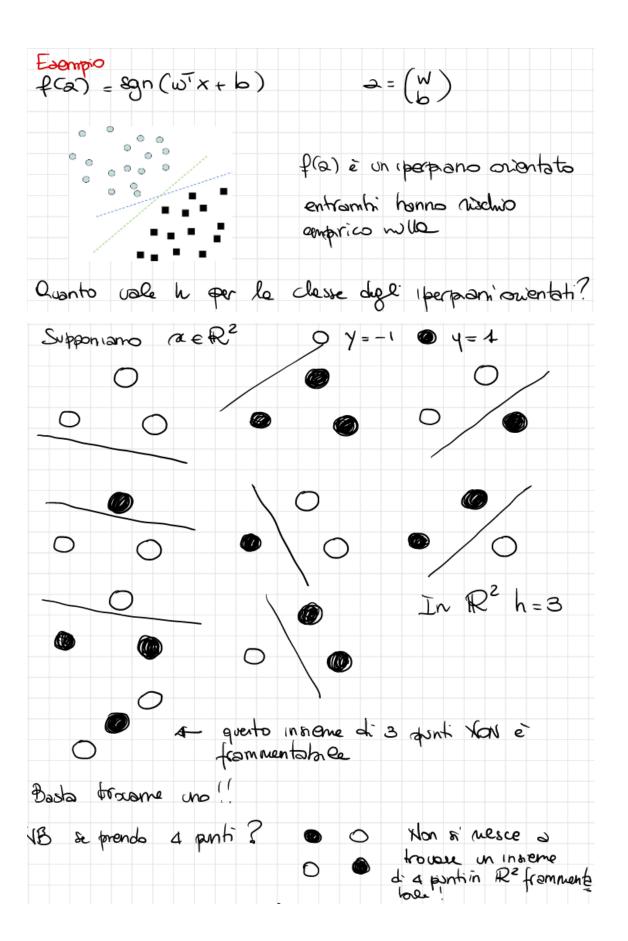
$$R(\alpha) \leq R_{\text{emp}}(\alpha) + VC(h, \eta, l) = U(\alpha, h)$$

Nella progettazione della nostra macchina vogliamo un **trade-off** fra complessità della macchina e il rischio reale. A tale scopo, occorre minimizzare l'upper bound  $U(\alpha, h)$ .

### Definizione 67. VC dimension

h è il massimo numero di punti che possono essere **frammentati**, ovvero che possono essere separati tramite la macchina di apprendimento  $f(\alpha)$  in due classi quando etichettati in tutti i modi possibili.

### Esempio 68.



#### Idea:

La nuova funzione obiettivo da massimizzare è il rischio strutturale:

$$U(\alpha, h) = R_{\text{emp}}(\alpha) + \text{VCC}(h, \alpha)$$

Si definiscono delle classi di funzioni di apprendimento:

$$F_1 \subseteq F_2 \subseteq \cdots \subseteq F_p$$

$$h_1 \leqslant h_2 \leqslant \cdots \leqslant h_p$$

## Procedura euristica per minimizzare il rischio strutturale

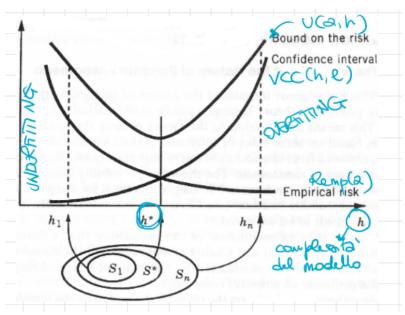
Per ogni classi  $F_j$  con VC dimension  $h_j$ , minimizza il rischio empirico  $R_{\rm emp}(\alpha)$ :

$$\alpha_j = \arg\min_{F_j} R_{\text{emp}}(\alpha)$$

Inoltre, calcola:

$$U^{j} = R_{\text{emp}}(\alpha_{j}) + \text{VCC}(h_{j}, l) \quad j = 1, \dots p$$

Scelgo la classe di macchine chemi restituisce il valore più basso di  $U^{j}$ .



**Nota 69.** h non è necessariamente proporzionale alla dimensione di  $\alpha$ .

Si hanno due approcci possibili per minimizzare  $U(\alpha, w)$ :

- 1. Fisso h e minimizzo  $R_{\rm emp}(\alpha) \longrightarrow {\bf reti\ neurali};$
- 2. Fisso  $R_{\text{emp}}(\alpha) = 0$  e minimizzo  $\text{VCC}(h, l) \longrightarrow \textbf{SVM}$  (Super Vector Machine);

# 13 Iperpiani Orientati

Un **iperpiano orientato** è definito come:

$$f(\alpha) = \operatorname{sgn}(w^T x + b) \quad \alpha = \left(\begin{array}{c} w \\ b \end{array}\right) \quad x \in \operatorname{TS}$$

#### Teorema 70.

Un insieme di punti  $\{x^1, \ldots, x^m\}$  è frammentabile dalla famiglia degli iperpiani orientati  $f(\alpha) = \operatorname{sgm}(w^Tx + b) \iff \{x^1, \ldots, x^m\}$  sono **affinemente indipendenti** cioè  $x_2 - x_1, \ldots, x_m - x_1$  sono linearmente indipendenti.

#### Importante 71.

h è il massimo numero di punti affinemente indipendenti in  $\mathbb{R}^n$ , quindi h=n+1.

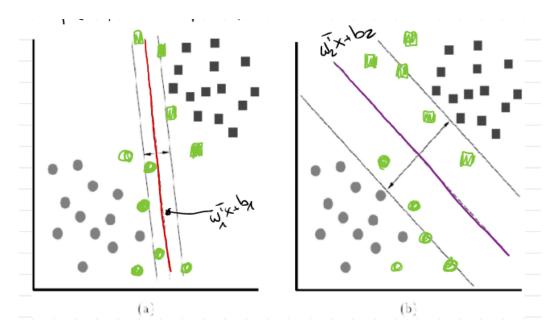


Figura 9. A sinistra un margine minore mi porta ad errori di test maggiori rispetto a quelli di destra

### Definizione 72. Margine

Il margine è la distanza minimi dell'iperpiano orientato dai punti del training set.

### Intuizione

Quanto più l'iperpiano è lontano dai dati di training, tanto più sarà migliore la sua capacità di generalizzazione.

#### Idea

Ci si restringe ad un sottocaso degli iperpiani detti **iperpiani orientati con gap di tolle-** ranza(margine).

**Ipotesi**: Supponiamo che i miei dati appartengano ad una sgera di diametro D.

$$y = H(w, b) = \begin{cases} 1 & \text{se } \frac{w^T x + b}{\|w\|} \geqslant \rho \\ -1 & \text{se } \frac{w^T x + b}{\|w\|} \leqslant -\rho \end{cases}$$

### Nota 73.

- $\frac{w^Tx+b}{\|w\|}$ := è la distanza di x dall'iperpiano;
- $\rho = 0 \longrightarrow iperpiani orientati.$

Ora devo calcolare la VC dimensione, essa dipende sia da  $\rho$  che da D.

## 13.1 Iperpiani con gap di tolleranza

Supponiamo che i dati siano generati all'interno di una sfera di diametro D e che si assegnino le uscite:

$$y = \begin{cases} 1 & \sec \frac{w^T x + b}{\|w\|} \geqslant \rho \\ -1 & \sec \frac{w^T x + b}{\|w\|} \leqslant -\rho \end{cases}$$

Definizione 74. Insiemi del data set

$$A = \{x^i \in T: y^i = 1\}$$

$$B=\{x^j\in T\colon y^j=-1\}$$

#### 13.1.1 Variazione di VC dimension

L'intuizione è che all'aumentare di  $\rho$ , h diminuisce.

### Teorema 75. VC dimension

Per gli iperpiani con margine si ha:

$$h \leqslant \min\left\{ \left\lceil \frac{D^2}{\rho^2} \right\rceil, n \right\} + 1$$

Nella minimzzazione del rischio strutturale si prende:

$$F_i = \{ f(x) = w^T x + b, \rho(w, b) \geqslant \rho_i \}$$

#### Definizione 76. Margine Iperpiano con gap di tolleranza

Definiamo il margine dell'iperpiano come:

$$\rho(w,b) = \min_{x^i \in T} \left\{ \frac{|w^T x^i + b|}{\|w\|} \right\}$$

Data una famglia di iperpiani  $F_i$  vogliamo determinare l'iperpiano che minimizza l'upper-bound così definito:

$$R(\alpha) \leq R_{\text{emp}}(\alpha) + \text{VCC}(h, l, \eta) = U(\alpha, h)$$

così facendo otteniamo l'**iperpiano ottimo** che ha un margine massimo ed ha un livello di generalizzazione maggiore su nuovi dati appartenenti al test set.

**Ipotesi:**A, B sono lineamente separabili e quindi:

 $\exists (\overline{w}, \overline{b})$  che speara correttamente T in due insemi AeB

In particolare, dato un training set:

$$TS = \{(x^i, y^i) i = 1, \dots, l, x^i \in \mathbb{R}^n. y^i \in \{-1, 1\}\}$$
 
$$A = \{x^i \in T: y^i = 1\}$$
 
$$B = \{x^j \in T: y^j = -1\}$$

I due insiemi sono **linearmente separabili** se  $\exists (w,b): y(x) = \operatorname{sgn}(w^Tx + b)$  classifica correttamente il TS, ovvero:

$$w^T x^i + b > 0 \qquad x^i \in A$$

$$w^T x^j + b < 0$$
  $x^j \in B$ 

Poiché i risolutori si comportano male in presenza di disequazioni non strette, riscriviamo le relazioni superiori nel seguente modo:

$$w^T x^i + b \geqslant \varepsilon$$
  $x^i \in A$ 

$$w^T x^j + b \leqslant -\varepsilon$$
  $x^j \in B$ 

Inotre, dato che  $\varepsilon$  è uno scalare >0, possiamo rinominare  $w=\frac{w}{\varepsilon}$  e  $b=\frac{b}{\varepsilon}$  ottenendo:

$$w^T x^i + b \geqslant 1$$
  $x^i \in A$ 

$$w^T x^j + b \le -1$$
  $x^j \in B$ 

Che corrisponde ad avere un  $R_{\text{emp}}(w,b) = 0$ .

Fra tutti questi iperpiano, come da ipotesi, vofliamo determinare quello ottimo e con il margine massimo:

$$\begin{aligned} \max_{w,b} \rho(w,b) &= & \min_{x^i \in A \cup B} \left\{ \frac{|w^T x^i + b|}{\|w\|} \right\} \\ w^T x^i + b &\geqslant 1 \quad \forall x^i \in A \\ w^T x^j + b &\leqslant -1 \quad \forall x^j \in B \end{aligned}$$

Questo problema combina un problema di massimo e di minimo, il che può essere riscritto come:

$$\begin{aligned} & & & & & & & \\ & & & & & & \\ w^Tx^i + b & & \geqslant & 1 & \forall x^i \in A \\ & & & & & & \\ w^Tx^j + b & & \leqslant & -1 & \forall x^j \in B \end{aligned}$$

#### Nota 77.

Questo problema è convesso poiché, i vincoli sono lineare e la funzione obiettivo è quadratica e anch'essa convessa.

#### Lemma 78.

Per ogni iperpiano ammissibile  $(\hat{w}, \hat{b})$  si ha:

$$\rho(\hat{w}, \hat{b}) \geqslant \frac{1}{\|\hat{w}\|}$$

Dimostrazione.

$$\rho(w,b) = \min_{x^i \in A \cup B} \left\{ \frac{|w^T x^i + b|}{\|w\|} \right\}$$

Poiché è ammissibile:

$$w^T x^i + b \geqslant 1 \quad \forall x^i \in A \quad \forall x^i \in A \quad |w^T x^i + b| \geqslant 1 = w^T \hat{x}^i + \hat{b}$$

$$w^T x^j + b \leqslant -1 \quad \forall x^j \in B \rightarrow |w^T x^i + b| = -(w^T x^i + b) \geqslant 1$$

Quindi:

$$\begin{split} |w^Tx^i+b|\geqslant 1 & \forall x^i\in A\cup B\\ \min_{x^i\in A\cup B}\left\{|w^Tx^i+b|\right\}\geqslant 1 & \longrightarrow \rho(\hat{w},\hat{b})\geqslant \frac{1}{\|\hat{w}\|} \end{split}$$

#### Teorema 79.

Per ogni iperpiano ammissibile  $(\hat{w}, \hat{b})$ , essite un altro iperpiano ammissibile  $(\overline{w}, \overline{b})$  tale che:

$$\rho(\overline{w}, \overline{b}) = \frac{1}{\|w\|} \geqslant \rho(\hat{w}, \hat{b})$$

Inoltre, esistono due punti  $x^+ \in A$  e  $x^- \in B$  tali che:

$$w^T x^+ + b = 1$$
  $w^T x^- + b = -1$ 

#### Dimostrazione.

Prendo $x^i\!\in\!A$ e $x^j\!\in\!B$ più vicini, per calcolare la distanza definisco:

$$\hat{d}_i = \min_{x^i \in A} \left\{ \frac{|\hat{w}^T x^i + \hat{b}|}{\|\hat{w}\|} \right\}$$

$$\hat{d}_j = \min_{x^j \in B} \left\{ \frac{|\hat{w}^T x^j + \hat{b}|}{\|\hat{w}\|} \right\}$$

Per l'insieme A:

$$\hat{d_i} = \frac{|\hat{w}^T \hat{x}^i + \hat{b}|}{\|\hat{w}\|} \leqslant \frac{|\hat{w}^T x^i + \hat{b}|}{\|\hat{w}\|} \quad \forall x^i \in A \longrightarrow \hat{w}^T \hat{x}^i \leqslant \hat{w}^T x^i$$

Per l'insieme B:

$$\hat{d}_j \!=\! \frac{|\hat{w}^T\!\hat{x}^j + \hat{b}|}{\|\hat{w}\|} \!\leqslant\! \frac{|\hat{w}^T\!x^j + \hat{b}|}{\|\hat{w}\|} \quad \forall x^j \!\in\! B$$

$$\frac{-\hat{w}^T\hat{x}^j - \hat{b}}{\|\hat{w}\|} \leqslant \frac{-\hat{w}^Tx^j - \hat{b}}{\|\hat{w}\|} \longrightarrow -\hat{w}^T\hat{x}^j \leqslant -\hat{w}^Tx^j$$

Definiamo  $\rho(\hat{w}, \hat{b}) = \min \{\hat{d}_i, \hat{d}_i\}$ 

### Corollario 80. Proprietà del minimo

$$\min\left\{a,b\right\} \leqslant \frac{1}{2}a + \frac{1}{2}b$$

Dimostrazione.

$$\min\left\{a,b\right\}\leqslant a \qquad \min\left\{a,b\right\}\leqslant b \longrightarrow \frac{1}{2}\min\left\{a,b\right\}\leqslant \frac{1}{2}a \qquad \frac{1}{2}\min\left\{a,b\right\}\leqslant \frac{1}{2}b$$

Sommo entrambe le relazioni:

$$\min\left\{a,b\right\} \leqslant \frac{1}{2}a + \frac{1}{2}b \qquad \qquad \Box$$

Quindi, ritornando alla prima dimostrazione:

$$\begin{split} \rho(\hat{w}, \hat{b}) &= \min{\{\hat{d}_i, \hat{d}_j\}} \leqslant \frac{1}{2} \hat{d}_i + \frac{1}{2} \hat{d}_j &= \frac{1}{2} \frac{|\hat{w}^T \hat{x}^i + \hat{b}|}{\|\hat{w}\|} + \frac{1}{2} \frac{|\hat{w}^T \hat{x}^j + \hat{b}|}{\|\hat{w}\|} \\ &= \frac{1}{2} \frac{\hat{w}^T \hat{x}^i + \hat{b}}{\|\hat{w}\|} - \frac{1}{2} \frac{\hat{w}^T \hat{x}^j + \hat{b}}{\|\hat{w}\|} \\ &= \frac{\hat{w}^T (\hat{x}^i - \hat{x}^j)}{2\|w\|} \end{split}$$

Modifico  $(\hat{w}, \hat{b})$  introducendo due scalari  $\alpha$ , coefficiente di rotazione, e  $\beta$ , coefficiente di traslazione,  $\longrightarrow (\overline{w}, \overline{b})$ :

$$\overline{w} = \alpha \, \hat{w}$$

$$\bar{b} = \beta$$

Questi due parametri devono soddisfare le seguenti relazioni:

$$\begin{cases} \alpha \, \hat{w}^T \hat{x}^i + \beta = 1 \\ \alpha \hat{w}^T \hat{x}^j + \beta = -1 \end{cases}$$

Che rappresentano i punti sul margine dell'iperpiano. Equivalgono a vincoli attivi cioè soddisfatti all'uguaglianza. Risolviamo ora il sistema:

$$\begin{split} \alpha \, \hat{w}^T (\hat{x}^i - \hat{x}^j) &= 2 \to \alpha = \frac{2}{\hat{w}^T (\hat{x}^i - \hat{x}^j)} \geqslant 2 \\ \beta &= 1 - \alpha \hat{w}^T \hat{x}^i = 1 - \frac{2 \hat{w}^T \hat{x}^i}{\hat{w}^T (\hat{x}^i - \hat{x}^j)} = \frac{\hat{w}^T \hat{x}^i - \hat{w}^T \hat{x}^j - 2 \, \hat{w}^T \hat{x}^i}{\hat{w}^T (\hat{x}^i - \hat{x}^j)} = \frac{\hat{w}^T (\hat{x}^i + \hat{x}^j)}{\hat{w}^T (\hat{x}^i - \hat{x}^j)} \end{split}$$

Nota 81.

$$0 < \alpha < \leq 1$$

A questo punto dobbiamo verificare che il nuovo iperpiano  $(\overline{w}, \overline{b})$  sia ammissibile. A tale scopo, so che:

$$1 \leqslant \hat{w}^T \hat{x}^i + \hat{b} \leqslant \hat{w}^T \hat{x}^j + \hat{b} \quad \forall x^i \in A$$

$$\begin{array}{ll} |\hat{w}^T\!\hat{x}^i+\hat{b}| & \leqslant & |\hat{w}^T\!x^i+\hat{b}| \qquad \forall x^i \in A \\ |\hat{w}^T\!\hat{x}^j+\hat{b}| & \leqslant & |\hat{w}^T\!x^j+\hat{b}| \qquad \forall x^j \in B \longrightarrow |\hat{w}^T\!\hat{x}^j+\hat{b}| \geqslant 1 \end{array}$$

Quindi:

$$\begin{array}{ll} \overline{w}^{\,T}\!x^i + \overline{b} &=& \alpha\,\hat{w}^T\!x^i + \beta \quad \text{Ricordando che}\,\hat{w}^T\!\hat{x}^i \leqslant \hat{w}^T\!x^i \\ \geqslant & \alpha\,\hat{w}^T\!\hat{x}^i + \beta = 1 \quad \forall x^i \in A \end{array}$$

е

$$\overline{w}^T x^j + \overline{b} = \alpha \, \hat{w}^T x^j + \beta \quad \text{Ricordando che} - \hat{w}^T \hat{x}^j \leqslant -\hat{w}^T x^j$$
 
$$\leqslant \alpha \, \hat{w}^T \hat{x}^j + \beta = -1 \quad \forall x^j \in B$$

Quindi l'iperpiano ottenuto ruotando e traslando è ancora ammissibile.

In conclusione,  $(\overline{w}, \overline{b})$  è l'iperpiano di separazione:

$$\rho(\overline{w}, \overline{b}) = \min_{x^i \in A \cup B} \left\{ \frac{|\overline{w}^T x^i + \hat{b}|}{\|\overline{w}\|} \right\} = \frac{1}{\|\overline{w}\|} = \frac{1}{\alpha \|\hat{w}\|}$$

#### Nota 82.

Il numeratore vale 1 per costruzione.

$$= \frac{1}{\alpha \|\hat{w}\|} = \frac{\hat{w}^T (\hat{x}^i - \hat{x}^j)}{2 \|\hat{w}\|} = \frac{1}{2} \hat{d}_i + \frac{1}{2} \hat{d}_j \geqslant \rho(\hat{w}, \hat{b})$$

Inoltre, so che:

$$\begin{cases} \overline{w}^T \hat{x}^i + \beta = 1 \\ \overline{w}^T \hat{x}^j + \beta = -1 \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} x^+ = x^i \\ x^- = x^j \end{cases}$$

Che erano l'ipotesi del teorema.

Ricapitolando, l'iperpiano ottimo:

$$\begin{aligned} \max_{w,\rho} \rho(w,b) &= \min_{x^i \in A \cup B} \left\{ \frac{|w^T x^i + b|}{\|w\|} \right\} \\ w^T x^i + b \geqslant 1 \quad \forall x^\iota \in A \\ w^T x^j + b \leqslant -1 \quad \forall x^j \in B \end{aligned}$$

#### Lemma 83.

Per ogni iperpiano ammissibile  $(\hat{w}, \hat{b})$  si ha  $\rho(\hat{w}, \hat{b}) \geqslant \frac{1}{\|\hat{w}\|}$ 

#### Teorema 84.

Per ogni iperpiano ammissibile  $(\hat{w}, \hat{b})$  esiste un iperpiano  $(\overline{w}, \overline{b})$  tale che:

$$\rho(\overline{w}, \overline{b}) = \frac{1}{\|\overline{w}\|} \geqslant \rho(\hat{w}, \hat{b})$$

Inoltre esistono  $x^+ \in A, x^- \in B$  tali che:

$$\overline{w}x^+ + \overline{b} = 1$$

$$\overline{w}x^- + \overline{b} = -1$$

Vogliamo far vedere che il problema inizialia di max min è equivalente a :

$$\min \frac{1}{2} ||w||^2 = f(w, b)$$

$$w^T x^i + b \geqslant 1 \quad \forall x^i \in A$$

$$w^T x^j + b \leqslant -1 \quad \forall x^j \in b$$

L'insieme ammissibile è chiuso ma potrebbe essere illimitato. Inoltre, è anche convesso e non vuoto:

$$\nabla f = \left( \begin{array}{c} w \\ 0 \end{array} \right) \qquad \nabla^2 f = \left( \begin{array}{cc} I & 0 \\ 0 & 0 \end{array} \right) \succcurlyeq 0$$

Quindi f è convessa e coerciva solo rispetto a w. Tuttavia, non è ne convessa ne coerciva ne vale Weierstrass-Ermann, occorre quindi determinare l'unicità della soluzione.

### Teorema 85.

Il problema equivalente ammette una soluzione unica  $(w^*, b^*)$ .

#### Dimostrazione.

L'insieme ammissibile è chiuso, ma non limitato. Dobbiamo, quindi, far vedere l'insieme di livello è compatto, se lo è allora il problema ammette soluzione.

$$L_0 = \left\{ (w, b) \in F : \frac{1}{2} ||w||^2 \leqslant \frac{1}{2} ||w_0||^2 \right\}$$

$$F(w,b): w^T x^i + b \geqslant 1 \quad \forall x^i \in A, w^T x^j + b \leqslant -1 \quad \forall x^j \in b$$

 $L_0$  è chiuso poiché F è chiuso, devo far vedere che è limitato.

Suppongo per assurdo che  $\exists \{w^k, b^k\}$  tale che  $w^k, b^k \in L_0$   $\left\| \begin{pmatrix} w^k \\ b^k \end{pmatrix} \right\| \uparrow \infty$ 

Dato che l'insieme di livello è definito come  $\|w^k\|^2 \leq \|w_0\|^2 \longrightarrow \|w^k\|$  è finita, suppongo che  $\lim_{b\to\infty} b^k = \infty$ :

$$\begin{pmatrix} w^k \\ b^k \end{pmatrix} \in F \longrightarrow w^{k^T} x^i + b^k \geqslant 1 \quad \forall x^i \in A$$

$$w^{k^T} x^j + b^k \leqslant -1 \quad \forall x^j \in B$$

Se  $b^k \to \infty$  il primo gruppo di vincoli è soddisfatto. Ci rimane da soddisfare il secondo:

$$w^{k^T} x^j + b^k \leqslant -1 \quad \forall x^j \in B$$

Per essere soddisfatto deve valere  $w^{k^T}x^j \to -\infty \longrightarrow ||w^k|| \to \infty$ . Ciò comporta un assurdo poiché la successione non appartiene più a  $L_0$ .

Allo stesso modo se  $b^k \to -\infty$  devo soddisfare:

$$w^{k^T}x^i + b^k \geqslant 1 \quad \forall x^i \in A \longrightarrow w^{k^T}x^i \to \infty \longrightarrow ||w^k|| \to \infty$$

Ciò comporta un assurdo. Quindi,  $L_0$  è un insieme compatto e quindi esiste soluzione.

L'unico aspetto che ci occorre dimostrare che la soluzione è unica: suppongo per assurdo che non lo sia. In particolare:

$$\exists (w^*, b^*), (\overline{w}, \overline{b}) \text{ ottime}$$

Quindi:

$$\frac{1}{2}\|w^*\|^2 = \frac{1}{2}\|\overline{w}\|^2 \leqslant \frac{1}{2}\|w\|^2 \quad \forall \left(\begin{array}{c} w \\ b \end{array}\right) \text{ammissibile}$$

Suppongo che  $\overline{w} \neq w^*$ . Siccome l'insieme è convesso, tramite la definizione di convessità:

$$\exists \lambda \in [0,1] \quad \lambda \bigg(\begin{array}{c} w^* \\ b^* \end{array}\bigg) + (1-\lambda) \bigg(\begin{array}{c} \overline{w} \\ \overline{b} \end{array}\bigg) \in F$$

Scegliamo  $\lambda = \frac{1}{2}$ :

$$\begin{pmatrix} \tilde{w} \\ \tilde{b} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \overline{w} \\ \overline{b} \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} w^* \\ b^* \end{pmatrix}$$

$$f(\tilde{w}, \tilde{b}) = \frac{1}{2} \left\| \frac{1}{2} \overline{w} + \frac{1}{2} w^* \right\|^2$$

Calcoliamo il valore della funzione obiettivo. La funzione obiettivo è stressamente convessa in w se e solo se:

$$f\!\left(\lambda\!\left(\begin{array}{c}w\\b\end{array}\right)\!+(1-\lambda)\left(\begin{array}{c}w^*\\b^*\end{array}\right)\right)\!<\lambda f\!\left(\begin{array}{c}\overline{w}\\\overline{b}\end{array}\right)\!+(1-\lambda)\left(\begin{array}{c}w^*\\b^*\end{array}\right)$$

In  $\tilde{w}$ :

$$f(\tilde{w},\tilde{b}) = \frac{1}{2} \, \|\tilde{w}\|^2 < \frac{1}{2} \, \frac{1}{2} \|w^*\| + \frac{1}{2} \, \frac{1}{2} \|\overline{w}\|^2 = \frac{1}{2} \|w^*\|^2$$

Questo è un assurdo poiché avremmo travo un iperpiano ammissibile migliore di quello ottimo e quindi deve valere necessariamente che:

$$\overline{w} = w^*$$

Ora ci rimane da controllare il valore del termine noto b: supponiamo  $b^* > \bar{b}.$ 

So che  $\exists x^+ \in A$ :

$$w^{*^{T}}x^{+} + b^{*} = 1 = \overline{w}^{T}x^{+} + b^{*} > \overline{w}^{T}x^{+} + \overline{b} \longrightarrow \overline{w}^{T}x^{+} + \overline{b} < 1 \longrightarrow ASSURDO$$

Questo è un assurdo poiché  $x^+ \in A$  e  $\left(\begin{array}{c} \overline{w} \\ \overline{b} \end{array}\right)$  è ammissibile. Allo stesso modo, supponiamo che  $b^* < \overline{b}$ :

$$w^{*T}x^- + b^* = -1 = \overline{w}^Tx^- + b^* < \overline{w}^Tx^- + b^* \rightarrow \overline{w}^Tx^- + \overline{b} > 1 \longrightarrow ASSURDO$$

Questo è un assurdo poiché  $x^- \in B$  e  $\left(\begin{array}{c} \overline{w} \\ \overline{b} \end{array}\right)$  è ammissibile.

Quindi per valere entrambe le condizioni, dobbiamo avere che:

$$\bar{b} = b^*$$

La soluzione, infine, è unica.

#### Teorema 86.

 $L'unica \ soluzione \left( \begin{array}{c} w^* \\ b^* \end{array} \right) \ del \ problema:$ 

$$\min \frac{1}{2} ||w||^2$$
 
$$w^T x^i + b \geqslant 1 \quad \forall x^i \in A$$
 
$$w^T x^j + b \leqslant -1 \quad \forall x^j \in b$$

è l'unica soluzione del problema:

$$\max \rho(w,b)$$
 
$$w^T x^i + b \geqslant 1 \quad \forall x^i \in A$$
 
$$w^T x^j + b \leqslant -1 \quad \forall x^j \in B$$

#### Dimostrazione.

Dal lemma 83 so che per ogni iperpiano ammissibile:

$$\rho(\hat{w}, \hat{b}) \geqslant \frac{1}{\|\hat{w}\|}$$

Inoltre, so che per ogni iperpiano ammissibile  $\begin{pmatrix} \hat{w} \\ \hat{b} \end{pmatrix}$  esiste un iperpiano  $\begin{pmatrix} \overline{w} \\ \overline{b} \end{pmatrix}$  tale che:

$$\rho(\hat{w}, \hat{b}) \leqslant \rho(\overline{w}, \overline{b}) = \frac{1}{\|\overline{w}\|}$$

In aggiunta, so che:

$$\begin{split} &\frac{1}{2}\|w^*\|^2 \leqslant \frac{1}{2}\|w\|^2 & \forall \left( \begin{array}{c} w \\ b \end{array} \right) \text{ammissibile} \\ &\longrightarrow \|w^*\| \leqslant \|w\| & \forall \left( \begin{array}{c} w \\ b \end{array} \right) \text{ammissibile} \\ &\longrightarrow \frac{1}{\|w^*\|} \geqslant \frac{1}{\|w\|} & \forall \left( \begin{array}{c} w \\ b \end{array} \right) \text{ammissibile} \end{split}$$

Per qualunque  $\begin{pmatrix} \hat{w} \\ \hat{b} \end{pmatrix}$  ammissibile:

$$\frac{1}{\|\hat{w}\|} \leqslant \rho(\hat{w}, \hat{b}) \leqslant \frac{1}{\|\overline{w}\|} \leqslant \frac{1}{\|w^*\|}$$

Allora:

$$\rho(\hat{w}, \hat{b}) \leqslant \rho(w^*, b^*) \quad \forall \begin{pmatrix} \hat{w} \\ \hat{b} \end{pmatrix}$$

Cioè è l'iperpiano a massimo margine.

Abbiamo dimostrato che è l'ottimo globale.

Il problema della riformulazione del problema è dato dalla presenza di vincoli per ogni punto e quindi risulta oneroso dal punto di vista computazionale.

## 14 Teoria della Dualità

### 14.1 Introduzione

Il problema che vogliamo risolvere è:

$$\begin{cases} \min \frac{1}{2} ||w||^2 \\ y^i(w^T x^i + b) \geqslant 1 \quad \forall i = 1, \dots, l \end{cases}$$

A tale scopo generiamo una formulazione alternativa del problema, detto problema duale, e, di conseguenza, otteniamo i seguenti vantaggi:

- 1. Teorici: otteniamo risultati e informazioni sul problema originario—condizioni di ottimo;
- 2. Praciti: il duale è più semplice da risolvere— il numero di vincoli diminuisce mentre il numero delle variabili aumentano.

Quindi la situazioni che abbiamo davanti è del tipo:

#### Problema Primale

$$\left\{ \begin{array}{l} \min f(x) \\ x \in S \end{array} \right.$$

Problema Duale

$$\begin{cases} \max \psi(u) \\ u \in U \end{cases}$$

Tipicamente vale la proprietà di dualità debole:

$$\sup \psi(u) \leqslant \inf f(x)$$

$$u \in U$$
  $x \in S$ 

In alcuni casi, cioè quando il problema è convesso, vale la dualità forte:

$$\sup \psi(u) = \inf f(x)$$

$$u \in U$$
  $x \in S$ 

La dualità ci permette di ottenere:

- 1. Stima del valore ottimo (lower-bound) del primale;
- 2. Condizioni di ottimo;
- 3. Algoritmi di soluzione.

## 14.2 Dualità di Wolfe

Dato un problema primale non lineare convesso, del tipo:

$$\begin{cases} \min f(x) \\ g_i(x) \leq 0 & i = 1, \dots, m \\ h_j(x) = 0 & j = 1, \dots, p \end{cases}$$

$$f, g_i, h_i \in C^1$$
  $i = 1, ..., n$   $j = 1, ..., p$ 

In particolare:

$$f, g_i \quad i = 1, \dots, m$$
 convesse

$$h_j$$
  $j=1,\ldots,p$  lineare

Quindi abbiamo che le condizioni di KKT risultano necessarie e sufficienti di ottimo globale:

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(x) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j h_j(x)$$

Definiamo a questo punto il duale di Wolfe:

$$\begin{cases} \max_{x,\lambda,\mu} L(x,\lambda,\mu) \\ \nabla_x L(x,\lambda,\mu) = 0 = \nabla f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla_i g_i(x) + \sum_{j=1}^p \mu_j h_j(x) \\ \lambda \geqslant 0 \end{cases}$$

#### Teorema 87.

Se il problema **primale** che ammette soluzione  $x^*$  con moltiplicatori  $(\lambda^*, \mu^*)$  allora  $(x^*, \lambda^*, \mu^*)$  è soluzione del duale e il **gap di dualità** è nullo, cioè:

$$f(x^*) = L(x^*, \lambda^*, \mu^*)$$

#### Dimostrazione.

 $(x^*, \lambda^*, \mu^*)$  è soluzione del problema primale  $\longleftrightarrow$ le condizioni di KKT sono soddisfatte:

$$\nabla_{x}L(x^{*}, \lambda^{*}, \mu^{*}) = 0 \quad (1)$$

$$\lambda^{*} \geqslant 0 \quad (2)$$

$$\lambda_{i} g_{i}(x^{*}) = 0 \qquad i = 1, \dots, m$$

$$g_{i}(x^{*}) \leqslant 0 \qquad i = 1, \dots, m$$

$$h_{j}(x^{*}) = 0 \qquad j = 1, \dots, p$$

La (1)+(2) forniscono la soluzione  $(x^*, \lambda^*, \mu^*)$  ammissibile per i duale.

$$L(x^*, \lambda^*, \mu^*) = f(x^*) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(x) + \sum_{i=1}^{p} \mu_i h_j(x) = f(x^*)$$

#### Nota 88.

- $\sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(x) = 0$  per complementarietà;
- $\sum_{j=1}^{p} \mu_j h_j(x) = 0$  per ammissibilità

Quindi il gap di dualità è nullo.

A questo punto devo far vedere che la soluzione è **ottima** per il duale. Quindi devo far vedere che:

$$L(x^*, \lambda^*, \mu^*) \geqslant L(x, \lambda, \mu) \quad \forall (x, \lambda, \mu) \text{ ammissibile per il duale}$$

$$L(x^*, \lambda^*, \mu^*) = f(x^*) \geqslant f(x^*) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(x^*) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j h_j(x^*) = L(x^*, \lambda, \mu) \quad (\alpha)$$

#### Nota 89.

- $\lambda_i$  poiché  $\lambda$  è ammissibile per il duale;
- $g_i(x^*) \leq 0$  per l'ammissibilità di  $x^*$  nel problema primale;
- $h_i(x^*) = 0$  poiché  $x^*$  è ammissibile

Otteniamo quindi:

$$L(x^*, \lambda^*, \mu^*) \geqslant L(x^*, \lambda, \mu)$$

Inoltre sappiamo che  $L(x,\lambda,\mu)$  è convessa e appartiene a  $C^1$ . Allora:

$$L(x^*, \lambda, \mu) \geqslant L(x, \lambda, \mu) + \nabla_x L(x, \lambda, \mu)^T (x^* - x) \quad \forall (x, \lambda, \mu) \text{ ammissibile nel duale } (\beta)$$

#### Nota 90.

•  $\nabla_x L(x,\lambda,\mu)^T(x^*-x) = 0$  per l'ammissibilità duale

Infine, unendo  $(\alpha) + (\beta)$ , si giunge a:

$$L(x^*,\lambda^*,\mu^*) \geqslant L(x,\lambda,\mu) \quad \forall (x,\lambda,\mu) \text{ ammissibil per il duale}$$

Il che implica che la terna  $(x^*, \lambda^*, \mu^*)$  è ottima per il duale.

#### Nota 91.

Dopo aver effettuato queste operazioni di trasformazione del problema primale, il duale non è più lineare e non vale neanche la convessità. Ciò corrisponde ad un aumento di complessità. Tuttavia nel nostro caso, con funzione obiettivo quadratica e vincoli lineari, il problema si semplifica.

## 14.3 Programmazione Quadratica - Duale

Dato il problema dell'iperpiano ottimo:

$$\begin{cases} \min \frac{1}{2} x^T Q \, x + c^T x \\ A \, x \geqslant b & Q \geqslant 0 \\ A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \, b \in \mathbb{R}^m \end{cases}$$

Definiamo la Lagrangiana.

$$L(x,\lambda) = \frac{1}{2}x^TQx + c^Tx + \lambda^T(Ax - b)$$

Scriviamo il duale:

$$\begin{aligned} \max_{x,\lambda} \frac{1}{2} x^T Q \, x + c^T x + \lambda^T \left( A \, x - b \right) \\ Q \, x + c + A^T \lambda &= 0 \\ \lambda &\geqslant 0 \end{aligned}$$

Moltiplicando il vincolo per  $x^T$ :

$$x^TQ\,x + c^Tx - x^TA^T\lambda = 0 \longrightarrow c^Tx + \lambda^TA\,x = -x^TQ\,x$$

e sostituisco nella funzione obiettivo:

$$\begin{split} \max \frac{1}{2} x^T Q \, x - x^T Q \, x - \lambda^T b = -\frac{1}{2} x^T \, Q \, x - \lambda^T b \\ \longrightarrow -\min \frac{1}{2} x^T Q \, x + b^T \lambda \end{split}$$

Quindi posso ora scrivere il duale:

$$\begin{cases} -\min_{x,\lambda} \frac{1}{2} x^T Q x + b^T \lambda = \theta(x,\lambda) \\ Q x + c + A^T \lambda = 0 \\ \lambda \geqslant 0 \end{cases}$$
 Problema Convesso

$$\nabla^2\theta(x,\lambda) = \left(\begin{array}{cc} Q & 0 \\ 0 & 0 \end{array}\right) \succcurlyeq 0 \quad \text{semidefinito positivo} \rightarrow \text{solo strettamente convessa}$$

Quindi le condizioni di KKT sono necessarie e sufficienti di ottimo globale.

#### Teorema 92.

Dato il problema primale e duale:

$$\begin{cases} \min \frac{1}{2} x^T Q x + c^T x \\ A x \leqslant b \end{cases} (P) \qquad \begin{cases} -\min \frac{1}{2} x^T Q x + b^T \lambda \\ Q x + c + A^T \lambda = 0 \\ \lambda \geqslant 0 \end{cases} [v] (D)$$

La condizione necessaria è che  $Q \succcurlyeq 0$ .

Sia  $(\bar{x}, \bar{\lambda})$  soluzione del duale, allora  $\exists x^*$ , non necessariamente uguale a  $\bar{x}$ , tale che:

- 1.  $Q(\bar{x} x^*) = 0;$
- 2.  $x^*$  soluzione del problema primale (P);
- 3.  $(\bar{x}, \bar{\lambda})$  è una coppia di minimo globale-moltiplicatore del primale (P);

#### Nota 93.

La x, passando dal primale al duale può cambiare, ma la  $\bar{\lambda}$  è lo stesso.

#### Dimostrazione.

 $(\bar{x}, \bar{\lambda})$  è soluzione ottima del duale  $(D) \longrightarrow KKT$  è soddisfatta nel duale.

Scriviamo ora la Lagrangiana del duale W con le corrispettive condizioni di KKT:

$$\begin{split} W(x,\lambda,v,z) &= \frac{1}{2} x^T \, \mathbf{Q} \mathbf{x} + b^T \lambda - v^T \big( \mathbf{Q} \, x + c + A^T \lambda \big) - z^T \lambda \\ \nabla_x W &= \mathbf{Q} \, x - \mathbf{Q} \, v = 0 \\ \nabla_\lambda W &= b - A \, v - z = 0 \\ z^T \lambda &= 0 \\ z &\geqslant 0 \\ \mathbf{Q} \, \overline{x} + c + A^T \overline{\lambda} &= 0 \\ \lambda &> 0 \end{split} \tag{\Delta}$$

Sono soddisfatte in  $\bar{x}, \bar{\lambda}$  poiché per le ipotesi di KKT. Ora, devo trovare la soluzione  $x^*$  del primale. A tale scopo, sceiviamo KKT del primale e si deve avere:

$$\nabla_x L = 0 = -Q x + c + A^T \lambda$$
$$\lambda^T (A x - b) = 0$$
$$\lambda \geqslant 0$$
$$A x \leqslant b$$

Da (a) è possibile ricavarsi z = b - Av che, sostituito nella complementarietà del duale:

$$\overline{\lambda}^{\,T}(b-A\,v)=0 \longrightarrow z \geqslant 0 \; (\text{ammissibilità}) \longrightarrow A\,v \leqslant b(\text{ammissibilità primale di}\,v)$$

#### Nota 94.

Quindi abbiamo trovato l'ammissibilà tra primale e duale con lo stesso  $\lambda$ .

Inoltre, so che:

$$Q(\overline{x} - v) = 0 \longrightarrow Q \overline{x} = Q v$$

Sostituendo quest'ultimo risultato in  $(\Delta)$ :

$$Qv + c + A^T \overline{\lambda} = 0 \longrightarrow (x, v)$$
 soddisfa KKT

A questo punto, abbiamo scritto KKT per il primale, in cui:

$$x^* = v \longrightarrow \text{La coppia}(x^*, \overline{\lambda}) \text{ soddisfa KKT del primale}$$

 $\longrightarrow x^*$  è soluzione ottima del primale  $\to x^* = v$  è soluzione globale  $Q \bar{x} - Q x^* = 0$ 

$$\longrightarrow Q(\bar{x} - x^*) = 0$$

Nota 95.

- $\bar{\lambda}$  viene trovato risolvendo il problema duale: ci si ricava la soluzione duale con cui risolvere il primale;
- Se  $Q \succ 0, \overline{x} = x^*$  poiché  $Q(\overline{x} x^*) = 0 \longleftrightarrow \overline{x} x^* = 0$

## 15 SVM Lineari

Il nostro obiettivo è quello di applicare la teoria della dualità della programmazione quadratica per risolvere il problema dell'iperpiano ottimo seguente:

$$\begin{cases} \min \frac{1}{2} ||w||^2 \\ y^i(w^T x^i + b) \geqslant 1 \quad i = 1, \dots, l \quad (\lambda_i) \end{cases}$$

In questo tipo di problema è possibile applicare la dualità di Wolfe poiché la funzione obiettivo è convessa ed in particolare:

$$Q = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \succcurlyeq 0$$
 semidefinita positiva

Inoltre, i vincoli sono lineari.

Quindi iniziamo con lo scrivere la Lagrangiana di questo problema:

$$L(w, b, \lambda) = \frac{1}{2} ||w||^2 - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i (y^i (w^T x^i + b) - 1)$$

Il corrispondente duale di Wolfe, risulterà:

$$\begin{split} \max_{w,b,\lambda} \frac{1}{2} w^T w - \sum_{i=1}^l \, \lambda_i \, y^i \, w^T x^i - \sum_{i=1}^l \, \lambda_i y^i \, b + \sum_{i=1}^l \, \lambda_i \\ \Delta_w L(w,b,\lambda) = w - \sum_{i=1}^l \, \lambda_i \, y^i \, x^i = 0 \\ \frac{\partial L(w,b,\lambda)}{\partial b} = - \sum_{i=1}^l \, \lambda_i \, y^i = 0 \\ \lambda \geqslant 0 \end{split}$$

Dall'annullamento della Lagrangiana rispetto a b otteniamo che  $\sum_{i=1}^{l} \lambda_i y^i b = 0$ ; mentre dall'annullamento della Lagrangiana rispetto a w otteniamo:

$$w = \sum_{i=1}^{l} \lambda_i y^i x^i$$

Sostituendo l'ultima espressione nella funzione obiettivo, il problema può essere riscritto come:

$$\max \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} \lambda_{i} y^{i} (x^{i})^{T} \sum_{j=1}^{l} \lambda_{i} y^{j} x^{j} - \sum_{i=1}^{l} \lambda_{i} y^{i} (x^{i})^{T} \sum_{j=1}^{l} \lambda_{j} y^{j} x^{j} + \sum_{i=1}^{l} \lambda_{i} =$$

$$= \max -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{l} \lambda_{i} \lambda_{j} y^{i} y^{j} (x^{i})^{T} x^{j} - \sum_{i=1}^{l} \lambda_{i}$$

Riscrivendo la funzione obiettivo in forma otteniamo il duale di Wolfe:

$$\begin{cases} -\min \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{l} \lambda_i \lambda^j y^i y^j (x^i)^T x^j - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i \\ \sum_{i=1}^{l} \lambda_i y^i = 0 \\ \lambda \geqslant 0 \quad i = 1, \dots, l \end{cases}$$

A questo punto defiscono la forma matriciale di questo problema introducendo la matrice:

$$X = [y^1 x^1 \dots y^l x^l] \quad X \in \mathbb{R}^{n \times l}$$

In cui l'elemento ij – esimo risulterà nella forma:

$$[X^TX]_{ij} = y^i y^j (x^i)^T x^j$$

Quindi otteniamo il duale in forma compatta:

$$\min \frac{1}{2} \lambda^T X^T X \lambda - e^T \lambda$$
$$u^T \lambda = 0$$

$$\lambda \geqslant 0$$

in cui 
$$e = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$
.

Nota 96.

$$Q = X^T X \longrightarrow z^T Q z = z^T X^T X z = (Xz)^T X z = ||Xz||^2 \geqslant 0 \longrightarrow Q \geqslant 0$$

Il problema è convesso in  $\lambda$ .

Quello a cui vogliamo rispondere è che:

- Il problema duale ammette soluzione?
  - Per il teorema 87 so che il problema primale ammette soluzione unica, allora il problema duale ammette soluzione.
- Come si trovano  $w^*$  e  $b^*$  una volta che ho risolto il problema duale?

Sia  $\lambda^*$  la soluzione del problema duale:

$$w^* = \sum_{i=1}^l \lambda_i^* y^i x^i \qquad \lambda^* \geqslant 0$$

Gli unici punti del Training Set che contribuiscono ad individuare w sono gli  $x^i$  per cui  $\lambda^{i*} > 0$ . I punti che soddisfano tale condizioni vengono detti **vettori di supporto.** 

Risolvere il problema duale mi fornisce l'informazione sulla <u>ridondanza</u> del TS. Nel caso in cui  $\lambda^{i*} > 0$ , allora il vincolo i – esimo del primale è attivo all'uguaglianza e quindi il punto si trova sul margine.

• Come si ricava  $w^*$ ?

Per ricavare  $b^*$  si utilizza il teorema della dualità di Wolfe nel caso quadratico. In particolare  $\lambda^*$  è il moltiplicatore associato a  $w^*$ ,  $b^*$  e quindi vale la complementarietà:

$$\lambda_i^*(y^i(w^{*T}x^i+b^*)-1)=0$$
  $i=1,\ldots,l$ 

Se  $\lambda_i^* > 0 \longrightarrow y^i(w^{*T}x^i + b^*) = 1$ . Quindi:

$$b^* = \frac{1}{y^i} - w^{*T} x^i = \frac{1}{y^i} - \sum_{i=1}^l \lambda_j^* y^j (x^j)^T x^i$$

Quindi la **SVM** diventa:

$$y(x) = \operatorname{sgn}(w^{*^T}x + b^*) = \operatorname{sgn}\left(\sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* y^i (x^i)^T x + b^*\right)$$

Riassumento, per trovare l'iperpiano ottimo (cioè quello con migliore capacità di generalizzazione tra quelli che separano i due insiemi A e B) posso risolvere o il problema primale o il duale e sono entrambi problemi di programmazione quadratica convessa.

Tutta la teoria funzione se A e B sono linearmente separabili. In caso contrario, l'insieme ammissibile è un insieme **vuoto** e quindi occorre rilassare i vincoli tramite l'aggiunta di variabili ausialiarie dette **variabili di slack**:

$$y^{i}(w^{T}x^{i}+b) \geqslant 1-\xi_{i} \quad i=1,\ldots,l$$
  
 $\xi_{i} \geqslant 0$ 

Quindi un punto  $x^i + \mathbf{mal}$  classificato se i segni di  $y^i$  e  $w^T x^i + b$  sono discordi. Allora:

$$y^{i}(w^{T}x^{i}+b)<0$$

$$y^i(w^Tx^i+b) \geqslant 1-\xi_i \longleftrightarrow \xi_i \geqslant 1-y^i(w^Tx^i+b) \longrightarrow \xi_i > 1$$
 se  $x^i$  è mal classificato

In particolare,  $\sum_{i=1}^{l} \xi_i$  è un **upperbound** sul numero di punti mal classificati.

A fronte di ciò modifichiamo la funzione obiettivo del problema primale nel seguente modo;

$$\min_{w,b,\xi} \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^l \, \xi_i$$

$$y^{i}(w^{T}x^{i}+b) \geqslant 1-\xi_{i} \quad i=1,\ldots,l \qquad \lambda_{i}$$
  
$$\xi_{i} \geqslant 0 \qquad i=1,\ldots,l \qquad \mu_{i}$$

#### Nota 97.

Il termine  $C \sum_{i=1}^{l} \xi_i$  rappresenta una **penalità** sull'errore sul TS e C > 0 viene scelto in cross validation.

Scriviamo a questo punto la nuova Lagrangiana

$$L(w, b, \xi, \lambda, \mu) = \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^{l} \xi_i - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i \left( y^i \left( w^T x^i + b \right) - 1 + \xi_i \right) - \sum_{i=1}^{l} \mu_i \xi_i$$

e il suo duale:

$$\max \frac{1}{2} \|w\|^{2} + C \sum_{i=1}^{l} \xi_{i} - \sum_{i=1}^{l} \lambda_{i} (y^{i} (w^{T} x^{i} + b) - 1 + \xi_{i}) - \sum_{i=1}^{l} \mu_{i} \xi_{i}$$

$$\Delta_{w} L(w, b, \xi, \lambda, \mu) = w - \sum_{i=1}^{l} \lambda_{i} y^{i} x^{i} = 0$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} (w, b, \xi, \lambda, \mu) = -\sum_{i=1}^{l} \lambda_{i} y^{i} = 0$$

$$\frac{\partial L}{\partial \xi_{i}} (w, b, \xi, \lambda, \mu) = C - \lambda_{i} - \mu_{i} \qquad i = 1, \dots, l$$

$$\lambda_{i} \geq 0 \qquad i = 1, \dots, l$$

$$\mu_{i} \geq 0 \qquad i = 1, \dots, l$$

Dall'annullamento della Lagrangiana rispetto a w e  $\xi$  possiamo ricavare:

$$w = \sum_{i=1}^{l} \lambda_i y^i x^i$$
  $\mu_i = C - \lambda_i$   $i = 1, \dots, l$ 

Sostituendo queste due ultime espressioni, il problema diventa:

$$\max \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{l} \lambda_{i} \lambda_{j} y^{i} y^{j} (x^{i})^{T} x^{j} + C \sum_{i=1}^{l} \xi_{i} - \sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{l} \lambda_{i} \lambda_{j} y^{i} y^{j} (x^{i})^{T} x^{j} - \sum_{i=1}^{l} \lambda_{i} y^{i} b + \sum_{i=1}^{l} \lambda_{i} - \sum_{i=1}^{l} \lambda^{i} \xi^{i} - \sum_{i=1}^{l} (C - \lambda_{i}) \xi_{i}$$

Nota 98. I termini in rosso si semplificano o diventano nulli.

$$\max -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{l} \lambda_i \lambda_j y^i y^j (x^i)^T x^j + \sum_{i=1}^{l} \lambda_i$$

Riscrivendolo in forma di minimo:

$$-\min \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{l} \lambda_i \lambda_j y^i y^j (x^i)^T x^j - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i$$

$$\sum_{i=1}^{l} \lambda^i y^i = 0$$

$$\lambda_i \ge 0$$

$$C - \lambda_i \ge 0 \quad i = 1, \dots, l$$

Gli ultimi due vincoli vengono riscritti come  $0 \le \lambda_i \le C$  i = 1, ..., lAlla fine il duale diventa:

$$-\min \quad \frac{1}{2}\lambda^T X^T X \lambda - e^T \lambda$$
$$y^T \lambda = 0$$
$$0 \le \lambda_i \le C \quad i = 1, \dots, l$$

A questo punto supponiamo di risolvere il duale  $\lambda^*$ , vogliamo capire come si trovano  $w^*, b^*$  del primale. A tale scopo:

$$w^* = \sum_{i=1}^l \lambda_i^* \, y^i \, x^i$$

Importante 99. I vettori di supporto sono gli  $x^i$  per cui  $\lambda_i^* > 0$ .

In aggiunta,  $b^*$  si trova tramite la complementarieta. In particolare,  $(\lambda^*, \mu^*)$  dove  $\mu_i^* = C - \lambda_i^*$  sono i moltiplicatori associati alla soluzione primale. Allora questi moltiplicatori devono soddisfare la complementarietà:

$$\lambda_i^*(y^i(w^{*^T}x^i+b^*)-1+\xi_i^*)=0 \quad i=1,\dots,l$$
 
$$\mu_i^*\,\xi_i^*=(C-\lambda_i^*)\,\xi_i^*=0 \quad i=1,\dots,l$$
 
$$\xi_i^*(C-\lambda_i^*)=0 \longrightarrow \operatorname{Se}\lambda_i^*< C \longrightarrow \xi_i^*=0 \longrightarrow x^i\,\mathrm{\grave{e}}\,\mathbf{ben}\,\mathbf{calssificato}$$

Per trovare  $b^*$  scelgo  $i: 0 < \lambda_i^* < C$ . Allora  $\xi_i^* = 0 \longrightarrow y^i(w^{*^T}x^i + b^*) = 1$ .

I punti  $x^i$  per cui  $\lambda_i^* = C$  non posso calcolare  $\xi_i^*$ . Allora sono candidati ad essere malclassificati. Infine, la nostra macchina SVN sarà del tipo:

$$y(x) = \operatorname{sgn}(w^{*T}x + b^*)$$