Lecture 2 Notes

2021 年 9 月 11 日

这一节主要考虑无约束优化问题，问题描述为 $\min_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x})$，假定 $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 这个映射具有一定的光滑性，首先给出无约束优化问题的最优解所需要满足的一些必要性条件以及用于判别一个点是否是局部最优解的充分性条件，这对于后面设计数值算法的终止准则非常重要，其次给出两种具体的数值求解方法：梯度下降方法以及牛顿方法，最后对于给出的数值方法分析它的收敛性以及收敛速度从而给出数值方法在计算性能上的评估。

1 基本定义与预备知识

1.1 基本定义

定义 1.1. *松弛数列：对于数列* $\{a_k\}_{k=1}^{\infty}$ *若满足* $a_{k+1} \le a_k (k = 1, 2, \cdots)$ *即该数列单调下降.*

- 松弛数列如果存在下界那么它的极限一定是存在的 (单调有界数列一定是收敛的).
- 对于一个无约束优化问题如果函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的下界存在,若某一数值方法迭代产生的点列 $\{\boldsymbol{x}^k\}_{k=1}^{\infty}$ 如果对应的目标函数值序列 $\{f(\boldsymbol{x}^k)\}_{k=1}^{\infty}$ 是松弛序列，此时当 k 趋于无穷时，$f(\boldsymbol{x}^k)$ 会趋于某一常数但是未必会是最优值.

  例如对于一元函数 $f(x) = x^2$ 它的最优解 $x^* = 0$，如果点列 $x_k = 1/k + 1$ 可以看到 $f(x_k)$ 的值是单调下降的但是它并不收敛到函数最优值

泰勒展开 (一点处的近似)：这里用到的符号和 Lecture 1 Notes 中一致，假定集合 $S \subseteq \mathbb{R}^n$
若 $f \in C^1(S)$ 则给定点 $\bar{\boldsymbol{x}} \in S$，$f(\boldsymbol{x})$ 在 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 处的一阶泰勒展开式为

$$f(\boldsymbol{x}) = f(\bar{\boldsymbol{x}}) + \nabla f(\bar{\boldsymbol{x}})^\top (\boldsymbol{x} - \bar{\boldsymbol{x}}) + o(\|\boldsymbol{x} - \bar{\boldsymbol{x}}\|)$$

这里 $o(\|\boldsymbol{x} - \bar{\boldsymbol{x}}\|)$ 表示的是当 $\|\boldsymbol{x} - \bar{\boldsymbol{x}}\| \to 0$ 时的高阶无穷小
若 $f \in C^2(S)$ 则给定点 $\bar{\boldsymbol{x}} \in S$，$f(\boldsymbol{x})$ 在 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 处的二阶泰勒展开式为

$$f(\boldsymbol{x}) = f(\bar{\boldsymbol{x}}) + \nabla f(\bar{\boldsymbol{x}})^\top (\boldsymbol{x} - \bar{\boldsymbol{x}}) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \bar{\boldsymbol{x}})^\top \nabla^2 f(\bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x} - \bar{\boldsymbol{x}}) + o(\|\boldsymbol{x} - \bar{\boldsymbol{x}}\|^2)$$

1.2 梯度的几何意义

定义 1.2. 函数的梯度：对于函数 $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ 在某一点 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 处若偏导数 $\frac{\partial f(\bar{\boldsymbol{x}})}{\partial x_i}$ 均存在，则定义函数 f 在 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 处的梯度为如下的列向量并记为 $\nabla f(\bar{\boldsymbol{x}})$

$$\nabla f(\bar{\boldsymbol{x}})=[\frac{\partial f(\bar{\boldsymbol{x}})}{\partial x_1},\frac{\partial f(\bar{\boldsymbol{x}})}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial f(\bar{\boldsymbol{x}})}{\partial x_n}]^\top$$

下面的论证将说明梯度的几何意义：目标函数在一点的梯度是目标函数在该点处上升最快的方向，此外梯度是等值面的法向 (至于什么是等值面，什么叫法向在后文中会给出解释)

定义 1.3. 函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的 r-下水平集记为 $\mathcal{L}(f,r)$

$$\mathcal{L}(f,r)=\{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n|f(\boldsymbol{x})\le r\}$$

- 若 $f(\boldsymbol{x})$ 连续则下水平集 $\mathcal{L}(f,r)$ 的边界为 $\{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n|f(\boldsymbol{x})=r\}$ 实际上边界是等值曲面.

定义 1.4. 将函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的 r-下水平集记为 $\mathcal{L}(f,r)$，设 $f(\bar{\boldsymbol{x}})=r$，定义 $f(\boldsymbol{x})$ 在 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 处的切向集合如下，记为 $S(f,\bar{\boldsymbol{x}})$

$$S(f,\bar{\boldsymbol{x}})=\left\{\boldsymbol{s}\in\mathbb{R}^n \mid \boldsymbol{s}=\lim_{\substack{\boldsymbol{y}_k\to\bar{\boldsymbol{x}},\\ f(\boldsymbol{y}_k)=r}}\frac{\boldsymbol{y}_k-\bar{\boldsymbol{x}}}{\|\boldsymbol{y}_k-\bar{\boldsymbol{x}}\|}\right\}$$

- 如果 f 是一个连续函数那么这里 $f(\bar{\boldsymbol{x}})=r$ 意义是 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 是边界曲面 $\{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n|f(\boldsymbol{x})=r\}$ 上的一个点，而 $\boldsymbol{s}\in S(f,\bar{\boldsymbol{x}})$ 表示的其实是等值面上 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 点处的一个切向量，而所有切向量构成的集合是 $S(f,\bar{\boldsymbol{x}})$ 几何上 $S(f,\bar{\boldsymbol{x}})$ 表现为 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 处的切平面

下面的引理说明实际上一点处的梯度是该点处的切平面的法向

引理 1.1. 若 $\boldsymbol{s}\in S(f,\bar{\boldsymbol{x}})$，则有 $\langle\nabla f(\bar{\boldsymbol{x}}),\boldsymbol{s}\rangle=0$(这里的 $\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle:=\boldsymbol{x}^\top\boldsymbol{y}$)

证明. 任取 $\boldsymbol{s}\in S(f,\bar{\boldsymbol{x}})$，由切向集合的定义可知：

存在序列 $\{\boldsymbol{y}_k\}_{k=1}^\infty$ 满足 $f(\boldsymbol{y}_k)=f(\bar{\boldsymbol{x}})$，将 f 在 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 处一阶泰勒展开可得

$$f(\bar{\boldsymbol{x}})=f(\boldsymbol{y}_k)=f(\bar{\boldsymbol{x}})+\langle\nabla f(\bar{\boldsymbol{x}}),\boldsymbol{y}_k-\bar{\boldsymbol{x}}\rangle+o(\|\boldsymbol{y}_k-\bar{\boldsymbol{x}}\|)$$

由此可得下式：

$$\langle\nabla f(\bar{\boldsymbol{x}}),\boldsymbol{y}_k-\bar{\boldsymbol{x}}\rangle+o(\|\boldsymbol{y}_k-\bar{\boldsymbol{x}}\|)=0$$

等式两边同时除以 $\|\boldsymbol{y}_k-\bar{\boldsymbol{x}}\|$ 令 k 趋于无穷大即可得到结论 □

- 梯度几何上表现为等值面的法向，因此沿着梯度方向走目标函数值一定会发生改变.
- 一点处的梯度是目标函数在该点处上升最快的方向：对于函数 $f(\boldsymbol{x})$ 假设 $\boldsymbol{x}$ 沿着方向 $\boldsymbol{d}$ 走的步长是 α 则下一点表示为 $\boldsymbol{x}+\alpha\boldsymbol{d}$，对于该点的目标函数值 $f(\boldsymbol{x}+\alpha\boldsymbol{d})$ 利用一阶泰勒展开有：

  $$f(\boldsymbol{x}+\alpha\boldsymbol{d})=f(\boldsymbol{x})+\alpha\cdot\langle\nabla f(\boldsymbol{x}),\boldsymbol{d}\rangle+o(\alpha)$$

  利用柯西施瓦茨不等式即：$|\langle\nabla f(\boldsymbol{x}),\boldsymbol{d}\rangle|\le\|\nabla f(\boldsymbol{x})\|\cdot\|\boldsymbol{d}\|$ 因此可知函数 f 在 $\boldsymbol{x}$ 处 $\nabla f(\boldsymbol{x})$ 是目标函数上升最快的方向，相反 $-\nabla f(\boldsymbol{x})$ 是目标函数下降最快的方向.

2 最优性条件

这一部分将介绍无约束最优化问题的局部最优点所满足的必要性条件，用于判断是否为局部最优解的充分性条件

设无约束最优化问题为 $\min_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x})$

引理 2.1. *一阶必要性条件：若函数 $f : \mathbb{R}^n \rightrightarrows \mathbb{R}$，$\boldsymbol{x}^*$ 为 $f(\boldsymbol{x})$ 的局部最优解，$f(\boldsymbol{x})$ 在 $\boldsymbol{x}^*$ 处可微，则在 $\boldsymbol{x}^*$ 处有 $\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$*

- 一阶必要性条件有时候并不足以判断满足方程 $\nabla f(\boldsymbol{x}) = 0$ 的解 $\boldsymbol{x}$ 是问题的最优解，它也可能是鞍点.

  例如对于如下的一元函数 $f(x)$, 可以看到 $x = 0$ 是满足 $f'(x) = 0$ 的但是因为 sin 函数实际上 0 并不是最优解.

  $$f(x) = \begin{cases} x^4 \sin(\dfrac{1}{x}) & (x \neq 0) \\ 0 & (x = 0) \end{cases}$$

- 实际上从泰勒公式中可以看到想要得到对于 $f(\boldsymbol{x})$ 更好的近似就需要用到更高阶的信息，因此是不是局部最优解是否会有一些高阶的性质？

引理 2.2. *二阶必要性条件：若函数 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$，$\boldsymbol{x}^*$ 为 $f(\boldsymbol{x})$ 的局部最优解且 $f(\boldsymbol{x})$ 在 $\boldsymbol{x}^*$ 处二阶可微 (即 $\nabla f(\boldsymbol{x}^*)$ 以及 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)$ 都存在)，则在 $\boldsymbol{x}^*$ 处有 $\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$ 且 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)$ 半正定 (记为 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*) \succeq \mathbf{0}$)*

- 二阶必要性条件实际上仍然是一个必要性条件而不是充要的本质的原因依旧是近似的程度，实际上满足二阶必要性条件的点依然未必是最优解.

例如一元函数 $f(x) = x^3$ 可以看到在 $x = 0$ 处有 $f'(0) = 0$ 且 $f''(0) = 0$ 但是 $x = 0$ 并不是最优解.

接下来是一些充分性条件，即根据当前点满足的性质来判断它是否是局部最优解

引理 2.3. *设函数 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 若有 $f \in C^2$，在点 $\boldsymbol{x}^*$ 处若满足 $\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = 0$ 且 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)$ 正定 (记为 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*) \succ \mathbf{0}$) 则 $\boldsymbol{x}^*$ 是 $f(\boldsymbol{x})$ 的一个局部严格极小点 (即：存在 $\delta > 0$ 有 $B(\boldsymbol{x}^*, \delta)$ 内任意的 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{x}^*$ 成立 $f(\boldsymbol{x}) > f(\boldsymbol{x}^*)$)*

3 可微函数类

在这一部分将给出一些可微函数的类别，同时给出一些具有好的光滑性的函数的性质，这些内容在设计数值算法，后续分析算法性能比如收敛速度，复杂度估计等等都会用到

定义 3.1. 光滑函数类 $C_L^{1,1}(\mathbb{R}^n)$: 首先 $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ 是光滑的即 $f\in C^1$, 其次梯度映射 $\nabla f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$ 是 Lipshitz 连续的且 Lipshitz 常数为 L 即:

$$\|\nabla f(\boldsymbol{x})-\nabla f(\boldsymbol{y})\|\leq L\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|$$

- 上述定义可以推广得到一般的函数类 $C_L^{k,p}(Q)$，这里 $Q\subseteq\mathbb{R}^n$. 上标 k 表示的是函数的光滑度即：$f\in C^k(Q)$，另外一个上标 p 表示的是函数的 p 阶偏导数是 Lipshitz 连续的且 Lipshitz 常数为 L

  Remark: 上述定义的 ∇f 的 Lipshitz 连续性如果范数取的是无穷范，等价于

  $$|\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_i}-\frac{\partial f(\boldsymbol{y})}{\partial x_i}|\leq L\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|(\forall i=1,2,\cdots,n)$$

  因此实际上梯度映射的 Lipshitz 连续等价于每个偏导数的 Lipschitz 连续性.

引理 3.1. 函数 $f(\boldsymbol{x})$ 有 $f\in C_L^{2,1}(\mathbb{R}^n)$ 等价于 $\|\nabla^2 f(\boldsymbol{x})\|\leq L(\forall\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n)$

引理 3.2. 设函数 $f(\boldsymbol{x})\in C_L^{1,1}(\mathbb{R}^n)$，对于任意的 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n$ 有下式成立:

$$|f(\boldsymbol{y})-f(\boldsymbol{x})-\langle\nabla f(\boldsymbol{x}),\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}\rangle|\leq\frac{L}{2}\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}\|^2$$

引理 3.3. 设函数 $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ 有 $f\in C_L^{2,2}(\mathbb{R}^n)$. 则对于任意的 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n$ 有下式成立:

$$\|\nabla f(\boldsymbol{y})-\nabla f(\boldsymbol{x})-\nabla^2 f(\boldsymbol{x})(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x})\|\leq\frac{L}{2}\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}\|^2$$

引理 3.4. 设函数 $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ 有 $f\in C_L^{2,2}(\mathbb{R}^n)$. 设 $\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}\|=r$ 则有下式成立:

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x})-LrI_n\preceq\nabla^2 f(\boldsymbol{y})\preceq\nabla^2 f(\boldsymbol{x})+LrI_n$$

4 基本的数值算法

对于无约束优化问题 $\min\limits_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x})$ 的数值解法这里主要介绍梯度方法，牛顿方法.

给出一个数值算法首先需要考虑的问题就是它的收敛性即算法能否终止，终止时输出的解是否是我们需要的问题的数值解，其次就是收敛速度通俗意义上说就是算法算的快不快

4.1 算法的收敛速度

假设迭代产生的序列为 $\{\boldsymbol{x}^k\}$ 最优解为 $\boldsymbol{x}^*$ 设 $r_k=\|\boldsymbol{x}^k-\boldsymbol{x}^*\|$，下面定义三种收敛速度

- 次线性收敛：$r_k\leq\frac{c}{\sqrt{k}}$.
- 线性收敛：$r_k\leq c(1-q)^k$.
- 二次收敛：$r_{k+1}\leq cr_k^2$

* 定义收敛速度的方式并不唯一比如还可以利用 $\lim\limits_{k\to\infty}\frac{r_{k+1}}{r_k}$ 定义收敛速度.

4.2 梯度下降方法

梯度下降方法设计的主要原则是在某一点处函数值下降最快的方向是该点的负梯度方向，算法迭代格式如下

Step 1 选取初始点 $\boldsymbol{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ 精度 ϵ，设定 $k=0$.

Step 2 检验迭代点 $\boldsymbol{x}^k$ 是否成立 $\|\nabla f(\boldsymbol{x}^k)\| < \epsilon$ 若成立返回 $\boldsymbol{x}^k$ 作为问题的数值解.

Step 3 更新迭代点 $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k - h_k \nabla f(\boldsymbol{x}^k)$，令 $k=k+1$，转 Step 2.

可以看到每次迭代都是沿着负梯度方向进行的，因为该方向是目标函数值下降最快的方向，算法中对于步长的选择即序列 $\{h_k\}_{k=1}^{\infty}$ 并没有明确给出，接下来对于步长如何选取进行讨论

4.2.1 步长选取原则

- 预先给定比如令 $h_k = 1 (\forall k = 1, 2, \cdots)$ 即预先指定每一次迭代的步长，它的优点在于简单，缺点在于不能保证每次迭代目标函数值会下降即 $\{f(\boldsymbol{x}^k)\}_{k=1}^{\infty}$ 未必是松弛的.

- 每次选取的步长 h_k 满足:$h_k = \arg\min\limits_{h \geq 0} f(\boldsymbol{x}^k - h\nabla f(\boldsymbol{x}^k))$ 即此时的步长一定是当前点 $\boldsymbol{x}^k$ 处能取到的最好的步长，这样选取的话对于每一次迭代来说步长选取都是最优的但是也要注意到这样的选取只能保证每一步迭代是最优的，从全局来看这样的迭代可能最后并不能使得目标函数得到充分下降.

  还有一个问题在于，如果这样确定步长，由一阶必要性条件可知：

  $$\begin{aligned} \nabla f(\boldsymbol{x}^k - h_k \nabla f(\boldsymbol{x}^k))^\top \nabla f(\boldsymbol{x}^k) = 0 \\ \nabla f(\boldsymbol{x}^{k+1})^\top \nabla f(\boldsymbol{x}^k) = 0 \end{aligned}$$

  几何上表现为相邻两步的搜索方向是相互垂直的实际上这样的话迭代次数会增加，此外每次为了确定步长 h_k 需要求解一个一元函数极小化问题，该问题求解的难易程度和 f 也是有关系的可能这个问题也不容易求解.

- 因此在选取步长的操作中，首先选取步长这个过程不能太复杂 (像上述直接求解一个一元函数无约束优化问题得到步长的操作一般是不合适的)，其次选取的步长要能使得目标函数值下降.

  Goldsein-Armijo 原则：

  假设当前迭代点为 $\boldsymbol{x}^k$ 迭代方向为 $\boldsymbol{d}^k$ 选取步长 h_k 得到点 $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + h_k \boldsymbol{d}^k$ 满足下式，其中 $0 < \alpha < \beta < 1$ 是预先选定的常数：

  $$\begin{cases} f(\boldsymbol{x}^{k+1}) \leq f(\boldsymbol{x}^k) + \alpha \langle \nabla f(\boldsymbol{x}^k), \boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}^k \rangle \\ f(\boldsymbol{x}^{k+1}) \geq f(\boldsymbol{x}^k) + \beta \langle \nabla f(\boldsymbol{x}^k), \boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}^k \rangle \end{cases}$$

* 实际上注意到 $f(\boldsymbol{x}^{k+1}) \approx f(\boldsymbol{x}^k) + \langle \nabla f(\boldsymbol{x}^k), \boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}^k \rangle$ 是一阶近似，因此上述选取的步长其实是夹在两条线之间的任意的值.

4.2.2 全局收敛性

在这一部分中对 f 的假设：$1.f \in C_L^{1,1}(\mathbb{R}^n)$ $2.f(\boldsymbol{x})$ 在 $\mathbb{R}^n$ 有下界

- 令 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}-h\nabla f(\boldsymbol{x})$，利用引理3.3，成立

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{y}) &\leq f(\boldsymbol{x})+\langle\nabla f(\boldsymbol{x}),\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}\rangle+\frac{L}{2}\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}\|^2 \\ &= f(\boldsymbol{x})-h(1-\frac{L}{2}h)\|\nabla f(\boldsymbol{x})\|^2 \end{aligned} \tag{1}$$

  注意到右端项是一个关于 h 的一元二次函数，在 $h=1/L$ 时右端项取到最小值，成立下面的不等式：

$$f(\boldsymbol{y}) \leq f(\boldsymbol{x})-\frac{1}{2L}\|\nabla f(\boldsymbol{x})\|^2$$

  上式意义在于在 $\boldsymbol{x}$ 处取步长 $h=1/L$ 则目标函数值至少 (最差的情况) 能下降 $\|\nabla f(\boldsymbol{x})\|^2/(2L)$

- 对于不同的步长选取方法分析每次迭代目标函数值的下降量

  1. 对于 Goldstein-Armijo 准则：

$$f\left(x_k\right)-f\left(x_{k+1}\right) \leq \beta\left\langle\nabla f\left(x_k\right), x_k-x_{k+1}\right\rangle=\beta h_k\left\|\nabla f\left(x_k\right)\right\|^2$$

  利用不等式 (1) 成立 $f\left(x_k\right)-f\left(x_{k+1}\right) \geq h_k\left(1-\frac{h_k}{2}L\right)\left\|\nabla f\left(x_k\right)\right\|^2$ 由此可以推得步长 h_k 的下界 $h_k \geq \frac{2}{L}(1-\beta)$ 再由 Goldstein-Armijo 条件成立下式：

$$f\left(x_k\right)-f\left(x_{k+1}\right) \geq \alpha\left\langle\nabla f\left(x_k\right), x_k-x_{k+1}\right\rangle=\alpha h_k\left\|\nabla f\left(x_k\right)\right\|^2$$

  由此可以推得下述的每一步的下降量估计：

$$f\left(x_k\right)-f\left(x_{k+1}\right) \geq \frac{2}{L}\alpha(1-\beta)\left\|\nabla f\left(x_k\right)\right\|^2$$

  2. 对于每步步长给定情形这里假设 $h_k=1/L(k=1,2,\cdots)$ 或者每一步都取成最好的步长 (即：$h_k=\underset{h\geq 0}{\arg\min} f(\boldsymbol{x}^k-h\nabla f(\boldsymbol{x}^k)))$ 此时都会成立下式：

$$f\left(x_k\right)-f\left(x_{k+1}\right) \geq \frac{1}{2L}\left\|\nabla f\left(x_k\right)\right\|^2$$

  综合上述分析可得：存在常数 ω 使得依上述步长选取准则得到的迭代点 $\boldsymbol{x}^{k+1}$ 满足：

$$f\left(x_k\right)-f\left(x_{k+1}\right) \geq \frac{\omega}{L}\left\|\nabla f\left(x_k\right)\right\|^2$$

  由此可以推得：$\sum\limits_{k=0}^{N}\|\nabla f(\boldsymbol{x}^k)\| \leq \frac{L}{\omega}(f(\boldsymbol{x}^0)-f(\boldsymbol{x}^N)) \leq \frac{L}{\omega}(f(\boldsymbol{x}^0)-f(\boldsymbol{x}^*))$ 由此可知 $\|\nabla f(\boldsymbol{x}^k)\| \to 0$ 当 $k\to\infty$ 因此算法具有全局收敛性 (所谓的全局收敛是指对于初始迭代点 $\boldsymbol{x}^0$ 的选取没有任何的要求，任意选取 $\boldsymbol{x}^0$ 利用梯度方法计算依照上述的准则选取步长最后算法都会收敛).

4.2.3 全局收敛速度

在上一部分中证明了梯度算法具有全局收敛性，这说明使用梯度方法求解一个目标函数是光滑的无约束优化问题，算法总是能够终止输出一个解的但是问题是这种方法的求解速度到底好不好，因此这一节将给出梯度算法的收敛速度的评估.

令 $g_N^* = \min\limits_{1\le k\le N} \|\nabla f(\boldsymbol{x}^k)\|$ 由此成立：

$$(N+1)(g_N^*)^2 \le \sum_{k=0}^{N} \|\nabla f(\boldsymbol{x}^k)\| \le \frac{L}{\omega}(f(\boldsymbol{x}^0) - f(\boldsymbol{x}^*))$$

$$g_N^* \le \frac{1}{\sqrt{N+1}}\left[\frac{1}{\omega}L\left(f\left(\boldsymbol{x}^0\right) - f(\boldsymbol{x}^*)\right)\right]^{1/2}$$

注意到上式可以用来给出复杂度的上界，令右端项小于等于 ϵ(这里的 ϵ 是梯度方法中的给定的常数) 可知：

$$\frac{1}{\sqrt{N+1}}\left[\frac{L}{\omega}\left(f\left(\boldsymbol{x}^0\right) - f(\boldsymbol{x}^*)\right)\right]^{1/2} \le \epsilon$$

$$N+1 \ge \frac{L}{\omega\epsilon^2}(f\left(\boldsymbol{x}^0\right) - f(\boldsymbol{x}^*))$$

注意到上式估计出了在 N 次迭代后有 $g_N^* \le \epsilon$ 当然这是最差的情况也就是说 $\frac{L}{\omega\epsilon^2}(f\left(\boldsymbol{x}^0\right) - f(\boldsymbol{x}^*))$ 是 Lecture 1 中的复杂度上界.

- 上述的推导的梯度方法的复杂度上界与问题的维数无关.
- 对于复杂度上界的估计中可以看到如果梯度方法的 $\epsilon = 10^{-6}$ 那么复杂度上界相当大，也就是说梯度方法的迭代次数在最坏的情况下是非常大的.

4.2.4 局部收敛性与收敛速度

上一部分分析了梯度方法全局的性质，这里将考虑如果有好的初值猜测梯度算法的表现.

以下分析基于下面的基本假设：

1. $f \in C_M^{2,2}(\mathbb{R}^n)$
2. 最优解 $\boldsymbol{x}^*$ 处的海瑟矩阵满足：存在常数 $0 < l \le L < \infty$ 使得：

$$lI_n \preceq \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*) \preceq LI_n$$

3. 初始迭代点 $\boldsymbol{x}^0$ 充分靠近最优解 $\boldsymbol{x}^*$

利用梯度方法的迭代式成立：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^{k+1}-\boldsymbol{x}^* &= \boldsymbol{x}^k - h_k\nabla f(\boldsymbol{x}^k)-\boldsymbol{x}^* \\ &= (\boldsymbol{x}^k-\boldsymbol{x}^*)-h_k(\nabla f(\boldsymbol{x}^k)-\nabla f(\boldsymbol{x}^*)) \\ &= (\boldsymbol{x}^k-\boldsymbol{x}^*)-h_k\int_0^1 \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*+\tau(\boldsymbol{x}^k-\boldsymbol{x}^*))(\boldsymbol{x}^k-\boldsymbol{x}^*)d\tau \quad = (I-h_kG_k)(\boldsymbol{x}^k-\boldsymbol{x}^*)\end{aligned}$$

(这里$G_k = \int_0^1 \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*+\tau(\boldsymbol{x}^k-\boldsymbol{x}^*))(\boldsymbol{x}^k-\boldsymbol{x}^*)d\tau$)

注意到如果成立 $\|I-h_kG_k\|<1$ 那么可知 $\|\boldsymbol{x}^{k+1}-\boldsymbol{x}^*\|<\|\boldsymbol{x}^k-\boldsymbol{x}^*\|$，下面估计 $\|I-h_kG_k\|$

利用引理3.4，结合 G_k 的定义可知：$\left(l-\frac{r_k}{2}M\right)I\preceq G_k\preceq\left(L+\frac{r_k}{2}M\right)I$

由此可以得到矩阵 $I-h_kG_k$ 的范数估计即：

$$\|I-h_kG_k\|\le \max\{1-h_k(l-\frac{r_k}{2}M),h_k\left(L+\frac{r_k}{2}M\right)-1\} \tag{2}$$

注意到：如果把 h_k 看成是变量右端项 $\max\{1-h_k(l-\frac{r_k}{2}M),h_k\left(L+\frac{r_k}{2}M\right)-1\}$ 实际上是关于 h_k 的两个线性函数取 max，因此只要 $r_k<\frac{2l}{M}$ 就有 $\|I-h_kG_k\|<1$(这是因为在 $h_k=0$ 时 max 里的函数值分别为 1，-1 注意到取值为 1 的线性函数是递减的由此可知存在这样的步长 h_k)，因此存在步长序列 $\{h_k\}$ 使得 $\|\boldsymbol{x}^{k+1}-\boldsymbol{x}^*\|<\|\boldsymbol{x}^k-\boldsymbol{x}^*\|$

为了使得 $\|\boldsymbol{x}^{k+1}-\boldsymbol{x}^*\|$ 尽可能的更小，因此可以要尽量使得 $\|I-h_kG_k\|$ 更小，由不等式 (3.4) 可知在 $h_k=2/(l+L)$ 时 $\|I-h_kG_k\|$ 的上界是最小的.

因此在 $h_k=2/(l+L)$ 时成立下面的不等式：

$$\|\boldsymbol{x}^{k+1}-\boldsymbol{x}^*\|\le\frac{L-l}{l+L}\|\boldsymbol{x}^k-\boldsymbol{x}^*\|+\frac{M\|\boldsymbol{x}^k-\boldsymbol{x}^*\|^2}{L+l} \tag{3}$$

* 为了符号简便令 $r_k=\|\boldsymbol{x}^k-\boldsymbol{x}^*\|,k=0,1,2,\cdots$

定理 4.1. 设 $f(\boldsymbol{x})$ 满足这一小节最初的假设，若初始迭代点 $\boldsymbol{x}^0$ 足够靠近局部极小点 $\boldsymbol{x}^*$ 即：

$$r_0:=\|\boldsymbol{x}^0-\boldsymbol{x}^*\|\le\bar r:=\frac{2l}{M}$$

由此若迭代步长 $h_k=2/(l+L)$(即最优步长) 则梯度方法每一步的迭代点 $\boldsymbol{x}^k$ 与局部最优解 $\boldsymbol{x}^*$ 之间满足：

$$\|\boldsymbol{x}^k-\boldsymbol{x}^*\|\le\frac{\bar r r_0}{\bar r-r_0}(\frac{L+l}{L+3l})^k$$

证明. 首先先证明序列 $\{r_k\}$ 有界，利用数学归纳法：

当 $k=0$ 时 $r_0\le\bar r$，假设当 $k\ge0$ 也有 $r_k\le\bar r$ 下面证明 $r_{k+1}\le\bar r$ 从而说明 $\{r_k\}$ 是有界的.

由不等式 (3) 可知：

$$\begin{aligned}r_{k+1}&\le\frac{L-l}{l+L}r_k+\frac{Mr_k^2}{L+l}\\ &\le(\frac{L-l}{l+L}+\frac{2l}{l+L})r_k\\ &\le\bar r=\frac{2l}{M}\end{aligned}$$

至此证明了 $\{r_k\}$ 有界.

下面将给出 r_k 的具体估计式：

引入记号：令 $q=\frac{2l}{L+l}$，$a_k=\frac{M}{L+l}r_k$ 则成立

$$
\begin{aligned}
&a_{k+1}\le(1-q)a_k+a_k^2=a_k(1-q+a_k)=a_k\frac{1-(a_k-q)^2}{1-(a_k-q)}\le\frac{a_k}{1-(a_k-q)}\\
&\frac{1}{a_{k+1}}\ge\frac{1+q}{a_k}-1\\
&\frac{q}{a_{k+1}}-1\ge(1+q)(\frac{q}{a_k}-1)
\end{aligned}
$$

因此经过 k 次放缩后成立：

$$
\frac{q}{a_{k+1}}-1\ge(1+q)^k(\frac{q}{a_0}-1)\quad=(1+q)^k(\frac{\bar{r}}{r_0}-1)
$$

由此成立：$a_k\le\frac{qr_0}{r_0+(1+q)^k(\bar{r}-r_0)}\le\frac{qr_0}{\bar{r}-r_0}\left(\frac{1}{1+q}\right)^k$ 结论得证 □

- 上述不等式给出了每一步的迭代点 $\boldsymbol{x}^k$ 与最优解 $\boldsymbol{x}^*$ 的距离估计当然前提是 $\boldsymbol{x}^0$ 取的足够好，在这种情况下可以看到梯度方法局部收敛速度是线性的

4.3 牛顿方法

4.3.1 牛顿步的导出

求解一个无约束的优化问题 $\min\limits_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x})$ 其中 $f(\boldsymbol{x})$ 是一个光滑函数等价于求解方程组 $\nabla f(\boldsymbol{x})=0$，对于该方程组的求解可以利用一阶近似即：

$$
\nabla f(\boldsymbol{y})\approx\nabla f(\boldsymbol{x})+\nabla^2 f(\boldsymbol{x})(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x})
$$

因此求解 $\nabla f(\boldsymbol{x})=0$ 可以被替换为求解 $\nabla f(\boldsymbol{x})+\nabla^2 f(\boldsymbol{x})(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x})=0$ 因为一阶近似的误差存在，因此需要迭代地求解上述近似的方程组

如果 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x})$ 是可逆的那么近似方程组的解 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}-[\nabla^2 f(\boldsymbol{x})]^{-1}\nabla f(\boldsymbol{x})$

由此可以得到另外一种求解无约束优化问题的方法：

Step 1. 选定初始点 $\boldsymbol{x}^0$ 计算 $\nabla f(\boldsymbol{x}^0)$ 以及 $[\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^0)]^{-1}$，令 $k=0$

Step 2. 检验是否成立 $\|\nabla f(\boldsymbol{x}^k)\|<\epsilon$ 若成立则输出 $\boldsymbol{x}^k$ 作为问题的解.

Step 3. 得到新的迭代点 $\boldsymbol{x}^{k+1}$，$\boldsymbol{x}^{k+1}=\boldsymbol{x}^k-[\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^k)]^{-1}\nabla f(\boldsymbol{x}^k)$，令 $k=k+1$ 转 Step 2.

- 上述计算步骤中要求 $f\in C^2(\mathbb{R}^n)$，此外海瑟矩阵必须是非奇异的否则求逆的操作会出现问题.

- 定义 $-[\nabla^2 f(\boldsymbol{x})]^{-1}\nabla f(\boldsymbol{x})$ 为点 $\boldsymbol{x}$ 处的牛顿步.

另外也可以从二阶近似的角度导出牛顿步即：

$$f(\boldsymbol{y}) \approx f(\boldsymbol{x})+\langle\nabla f(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}\rangle+\frac{1}{2}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x})^{\top} \nabla^{2} f(\boldsymbol{x})(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x})$$

让二阶近似取极小值即可得到 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}-[\nabla^{2} f(\boldsymbol{x})]^{-1} \nabla f(\boldsymbol{x})$ 由此上述求解步骤也可以看成是求解一序列的目标函数为二次的无约束最优化问题.

* 上述算法的主要缺点在于海瑟矩阵不一定总是可逆的，如果迭代中产生的点 $\boldsymbol{x}^{k}$ 而 $\boldsymbol{x}^{k}$ 的海瑟矩阵不可逆，算法将会失效.

* 另外海瑟矩阵逆的计算并不一定容易，计算复杂度是 $O(n^{3})$ 也就是说如果维数 n 较大海瑟矩阵的求逆会占用非常多的时间

4.3.2 局部收敛性

以下分析基于下面的基本假设：

1. $f \in C_{M}^{2,2}(\mathbb{R}^{n})$
2. 最优解 $\boldsymbol{x}^{*}$ 处的海瑟矩阵满足：存在常数 $l>0$ 使得：

   $$\nabla^{2} f(\boldsymbol{x}^{*}) \succeq l I_{n}$$

   即最优解处的海瑟矩阵是正定的.
3. 初始迭代点 $\boldsymbol{x}^{0}$ 充分靠近局部最优解 $\boldsymbol{x}^{*}$.

定理 4.2. *设函数 $f(\boldsymbol{x})$ 满足本小节的假设，初始迭代点 $\boldsymbol{x}^{0}$ 充分靠近局部最优解 $\boldsymbol{x}^{*}$*

$$\left\|\boldsymbol{x}^{0}-\boldsymbol{x}^{*}\right\|<\bar{r}=\frac{2 l}{3 M}$$

则成立对于任意的 k 有 $\left\|\boldsymbol{x}^{k}-\boldsymbol{x}^{*}\right\|<\bar{r}$，且牛顿方法具有局部二次收敛性

$$\left\|\boldsymbol{x}^{k+1}-\boldsymbol{x}^{*}\right\| \leq \frac{M\left\|\boldsymbol{x}^{k}-\boldsymbol{x}^{*}\right\|^{2}}{2\left(l-M\left\|\boldsymbol{x}^{k}-\boldsymbol{x}^{*}\right\|\right)}$$

证明. 由迭代式：$\boldsymbol{x}^{k+1}=\boldsymbol{x}^{k}-\left[\nabla^{2} f\left(\boldsymbol{x}^{k}\right)\right]^{-1} \nabla f\left(\boldsymbol{x}^{k}\right)$ 由此有：

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{x}^{k+1}-\boldsymbol{x}^{*} &=\boldsymbol{x}^{k}-\boldsymbol{x}^{*}-\left[\nabla^{2} f(\boldsymbol{x}^{k})\right]^{-1} \nabla f(\boldsymbol{x}^{k}) \\
&=\boldsymbol{x}^{k}-\boldsymbol{x}^{*}-\left[\nabla^{2} f(\boldsymbol{x}^{k})\right]^{-1} \int_{0}^{1} \nabla f(\boldsymbol{x}^{*}+\tau(\boldsymbol{x}^{k}-\boldsymbol{x}^{*}))(\boldsymbol{x}^{k}-\boldsymbol{x}^{*}) d \tau \\
&=\left[\nabla^{2} f(\boldsymbol{x}^{k})\right]^{-1} G_{k}(\boldsymbol{x}^{k}-\boldsymbol{x}^{*})
\end{aligned}$$

这里 $G_{k}=\int_{0}^{1}\left[\nabla^{2} f\left(\boldsymbol{x}^{k}\right)-\nabla^{2} f\left(\boldsymbol{x}^{*}+\tau\left(\boldsymbol{x}^{k}-\boldsymbol{x}^{*}\right)\right)\right] d \tau$

不妨记 $r_k = \left\|\boldsymbol{x}^k - \boldsymbol{x}^*\right\|$，则有

$$\begin{aligned}
\|G_k\| &= \left\|\int_0^1 \left[\nabla^2 f\left(\boldsymbol{x}^k\right) - \nabla^2 f\left(\boldsymbol{x}^* + \tau\left(\boldsymbol{x}^k - \boldsymbol{x}^*\right)\right)\right] d\tau\right\| \\
&\leq \int_0^1 \left\|\nabla^2 f\left(\boldsymbol{x}^k\right) - \nabla f\left(\boldsymbol{x}^* + \tau\left(\boldsymbol{x}^k - \boldsymbol{x}^*\right)\right)\right\| d\tau \\
&\leq \int_0^1 M(1-\tau) r_k d\tau = \frac{r_k}{2} M
\end{aligned}$$

利用引理3.4可知

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^k) \succeq \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*) - M r_k I \succeq (l - M r_k) I$$

由此可得 $\left\|\left[\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^k)\right]^{-1}\right\| \leq (l - M r_k)^{-1}$，可知 $r_{k+1} \leq \frac{M r_k^2}{2(\ell - M r_k)}$ 故二次收敛性得证.

而 $\left\|\boldsymbol{x}^k - \boldsymbol{x}^*\right\| < \bar{r}$ 利用证明二次收敛性时得到的不等式以及数学归纳法可得 □