{% include head.html %}

无约束优化的梯度方法

本文主要参照Princeton Prof. Yunxin Chen的Slides以及课堂笔记做的总结，聊一下无约束问题的梯度优化方法。既然提到了梯度，那么讨论的目标函数一定是可微的(可以用任意点处的的切平面来近似该点处的函数曲面)。后面有时间还会写一下约束优化问题的梯度方法，以及针对不可微目标函数的次梯度方法。

先来介绍几个基本概念：下降方向，迭代下降算法，以及大名鼎鼎的梯度下降。

- 下降方向 decent direction: 对于函数在x处沿d的方向导数$f'(x;d) := lim_{\tau\to\infty}\frac{f(x+\tau d)-f(x)}{\tau} = \nabla f(x)^\top d$，如果$d$满足方向导数$f'(x;d) = \nabla f(x)^\top d < 0$, 那么称$d$为下降方向。
- 迭代下降算法 iterative descent algorithms： 从点x^0开始，构造序列x^t，使得

  $$f(x^{t+1}) < f(x^t), t = 0, 1, ...$$

  在每次迭代中，寻找在当前 x^t 点的下降方向 d^t , 其中 $\eta_t > 0$ 为步长。
- 梯度下降 Gradient Descent: $x^{t+1} = x^t - \eta_t \nabla f(x^t)$, 下降方向 $d^t = -\nabla f(x^t)$, 即最陡峭的下降方向，由Cauchy-Schwarz不等式

$$\arg\min_{d:||d||_2\le 1} f'(x;d) = \arg\min_{||d||_2\le 1} \nabla f(x)^\top d = -\frac{\nabla f(x)}{||\nabla f(x)||_2}$$

下面由特殊到一般，讨论一下各类无约束优化问题的下降算法及其收敛速度。

二次优化问题 Quadratic minimization problems

$$\min_x f(x) := \frac{1}{2}(x-x^*)^\top Q(x-x^*)$$

其中$Q \succ 0, Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$. $\nabla f(x) = Q(x-x^*)$.

该二次优化问题的解析解很容易看出 $x = x^*$，$f(x^*) = 0$.这里讨论仅是验证梯度下降方法的收敛性。

常数步长及其收敛性

当每次迭代步长为固定值时，应该如何确定每次步长的大小呢?
最优选择为$\eta_t = \eta = \frac{2}{\lambda_1(Q)+\lambda_n(Q)}$, 此时有

$$||x^t - x^*||_2 \le \left(\frac{\lambda_1(Q)-\lambda_n(Q)}{\lambda_1(Q)+\lambda_n(Q)}\right)^t ||x^0 - x^*||_2$$

- 下面的证明会看到，选取步长使得$|1-\eta\lambda_n(Q)| = |1-\eta\lambda_1(Q)|$
- 收敛速度取决于Q的 condition number $\frac{\lambda_1(Q)}{\lambda_n(Q)}$，即$\frac{\max_x \lambda_1(\nabla^2 f(x))}{\min_x \lambda_n(\nabla^2 f(x))}$。
- 该收敛速度称为线性收敛 linear convergence 或几何收敛 geometric convergence. 这是因为log(1/误差)和迭代次数 t 成线性关系，系数是log(1/α), α为$\frac{\lambda_1(Q)-\lambda_n(Q)}{\lambda_1(Q)+\lambda_n(Q)}$。

$$t log\left(\frac{1}{\alpha}\right) = log\left(\frac{||x^0-x^*||_2}{\epsilon}\right)$$

- Analysis: 想比较每次迭代后得到的结果和最优解的距离，先带入第t+1次GD迭代rule，$x^{t+1}-x^* = x^t - x^* - \eta_t \nabla f(x^t) = (\boldsymbol{I}-\eta_t\boldsymbol{Q})(\boldsymbol{x}^t - \boldsymbol{x}^*)$，由Cauchy-Schwarz不等式得到此次距离和上次距离的关系，一个upper bound: $\left\|x^{t+1}-x^*\right\|_2 \le \|\boldsymbol{I}-\eta_t\boldsymbol{Q}\|\,\|\boldsymbol{x}^t-\boldsymbol{x}^*\|_2$. 现在要做的事情就是找到最优的$\eta_t$使得每一步迭代都尽可能使得下一步距离更接近，即最小化谱范数$||\boldsymbol{I}-\eta\boldsymbol{Q}||$。假如已经知道$Q$的特征值$\lambda_1 \ge ... \ge \lambda_n \ge 0$，那么$\boldsymbol{I}-\eta\boldsymbol{Q}$的特征值$1-\eta\lambda_1 \le ... \le 1-\eta\lambda_n$，但如果没有具体例子，无法判断哪一个绝对值最大。但是谱范数找的是绝对值最大的特征值的绝对值，因此可以确定$||\boldsymbol{I}-\eta\boldsymbol{Q}|| = \max\{|1-\eta_t\lambda_1(\boldsymbol{Q})|, |1-\eta_t\lambda_n(\boldsymbol{Q})|\}$，那么由此我们有

$$\eta = \arg\min\max\{|1-\eta_t\lambda_1(\boldsymbol{Q})|, |1-\eta_t\lambda_n(\boldsymbol{Q})|\} = \frac{2}{\lambda_1(Q)+\lambda_n(Q)}$$

此时$||I-\eta Q|| = 1 - \frac{2\lambda_n(\boldsymbol{Q})}{\lambda_1(\boldsymbol{Q})+\lambda_n(\boldsymbol{Q})} = \frac{\lambda_1(\boldsymbol{Q})-\lambda_n(\boldsymbol{Q})}{\lambda_1(\boldsymbol{Q})+\lambda_n(\boldsymbol{Q})}$

最后解释η的最优解如何求到的：根据$|1-\eta_t\lambda_1(\boldsymbol{Q})|,|1-\eta_t\lambda_n(\boldsymbol{Q})|$的大小关系对$\eta$的取值和目标函数的取值进行分类讨论，

- 最小的特征值大于等于0： $0 \le 1-\eta\lambda_1 \Rightarrow \eta \le \frac{1}{\lambda_1}$，此时$\|\boldsymbol{I}-\eta\boldsymbol{Q}\| = |1-\eta_t\lambda_n(\boldsymbol{Q})| \geqslant \frac{\lambda_1-\lambda_n}{\lambda_1}$
- 最大的特征值小于等于0： $1-\lambda_n \le 0 \Rightarrow \eta \geqslant \frac{1}{\lambda_n}$，此时$\|\boldsymbol{I}-\eta\boldsymbol{Q}\| = |1-\eta_t\lambda_1(\boldsymbol{Q})| \geqslant \frac{\lambda_1-\lambda_n}{\lambda_1}$
- 最小的小于0,最大的大于0： $1-\eta\lambda_1<0,\ 1-\eta\lambda_n>0 \Rightarrow \frac{1}{\lambda_1} \leqslant \eta \leqslant \frac{1}{\lambda_n}$. 该情况又分为两种: $\frac{1}{\lambda_1}<\eta \leqslant \frac{2}{\lambda_1+\lambda_n}$, 和 $\frac{2}{\lambda_1+\lambda_n} \leqslant \eta < \frac{1}{\lambda_n}$，最终可得$\eta=\frac{2}{\lambda_1+\lambda_n}$时 $\|\boldsymbol{I}-\eta\boldsymbol{Q}\|$取到最小 $\frac{\lambda_1(\boldsymbol{Q})-\lambda_n(\boldsymbol{Q})}{\lambda_1(\boldsymbol{Q})+\lambda_n(\boldsymbol{Q})}$。这也是三种情况中的最小情况。

一种非固定的步长取值：Exact Line Search

上面讨论的是固定迭代步长 $\eta_t=\eta=\frac{2}{\lambda_1(Q)+\lambda_n(Q)}$ 的情况，但需要已知Q的谱特性。另一个更加practical的策略是 exact line search rule

$$\eta_t=\arg\min_{\eta\geq 0} f\left(\boldsymbol{x}^t-\eta\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right)$$

目的是每一步迭代中，都选使得目标函数最小的那个步长。
该方法的收敛速度为

$$f\left(\boldsymbol{x}^t\right)-f\left(\boldsymbol{x}^*\right) \leq\left(\frac{\lambda_1(\boldsymbol{Q})-\lambda_n(\boldsymbol{Q})}{\lambda_1(\boldsymbol{Q})+\lambda_n(\boldsymbol{Q})}\right)^{2t}\left(f\left(\boldsymbol{x}^0\right)-f\left(\boldsymbol{x}^*\right)\right)$$

- 与常数步长的收敛分析不同，此处用目标值说明收敛速度。
- 收敛速度为线性收敛 linear convergence，和常数步长的情况相似。
- Analysis: 为方便，设 $\boldsymbol{g}^t=\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)=\boldsymbol{Q}\left(\boldsymbol{x}^t-\boldsymbol{x}^*\right)$，根据 exact line search rule 可以得到 $\eta_t=\frac{\boldsymbol{g}^{t\top}\boldsymbol{g}^t}{\boldsymbol{g}^{t\top}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{g}^t}$. 代入第 t+1 次的结果，找出与第 t 次的关系：

$$\begin{aligned}
f\left(\boldsymbol{x}^{t+1}\right) & =\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{x}^t-\eta_t\boldsymbol{g}^t-\boldsymbol{x}^*\right)^{\top}\boldsymbol{Q}\left(\boldsymbol{x}^t-\eta_t\boldsymbol{g}^t-\boldsymbol{x}^*\right) \\
& =\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{x}^t-\boldsymbol{x}^*\right)^{\top}\boldsymbol{Q}\left(\boldsymbol{x}^t-\boldsymbol{x}^*\right)-\eta_t\left\|\boldsymbol{g}^t\right\|_2^2+\frac{\eta_t^2}{2}\boldsymbol{g}^{t\top}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{g}^t \\
& =\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{x}^t-\boldsymbol{x}^*\right)^{\top}\boldsymbol{Q}\left(\boldsymbol{x}^t-\boldsymbol{x}^*\right)-\frac{\left\|\boldsymbol{g}^t\right\|_2^4}{2\boldsymbol{g}^{t\top}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{g}^t} \\
& =\left(1-\frac{\left\|\boldsymbol{g}^t\right\|_2^4}{\left(\boldsymbol{g}^{t\top}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{g}^t\right)\left(\boldsymbol{g}^{t\top}\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{g}^t\right)}\right) f\left(\boldsymbol{x}^t\right)
\end{aligned}$$

最后一个等号用到了 $f\left(x^t\right)=\frac{1}{2}\left(x^t-x^*\right)^{\top}Q\left(x^t-x^*\right)=\frac{1}{2}g^{t\top}Q^{-1}g^t$.

由 Kantorovich 不等式 （下降方法收敛性研究的核心）$\frac{\|\boldsymbol{y}\|_2^4}{\left(\boldsymbol{y}^{\top}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{y}\right)\left(\boldsymbol{y}^{\top}\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{y}\right)} \geq \frac{4\lambda_1(\boldsymbol{Q})\lambda_n(\boldsymbol{Q})}{\left(\lambda_1(\boldsymbol{Q})+\lambda_n(\boldsymbol{Q})\right)^2}$，代入得到

$$
\begin{aligned}
f\left(\boldsymbol{x}^{t+1}\right) &\leq\left(1-\frac{4 \lambda_{1}(\boldsymbol{Q}) \lambda_{n}(\boldsymbol{Q})}{\left(\lambda_{1}(\boldsymbol{Q})+\lambda_{n}(\boldsymbol{Q})\right)^{2}}\right) f\left(\boldsymbol{x}^{t}\right) \\
&=\left(\frac{\lambda_{1}(\boldsymbol{Q})-\lambda_{n}(\boldsymbol{Q})}{\lambda_{1}(\boldsymbol{Q})+\lambda_{n}(\boldsymbol{Q})}\right)^{2} f\left(\boldsymbol{x}^{t}\right)
\end{aligned}
$$

由于已知 $f\left(\boldsymbol{x}^{*}\right)=\min_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x})=0$，收敛性得证。

强凸且光滑的问题 Strongly Convex and Smooth Problems

上面讨论了二次优化问题在梯度下降的情况，下面讨论稍一般的问题，目标函数为强凸且光滑的情况。强凸和光滑的定义及其等价定义后面有时间会写！！！！！！。对于一个二次可微 twice-differenctiable 的函数，μ-strongly convex 且 L-smooth 如果满足

$$
\mathbf{0} \preceq \mu \boldsymbol{I} \preceq \nabla^{2} f(\boldsymbol{x}) \preceq L \boldsymbol{I}, \quad \forall \boldsymbol{x}
$$

常数步长的情况

Theorem 1 (GD for strongly convex and smooth functions, constant stepsize)
f is μ-strongly convex and L-smooth. If $\eta_{t} \equiv \eta=\frac{2}{\mu+L}$, then

$$
\left\|x^{t}-x^{*}\right\|_{2} \leq\left(\frac{\kappa-1}{\kappa+1}\right)^{t}\left\|x^{0}-x^{*}\right\|_{2}
$$

where $\kappa:=L / \mu$ is condition number; x^{*} is minimizer.

- 与二次函数情况的对比，步长 $\eta=\frac{2}{\mu+L}$ V.S. $\eta=\frac{2}{\lambda_{1}(\boldsymbol{Q})+\lambda_{n}(\boldsymbol{Q})}$; 收缩比例 $\frac{\kappa-1}{\kappa+1}$ V.S. $\frac{\lambda_{1}(Q)-\lambda_{n}(Q)}{\lambda_{1}(Q)+\lambda_{n}(Q)}$
- Dimension-free: 迭代复杂度为 $O\left(\frac{\log \frac{1}{\varepsilon}}{\log \frac{\kappa+1}{\kappa-1}}\right)$，与问题规模$n$无关，如果 κ 不受 n 的影响. 但是一般情况下，每次迭代的代价会受n影响，这样的话总的计算复杂度还是增加的。
- 依照smoothness的定义，以及 $\nabla f(x^*)=0$, 可得

$$
f\left(\boldsymbol{x}^{t}\right)-f\left(\boldsymbol{x}^{*}\right) \leq \frac{L}{2}\left(\frac{\kappa-1}{\kappa+1}\right)^{2 t}\left\|\boldsymbol{x}^{0}-\boldsymbol{x}^{*}\right\|_{2}^{2}
$$

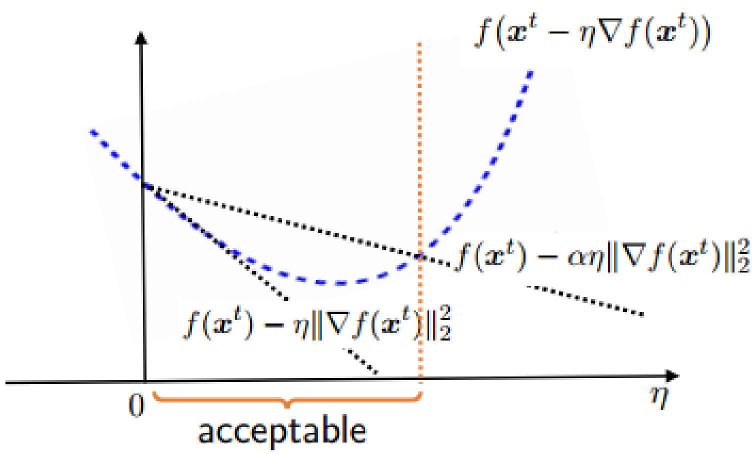
- Analysis: 设 $g(\tau)=f(x_\tau)=f(x^t+\tau(x^*-x^t))$, 则 $\int_0^1 g''(\tau)d\tau=g'(1)-g'(0)$. 其中$\{x_\tau\}_{0\leq\tau\leq 1}$ 可看成是 x^t 到 x^* 间的线段.
  $\nabla f\left(\boldsymbol{x}^{t}\right)=\nabla f\left(\boldsymbol{x}^{t}\right)-\nabla f\left(\boldsymbol{x}^{*}\right)=g'(1)-g'(0)=\left(\int_{0}^{1} \nabla^{2} f\left(\boldsymbol{x}_{\tau}\right) \mathrm{d} \tau\right)\left(\boldsymbol{x}^{t}-\boldsymbol{x}^{*}\right)$

$$
\begin{aligned}
\left\|\boldsymbol{x}^{t+1}-\boldsymbol{x}^*\right\|_2 &= \left\|\boldsymbol{x}^t-\boldsymbol{x}^*-\eta\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right\|_2 \\
&= \left\|\left(\boldsymbol{I}-\eta\int_0^1 \nabla^2 f\left(\boldsymbol{x}_\tau\right)\mathrm{d}\tau\right)\left(\boldsymbol{x}^t-\boldsymbol{x}^*\right)\right\| \\
&\leq \sup_{0\leq\tau\leq 1}\left\|\boldsymbol{I}-\eta\nabla^2 f\left(\boldsymbol{x}_\tau\right)\right\|\left\|\boldsymbol{x}^t-\boldsymbol{x}^*\right\|_2 \\
&\leq \frac{L-\mu}{L+\mu}\left\|\boldsymbol{x}^t-\boldsymbol{x}^*\right\|_2
\end{aligned}
$$

Line Search 的情况：Backtracking Line Search

比起常数步长，实际中更常用 line search，现实中大多数用到的是 inexact line search，一个简单有效的方法是 backtracking line search. 不管哪一种步长选择，都是想用最小的代价尽可能快的找到最优点。

Backingtracking line search 的思想是：在搜索方向上，先设置一个初始步长，如果过大则缩减步长，直到合适为止。这就涉及到如何判断步长是否合适、如果缩短步长两个问题。



确保充分下降的 Armijo condition: 存在 $0<\alpha<1$ 使得

$$
f\left(\boldsymbol{x}^t-\eta\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right)<f\left(\boldsymbol{x}^t\right)-\alpha\eta\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right\|_2^2
$$

（可以由泰勒公式展开得到）

但是！实际中我们选择的 $0<\alpha<\frac{1}{2}$，至于原因，是希望算法的收敛速度更快（下降速度更快），有人说和超线性收敛有关，具体参考《最优化理论与方法》（袁亚湘），我还没check。缩减的方法采用反复乘以一个小于1的系数 β .

Algorithm 2.2 Backtracking line search for GD

Initialize $\eta=1$, $0<\alpha\leq 1/2$, $0<\beta<1$
while $f(\boldsymbol{x}^t-\eta\nabla f(\boldsymbol{x}^t))>f(\boldsymbol{x}^t)-\alpha\eta\|\nabla f(\boldsymbol{x}^t)\|_2^2$ **do**
    $\eta\leftarrow\beta\eta$

当初始步长足够大时，根据上述算法得到的步长 η 具有 lower bound, 找到 η 一个取值，使得当 $\eta=\tilde{\eta}_t$ 时，算法不会使 η 减小，根据算法中步长的缩减规则，我们有 $\eta_t\geq\beta\tilde{\eta}_t$.

这个值我们取目标迭代函数值的上限 $f\left(\boldsymbol{x}^t\right)-\alpha\eta\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right\|_2^2$ 与二阶近似的上限 $f\left(\boldsymbol{x}^t\right)-\eta\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right\|_2^2+\frac{L\eta^2}{2}\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right\|_2^2$ 相等的根。
这里二阶近似的上限用到了目标函数的光滑性 L-smoothness. 这是因为对于光滑函数，当 $\eta=\tilde{\eta}_t$ 时，
$f\left(\boldsymbol{x}^t-\eta\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right)\leq f\left(\boldsymbol{x}^t\right)-\eta\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right\|_2^2+\frac{L\eta^2}{2}\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right\|_2^2$.

$$\begin{aligned}
& f\left(\boldsymbol{x}^t\right)-\alpha\eta\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right\|_2^2=f\left(\boldsymbol{x}^t\right)-\eta\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right\|_2^2+\frac{L\eta^2}{2}\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right\|_2^2 \\
\Longrightarrow \quad & \eta_t \geq \frac{2(1-\alpha)\beta}{L}=\tilde{\eta}_t
\end{aligned}$$

实际中， backtracking line search 通常可以对局部 Lipschitz 常数 (local Lipschitz constant) $\|\nabla f(x)-\nabla f(y)\| \leq L\|x-y\|$ 给出良好估计。

$$L \geq \frac{2(1-\alpha)\beta}{\eta_t}$$

Theorem 2 (GD for strongly convex and smooth functions, backtracking line search)
f is μ-strongly convex and L-smooth. With backtracking line search,

$$f\left(\boldsymbol{x}^t\right)-f\left(\boldsymbol{x}^*\right)\leq\left(1-\min\left\{2\mu\alpha,\frac{2\beta\alpha\mu}{L}\right\}\right)^t\left(f\left(\boldsymbol{x}^0\right)-f\left(\boldsymbol{x}^*\right)\right)$$

where x^* is minimizer.
和 constant stepsize 不同的是用目标函数值来表达收敛性，但同样是线性收敛 linear convergence.

线性收敛一定要求强凸吗?

上面我们讨论了在目标函数μ-strongly convex 和 L-smooth 的情况下具有线性收敛性，那可否在不满足强凸的情况下也具备线性收敛呢？其实，强凸性可以被 relaxed 成

- 局部强凸性 local strong convexity
- 正则条件 regularity condition
- P-L 条件 Polyak-Lojasiewicz condition

局部强凸 Local strong convexity

这里举一个耳熟能详(并不)的栗子——逻辑回归 logistic regression.

逻辑回归 Logistic Regression

给定 N 个独立样本，$\{x_i,g_i\}_{i=1}^N$, 其中 $x_i\in\mathbb{R}^p$ 是已知的设计向量，$g_i\in\{1,...,K\}$ 是 K 分类的结果，我们希望学习到给定设计向量判断分类的方法。这部分是背景，参考了 *The Elements of Statistic Learning*, Hastie et. al.

逻辑回归的思想是根据样本特征的线性函数来建模，得到属于各类别的后验概率，同时保证概率和为1、且每一种概率大小都在 $[0,1]$ 范围内。我们让线性回归 $a^\top x+b_0$ （连续、无界）的值恰好为后验概率的 log 函数

$$
\begin{aligned}
\log \operatorname{Pr}(G=1 \mid X=x) &= \beta_{10}+\beta_1^T x \\
\log \operatorname{Pr}(G=2 \mid X=x) &= \beta_{20}+\beta_2^T x \\
&\vdots \\
\log \operatorname{Pr}(G=K-1 \mid X=x) &= \beta_{(K-1)0}+\beta_{K-1}^T x \\
\log \operatorname{Pr}(G=K \mid X=x) &= \beta_{(K)0}+\beta_K^T x \\
\sum_{k=1}^K \operatorname{Pr}(G=k \mid X=x) &= 1
\end{aligned}
$$

上面可以看成是 K 组未知数 $\{\beta_{k0},\beta_k\}$, $K+1$ 个方程，把最后一个式子看成约束条件，就可以约去一个表达式（一旦其中 $K-1$ 组未知数确定，由约束条件亦可确定最后一组）。我们假设约去了第K个表达式，就得到

$$
\begin{aligned}
\log \frac{\operatorname{Pr}(G=1 \mid X=x)}{\operatorname{Pr}(G=K \mid X=x)} &= \beta_{10}+\beta_1^T x \\
\log \frac{\operatorname{Pr}(G=2 \mid X=x)}{\operatorname{Pr}(G=K \mid X=x)} &= \beta_{20}+\beta_2^T x \\
&\vdots \\
\log \frac{\operatorname{Pr}(G=K-1 \mid X=x)}{\operatorname{Pr}(G=K \mid X=x)} &= \beta_{(K-1)0}+\beta_{K-1}^T x
\end{aligned}
$$

上面 $K-1$ 个式子暗含了约束条件：概率和为1.
求个exp加起来加个1除一除乘一乘就可以得到

$$
\begin{aligned}
\operatorname{Pr}(G=k \mid X=x) &= \frac{\exp\left(\beta_{k0}+\beta_k^T x\right)}{1+\sum_{\ell=1}^{K-1} \exp\left(\beta_{\ell 0}+\beta_\ell^T x\right)}, k=1,\ldots,K-1 \\
\operatorname{Pr}(G=K \mid X=x) &= \frac{1}{1+\sum_{\ell=1}^{K-1} \exp\left(\beta_{\ell 0}+\beta_\ell^T x\right)}
\end{aligned}
$$

上面的式子明显和为1.
我们将参数集合表示为 $\theta=\left\{\beta_{10},\beta_1^T,\ldots,\beta_{(K-1)0},\beta_{K-1}^T\right\}$， 为了强调对参数集的 dependence,将概率表示为 $\operatorname{Pr}(G=k \mid X=x)=p_k(x;\theta)$.

当 $K=2$ 时，上述式子只有一个，是最简单但是非常常用的情况。

现在已经有了模型，接下来要做的就是，利用观察到的样本们去学习 fit 它！也就是根据样本、目标函数 fit 参数集合 θ. 如何习得参数们呢？逻辑回归通常采用的是最大似然（参数估计的一种方法，基础概率还要补一补，何况是测度blabla...后面有时间会写的）去fit——用给定 X 时 G 的条件似然。由于 $\Pr(G|X)$ 完全确定了条件分布，多项分布 multinomial distribution 是合适的（应该是well defined的意思）。
现在假设有 N 个独立样本，$\{x_i, g_i\}_{i=1}^N$, 其中 x_i 是已知的设计向量，g_i 是 K 分类的结果。根据前面的分析，设这些样本服从前面的条件分布：$\{p_k(x;\theta)\}_{k=1}^K$. 我们希望：找到一组参数 θ 使得观察到的样本出现的概率最大。
这个概率的表达式为

$$p\left(x_1, \ldots, x_N; \theta\right)=\prod_{i=1}^N p_{g_i}\left(x_i; \theta\right)$$

最大化这个概率等价于最大化这个概率的log函数，所求的变量自然是参数集合 θ. 因此可以写成 θ 的函数

$$\ell(\theta)=\sum_{i=1}^N \log p_{g_i}\left(x_i; \theta\right)$$

其中 $p_k\left(x_i; \theta\right)=\Pr\left(G=k | X=x_i; \theta\right)$.

下面我们详细讨论一下二分类的情况，这种情况下算法会大大简化。将两种类别 g_i 编码为取值 $0,1$ 的响应 y_i , 当 $g_i=1$ 时，取 $y_i=1$，当 $g_i=2$ 时取 $y_i=0$. 并让 $p_1(x;\theta)=p(x;\theta)$，则 $p_2(x;\theta)=1-p(x;\theta)$. 那么，对于某个样本而言，就实现了log表达式的统一：

- 若样本类别为 $y_i=1$，则 $\log p_{y_i}(x;\theta)=\log p(x;\beta)=y_i \log p(x;\beta)+(1-y_i)\log(1-p(x;\beta))$,
- 若样本类别为 $y_i=0$，则 $\log p_{y_i}(x;\theta)=\log(1-p(x;\beta))=y_i \log p(x;\beta)+(1-y_i)\log(1-p(x;\beta))$.

此时 log-likelihood 可写成关于参数 β 的函数

$$\begin{aligned}
\ell(\beta) &=\sum_{i=1}^N\left\{y_i \log p\left(x_i; \beta\right)+\left(1-y_i\right) \log \left(1-p\left(x_i; \beta\right)\right)\right\} \\
&=\sum_{i=1}^N\left\{y_i \log \frac{p\left(x_i; \beta\right)}{1-p\left(x_i; \beta\right)}+\log \left(1-p\left(x_i; \beta\right)\right)\right\} \\
&=\sum_{i=1}^N\left\{y_i \beta^T x_i-\log \left(1+e^{\beta^T x_i}\right)\right\}
\end{aligned}$$

最后一个式子就是代入前面条件概率的表达式得到的，这里 $\beta=\{\beta_{10}, \beta_1\}$，并假设输入向量 $x_i \in \{1 \times \mathbb{R}^p\}$ 中已经包含了对应之前 β_{10} 的常数项1.

到这里整个逻辑回归的数学模型就已经建立了，下面就是优化的部分了（其实优化部分才是本文重点）。之前看了一些关于逻辑回归的博客，甚至还做过project，但感觉理解不够透彻，有些原理在一些博客被忽略掉了，自己作为小白就会比较难受，现在根据《统计学习要素》中的讲解整理一下，思路就清晰许多。实际上关于逻辑回归有很多角度的解释，但自己感觉这个版本最清晰也最根本，有理有据。以后有新的视角也会补充进来。

为了最大化 log-likelihood，我们令其导数为0，

$$\frac{\partial \ell(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}}=\sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{x}_{i}\left(y_{i}-p\left(\boldsymbol{x}_{i} ; \boldsymbol{\beta}\right)\right)=\mathbf{0}$$

这实际上是 $p+1$ 个关于 $\boldsymbol{\beta}$ 的非线性方程。由于 $\boldsymbol{x}_i$ 的第一项为1，那么第一个非线性方程要求 $\sum_{i=1}^{N} y_{i}=\sum_{i=1}^{N} p\left(\boldsymbol{x}_{i} ; \boldsymbol{\beta}\right)$，即观察到分类为1的样本数目与期望的分类为1的数目一致（分类为0的样本数目因此也是一致的）。

进一步求其 Hessian 矩阵，

$$\frac{\partial^{2} \ell(\beta)}{\partial \beta \partial \beta^{T}}=-\sum_{i=1}^{N} x_{i} x_{i}^{T} p\left(x_{i} ; \beta\right)\left(1-p\left(x_{i} ; \beta\right)\right)$$

看到 Hessian 负定没关系，因为是最大化似然函数，所以加个负号变成minimize，Hessian 自然也是正定的。但这个只是一般情况！当 $x \rightarrow \infty$ 时，$p\left(x_{i} ; \beta\right)\left(1-p\left(x_{i} ; \beta\right)\right)=\frac{\exp\left(\beta^{\top} x_{i}\right)}{\left(1+\exp\left(\beta^{\top} x_{i}\right)\right)^{2}} \rightarrow 0$, 因此目标函数竟然是 0-strongly convex的，想不到吧。现在终于回到正题，目标函数难道不具备线性收敛性吗?

常数步长的线性收敛性

Theorem 3 (GD for locally strongly convex and smooth functions, constant stepsize)
f is locally μ-strongly convex and L-smooth such that

$$\mu \boldsymbol{I} \preceq \nabla^{2} f(\boldsymbol{x}) \preceq L \boldsymbol{I}, \quad \forall \boldsymbol{x} \in \mathcal{B}_{0}$$

where $\mathcal{B}_{0}:=\left\{\boldsymbol{x}:\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^{*}\right\|_{2} \leq\left\|\boldsymbol{x}^{0}-\boldsymbol{x}^{*}\right\|_{2}\right\}$. Then **Theorem 1** continues to hold, i.e., if $\eta_{t} \equiv \eta=\frac{2}{\mu+L}$, then

$$\left\|x^{t}-x^{*}\right\|_{2} \leq\left(\frac{\kappa-1}{\kappa+1}\right)^{t}\left\|x^{0}-x^{*}\right\|_{2}$$

where $\kappa:=L / \mu$ is condition number; x^{*} is minimizer.

- 对任意 $x^{t} \in \mathcal{B}_{0}$， 可得 $\left\|x^{t+1}-x^{*}\right\|_{2} \leq \frac{\kappa-1}{\kappa+1}\left\|x^{t}-x^{*}\right\|_{2}$，则有 $\boldsymbol{x}^{t+1} \in \mathcal{B}_{0}$，因此上述上限将在后来的迭代中继续成立。
- 回到逻辑回归的例子，local strong convexity 的参数表达式为

$$\inf_{x:\|x-x^*\|_2\le\|x^0-x^*\|_2}\lambda_{\min}\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{\exp\left(\beta^\top x_i\right)}{\left(1+\exp\left(\beta^\top x_i\right)\right)^2}\boldsymbol{a}_i\boldsymbol{a}_i^\top\right)$$

该表达式常常与0有严格距离，因此使得线性收敛性成立。

正则条件 Regularity condition

另一个可以替代强凸和光滑要求的是正则条件。

$$\langle\nabla f(\boldsymbol{x}),\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*\rangle\ge\frac{\mu}{2}\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*\|_2^2+\frac{1}{2L}\|\nabla f(\boldsymbol{x})\|_2^2,\quad\forall\boldsymbol{x}$$

它是这么得到的：

- L-smoothness: $\langle\nabla f(x)-\nabla f(y),x-y\rangle\le M\|x-y\|_2^2\quad\forall x,y\in\mathbb{R}^d$
- μ-convexity: $\langle\nabla f(x)-\nabla f(y),x-y\rangle\ge\mu\|x-y\|_2^2\quad\forall x,y\in\mathbb{R}^d$
- 上述两式相加， $y\to x^*$, 代入 $\nabla f(x^*)=0$.
- 强凸要求每一对 (x,y) 都要满足条件，正则条件只要求了 (x,x^*).

Theorem 4 (GD for functions satisfying regularity condition, constant stepsize)
Suppose f satisfies

$$\langle\nabla f(\boldsymbol{x}),\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*\rangle\ge\frac{\mu}{2}\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*\|_2^2+\frac{1}{2L}\|\nabla f(\boldsymbol{x})\|_2^2,\quad\forall\boldsymbol{x}$$

If $\eta_t\equiv\eta=\frac{1}{L}$, then

$$\left\|x^t-x^*\right\|_2^2\le\left(1-\frac{\mu}{L}\right)^t\left\|x^0-x^*\right\|_2^2$$

Proof.

$$\begin{aligned}\left\|x^{t+1}-x^*\right\|_2^2&=\left\|x^t-x^*-\frac{1}{L}\nabla f\left(x^t\right)\right\|_2^2\\&=\left\|x^t-x^*\right\|_2^2+\frac{1}{L^2}\left\|\nabla f\left(x^t\right)\right\|_2^2-\frac{2}{L}\left\langle x^t-x^*,\nabla f\left(x^t\right)\right\rangle\\&\le\left\|x^t-x^*\right\|_2^2-\frac{\mu}{L}\left\|x^t-x^*\right\|_2^2\\&=\left(1-\frac{\mu}{L}\right)\left\|x^t-x^*\right\|_2^2\end{aligned}$$

其中不等式利用了regularity condition. ■

P-L 条件 Polyak-Lojasiewicz condition

存在 $\mu > 0$ 使得

$$\|\nabla f(\boldsymbol{x})\|_2^2 \geq 2\mu\left(f(\boldsymbol{x})-f\left(\boldsymbol{x}^*\right)\right), \quad \forall \boldsymbol{x}$$

- 强凸：$f(y)-f(x)-\langle\nabla f(x), y-x\rangle \leq \frac{1}{2\mu}\|\nabla f(x)-\nabla f(y)\|_2^2 \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^d$. PL 条件：$y \rightarrow x$，$x \rightarrow x^*$. 强凸一定PL.
- 当远离最优目标值时，梯度上升速度加快。
- 每个驻点 stationary point （梯度为0的点）都是全局最优。

Theorem 5 (GD for functions satisfying smoothness and PL condition, constant stepsize)
Suppose f is L-smooth and satisfies

$$\|\nabla f(\boldsymbol{x})\|_2^2 \geq 2\mu\left(f(\boldsymbol{x})-f\left(\boldsymbol{x}^*\right)\right), \quad \forall \boldsymbol{x}$$

If $\eta_t \equiv \eta=\frac{1}{L}$, then

$$f\left(\boldsymbol{x}^t\right)-f\left(\boldsymbol{x}^*\right) \leq\left(1-\frac{\mu}{L}\right)^t\left(f\left(\boldsymbol{x}^0\right)-f\left(\boldsymbol{x}^*\right)\right)$$

- 最优目标值的线性收敛性
- 未必有唯一全局最优解
- 证明在后面

例子：over-parametrized linear regression

给 n 个数据样本，$\left\{a_i \in \mathbb{R}^d, y_i \in \mathbb{R}\right\}_{1 \leq i \leq n}$ 进行线性回归，找到 fit 数据的最好的线性模型

$$\underset{x \in \mathbb{R}^d}{\operatorname{minimize}} f(x) \triangleq \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n\left(a_i^{\top} x-y_i\right)^2$$

over-parametrization: 模型的维度 $d >$ 样本数量 n
在深度学习中尤为重要。
该问题是凸的，但不是强凸的，因为

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x})=\sum_{i=1}^n \boldsymbol{a}_i \boldsymbol{a}_i^{\top}$$

当 $d>n$ 时不满秩。但大多数时候仍然满足 $f\left(\boldsymbol{x}^*\right)=0$ 以及 PL 条件，因此GD线性收敛。

Fact 1 Suppose that $\boldsymbol{A}=\left[\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n\right]^{\top} \in \mathbb{R}^{n \times d}$ has rank n, and that $\eta_t \equiv \eta=\frac{1}{\lambda_{\max}\left(A A^{\top}\right)}$. Then GD obeys

$$f\left(\boldsymbol{x}^t\right)-f\left(\boldsymbol{x}^*\right) \leq\left(1-\frac{\lambda_{\min }\left(\boldsymbol{A} \boldsymbol{A}^{\top}\right)}{\lambda_{\max }\left(\boldsymbol{A} \boldsymbol{A}^{\top}\right)}\right)^t\left(f\left(\boldsymbol{x}^0\right)-f\left(\boldsymbol{x}^*\right)\right), \quad \forall t$$

- 原问题的 Hessian $\nabla^2 f(\boldsymbol{x})=\sum_{i=1}^n \boldsymbol{a}_i \boldsymbol{a}_i^{\top}=\boldsymbol{A}^{\top} \boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{d \times d}$
- 对 $\{\boldsymbol{a}_i\}$ 的假设温和
- 对 $\{y_i\}$ 没有要求
- 当有很多全局最优解时，对该over-parametrized 问题，GD 给出的结果有偏好，往往收敛到距离初始化 x^0 最近的全局最优。
- **证明**: $\boldsymbol{A}^{\top} \boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{A} \boldsymbol{A}^{\top}$ 的特征值除0外相同（可以用SVD证明），因此最大的特征值相同。由于在Over-Parametrized 问题中 $f\left(x^*\right)=0$ 因此只需要证明 $\lambda_{\min }\left(A A^{\top}\right)$ 就是 PL 条件中的 μ 即可，也就是 $\|\nabla f(\boldsymbol{x})\|_2^2 \geq 2 \lambda_{\min }\left(\boldsymbol{A} \boldsymbol{A}^{\top}\right) f(\boldsymbol{x})$. 如果该不等式成立，那么 Fact 1 得证。下面就证明这个不等式。
令 $\boldsymbol{y}=\left[y_i\right]_{1 \leq i \leq n}$， 则 $\boldsymbol{x}^*=\boldsymbol{x}-\boldsymbol{A}^{\top}\left(\boldsymbol{A} \boldsymbol{A}^{\top}\right)^{-1}(\boldsymbol{A} \boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})=\arg \min _{A z=y}\|z-x\|_2$. 我们有

$$\begin{aligned}
\nabla f(\boldsymbol{x}) & =\sum_i \boldsymbol{a}_i\left(\boldsymbol{a}_i^{\top} \boldsymbol{x}-y_i\right)=\sum_i \boldsymbol{a}_i\left(\boldsymbol{a}_i^{\top} \boldsymbol{x}-\boldsymbol{a}_i^{\top} \boldsymbol{x}^*\right) \\
& =\left(\sum_i \boldsymbol{a}_i \boldsymbol{a}_i^{\top}\right)\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*\right)=\boldsymbol{A}^{\top} \boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*\right) \\
& =\boldsymbol{A}^{\top} \boldsymbol{A} \boldsymbol{A}^{\top}\left(\boldsymbol{A} \boldsymbol{A}^{\top}\right)^{-1}(\boldsymbol{A} \boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) \\
& =\boldsymbol{A}^{\top}(\boldsymbol{A} \boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})
\end{aligned}$$

结果有

$$\begin{aligned}
\|\nabla f(\boldsymbol{x})\|_2^2 & =(\boldsymbol{A} \boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})^{\top} \boldsymbol{A} \boldsymbol{A}^{\top}(\boldsymbol{A} \boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) \\
& \geq \lambda_{\min }\left(\boldsymbol{A} \boldsymbol{A}^{\top}\right)\|\boldsymbol{A} \boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_2^2 \\
& =2 \lambda_{\min }\left(\boldsymbol{A} \boldsymbol{A}^{\top}\right) f(\boldsymbol{x}) \quad \blacksquare
\end{aligned}$$

凸且光滑的问题 Convex and smooth problems

没有强凸性时，研究收敛性往往用目标函数值 $\left\|f\left(x^t\right)-f\left(x^*\right)\right\|$ 的收敛而不是最优解 $\left\|x^t-x^*\right\|$ 的收敛。举个例子，函数 $f(x)=1 / x(x>0)$, GD 迭代下去很可能难以收敛到 $x^*=\infty$. 相比之下， $f\left(x^t\right)$ 可能很快达到 $f\left(x^*\right)=0$.

保证目标函数下降吗

那么问题来了，不具备强凸性时，我们能保证目标函数值下降（i.e., $f\left(\boldsymbol{x}^{t+1}\right)<f\left(\boldsymbol{x}^t\right)$）吗？如何选择步长才能保证充分的下降呢？

关键思想： **majorization-minimization**, 给 $f(x)$ 找到简单的 majorizing function 然后优化这个替代函数。

由于光滑，

$$
\begin{aligned}
f\left(\boldsymbol{x}^{t+1}\right)-f\left(\boldsymbol{x}^t\right) & \leq \nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)^{\top}\left(\boldsymbol{x}^{t+1}-\boldsymbol{x}^t\right)+\frac{L}{2}\left\|\boldsymbol{x}^{t+1}-\boldsymbol{x}^t\right\|_2^2 \\
& =-\eta_t\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right\|_2^2+\frac{\eta_t^2 L}{2}\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right\|_2^2
\end{aligned}
$$

最后一个等号后面的就是由光滑得到的目标函数下降的 majorizing function，我们想要最大化每次迭代的下降程度的下限，就要最大化 $\left(\eta_t-\frac{\eta_t^2 L}{2}\right)\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right\|_2^2$, 选择 $\eta_t=1/L$ 取到最大，此时每次迭代至少使目标函数下降 $\frac{1}{2L}\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right\|_2^2$. 我们就有了下面的 **Fact 2**.

Fact 2 Suppose f is L-smooth. Then GD with $\eta_t=1/L$ obeys

$$
f\left(\boldsymbol{x}^{t+1}\right) \leq f\left(\boldsymbol{x}^t\right)-\frac{1}{2L}\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right\|_2^2
$$

- 当步长足够小时，GD可以保证目标函数值下降。因为：令下降值下限 $\left(\eta_t-\frac{\eta_t^2 L}{2}\right)\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right\|_2^2>0$ 可得 $0<\eta_t<2/L$.
- 并不依赖凸性！

GD 不仅可以优化目标函数值，只要步长不太大，迭代时也会逐渐靠近最优解。将 f 看作 0-strongly convex 可以根据前面的分析得到

$$
\left\|x^{t+1}-x^*\right\|_2 \leq\left\|x^t-x^*\right\|_2
$$

也就是说，$\left\|x^t-x^*\right\|_2$ 对 t 单调不增.

实际上，可以进一步证明除非 $\boldsymbol{x}^t$ 已经是最优解，$\left\|x^t-x^*\right\|_2$ 是严格下降的。

Fact 3 Suppose f is convex and L-smooth. If $\eta_t=1/L$, then

$$
\left\|x^{t+1}-x^*\right\|_2 \leq\left\|x^t-x^*\right\|_2-\frac{1}{L^2}\left\|\nabla f\left(x^t\right)\right\|_2^2
$$

where x^* is any minimizer with optimal $f(x^*)$.

- 证明：

$$
\begin{aligned}
\left\|x^{t+1}-x^*\right\|_2^2 & =\left\|x^t-x^*-\eta\left(\nabla f\left(x^t\right)-\nabla f\left(x^*\right)\right)\right\|_2^2 \\
& =\left\|x^t-x^*\right\|_2^2-2\eta\left\langle\boldsymbol{x}^t-\boldsymbol{x}^*, \nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)-\nabla f\left(\boldsymbol{x}^*\right)\right\rangle+\eta^2\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)-\nabla f\left(\boldsymbol{x}^*\right)\right\|_2^2
\end{aligned}
$$

由于 smooth 且 convex，$\langle \boldsymbol{x}^t - \boldsymbol{x}^*, \nabla f(\boldsymbol{x}^t) - \nabla f(\boldsymbol{x}^*) \rangle \geq \frac{1}{L} \|\nabla f(\boldsymbol{x}^t) - \nabla f(\boldsymbol{x}^*)\|_2^2$, 又因为 $\eta_t = 1/L$，我们有 $\left\|x^{t+1} - x^*\right\|_2^2 \leq \|\boldsymbol{x}^t - \boldsymbol{x}^*\|_2^2 - \eta^2 \|\nabla f(\boldsymbol{x}^t) - \nabla f(\boldsymbol{x}^*)\|_2^2$，其中 $\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = 0$. ■

现在可以证明前面的 **Theorem 5** 了。回顾一下 Theorem 5 说了什么。
Theorem 5 (GD for functions satisfying smoothness and PL condition, constant stepsize)
Suppose f is L-smooth and satisfies

$$\|\nabla f(\boldsymbol{x})\|_2^2 \geq 2\mu \left(f(\boldsymbol{x}) - f(\boldsymbol{x}^*)\right), \quad \forall \boldsymbol{x}$$

If $\eta_t \equiv \eta = \frac{1}{L}$, then

$$f(\boldsymbol{x}^t) - f(\boldsymbol{x}^*) \leq \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^t \left(f(\boldsymbol{x}^0) - f(\boldsymbol{x}^*)\right)$$

Proof.

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}^{t+1}) - f(\boldsymbol{x}^*) &\leq f(\boldsymbol{x}^t) - f(\boldsymbol{x}^*) - \frac{1}{2L} \left\|\nabla f(\boldsymbol{x}^t)\right\|_2^2 \\ &\leq f(\boldsymbol{x}^t) - f(\boldsymbol{x}^*) - \frac{\mu}{L} \left(f(\boldsymbol{x}^t) - f(\boldsymbol{x}^*)\right) \\ &= \left(1 - \frac{\mu}{L}\right) \left(f(\boldsymbol{x}^t) - f(\boldsymbol{x}^*)\right) \end{aligned}$$

收敛性分析

不幸的是，没有强凸性时，收敛速度将远远慢于线性收敛（或几何收敛）。

Theorem 6 (GD for convex and smooth problems)
Let f be convex and L-smooth. If $\eta_t \equiv \eta = 1/L$, then GD obeys

$$f(\boldsymbol{x}^t) - f(\boldsymbol{x}^*) \leq \frac{2L \left\|\boldsymbol{x}^0 - \boldsymbol{x}^*\right\|_2^2}{t}$$

where x^* is any minimizer with optimal $f(x^*)$.

- 要达到 ϵ-准确，需要 $O(1/\epsilon)$ 次迭代。线性收敛：$O(\log \frac{1}{\epsilon})$.
- 证明：由 **Fact 2**，$f(\boldsymbol{x}^{t+1}) - f(\boldsymbol{x}^t) \leq -\frac{1}{2L} \|\nabla f(\boldsymbol{x}^t)\|_2^2$.
  为了递归的表示 $f(\boldsymbol{x}^t)$，我们将 $\|\nabla f(\boldsymbol{x}^t)\|_2$ 替换为 $f(\boldsymbol{x}^t)$ 的函数。
  为此，利用 convexity 得到

$$
\begin{aligned}
& f\left(\boldsymbol{x}^*\right)-f\left(\boldsymbol{x}^t\right) \geq \nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)^{\top}\left(\boldsymbol{x}^*-\boldsymbol{x}^t\right) \geq-\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right\|_2\left\|\boldsymbol{x}^t-\boldsymbol{x}^*\right\|_2 \\
& \Longrightarrow \quad\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^t\right)\right\|_2 \geq \frac{f\left(\boldsymbol{x}^t\right)-f\left(\boldsymbol{x}^*\right)}{\left\|\boldsymbol{x}^t-\boldsymbol{x}^*\right\|_2} \geq \frac{f\left(\boldsymbol{x}^t\right)-f\left(\boldsymbol{x}^*\right)}{\left\|\boldsymbol{x}^0-\boldsymbol{x}^*\right\|_2}
\end{aligned}
$$

令 $\Delta_t:=f\left(\boldsymbol{x}^t\right)-f\left(\boldsymbol{x}^*\right)$ 可得 $\Delta_{t+1}-\Delta_t \leq-\frac{1}{2 L\left\|\boldsymbol{x}^0-\boldsymbol{x}^*\right\|_2^2} \Delta_t^2$ （代入Fact 2）
下面用归纳法证明 $\Delta_t \leq \frac{b}{t}$ ，其中 $b=2 L\left\|\boldsymbol{x}^0-\boldsymbol{x}^*\right\|_2^2$. 如果该不等式对 t 成立，那么 $\Delta_{t+1} \leq \Delta_t-\Delta_t^2 / b$, 而这个不等式在 $\Delta_t<b / 2$ 时增，我们让 $\Delta_t \leq \frac{b}{t} \leq \frac{b}{2}$，那么函数始终对 Δ_t 是增的，也就是当 $t \geq 2$ 时函数对 Δ_t 增。因此有 $\Delta_{t+1} \leq \frac{b(t-1)}{t^2} \leq \frac{b}{t+1}$. ■

非凸问题 Nonconvex problems

许多代价函数都是非凸的，比如低秩矩阵补全，盲逆卷积，字典学习，混合模型，深度神经网络学习......对于这样的函数，可能到处都有 bumps 和 局部最小值。没有算法可保证有效解决所有情况的非凸问题。

典型的收敛保证

我们很难希望快速收敛到全局最优解，但是我们或许可以有

- 收敛到驻点
- 收敛到局部最小
- 局部收敛到全局最小（需要合适的初始化）

如果我们只希望找到一个(近似的)驻点 ϵ-approximate stationary point，那么我们的目标就是找到点 x 使得

$$
\|\nabla f(\boldsymbol{x})\|_2 \leq \varepsilon
$$

GD 可以达到这个目标吗?

Theorem 7
Let f be L-smooth and $\eta_k \equiv \eta=1 / L$. Assume t is even.

- in general, GD obeys

$$
\min _{0 \leq k<t}\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^k\right)\right\|_2 \leq \sqrt{\frac{2 L\left(f\left(\boldsymbol{x}^0\right)-f\left(\boldsymbol{x}^*\right)\right)}{t}}
$$

- if f is convex, then GD obeys

$$
\min _{t / 2 \leq k<t}\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^k\right)\right\|_2 \leq \frac{4 L\left\|\boldsymbol{x}^0-\boldsymbol{x}^*\right\|_2}{t}
$$

GD 找 ϵ-approximate stationary point 需要 $O\left(1/\varepsilon^2\right)$ 次迭代。并不意味着 GD 收敛到驻点，只是说在 GD 的轨迹中存在一个ϵ-approximate stationary point.

证明: 由 Fact 2 有 $\frac{1}{2L}\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^k\right)\right\|_2^2 \leq f\left(\boldsymbol{x}^k\right)-f\left(\boldsymbol{x}^{k+1}\right)$, $\forall k$, 那么

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2L}\sum_{k=t_0}^{t-1}\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^k\right)\right\|_2^2 &\leq \sum_{k=t_0}^{t-1}\left(f\left(\boldsymbol{x}^k\right)-f\left(\boldsymbol{x}^{k+1}\right)\right)=f\left(\boldsymbol{x}^{t_0}\right)-f\left(\boldsymbol{x}^t\right) \\
&\leq f\left(\boldsymbol{x}^{t_0}\right)-f\left(\boldsymbol{x}^*\right) \\
\Longrightarrow \quad \min_{t_0\leq k<t}\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^k\right)\right\|_2 &\leq \sqrt{\frac{2L\left(f\left(\boldsymbol{x}^{t_0}\right)-f\left(\boldsymbol{x}^*\right)\right)}{t-t_0}}
\end{aligned}
$$

对于一般情况，令 $t_0=0$ 即可得证。
如果 f convex, 由 **Theorem 6**

$$
f\left(\boldsymbol{x}^{t_0}\right)-f\left(\boldsymbol{x}^*\right) \leq \frac{2L\left\|\boldsymbol{x}^0-\boldsymbol{x}^*\right\|_2^2}{t_0}
$$

令 $t_0=t/2$ 可得

$$
\min_{t_0\leq k<t}\left\|\nabla f\left(\boldsymbol{x}^k\right)\right\|_2 \leq \frac{2L}{\sqrt{t_0\left(t-t_0\right)}}\left\|\boldsymbol{x}^0-\boldsymbol{x}^*\right\|_2=\frac{4L\left\|\boldsymbol{x}^0-\boldsymbol{x}^*\right\|_2}{t}
$$

逃离鞍点 Escaping saddles

至少有两种点梯度为0，一种是全局/局部最小，另一种是鞍点。鞍点看上去是不稳定的 critical points,我们有办法逃离鞍点吗?

GD 有时候确实逃离不了鞍点，比如 x^0 恰好是鞍点，那么 GD 就陷入其中。但好在当随机初始化 random initialization 时这种情况通常可以被避免。
幸运的是，在温和条件下，随机初始化的 GD 几乎都能收敛到局部（有时甚至是全局）最优解。