Методы оптимизации, ВМК, осень 2018

Семинар 8: Сопряженные функции. Двойственность Фенхеля.

1 Замкнутые функции

Напомним, что *надграфиком* функции $f : E \to \mathbb{R}$, заданной на множестве E, называется множество $\operatorname{Epi} f := \{(x, t) \in E \times \mathbb{R} : f(x) \le t\}$.

Определение 1.1 (Замкнутые функции)**.** Пусть $f : E \to \mathbb{R}$ — функция, заданная на множестве E в нормированном пространстве V. Функция f называется *замкнутой*, если $\operatorname{Epi} f$ является замкнутым множеством в пространстве $V \oplus \mathbb{R}$.

Утверждение 1.2 (Эквивалентное определение замкнутости через множества подуровней)**.** *Пусть $f : E \to \mathbb{R}$ — функция, заданная на множестве E в нормированном пространстве. Тогда f является замкнутой, если и только если множество подуровней $f^{-1}((-\infty, a]) := \{x \in E : f(x) \le a\}$ является замкнутым для любого $a \in \mathbb{R}$.*

Определение 1.3 (Полунепрерывность)**.** Пусть $f : E \to \mathbb{R}$ — функция, заданная на множестве E в нормированном пространстве. Функция f называется *полунепрерывной снизу (соответственно сверху) в точке* $x_0 \in E$, если для любой последовательности $(x_k)_{k=1}^{\infty}$ точек из E, сходящейся к x_0, выполняется $f(x_0) \le \liminf_{k\to\infty} f(x_k)$ (соответственно $f(x_0) \ge \limsup_{k\to\infty} f(x_k)$). Если f является полунепрерывной снизу (соответственно сверху) в каждой точке $x \in E$, то f просто называется *полунепрерывной снизу (соответственно сверху)*.

Пример 1.4. Пусть $E := [-1, 1]$, и пусть $f, g : E \to \mathbb{R}$ — функции

$$f(x) := \begin{cases} 0, & \text{если } x \ne 0, \\ -1, & \text{если } x = 0, \end{cases} \qquad g(x) := \begin{cases} 0, & \text{если } x \ne 0, \\ 1, & \text{если } x = 0. \end{cases}$$

Обе функции f и g не являются непрерывными, однако f является полунепрерывной снизу, а g является полунепрерывной сверху.

Нетрудно видеть, что f является непрерывной, если и только если f одновременно является полунепрерывной снизу и сверху.

Утверждение 1.5 (Критерий замкнутости)**.** *Пусть $f : E \to \mathbb{R}$ — функция, заданная на множестве E в нормированном пространстве. Тогда f является замкнутой, если и только если*

(a) f является полунепрерывной снизу;

(b) f обладает барьерным свойством*: для всех $x_0 \in \partial E \setminus E$ выполнено $f(x) \to +\infty$ при $x \to x_0; x \in E$.*

Замечание 1.6. Если множество $\partial E \setminus E$ является пустым, т. е. если множество E замкнутое, то барьерное свойство выполняется бессодержательно. Таким образом, в случае замкнутой области определения, замкнутость функции эквивалентна полунепрерывности снизу.

Приведенный критерий является одним из главных поставщиков базовых примеров замкнутых функций.

Пример 1.7. Любая полунепрерывная (в том числе и просто непрерывная) функция $f : E \to \mathbb{R}$, заданная на *замкнутом* множестве E в нормированном пространстве, замкнутая.

Пример 1.8. Пусть $E := (0, +\infty)$ — открытое множество в $\mathbb{R}$. Тогда функции $x \mapsto -\ln x$ и $x \mapsto \frac{1}{x}$, заданные на E, замкнутые, поскольку они обе непрерывны, и обладают барьерным свойством: в данном случае $\partial E \setminus E = \{0\}$ и обе функции стремятся к $+\infty$ при $x \to 0; x > 0$. В то же время функции $x \mapsto \ln x$ и $x \mapsto 0$, заданные на E, являются непрерывными, но не замкнутыми, поскольку не обладают барьерным свойством: первая из них стремится к $-\infty$ при $x \to 0; x > 0$, а вторая стремится к 0.

Утверждение 1.9 (Операции, сохраняющие замкнутость). *Пусть E и G — множества в нормированных пространствах V и W соответственно, и пусть $f : E \to \mathbb{R}$ и $g : G \to \mathbb{R}$ — замкнутые функции.*

(a) *(Умножение на положительный скаляр) Если $c > 0$, то функция $cf : E \to \mathbb{R}$ замкнутая.*

(b) *(Сумма) Если $V = W$, то функция $f + g : E \cap G \to \mathbb{R}$ замкнутая.*

(c) *(Композиция с непрерывным преобразованием) Если $T : V \to W$ — непрерывное преобразование, то композиция $g \circ T : T^{-1}(G) \to \mathbb{R}$ замкнутая.*

(d) *(Поточечный супремум) Пусть I — произвольное (не обязательно конечное и не обязательно счетное) множество, и пусть для каждого $i \in I$ заданы множество E_i в пространстве V и замкнутая функция $f_i : E_i \to \mathbb{R}$. Тогда функция $\sup_{i \in I} f_i : E \to \mathbb{R}$, определенная на множестве $E := \{x \in \cap_{i \in I} E_i : \sup_{i \in I} f_i(x) < +\infty\}$, замкнутая.*

(e) *(Поточечный минимум) Пусть $\phi : E \times G \to \mathbb{R}$ — замкнутая функция (относительно пространства $V \oplus W$). Если множество G компактное, то функция $h : E \to \mathbb{R}$, определенная как $h(x) := \min_{y \in G} \phi(x, y)$, замкнутая. (Минимум здесь всегда достигается согласно теореме Вейерштрасса.)*

Пример 1.10 (Максимум конечного числа функций). Пусть $f_1 : E_1 \to \mathbb{R}, \dots, f_m : E_m \to \mathbb{R}$ — замкнутые функции, заданные на множествах $E_1, \dots, E_m$ в нормированном пространстве. Тогда поточечный максимум $\max_{1 \le i \le m} f_i : \cap_{1 \le i \le m} E_i \to \mathbb{R}$ этих функций является замкнутой функцией как частный случай поточечного супремума (с индексным множеством $I := \{1, \dots, n\}$).

Пример 1.11 (Супремум семейства аффинных функций). Пусть V — евклидово пространство, I — произвольное множество, и пусть для каждого $i \in I$ заданы вектор $a_i \in V$ и скаляр $b_i \in \mathbb{R}$. Пусть $E := \{x \in V : \sup_{i \in I}\{\langle a_i, x\rangle + b_i\} < +\infty\}$. Тогда функция $f : E \to \mathbb{R}$, заданная как $f(x) := \sup_{i \in I}\{\langle a_i, x\rangle + b_i\}$, замкнутая. Это следует из правила поточечного супремума и того, что аффинная функция является замкнутой (как непрерывная функция).

2 Сопряженные функции

Определение 2.1 (Сопряженная функция). Пусть $f : E \to \mathbb{R}$ — функция, заданная на множестве E в евклидовом пространстве V. *Сопряженной функцией* для функции f называется функция $f^* : E_* \to \mathbb{R}$, определенная как

$$f^*(s) := \sup_{x \in E}\{\langle s, x\rangle - f(x)\},$$

где $E_* := \{s \in V : \sup_{x \in E}\{\langle s, x\rangle - f(x)\} < +\infty\}$. Сопряженную функцию также часто называют *сопряженной функцией Фенхеля*. Преобразование $f \mapsto f^*$ называют *преобразованием Фенхеля*, *преобразованием Лежандра* или *преобразованием Фенхеля–Лежандра*.

Из определения сразу же следует, что сопряженная функция f^* является выпуклой и замкнутой функцией как поточечный супремум семейства аффинных функций, независимо от того, является ли при этом исходная функция f выпуклой или замкнутой.

Замечание 2.2. Вообще говоря, сопряженная функция f^* зависит от скалярного произведения, введенного в пространстве V. Таким образом, при работе с сопряженными функциями необходимо четко указывать, какое конкретно используется скалярное произведение. Всюду в дальнейшем, если не оговорено иное, будем считать, что во всех пространствах, с которыми мы работаем, введено стандартное скалярное произведение, и сопряженная функция определяется относительно него. Отметим также, что существует более общий взгляд на сопряженные функции, в котором сопряженная функция определяется на *двойственном пространстве* V^* всевозможных непрерывных линейных функционалов на

V; в этом случае $s \in V^*$ является линейным функционалом, а операция $\langle s, x\rangle$ интерпретируется как вычисление линейного функционала s на аргументе x. При таком определении никаких проблем вышеуказанного характера не возникает (и при этом даже можно работать с пространствами, на которых скалярное произведение ввести невозможно). Тем не менее, для простоты и понятности мы не будем рассматривать это обобщение.

Следующее утверждение является тривиальным следствием из определения сопряженной функции:

Утверждение 2.3 (Неравенство Фенхеля–Юнга)**.** *Пусть $f : E \to \mathbb{R}$ — функция, заданная на множестве E в евклидовом пространстве, и пусть $f^* : E_* \to \mathbb{R}$ — сопряженная функция. Тогда для всех $x \in E$ и всех $s \in E_*$ выполнено*

$$\langle s, x\rangle \leq f^*(s) + f(x).$$

Несмотря на свою простоту, это утверждение имеет многочисленные приложения. Неравенство Фенхеля–Юнга дает систематичный способ построения оценок вида

$$\langle s, x\rangle \leq g(s) + f(x), \tag{2.1}$$

для всех s и x, где f и g — некоторые функции. Сопряженная функция может быть мотивирована следующим вопросом: какие функции f и g нужно выбрать в неравенстве (2.1), чтобы оно было «максимально точным»? Однозначного ответа на такой вопрос нет, поскольку, например, если пара (f, g) дает «максимально точную» оценку, то пара $(f + c, g - c)$ также будет давать «максимально точную» оценку для любого $c \in \mathbb{R}$. Тем не менее, если зафиксировать хотя бы одну из этих функций, скажем, f, то другая функция g, дающая «максимально точную» оценку в неравенстве (2.1) уже определяется однозначно — это в точности сопряженная функция f^* из определения 2.1.

Перейдем к некоторым важным примерам сопряженных функций.

Для первого примера (а также в дальнейшем) нам понадобится понятие индикаторной функции. *Индикаторной функцией множества* E называется функция $\delta_E : E \to \mathbb{R}$, определенная как $\delta_E(x) := 0$. (Таким образом, функция δ_E тождественно равна нулю на множестве E; за пределами E функция δ_E не определена.)

Пример 2.4 (Линейная форма)**.** Пусть V — евклидово пространство, и пусть $f : V \to \mathbb{R}$ — функция $f(x) := \langle a, x\rangle$, где $a \in V$. Поскольку

$$\sup_{x\in V}\{\langle s, x\rangle - \langle a, x\rangle\} = \sup_{x\in V}\langle s - a, x\rangle = \begin{cases} 0, & \text{если } s = a, \\ +\infty, & \text{иначе} \end{cases}$$

для всех $s \in V$, то сопряженная функция f^* — это индикаторная функция $\delta_{\{a\}}$ одноэлементного множества $\{a\}$.

Пример 2.5 (Индикатор одноэлементного множества)**.** Пусть V — евклидово пространство, $a \in V$, и пусть $\delta_{\{a\}} : \{a\} \to \mathbb{R}$ — индикаторная функция одноэлементного множества $\{a\}$. Поскольку для $s \in V$ выполнено

$$\sup_{x\in\{a\}}\{\langle s, x\rangle - \delta_{\{a\}}(x)\} = \langle s, a\rangle,$$

то сопряженная функция $\delta^*_{\{a\}}$ равна линейной форме $x \mapsto \langle a, x\rangle$, рассмотренной в примере 2.4.

Для следующего примера нам понадобится понятие *сопряженной нормы.* Пусть V — конечномерное евклидово пространство, и пусть $\|\|$ — произвольная норма в V (не обязательно индуцированная скалярным произведением). Тогда *сопряженной нормой* для $\|\|$ называется норма $\|\|_*$, определенная как

$$\|s\|_* := \max_{\|v\|=1} |\langle s, v\rangle|.$$

Заметим, что это определение корректное, поскольку максимум достигается по теореме Вейерштрасса в силу компактности единичной сферы.

Пример 2.6 (l^p-норма)**.** Пусть $p \in [1, +\infty]$, и пусть $\|\|_p : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ — l^p-норма. Тогда из неравенства Гельдера следует, что сопряженная норма $(\|\|_p)_*$ — это l^q-норма $\|\|_q$, где $q \in [1, +\infty]$ определяется из равенства $1/p + 1/q = 1$. В частности, l^1-норма является сопряженной к l^∞-норме; в то же время, l^∞-норма является сопряженной к l^1-норме, а l^2 норма является самосопряженной.

Упражнение 2.7 (Основные свойства сопряженной нормы)**.** Пусть V — конечномерное евклидово пространство, и пусть $\|\| : V \to \mathbb{R}$ — норма в V (не обязательно индуцированная скалярным произведением). Покажите, что:

(a) Сопряженная норма $\|\|_*$, действительно, является нормой в V.

(b) (Неравенство Гельдера) Для всех $s, v \in V$ выполнено

$$|\langle s, v\rangle| \le \|s\|_* \|v\|.$$

(c) (Эквивалентные формы записи сопряженной нормы) Для всех $s \in V$ выполнено

$$\|s\|_* = \max_{\|v\|=1} \langle s, v\rangle = \max_{\|v\|\le 1} |\langle s, v\rangle| = \max_{\|v\|\le 1} \langle s, v\rangle.$$

(d) (Сопряжение является инволюцией) $\|\|_{**} = \|\|$.

Пример 2.8 (Норма)**.** Пусть V — конечномерное евклидово пространство, и пусть $\|\|$ — произвольная норма в V (не обязательно индуцированная скалярным произведением). Тогда сопряженная функция $\|\|^*$ равна индикаторной функции замкнутого единичного шара $\overline{B}_{\|\|_*}(0, 1)$ с центром в нуле относительно сопряженной нормы $\|\|_*$:

$$\|\|^* = \delta_{\overline{B}_{\|\|_*}(0,1)}.$$

Доказательство. Пусть $s \in V$. Выполняя замену переменных $x = ty$, где $t \ge 0$, $\|y\| = 1$ (почему эта замена взаимнооднозначная?), получаем

$$\sup_{x \in V}\{\langle s, x\rangle - \|x\|\} = \sup_{t\ge 0; \|y\|=1} t(\langle s, y\rangle - 1).$$

Переписывая супремум как повторный, получаем

$$\sup_{t\ge 0; \|y\|=1} t(\langle s, y\rangle - 1) = \sup_{t\ge 0} \sup_{\|y\|=1} t(\langle s, y\rangle - 1)$$

Поскольку $\sup_{\|y\|=1}\langle s, y\rangle = \|s\|_*$ (см. упражнение 2.7), то

$$\sup_{\|y\|=1} t(\langle s, y\rangle - 1) = t(\|s\|_* - 1)$$

для всех $t \ge 0$, откуда

$$\sup_{t\ge 0} \sup_{\|y\|=1} t(\langle s, y\rangle - 1) = \sup_{t\ge 0} t(\|s\|_* - 1) = \begin{cases} 0, & \text{если } \|s\|_* \le 1, \\ +\infty, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Таким образом, областью определения сопряженной функции $\|\|^*$ является шар $\overline{B}_{\|\|_*}(0, 1)$, и всюду на этом множестве функция $\|\|^*$ равна нулю. Значит, $\|\|^* = \delta_{\overline{B}_{\|\|_*}(0,1)}$. □

Замечание 2.9. Обратите внимание, что сопряженная функция $\|\|^*$ для нормы $\|\|$ не равна сопряженной норме $\|\|_*$. Вместо этого, она равна индикатору $\delta_{\overline{B}_{\|\|_*}(0,1)}$ единичного шара относительно сопряженной нормы. Несмотря на схожие обозначения, функции $\|\|^*$ и $\|\|_*$ являются разными: например, сопряженная норма $\|\|_*$ всегда определена на всем пространстве V (как и любая норма), в то время как сопряженная функция $\|\|^*$ оказывается определенной на собственном подмножестве V.

Пример 2.10 (Индикатор единичного шара)**.** Пусть V— евклидово пространство, и пусть $\|\|$ — произвольная норма в V (не обязательно индуцированная скалярным произведением). Тогда сопряженной функцией для индикатора $\delta_{\overline{B}_{\|\|}(0,1)}$ замкнутого единичного шара с центром в нуле относительно нормы $\|\|$ является сопряженная норма $\|\|_*$:

$$\delta^*_{\overline{B}_{\|\|}(0,1)} = \|\|_*.$$

Доказательство. Для $s \in V$ имеем

$$\sup_{x\in\overline{B}_{\|\|}(0,1)} \langle s, x\rangle = \sup_{\|x\|\le 1} \langle s, x\rangle = \|s\|_*,$$

где последнее равенство следует из упражнения 2.7. □

Пример 2.11 (Логистическая функция)**.** Пусть $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ — функция $f(x) := \ln(1 + e^x)$. Тогда $f^* = \mathrm{Ent}_b$, где $\mathrm{Ent}_b : [0, 1] \to \mathbb{R}$ — *бинарная энтропийная функция*

$$\mathrm{Ent}_b(x) := \begin{cases} x\ln x + (1-x)\ln(1-x), & \text{если } 0 < x < 1,\\ 0, & \text{если } x = 0 \text{ или } x = 1.\end{cases}$$

Доказательство. Пусть $s \in \mathbb{R}$. Вычислим

$$\sup_{x\in\mathbb{R}}\{sx - \ln(1 + e^x)\}. \tag{2.2}$$

Для этого рассмотрим различные случаи.

Пусть $s < 0$. Из монотонности логарифма и того, что $e^x < 1$ при $x < 0$, следует $\ln(1+e^x) < \ln 2$ для всех $x < 0$. Значит, $sx - \ln(1 + e^x) > sx - \ln 2$ для всех $x < 0$. Поскольку $sx \to +\infty$ при $x \to -\infty$, то отсюда следует, что $sx - \ln(1 + e^x) \to +\infty$ при $x \to -\infty; x < 0$. Таким образом, супремум (2.2) равен $+\infty$.

В случае $s > 1$, то аналогичные рассуждения дают неравенство $\ln(1 + e^x) < \ln(e^x + e^x) = \ln 2 + x$ при $x > 0$. Отсюда $sx - \ln(1+e^x) > (s-1)x - \ln 2$ для всех $x > 0$. Устремляя $x \to +\infty; x > 0$, получаем, что супремум (2.2) равен $+\infty$.

Пусть $s = 0$. Поскольку $\ln(1+e^x) \ge 0$ для всех $x \in \mathbb{R}$ и $\ln(1+e^x) \to 0$ при $x \to -\infty$, то в этом случае супремум (2.2) равен нулю.

Если $s = 1$, то из неравенства $\ln(1 + e^x) \ge x$ для всех $x \in \mathbb{R}$, следует, что супремум (2.2) не больше нуля. Но, поскольку $\ln(1 + e^x) = x + \ln(1 + e^{-x})$ для всех $x \in \mathbb{R}$ и $\ln(1 + e^{-x}) \to 0$ при $x \to +\infty$, супремум (2.2) в точности равен нулю.

Наконец, пусть $0 < s < 1$. Несложные вычисления показывают, что в этом случае функция $x \mapsto sx-\ln(1+e^x)$ имеет точку стационарности $\bar{x} := \ln s-\ln(1-s)$, а соответствующее значение функции в $\bar{x}$ равно $s\ln s+(1-s)\ln(1-s)$. Поскольку функция $x \mapsto sx-\ln(1+e^x)$ вогнутая, то найденное значение — это и есть супремум (2.2). □

Пример 2.12 (Бинарная энтропийная функция)**.** Пусть $\mathrm{Ent}_b : [0, 1] \to \mathbb{R}$ — бинарная энтропийная функция, определенная в примере 2.11. Тогда $\mathrm{Ent}_b^* : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ — это логистическая функция

$$\mathrm{Ent}_b^*(s) = \ln(1 + e^s)$$

для всех $s \in \mathbb{R}$.

Доказательство. Пусть $s \in \mathbb{R}$. Вычислим

$$\sup_{0\le x\le 1}\{sx - \mathrm{Ent}_b(x)\}. \tag{2.3}$$

Для этого найдем

$$\sup_{0<x<1}\{sx - \mathrm{Ent}_b(x)\} = \sup_{0<x<1}\{sx - x\ln x - (1-x)\ln(1-x)\}.$$

Поскольку множество $(0,1)$ открытое, а функция $x \mapsto sx - x\ln x - (1-x)\ln(1-x)$, определенная на этом множестве, является вогнутой, то достаточно найти точку стационарности и соответствующее значение этой функции. Дифференцируя, находим, что $\bar{x} := \frac{1}{1+e^{-s}}$ является точкой стационарности с соответствующим значением функции $\ln(1+e^s)$. Таким образом,

$$\sup_{0<x<1} \{sx - \mathrm{Ent}_b(x)\} = \ln(1+e^s).$$

Поскольку функция $sx - \mathrm{Ent}_b(x) = 0$ для $x = 0$ и $sx - \mathrm{Ent}_b(x) = s$ для $x = 1$, то супремум (2.3) равен максимуму из 0, s и $\ln(1+e^s)$. Остается воспользоваться тем, что $\ln(1+e^s) \geq \max\{0, s\}$. $\square$

Как показывают примеры 2.4, 2.5, 2.8, 2.10, 2.11, 2.12, преобразование Фенхеля $f \mapsto f^*$ зачастую является инволюцией: если f^* — сопряженная функция для f, то сопряженная функция f^{**} к функции f^* — это исходная функция f. Следующая крайне важная теорема говорит о том, что это не случайно, и что такой результат является отличительной особенностью класса выпуклых замкнутых функций:

Теорема 2.13 (Теорема Фенхеля–Моро)**.** *Пусть f — функция, заданная на непустом множестве в евклидовом пространстве. Тогда $f = f^{**}$, если и только если f является выпуклой и замкнутой.*

Замечание 2.14. В одну сторону теорема Фенхеля–Моро очевидна: если $f = f^{**}$, то f обязана быть выпуклой и замкнутой, поскольку сопряженная функция к любой функции (в том числе к f^*) является выпуклой и замкнутой вне зависимости от того, обладала ли исходная функция этими свойствами или нет. Нетривиальной частью теоремы Фенхеля–Моро является обратное утверждение: что выпуклость и замкнутость f является не только необходимым условием, но и достаточным.

Утверждение 2.15 (Исчисление сопряженных функций)**.** *Пусть $f : E \to \mathbb{R}$ и $g : G \to \mathbb{R}$ — функции, заданные на множествах E и G в евклидовых пространствах V и W соответственно, и пусть $f^* : E_* \to \mathbb{R}$ и $g^* : G_* \to \mathbb{R}$ — соответствующие сопряженные функции.*

(a) *(Умножение на положительный скаляр) Если $c > 0$, то $(cf)^* : cE_* \to \mathbb{R}$ — это функция $(cf)^*(s) = cf^*(s/c)$ для всех $s \in cE_*$.*

(b) *(Сдвиг аргумента) Пусть $a \in V$, и пусть $h : E - a \to \mathbb{R}$ — функция $h(x) := f(x+a)$. Тогда $h^* : E_* \to \mathbb{R}$ — это функция $h^*(s) = f^*(s) - \langle s, a \rangle$ для всех $s \in E_*$.*

(c) *(Прибавление аффинной функции) Пусть $a \in V$, $b \in \mathbb{R}$, и пусть $h : E \to \mathbb{R}$ — функция $h(x) := f(x) + \langle a, x \rangle + b$. Тогда $h^* : E_* + a \to \mathbb{R}$ — это функция $h^*(s) = f^*(s-a) - b$ для всех $s \in E_* + a$.*

(d) *(Композиция с обратимым линейным преобразованием) Пусть $A : V \to V$ — обратимое линейное преобразование. Тогда $(f \circ A)^* : A^*(E_*) \to \mathbb{R}$ — это функция $(f \circ A)^*(s) = f^*((A^*)^{-1}s)$ для всех $s \in A^*(E_*)$.*

(e) *(Сепарабельная сумма) Пусть $\phi : E \times G \to \mathbb{R}$ — функция $\phi(x,y) := f(x) + g(y)$. Тогда $\phi^* : E_* \times G_* \to \mathbb{R}$ — это функция $\phi_*(s,u) = f^*(s) + g^*(u)$ для всех $s \in E_*$ и всех $u \in G_*$.*

Пример 2.16 (Норма с коэффициентом)**.** Этот пример является обобщением примера 2.8. Пусть V — евклидово пространство, $\|\|$ — произвольная норма в V (не обязательно индуцированная скалярным произведением), и пусть $\lambda > 0$. Тогда $(\lambda\|\|)^* = \delta_{\overline{B}_{\|\|_*}(0,\lambda)}$, т. е. сопряженная функция для функции $x \mapsto \lambda\|x\|$ — это индикатор замкнутого шара радиуса λ с центром в нуле относительно сопряженной нормы $\|\|_*$.

Пример 2.17 (Многомерная логистическая функция)**.** Пусть $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ — функция $f(x) := \sum_{i=1}^n \ln(1+e^{x_i})$. Тогда $f^* : [0,1]^n \to \mathbb{R}$ — функция

$$f^*(s) = \sum_{i=1}^n \mathrm{Ent}_b(x_i)$$

для всех $s \in \mathbb{R}^n$. Это следует из свойства сепарабельной суммы и примера 2.11.

3 Двойственность Фенхеля

Пусть $f : E \to \mathbb{R}$ и $g : G \to \mathbb{R}$ — функции, заданные на множествах E и G в евклидовых пространствах V и W соответственно, и пусть $A : V \to W$ — линейное преобразование. *Задачей Фенхеля–Рокафеллара* называется задача минимизации следующего вида:

$$\min_{x \in E \cap A^{-1}(G)} f(x) + g(Ax), \tag{3.1}$$

где $A^{-1}(G) := \{x \in V : Ax \in G\}$ — прообраз множества G.

Для этой задачи можно построить двойственную задачу Лагранжа с помощью следующего приема, который называется *разделение переменных*. Введем дополнительную переменную $y = Ax$. Тогда задача Фенхеля–Рокафеллара переписывается в виде

$$\min_{x \in E; y \in G} f(x) + g(y) \quad \text{s. t.} \;\; y = Ax.$$

Пусть $L : E \times G \times W \to \mathbb{R}$ — функция Лагранжа для этой задачи:

$$L(x, y, u) := f(x) + g(y) + \langle u, Ax - y \rangle.$$

Найдем двойственную функцию Лагранжа. Для этого зафиксируем $u \in W$ и вычислим

$$\begin{aligned}\inf_{x \in E,\ y \in G} L(x, y, u) &= \inf_{y \in G}\{g(y) - \langle u, y \rangle\} + \inf_{x \in E}\{f(x) + \langle A^* u, x \rangle\} \\ &= -\sup_{y \in G}\{\langle u, y \rangle - g(y)\} - \sup_{x \in E}\{\langle -A^* u, x \rangle - f(x)\}.\end{aligned}$$

Здесь A^* — сопряженный оператор для A. Первое равенство следует из свойства сепарабельности инфимума, а второе из того, что $\inf X = -\sup(-X)$ для любого множества $X \subseteq \mathbb{R}$.

Пусть $f^* : E_* \to \mathbb{R}$ и $g^* : G_* \to \mathbb{R}$ — сопряженные функции для f и g соответственно. Из определения следует, что

$$\sup_{y \in G}\{\langle u, y \rangle - g(y)\} = \begin{cases} g^*(u), & \text{если } u \in G_*, \\ +\infty, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Аналогично,

$$\sup_{x \in E}\{\langle -A^* u, x \rangle - f(x)\} = \begin{cases} f^*(-A^* u), & \text{если } u \in (-A^*)^{-1}(E_*), \\ +\infty, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Таким образом,

$$-\sup_{y \in G}\{\langle u, y \rangle - g(y)\} - \sup_{x \in E}\{\langle -A^* u, x \rangle - f(x)\} = \begin{cases} -g^*(u) - f^*(-A^* u), & \text{если } u \in G_* \cap (-A^*)^{-1}(E_*), \\ -\infty, & \text{иначе.} \end{cases}$$

В результате, двойственная функция Лагранжа ϕ определена на множестве $G_* \cap (-A^*)^{-1}(E_*)$ и равна

$$\phi(u) = -g^*(u) - f^*(-A^* u).$$

Значит, двойственная задача Лагранжа следующая:

$$\max_{u \in G_* \cap (-A^*)^{-1}(E_*)} -g^*(u) - f^*(-A^* u). \tag{3.2}$$

Задача (3.2) называется *двойственной задачей Фенхеля* к задаче (3.1).

Следующая фундаментальная теорема резюмирует вышеописанные рассуждения и предоставляет достаточные условия для сильной двойственности:

Теорема 3.1 (Теорема Фенхеля–Рокафеллара)**.** *Пусть $f : E \to \mathbb{R}$, $g : G \to \mathbb{R}$ — функции, заданные на множествах E и G в евклидовых пространствах V и W соответственно, $f^* : E_* \to \mathbb{R}$, $g^* : G_* \to \mathbb{R}$ — соответствующие сопряженные функции, $A : V \to W$ — линейное преобразование, и пусть $p, d \in [-\infty, +\infty]$ — оптимальные значения в прямой и двойственной задачах*

$$\begin{aligned} p &:= \inf_{x \in E \cap A^{-1}(G)} \{f(x) + g(Ax)\}, \\ d &:= \sup_{u \in G_* \cap (-A^*)^{-1}(E_*)} \{-g^*(u) - f^*(-A^* u)\}. \end{aligned}$$

Тогда имеет место слабая двойственность: $p \geq d$. Если при этом функции f и g выпуклые, и выполнено условие регулярности[1] *$A(\operatorname{rint}(E)) \cap \operatorname{rint}(G) \neq \emptyset$, то имеет место сильная двойственность: $p = d$; если при этом d конечно, то супремум в двойственной задаче достигается. При этом точки $\bar{x} \in E \cap A^{-1}(G)$ и $\bar{u} \in G_* \cap (-A^*)^{-1}(E_*)$ являются оптимальными решениями для прямой и двойственной задач, если и только если $-A^* \bar{u} \in \partial f(\bar{x})$ и $\bar{u} \in \partial g(A\bar{x})$.*

Если перейти от задачи максимизации к эквивалентной ей задаче минимизации минус функции, то двойственную задачу к задаче

$$\min_{x \in E \cap A^{-1}(G)} f(x) + g(Ax)$$

можно записать в форме

$$\min_{u \in G_* \cap (-A^*)^{-1}(E_*)} g^*(u) + f^*(-A^* u).$$

В таком виде двойственность Фенхеля является полностью симметричной: двойственной задачей к задаче Фенхеля–Рокафеллара с параметрами (f, g, A) является задача Фенхеля–Рокафеллара с параметрами $(g^*, f^*, -A^*)$; если при этом функции f и g являются выпуклыми и замкнутыми, то двойственной задачей к двойственной задаче является исходная задача Фенхеля–Рокафеллара, поскольку $f^{**} = f$, $g^{**} = g$ (см. теорему 2.13) и $-((-A)^*)^* = A$ (это простой результат из линейной алгебры, выпуклость и замкнутость f и g здесь ни при чем).

Пример 3.2 (Логистическая регрессия)**.** Построим двойственную задачу для задачи логистической регрессии

$$\inf_{x \in \mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^{m} \ln(1 + e^{\langle a_i, x \rangle}), \tag{3.3}$$

где $a_1, \ldots, a_m \in \mathbb{R}^n$.

Пусть $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ и $g : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ — функции

$$f(x) := 0, \qquad g(y) := \sum_{i=1}^{m} \ln(1 + e^{y_i}),$$

и пусть $A : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ — линейный оператор

$$Ax := (\langle a_i, x \rangle)_{1 \leq i \leq m}.$$

Тогда задачу (3.3) можно переписать в виде задачи Фенхеля–Рокафеллара

$$p := \inf_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) + g(Ax).$$

[1] В этом условии используется понятие относительной внутренности множества, которое определяется следующим образом. Пусть C — множество в вещественном векторном пространстве V. *Относительной внутренностью множества* C, обозначаемой $\operatorname{rint}(C)$, называется стандартная топологическая внутренность множества C относительно метрического пространства $\operatorname{Aff}(C)$ — аффинной оболочки множества C (наименьшее аффинное множество, содержащее C или, эквивалентно, множество всевозможных аффинных комбинаций точек из C). Несложно видеть, что если $\operatorname{int}(C) \neq \emptyset$, то $\operatorname{Aff}(C) = V$ и $\operatorname{rint}(C) = \operatorname{int}(C)$; таким образом, понятие относительной внутренности имеет смысл только для тех множеств C, у которых внутренность пустая. Например, если $C := \{(x, 1) : 0 \leq x \leq 1\}$ — отрезок в пространстве $\mathbb{R}^2$, то $\operatorname{int}(C) = \emptyset$; в то же время, $\operatorname{Aff}(C) = \mathbb{R} \times \{1\}$ — прямая $y = 1$, и, следовательно, $\operatorname{rint}(C) = \{(x, 1) : 0 < x < 1\}$.

Согласно примерам 2.4 и 2.17, соответствующие сопряженные функции следующие:

$$f^* = \delta_{\{0\}}, \qquad g^* : [0,1]^m \to \mathbb{R} \text{ — функция } g^*(u) = \sum_{i=1}^m \mathrm{Ent}_b(u_i).$$

Сопряженный оператор $A^* : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$ в этом случае имеет вид

$$A^* u = \sum_{i=1}^m u_i a_i$$

для всех $u \in \mathbb{R}^m$ (почему?; считаем, что скалярное произведение в $\mathbb{R}^m$ стандартное).

Таким образом, двойственная задача

$$d := \sup_{u \in [0,1]^m} \left\{ -\sum_{i=1}^m \mathrm{Ent}_b(u_i) : \sum_{i=1}^m u_i a_i = 0 \right\}$$

представляет собой минимизацию сепарабельной суммы бинарных энтропийных функций на линейном подпространстве $\{u \in \mathbb{R}^m : \sum_{i=1}^m u_i a_i = 0\}$. Этот пример показывает, что двойственная задача для безусловной задачи может быть условной.

Согласно теореме Фенхеля–Рокафеллара, в данном случае имеет место сильная двойственность: $p = d$ (почему условие $A(\mathrm{rint}(E)) \cap \mathrm{rint}(G) \neq \emptyset$ выполняется?). Более того, множество решений двойственной задачи не пусто (т. е. супремум d достигается). Действительно, поскольку прямая задача допустимая (например, $x = 0$ является допустимой точкой), то $p < +\infty$; аналогично, поскольку двойственная задача допустимая (например, $u = 0$ является допустимой точкой), то $d > -\infty$. Таким образом, оба значения p и d конечные (напомним, что $p = d$).

Прямая задача, в отличие от двойственной, вообще говоря, может не иметь решений (т. е. инфимум p может не достигаться). Например, если $m = n$ и $a_i = e_i$ для всех $1 \le i \le n$, где $e_1, \dots, e_n$ — стандартный базис в $\mathbb{R}^n$, то

$$\sum_{i=1}^n \ln(1 + e^{x_i}) > 0$$

для всех $x \in \mathbb{R}^n$ (поскольку $\ln(1 + e^t) > 0$ для любого $t \in \mathbb{R}$), однако

$$p = \inf_{x \in \mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^n \ln(1 + e^{x_i}) = 0,$$

поскольку $\ln(1 + e^t) \to 0$ при $t \to -\infty$. Тем не менее, используя двойственность, можно указать достаточное условие, при выполнении которого можно гарантировать, что решение у прямой задачи существует. В силу того, что функции f и g являются не только выпуклыми, но и замкнутыми (почему?), прямую задачу можно рассматривать как двойственную задачу к двойственной задаче. Тогда, снова используя теорему Фенхеля–Рокафеллара, заключаем, что инфимум p в прямой задаче достигается, если

$$-A^*(\mathrm{rint}([0,1]^m)) \cap \mathrm{rint}(\{0\}) = -A^*((0,1)^m) \cap \{0\} \neq \emptyset \qquad \Longleftrightarrow \qquad 0 \in \left\{ \sum_{i=1}^m u_i a_i : 0_m \prec u \prec 1_m \right\}.$$

Заметим, что для указанного выше примера это условие нарушается. В то же время, если, скажем, $a_i = -a_j$ для некоторых $1 \le i < j \le m$, то это условие выполняется (почему?).

Пример 3.3. Теперь рассмотрим задачу логистической регрессии с l^1-регуляризатором:

$$p := \inf_{x \in \mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^m \ln(1 + e^{\langle a_i, x \rangle}) + \lambda \|x\|_1,$$

где $a_1, \dots, a_m \in \mathbb{R}^n$, $\lambda > 0$.

В этом случае $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ и $g : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ — это функции

$$f(x) := \lambda \|x\|_1, \qquad g(y) := \sum_{i=1}^m \ln(1 + e^{y_i}),$$

а $A : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ — линейный оператор $Ax := (\langle a_i, x \rangle)_{1 \le i \le m}$. Согласно примерам 2.16, 2.6 и 2.17, соответствующие сопряженные функции

$$f^* = \delta_{\overline{B}_{\|\|_\infty}(0,\lambda)}, \qquad g^* : [0,1]^m \to \mathbb{R} \text{ — функция } g^*(u) = \sum_{i=1}^m \mathrm{Ent}_b(u_i).$$

Значит, двойственная задача имеет вид

$$d := \sup_{u \in [0,1]^m} \left\{ -\sum_{i=1}^m \mathrm{Ent}_b(u_i) : \left\| \sum_{i=1}^m u_i a_i \right\|_\infty \le \lambda \right\}.$$

Используя теорему Фенхеля–Рокафеллара, заключаем, что имеет место сильная двойственность (почему?): $p = d$. Поскольку прямая и двойственная задача допустимы (почему?), то двойственная задача имеет решения, и супремум d достигается. Кроме того, в отличие от предыдущего примера, в данном случае прямая задача всегда имеет решение (но не обязательно единственное). Это следует, в частности, из повторного применения теоремы Фенхеля–Рокафеллара, но на этот раз к двойственной задаче. В данном случае необходимо проверить, что

$$-A^*(\mathrm{rint}([0,1]^m)) \cap \mathrm{rint}(\overline{B}_{\|\|_\infty}(0,\lambda)) = -A^*((0,1)^m) \cap B_{\|\|_\infty}(0,\lambda) \neq \emptyset,$$

где $B_{\|\|_\infty}(0,\lambda) := \{u \in \mathbb{R}^m : \|u\|_\infty < \lambda\}$ — открытый l^∞-шар радиуса λ с центром в нуле, или, эквивалентно (в силу симметричности шара), необходимо проверить, что

$$A^*((0,1)^m) \cap B_{\|\|_\infty}(0,\lambda) \neq \emptyset.$$

Но это, действительно, так поскольку, например, для точки $\bar{u} \in \mathbb{R}^m$ с координатами $\bar{u}_i := \min\{\frac{1}{2}, \frac{\lambda}{m(\|a_i\|_\infty + 1)}\}$ получаем $\bar{u} \in (0,1)^m$ и $\bar{u} \in B_{\|\|_\infty(0,\lambda)}$ в силу того, что

$$\left\| \sum_{i=1}^m \bar{u}_i a_i \right\|_\infty \le \sum_{i=1}^m \bar{u}_i \|a_i\|_\infty < \lambda.$$