数值计算

一、数值稳定性

1. 在计算机中执行数学运算需要使用有限的比特位来表达实数，这会引入近似误差。

   近似误差可以在多步数值运算中传递、积累，从而导致理论上成功的算法失败。因此数值算法设计时要考虑将累计误差最小化。

2. 当从头开始实现一个数值算法时，需要考虑数值稳定性。当使用现有的数值计算库（如`tensorflow`）时，不需要考虑数值稳定性。

1.1 上溢出、下溢出

1. 一种严重的误差是下溢出`underflow`：当接近零的数字四舍五入为零时，发生下溢出。

   许多函数在参数为零和参数为一个非常小的正数时，行为是不同的。如：对数函数要求自变量大于零，除法中要求除数非零。

2. 一种严重的误差是上溢出`overflow`：当数值非常大，超过了计算机的表示范围时，发生上溢出。

3. 一个数值稳定性的例子是`softmax`函数。

   设 $\vec{\mathbf{x}}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$，则`softmax`函数定义为：

   $$\text{softmax}(\vec{\mathbf{x}})=\left(\frac{\exp(x_1)}{\sum_{j=1}^n\exp(x_j)},\frac{\exp(x_2)}{\sum_{j=1}^n\exp(x_j)},\cdots,\frac{\exp(x_n)}{\sum_{j=1}^n\exp(x_j)}\right)^T$$

   当所有的 x_i 都等于常数 c 时，`softmax`函数的每个分量的理论值都为 $\frac{1}{n}$ 。

   - 考虑 c 是一个非常大的负数（比如趋近负无穷），此时 $\exp(c)$ 下溢出。此时 $\frac{\exp(c)}{\sum_{j=1}^n\exp(c)}$ 分母为零，结果未定义。
   - 考虑 c 是一个非常大的正数（比如趋近正无穷），此时 $\exp(c)$ 上溢出。 $\frac{\exp(c)}{\sum_{j=1}^n\exp(c)}$ 的结果未定义。

4. 为了解决`softmax`函数的数值稳定性问题，令 $\vec{\mathbf{z}}=\vec{\mathbf{x}}-\max_i x_i$，则有 $\text{softmax}(\vec{\mathbf{z}})$ 的第 i 个分量为：

   $$\begin{aligned}\text{softmax}(\vec{\mathbf{z}})_i&=\frac{\exp(z_i)}{\sum_{j=1}^n\exp(z_j)}=\frac{\exp(\max_k x_k)\exp(z_i)}{\exp(\max_k x_k)\sum_{j=1}^n\exp(z_j)}\\&=\frac{\exp(z_i+\max_k x_k)}{\sum_{j=1}^n\exp(z_j+\max_k x_k)}\\&=\frac{\exp(x_i)}{\sum_{j=1}^n\exp(x_j)}\\&=\text{softmax}(\vec{\mathbf{x}})_i\end{aligned}$$

   - 当 $\vec{\mathbf{x}}$ 的分量较小时，$\vec{\mathbf{z}}$ 的分量至少有一个为零，从而导致 $\text{softmax}(\vec{\mathbf{z}})_i$ 的分母至少有一项为 1，从而解决了下溢出的问题。
   - 当 $\vec{\mathbf{x}}$ 的分量较大时，$\text{softmax}(\vec{\mathbf{z}})_i$ 相当于分子分母同时除以一个非常大的数 $\exp(\max_i x_i)$，从而解决了上溢出。

5. 当 $\vec{\mathbf{x}}$ 的分量 x_i 较小时，$\text{softmax}(\vec{\mathbf{x}})_i$ 的计算结果可能为 0 。此时 $\log\text{softmax}(\vec{\mathbf{x}})$ 趋向于负无穷，因此存在数值稳定性问题。

- 通常需要设计专门的函数来计算 $\log\text{softmax}$，而不是将 softmax 的结果传递给 log 函数。
- $\log\text{softmax}(\cdot)$ 函数应用非常广泛。通常将 softmax 函数的输出作为模型的输出。由于一般使用样本的交叉熵作为目标函数，因此需要用到 softmax 输出的对数。

6. `softmax` 名字的来源是 `hardmax`。
   - `hardmax` 把一个向量 $\vec{\mathbf{x}}$ 映射成向量 $(0,\cdots,0,1,0,\cdots,0)^T$。即：$\vec{\mathbf{x}}$ 最大元素的位置填充 `1`，其它位置填充 `0`。
   - `softmax` 会在这些位置填充 `0.0~1.0` 之间的值（如：某个概率值）。

1.2 Conditioning

1. `Conditioning` 刻画了一个函数的如下特性：当函数的输入发生了微小的变化时，函数的输出的变化有多大。

   对于 `Conditioning` 较大的函数，在数值计算中可能有问题。因为函数输入的舍入误差可能导致函数输出的较大变化。

2. 对于方阵 $\mathbf{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$，其条件数 `condition number` 为：

$$\text{condition number}=\max_{1\le i,j\le n,i\ne j}\left|\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right|$$

   其中 $\lambda_i,i=1,2,\cdots,n$ 为 $\mathbf{A}$ 的特征值。
   - 方阵的条件数就是最大的特征值除以最小的特征值。
   - 当方阵的条件数很大时，矩阵的求逆将对误差特别敏感（即：$\mathbf{A}$ 的一个很小的扰动，将导致其逆矩阵一个非常明显的变化）。
   - 条件数是矩阵本身的特性，它会放大那些包含矩阵求逆运算过程中的误差。

二、梯度下降法

1. 梯度下降法是求解无约束最优化问题的一种常见方法，优点是实现简单。
2. 对于函数：$f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$，假设输入 $\vec{\mathbf{x}}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$，则定义梯度：

$$\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}})=\left(\frac{\partial}{\partial x_1}f(\vec{\mathbf{x}}),\frac{\partial}{\partial x_2}f(\vec{\mathbf{x}}),\cdots,\frac{\partial}{\partial x_n}f(\vec{\mathbf{x}})\right)^T$$

   函数的驻点满足：$\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}})=\vec{\mathbf{0}}$。

3. 沿着方向 $\vec{\mathbf{u}}$ 的方向导数 `directional derivative` 定义为：

$$\lim_{\alpha\to 0}\frac{f(\vec{\mathbf{x}}+\alpha\vec{\mathbf{u}})-f(\vec{\mathbf{x}})}{\alpha}$$

   其中 $\vec{\mathbf{u}}$ 为单位向量。

   方向导数就是 $\frac{\partial}{\partial\alpha}f(\vec{\mathbf{x}}+\alpha\vec{\mathbf{u}})$。根据链式法则，它也等于 $\vec{\mathbf{u}}^T\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}})$。

3. 为了最小化 f，则寻找一个方向：沿着该方向，函数值减少的速度最快（换句话说，就是增加最慢）。即：

$$\min_{\vec{\mathbf{u}}}\vec{\mathbf{u}}^T\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}})$$
$$s.t.\quad ||\vec{\mathbf{u}}||_2=1$$

   假设 $\vec{\mathbf{u}}$ 与梯度的夹角为 θ，则目标函数等于：$||\vec{\mathbf{u}}||_2||\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}})||_2\cos\theta$。

   考虑到 $||\vec{\mathbf{u}}||_2=1$，以及梯度的大小与 θ 无关，于是上述问题转化为：

$$\min_{\theta}\cos\theta$$

于是：$\theta^*=\pi$，即 $\vec{\mathbf{u}}$ 沿着梯度的相反的方向。即：梯度的方向是函数值增加最快的方向，梯度的相反方向是函数值减小的最快的方向。

因此：可以沿着负梯度的方向来降低 f 的值，这就是梯度下降法。

4. 根据梯度下降法，为了寻找 f 的最小点，迭代过程为：$\vec{\mathbf{x}}'=\vec{\mathbf{x}}-\epsilon\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}})$ 。其中：ϵ 为学习率，它是一个正数，决定了迭代的步长。

   迭代结束条件为：梯度向量 $\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}})$ 的每个成分为零或者非常接近零。

5. 选择学习率有多种方法：

   - 一种方法是：选择 ϵ 为一个小的、正的常数。
   - 另一种方法是：给定多个 ϵ，然后选择使得 $f(\vec{\mathbf{x}}-\epsilon\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}}))$ 最小的那个值作为本次迭代的学习率（即：选择一个使得目标函数下降最大的学习率）。

     这种做法叫做线性搜索`line search` 。
   - 第三种方法是：求得使 $f(\vec{\mathbf{x}}-\epsilon\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}}))$ 取极小值的 ϵ，即求解最优化问题：

     $$\epsilon^*=\arg\min_{\epsilon,\epsilon>0}f(\vec{\mathbf{x}}-\epsilon\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}}))$$

     这种方法也称作最速下降法。

     - 在最速下降法中，假设相邻的三个迭代点分别为：$\vec{\mathbf{x}}^{<k>},\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>},\vec{\mathbf{x}}^{<k+2>}$，可以证明：$(\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>}-\vec{\mathbf{x}}^{<k>})\cdot(\vec{\mathbf{x}}^{<k+2>}-\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>})=0$。即相邻的两次搜索的方向是正交的！

       证明：

       $$\begin{aligned}\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>}&=\vec{\mathbf{x}}^{<k>}-\epsilon^{<k>}\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>})\\\vec{\mathbf{x}}^{<k+2>}&=\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>}-\epsilon^{<k+1>}\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>})\end{aligned}$$

       根据最优化问题，有：

       $$\epsilon^{<k>}=\arg\min_{\epsilon,\epsilon>0}f(\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>})$$

       将 $\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>}=\vec{\mathbf{x}}^{<k>}-\epsilon\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>})$ 代入，有：

       $$f(\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>})=f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>}-\epsilon\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>}))$$

       为求 $f(\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>})$ 极小值，则求解：$\frac{\partial f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>}-\epsilon\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>}))}{\partial\epsilon}|_{\epsilon=\epsilon^{<k>}}=0$ 。

       根据链式法则：

       $$\frac{\partial f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>}-\epsilon\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>}))}{\partial\epsilon}=\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>}-\epsilon\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>}))\cdot[-\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>})]=0$$

       即：$\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>})\cdot\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>})=0$ 。则有：$(\vec{\mathbf{x}}^{<k+2>}-\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>})\cdot(\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>}-\vec{\mathbf{x}}^{<k>})=0$ 。
     - 此时迭代的路线是锯齿形的，因此收敛速度较慢。

6. 某些情况下如果梯度向量 $\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}})$ 的形式比较简单，则可以直接求解方程：$\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}})=\vec{\mathbf{0}}$ 。

   此时不用任何迭代，直接获得解析解。

7. 梯度下降算法：

   - 输入：

    - 目标函数 $f(\vec{\mathbf{x}})$
    - 梯度函数 $g(\vec{\mathbf{x}})=\nabla f(\vec{\mathbf{x}})$
    - 计算精度 e
  - 输出： $f(\vec{\mathbf{x}})$ 的极小点 $\vec{\mathbf{x}}^*$
  - 算法步骤：
    - 选取初始值 $\vec{\mathbf{x}}^{<0>}\in\mathbb{R}^n$，置 $k=0$。
    - 迭代，停止条件为：梯度收敛或者目标函数收敛。迭代步骤为：
      - 计算目标函数 $f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>})$，计算梯度 $\vec{\mathbf{g}}_k=g(\vec{\mathbf{x}}^{<k>})$。
      - 若梯度 $|\vec{\mathbf{g}}_k|<e$，则停止迭代，$\vec{\mathbf{x}}^*=\vec{\mathbf{x}}$。
      - 若梯度 $|\vec{\mathbf{g}}_k|\geq e$，则令 $\vec{\mathbf{p}}_k=-\vec{\mathbf{g}}_k$，求 ϵ_k： $\epsilon_k=\min_{\epsilon\leq 0}f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>}+\epsilon\vec{\mathbf{p}}_k)$。

        > 通常这也是个最小化问题。但是可以给定一系列的ϵ_k的值，如：`[10,1,0.1,0.01,0.001,0.0001]`。然后从中挑选使得目标函数最小的那个。

      - 令 $\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>}=\vec{\mathbf{x}}^{<k>}+\epsilon_k\vec{\mathbf{p}}_k$，计算 $f(\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>})$。
        - 若 $|f(\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>})-f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>})|<e$或者 $|\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>}-\vec{\mathbf{x}}^{<k>}|<e$ 时，停止迭代，此时 $\vec{\mathbf{x}}^*=\vec{\mathbf{x}}$。
        - 否则，令 $k=k+1$，计算梯度 $\vec{\mathbf{g}}_k=g(\vec{\mathbf{x}}^{<k>})$ 继续迭代。

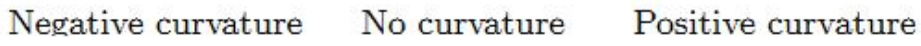
8. 当目标函数是凸函数时，梯度下降法的解是全局最优的。通常情况下，梯度下降法的解不保证是全局最优的。
9. 梯度下降法的收敛速度未必是最快的。

三、二阶导数与海森矩阵

3.1 海森矩阵

1. 二阶导数 $f''(x)$ 刻画了曲率。假设有一个二次函数（实际任务中，很多函数不是二次的，但是在局部可以近似为二次函数）：
   - 如果函数的二阶导数为零，则它是一条直线。如果梯度为 1，则当沿着负梯度的步长为 ϵ 时，函数值减少 ϵ。

- 如果函数的二阶导数为负，则函数向下弯曲。如果梯度为1，则当沿着负梯度的步长为 ϵ 时，函数值减少的量大于 ϵ 。
- 如果函数的二阶导数为正，则函数向上弯曲。如果梯度为1，则当沿着负梯度的步长为 ϵ 时，函数值减少的量少于 ϵ 。



2. 当函数输入为多维时，定义海森矩阵：

$$\mathbf{H}(f)(\vec{\mathbf{x}}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_1} f & \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} f & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_n} f \\ \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial x_1} f & \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial x_2} f & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial x_n} f \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2}{\partial x_n \partial x_1} f & \frac{\partial^2}{\partial x_n \partial x_2} f & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial x_n \partial x_n} f \end{bmatrix}$$

   即海森矩阵的第 i 行 j 列元素为：$\mathbf{H}_{i,j} = \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} f(\vec{\mathbf{x}})$ 。

3. 当二阶偏导是连续时，海森矩阵是对称阵，即有： $\mathbf{H} = \mathbf{H}^T$ 。

   在深度学习中大多数海森矩阵都是对称阵。

4. 对于特定方向 $\vec{\mathbf{d}}$ 上的二阶导数为：$\vec{\mathbf{d}}^T \mathbf{H} \vec{\mathbf{d}}$ 。
   - 如果 $\vec{\mathbf{d}}$ 是海森矩阵的特征向量，则该方向的二阶导数就是对应的特征值。
   - 如果 $\vec{\mathbf{d}}$ 不是海森矩阵的特征向量，则该方向的二阶导数就是所有特征值的加权平均，权重在 `(0,1)` 之间。且与 $\vec{\mathbf{d}}$ 夹角越小的特征向量对应的特征值具有更大的权重。
   - 最大特征值确定了最大二阶导数，最小特征值确定最小二阶导数。

3.2 海森矩阵与学习率

1. 将 $f(\vec{\mathbf{x}})$ 在 $\vec{\mathbf{x}}_0$ 处泰勒展开：$f(\vec{\mathbf{x}}) \approx f(\vec{\mathbf{x}}_0) + (\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_0)^T \vec{\mathbf{g}} + \frac{1}{2}(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_0)^T \mathbf{H}(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_0)$ 。其中：$\vec{\mathbf{g}}$ 为 $\vec{\mathbf{x}}_0$ 处的梯度；$\mathbf{H}$ 为 $\vec{\mathbf{x}}_0$ 处的海森矩阵。

   根据梯度下降法：$\vec{\mathbf{x}}' = \vec{\mathbf{x}} - \epsilon \nabla_{\vec{\mathbf{x}}} f(\vec{\mathbf{x}})$ 。

   应用在点 $\vec{\mathbf{x}}_0$，有：$f(\vec{\mathbf{x}}_0 - \epsilon \vec{\mathbf{g}}) \approx f(\vec{\mathbf{x}}_0) - \epsilon \vec{\mathbf{g}}^T \vec{\mathbf{g}} + \frac{1}{2}\epsilon^2 \vec{\mathbf{g}}^T \mathbf{H} \vec{\mathbf{g}}$ 。
   - 第一项代表函数在点 $\vec{\mathbf{x}}_0$ 处的值。
   - 第二项代表由于斜率的存在，导致函数值的变化。
   - 第三项代表由于曲率的存在，对于函数值变化的矫正。

2. 注意：如果 $\frac{1}{2}\epsilon^2\vec{\mathbf{g}}^T\mathbf{H}\vec{\mathbf{g}}$ 较大，则很有可能导致：沿着负梯度的方向，函数值反而增加！
   - 如果 $\vec{\mathbf{g}}^T\mathbf{H}\vec{\mathbf{g}}\leq 0$，则无论 ϵ 取多大的值， 可以保证函数值是减小的。
   - 如果 $\vec{\mathbf{g}}^T\mathbf{H}\vec{\mathbf{g}}> 0$， 则学习率 ϵ 不能太大。若 ϵ 太大则函数值增加。
     - 根据 $f(\vec{\mathbf{x}}_0-\epsilon\vec{\mathbf{g}})-f(\vec{\mathbf{x}}_0)<0$，则需要满足：$\epsilon<\frac{2\vec{\mathbf{g}}^T\vec{\mathbf{g}}}{\vec{\mathbf{g}}^T\mathbf{H}\vec{\mathbf{g}}}$ 。若 $\epsilon\geq\frac{2\vec{\mathbf{g}}^T\vec{\mathbf{g}}}{\vec{\mathbf{g}}^T\mathbf{H}\vec{\mathbf{g}}}$ ，则会导致沿着负梯度的方向函数值在增加。
     - 考虑最速下降法，选择使得 f 下降最快的 ϵ，则有：$\epsilon^*=\arg\min_{\epsilon,\epsilon>0}f(\vec{\mathbf{x}}_0-\epsilon\vec{\mathbf{g}})$ 。求解 $\frac{\partial}{\partial\epsilon}f(\vec{\mathbf{x}}_0-\epsilon\vec{\mathbf{g}})=0$ 有：$\epsilon^*=\frac{\vec{\mathbf{g}}^T\vec{\mathbf{g}}}{\vec{\mathbf{g}}^T\mathbf{H}\vec{\mathbf{g}}}$ 。

       根据 $\vec{\mathbf{g}}^T\mathbf{H}\vec{\mathbf{g}}>0$，很明显有： $\epsilon^*<\frac{2\vec{\mathbf{g}}^T\vec{\mathbf{g}}}{\vec{\mathbf{g}}^T\mathbf{H}\vec{\mathbf{g}}}$ 。

3. 由于海森矩阵为实对称阵，因此它可以进行特征值分解。假设其特征值从大到小排列为：$\lambda_1\geq\lambda_2\geq\cdots\geq\lambda_n$ 。

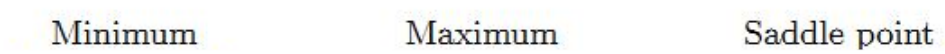
   海森矩阵的瑞利商为： $R(\vec{\mathbf{x}})=\frac{\vec{\mathbf{x}}^T\mathbf{H}\vec{\mathbf{x}}}{\vec{\mathbf{x}}^T\vec{\mathbf{x}}},\vec{\mathbf{x}}\neq\vec{\mathbf{0}}$ 。可以证明：

$$\lambda_n\leq R(\vec{\mathbf{x}})\leq\lambda_1$$
$$\lambda_1=\max_{\vec{\mathbf{x}}\neq\vec{\mathbf{0}}}R(\vec{\mathbf{x}})$$
$$\lambda_n=\min_{\vec{\mathbf{x}}\neq\vec{\mathbf{0}}}R(\vec{\mathbf{x}})$$

   根据 $\epsilon^*=\frac{\vec{\mathbf{g}}^T\vec{\mathbf{g}}}{\vec{\mathbf{g}}^T\mathbf{H}\vec{\mathbf{g}}}=\frac{1}{R(\vec{\mathbf{g}})}$ 可知：海森矩阵决定了学习率的取值范围。最坏的情况下，梯度 $\vec{\mathbf{g}}$ 与海森矩阵最大特征值 λ_1 对应的特征向量平行，则此时最优学习率为 $\frac{1}{\lambda_1}$ 。

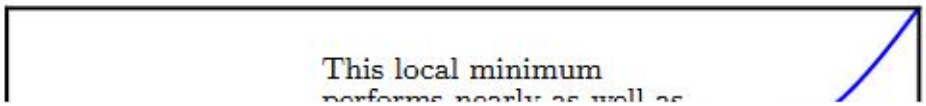
3.3 驻点与全局极小点

1. 满足导数为零的点（即 $f'(x)=0$）称作驻点。驻点可能为下面三种类型之一：
   - 局部极小点：在 x 的一个邻域内，该点的值最小。
   - 局部极大点：在 x 的一个邻域内，该点的值最大。
   - 鞍点：既不是局部极小，也不是局部极大。



2. 全局极小点：$x^*=\arg\min_x f(x)$。
   - 全局极小点可能有一个或者多个。
   - 在深度学习中，目标函数很可能具有非常多的局部极小点，以及许多位于平坦区域的鞍点。这使得优化非常不利。

     因此通常选取一个非常低的目标函数值，而不一定要是全局最小值。



3. 二阶导数可以配合一阶导数来决定驻点的类型：
   - 局部极小点：$f'(x)=0, f''(x)>0$ 。
   - 局部极大点：$f'(x)=0, f''(x)<0$ 。
   - $f'(x)=0, f''(x)=0$ ：驻点的类型可能为任意三者之一。
4. 对于多维的情况类似有：
   - 局部极小点：$\nabla_{\vec{\mathbf{x}}} f(\vec{\mathbf{x}})=0$，且海森矩阵为正定的（即所有的特征值都是正的）。

     当海森矩阵为正定时，任意方向的二阶偏导数都是正的。
   - 局部极大点：$\nabla_{\vec{\mathbf{x}}} f(\vec{\mathbf{x}})=0$，且海森矩阵为负定的（即所有的特征值都是负的）。

     当海森矩阵为负定时，任意方向的二阶偏导数都是负的。
   - $\nabla_{\vec{\mathbf{x}}} f(\vec{\mathbf{x}})=0$，且海森矩阵的特征值中至少一个正值、至少一个负值时，为鞍点。
   - 当海森矩阵非上述情况时，驻点类型无法判断。

   下图为 $f(\vec{\mathbf{x}})=x_1^2-x_2^2$ 在原点附近的等值线。其海森矩阵为一正一负。
   - 沿着 x_1 方向，曲线向上弯曲；沿着 x_2 方向，曲线向下弯曲。
   - 鞍点就是在一个横截面内的局部极小值，另一个横截面内的局部极大值。

四、牛顿法

1. 梯度下降法有个缺陷：它未能利用海森矩阵的信息。
   - 当海森矩阵的条件数较大时，不同方向的梯度的变化差异很大。
     - 在某些方向上，梯度变化很快；在有些方向上，梯度变化很慢。
     - 梯度下降法未能利用海森矩阵，也就不知道应该优先搜索导数长期为负或者长期为正的方向。

       本质上应该沿着负梯度方向搜索。但是沿着该方向的一段区间内，如果导数一直为正或者一直为负，则可以直接跨过该区间。前提是：必须保证该区间内，该方向导数不会发生正负改变。
   - 当海森矩阵的条件数较大时，也难以选择合适的步长。
     - 步长必须足够小，从而能够适应较强曲率的地方（对应着较大的二阶导数，即该区域比较陡峭）。
     - 但是如果步长太小，对于曲率较小的地方（对应着较小的二阶导数，即该区域比较平缓）则推进太慢。

2. 下图是利用梯度下降法寻找函数最小值的路径。该函数是二次函数，海森矩阵条件数为 5，表明最大曲率是最小曲率的5倍。红线为梯度下降的搜索路径。

   > 它没有用最速下降法，而是用到线性搜索。如果是最速下降法，则相邻两次搜索的方向正交。

3. 牛顿法结合了海森矩阵。

   考虑泰勒展开式：$f(\vec{\mathbf{x}}) \approx f(\vec{\mathbf{x}}_0) + (\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_0)^T\vec{\mathbf{g}} + \frac{1}{2}(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_0)^T\mathbf{H}(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_0)$ 。其中 $\vec{\mathbf{g}}$ 为 $\vec{\mathbf{x}}_0$ 处的梯度； $\mathbf{H}$ 为 $\vec{\mathbf{x}}_0$ 处的海森矩阵。

   如果 $\vec{\mathbf{x}}$ 为极值点，则有： $\frac{\partial}{\partial\vec{\mathbf{x}}}f(\vec{\mathbf{x}}) = \vec{\mathbf{0}}$，则有：$\vec{\mathbf{x}}^* = \vec{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{H}^{-1}\vec{\mathbf{g}}$ 。

   - 当 f 是个正定的二次型，则牛顿法直接一次就能到达最小值点。
   - 当 f 不是正定的二次型，则可以在局部近似为正定的二次型，那么则采用多次牛顿法即可到达最小值点。

4. 一维情况下，梯度下降法和牛顿法的原理展示：

   - 梯度下降法：下一次迭代的点 $\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>} = \vec{\mathbf{x}}^{<k>} - \epsilon_k\nabla f(\vec{\mathbf{x}})$。

     对于一维的情况，可以固定 $\epsilon_k = \eta$ 。由于随着迭代的推进，$f'(x)$ 绝对值是减小的（直到0），因此越靠近极值点，$\Delta(x)$ 越小。

   - 牛顿法：目标是 $\nabla f(\vec{\mathbf{x}}) = 0$。

     在一维情况下就是求解 $f'(x) = 0$。牛顿法的方法是：以 $x = x^{<k>}$ 做 $y = f'(x)$ 切线，该切线过点 $(x^{<k>}, f'(x^{<k>}))$。该切线在 x 轴上的交点就是： $x^{<k+1>} = x^{<k>} - \frac{f'(x^{<k>})}{f''(x^{<k>})}$ 。

     推广到多维情况下就是：$\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>} = \vec{\mathbf{x}}^{<k>} - \mathbf{H}_k^{-1}\vec{\mathbf{g}}_k$ 。

5. 当位于一个极小值点附近时，牛顿法比梯度下降法能更快地到达极小值点。

   如果在一个鞍点附近，牛顿法效果很差，因为牛顿法会主动跳入鞍点。而梯度下降法此时效果较好（除非负梯度的方向刚好指向了鞍点）。

6. 仅仅利用了梯度的优化算法（如梯度下降法）称作一阶优化算法，同时利用了海森矩阵的优化算法（如牛顿法）称作二阶优化算法。

7. 牛顿法算法：

   - 输入：
     - 目标函数 $f(\vec{\mathbf{x}})$
     - 梯度 $g(\vec{\mathbf{x}}) = \nabla f(\vec{\mathbf{x}})$
     - 海森矩阵 $\mathbf{H}(\vec{\mathbf{x}})$
     - 精度要求 e
   - 输出： $f(\vec{\mathbf{x}})$ 的极小值点 $\vec{\mathbf{x}}^*$
   - 算法步骤：
     - 选取初始值 $\vec{\mathbf{x}}^{<0>} \in \mathbb{R}^n$, 置 $k = 0$ 。
     - 迭代，停止条件为：梯度收敛。迭代步骤为：
       - 计算 $\vec{\mathbf{g}}_k = g(\vec{\mathbf{x}}^{<k>})$ 。
       - 若 $|\vec{\mathbf{g}}_k| < e$， 则停止计算，得到近似解 $\vec{\mathbf{x}} = \vec{\mathbf{x}}^*$ 。
       - 若 $|\vec{\mathbf{g}}_k| \geq e$， 则：
         - 计算 $\mathbf{H}_k = \mathbf{H}(\vec{\mathbf{x}}^{<k>})$，并求 $\vec{\mathbf{p}}_k$，使得：$\mathbf{H}_k\vec{\mathbf{p}}_k = -\vec{\mathbf{g}}_k$ 。
         - 置 $\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>} = \vec{\mathbf{x}}^{<k>} + \vec{\mathbf{p}}_k$ 。
         - 置 $k = k + 1$ ，继续迭代。

8. 梯度下降法中，每一次 $\vec{\mathbf{x}}$ 增加的方向一定是梯度相反的方向 $-\epsilon_k\nabla_k$ 。增加的幅度由 ϵ_k 决定，若跨度过大容易引发震荡。

   而牛顿法中，每一次 $\vec{\mathbf{x}}$ 增加的方向是梯度增速最大的反方向 $-\mathbf{H}_k^{-1}\nabla_k$（它通常情况下与梯度不共线）。增加的幅度已经包含在 $\mathbf{H}_k^{-1}$ 中（也可以乘以学习率作为幅度的系数）。

9. 深度学习中的目标函数非常复杂，无法保证可以通过上述优化算法进行优化。因此有时会限定目标函数具有`Lipschitz`连续，或者其导数`Lipschitz`连续。

   - `Lipschitz`连续的定义：对于函数 f，存在一个`Lipschitz`常数 $\mathcal{L}$，使得：

     $$\forall\vec{\mathbf{x}},\forall\vec{\mathbf{y}},|f(\vec{\mathbf{x}})-f(\vec{\mathbf{y}})|\leq\mathcal{L}||\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{y}}||_2$$

   - `Lipschitz`连续的意义是：输入的一个很小的变化，会引起输出的一个很小的变化。

     > 与之相反的是：输入的一个很小的变化，会引起输出的一个很大的变化

10. 凸优化在某些特殊的领域取得了巨大的成功。但是在深度学习中，大多数优化问题都难以用凸优化来描述。

    凸优化的重要性在深度学习中大大降低。凸优化仅仅作为一些深度学习算法的子程序。

五、拟牛顿法

5.1 原理

1. 在牛顿法的迭代中，需要计算海森矩阵的逆矩阵 $\mathbf{H}^{-1}$，这一计算比较复杂。

   可以考虑用一个 n 阶矩阵 $\mathbf{G}_k=G(\vec{\mathbf{x}}^{<k>})$ 来近似代替 $\mathbf{H}_k^{-1}=H^{-1}(\vec{\mathbf{x}}^{<k>})$。

2. 先看海森矩阵满足的条件：$\vec{\mathbf{g}}_{k+1}-\vec{\mathbf{g}}_k=\mathbf{H}_k(\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>}-\vec{\mathbf{x}}^{<k>})$ 。

   - 令 $\vec{\mathbf{y}}_k=\vec{\mathbf{g}}_{k+1}-\vec{\mathbf{g}}_k,\vec{\delta}_k=\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>}-\vec{\mathbf{x}}^{<k>}$ 。则有：$\vec{\mathbf{y}}_k=\mathbf{H}_k\vec{\delta}_k$，或者 $\mathbf{H}_k^{-1}\vec{\mathbf{y}}_k=\vec{\delta}_k$。

     这称为拟牛顿条件。

   - 根据牛顿法的迭代：$\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>}=\vec{\mathbf{x}}^{<k>}-\mathbf{H}_k^{-1}\vec{\mathbf{g}}_k$，将 $f(\vec{\mathbf{x}})$ 在 $\vec{\mathbf{x}}^{<k>}$ 的一阶泰勒展开：

     $$\begin{aligned}f(\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>})&=f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>})+f'(\vec{\mathbf{x}}^{<k>})(\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>}-\vec{\mathbf{x}}^{<k>})\\&=f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>})+\vec{\mathbf{g}}_k^T(-\mathbf{H}_k^{-1}\vec{\mathbf{g}}_k)=f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>})-\vec{\mathbf{g}}_k^T\mathbf{H}_k^{-1}\vec{\mathbf{g}}_k\end{aligned}$$

     当 $\mathbf{H}_k$ 是正定矩阵时，总有 $f(\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>})<f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>})$，因此每次都是沿着函数递减的方向迭代。

3. 如果选择 $\mathbf{G}_k$ 作为 $\mathbf{H}_k^{-1}$ 的近似时，$\mathbf{G}_k$ 同样要满足两个条件：

   - $\mathbf{G}_k$ 必须是正定的。
   - $\mathbf{G}_k$ 满足拟牛顿条件：$\mathbf{G}_{k+1}\vec{\mathbf{y}}_k=\vec{\delta}_k$ 。

     因为 $\mathbf{G}_0$ 是给定的初始化条件，所以下标从 $k+1$ 开始。

   按照拟牛顿条件，在每次迭代中可以选择更新矩阵 $\mathbf{G}_{k+1}=\mathbf{G}_k+\Delta\mathbf{G}_k$ 。

4. 正定矩阵定义：设 $\mathbf{M}$ 是 $n\times n$ 阶方阵，如果对任何非零向量$\vec{\mathbf{x}}$，都有 $\vec{\mathbf{x}}^T\mathbf{M}\vec{\mathbf{x}}>0$，就称 $\mathbf{M}$正定矩阵。

   - 正定矩阵判定：
     - 判定定理1：对称阵 $\mathbf{M}$ 为正定的充分必要条件是：$\mathbf{M}$ 的特征值全为正。
     - 判定定理2：对称阵 $\mathbf{M}$ 为正定的充分必要条件是：$\mathbf{M}$ 的各阶顺序主子式都为正。
     - 判定定理3：任意阵 $\mathbf{M}$ 为正定的充分必要条件是：$\mathbf{M}$ 合同于单位阵。
   - 正定矩阵的性质：

        - 正定矩阵一定是非奇异的。奇异矩阵的定义：若 $n\times n$ 阶矩阵 $\mathbf{M}$ 为奇异阵，则其的行列式为零，即 $|\mathbf{M}|=0$。
        - 正定矩阵的任一主子矩阵也是正定矩阵。
        - 若 $\mathbf{M}$ 为$n\times n$ 阶对称正定矩阵，则存在唯一的主对角线元素都是正数的下三角阵 $\mathbf{L}$，使得 $\mathbf{M}=\mathbf{L}\mathbf{L}^T$，此分解式称为 正定矩阵的乔列斯基（`Cholesky`）分解。
        - 若 $\mathbf{M}$ 为 $n\times n$ 阶正定矩阵，则 $\mathbf{M}$ 为 $n\times n$ 阶可逆矩阵。
    - 正定矩阵在某个合同变换下可化为标准型， 即对角矩阵。
    - 所有特征值大于零的对称矩阵也是正定矩阵。
5. 合同矩阵：两个实对称矩阵 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 是合同的，当且仅当存在一个可逆矩阵 $\mathbf{P}$ ，使得 $\mathbf{A}=\mathbf{P}^T\mathbf{B}\mathbf{P}$
    - $\mathbf{A}$ 的合同变换：对某个可逆矩阵 $\mathbf{P}$，对 $\mathbf{A}$ 执行 $\mathbf{P}^T\mathbf{A}\mathbf{P}$。

5.2 DFP 算法

1. `DFP` 算法(`Davidon-Fletcher-Powell`) 选择 $\mathbf{G}_{k+1}$ 的方法是：

   假设每一步迭代中 $\mathbf{G}_{k+1}$ 是由 $\mathbf{G}_k$ 加上两个附加项构成：$\mathbf{G}_{k+1}=\mathbf{G}_k+\mathbf{P}_k+\mathbf{Q}_k$，其中 $\mathbf{P}_k,\mathbf{Q}_k$ 是待定矩阵。此时有：$\mathbf{G}_{k+1}\vec{\mathbf{y}}_k=\mathbf{G}_k\vec{\mathbf{y}}_k+\mathbf{P}_k\vec{\mathbf{y}}_k+\mathbf{Q}_k\vec{\mathbf{y}}_k$。

   为了满足拟牛顿条件，可以取：$\mathbf{P}_k\vec{\mathbf{y}}_k=\vec{\delta}_k,\quad \mathbf{Q}_k\vec{\mathbf{y}}_k=-\mathbf{G}_k\vec{\mathbf{y}}_k$。

   这样的$\mathbf{P}_k,\mathbf{Q}_k$ 不止一个。例如取：

   $$\mathbf{P}_k=\frac{\vec{\delta}_k\vec{\delta}_k^T}{\vec{\delta}_k^T\vec{\mathbf{y}}_k},\quad \mathbf{Q}_k=-\frac{\mathbf{G}_k\vec{\mathbf{y}}_k\vec{\mathbf{y}}_k^T\mathbf{G}_k}{\vec{\mathbf{y}}_k^T\mathbf{G}_k\vec{\mathbf{y}}_k}$$

   则迭代公式为：

   $$\mathbf{G}_{k+1}=\mathbf{G}_k+\frac{\vec{\delta}_k\vec{\delta}_k^T}{\vec{\delta}_k^T\vec{\mathbf{y}}_k}-\frac{\mathbf{G}_k\vec{\mathbf{y}}_k\vec{\mathbf{y}}_k^T\mathbf{G}_k}{\vec{\mathbf{y}}_k^T\mathbf{G}_k\vec{\mathbf{y}}_k}$$

   可以证明：如果初始矩阵 $\mathbf{G}_0$ 是正定的，则迭代过程中每个矩阵 $\mathbf{G}_k$ 都是正定的。

2. `DFP` 算法：
    - 输入：
        - 目标函数 $f(\vec{\mathbf{x}})$
        - 梯度 $g(\vec{\mathbf{x}})=\nabla f(\vec{\mathbf{x}})$
        - 精度要求 e
    - 输出： $f(\vec{\mathbf{x}})$ 的极小值点 $\vec{\mathbf{x}}^*$
    - 算法步骤：
        - 选取初始值 $\vec{\mathbf{x}}^{<0>}\in\mathbb{R}^n$, 取 $\mathbf{G}_0$ 为正定对称矩阵，置 $k=0$ 。
        - 迭代，停止条件为：梯度收敛。迭代步骤为：
            - 计算 $\vec{\mathbf{g}}_k=g(\vec{\mathbf{x}}^{<k>})$ 。
            - 若 $|\vec{\mathbf{g}}_k|<e$， 则停止计算，得到近似解 $\vec{\mathbf{x}}=\vec{\mathbf{x}}^*$。
            - 若 $|\vec{\mathbf{g}}_k|\geq e$， 则：
                - 计算 $\vec{\mathbf{p}}_k=-\mathbf{G}_k\vec{\mathbf{g}}_k$ 。
                - 一维搜索：求 ϵ_k： $\epsilon_k=\min_{\epsilon\geq 0}f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>}+\epsilon\vec{\mathbf{p}}_k)$ 。
                - 设置 $\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>}=\vec{\mathbf{x}}^{<k>}+\epsilon_k\vec{\mathbf{p}}_k$ 。

        - 计算 $\vec{\mathbf{g}}_{k+1}=g(\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>})$。若 $|\vec{\mathbf{g}}_{k+1}|<e$，则停止计算，得到近似解 $\vec{\mathbf{x}}=\vec{\mathbf{x}}^*$ 。
        - 否则计算 $\mathbf{G}_{k+1}$，置 $k=k+1$，继续迭代。
3. `DFP` 算法中，每一次 $\vec{\mathbf{x}}$ 增加的方向是 $-\mathbf{G}_k\nabla_k$ 的方向。增加的幅度由 ϵ_k 决定，若跨度过大容易引发震荡。

5.2 BFGS 算法

1. `BFGS` 是最流行的拟牛顿算法。 `DFP` 算法中，用 $\mathbf{G}_k$ 逼近 $\mathbf{H}^{-1}$。换个角度看，可以用矩阵 $\mathbf{B}_k$ 逼近海森矩阵 $\mathbf{H}$。此时对应的拟牛顿条件为： $\mathbf{B}_{k+1}\vec{\delta}_k=\vec{\mathbf{y}}_k$。

   > 因为 $\mathbf{B}_0$ 是给定的初始化条件，所以下标从 $k+1$ 开始。

2. 令： $\mathbf{B}_{k+1}=\mathbf{B}_k+\mathbf{P}_k+\mathbf{Q}_k$，有： $\mathbf{B}_{k+1}\vec{\delta}_k=\mathbf{B}_k\vec{\delta}_k+\mathbf{P}_k\vec{\delta}_k+\mathbf{Q}_k\vec{\delta}_k$ 。

   可以取 $\mathbf{P}_k\vec{\delta}_k=\vec{\mathbf{y}}_k,\mathbf{Q}_k\vec{\delta}_k=-\mathbf{B}_k\vec{\delta}_k$ 。寻找合适的 $\mathbf{P}_k,\mathbf{Q}_k$ ，可以得到 `BFGS` 算法矩阵的 $\mathbf{B}_{k+1}$ 的迭代公式：

   $$\mathbf{B}_{k+1}=\mathbf{B}_k+\frac{\vec{\mathbf{y}}_k\vec{\mathbf{y}}_k^T}{\vec{\mathbf{y}}_k^T\vec{\delta}_k}-\frac{\mathbf{B}_k\vec{\delta}_k\vec{\delta}_k^T\mathbf{B}_k}{\vec{\delta}_k^T\mathbf{B}_k\vec{\delta}_k}$$

   可以证明，若 $\mathbf{B}_0$ 是正定的，则迭代过程中每个矩阵 $\mathbf{B}_k$ 都是正定的。

3. `BFGS` 算法：
   - 输入：
     - 目标函数 $f(\vec{\mathbf{x}})$
     - 梯度 $g(\vec{\mathbf{x}})=\nabla f(\vec{\mathbf{x}})$
     - 精度要求 e
   - 输出： $f(\vec{\mathbf{x}})$ 的极小值点 $\vec{\mathbf{x}}^*$
   - 算法步骤：
     - 选取初始值 $\vec{\mathbf{x}}^{<0>}\in\mathbb{R}^n$，取 $\mathbf{B}_0$ 为正定对称矩阵，置 $k=0$ 。
     - 迭代，停止条件为：梯度收敛。迭代步骤为：
       - 计算 $\vec{\mathbf{g}}_k=g(\vec{\mathbf{x}}^{<k>})$ 。
       - 若 $|\vec{\mathbf{g}}_k|<e$，则停止计算，得到近似解 $\vec{\mathbf{x}}=\vec{\mathbf{x}}^*$ 。
       - 若 $|\vec{\mathbf{g}}_k|\geq e$，则:
         - 由 $\mathbf{B}_k\vec{\mathbf{p}}_k=-\vec{\mathbf{g}}_k$ 求出 $\vec{\mathbf{p}}_k$ 。

           > 这里表面上看需要对矩阵求逆。但是实际上 $\mathbf{B}_k^{-1}$ 有迭代公式。根据 `Sherman-Morrison` 公式以及 $\mathbf{B}_k$ 的迭代公式，可以得到 $\mathbf{B}_k^{-1}$ 的迭代公式。

         - 一维搜索：求 ϵ_k： $\epsilon_k=\min_{\epsilon\geq 0}f(\vec{\mathbf{x}}^{<k>}+\epsilon\vec{\mathbf{p}}_k)$ 。
         - 设置 $\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>}=\vec{\mathbf{x}}^{<k>}+\epsilon_k\vec{\mathbf{p}}_k$ 。
         - 计算 $\vec{\mathbf{g}}_{k+1}=g(\vec{\mathbf{x}}^{<k+1>})$。若 $|\vec{\mathbf{g}}_{k+1}|<e$ ， 则停止计算，得到近似解 $\vec{\mathbf{x}}=\vec{\mathbf{x}}^*$ 。
         - 否则计算 $\mathbf{B}_{k+1}$ ，置 $k=k+1$ ，继续迭代。
4. `BFPS` 算法中，每一次 $\vec{\mathbf{x}}$ 增加的方向是 $-\mathbf{B}_k^{-1}\nabla_k$ 的方向。增加的幅度由 ϵ_k 决定，若跨度过大容易引发震荡。

5.3 Broyden 类算法

1. 若记 $\mathbf{G}_k=\mathbf{B}_k^{-1},\mathbf{G}_{k+1}=\mathbf{B}_{k+1}^{-1}$，则对式子：

$$\mathbf{B}_{k+1}=\mathbf{B}_k+\frac{\vec{\mathbf{y}}_k\vec{\mathbf{y}}_k^T}{\vec{\mathbf{y}}_k^T\vec{\delta}_k}-\frac{\mathbf{B}_k\vec{\delta}_k\vec{\delta}_k^T\mathbf{B}_k}{\vec{\delta}_k^T\mathbf{B}_k\vec{\delta}_k}$$

使用两次`Sherman-Morrison`公式可得：

$$\mathbf{G}_{k+1}=(\mathbf{I}-\frac{\vec{\delta}_k\vec{\mathbf{y}}_k^T}{\vec{\delta}_k^T\vec{\mathbf{y}}_k})\mathbf{G}_k(\mathbf{I}-\frac{\vec{\delta}_k\vec{\mathbf{y}}_k^T}{\vec{\delta}_k^T\vec{\mathbf{y}}_k})^T+\frac{\vec{\delta}_k\vec{\delta}_k^T}{\vec{\delta}_k^T\vec{\mathbf{y}}_k}$$

2. 令 `DFP` 算法获得的 $\mathbf{G}_{k+1}$ 的迭代公式记作：

$$\mathbf{G}^{DFP}=\mathbf{G}_k+\frac{\vec{\delta}_k\vec{\delta}_k^T}{\vec{\delta}_k^T\vec{\mathbf{y}}_k}-\frac{\mathbf{G}_k\vec{\mathbf{y}}_k\vec{\mathbf{y}}_k^T\mathbf{G}_k}{\vec{\mathbf{y}}_k^T\mathbf{G}_k\vec{\mathbf{y}}_k}$$

由 `BFGS` 算法获得的 $\mathbf{G}_{k+1}$ 的迭代公式记作：

$$\mathbf{G}^{BFGS}=(\mathbf{I}-\frac{\vec{\delta}_k\vec{\mathbf{y}}_k^T}{\vec{\delta}_k^T\vec{\mathbf{y}}_k})\mathbf{G}_k(\mathbf{I}-\frac{\vec{\delta}_k\vec{\mathbf{y}}_k^T}{\vec{\delta}_k^T\vec{\mathbf{y}}_k})^T+\frac{\vec{\delta}_k\vec{\delta}_k^T}{\vec{\delta}_k^T\vec{\mathbf{y}}_k}$$

他们都满足拟牛顿条件，所以他们的线性组合：$\mathbf{G}_{k+1}=\alpha\mathbf{G}^{DFP}+(1-\alpha)\mathbf{G}^{BFGS}$