**第4章 超越梯度下降**

第3章介绍了梯度下降法。梯度下降法基于函数局部一阶特性。一阶近似是粗糙的，这种粗糙带来了一些问题。本章将介绍函数在局部的二阶特性。基于二阶特性分析函数在局部的性质。

本章首先回顾一些矩阵的相关知识，之后介绍如何在局部对函数进行二阶近似。有了函数的二阶近似就可以确定驻点的类型：极小点、极大点或者鞍点。之后本章介绍对原始梯度下降法的一些改进，这些改进有助于提高收敛速度，防止震荡或发散，规避局部极小。

最后，本章介绍两个基于函数二阶特性的优化算法：牛顿法和共轭方向法。然后介绍用牛顿法训练逻辑回归模型。二阶算法虽然不常用在神经网络和深度学习的训练中。阅读完本章，读者应该对函数的局部形态有更深刻的理解。

**4.1 矩阵**

首先回顾一下矩阵。这不是一个关于矩阵的全面介绍，例如行列式这个概念就没有出现。本节只介绍一下后文讨论中用得上的相关知识。

**4.1.1 矩阵基础**

矩阵是实数构成的2维阵列。以一个矩阵为例：

（4.1）

式（4.1）囊括了本书用到的对矩阵的各种表示。本书用大写粗斜体字母表示矩阵，例如。是实数，是矩阵的第行、第列元素。是矩阵的第列，它是一个列向量：

（4.2）

是矩阵的第行，它是一个列向量：

（4.3）

式（4.1）中对进行了转置，以表示一行。矩阵的行数和列数不一定相等，可以是，。表示成：

（4.4）

一般可省略下标。两个相同形状的矩阵可以相加：

（4.5）

矩阵相加就是把相应元素相加。可以用实数（标量）乘一个矩阵：

（4.6）

就是。显然有。是所有元素都为0的矩阵——零矩阵。矩阵的转置定义为：

（4.7）

把的行当做列，列当做行。如果是的，那么就是的。如果矩阵是的，它可以与一个维向量相乘：

（4.8）

矩阵乘向量，使用的元素对矩阵的列进行线性组合。所以的列数和的维数必须相同。得到的结果是一个维向量。容易看出的第个元素是，即的第行与的内积。

有了矩阵和向量相乘的定义，就可以定义矩阵与矩阵相乘：

（4.9）

与的乘积是矩阵。的第列是与的第列的乘积。如果是的，那么必须是维向量，即必须为行。的列数任意，例如。所以要能够与的相乘，的形状必须是，任意。结果的形状是。的第行、第列元素是：

（4.10）

仅从形状上看与不一定能够相乘，因为不一定等于。就算，也不一定等于。即矩阵乘法不满足交换律。一个反例就可以证明这一点。这里不再赘述。

矩阵的乘法满足结合率：

（4.11）

矩阵乘法对加法满足结合律：

（4.12）

矩阵乘法对数乘满足：

（4.13）

矩阵的数乘满足分配率：

（4.14）

矩阵乘积的转置是：

（4.15）

上述几个规则的证明很简单，只需要检查一下矩阵元素的表达式。向量的转置可以乘一个矩阵：

（4.16）

把列向量和行向量分别看作和的矩阵，则矩阵与向量的乘法也满足上述几个规则。

行数和列数相同的矩阵是方阵。方阵的对角线元素之和称为它的迹（trace）：

（4.17）

方阵和的乘积的迹等于的迹，因为**：**

（4.18）

如果一个的方阵的对角线元素为1，其余元素都是0，那么它是单位阵：

（4.19）

容易验证对于任何矩阵，。在上下文很清晰时一般省略的下标。

**4.1.2 矩阵的逆**

令是方阵，如果存在方阵满足：

（4.20）

则称是可逆的。是的逆矩阵。的逆矩阵是唯一的。因为假如任何一个矩阵是的逆矩阵，根据定义有：

（4.21）

如果可逆则的列线性独立。因为假如线性相关，则存在一组不全为0的系数，使得。即存在向量使：

（4.22）

因为可逆，存在：

（4.23）

这与矛盾。所以可逆矩阵的列一定线性独立。如果方阵的逆矩阵是，则称为正交矩阵：

（4.24）

从（4.24）可以看出的列是单位向量且两两正交：

（4.25）

也就是说，正交矩阵的列都是单位向量，。任意两列是正交的（夹角为）。因为可逆，所以线性独立，是维线性空间的一组基。因为两两正交，还是单位向量，所以它们被称为的一组标准正交基。

如果一组向量是线性独立的，可以通过施密特正交化过程构造一组正交的向量。构造过程是，首先令。然后令：

（4.26）

是与的夹角。是减去向的投影。与线性独立，它不是的数乘，所以不是零向量。而且容易验证与正交。再令：

（4.27）

是与的夹角，是与的夹角。是减去向张成空间的投影。如果，那么可以被线性表出，也就可以被线性表出，这与线性独立矛盾。故。容易验证正交于。此过程继续下去，最终可构造一组正交向量。这就是施密特正交化过程。将的每一个向量除以各自的模，缩放到长度为1，就得到了一组正交的单位向量。

**4.1.3 特征值与特征向量**

特征值和特征向量的概念不局限于方阵，但本书主要关注方阵。用方阵乘向量是在中进行一个变换，将变换成。例如矩阵：

（4.28）

用乘向量等于将逆时针旋转度。这可以自行验证。任何方阵也改变不了零向量，因为。如果对于某非零向量，只能改变的长度而不能改变其方向，即存在某个标量（可以为0），有：

（4.29）

则称是的特征值，是的对于的特征向量。同一个特征向量不可能对应两个特征值。假如都有是其特征向量：

（4.30）

且，所以式（4.30）是不可能的。但是同一个特征值可以对应多个特征向量。如果是对应的特征向量，容易验证也是对应的特征向量。线性独立的两个向量也有可能是同一个特征值对应的特征向量。

假如对应的特征向量和是线性独立的，即谁也不是另一个的数乘。那么也是对应的特征向量。这也很容易验证。如果特征值共有个线性独立的特征向量，由它们线性组合而得的向量也是的特征向量。这个线性独立的特征向量张成的维线性空间称为对应的特征空间，其中所有向量都是的特征向量。

将式（4.29）变形。如果是的特征值，它必须满足对某个，有：

（4.31）

因为，所以的列线性相关。求的特征值和特征向量，就是求满足方程（4.31）的和。若要的列线性相关，则的行列式等于0。本书没有涉及行列式，因为行列式与本书主线关系不大，加进来会影响流畅性。读者可以查阅任何一种线性代数教材。是的次方程。它有个根（包括重根和复数根）。即有个特征值（包括重复的以及复特征值）。求得了，就可以再求它对应的特征向量。

矩阵属于不同特征值的特征向量是线性独立的。现在证明这一点。是个不同特征值对应的特征向量。如果它们线性相关，则其中某一个可以被其他线性表出：

（4.32）

因为是的特征向量，所以它不是零向量。那么一定不全为0。另外根据特征值和特征向量的定义：

（4.33）

如果，那么。再加上不全为0，说明线性相关。在情况下我们将问题规模减小了1。如果，有：

（4.34）

于是式（4.34）等于式（4.32），所以有：

（4.35）

因为都是不同的特征值，所以。再加上不全为0，说明线性相关。在情况下我们也将问题规模减小了1。这个过程持续下去，最终将只剩下两个向量和。他们分属不同的特征值和。且和线性相关，其中一个是另一个的数乘。不妨假设，则也是的特征向量。之前已经证明，一个向量不可能同时属于两个不同特征值。这就推翻了最早的假设，证明了线性独立。

**4.1.4 对称矩阵的谱分解**

如果方阵满足:

（4.36）

如果的元素都是实数，则它是一个实矩阵。实矩阵的特征值都是实数，特征向量是实向量。为了证明这个结论，我们需要暂时离开实数域。

复数的共轭是。

（4.37）

只有当，即时，才有。否则。对于两个复数和，有：

（4.38）

把复矩阵的元素全都取共轭就得到的共轭。如果（复数）和（复向量）是的特征值及对应特征向量，由式（4.38）容易看出：和是的特征值及对应特征向量。

（4.39）

因为是实对称矩阵，有，所以有：

（4.40）

因为，根据式（4.37）。所以，即是实数。是实矩阵，是实数，所以一定是实向量。这就证明了实对称矩阵的特征值都是实数，特征向量是实向量。后文谈到矩阵都是实矩阵。

所以实对称矩阵有个实特征值（可重复）。有一个结论我们不加证明：如果是的重特征值（方程的重根），则对应的特征空间是维，即对于能找到个线性独立的特征向量。

对于对称矩阵，求得它的个特征值，从大到小排列。对每个特征值找到一个它的单位特征向量。如果某个特征值是重，那么找到它的个线性独立的特征向量，经过施密特正交化过程，再缩放到长度为1。这样，一共找到个单位特征向量。可以证明这个特征向量是线性独立的。因为假如它们线性相关，则存在一组不全为0的参数满足：

（4.41）

如果个特征值共有种不同取值，把属于同一个取值的特征向量归到一起：

（4.42）

是属于第个排重特征值（一共排重特征值）的特征向量下标集合。式（4.42）中每一个是对第个排重特征值的特征向量的线性组合，它仍然是第个排重特征值的特征向量。不可能所有都是零向量。因为存在非0的且，这与线性独立产生矛盾。那些非零的加在一起是零向量，又与属于不同特征值的特征向量线性独立矛盾。所以是线性独立的。

对称矩阵属于不同特征值的特征向量是正交的。如果和是的两个不同特征值，和是特们各自的特征向量，有：

（4.43）

式（4.43）多次用到了特征值/特征向量的定义，以及标量的转置还是该实数本身。注意观察式（4.43）那些计算结果是标量。

根据式（4.43），有：

（4.44）

因为，所以必有。

的属于同一个特征值的特征向量已经经过施密特正交化，它们彼此正交。刚刚证明了属于不同特征值的特征向量是正交的，所以是线性独立、两两正交的单位向量。用它们作为列，构造矩阵：

（4.45）

是正交矩阵。用的特征值构造对角矩阵：

（4.46）

的个对角线元素是从大到小排列的特征值。其余元素是0。有：

（4.47）

因为，所以有：

（4.48）

这就是对称矩阵的谱分解。

**4.1.5 二次型**

式（4.48）中的列，也就是的行是的一组标准正交基。所以对于任何向量，的每一个元素是向个标准基向量的投影长度，即在这组基下的坐标，写作。这时候有：

（4.49）

式（4.49）说明等于向量在坐标系下各个坐标值的平方乘以对应特征值再加和。

对于某个对称矩阵：

（4.50）

称作一个二次型。