



无约束优化

Unconstrained Minimization · Chapter 9

梁经纬 Jingwei Liang

Institute of Natural Sciences
School of Mathematical Sciences

Lecture 03: 无约束优化

2026 年秋季学期

饮水思源 · 爱国荣校

本讲内容

回顾、问题与假设 §9.1
前序知识、最优性、Hessian 上下界与条件数

下降框架 §9.2
方向、步长、精确线搜索与回溯线搜索

一阶方法 §§9.3–9.4
梯度法、一般范数下的最速下降与预条件

二阶方法 §9.5
Newton 步、Newton decrement 与两阶段收敛

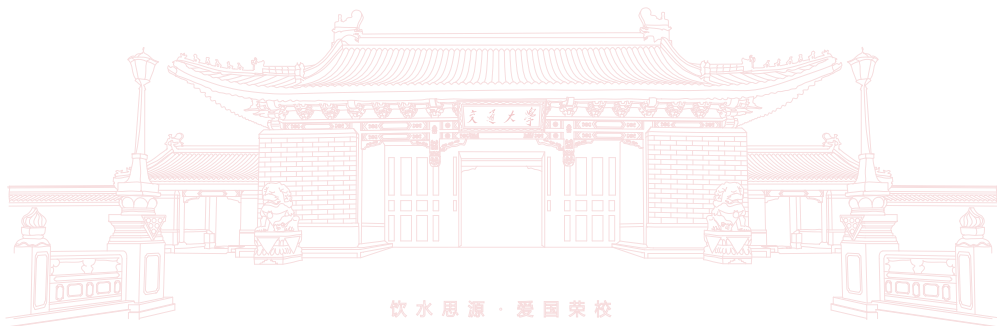
自协调函数 §9.6
用仿射不变条件分析 Newton 法，
得到不含未知常数的复杂度界。

实现 §9.7
线搜索预计算、Cholesky 分解、带状/稀疏/低秩结构。

主线： 如何选择方向与步长；
性能： 条件数、局部曲率与结构；
实现： 迭代次数与单步代价同时考虑。

01

前序知识与应用



饮水思源 · 爱国荣校

与前序课程的连接

数学基础

向量与矩阵维度；梯度、Hessian
与 Taylor 展开

Lectures 01A–01C

凸集、凸函数、最优性条件与问题
变换

与前序课程的连接

数学基础

向量与矩阵维度；梯度、Hessian
与 Taylor 展开

Lectures 01A–01C

凸集、凸函数、最优性条件与问题
变换

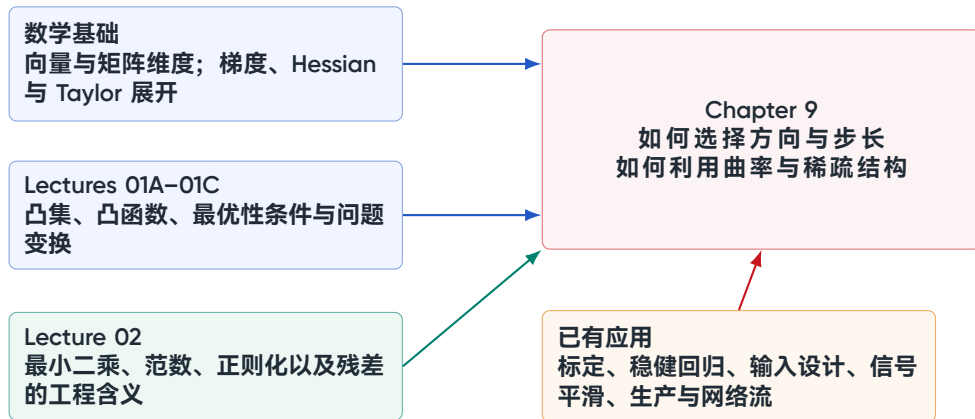
Lecture 02

最小二乘、范数、正则化以及残差的
工程含义

已有应用

标定、稳健回归、输入设计、信号
平滑、生产与网络流

与前序课程的连接



第 9 章将前面建立的模型与微分工具转化为可实现、可分析的数值算法。

课程内部回顾；Boyd & Vandenberghe, Chapters 2–4, 6, and 9

微分与维度

设 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, 搜索方向 $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ 。后续推导反复使用

$$\nabla f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^n, \quad \nabla^2 f(\mathbf{x}) \in \mathbb{S}^n, \quad \left. \frac{d}{dt} f(\mathbf{x} + t\mathbf{v}) \right|_{t=0} = \nabla f(\mathbf{x})^\top \mathbf{v}.$$

二阶局部模型

$$f(\mathbf{x} + \mathbf{v}) \approx f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^\top \mathbf{v} + \frac{1}{2} \mathbf{v}^\top \nabla^2 f(\mathbf{x}) \mathbf{v}.$$

梯度给出一阶变化; Hessian 描述方向之间的曲率耦合。

仿射复合

若 $f(\mathbf{x}) = h(A\mathbf{x} + \mathbf{b})$, 则

$$\begin{aligned} \nabla f(\mathbf{x}) &= A^\top \nabla h(A\mathbf{x} + \mathbf{b}), \\ \nabla^2 f(\mathbf{x}) &= A^\top \nabla^2 h(A\mathbf{x} + \mathbf{b}) A. \end{aligned}$$

其中 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 两式的输出维度分别为 n 与 $n \times n$ 。

凸性与最优性

本讲直接调用的结论

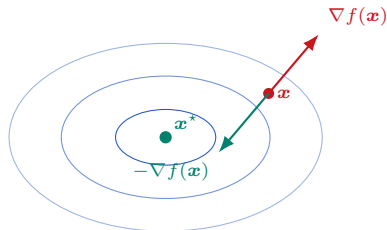
在开凸定义域内, 取 $x^* \in \text{dom } f$, 并令 $m > 0$:

f 凸且可微: $\nabla f(x^*) = 0 \iff x^*$ 全局最优,

f 二阶可微: f 凸 $\iff \nabla^2 f(x) \succeq 0$,

$\nabla^2 f(x) \succeq mI$: f 强凸; 若最优点存在, 则唯一。

若 $mI \preceq \nabla^2 f(x) \preceq MI$, 则比值 M/m 同时控制几何扁长程度与一阶方法的收敛速度。



凸性把局部微分信息转化为全局结论。

已有模型如何进入本讲

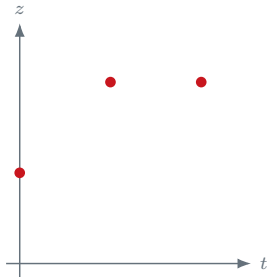
前序课程中的模型	进入第 9 章后的形式	本讲关注的问题
标定与最小二乘	光滑凸二次函数	条件数、步长与 Newton 一步求解
稳健回归	可微罚函数之和	下降方向与回溯线搜索
Tikhonov、输入设计、信号平滑	二次目标, 常带 Toeplitz 或带状结构	预条件与单步计算成本
生产计划、网络流	线性约束加对数障碍	自协调 Newton 法与稀疏线性代数
几何规划的凸形式	log-sum-exp 与仿射复合	梯度、Hessian 及数值稳定性

同一应用会在不同章节再次出现：模型不变，观察重点从“是否凸、如何表示”转向“如何高效求解”。

应用例 1: 传感器标定

测量模型为 $z_i = c + gt_i + \epsilon_i$ 。取 $t = (0, 1, 2)$ 、 $z = (1, 2, 2)$ ，则

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} c \\ g \end{bmatrix}, \quad f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2.$$



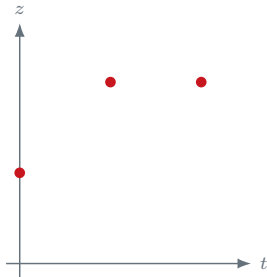
$A : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$; 残差属于 $\mathbb{R}^3$ 。

应用例 1: 传感器标定

测量模型为 $z_i = c + gt_i + \epsilon_i$ 。取 $t = (0, 1, 2)$ 、 $z = (1, 2, 2)$ ，则

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} c \\ g \end{bmatrix}, \quad f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2.$$

$$\nabla f(\mathbf{x}) = A^\top (\mathbf{Ax} - \mathbf{b}), \quad \nabla^2 f = A^\top A = \begin{bmatrix} 3 & 3 \\ 3 & 5 \end{bmatrix}.$$



$A : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$; 残差属于 $\mathbb{R}^3$ 。

应用例 1: 传感器标定

测量模型为 $z_i = c + gt_i + \epsilon_i$ 。取 $t = (0, 1, 2)$ 、 $z = (1, 2, 2)$ ，则

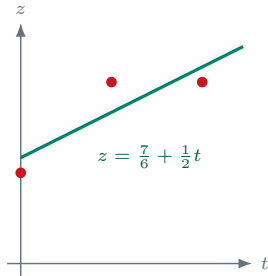
$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} c \\ g \end{bmatrix}, \quad f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2.$$

$$\nabla f(\mathbf{x}) = A^\top (A\mathbf{x} - \mathbf{b}), \quad \nabla^2 f = A^\top A = \begin{bmatrix} 3 & 3 \\ 3 & 5 \end{bmatrix}.$$

从 $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{0}$ 出发，Newton 方程给出

$$\mathbf{x}^{(1)} = (A^\top A)^{-1} A^\top \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 7/6 \\ 1/2 \end{bmatrix} = \mathbf{x}^*.$$

凸二次问题的精确 Newton 步一次到达最优点。

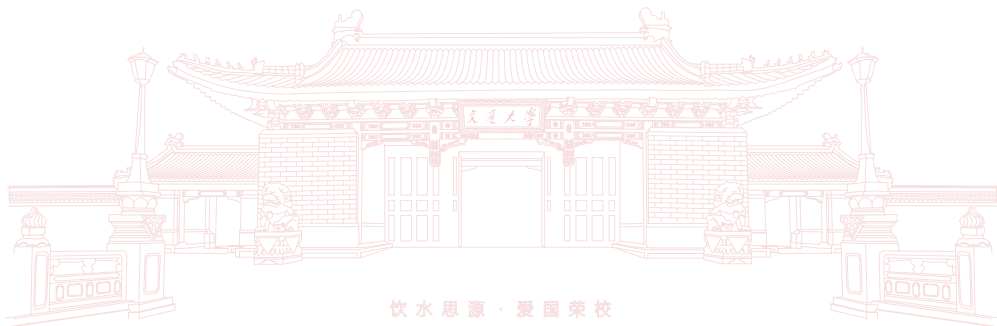


$A : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$; 残差属于 $\mathbb{R}^3$ 。

自编数值例；延续 Lectures 01–02 的标定与最小二乘模型

02

问题与基本假设



饮水思源 · 爱国荣校

无约束优化

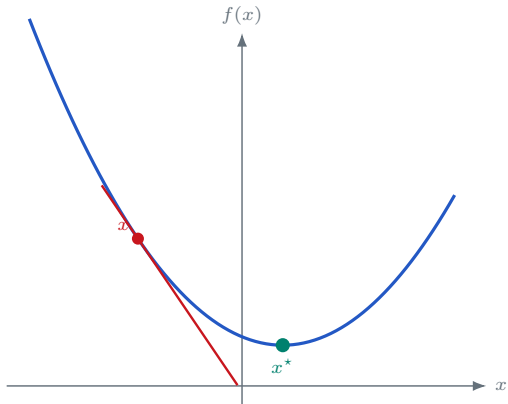
基本问题

$$\underset{x \in \text{dom } f}{\text{minimize}} \quad f(x),$$

其中 $\text{dom } f \subseteq \mathbb{R}^n$ 为开集, $f: \text{dom } f \rightarrow \mathbb{R}$ 为凸、二阶连续可微函数, 并假设最优解存在。

$$p^* = f(x^*), \quad x^* \text{ 最优} \iff \nabla f(x^*) = \mathbf{0}.$$

一般不能解析求解 n 个非线性方程 $\nabla f(x) = \mathbf{0}$, 因此构造迭代序列。



凸性把“驻点”与“全局最优解”连接起来。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.1, equations (9.1)–(9.2)

迭代序列与起点

最小化序列 (minimizing sequence)

$$\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}, \dots \in \text{dom } f, \quad f(\mathbf{x}^{(k)}) \longrightarrow p^*.$$

当

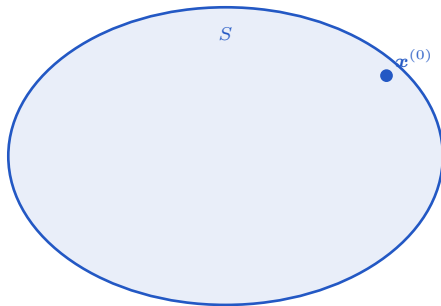
$$f(\mathbf{x}^{(k)}) - p^* \leq \varepsilon$$

时, 称 $\mathbf{x}^{(k)}$ 为 ε -次优解。

起点需满足 $\mathbf{x}^{(0)} \in \text{dom } f$, 并要求初始次水平集

$$S = \{\mathbf{x} \in \text{dom } f \mid f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}^{(0)})\}$$

闭合。若将 f 在 $\text{dom } f$ 外延拓为 $+\infty$ 后是闭函数, 该条件自动成立; 特别地, $\text{dom } f = \mathbb{R}^n$ 且 f 连续时成立。



下降方法始终留在初始次水平集内。

迭代序列与起点

最小化序列 (minimizing sequence)

$$\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}, \dots \in \text{dom } f, \quad f(\mathbf{x}^{(k)}) \longrightarrow p^*.$$

当

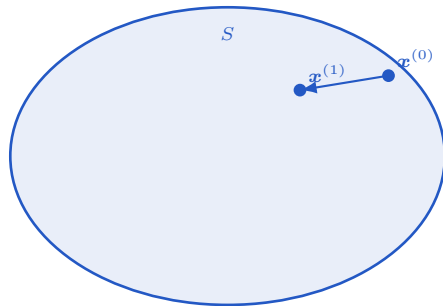
$$f(\mathbf{x}^{(k)}) - p^* \leq \varepsilon$$

时, 称 $\mathbf{x}^{(k)}$ 为 ε -次优解。

起点需满足 $\mathbf{x}^{(0)} \in \text{dom } f$, 并要求初始次水平集

$$S = \{\mathbf{x} \in \text{dom } f \mid f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}^{(0)})\}$$

闭合。若将 f 在 $\text{dom } f$ 外延拓为 $+\infty$ 后是闭函数, 该条件自动成立; 特别地, $\text{dom } f = \mathbb{R}^n$ 且 f 连续时成立。



下降方法始终留在初始次水平集内。

迭代序列与起点

最小化序列 (minimizing sequence)

$$\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}, \dots \in \text{dom } f, \quad f(\mathbf{x}^{(k)}) \longrightarrow p^*.$$

当

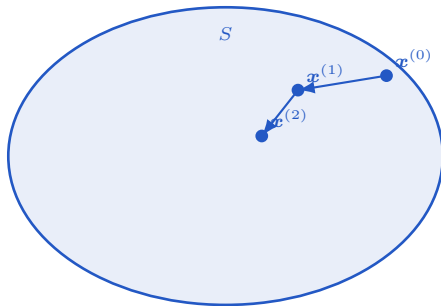
$$f(\mathbf{x}^{(k)}) - p^* \leq \varepsilon$$

时, 称 $\mathbf{x}^{(k)}$ 为 ε -次优解。

起点需满足 $\mathbf{x}^{(0)} \in \text{dom } f$, 并要求初始次水平集

$$S = \{\mathbf{x} \in \text{dom } f \mid f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}^{(0)})\}$$

闭合。若将 f 在 $\text{dom } f$ 外延拓为 $+\infty$ 后是闭函数, 该条件自动成立; 特别地, $\text{dom } f = \mathbb{R}^n$ 且 f 连续时成立。



下降方法始终留在初始次水平集内。

迭代序列与起点

最小化序列 (minimizing sequence)

$$\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}, \dots \in \text{dom } f, \quad f(\mathbf{x}^{(k)}) \longrightarrow p^*.$$

当

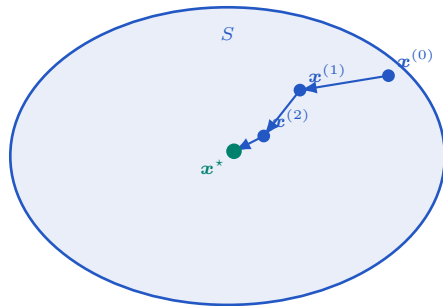
$$f(\mathbf{x}^{(k)}) - p^* \leq \varepsilon$$

时, 称 $\mathbf{x}^{(k)}$ 为 ε -次优解。

起点需满足 $\mathbf{x}^{(0)} \in \text{dom } f$, 并要求初始次水平集

$$S = \{\mathbf{x} \in \text{dom } f \mid f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}^{(0)})\}$$

闭合。若将 f 在 $\text{dom } f$ 外延拓为 $+\infty$ 后是闭函数, 该条件自动成立; 特别地, $\text{dom } f = \mathbb{R}^n$ 且 f 连续时成立。



下降方法始终留在初始次水平集内。

二次问题与最小二乘

凸二次函数

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} x^\top P x + q^\top x + r, \quad P \succeq 0.$$

最优性条件为

$$P x^* = -q.$$

若 $P \succ 0$, 解唯一且 $x^* = -P^{-1}q$; 若方程无解, 问题无下界。

最小二乘是特例

$$\min_x \|Ax - b\|_2^2, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad b \in \mathbb{R}^m.$$

展开后二次项为 $A^\top A$, 一阶条件给出正规方程

$$A^\top A x^* = A^\top b.$$

Newton 法正是反复最小化当前位置的二次模型; 二次问题因而是后续方法的基准。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.1.1, equation (9.4)

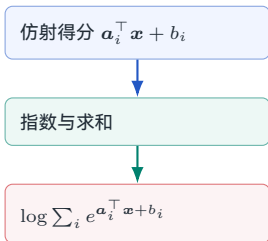
非二次原型

无约束几何规划的凸形式

$$f(\mathbf{x}) = \log \left(\sum_{i=1}^m \exp(\mathbf{a}_i^\top \mathbf{x} + b_i) \right),$$

$$\text{dom } f = \mathbb{R}^n.$$

梯度是 $\mathbf{a}_i$ 的 softmax 加权平均；一般没有解析驻点。

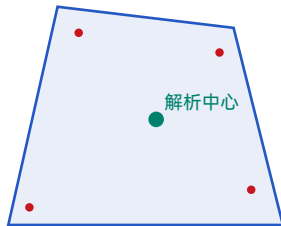


线性不等式的解析中心

$$f(\mathbf{x}) = - \sum_{i=1}^m \log(b_i - \mathbf{a}_i^\top \mathbf{x}),$$

$$\text{dom } f = \{\mathbf{x} \mid \mathbf{a}_i^\top \mathbf{x} < b_i, i = 1, \dots, m\}.$$

靠近任一边界时 $f(\mathbf{x}) \rightarrow +\infty$ ，因此算法必须从严格可行点出发。



边界对应对数障碍趋于无穷

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.1.1, equations (9.5) and the preceding geometric-program example

矩阵不等式的解析中心

设

$$F(\mathbf{x}) = F_0 + x_1 F_1 + \cdots + x_n F_n, \quad F_i \in \mathbb{S}^p.$$

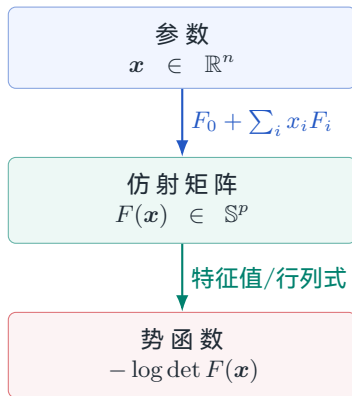
解析中心问题为

$$\min_{\mathbf{x}} -\log \det F(\mathbf{x}), \quad \text{dom } f = \{\mathbf{x} \mid F(\mathbf{x}) \succ 0\}.$$

起点必须满足 $F(\mathbf{x}^{(0)}) \succ 0$ 。最小特征值趋于零时，
 $-\log \det F = -\sum_j \log \lambda_j(F)$ 急剧增大。

变量与维度

$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ 是参数； $F(\mathbf{x}) \in \mathbb{S}^p$ 是矩阵输出；正定约束控制全部 p 个特征值。



应用例 2: 二维 LMI 的解析中心

考虑仿射矩阵不等式

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2)^\top, \quad F(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} 2 + x_1 & x_2 \\ x_2 & 2 - x_1 \end{bmatrix} \succ 0.$$

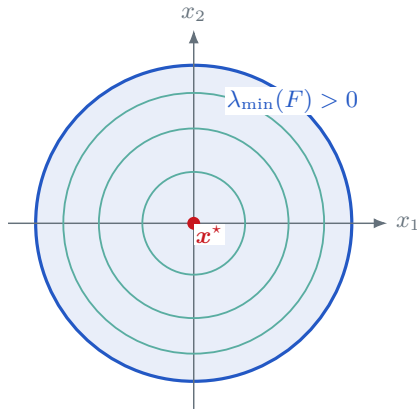
两个特征值为

$$2 \pm \sqrt{x_1^2 + x_2^2},$$

且 $\det F = 4 - x_1^2 - x_2^2$, 所以

$$\text{dom } f = \{\mathbf{x} \mid \|\mathbf{x}\|_2 < 2\}, \quad f(\mathbf{x}) = -\log(4 - \|\mathbf{x}\|_2^2).$$

解析中心 $\mathbf{x}^* = \mathbf{0}$ 同时使最小特征值与行列式最大。



圆周上 $\det F = 0$; 障碍趋于无穷

自编数值例; 延续 Lecture 01A 的 LMI 与正定矩阵

强凸性

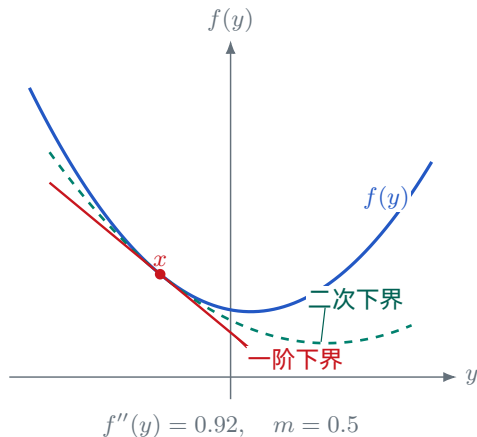
由于本讲的 f 为凸函数，初始次水平集 S 也是凸集。若在 S 上存在 $m > 0$ 使

$$\nabla^2 f(x) \succeq mI, \quad x \in S,$$

则 f 在 S 上强凸。由 Taylor 展开得到

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^\top (y-x) + \frac{m}{2} \|y-x\|_2^2. \quad (9.8)$$

与普通凸性的一阶下界相比，多出的二次项给出可量化的曲率。



Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.1.2, equations (9.7)–(9.8); exact one-dimensional illustration

梯度给出的次优性界

对固定 x ，式 (9.8) 的右端关于 y 是凸二次函数，在

$$\tilde{y} = x - \frac{1}{m} \nabla f(x)$$

处取最小值。因此，对任意 $y \in S$ ，

$$\begin{aligned} f(y) &\geq f(x) + \nabla f(x)^\top (y - x) + \frac{m}{2} \|y - x\|_2^2 \\ &\geq f(x) - \frac{1}{2m} \|\nabla f(x)\|_2^2. \end{aligned}$$

令 $y = x^*$ ，得到

$$f(x) - p^* \leq \frac{1}{2m} \|\nabla f(x)\|_2^2.$$

于是

$$\|\nabla f(x)\|_2 \leq \sqrt{2m\varepsilon} \implies f(x) - p^* \leq \varepsilon.$$

距离界与唯一性

将强凸下界用于 $y = x^*$:

$$p^* \geq f(x) + \nabla f(x)^\top (x^* - x) + \frac{m}{2} \|x^* - x\|_2^2.$$

结合 $p^* \leq f(x)$ 与 Cauchy-Schwarz 不等式, 得到

$$\|x - x^*\|_2 \leq \frac{2}{m} \|\nabla f(x)\|_2. \quad (9.11)$$

解释

梯度小不仅意味着目标值接近最优, 也限制了变量离最优点的距离。

推论

若存在两个最优点, 将任一个代入距离界都得到二者距离为零; 故强凸问题的最优解唯一。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.1.2, equation (9.11)

Hessian 的双侧界

强凸性使 S 有界; $\nabla^2 f$ 连续, 因此存在 $M < \infty$ 使

$$mI \preceq \nabla^2 f(x) \preceq MI, \quad x \in S. \quad (9.15)$$

相应地, 对 $x, y \in S$,

$$\begin{aligned} f(x) + \nabla f(x)^\top (y - x) + \frac{m}{2} \|y - x\|_2^2 &\leq f(y) \\ &\leq f(x) + \nabla f(x)^\top (y - x) + \frac{M}{2} \|y - x\|_2^2. \end{aligned}$$

最小化上界还得到

$$f(x) - \frac{1}{2M} \|\nabla f(x)\|_2^2 \geq p^*.$$

后续用途

m 控制“至少有多弯”, M 控制“至多有多弯”; 二者共同决定一阶方法的收敛速度。

条件数的几何含义

若 $mI \preceq \nabla^2 f(x) \preceq MI$, 则 Hessian 条件数至多为

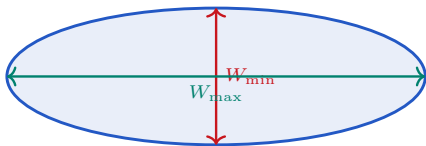
$$\kappa = \frac{M}{m}.$$

对有界、满维凸集 C , 定义方向 q ($\|q\|_2 = 1$) 上的宽度

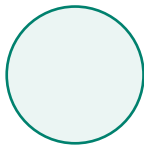
$$W(C, q) = \sup_{z \in C} q^\top z - \inf_{z \in C} q^\top z.$$

集合条件数为

$$\text{cond}(C) = \frac{W_{\max}^2}{W_{\min}^2}.$$



偏心程度越大, 条件数越大



各方向宽度接近, 条件数接近 1

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.1.2, condition number of sublevel sets

例 9.1: 椭球的条件数

设

$$E = \{\mathbf{x} \mid (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^\top A^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \leq 1\}, \quad A \in \mathbb{S}_{++}^n.$$

沿单位方向 $\mathbf{q}$ 的宽度为

$$W(E, \mathbf{q}) = 2\|A^{1/2}\mathbf{q}\|_2.$$

因此

$$W_{\min} = 2\sqrt{\lambda_{\min}(A)}, \quad W_{\max} = 2\sqrt{\lambda_{\max}(A)},$$

$$\text{cond}(E) = \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)} = \kappa(A).$$

关系

矩阵 A 的谱条件数与它所定义椭球的几何偏心程度完全一致。

应用例 3: 岭回归改善条件数

延续 Lecture 02 的 Tikhonov 正则化。令

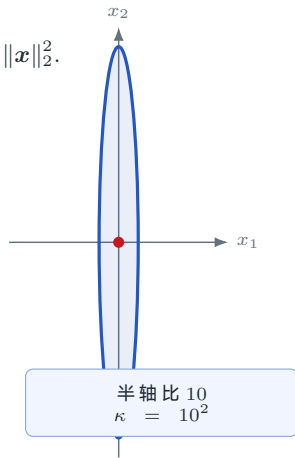
$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0.1 \end{bmatrix}, \quad f_\lambda(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2 + \frac{\lambda}{2} \|\mathbf{x}\|_2^2.$$

未正则化: $\lambda = 0$

$$\nabla^2 f_0 = A^\top A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0.01 \end{bmatrix},$$

$$\kappa(\nabla^2 f_0) = 100.$$

低敏感方向的曲率很小，梯度法容易产生狭长锯齿路径。



应用例 3: 岭回归改善条件数

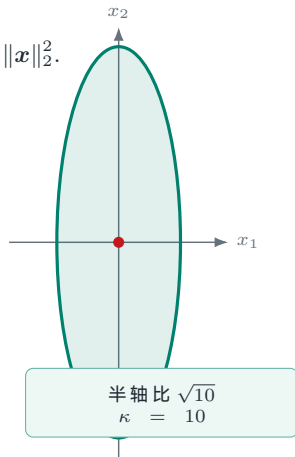
延续 Lecture 02 的 Tikhonov 正则化。令

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0.1 \end{bmatrix}, \quad f_\lambda(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2 + \frac{\lambda}{2} \|\mathbf{x}\|_2^2.$$

加入正则化: $\lambda = 0.1$

$$\nabla^2 f_{0.1} = A^\top A + 0.1I = \begin{bmatrix} 1.1 & 0 \\ 0 & 0.11 \end{bmatrix},$$
$$\kappa(\nabla^2 f_{0.1}) = 10.$$

正则化同时改变估计偏差与数值条件; 二者需要共同权衡。



自编数值例; 延续 Lecture 02 的 Tikhonov regularization

次水平集的球夹逼

对 $p^* < \alpha \leq f(\mathbf{x}^{(0)})$, 令

$$C_\alpha = \{\mathbf{y} \in \text{dom } f \mid f(\mathbf{y}) \leq \alpha\}.$$

在最优点 $\mathbf{x}^*$ 处应用上下二次界:

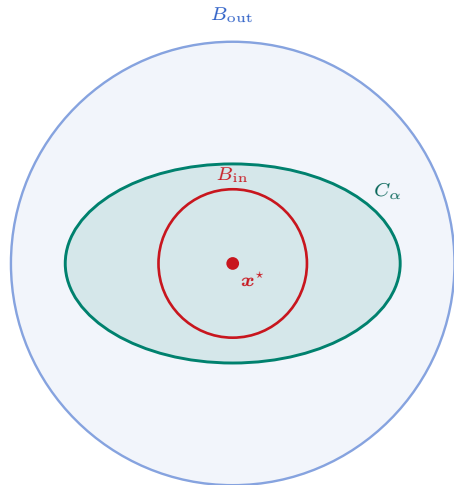
$$p^* + \frac{m}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}^*\|_2^2 \leq f(\mathbf{y}) \leq p^* + \frac{M}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}^*\|_2^2.$$

于是

$$B_{\text{in}} \subseteq C_\alpha \subseteq B_{\text{out}},$$

两球半径分别为

$$r_{\text{in}} = \sqrt{\frac{2(\alpha - p^*)}{M}}, \quad r_{\text{out}} = \sqrt{\frac{2(\alpha - p^*)}{m}}.$$



$$\text{cond}(C_\alpha) \leq \frac{M}{m}.$$

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.1.2, sublevel-set conditioning; qualitative redraw

理论常数的局限

理论上

给定 m, M 可证明:

- ▣ 小梯度对应小次优性;
- ▣ 梯度法至少线性收敛;
- ▣ 条件数 M/m 影响迭代次数。

实际中

m, M 往往未知, 因此

$$\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2 \leq \sqrt{2m\varepsilon}$$

通常不能直接作为可验证的精确停止准则。

强凸性与 Hessian 界
未知 m, M, L

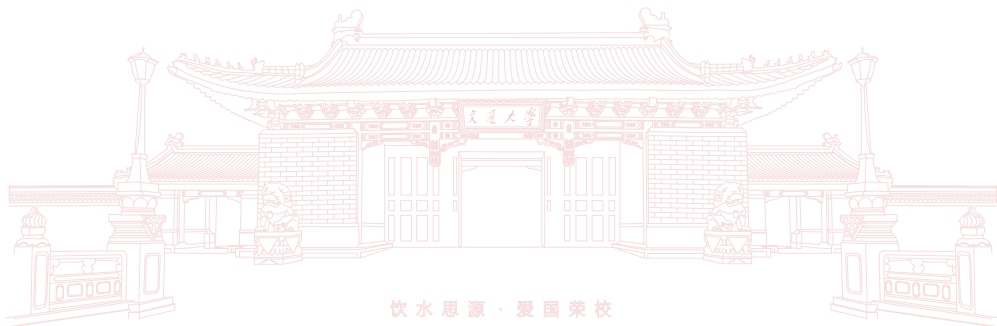
梯度法与 Newton 法
可证明收敛

§9.6 自协调性
仿射不变且无未知常数

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.1.2, “The strong convexity constants”

03

下降方法与线搜索



饮水思源 · 爱国荣校

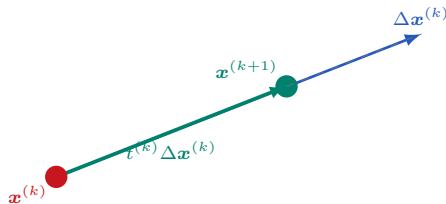
方向与步长

下降方法按

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + t^{(k)} \Delta \mathbf{x}^{(k)}, \quad t^{(k)} > 0$$

更新。

- ▣ $\Delta \mathbf{x}^{(k)} \in \mathbb{R}^n$: 搜索方向 (search direction);
- ▣ $t^{(k)}$: 步长 (step size);
- ▣ 实际位移为 $t^{(k)} \Delta \mathbf{x}^{(k)}$, 其欧氏长度一般不等于 $t^{(k)}$ 。



下降性质

除最优点外, 要求 $f(\mathbf{x}^{(k+1)}) < f(\mathbf{x}^{(k)})$, 故全部迭代点留在初始次水平集 S 内。

下降方向

由凸性,

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^\top (y - x).$$

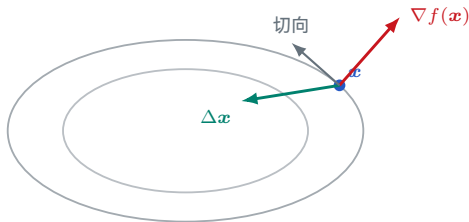
要使足够小的正步长产生下降, 搜索方向必须满足

$$\nabla f(x)^\top \Delta x < 0.$$

这等价于 Δx 与负梯度 $-\nabla f(x)$ 的夹角小于 90° 。

边界情形

若内积为零, 方向是一阶切向方向; 一阶模型不能保证严格下降。

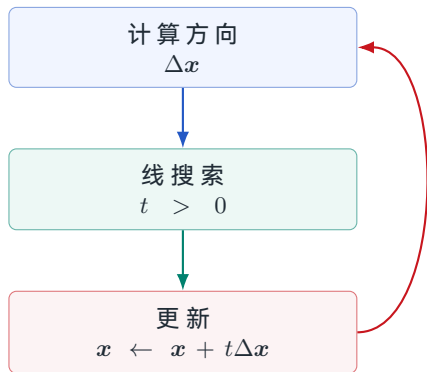


一般下降方法

Algorithm 9.1

给定 $x \in \text{dom } f$, 重复:

1. 选择下降方向 Δx , 满足 $\nabla f(x)^\top \Delta x < 0$;
2. 通过线搜索选择步长 $t > 0$;
3. 更新 $x \leftarrow x + t\Delta x$;
4. 检查停止准则。



问题 不同算法的核心差别分别落在“方向”和“步长”的哪一部分？

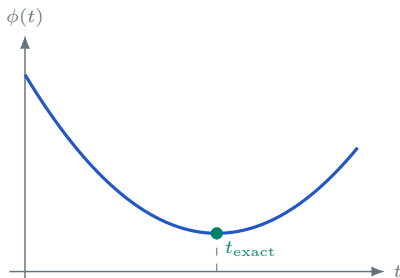
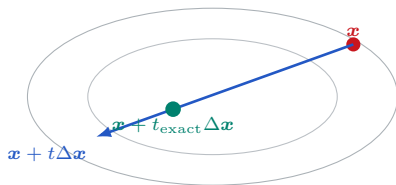
精确线搜索

固定当前位置与方向，将高维目标限制在定义域内的射线上：

$$\mathcal{T} = \{t \geq 0 \mid \mathbf{x} + t\Delta\mathbf{x} \in \text{dom } f\}, \quad \phi(t) = f(\mathbf{x} + t\Delta\mathbf{x}), \quad t \in \mathcal{T}.$$

若最小值能够达到，精确线搜索（exact line search）取

$$t_{\text{exact}} \in \operatorname{argmin}_{s \in \mathcal{T}} f(\mathbf{x} + s\Delta\mathbf{x}). \quad (9.16)$$



适用于一维子问题便宜或存在解析解的情形；§9.7.1 讨论如何预计算以降低代价。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.2, equation (9.16)

回溯线搜索

Algorithm 9.2

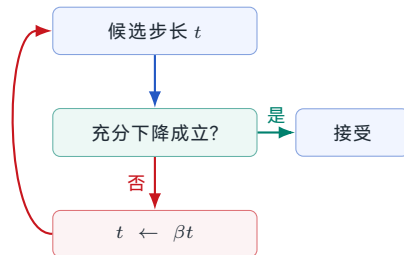
给定下降方向 Δx , 参数 $0 < \alpha < 1/2$ 、 $0 < \beta < 1$:

1. 令 $t \leftarrow 1$;
2. 当 $x + t\Delta x \notin \text{dom } f$, 或

$$f(x + t\Delta x) > f(x) + \alpha t \nabla f(x)^\top \Delta x$$

时, 令 $t \leftarrow \beta t$;

3. 返回第一个满足充分下降条件的 t 。



Armijo 充分下降条件

令

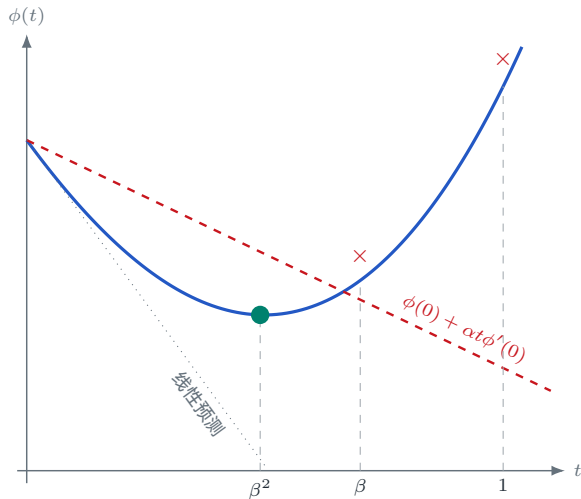
$$\phi(t) = f(x + t\Delta x),$$

$$\phi'(0) = \nabla f(x)^\top \Delta x < 0.$$

线性预测为 $\phi(0) + t\phi'(0)$ ，回溯仅要求达到其中 α 比例：

$$\phi(t) \leq \phi(0) + \alpha t \phi'(0).$$

图中取 $\alpha = 0.35$, $\beta = 0.7$ 。步长 $1, \beta, \beta^2$ 依次测试；前两个被拒绝， β^2 被接受。



Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.2, Figure 9.1; qualitative redraw

应用例 4: 稳健位置估计

用一个常数 x 拟合三个观测 $y = (0, 1, 8)$; 第三个观测是离群点。比较

$$f_{\text{LS}}(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 (x - y_i)^2, \quad f_{\text{H}}(x) = \sum_{i=1}^3 \phi_1(x - y_i),$$

其中 $\phi_1(r) = \frac{1}{2}r^2$ ($|r| \leq 1$), 否则 $\phi_1(r) = |r| - \frac{1}{2}$ 。

平方损失

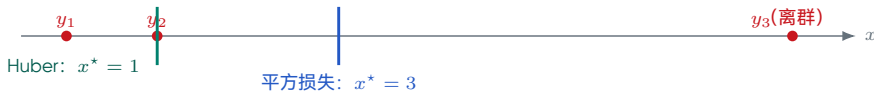
$$x_{\text{LS}}^* = 3, \quad f'_{\text{LS}}(0) = -9.$$

若取方向 $d = -f'(0) = 9$, 精确线搜索返回 $t^* = 1/3$ 。平方损失中, 单个样本的梯度贡献随残差线性增长。

Huber 损失

$$x_{\text{H}}^* = 1, \quad f'_{\text{H}}(0) = -2.$$

此时 $d = 2$, 精确线搜索返回 $t^* = 1/2$; 大残差的导数被限制在 $[-1, 1]$ 。



Huber 损失为 C^1 但并非处处 C^2 。梯度法与线搜索仍可使用; 标准 Newton 分析需平滑近似或广义 Hessian。

自编数值例; 延续 Lecture 02 的 robust regression

回溯为何终止

由于 Δx 是下降方向,

$$f(x + t\Delta x) = f(x) + t\nabla f(x)^\top \Delta x + o(t).$$

当 $t > 0$ 足够小时, 且 $0 < \alpha < 1$, 必有

$$f(x + t\Delta x) < f(x) + \alpha t \nabla f(x)^\top \Delta x.$$

因此回溯在有限次缩步后终止。若满足条件的步长区间是 $(0, t_0]$, 返回值满足

$$t = 1 \quad \text{或} \quad t \in (\beta t_0, t_0], \quad t \geq \min\{1, \beta t_0\}.$$

有边界的定义域

先缩步直到 $x + t\Delta x \in \text{dom } f$, 再检验充分下降。

常用参数

教材建议 $\alpha \in [0.01, 0.3]$, $\beta \in [0.1, 0.8]$ 。

应用例 5: 物流容量与回溯

总需求为 10, 两条并行线路的流量分别为 x 与 $10 - x$, 且容量均为 8, 故严格可行域为 $2 < x < 8$ 。以障碍参数 $\mu = 0.2$ 构造

$$f_{\mu}(x) = \frac{1}{2}x^2 + 0.1(10 - x)^2 - 0.2 \log(x - 2) - 0.2 \log(8 - x).$$

在 $x^{(0)} = 2.3$ 处, $f'_{\mu}(x^{(0)}) = 0.1284$ 。取下降方向 $d = -1$, $\alpha = 0.1$ 、 $\beta = 0.5$ 。

$$x^{(0)} = 2.3, \text{ 方向 } d = -1$$

应用例 5: 物流容量与回溯

总需求为 10, 两条并行线路的流量分别为 x 与 $10 - x$, 且容量均为 8, 故严格可行域为 $2 < x < 8$ 。以障碍参数 $\mu = 0.2$ 构造

$$f_{\mu}(x) = \frac{1}{2}x^2 + 0.1(10 - x)^2 - 0.2 \log(x - 2) - 0.2 \log(8 - x).$$

在 $x^{(0)} = 2.3$ 处, $f'_{\mu}(x^{(0)}) = 0.1284$ 。取下降方向 $d = -1$, $\alpha = 0.1$ 、 $\beta = 0.5$ 。

先检查定义域

$t = 1$ 与 $t = 0.5$ 分别给出 $x = 1.3, 1.8$, 跨过容量边界 $x = 2$, 无需评价对数项, 直接缩步。

$$x^{(0)} = 2.3, \text{ 方向 } d = -1$$



$t = 1, 0.5$: 越过 $x = 2$ 定义域拒绝

应用例 5: 物流容量与回溯

总需求为 10, 两条并行线路的流量分别为 x 与 $10 - x$, 且容量均为 8, 故严格可行域为 $2 < x < 8$ 。以障碍参数 $\mu = 0.2$ 构造

$$f_{\mu}(x) = \frac{1}{2}x^2 + 0.1(10 - x)^2 - 0.2 \log(x - 2) - 0.2 \log(8 - x).$$

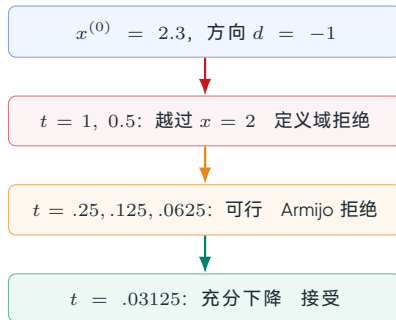
在 $x^{(0)} = 2.3$ 处, $f'_{\mu}(x^{(0)}) = 0.1284$ 。取下降方向 $d = -1$, $\alpha = 0.1$ 、 $\beta = 0.5$ 。

先检查定义域

$t = 1$ 与 $t = 0.5$ 分别给出 $x = 1.3, 1.8$, 跨过容量边界 $x = 2$, 无需评价对数项, 直接缩步。

再检查 Armijo 条件

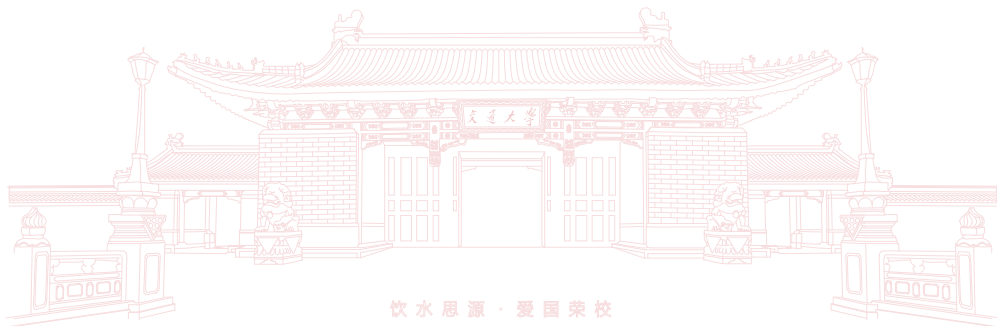
$t = 0.25, 0.125, 0.0625$ 均可行但下降不足;
 $t = 0.03125$ 首次满足充分下降条件。



自编数值例; 容量约束用于区分定义域检查与 Armijo 检查

04

梯度下降法



梯度法

欧氏范数下最自然的方向是负梯度:

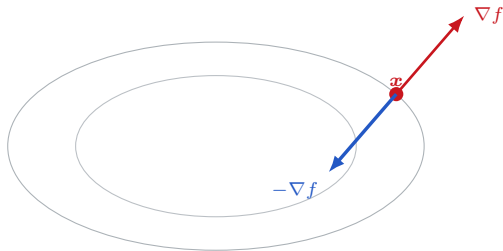
$$\Delta x = -\nabla f(x), \quad \nabla f(x)^\top \Delta x = -\|\nabla f(x)\|_2^2.$$

当 $\nabla f(x) \neq 0$ 时该内积严格为负; 若梯度为零, 则已满足驻点停止条件。

Algorithm 9.3

给定 $x \in \text{dom } f$, 重复:

1. $\Delta x \leftarrow -\nabla f(x)$;
2. 用精确或回溯线搜索选择 t ;
3. $x \leftarrow x + t\Delta x$;
4. 当 $\|\nabla f(x)\|_2 \leq \eta$ 时停止。

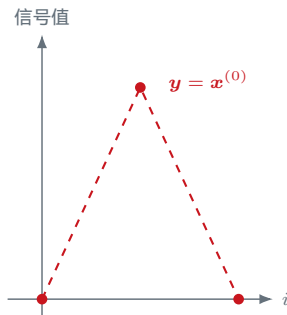


应用例 6: 信号平滑的一步更新

Lecture 02 的二次平滑在三个采样点上的最小模型为

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2 + \frac{\lambda}{2} \|D\mathbf{x}\|_2^2, \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad D = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \end{bmatrix}, \quad \lambda = \frac{1}{4}.$$

从观测本身 $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{y}$ 出发,



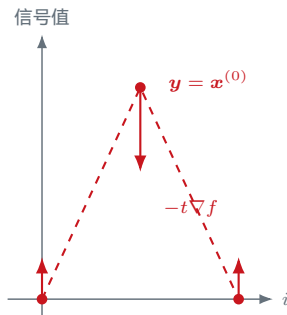
应用例 6: 信号平滑的一步更新

Lecture 02 的二次平滑在三个采样点上的最小模型为

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2 + \frac{\lambda}{2} \|D\mathbf{x}\|_2^2, \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad D = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \end{bmatrix}, \quad \lambda = \frac{1}{4}.$$

从观测本身 $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{y}$ 出发,

$$\nabla f(\mathbf{x}^{(0)}) = \lambda D^\top D \mathbf{y} = \begin{bmatrix} -0.5 \\ 1 \\ -0.5 \end{bmatrix}.$$



应用例 6: 信号平滑的一步更新

Lecture 02 的二次平滑在三个采样点上的最小模型为

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2 + \frac{\lambda}{2} \|D\mathbf{x}\|_2^2, \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad D = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \end{bmatrix}, \quad \lambda = \frac{1}{4}.$$

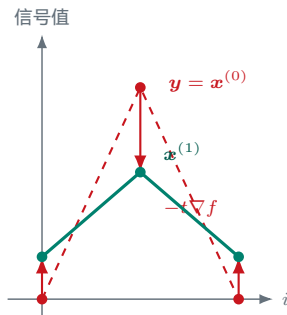
从观测本身 $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{y}$ 出发,

$$\nabla f(\mathbf{x}^{(0)}) = \lambda D^\top D \mathbf{y} = \begin{bmatrix} -0.5 \\ 1 \\ -0.5 \end{bmatrix}.$$

取 $t = 0.4$, 得到

$$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} - t \nabla f(\mathbf{x}^{(0)}) = \begin{bmatrix} 0.2 \\ 0.6 \\ 0.2 \end{bmatrix},$$

且 $f(\mathbf{x}^{(0)}) = 0.50$ 降至 $f(\mathbf{x}^{(1)}) = 0.20$ 。



自编数值例; 延续 Lecture 02 的 quadratic smoothing

沿负梯度的二次上界

假设 $mI \preceq \nabla^2 f(\mathbf{x}) \preceq MI$ 于 S , 并令

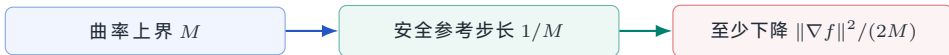
$$\tilde{f}(t) = f(\mathbf{x} - t\nabla f(\mathbf{x})).$$

由 Hessian 上界,

$$\tilde{f}(t) \leq f(\mathbf{x}) - t\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2 + \frac{Mt^2}{2}\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2. \quad (9.17)$$

右端关于 t 的二次函数在 $t = 1/M$ 处最小, 因此精确线搜索至少达到

$$f(\mathbf{x}^+) \leq f(\mathbf{x}) - \frac{1}{2M}\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2.$$



Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.3.1, equation (9.17)

精确搜索的线性收敛

由强凸性得到

$$\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2 \geq 2m(f(\mathbf{x}) - p^*).$$

代入单步下降界:

$$f(\mathbf{x}^+) - p^* \leq \left(1 - \frac{m}{M}\right) (f(\mathbf{x}) - p^*).$$

递推可得

$$f(\mathbf{x}^{(k)}) - p^* \leq c^k (f(\mathbf{x}^{(0)}) - p^*), \quad c = 1 - \frac{m}{M} < 1. \quad (9.18)$$

达到 ε -次优所需迭代次数满足

$$k \geq \frac{\log((f(\mathbf{x}^{(0)}) - p^*)/\varepsilon)}{\log(1/c)}. \quad (9.19)$$

当 M/m 很大时, $\log(1/c) \approx m/M$, 迭代次数随条件数近似线性增长。

回溯线搜索的收敛界

当 $0 \leq t \leq 1/M$ 时, 式 (9.17) 给出

$$\tilde{f}(t) \leq f(\mathbf{x}) - \frac{t}{2} \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2 \leq f(\mathbf{x}) - \alpha t \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2.$$

因此回溯返回

$$t = 1 \quad \text{或} \quad t \geq \frac{\beta}{M},$$

并且

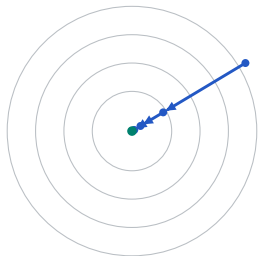
$$f(\mathbf{x}^+) \leq f(\mathbf{x}) - \min \left\{ \alpha, \frac{\alpha\beta}{M} \right\} \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2.$$

结合强凸性:

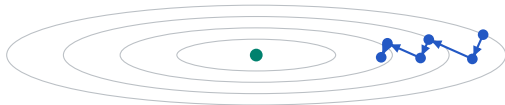
$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}^{(k)}) - p^* &\leq c^k (f(\mathbf{x}^{(0)}) - p^*), \\ c &= 1 - \min \left\{ 2m\alpha, \frac{2\alpha\beta m}{M} \right\} < 1. \end{aligned}$$

回溯仍保证线性收敛, 条件数仍进入收敛因子。

条件数与锯齿



$$Q = I, \kappa = 1$$



$$Q = \text{diag}(1, 25), \kappa = 25$$

同一欧氏梯度规则的两几何

等高线接近圆时，负梯度直接指向中心；狭长等高线使方向在陡峭轴两侧来回切换，沿平缓轴推进很慢。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.3.2, Figures 9.2 and 9.7–9.8; qualitative redraw

二维二次问题

考虑

$$f(x_1, x_2) = \frac{1}{2}(x_1^2 + \gamma x_2^2), \quad \mathbf{x}^{(0)} = (\gamma, 1), \quad \gamma > 0.$$

最优点为 $\mathbf{0}$ ，条件数为

$$\kappa = \frac{\max\{1, \gamma\}}{\min\{1, \gamma\}} = \max\{\gamma, 1/\gamma\}.$$

采用精确线搜索时，教材给出闭式迭代：

$$x_1^{(k)} = \gamma \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \right)^k, \quad x_2^{(k)} = \left(-\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \right)^k,$$

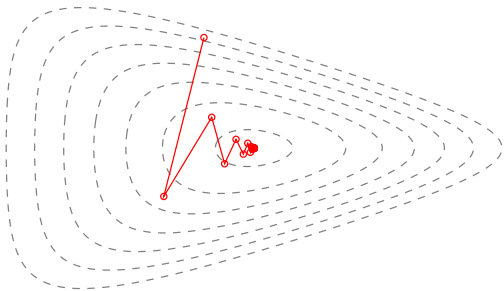
$$f(\mathbf{x}^{(k)}) = \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \right)^{2k} f(\mathbf{x}^{(0)}).$$

当 $\gamma = 1$ 时一步到达；当 $\gamma \gg 1$ 或 $\gamma \ll 1$ 时收敛显著变慢。

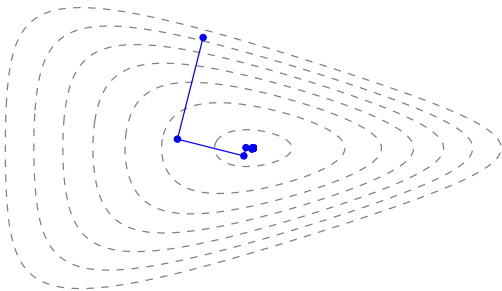
非二次二维例子

教材考虑

$$f(x_1, x_2) = e^{x_1+3x_2-0.1} + e^{x_1-3x_2-0.1} + e^{-x_1-0.1}. \quad (9.20)$$



回溯线搜索: $\alpha = 0.1$, $\beta = 0.7$ 。

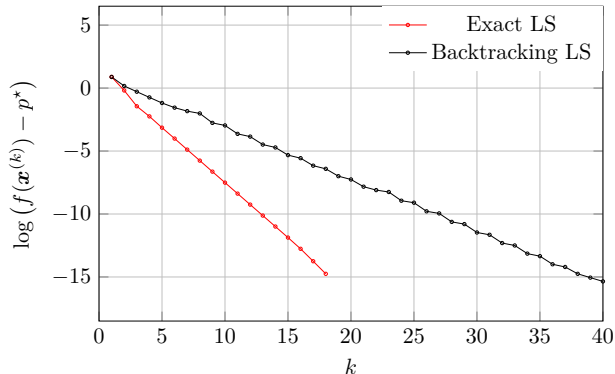


精确线搜索。

同一起点下，两种方法都近似线性收敛；精确线搜索更快，但每步的一维优化代价也更高。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.3.2, equation (9.20), Figures 9.3 and 9.5; trajectories redrawn from the textbook example

精确与回溯的误差比较



对于式 (9.20):

- 回溯线搜索约 20 步将误差从 10 降至 10^{-7} , 平均每步乘约 0.4;
- 精确线搜索约 15 步下降约 10^{-11} , 平均每步乘约 0.2;
- 半对数图上近似直线, 对应近似几何级数衰减。

判断

精确线搜索减少迭代次数, 但实际总耗时还取决于每次线搜索的计算量。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.3.2, Figure 9.4; qualitative reconstruction

一百维例子与参数影响

教材的 $n = 100, m = 500$ 例子为

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^\top \mathbf{x} - \sum_{i=1}^m \log(b_i - \mathbf{a}_i^\top \mathbf{x}). \quad (9.21)$$

收敛现象

- ▣ 回溯：约 175 次迭代下降 10^6 ;
- ▣ 精确：约 140 次迭代;
- ▣ 后期比前期慢，反映局部条件数改变。

参数实验

达到 10^{-5} 精度时：

- ▣ 固定 $\beta = 0.5$ ，较大的 $\alpha \in [0.2, 0.5]$ 通常更好;
- ▣ 固定 $\alpha = 0.1$ ， $\beta \approx 0.5$ 表现较好;
- ▣ 参数影响通常在约两倍范围内。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.3.2, equation (9.21), Figure 9.6

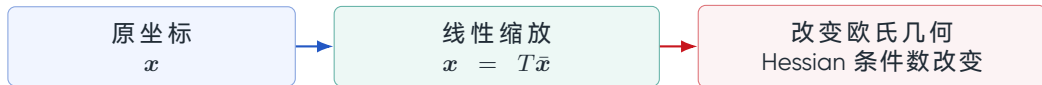
坐标缩放会改变梯度法

令 $x = T\bar{x}$, 其中

$$T = \text{diag}(1, \gamma^{1/n}, \gamma^{2/n}, \dots, \gamma^{(n-1)/n}).$$

则式 (9.21) 变为

$$\bar{f}(\bar{x}) = c^\top T\bar{x} - \sum_{i=1}^m \log(b_i - a_i^\top T\bar{x}). \quad (9.22)$$



教材实验中, 对角缩放达到 10:1 时迭代次数已超过 10^3 ; γ 很大或很小时, 迭代数与最优点 Hessian 条件数呈相似变化。

梯度法的结论

收敛形态

误差通常近似按几何级数下降，即半对数图上接近直线。

线搜索

精确线搜索常有改善，但相对回溯的收益通常有限。

主要瓶颈

收敛速度对 Hessian 或次水平集的条件数十分敏感。

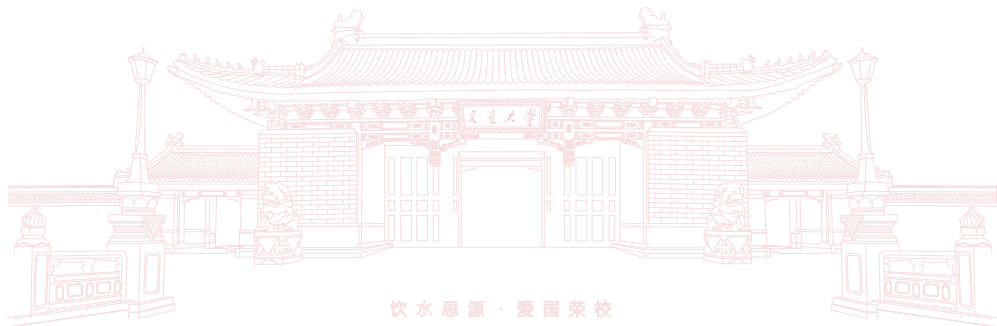
优势
实现简单，每步只需梯度与线搜索

引出一般度量

不足
中等病态时也可能需要大量迭代

05

一般范数下的最速下降



饮水思源 · 爱国荣校

最陡取决于度量

一阶模型为

$$f(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{v}) \approx f(\boldsymbol{x}) + \nabla f(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{v}.$$

若不限制 $\boldsymbol{v}$ 的大小，线性项可任意负。给定任意范数 $\|\cdot\|$ ，定义

$$\Delta \boldsymbol{x}_{\text{nsd}} = \operatorname{argmin}_{\|\boldsymbol{v}\| \leq 1} \nabla f(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{v}. \quad (9.23)$$

单位球决定允许方向

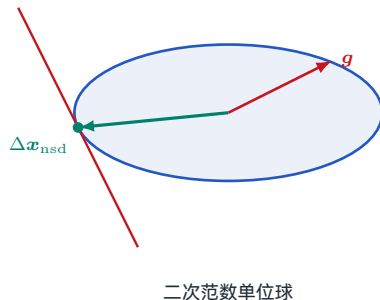
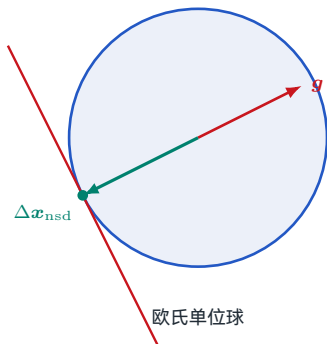
最优点是单位球在 $-\nabla f(\boldsymbol{x})$ 方向上的支撑点；不同范数的单位球不同，因而“最陡”的方向不同。

对偶范数给出最优值

$$\min_{\|\boldsymbol{v}\| \leq 1} \nabla f(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{v} = -\|\nabla f(\boldsymbol{x})\|_*.$$

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.4, equation (9.23)

单位球的支撑点



两图中的梯度相同；单位球改变后，支撑点及最速下降方向随之改变。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.4, Figures 9.9–9.10; qualitative redraw

最速下降步

将归一化方向按对偶范数缩放:

$$\Delta \mathbf{x}_{\text{sd}} = \|\nabla f(\mathbf{x})\|_* \Delta \mathbf{x}_{\text{nsd}}. \quad (9.24)$$

它满足

$$\nabla f(\mathbf{x})^\top \Delta \mathbf{x}_{\text{sd}} = -\|\nabla f(\mathbf{x})\|_*^2.$$

Algorithm 9.4

给定 $\mathbf{x} \in \text{dom } f$, 重复:

1. 计算所选范数下的 $\Delta \mathbf{x}_{\text{sd}}$;
2. 通过精确或回溯线搜索选择 t ;
3. 更新 $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} + t\Delta \mathbf{x}_{\text{sd}}$;
4. 检查停止准则。

精确线搜索下, 方向的正比例缩放不会改变射线, 因此归一化与否不影响下一迭代点。

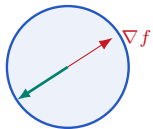
欧氏范数与二次范数

欧氏范数

当 $\|v\| = \|v\|_2$ 时,

$$\Delta x_{\text{sd}} = -\nabla f(x),$$

即普通梯度下降。



$P = I$: 负梯度

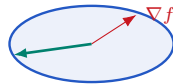
二次范数

对 $P \in \mathbb{S}_{++}^n$,

$$\|z\|_P = (z^\top P z)^{1/2}, \quad \|z\|_* = \|P^{-1/2} z\|_2.$$

相应最速下降步为

$$\Delta x_{\text{sd}} = -P^{-1} \nabla f(x). \quad (9.25)$$



$P \neq I$: 按曲率缩放

当 P 近似目标函数的局部曲率时, P^{-1} 使高曲率方向步长缩小、低曲率方向步长放大; 这就是预条件 (preconditioning)。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.4.1, equation (9.25)

坐标变换的解释

令

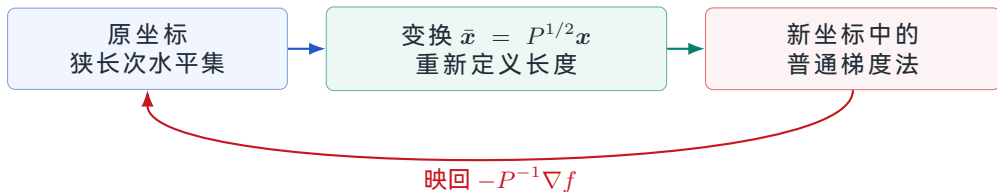
$$\bar{x} = P^{1/2}x, \quad \bar{f}(\bar{x}) = f(P^{-1/2}\bar{x}).$$

在新坐标中做欧氏梯度下降:

$$\Delta\bar{x} = -\nabla\bar{f}(\bar{x}) = -P^{-1/2}\nabla f(x).$$

映回原坐标得到

$$\Delta x = P^{-1/2}\Delta\bar{x} = -P^{-1}\nabla f(x).$$



Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.4.1, "Interpretation via change of coordinates"

ℓ_1 范数与坐标下降

设 i 满足

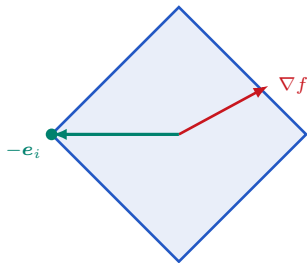
$$\|\nabla f(\mathbf{x})\|_\infty = \left| \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} \right|.$$

则 ℓ_1 单位球上的最速下降方向可取

$$\Delta \mathbf{x}_{\text{nsd}} = -\text{sign}\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right) \mathbf{e}_i,$$

非归一化步为

$$\Delta \mathbf{x}_{\text{sd}} = -\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} \mathbf{e}_i.$$



每次只更新梯度绝对值最大的一个坐标，因此线搜索可显著简化，甚至得到解析更新；这给出采用 Gauss–Southwell 选坐标规则的一种坐标下降法。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.4.2, Figure 9.10; qualitative redraw

应用例 7: 多特征回归的坐标选择

设一次回归迭代得到三个系数方向上的梯度

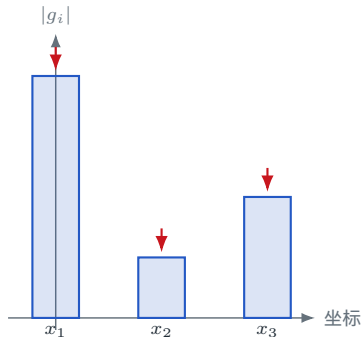
$$\nabla f(\mathbf{x}) = [4 \quad -1 \quad 2]^\top.$$

欧氏度量

$$\Delta \mathbf{x}_{\text{nsd}}^{(2)} = -\frac{1}{\sqrt{21}} \begin{bmatrix} 4 \\ -1 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

三个回归系数同时变化；方向与坐标系的量纲直接相关。

问题 若特征的物理量纲不同，直接比较 $|\partial f / \partial x_i|$ 是否公平？



所有分量共同构成 $-\nabla f$ 。

应用例 7: 多特征回归的坐标选择

设一次回归迭代得到三个系数方向上的梯度

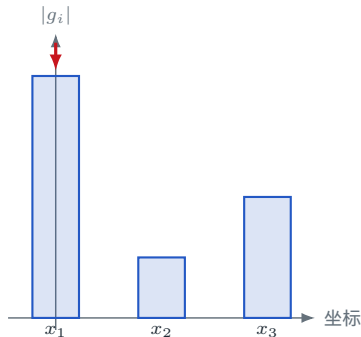
$$\nabla f(\mathbf{x}) = [4 \quad -1 \quad 2]^\top.$$

ℓ_1 度量

$$\|\nabla f\|_\infty = 4, \quad \Delta \mathbf{x}_{\text{nsd}}^{(1)} = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

当前只更新第一个系数；随后对该坐标做一维线搜索。

问题 若特征的物理量纲不同，直接比较 $|\partial f / \partial x_i|$ 是否公平？



ℓ_1 几何选择最大梯度分量。

自编数值例；与 Lecture 02 的 regression variable selection 对照

例 9.2: Frobenius 范数缩放

教材从矩阵缩放问题出发:

$$\min_{d>0} \sum_{i,j=1}^n M_{ij}^2 \frac{d_i^2}{d_j^2}.$$

作变量代换 $x_i = 2 \log d_i$, 等价于

$$\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) = \log \left(\sum_{i,j=1}^n M_{ij}^2 e^{x_i - x_j} \right).$$

固定其余分量时,

$$f(\mathbf{x}) = \log(\alpha_k + \beta_k e^{-x_k} + \gamma_k e^{x_k}),$$

一维最优解为

$$x_k \leftarrow \frac{1}{2} \log \frac{\beta_k}{\gamma_k}.$$

ℓ_1 -最速下降的三步

计算梯度; 选择 $|(\nabla f)_k| = \|\nabla f\|_\infty$; 用上式对第 k 个坐标做精确线搜索。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.4.2, Example 9.2

一般范数下的收敛

任意范数与欧氏范数等价, 存在 $\gamma, \tilde{\gamma} \in (0, 1]$ 使

$$\|z\| \geq \gamma \|z\|_2, \quad \|z\|_* \geq \tilde{\gamma} \|z\|_2.$$

沿最速下降方向有

$$f(\mathbf{x} + t\Delta\mathbf{x}_{\text{sd}}) \leq f(\mathbf{x}) - t\|\nabla f(\mathbf{x})\|_*^2 + \frac{Mt^2}{2\gamma^2} \|\nabla f(\mathbf{x})\|_*^2. \quad (9.26)$$

回溯返回 $t \geq \min\{1, \beta\gamma^2/M\}$, 因而

$$f(\mathbf{x}^+) - p^* \leq c(f(\mathbf{x}) - p^*),$$

$$c = 1 - 2m\alpha\tilde{\gamma}^2 \min\{1, \beta\gamma^2/M\} < 1.$$

改变范数不会破坏线性收敛, 但会显著改变收敛常数。

如何选择二次度量

若知道最优点 Hessian 的正定近似 $\hat{H} \succ 0$ 、 $\hat{H} \approx \nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ ，取

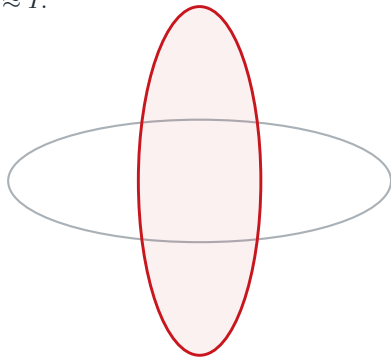
$$P = \hat{H}$$

可使变换后最优点附近的 Hessian

$$\hat{H}^{-1/2} \nabla^2 f(\mathbf{x}^*) \hat{H}^{-1/2} \approx I.$$



匹配的 P ：单位球贴合次水平集



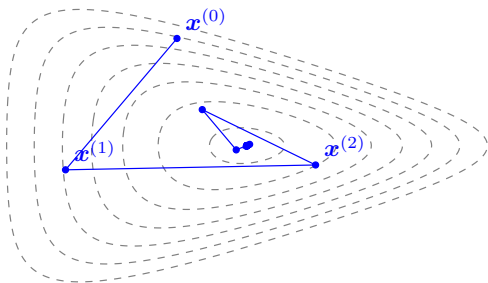
失配的 P ：变换后更加病态

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.4.4, choice of norm for steepest descent; qualitative redraw

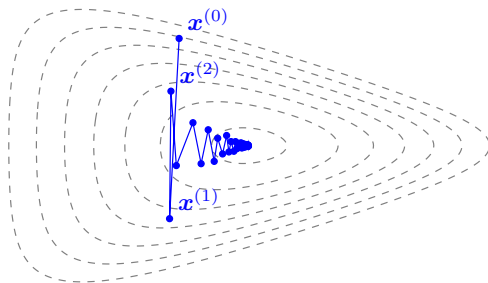
P_1 与 P_2 的路径

对式 (9.20), 教材比较

$$P_1 = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 8 \end{bmatrix}, \quad P_2 = \begin{bmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}, \quad \alpha = 0.1, \beta = 0.7.$$



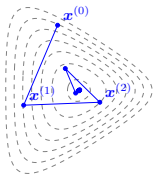
P_1 : 度量与次水平集较匹配。



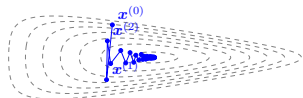
P_2 : 度量方向失配, 路径明显变慢。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.4.4, Figures 9.11–9.12; reconstruction of textbook example

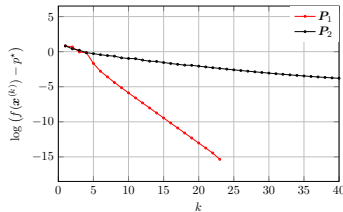
变换后的条件数



$P_1^{1/2}x$: 次水平集更接近圆。



$P_2^{1/2}x$: 次水平集更加狭长。



误差曲线显示 P_1 快、 P_2 慢。

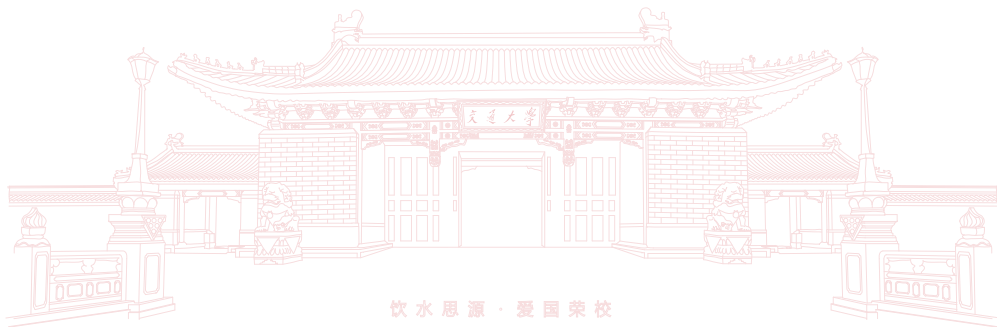
预条件的目标

选择 P 的实质，是让变换后的问题具有较温和的条件数；同一目标函数可以因度量不同而表现出完全不同的迭代速度。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.4.4, Figures 9.13–9.15; reconstruction of textbook example

06

Newton 法



饮水思源 · 爱国荣校

Newton 步

假设当前位置的 Hessian 满足 $\nabla^2 f(x) \succ 0$ 。在 x 处用二阶模型近似 f :

$$\hat{f}(x+v) = f(x) + \nabla f(x)^\top v + \frac{1}{2} v^\top \nabla^2 f(x) v. \quad (9.28)$$

该模型的极小点满足

$$\nabla^2 f(x) v = -\nabla f(x),$$

因此

$$\Delta x_{\text{nt}} = -\nabla^2 f(x)^{-1} \nabla f(x).$$

下降性

当 $\nabla^2 f(x) \succ 0$ 且梯度非零时,

$$\nabla f(x)^\top \Delta x_{\text{nt}} < 0.$$

二次函数

若 f 本身是严格凸二次函数, 二阶模型精确, 完整 Newton 步一步到达最优点。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.5.1, equation (9.28)

应用例 8: 逻辑回归的 Newton 步

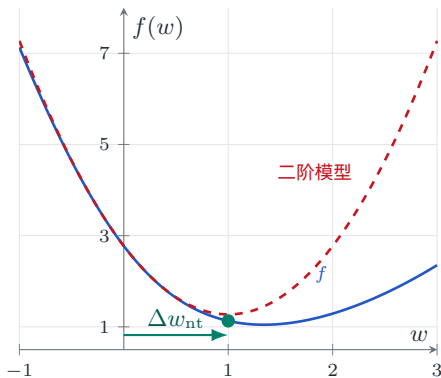
考虑一维带 ℓ_2 正则的逻辑回归:

$$a = (-2, -1, 1, 2), \quad y = (-1, -1, 1, 1), \quad \lambda = 0.5,$$

$$f(w) = \sum_{i=1}^4 \log(1 + e^{-y_i a_i w}) + \frac{\lambda}{2} w^2.$$

在 $w^{(0)} = 0$ 处,

$$f(0) = 4 \log 2 \approx 2.773.$$



应用例 8: 逻辑回归的 Newton 步

考虑一维带 ℓ_2 正则的逻辑回归:

$$a = (-2, -1, 1, 2), \quad y = (-1, -1, 1, 1), \quad \lambda = 0.5,$$

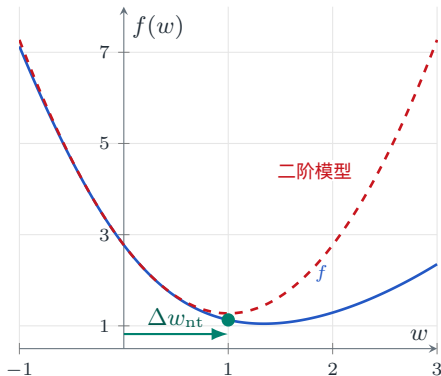
$$f(w) = \sum_{i=1}^4 \log(1 + e^{-y_i a_i w}) + \frac{\lambda}{2} w^2.$$

在 $w^{(0)} = 0$ 处,

$$f(0) = 4 \log 2 \approx 2.773.$$

由 $y_i a_i = (2, 1, 1, 2)$ 得

$$f'(0) = -3, \quad f''(0) = \frac{1}{4} \sum_i a_i^2 + \lambda = 3.$$



应用例 8: 逻辑回归的 Newton 步

考虑一维带 ℓ_2 正则的逻辑回归:

$$a = (-2, -1, 1, 2), \quad y = (-1, -1, 1, 1), \quad \lambda = 0.5,$$

$$f(w) = \sum_{i=1}^4 \log(1 + e^{-y_i a_i w}) + \frac{\lambda}{2} w^2.$$

在 $w^{(0)} = 0$ 处,

$$f(0) = 4 \log 2 \approx 2.773.$$

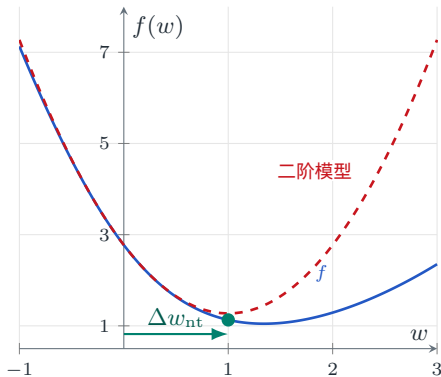
由 $y_i a_i = (2, 1, 1, 2)$ 得

$$f'(0) = -3, \quad f''(0) = \frac{1}{4} \sum_i a_i^2 + \lambda = 3.$$

因此

$$\Delta w_{\text{nt}} = -\frac{f'(0)}{f''(0)} = 1, \quad f(1) \approx 1.130.$$

这一步同时利用全部样本的一阶与二阶信息。



自编数值例; 逻辑损失是 Lecture 01B 中 log-sum-exp 的仿射复合

局部二次模型

以一维函数

$$f(z) = e^z - z$$

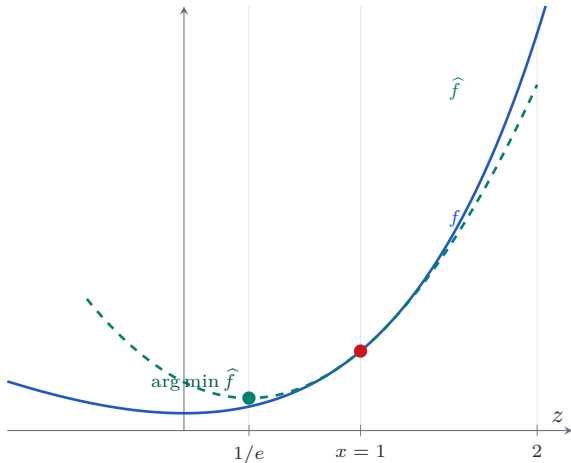
为例，在 $x = 1$ 处

$$f'(1) = e - 1, \quad f''(1) = e,$$

Newton 步为

$$\Delta x_{\text{nt}} = -\frac{e-1}{e}, \quad x + \Delta x_{\text{nt}} = \frac{1}{e}.$$

二次模型在 x 处与真实函数具有相同函数值、斜率和曲率。



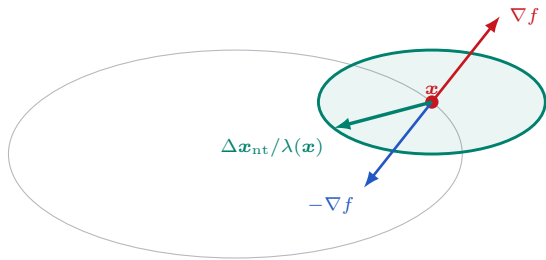
Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.5.1, Figure 9.16; self-contained quantitative example

Hessian 范数中的最速下降

当 $\nabla^2 f(x) \succ 0$ 时, Newton 步也是当前位置 Hessian 范数

$$\|u\|_{\nabla^2 f(x)} = \sqrt{u^\top \nabla^2 f(x) u}$$

下的最速下降步。



Hessian 在每一步根据局部曲率更新度量。
靠近最优时,

$$\nabla^2 f(x) \approx \nabla^2 f(x^*),$$

因而该度量接近理想的预条件器。

与 §9.4 的联系

二次范数最速下降使用固定 P ; Newton 法使用随位置变化的 $P = \nabla^2 f(x)$ 。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.5.1, Figure 9.17; qualitative redraw

线性化最优性条件

将驻点方程 $\nabla f(x^*) = 0$ 在 x 附近线性化:

$$\nabla f(x + v) \approx \nabla f(x) + \nabla^2 f(x)v = 0.$$

解得 $v = \Delta x_{\text{nt}}$ 。一维时, Newton 更新就是用 f' 的切线零点近似真实零点。

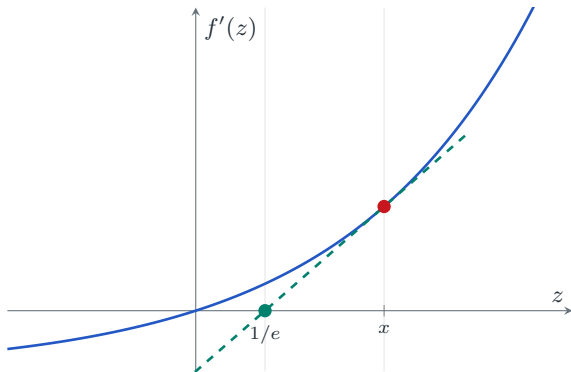
对于 $f(z) = e^z - z$,

$$f'(z) = e^z - 1.$$

在 $x = 1$ 处的切线为

$$f'(1) + f''(1)(z - 1),$$

其零点为 $z = 1/e$ 。



Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.5.1, Figure 9.18; self-contained quantitative example

仿射不变性

设 $T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 非奇异, $\bar{f}(\mathbf{y}) = f(T\mathbf{y})$, 且 $\mathbf{x} = T\mathbf{y}$ 。则

$$\nabla \bar{f}(\mathbf{y}) = T^\top \nabla f(\mathbf{x}), \quad \nabla^2 \bar{f}(\mathbf{y}) = T^\top \nabla^2 f(\mathbf{x}) T.$$

因此新坐标下的 Newton 步为

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{y}_{\text{nt}} &= -(T^\top \nabla^2 f(\mathbf{x}) T)^{-1} T^\top \nabla f(\mathbf{x}) \\ &= T^{-1} \Delta \mathbf{x}_{\text{nt}}. \end{aligned}$$

于是

$$\boxed{\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}_{\text{nt}} = T(\mathbf{y} + \Delta \mathbf{y}_{\text{nt}})}.$$

线性坐标变换只重新描述同一个 Newton 迭代; 这与欧氏梯度法对缩放高度敏感形成鲜明对比。

Newton decrement

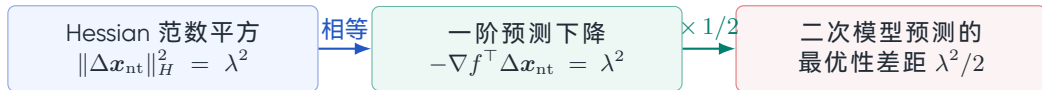
以下假设 $\nabla^2 f(x) \succ 0$ 。定义

$$\lambda(x) = \sqrt{\nabla f(x)^\top \nabla^2 f(x)^{-1} \nabla f(x)}.$$

它具有三个等价解释：

$$\lambda(x)^2 = \Delta x_{\text{nt}}^\top \nabla^2 f(x) \Delta x_{\text{nt}} = -\nabla f(x)^\top \Delta x_{\text{nt}}, \quad (9.29-9.30)$$

$$f(x) - \min_y \hat{f}(y) = \frac{1}{2} \lambda(x)^2.$$



Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.5.1, equations (9.29)–(9.30)

阻尼 Newton 法

Algorithm 9.5

假设 $\nabla^2 f$ 在定义域内正定。给定 $x \in \text{dom } f$ 与容差 $\varepsilon > 0$ ，重复：

1. 解 Newton 方程

$$\nabla^2 f(x) \Delta x_{\text{nt}} = -\nabla f(x), \quad \lambda^2 = -\nabla f(x)^\top \Delta x_{\text{nt}};$$

2. 若 $\lambda^2/2 \leq \varepsilon$ ，停止；

3. 用回溯线搜索选择 t ；

4. $x \leftarrow x + t \Delta x_{\text{nt}}$ 。

实现提示

实际计算解线性方程组，不显式形成 Hessian 的逆矩阵。§9.7 将讨论分解与结构利用。

经典收敛分析的假设

在初始次水平集 S 上假设

$$mI \preceq \nabla^2 f(\mathbf{x}) \preceq MI,$$

并增加 Hessian 的 Lipschitz 条件

$$\|\nabla^2 f(\mathbf{x}) - \nabla^2 f(\mathbf{y})\|_2 \leq L\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2, \quad \mathbf{x}, \mathbf{y} \in S. \quad (9.31)$$

m

最小曲率；保证唯一解与 Hessian 可逆。

M

最大曲率；控制安全步长与模型上界。

L

曲率随位置变化的速度；衡量二次模型在局部的可信范围。

二次函数满足 $L = 0$ ，其局部二次模型在全局都精确；后续含 $1/L$ 的界只讨论 $L > 0$ 。

两个收敛阶段

存在 $0 < \eta \leq m^2/L$ 与 $\gamma > 0$, 使得:

$$\|\nabla f(\mathbf{x}^{(k)})\|_2 \geq \eta \implies f(\mathbf{x}^{(k+1)}) - f(\mathbf{x}^{(k)}) \leq -\gamma, \quad (9.32)$$

$$\|\nabla f(\mathbf{x}^{(k)})\|_2 < \eta \implies t^{(k)} = 1, \quad \frac{L}{2m^2} \|\nabla f(\mathbf{x}^{(k+1)})\|_2 \leq \left(\frac{L}{2m^2} \|\nabla f(\mathbf{x}^{(k)})\|_2 \right)^2. \quad (9.33)$$

阻尼阶段: 每步至少下降固定量

纯 Newton 阶段: 单位步, 误差平方


$$\|\nabla f\|_2 \approx \eta$$

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.5.3, equations (9.32)–(9.33)

阻尼阶段的下降量

由 Hessian 上界与 $\lambda^2 \geq m \|\Delta \mathbf{x}_{\text{nt}}\|_2^2$,

$$f(\mathbf{x} + t\Delta \mathbf{x}_{\text{nt}}) \leq f(\mathbf{x}) - t\lambda^2 + \frac{Mt^2}{2m}\lambda^2.$$

参考步长 $\hat{t} = m/M$ 满足回溯条件, 故实际步长

$$t \geq \frac{\beta m}{M}.$$

又因

$$\lambda^2 = \nabla f^\top \nabla^2 f^{-1} \nabla f \geq \frac{1}{M} \|\nabla f\|_2^2,$$

当 $\|\nabla f\|_2 \geq \eta$ 时,

$$f(\mathbf{x}^+) - f(\mathbf{x}) \leq -\alpha\beta\eta^2 \frac{m}{M^2} \equiv -\gamma. \quad (9.38)$$

阻尼阶段因而最多持续 $(f(\mathbf{x}^{(0)}) - p^*)/\gamma$ 步。

单位步何时被接受

Hessian 的 Lipschitz 性给出沿 Newton 方向的三阶余项上界:

$$f(\boldsymbol{x} + \Delta \boldsymbol{x}_{\text{nt}}) \leq f(\boldsymbol{x}) - \frac{1}{2} \lambda(\boldsymbol{x})^2 + \frac{L}{6m^{3/2}} \lambda(\boldsymbol{x})^3. \quad (9.39)$$

若

$$\|\nabla f(\boldsymbol{x})\|_2 \leq \eta \leq 3(1 - 2\alpha) \frac{m^2}{L},$$

则三阶项足够小, 进而

$$f(\boldsymbol{x} + \Delta \boldsymbol{x}_{\text{nt}}) \leq f(\boldsymbol{x}) - \alpha \lambda(\boldsymbol{x})^2.$$

回溯因此立即接受 $t = 1$ 。此后 Newton 步不再被阻尼, 算法进入纯 Newton 阶段。

二次收敛

完整 Newton 步满足

$$\begin{aligned}\|\nabla f(\mathbf{x}^+)\|_2 &= \left\| \int_0^1 (\nabla^2 f(\mathbf{x} + s\Delta\mathbf{x}_{\text{nt}}) - \nabla^2 f(\mathbf{x})) \Delta\mathbf{x}_{\text{nt}} ds \right\|_2 \\ &\leq \frac{L}{2} \|\Delta\mathbf{x}_{\text{nt}}\|_2^2 \leq \frac{L}{2m^2} \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2.\end{aligned}$$

令

$$\eta = \min\{1, 3(1 - 2\alpha)\} \frac{m^2}{L},$$

则一旦 $\|\nabla f\|_2 < \eta$ ，后续梯度范数近似每步平方。

数值含义

进入局部阶段后，正确数字的位数近似每步翻倍；高精度通常只需再进行少量迭代。

经典复杂度界

阻尼阶段的步数至多

$$\frac{f(\mathbf{x}^{(0)}) - p^*}{\gamma},$$

二次收敛阶段达到 $f(\mathbf{x}) - p^* \leq \varepsilon$ 还需至多

$$\log_2 \log_2(\varepsilon_0/\varepsilon), \quad \varepsilon_0 = \frac{2m^3}{L^2}.$$

总迭代次数界为

$$\frac{f(\mathbf{x}^{(0)}) - p^*}{\gamma} + \log_2 \log_2(\varepsilon_0/\varepsilon). \quad (9.36)$$

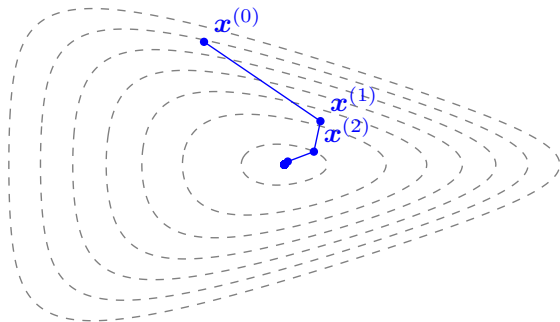
代入教材构造的 η, γ 可得

$$6 + \frac{M^2 L^2 / m^5}{\alpha \beta \min\{1, 9(1 - 2\alpha)^2\}} (f(\mathbf{x}^{(0)}) - p^*). \quad (9.40)$$

该界证明了收敛，但依赖通常未知且随坐标改变的 m, M, L ，这正是 §9.6 的动机。

二维 Newton 轨迹

对式 (9.20) 使用 Newton 法与回溯线搜索, $\alpha = 0.1$, $\beta = 0.7$ 。



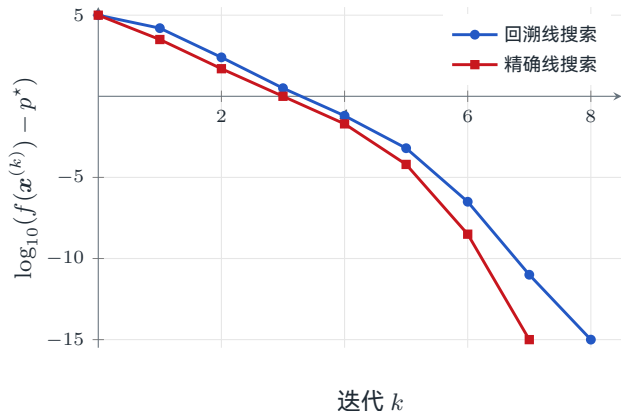
虚线给出目标函数的次水平集, 蓝线给出 Newton 轨迹; 每一步的局部二次模型使方向自动适配当前位置的曲率。

- ▣ 约 5 步达到很高精度;
- ▣ 最后一步将误差从约 10^{-5} 降至 10^{-10} ;
- ▣ 局部二次收敛清晰可见。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.5.4, Figures 9.19–9.20; reconstruction of textbook example

一百维 Newton 例子

教材对式 (9.21) 的 $n = 100$ 问题比较回溯与精确线搜索。



- 回溯约 8 步达到高精度;
- 精确线搜索只快约 1 步;
- 回溯线搜索前两步各回退一次, 之后均接受 $t = 1$;
- 教材建议常用 $\alpha = 0.01, \beta = 0.5$ 。

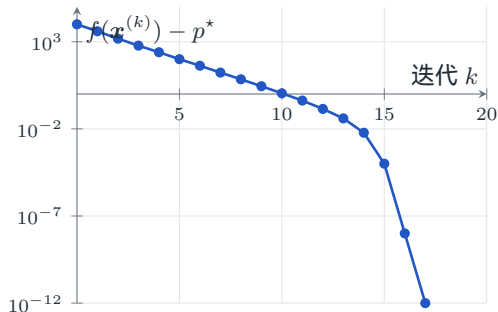
Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.5.4, Figures 9.21–9.22; qualitative redraw of the reported behavior

一万维 Newton 例子

教材进一步考虑 $n = 10000, m = 100000$ 的稀疏问题

$$\min_{\mathbf{x}} - \sum_{i=1}^n \log(1 - x_i^2) - \sum_{i=1}^m \log(b_i - \mathbf{a}_i^\top \mathbf{x}).$$

其定义域由 $|x_i| < 1$ ($i = 1, \dots, n$) 与 $\mathbf{a}_j^\top \mathbf{x} < b_j$ ($j = 1, \dots, m$) 给出。



- ▣ 约 13 步阻尼/近线性阶段;
- ▣ 再用 4-5 步达到极高精度;
- ▣ 变量维数大幅增加, 迭代次数只温和变化;
- ▣ 每步代价则取决于稀疏线性代数。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.5.4, Figure 9.23; qualitative redraw from the reported iteration behavior

仿射缩放实验

对式 (9.22) 的缩放族, γ 使梯度法的条件数与迭代次数剧烈变化。Newton 法使用

$$\alpha = 0.01, \quad \beta = 0.5,$$

在

$$10^{-10} \leq \gamma \leq 10^{10}$$

的整个范围内均用 9 次迭代求解到更高精度。

精确算术

Newton 步、decrement、线搜索和停止准则都保持仿射不变。



缩放前：欧氏梯度受长轴影响



有限精度

坐标缩放仍会影响线性方程求解的数值稳定性；它对 Newton 法主要是线性代数问题。



缩放后：几何接近各向同性

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §9.5.4, “Affine invariance of Newton’s method”

Newton 法的取舍

优势

- ▣ 通常收敛快，局部二次收敛；
- ▣ 仿射不变，对坐标缩放不敏感；
- ▣ 在教材的结构化实例中，迭代次数随维数增长较温和；
- ▣ 对线搜索参数不太敏感。

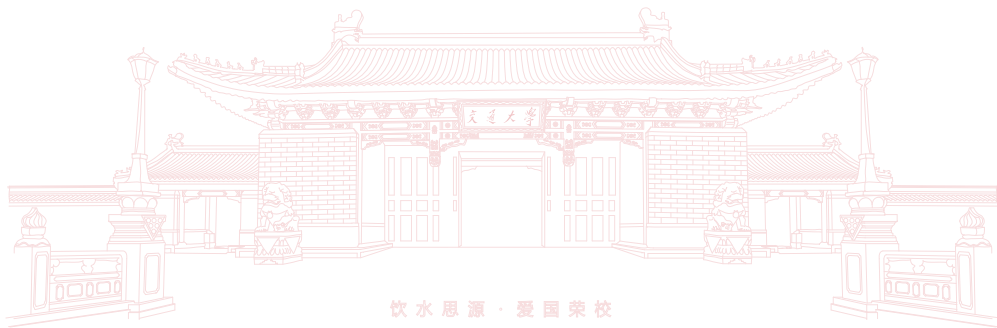
主要代价

- ▣ 形成并存储 Hessian；
- ▣ 求解 $\nabla^2 f \Delta x = -\nabla f$ ；
- ▣ 大规模问题必须利用带状、稀疏或低秩结构。

经典分析仍依赖未知的 m, M, L 。自协调性将给出与 Newton 法一样仿射不变、且不含未知曲率常数的分析。

07

自协调函数

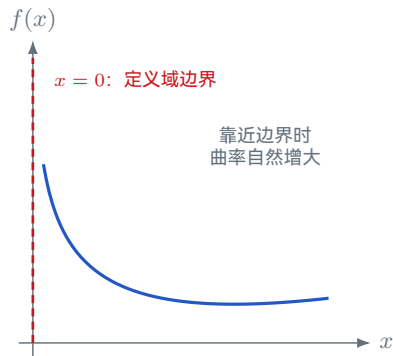


自协调性

在 **Newton 法** 的通常分析中，收敛界依赖强凸常数及 Hessian 的 Lipschitz 常数；这些常数往往未知，且会随坐标缩放而改变。

自协调性 (self-concordance) 以三阶导数和二阶导数的相对关系刻画函数的局部形状。它带来：

- ▣ 仿射坐标变化下不变的 Newton decrement；
- ▣ 不含未知曲率常数的停止准则与迭代复杂度；
- ▣ 对数障碍 (log barrier) 和 $-\log \det$ 的统一分析。

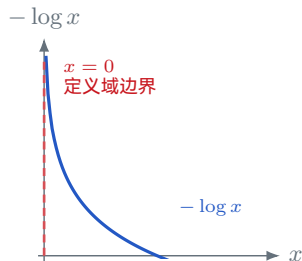


一维定义

定义在开区间 $\text{dom } f \subseteq \mathbb{R}$ 上的凸三次连续可微函数 $f : \text{dom } f \rightarrow \mathbb{R}$ 称为**自协调**，若对所有 $x \in \text{dom } f$,

$$|f'''(x)| \leq 2(f''(x))^{3/2}. \quad (9.41)$$

- ▣ 它不是单纯限制 $|f'''|$ 的大小，而是以局部曲率 f'' 为尺度。
- ▣ 常数 2 是规范化选择：若 $k > 0$ 且 $|f'''| \leq k(f'')^{3/2}$ ，则 $(k^2/4)f$ 满足标准形式； $k = 0$ 时已满足标准式。
- ▣ 线性与凸二次函数的三阶导数为零，因此自协调。



Boyd & Vandenberghe, Section 9.6.1, equation (9.41)

沿每一条直线检验

对定义在开凸域 $\text{dom } f \subseteq \mathbb{R}^n$ 上的凸三次连续可微函数 $f : \text{dom } f \rightarrow \mathbb{R}$ ，要求对每个 $\mathbf{x} \in \text{dom } f$ 和方向 $\mathbf{v}$ ，一维限制

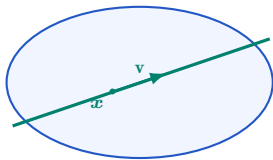
$$\tilde{f}(t) = f(\mathbf{x} + t\mathbf{v})$$

在 $\{t \mid \mathbf{x} + t\mathbf{v} \in \text{dom } f\}$ 上都满足 (9.41)。因此定义本身不依赖于坐标轴的选择。

以一维仿射变化 $g(t) = f(at + b)$ 为例，

$$g''(t) = a^2 f''(at + b), \quad g'''(t) = a^3 f'''(at + b).$$

自协调不等式两边都乘以 $|a|^3$ ，故保持不变。这是**仿射不变性** (affine invariance)。



$$t \mapsto \mathbf{x} + t\mathbf{v}$$

例 9.3: 两个基本一维函数

负对数 (negative logarithm)

$$f(x) = -\log x, \quad f''(x) = x^{-2}, \\ f'''(x) = -2x^{-3}.$$

故

$$\frac{|f'''(x)|}{2(f''(x))^{3/2}} = 1.$$

不等式恰好取等；这正是障碍函数在边界附近急剧上升的定量描述。

负熵加负对数

$$f(x) = x \log x - \log x, \\ f''(x) = \frac{x+1}{x^2}, \quad f'''(x) = -\frac{x+2}{x^3}.$$

比值为

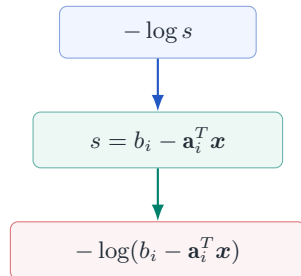
$$\frac{x+2}{2(x+1)^{3/2}} \leq 1 \quad (x > 0),$$

其上确界为 1，并在 $x \rightarrow 0^+$ 时趋近。

自协调函数的演算规则

1. 若 f 自协调, 且 $a \geq 1$, 则 af 自协调;
2. 若 f_1, f_2 自协调, 则 $f_1 + f_2$ 自协调;
3. 若 f 自协调, 则 $x \mapsto f(Ax + b)$ 自协调。

前两条使许多**可加的障碍项**可直接组合; 第三条将一维 $-\log$ 推广到线性不等式和矩阵值仿射映射。



例 9.4–9.6: 障碍函数的来源

线性不等式

$$-\sum_{i=1}^m \log(b_i - \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}), \quad \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} < b_i.$$

每一项由 $-\log$ 与仿射函数复合而来。

正定矩阵锥

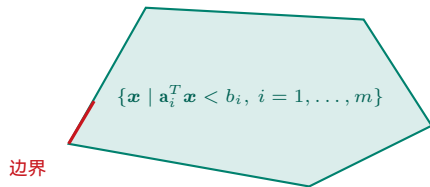
$$f(X) = -\log \det X, \quad X \succ 0.$$

沿 $X + tV$ 对角化后, 成为
 $\sum_i -\log(1 + t\lambda_i)$ 。

凹二次式的对数

$$q(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T P \mathbf{x} + \mathbf{q}^T \mathbf{x} + r,$$
$$f(\mathbf{x}) = -\log q(\mathbf{x}).$$

$P \in -\mathbb{S}_+^n$, 定义域为 $q(\mathbf{x}) > 0$;
一维限制可分解为两个负对数项之和。



例 9.7: 与对数复合的规则

若凸函数 $g: \mathbb{R}_{++} \rightarrow \mathbb{R}$ 满足

$$|g'''(x)| \leq \frac{3g''(x)}{x},$$

则

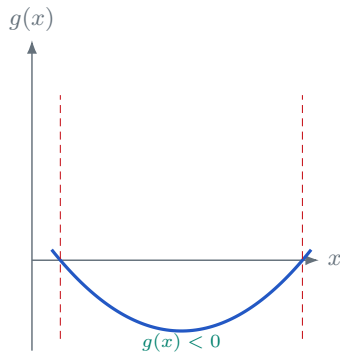
$$f(x) = -\log(-g(x)) - \log x$$

在 $\{x > 0 \mid g(x) < 0\}$ 上自协调。

教材给出满足条件的 g :

$$\begin{aligned} & -x^p \quad (0 < p \leq 1), \quad -\log x, \quad x \log x, \\ & x^p \quad (-1 \leq p \leq 0), \quad \frac{(ax+b)^2}{x}. \end{aligned}$$

再加任意凸二次函数 $ax^2 + bx + c$ ($a \geq 0$) 仍保留该条件。



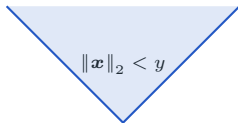
Boyd & Vandenberghe, Section 9.6.2 and Example 9.7

例 9.8: 常见约束的障碍

复合规则可识别出下列自协调障碍:

二阶锥

$$f(x, y) = -\log(y^2 - x^T x), \\ \|x\|_2 < y.$$



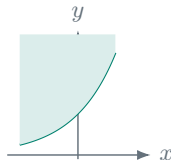
幂锥式约束

$$f(x, y) = -2 \log y \\ - \log(y^{2/p} - x^2), \\ |x|^p < y, \quad p \geq 1.$$

指数锥式约束

$$f(x, y) = -\log y \\ - \log(\log y - x), \\ e^x < y.$$

非线性边界也可由同一规则处理。



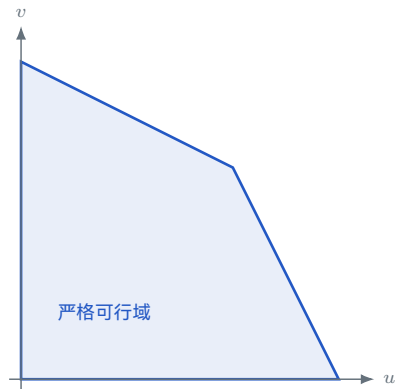
Boyd & Vandenberghe, Example 9.8

应用例 9：生产计划的障碍路径

回到 Lecture 01C 的生产计划：收益为 $3u + 2v$ ，约束为 $2u + v \leq 8$ 、 $u + 2v \leq 8$ 、 $u, v \geq 0$ 。对 $t > 0$ 构造无约束子问题

$$F_t(u, v) = -t(3u + 2v) - \log u - \log v \\ - \log(8 - 2u - v) - \log(8 - u - 2v).$$

定义域是原问题的严格可行域。 $-\log$ 障碍之和是自协调函数，线性收益项不改变二阶与三阶导数。



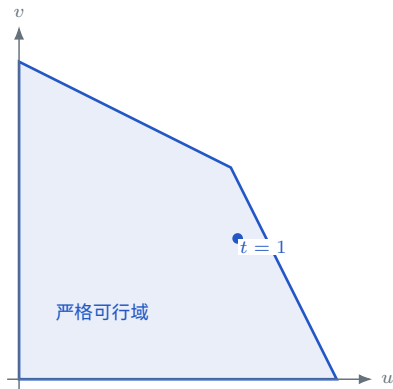
应用例 9：生产计划的障碍路径

回到 Lecture 01C 的生产计划：收益为 $3u + 2v$ ，约束为 $2u + v \leq 8$ 、 $u + 2v \leq 8$ 、 $u, v \geq 0$ 。对 $t > 0$ 构造无约束子问题

$$F_t(u, v) = -t(3u + 2v) - \log u - \log v \\ - \log(8 - 2u - v) - \log(8 - u - 2v).$$

定义域是原问题的严格可行域。 $-\log$ 障碍之和是自协调函数，线性收益项不改变二阶与三阶导数。

$t = 1$: $x_t \approx (2.7529, 1.7734)$ 。



应用例 9：生产计划的障碍路径

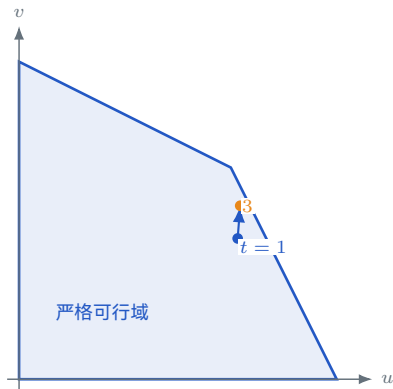
回到 Lecture 01C 的生产计划：收益为 $3u + 2v$ ，约束为 $2u + v \leq 8$ 、 $u + 2v \leq 8$ 、 $u, v \geq 0$ 。对 $t > 0$ 构造无约束子问题

$$F_t(u, v) = -t(3u + 2v) - \log u - \log v \\ - \log(8 - 2u - v) - \log(8 - u - 2v).$$

定义域是原问题的严格可行域。 $-\log$ 障碍之和是自协调函数，线性收益项不改变二阶与三阶导数。

$t = 1$: $\mathbf{x}_t \approx (2.7529, 1.7734)$ 。

$t = 3$: $\mathbf{x}_t \approx (2.7848, 2.1858)$ 。



应用例 9：生产计划的障碍路径

回到 Lecture 01C 的生产计划：收益为 $3u + 2v$ ，约束为 $2u + v \leq 8$ 、 $u + 2v \leq 8$ 、 $u, v \geq 0$ 。对 $t > 0$ 构造无约束子问题

$$F_t(u, v) = -t(3u + 2v) - \log u - \log v \\ - \log(8 - 2u - v) - \log(8 - u - 2v).$$

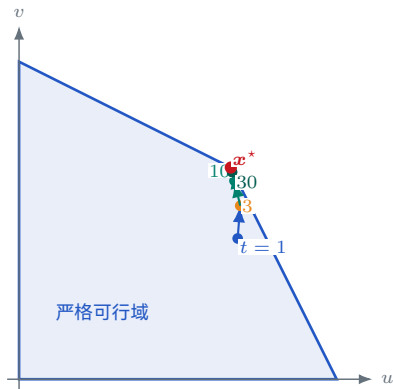
定义域是原问题的严格可行域。 $-\log$ 障碍之和是自协调函数，线性收益项不改变二阶与三阶导数。

$t = 1$: $x_t \approx (2.7529, 1.7734)$ 。

$t = 3$: $x_t \approx (2.7848, 2.1858)$ 。

$t = 10, 30$ 时依次为 $(2.7129, 2.4997)$ 、 $(2.6830, 2.6092)$ ，逐步逼近

$$x^* = (8/3, 8/3).$$



自编数值例；延续 Lecture 01C 的 production planning

局部范数与 Newton decrement

对严格凸自协调函数 f ，在 x 处以 Hessian 定义局部范数

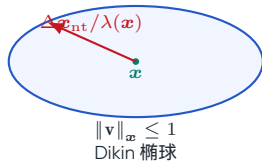
$$\|\mathbf{v}\|_x = (\mathbf{v}^T \nabla^2 f(x) \mathbf{v})^{1/2}, \quad \lambda(x) = (\mathbf{g}^T \nabla^2 f(x)^{-1} \mathbf{g})^{1/2}, \quad \mathbf{g} = \nabla f(x).$$

Newton decrement 同时满足 ($\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$)

$$\frac{-\mathbf{v}^T \mathbf{g}}{\|\mathbf{v}\|_x} \leq \lambda(x),$$

非驻点时，在 $\mathbf{v} = \Delta \mathbf{x}_{\text{nt}}$ 时取等号。

它是最陡下降的一阶收益，以当前位置的曲率度量；仿射变量代换下数值不变。



局部曲率不会突变

对一维严格凸自协调函数，自协调条件等价地给出

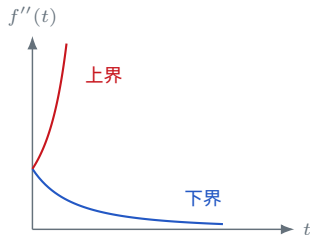
$$\left| \frac{d}{dt} (f''(t))^{-1/2} \right| \leq 1. \quad (9.45)$$

若 $t \geq 0$ 且 $[0, t] \subseteq \text{dom } f$ ，则下界成立；当另有 $t < (f''(0))^{-1/2}$ 时，上界也成立：

$$\frac{f''(0)}{(1 + t\sqrt{f''(0)})^2} \leq f''(t) \leq \frac{f''(0)}{(1 - t\sqrt{f''(0)})^2}. \quad (9.46)$$

这组界解释了局部范数的作用：只要移动距离相对于 $(f''(0))^{-1/2}$ 足够小，二阶曲率可被显式控制。

在多维情形，沿 $t \mapsto x + tv$ 应用同一结论；不需要预先知道全局强凸常数。



Boyd & Vandenberghe, Section 9.6.3, equations (9.45)–(9.46)

以 decrement 控制最优性间隙

对严格凸自协调函数，若 $\lambda(x) < 1$ ，则

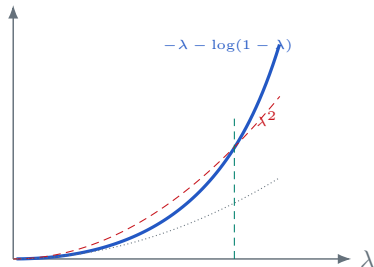
$$p^* \geq f(x) + \lambda(x) + \log(1 - \lambda(x)). \quad (9.49)$$

当 $\lambda(x) \leq 0.68$ 时，

$$f(x) - p^* \leq \lambda(x)^2. \quad (9.50)$$

因此以 $\lambda(x)^2 \leq \epsilon$ 为停止准则 ($\epsilon < 0.68^2$)，可直接保证 ϵ -次优。

二次模型给出的估计为 $\lambda^2/2$ ；自协调性说明，将它乘以 2 已是严格的上界。



Boyd & Vandenberghe, Section 9.6.3, equations (9.49)–(9.50)

自协调 Newton 法的两阶段行为

设 f 严格凸、自协调且有下界，初始次水平集闭合；采用 $0 < \alpha < 1/2$, $0 < \beta < 1$ 的 backtracking line search。存在只依赖 α, β 的 $\eta \in (0, 1/4]$ 与 $\gamma > 0$ ，使得：

阻尼阶段 (damped phase)

若 $\lambda(\mathbf{x}^{(k)}) > \eta$ ，则

$$f(\mathbf{x}^{(k+1)}) - f(\mathbf{x}^{(k)}) \leq -\gamma.$$

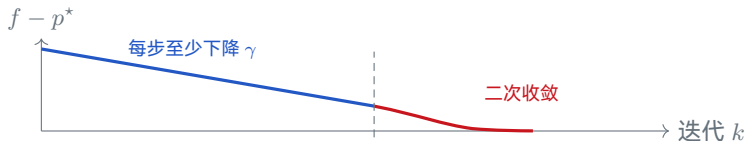
每一步有固定的函数值下降。

全步阶段 (full-step phase)

若 $\lambda(\mathbf{x}^{(k)}) \leq \eta$ ，线搜索接受 $t = 1$ ，且

$$2\lambda(\mathbf{x}^{(k+1)}) \leq (2\lambda(\mathbf{x}^{(k)}))^2.$$

decrement 呈二次收敛。



Boyd & Vandenberghe, Section 9.6.4, equations (9.51)–(9.52)

显式复杂度与数值表现

在上一页的假设下，阻尼阶段最多需要

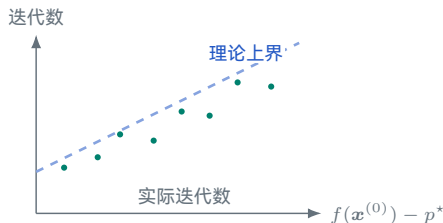
$$\frac{f(x^{(0)}) - p^*}{\gamma}$$

步；进入全步阶段后，再经过 $\log_2 \log_2(1/\epsilon)$ 步即可保证 $f(x) - p^* \leq \epsilon$ 。

对线性不等式的 log barrier，教材实验采用 $\alpha = 0.1, \beta = 0.8, \epsilon = 10^{-10}$ ；理论上界可写为

$$375(f(x^{(0)}) - p^*) + 6.$$

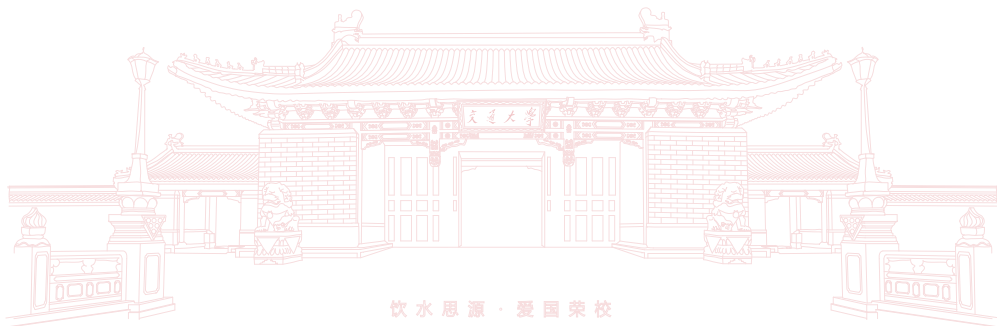
该界偏保守，但不含未知曲率常数。



Boyd & Vandenberghe, Section 9.6.4–9.6.5, equations (9.53)–(9.58), Figure 9.25 (定性重绘)

08

实现

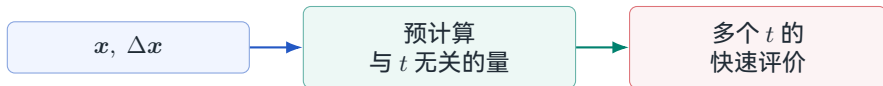


线搜索的预计算

线搜索反复评价同一条射线上的函数

$$\tilde{f}(t) = f(x + t\Delta x), \quad t \geq 0.$$

若每个 t 都重新形成 $x + t\Delta x$ 并调用完整的 f ，会重复大量计算。目标是先提取与 t 无关的量，再以低成本评价 $\tilde{f}(t)$ 及其导数。



仿射复合：把矩阵乘法移出循环

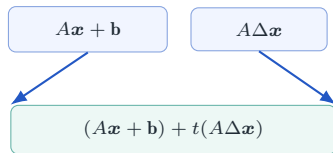
若 $f(\mathbf{x}) = \phi(A\mathbf{x} + \mathbf{b})$, $A \in \mathbb{R}^{p \times n}$, 则

$$A(\mathbf{x} + t\Delta\mathbf{x}) + \mathbf{b} = (A\mathbf{x} + \mathbf{b}) + t(A\Delta\mathbf{x}).$$

对 k 个候选步长:

- ▣ 直接计算: 约 $2kpn$ flops;
- ▣ 先计算 $A\mathbf{x} + \mathbf{b}$ 、 $A\Delta\mathbf{x}$: 约 $4pn + 2kp$ flops。

当 k 不小且 n 大时, 后者避免了 k 次高维矩阵乘法。



LMI 解析中心的线搜索

设 $f(x) = -\log \det F(x)$, 令 $A = F(x) \succ 0$ 、 $B = \sum_i \Delta x_i F_i$ 。沿 Newton 方向:

$$\tilde{f}(t) = -\log \det(A + tB) = -\log \det A - \sum_{i=1}^p \log(1 + t\lambda_i), \quad (9.59)$$

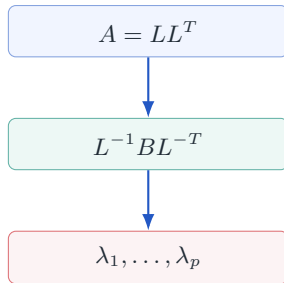
其中 λ_i 是 $L^{-1}BL^{-T}$ 的特征值, $A = LL^T$; 候选步长还须满足 $A + tB \succ 0$, 等价于 $1 + t\lambda_i > 0$ (所有 i)。

预计算之后, 每次函数或导数评价仅需 $O(p)$:

$$\tilde{f}'(t) = -\sum_{i=1}^p \frac{\lambda_i}{1 + t\lambda_i}.$$

总成本由直接法 $kn p^2 + \frac{1}{3}kp^3$ 降为

$$2np^2 + \frac{11}{3}p^3 + 4kp.$$



Boyd & Vandenberghe, Section 9.7.1, equation (9.59)

Newton 步的线性代数

形成 $H = \nabla^2 f(x)$ 、 $g = \nabla f(x)$ 后, Newton system 为

$$H \Delta x_{\text{nt}} = -g.$$

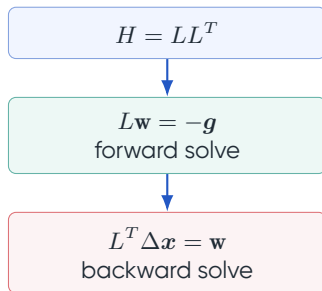
对正定 H , 用 Cholesky 分解 $H = LL^T$:

$$Lw = -g, \quad L^T \Delta x_{\text{nt}} = w, \quad \lambda^2 = \|w\|_2^2 = -\Delta x_{\text{nt}}^T g.$$

若 Hessian 是稠密且无结构的, Newton 步总成本约为

$$F + \frac{1}{3}n^3 \text{ flops,}$$

其中 F 是形成 H 和 g 的成本; Cholesky 分解通常主导。



Boyd & Vandenberghe, Section 9.7.2

应用例 10: 输入设计的 Newton system

Lecture 02 的最优输入设计取 $N = 200$, 令 H 为卷积矩阵、 D 为一阶差分矩阵:

$$f(\mathbf{u}) = \frac{\|H\mathbf{u} - \mathbf{y}_{\text{des}}\|_2^2}{N+1} + \frac{0.3}{N} \|D\mathbf{u}\|_2^2 + \frac{0.05}{N+1} \|\mathbf{u}\|_2^2.$$

该模型是严格凸二次问题; 这里追踪 Hessian 中每一项的来源。

$\frac{2}{N+1} H^\top H$ 跟踪项
Toeplitz / convolution

应用例 10: 输入设计的 Newton system

Lecture 02 的最优输入设计取 $N = 200$, 令 H 为卷积矩阵、 D 为一阶差分矩阵:

$$f(\mathbf{u}) = \frac{\|H\mathbf{u} - \mathbf{y}_{\text{des}}\|_2^2}{N+1} + \frac{0.3}{N} \|D\mathbf{u}\|_2^2 + \frac{0.05}{N+1} \|\mathbf{u}\|_2^2.$$

该模型是严格凸二次问题; 这里追踪 Hessian 中每一项的来源。

$\frac{2}{N+1} H^\top H$ 跟踪项
Toeplitz / convolution

$\frac{0.6}{N} D^\top D$ 平滑项
banded

应用例 10: 输入设计的 Newton system

Lecture 02 的最优输入设计取 $N = 200$, 令 H 为卷积矩阵、 D 为一阶差分矩阵:

$$f(\mathbf{u}) = \frac{\|H\mathbf{u} - \mathbf{y}_{\text{des}}\|_2^2}{N+1} + \frac{0.3}{N} \|D\mathbf{u}\|_2^2 + \frac{0.05}{N+1} \|\mathbf{u}\|_2^2.$$

该模型是严格凸二次问题; 这里追踪 Hessian 中每一项的来源。

$\frac{2}{N+1} H^\top H$ 跟踪项
Toeplitz / convolution

$\frac{0.6}{N} D^\top D$ 平滑项
banded

$\frac{0.1}{N+1} I$ 幅度项
diagonal

应用例 10: 输入设计的 Newton system

Lecture 02 的最优输入设计取 $N = 200$, 令 H 为卷积矩阵、 D 为一阶差分矩阵:

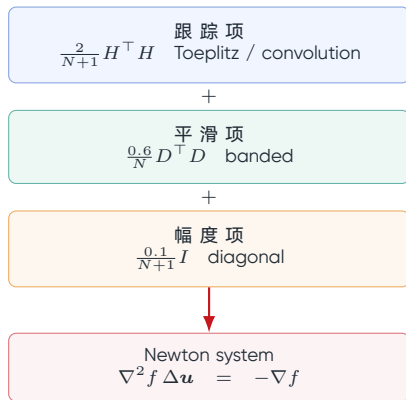
$$f(\mathbf{u}) = \frac{\|H\mathbf{u} - \mathbf{y}_{\text{des}}\|_2^2}{N+1} + \frac{0.3}{N} \|D\mathbf{u}\|_2^2 + \frac{0.05}{N+1} \|\mathbf{u}\|_2^2.$$

该模型是严格凸二次问题; 这里追踪 Hessian 中每一项的来源。

其 Hessian 为

$$\nabla^2 f = \frac{2}{N+1} H^\top H + \frac{0.6}{N} D^\top D + \frac{0.1}{N+1} I \succ 0.$$

目标是严格凸二次函数, 因此完整 Newton 步一次求得最优输入; 实际成本由这个线性系统的结构决定。



自编推导; 沿用 Lecture 02, Boyd & Vandenberghe, Example 6.3

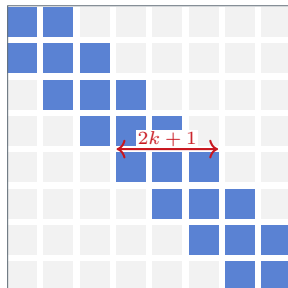
带状 Hessian

若 $H_{ij} = 0$ (当 $|i - j| > k$)，Hessian 的半带宽为 k 。带状 Cholesky 与三角求解的总成本为

$$F + nk^2 \quad (k \ll n),$$

而稠密算法为 $F + \frac{1}{3}n^3$ 。

这种结构意味着变量 x_i 在目标函数中只和附近的 $2k + 1$ 个变量发生非线性耦合。它常见于按时间、空间或链式索引排列的模型。



三对角结构：半带宽 $k = 1$

例 9.9: 链式耦合产生三对角结构

设每个 $\psi_i : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ 凸且二阶可微, 并考虑

$$f(\mathbf{x}) = \psi_1(x_1, x_2) + \psi_2(x_2, x_3) + \cdots + \psi_{n-1}(x_{n-1}, x_n).$$

每一项只耦合相邻两个变量, 所以 $\nabla^2 f(\mathbf{x})$ 是三对角矩阵。图结构和 Hessian 非零模式一一对应:



仅相邻变量相互作用

带宽恒为 1; 在形成 Hessian 亦为 $O(n)$ 且当前 Hessian 正定 (或经正则化) 的前提下, 带状 Cholesky 求解 Newton system 的工作量随 n **线性增长**, 而非 $O(n^3)$ 。

稀疏与低秩结构

稀疏 Hessian

可预先选择置换 P ，使

$$H = PLL^T P^T$$

的 Cholesky 因子更稀疏。该**符号分解**只做一次；
每步只更新数值分解。

对角加低秩

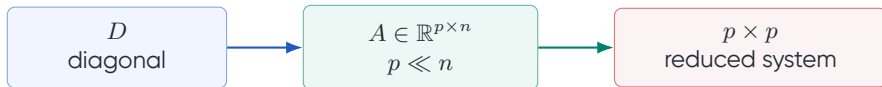
若 $D = \text{diag}(\psi_i''(x_i)) \succ 0$ 、
 $H_0 = \nabla^2 \psi_0(A\mathbf{x} + \mathbf{b}) = L_0 L_0^T \succeq 0$ ，且

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \psi_i(x_i) + \psi_0(A\mathbf{x} + \mathbf{b}),$$

则 $H = D + A^T H_0 A$ 。当 $A \in \mathbb{R}^{p \times n}$ 且 $p \ll n$ 时，
可将 Newton system 化为一个 $p \times p$ 系统：

$$(I + L_0^T A D^{-1} A^T L_0) \mathbf{w} = -L_0^T A D^{-1} \mathbf{g}. \quad (9.61)$$

随后以 $\Delta \mathbf{x} = -D^{-1}(A^T L_0 \mathbf{w} + \mathbf{g})$ 恢复 Newton
步；成本约为 $2p^2 n$ ，避免 $n \times n$ 稠密分解。



Boyd & Vandenberghe, Section 9.7.2, equation (9.61)

第 9 章的结构

方向与度量

- ▣ 梯度法使用欧氏几何；
- ▣ 最速下降法显式选择范数；
- ▣ Newton 法以 Hessian 作为局部度量。

步长与收敛

精确线搜索给出基准；回溯线搜索只需函数值。条件数决定一阶法的线性收敛速度，Newton 法靠近最优点后进入二次收敛阶段。

分析工具

强凸性与 Hessian 的 Lipschitz 条件给出经典分析；自协调性用局部曲率给出仿射不变的停止准则与复杂度界。

计算结构

一次迭代的价值同时取决于迭代次数和单步成本。预计算、Cholesky 分解以及带状、稀疏、低秩结构决定 Newton 法能否扩展到大规模问题。



上海交通大学

SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY

自然科学研究院

INSTITUTE OF NATURAL SCIENCES

Fin

