Advances in Applied Mathematics 应用数学进展, 2026, 15(11), 99-110
Published Online November 2026 in Hans. https://www.hanspub.org/journal/aam
https://doi.org/10.12677/aam.2026.1511435

Hans汉斯

固定函数值查询预算下零阶Heavy Ball方法的数值比较

严靖佳，聂维琳，王　承*

惠州学院数学与统计学院，广东　惠州

收稿日期：2026年10月9日；录用日期：2026年11月2日；发布日期：2026年11月17日

摘　要

随机梯度下降算法是优化问题的基本算法，但在实际应用中，有时目标函数的梯度难以获得，或者没有解析表达，只能得到其函数值。本文考虑在此情形下的零阶优化方法，在固定函数值查询预算下，比较小批量SGD、零阶随机梯度下降(ZO-SGD)及不同动量系数的零阶Heavy Ball方法(ZO-HB)的数值表现。主实验在合成线性回归、Diabetes岭回归和Breast Cancer逻辑回归三个任务上进行，并补充100维合成回归、非凸神经网络和扰动尺度比较。零阶训练统一采用96,000次零阶训练函数值查询上限(不含调参与性能评估)。结果表明，对比ZO-SGD，所考察ZO-HB配置在合成与Breast Cancer上的平均测试指标较好，在Diabetes上的平均RMSE较高。逐方向数独立选参后，K的增加并不一定带来预算内性能提升；两个补充任务中，验证选择的ZO-HB平均RMSE均低于ZO-SGD。单样本替换实验进一步显示，参数距离与测试目标变化不一定同向，其结果依赖于不同任务和超参数。本文结果说明了有限查询预算下随机方向数、动量和学习率选择之间的关系。

关键词

零阶随机优化，随机方向有限差分，Heavy Ball动量，函数值查询，数值实验

Numerical Comparison of Zeroth-Order Heavy Ball Methods under a Fixed Query Budget

Jingjia Yan, Weilin Nie, Cheng Wang*

School of Mathematics and Statistics, Huizhou University, Huizhou Guangdong

Received: October 9, 2026; accepted: November 2, 2026; published: November 17, 2026

*通讯作者。

文章引用: 严靖佳, 聂维琳, 王承. 固定函数值查询预算下零阶 Heavy Ball 方法的数值比较[J]. 应用数学进展, 2026, 15(11): 99-110. DOI: 10.12677/aam.2026.1511435

Abstract

Stochastic gradient descent is a fundamental algorithm for optimization problems. In practice, however, the gradient of the objective function is sometimes difficult to obtain or has no analytic expression, and only function values are available. This paper considers zeroth-order optimization methods in this setting and compares the numerical performance of mini-batch SGD, zeroth-order stochastic gradient descent (ZO-SGD), and zeroth-order Heavy Ball methods (ZO-HB) with different momentum coefficients under a fixed function value query budget. The main experiments are conducted on synthetic linear regression, Diabetes ridge regression, and Breast Cancer logistic regression, with additional comparisons on 100-dimensional synthetic regression, a nonconvex neural network, and perturbation scales, all with a cap of 96,000 zeroth-order training function-value queries, excluding tuning and evaluation. The results show that, compared with ZO-SGD, the tested ZO-HB configurations have better mean test metrics on synthetic data and Breast Cancer but higher mean RMSE on Diabetes. After independent validation selection for each direction count, increasing K does not necessarily improve performance within the budget. On both additional tasks, the validation-selected ZO-HB has lower mean RMSE than ZO-SGD. One-sample replacement experiments further show that parameter distance and test-objective change need not follow the same ordering, and the results depend on the task and hyperparameters. The results illustrate the relationships among direction count, momentum, and learning-rate selection under a limited query budget.

Keywords

Zeroth-Order Optimization, Gaussian Random Direction, Heavy Ball Momentum, Function-Value Queries, Numerical Experiment

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.
This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).
http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Open Access

1. 引言

随机梯度下降是优化问题中的经典方法，但当目标函数只能通过程序返回数值、无法直接获得解析梯度时，优化器需要利用有限次函数值调用构造更新方向。随机方向有限差分是一类常用的零阶方法，其基本思想是在当前参数附近施加随机扰动，并利用扰动前后的函数值差来近似表达梯度信息。高斯随机方向的零阶优化理论可追溯到 Nesterov 和 Spokoiny 的研究[1]；近年来，零阶随机梯度估计的偏差、稳定性及泛化问题也得到进一步讨论[2]。与一阶方法相比，由于一次更新中使用的随机方向数会直接决定函数值调用次数，零阶方法的计算成本不仅要考虑迭代次数，还应该讨论其函数值的调用数量。

Heavy Ball 方法通过保存历史更新方向构造速度变量，是经典的动量型迭代方法[3]。零阶优化中也已有带 Heavy Ball 动量的无导数随机优化方法，例如 Gorbunov 等提出的 stochastic derivative-free optimization method with momentum，并给出了相应的复杂度分析和数值实验[4]。与之不同，本文则是固定单边高斯随机方向有限差分估计器，重点研究一个更具体的数值问题：在函数值查询次数受到明确限制时，Heavy Ball 动量如何影响算法表现，以及随机方向数与可更新次数之间如何形成权衡。

固定函数值查询预算具有直接的黑盒计算意义。设每个小批量包含 m 个样本，每个样本使用 K 个随机方向，并缓存扰动前的基点函数值，则根据下面的(2)式，一次更新需要 $m(K+1)$次标量函数值调用。

若总查询预算为 Q，则可执行的完整更新次数由 $T=\dfrac{Q}{m(K+1)}$ 向下取整得到。因此，增大 K 一方面增加每步方向平均次数；另一方面则会减少在相同预算下能够执行的更新次数，可能影响最终结果的表现。如果只固定迭代次数而不对齐函数值调用，较大的 K 实际上消耗了更多黑盒信息，容易导致结果比较不公平。本文查询计数不含调参与性能评估。

本文围绕三个问题开展数值实验。第一，在相同函数值查询预算下，ZO-HB 是否能够相对于无动量的 ZO-SGD 改善测试表现？第二，在总查询次数固定时，随机方向数 K 的变化如何影响估计质量与更新次数之间的权衡？第三，当训练集只替换一个样本时，各零阶算法对最终参数距离和测试损失响应的影响，是否与其测试指标表现一致？

本文的贡献主要包括三点。其一，在统一的 96,000 次零阶训练函数值查询上限下，比较了 ZO-SGD 与不同 Heavy Ball 系数的 ZO-HB，并同时报告测试指标、测试损失和测试－训练经验目标差。其二，通过 $K=1$，5，10 下独立验证选参的方向数讨论，明确区分“每步估计质量”和“可更新次数”，避免把固定迭代次数实验误解为固定信息成本实验。其三，通过 20 组单样本替换实验，报告最终参数距离和测试目标的绝对、相对变化，将参数空间扰动与目标响应分开讨论。此外，在 100 维合成回归和非凸神经网络中补充比较，并考察扰动尺度的变化。

2. 方法与实验设计

2.1. 优化目标与评价指标

设训练集 $S=\{z_1,\cdots,z_n\}$，参数 $w\in R^d$，单样本损失为 $\ell(w;z)$。本文研究最小化经验目标

$$Fs(w)=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\ell(w;z_i)+\frac{\lambda}{2}\|w\|_2^2 \tag{1}$$

对于回归任务采用二分之一平方误差损失，分类任务则采用二元逻辑损失，标签取 0 或 1。主实验的线性和逻辑线性模型均不含截距项，回归目标未中心化或标准化。测试指标分别使用均方根误差(RMSE)和分类准确率。所有特征的均值与标准差只在当前训练集上估计，然后标准化变换处理验证集和测试集，以避免将后两部分的信息泄露到训练过程。合成、Diabetes、Breast Cancer 三个任务的 λ 分别取 0.01、0.03 和 0.01。

除测试指标外，本文报告测试损失以及测试－训练经验目标差 $G=F_{test}(w)-F_{train}(w)$。该量仅用于描述同一参数在两个固定数据部分上的经验目标差异，可能为负数。G 体现了模型在测试与训练样本上效果的差别，不等同于总体风险意义下的泛化误差，也不构成理论稳定性界。回归 RMSE 不包含正则化项，分类准确率则按决策函数值正负类别计算。测试损失包含正则项。

2.2. 单边高斯随机方向估计器

在第 t 次更新中，从训练集中抽取小批量 $B_t=\{z_i\}_{i=1}^{m}$，批量大小为 m。对每个样本 z_i 生成 K 个独立标准高斯方向 $u_{i,l}\in R_d$，满足 $u_{i,l}\sim N(0,I_d)$。设扰动尺度为 $\mu>0$，记 $f_\lambda(w;z)=\ell(w;z)+\dfrac{\lambda}{2}\|w\|_2^2$，则带正则化的单边有限差分估计器可写为

$$\hat{g}_t=\frac{1}{mK}\sum_{i=1}^{m}\sum_{l=1}^{K}\frac{f_\lambda(w_t+\mu u_{i,l};z_i)-f_\lambda(w_t;z_i)}{\mu}u_{i,l} \tag{2}$$

该形式对应单边高斯随机方向估计器[1] [2]。本文主实验及方向数比较固定 $\mu=0.01$，扰动尺度的补充设置见第 2.6 节，正则化项已包含在基点与扰动点的函数值中，不另加解析正则梯度，使零阶方法与一

阶 SGD 优化相同的经验目标。实现时，一个样本的基点函数值在其 K 个方向之间共享，因此一次小批量更新恰好使用 $m(K+1)$次标量函数值调用。

主实验取 $m=32$，$K=5$，因此每次更新消耗 192 次查询；总预算 $Q=96{,}000$ 时恰好执行 500 次更新。方向数取 $K=1$，5，10，对应完整更新次数分别为 1500、500 和 272 次；$K=10$ 时实际使用 95,744 次查询，因为剩余 256 次不足以完成下一轮完整更新。

2.3. Heavy Ball 更新与比较方法

设速度变量初值 $v_0=0$，学习率为 η，动量系数为 β，则 ZO-HB 的更新可写为

$$v_{t+1}=\beta v_t+\hat{g}_t \tag{3}$$

$$w_{t+1}=w_t-\eta v_{t+1} \tag{4}$$

当 $\beta=0$ 时，式(3~4)退化为 ZO-SGD。本文主实验考察 $\beta\in\{0,0.5,0.9,0.95\}$。需要说明的是，本文采用的递推没有对速度变量进行偏差校正或归一化处理。因此 η 与 β 的作用相互耦合，β 可能增强持续同向更新的累积效应，两者需要联合解释。不同 β 配置的学习率由验证阶段分别选定，因而下文表 1 中的比较是不同完整配置(模型、学习率、动量系数和查询预算)之间的数值差异，而不应把全部差异完全归因于 β 本身。

SGD 使用相同的线性或逻辑线性模型和小批量，但直接计算解析梯度，作为一阶信息可获得时的参照。主实验 $K=5$ 时，SGD 与零阶方法的更新次数均为 500 次，但这并不意味着二者具有相同的黑盒函数值查询成本。

2.4. 数据集与实验设置

主实验包含一个合成线性回归任务和两个真实数据任务，补充任务的设置见第 2.6 节。合成数据包含 1000 个样本和 30 个特征，其中 10 个真实系数非零；输入特征独立服从标准高斯分布，响应变量由固定真实系数生成并叠加标准差为 0.7 的高斯噪声。两个真实数据集通过 scikit-learn 数据加载接口获得[5]。Diabetes 数据包含 442 个样本和 10 个特征，采用岭回归；该数据也曾用于回归方法比较[6]。Breast Cancer 数据包含 569 个样本和 30 个特征，采用逻辑回归，其原始数据来源可追溯至细针穿刺细胞核图像特征研究[7]。

Table 1. Datasets and evaluation metrics
表 1. 数据集及评价指标

数据集	任务	样本数	维数	λ	测试指标
合成数据	线性回归	1000	30	0.01	RMSE
Diabetes	岭回归	442	10	0.03	RMSE
Breast Cancer	逻辑回归	569	30	0.01	准确率
100 维合成数据	线性回归	1000	100	0.01	RMSE
合成数据	tanh 网络	1000	155 参数	0.01	RMSE

正式实验重复 10 次，对应随机种子编号 101-110。每个正式种子独立按 70%、15%、15%划分训练、验证和测试数据，以及优化过程中的小批量抽样和随机方向生成，分类数据按类别分层。验证阶段在每个正式划分内分别选参，对每个零阶候选使用 24,000 次查询上限，一阶 SGD 的每个候选使用 125 次更

新，并根据最终验证损失选择学习率。回归学习率候选值为{0.0001, 0.0003, 0.001, 0.003}，分类候选值为{0.0003, 0.001, 0.003, 0.01}。各配置的学习率可随划分改变；主实验选参后在该训练集从零初始化正式训练，不合并验证样本。学习率等超参数仅在验证集上选择，调参阶段不计算测试指标，测试集不参与超参数调优。方向数实验对 $K = 1$、5、10 分别搜索学习率和动量：ZO-SGD 从 4 个学习率中选择，ZO-HB 从 4 个学习率与 3 个正动量系数的 12 种组合中选择，按终点验证目标最小值确定；验证值相同时先取较小学习率，再取较小动量。$K = 1$、5、10 的调参更新次数分别为 375、125、68 次，实际查询数为 24，000、24，000、23，936。$K = 5$ 复用主实验验证记录。表 2 中的标准差同时包含划分变化、测试集组成变化以及随机方向和小批量抽样变化，并非单一随机因素引起的不确定性效果。

2.5. 单样本替换敏感性实验

为观察训练样本变化对算法输出的影响，在每个任务固定一个数据划分，并构造仅相差一个训练样本的相邻训练集 S 与 S'。对每种方法构造 20 组单样本替换对 (S, S')，替换样本来自该划分的验证集。ZO-HB 的动量系数和学习率由该固定划分的验证目标选定，并在每对训练中保持不变。在每一对内部，两次训练使用相同的小批量索引和随机方向序列，并共用原始训练集 S 拟合的标准化器(均值和标准差)，使两次训练的差异主要来自被替换的样本，且输出参数在同一坐标下可比。最终参数距离定义为

$$D = \left\| w(S) - w(S') \right\|_2 \tag{5}$$

同时计算固定测试集上的测试目标绝对变化 $\left\| F_{test}\left(w(S)\right) - F_{test}\left(w(S')\right) \right\|_2$。两项指标分别描述单样本替换后的参数变化和测试目标响应。为比较相对变化，定义

$$D_{rel} = \frac{\left\| w(S) - w(S') \right\|_2}{\left\| w(S) \right\|_2},\ \Delta F_{rel} = \frac{\left| F_{test}\left(w(S)\right) - F_{test}\left(w(S')\right) \right|}{\left| F_{test}\left(w(S)\right) \right|} \tag{6}$$

式(6)的分母分别取原训练集所得模型的参数范数和含正则项的测试目标。先对每一对计算比值，再对 20 对求均值和样本标准差；分母不超过 10^{-12} 时该比值不定义。本次所有替换对的两个分母均高于该阈值。

2.6. 补充实验设置

较高维任务沿用原合成数据的 1000 个样本、30 个特征和响应，另用固定种子 1702 增加 70 列独立标准高斯无关特征，构成 100 维线性回归。原有特征的真实系数和噪声保持不变，新增特征的真实系数为 0。样本划分及标准化规则与原合成任务一致，正则化系数为 0.01。

非凸任务仍使用原 30 维合成数据，模型改为 5 个 tanh 隐藏单元的神经网络：

$$\hat{y}(x;\theta) = a^{\mathrm{T}} \tanh(Wx), \theta = (W, a) \tag{7}$$

其中 W 为 5 × 30 矩阵，a 为 5 维向量，不含偏置，共 155 个参数；tanh 逐分量作用。单样本损失仍取二分之一平方误差，对 W 和 a 的全部参数施加 0.01 的二次正则化。每个划分用种子 10,000 加划分编号初始化，W 的元素服从 $N(0, 1/30)$，a 的元素服从 $N(0, 0.1^2)$，速度为 0。同一划分内各候选及正式方法共用初始参数。两个补充任务均固定 $K = 5$、$\mu = 0.01$，使用第 2.4 节的回归学习率网格和动量候选，分别选择 ZO-SGD 和 ZO-HB。

扰动尺度比较取 $\mu = 0.001$、0.01、0.1，固定 $K = 5$，比较 ZO-SGD 与 $\beta = 0.9$ 的 ZO-HB。各方法的学习率沿用对应划分在 $\mu = 0.01$ 时的验证选择，并在三个尺度下保持一致；初始化、小批量和随机方向序列也保持一致。$\mu = 0.01$ 复用主实验结果。所有补充正式训练均采用 96,000 次训练查询上限，重复划分

为 101 至 110。

3. 结果

3.1. 固定查询预算下的主实验

表 2 给出了 $K = 5$、总函数值查询上限为 96,000 时的正式比较结果。合成任务中，ZO-SGD 的测试 RMSE 为 1.061 ± 0.040；ZO-HB $\beta = 0.5$，0.9 和 0.95 分别为 0.738 ± 0.036、0.742 ± 0.048 和 0.737 ± 0.066。三种动量配置在当前实验协议下的平均 RMSE 均低于 ZO-SGD，说明所选动量配置在该任务下取得了较低的平均测试误差。但由于不同 β 配置的学习率也由验证阶段分别确定，上述结果应解释为完整配置之间的数值差异，而不是单独的 β 所产生的效果。

Diabetes 上，ZO-SGD 的测试 RMSE 为 159.620 ± 6.335，ZO-HB $\beta = 0.5$，0.9 和 0.95 分别为 159.971 ± 6.447、160.037 ± 6.195 和 160.201 ± 6.395，三者的平均 RMSE 均高于 ZO-SGD。Breast Cancer 上，ZO-SGD 准确率为 0.960 ± 0.018，$\beta = 0.5$，0.9 和 0.95 分别为 0.968 ± 0.018、0.976 ± 0.020 和 0.975 ± 0.019。$\beta = 0.9$ 与 0.95 的平均准确率接近，但测试损失分别为 0.116 ± 0.025 和 0.117 ± 0.027，说明准确率这一离散指标不能完全反映概率损失差异。

Table 2. Main comparisons at $K = 5$ (mean ± sample standard deviation n = 10)
表 2. $K = 5$ 时的正式比较结果(均值 ± 样本标准差，n = 10)

数据集	方法	测试指标	测试目标	经验目标差 G
合成数据	SGD	1.062 ± 0.040	0.599 ± 0.043	0.035 ± 0.041
合成数据	ZO-SGD	1.061 ± 0.040	0.599 ± 0.041	0.035 ± 0.034
合成数据	ZO-HB $\beta = 0.5$	0.738 ± 0.036	0.325 ± 0.027	0.004 ± 0.029
合成数据	ZO-HB $\beta = 0.9$	0.742 ± 0.048	0.334 ± 0.036	0.006 ± 0.033
合成数据	ZO-HB $\beta = 0.95$	0.737 ± 0.066	0.331 ± 0.051	0.006 ± 0.035
Diabetes	SGD	159.352 ± 6.470	12732.001 ± 1046.025	−471.818 ± 1197.838
Diabetes	ZO-SGD	159.620 ± 6.335	12773.618 ± 1023.843	−490.222 ± 1155.213
Diabetes	ZO-HB $\beta = 0.5$	159.971 ± 6.447	12835.047 ± 1042.416	−391.931 ± 1161.017
Diabetes	ZO-HB $\beta = 0.9$	160.037 ± 6.195	12848.136 ± 1000.723	−390.186 ± 1129.102
Diabetes	ZO-HB $\beta = 0.95$	160.201 ± 6.395	12877.995 ± 1034.503	−352.110 ± 1141.505
Breast Cancer	SGD	0.966 ± 0.019	0.154 ± 0.021	0.011 ± 0.025
Breast Cancer	ZO-SGD	0.960 ± 0.018	0.154 ± 0.020	0.010 ± 0.025
Breast Cancer	ZO-HB $\beta = 0.5$	0.968 ± 0.018	0.131 ± 0.021	0.011 ± 0.025
Breast Cancer	ZO-HB $\beta = 0.9$	0.976 ± 0.020	0.116 ± 0.025	0.013 ± 0.029
Breast Cancer	ZO-HB $\beta = 0.95$	0.975 ± 0.019	0.117 ± 0.027	0.014 ± 0.030

一阶 SGD 的作用是提供解析梯度可用时的参照，而不是与零阶方法进行黑盒查询成本上的直接比较。表 2 中合成任务的 SGD 与 ZO-SGD 测试 RMSE 分别为 1.062 和 1.061，非常接近；Diabetes 上分别为 159.352 和 159.620，也非常接近；Breast Cancer 上 SGD 准确率为 0.966，高于 ZO-SGD 的 0.960，但低于两种较高动量配置的平均准确率。上述结果反映了给定更新次数、学习率和查询预算下，动量零阶算法在某些特定情形下对 SGD 方法可提升学习效果，但不能据此对一阶和零阶方法的一般优化能力排序。

图 1 展示三个任务的测试损失随累计训练函数值查询次数的变化。

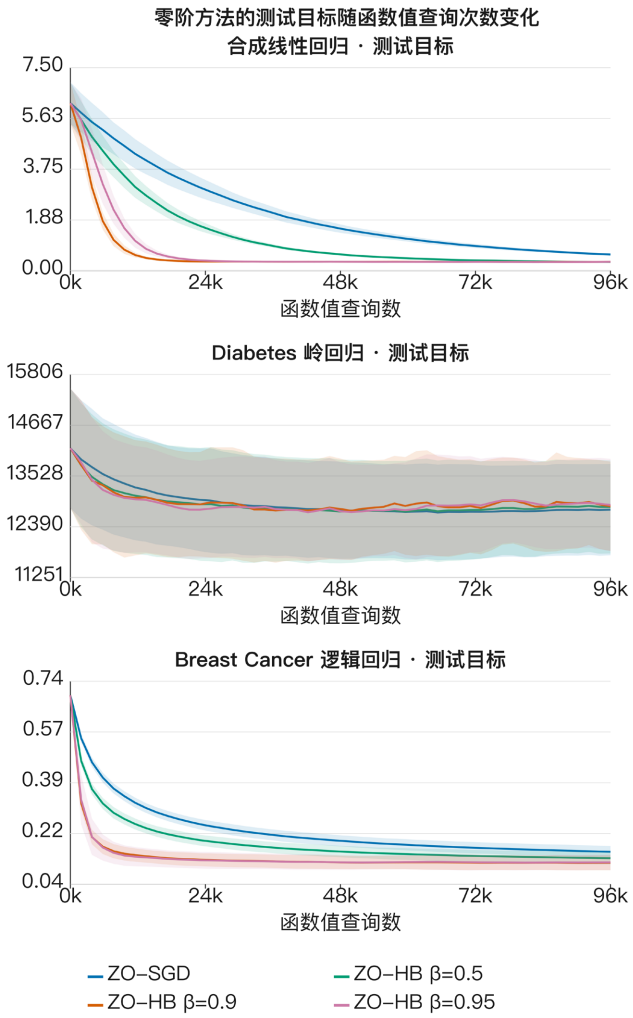


Figure 1. Test losses versus training function-value queries
图 1. 零阶方法的测试损失随累计训练函数值查询数变化

对于经验目标差，Diabetes 的均值均为负，说明在相应随机划分下测试部分的经验目标低于训练部分。该符号同时受到数据划分和目标值分布影响。因此，本文将该量作为描述性指标，而不将其用于稳定性或泛化理论推断。

3.2. 学习率与 Heavy Ball 系数的敏感性

图 2 给出了 $K=5$、$\mu=0.01$ 时学习率 η 与动量系数 β 的验证目标热力图。每个单元格为 10 个划分在 24，000 次调参查询下的终点验证目标均值，三个任务分别使用自己的色标。合成任务中，$\eta=0.001$ 时，β 从 0.9 增至 0.95 使平均验证目标由 0.776 降至 0.373；$\eta=0.003$ 时，相同变化则使其由 0.361 升至 0.455。Diabetes 中，$\eta=0.003$ 时 $\beta=0.5$ 的平均验证目标低于 $\beta=0.9$ 和 0.95，而在 $\eta=0.0001$ 时增大 β 使其下降。Breast Cancer 中，在本次网格内增大学习率和动量总体上降低了验证目标。上述结果显示，学习率与动量的作用需要共同考察。

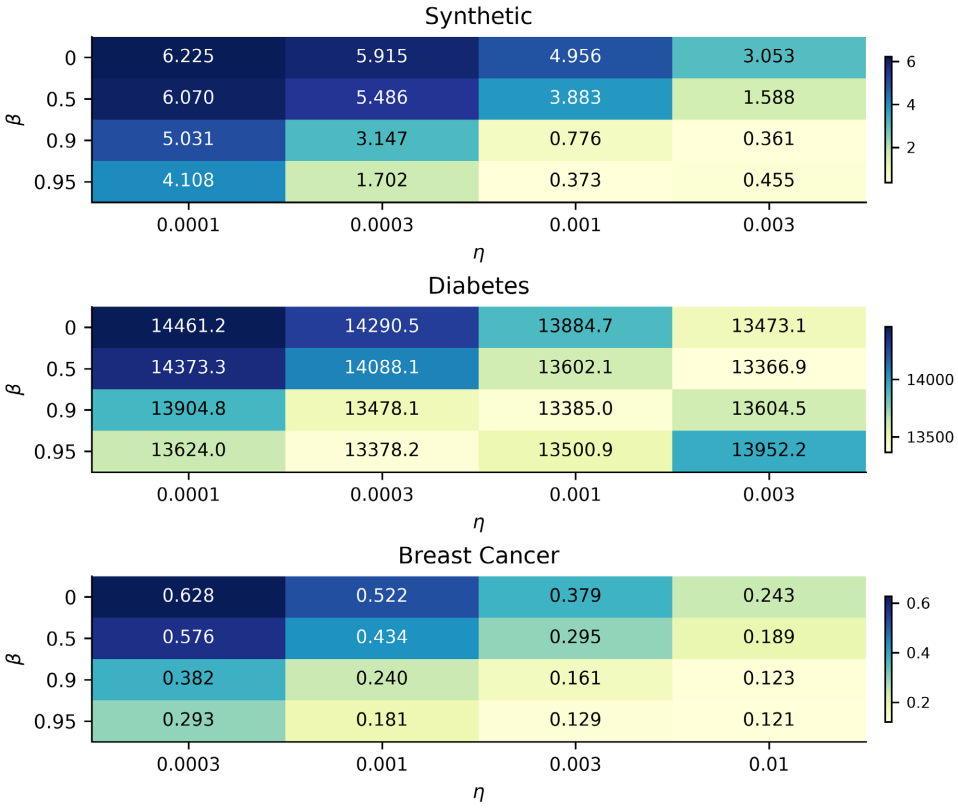


Figure 2. Validation objectives on the learning-rate and momentum grid at 24,000 training queries (Mean values for 10 segments)
图 2. 24,000 次调参查询下的学习率与动量验证目标(10 个划分均值)

3.3. 随机方向数 K 的敏感性

方向数比较 K = 1、5、10，每个划分在各 K 下分别按终点验证目标选择学习率及 ZO-HB 的动量系数，选参后重新初始化正式训练。图 3 合并的是逐划分验证选择的 ZO-HB 配置，动量系数可随划分和 K 改变。K = 1、5、10 分别对应 1500、500 和 272 次完整更新；K = 10 实际使用 95,744 次查询。该设计比较的是各 K 经相同验证规则选择后的完整配置。

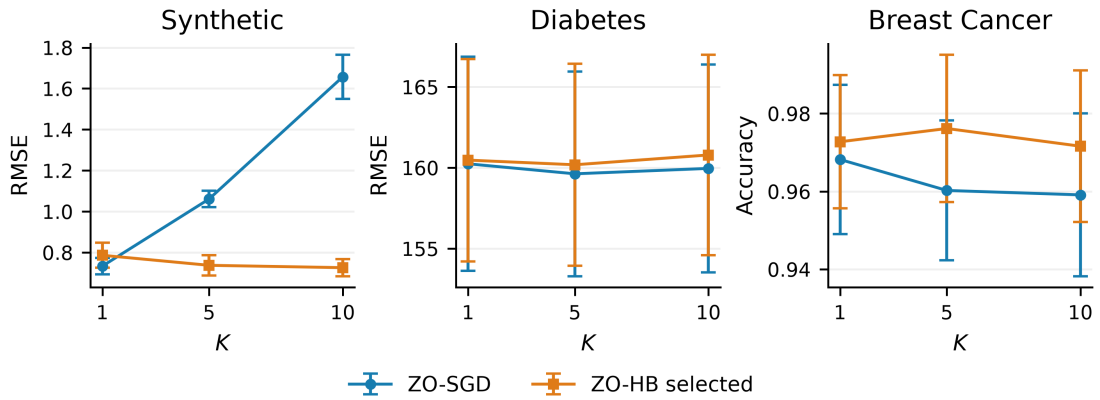


Figure 3. Direction-Count comparisons with independent validation selection under a 96,000 training-query cap
图 3. 96,000 次训练查询上限下各方向数独立验证选参的比较

合成任务中，ZO-SGD 在 $K = 1$、5、10 时的测试 RMSE 分别为 0.733 ± 0.040、1.061 ± 0.040、1.657 ± 0.108；相应验证选择的 ZO-HB 分别为 0.786 ± 0.061、0.737 ± 0.050、0.726 ± 0.042。重新选参后，ZO-HB 在 $K = 1$ 时的平均 RMSE 仍高于 ZO-SGD，在 $K = 5$、10 时较低。Diabetes 上，两种方法均在 $K = 5$ 时取得本次比较中较低的平均 RMSE，且三个 K 下 ZO-HB 的均值均高于 ZO-SGD。Breast Cancer 上，ZO-SGD 在 $K = 1$ 时的平均准确率较高，ZO-HB 则在 $K = 5$ 时较高。由此可见，较大的 K 并不总是产生更好的预算内结果。

方向数同时改变每步方向平均程度和可执行的更新次数，选参后的表现反映了这两个因素与学习率、动量的共同作用。

3.4. 单样本替换敏感性

表 3 与图 4 给出固定数据划分、20 组单样本替换对下的最终参数距离和测试目标的绝对、相对变化。合成任务中，ZO-SGD 的参数距离为 0.0168 ± 0.0098，ZO-HB 为 0.0158 ± 0.0129；两者均值差为 0.0010，仅作描述性比较。Diabetes 中，ZO-SGD 与 ZO-HB 的参数距离分别为 1.4381 ± 0.6025 和 3.9655 ± 1.8226；Breast Cancer 中，ZO-SGD 与 ZO-HB 分别为 0.0093 ± 0.0058 和 0.0248 ± 0.0238。

Table 3. Absolute and relative one-sample replacement sensitivity (mean ± sample standard deviation n = 20)
表 3. 单样本替换下的绝对与相对变化(均值 ± 样本标准差，n = 20)

数据集	方法	参数距离 D	测试目标绝对变化 ΔF	相对参数距离	相对测试目标变化
合成数据	ZO-SGD	0.0168 ± 0.0098	0.0027 ± 0.0029	0.0063 ± 0.0037	0.0043 ± 0.0047
合成数据	ZO-HB $\beta = 0.9$	0.0158 ± 0.0129	0.0009 ± 0.0012	0.0047 ± 0.0038	0.0025 ± 0.0035
Diabetes	ZO-SGD	1.4381 ± 0.6025	18.9786 ± 17.2802	0.0407 ± 0.0177	0.0016 ± 0.0015
Diabetes	ZO-HB $\beta = 0.95$	3.9655 ± 1.8226	28.6989 ± 34.7847	0.0633 ± 0.0349	0.0024 ± 0.0029
Breast Cancer	ZO-SGD	0.0093 ± 0.0058	0.0004 ± 0.0006	0.0077 ± 0.0048	0.0025 ± 0.0038
Breast Cancer	ZO-HB $\beta = 0.95$	0.0248 ± 0.0238	0.0001 ± 0.0002	0.0100 ± 0.0095	0.0012 ± 0.0016

测试目标绝对变化与参数距离并不保持相同排序。合成任务中，动量配置的两项均值均较低；Diabetes 中动量配置的参数距离和测试目标变化均较大；Breast Cancer 中动量配置的参数距离较大，但测试目标变化反而较小。这说明参数空间的欧氏距离和测试目标响应描述的是不同方面的现象。归一化后，Breast Cancer 中 ZO-SGD 与 ZO-HB 的相对参数距离分别为 0.0077 和 0.0100，相对测试目标变化分别为 0.0025 和 0.0012，仍保持这一不同排序。稳定性研究中，参数扰动与损失响应通过损失的光滑性和梯度大小联系起来[2]。从局部变化看，同样大小的参数移动，若方向与测试目标梯度接近垂直，或对应较平缓的方向，目标变化可以较小。Breast Cancer 中，两种方法的测试目标一阶方向变化绝对值均值分别为 0.000399 和 0.000151，与观察到的目标变化大小关系一致，支持这一局部响应解释。

3.5. 较高维与非凸任务的补充比较

表 4 给出了两个补充任务的正式结果。100 维合成回归中，ZO-SGD 与验证选择的 ZO-HB 测试 RMSE 分别为 1.328 ± 0.098 和 0.939 ± 0.107；非凸网络中分别为 1.925 ± 0.349 和 1.454 ± 0.119。同一划分内 ZO-HB 减 ZO-SGD 的 RMSE 差值，在两个任务上分别为−0.388 ± 0.059 和−0.471 ± 0.323。两个任务中所选 ZO-HB 配置的平均 RMSE 均较低。

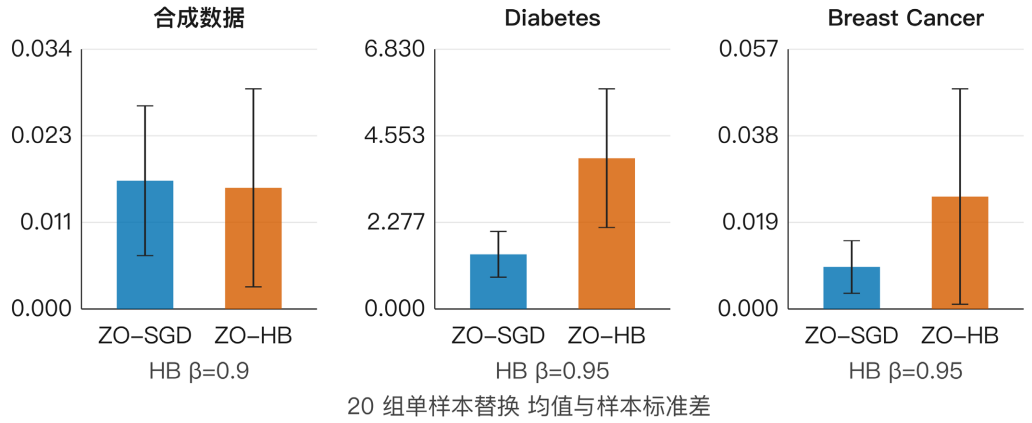


Figure 4. Final parameter distances after one-sample replacement
图 4. 单样本替换后的最终参数距离

Table 4. Higher-dimensional and nonconvex comparisons (mean ± sample standard deviation n = 10)
表 4. 较高维与非凸任务的比较(均值 ± 样本标准差，n = 10)

任务	方法	测试 RMSE	测试目标
100 维线性回归	ZO-SGD	1.328 ± 0.098	0.920 ± 0.129
100 维线性回归	验证选择 ZO-HB	0.939 ± 0.107	0.502 ± 0.102
155 参数网络	ZO-SGD	1.925 ± 0.349	1.958 ± 0.697
155 参数网络	验证选择 ZO-HB	1.454 ± 0.119	1.265 ± 0.198

3.6. 扰动尺度的敏感性

图 5 给出了三种扰动尺度下的测试指标。合成任务中，ZO-SGD 的平均 RMSE 在当前报告精度下均为 1.061；$\beta = 0.9$ 的 ZO-HB 在 $\mu = 0.001$、0.01、0.1 时分别为 0.742 ± 0.049、0.742 ± 0.048、0.761 ± 0.044。Diabetes 上，两种方法的平均 RMSE 在三个尺度之间变化较小。Breast Cancer 上，$\mu = 0.001$ 和 0.01 时两种方法的平均准确率分别相同，$\mu = 0.1$ 时略低。该比较在学习率和动量保持不变时展示了扰动尺度的响应，合成任务中较大扰动对所选动量配置的影响更明显。

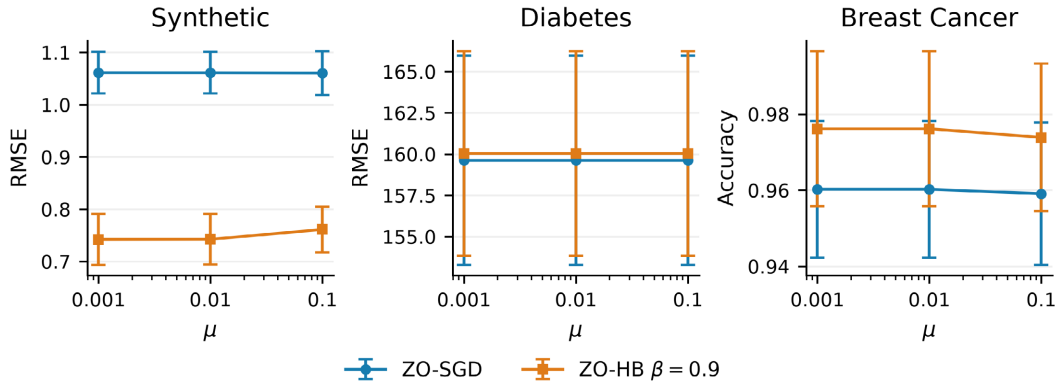


Figure 5. Test metrics at different perturbation scales (mean ± sample standard deviation n = 10)
图 5. 不同扰动尺度下的测试指标(均值 ± 样本标准差，n = 10)

4. 讨论

第一，固定函数值查询预算改变了对零阶算法的比较方式。对于 K 个方向的单边估计器，一次更新的查询成本为 $m(K+1)$，因此 K 的增加必然以减少更新次数为代价。本文的 K 多重实验结果说明，在有限预算下，估计器精度和更新次数之间不存在仅靠增大 K 即可解决的普遍规律。

第二，Heavy Ball 动量的效果与学习率共同决定。由于速度递推未进行额外归一化，β 增大可能同时增强持续同向方向的累积效应。图 2 的验证网格显示，在不同学习率下增加动量可能使目标变化方向不同；表 2 则给出了分别验证选参后的正式结果。两类比较共同说明动量和学习率需要联合选择。

第三，测试表现和单样本替换敏感性不是同一评价维度。合成任务中，动量配置既表现出较低的测试 RMSE，也表现出略低的平均参数距离；但 Diabetes 和 Breast Cancer 上参数距离则相反。尤其 Breast Cancer 中，较大的参数距离并未伴随更大的测试损失变化。因此，仅依据参数距离不能判断预测稳定性，也不能将测试指标的改善解释为算法稳定性改善。

第四，补充实验将参数规模扩展到 100 维线性模型和 155 参数非凸网络，两个任务中验证选择的 ZO-HB 均取得较低的平均 RMSE。本文使用三个方向数、三个扰动尺度和有限学习率网格，结果反映了这些设置下的预算分配与选参关系。重复划分共享样本，均值和标准差用于描述本次比较。Diabetes 采用无截距模型且响应未中心化，这一模型设置也影响了其误差水平。

后续工作可以进一步增加独立数据集和模型规模，并在带噪函数值及不同查询预算下考察学习率、动量和随机方向数的交互。

5. 结论

本文以单边高斯随机方向有限差分估计器为固定基线，在相同函数值查询预算下比较 ZO-SGD 与 Heavy Ball 零阶方法。三个任务的结果表明，所考察动量配置在合成与 Breast Cancer 上的平均测试指标较好，在 Diabetes 上的平均 RMSE 较高，效果随任务和超参数组合变化。在 100 维合成回归和非凸神经网络中，验证选择的 ZO-HB 也取得了低于 ZO-SGD 的平均 RMSE。

各方向数独立验证选参后的比较显示，增大 K 提高每步方向平均的充分程度，并减少可执行的更新次数，因此 K 并不存在仅凭增大即可获得更好预算内结果的普遍规律。单样本替换实验进一步表明，最终参数距离与测试目标变化不一定同向，动量对训练数据扰动的影响也并不一致。

因此，在固定函数值查询预算下选择零阶 Heavy Ball 方法时，需要共同考虑随机方向数、学习率和动量系数，并结合测试指标与单样本替换后的绝对、相对变化评价其数值表现。

参考文献

[1] Nesterov, Y. and Spokoiny, V. (2017) Random Gradient-Free Minimization of Convex Functions. *Foundations of Computational Mathematics*, **17**, 527-566. https://doi.org/10.1007/s10208-015-9296-2

[2] Zeng, S. and Lei, Y. (2026) Stochastic Gradient Methods: Bias, Stability and Generalization. *Journal of Machine Learning Research*, **27**, 1-55. https://jmlr.org/papers/v27/24-0637.html

[3] Polyak, B.T. (1964) Some Methods of Speeding up the Convergence of Iteration Methods. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, **4**, 1-17. https://doi.org/10.1016/0041-5553(64)90137-5

[4] Gorbunov, E., Bibi, A., Sener, O., Bergou, E.H. and Richtárik, P. (2020) A Stochastic Derivative Free Optimization Method with Momentum. 2020 *International Conference on Learning Representations*, Online, 26 April-1 May 2020. https://openreview.net/forum?id=HylAoJSKvH

[5] Pedregosa, F., Varoquaux, G., Gramfort, A., Michel, V., Thirion, B., Grisel, O., *et al*. (2011) Scikit-Learn: Machine Learning in Python. *Journal of Machine Learning Research*, **12**, 2825-2830. https://jmlr.org/papers/v12/pedregosa11a.html

[6] Efron, B., Hastie, T., Johnstone, I. and Tibshirani, R. (2004) Least Angle Regression. *The Annals of Statistics*, **32**, 407-

499. https://doi.org/10.1214/009053604000000067

[7] Wolberg, W.H., Street, W.N. and Mangasarian, O.L. (1994) Machine Learning Techniques to Diagnose Breast Cancer from Image-Processed Nuclear Features of Fine Needle Aspirates. *Cancer Letters*, **77**, 163-171. https://doi.org/10.1016/0304-3835(94)90099-x