

# 中国科学技术大学

## 线性代数小论文

姓名: 张竞一

学院: 数学学院

学号: PB23010356

主题: Hessian 矩阵的应用

日期: 2024 年 5 月 26 日

## 一.Hessian 矩阵的概念

Hessian 矩阵是一个多元函数的二阶偏导数构成的方阵，描述了函数的局部曲率。Hessian 矩阵最早于 19 世纪由德国数学家 Ludwig Otto Hesse 提出，并以其名字命名。Hessian 矩阵常用于牛顿法解决优化问题，利用 Hessian 矩阵可判定多元函数的极值问题。在工程实际问题的优化设计中，所列的目标函数往往很复杂，为了使问题简化，常常将目标函数在某点邻域展开成 Taylor 多项式来逼近原函数，此时函数在某点 Taylor 展开式的矩阵形式中会涉及到 Hessian 矩阵。

### 二元函数的 Hessian 矩阵

可知，若一元函数  $f(x)$  在  $x = x_0$  点的某个邻域内具有任意阶导数，则  $f(x)$  在  $x_0$  点处的 Taylor 展开式为

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)\Delta x + \frac{1}{2}f''(x_0)(\Delta x)^2 + \dots$$

其中  $\Delta x = x - x_0, (\Delta x)^2 = (x - x_0)^2$

而二元函数  $f(x, y)$  在点  $A(x_0, y_0)$  处的 Taylor 展开式为

$$f(x, y) = f(x_0, y_0) + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_A \Delta x + \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_A \Delta y + \frac{1}{2} \left[ \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_A (\Delta x)^2 + 2 \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right|_A \Delta x \Delta y + \left. \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right|_A (\Delta y)^2 \right] + \dots$$

其中  $\Delta x = x - x_0, \Delta y = y - y_0$

将上述展开式写成矩阵形式，则有：

$$f(X) = f(A) + \left( \left. \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y} \right) \right|_A \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix} + \frac{1}{2} (\Delta x, \Delta y) \begin{pmatrix} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_A & \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right|_A \\ \left. \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} \right|_A & \left. \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right|_A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix} + \dots$$

即：

$$f(X) = f(A) + \nabla f(A)^T \Delta X + \frac{1}{2} \Delta X^T H(A) \Delta X + \dots$$

其中  $H(X) = \begin{pmatrix} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_A & \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right|_A \\ \left. \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} \right|_A & \left. \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right|_A \end{pmatrix}$  是  $f(x, y)$  在  $A$  点的 Hessian 矩阵，它是由函数  $f(x, y)$  在  $A$  点的二阶偏导数所组成的方阵。

### 多元函数的 Hessian 矩阵

将二元函数的 Taylor 展开式推广到多元函数上，则  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  在  $A$  点的 Taylor 展开式的矩阵形式为：

$$f(X) = f(A) + \nabla f(A)^T \Delta X + \frac{1}{2} \Delta X^T H(A) \Delta X + \dots$$

其中  $\nabla f(A) = \left[ \left. \frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right] \right|_A^T$ ，它是  $f(X)$  在  $A$  点的梯度。而  $H(X) = \begin{pmatrix} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} \right|_A & \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} \right|_A & \cdots & \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \right|_A \\ \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} \right|_A & \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} \right|_A & \cdots & \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \right|_A \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} \right|_A & \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} \right|_A & \cdots & \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \right|_A \end{pmatrix}$

是  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  在  $A$  点的 Hessian 矩阵。

## Hessian 矩阵的对称性

如果函数  $f$  在  $D$  区域内二阶连续可导, 那么  $f$  的 Hessian 矩阵  $H(f)$  在  $D$  内为对称矩阵。原因为如果函数  $f$  的二阶偏导数连续, 则二阶偏导数的求导顺序没有区别, 即

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial f}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial f}{\partial x} \right)$$

则对于矩阵  $H(f)$ , 有  $H_{i,j}(f) = H_{j,i}(f)$ , 于是  $H(f)$  为对称矩阵。

## 二.Hessian 矩阵的一些简单应用

### 1. 多元函数极值

对于一元函数求极值时, 例如  $f(x) = x^2$ , 通常先求其一阶导数, 根据费马定理, 极值点处的一阶导数一定等于 0。但这仅仅是一个必要条件而非充分条件。对于  $f(x) = x^2$  来说, 函数的确在一阶导数为 0 点取得了极值, 但对于  $f(x) = x^3$  来说, 显然只检查一阶导数是不能下此结论的。这时需要再求一次导, 如果二阶导数  $f''(x) < 0$ , 那么说明函数在该点取得局部极大值; 如果二阶导数  $f''(x) > 0$ , 则说明函数在该点取得局部极小值; 如果  $f''(x) = 0$ , 则结果仍然是不确定的, 就不得不通过其它方式来确定函数的极值性。而类比这种流程, 我们可以得到多元函数求极值的结果。当一元函数的二阶导数等于 0 时, 并不能确定函数在该点的极值性。类似的, 面对 Hessian 矩阵, 仍然存在无法判定多元函数极值性的情况, 即当 Hessian 矩阵的行列式为 0 时, 无法确定函数是否能取得极值。甚至可能会得到一个鞍点, 也就是一个即非极大值也非极小值的点。

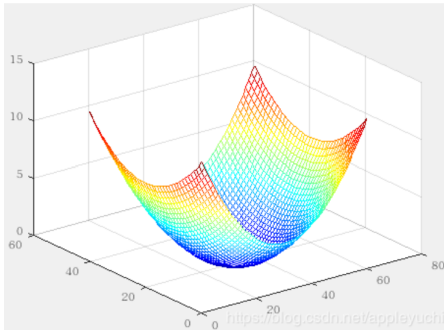
设  $n$  元实函数  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  在点  $A(a_1, a_2, \dots, a_n)$  的邻域上有连续的二阶偏导数, 若有

$$\nabla f \Big|_A = 0, H(X) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}$$

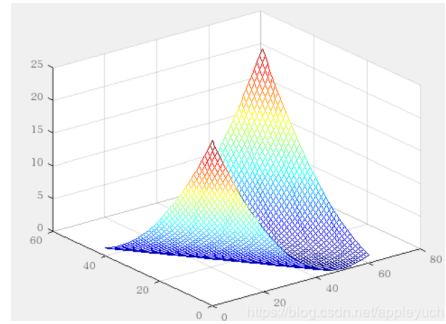
则有如下结果:

- 若  $H(X)$  是正定矩阵, 则其在  $A$  点处取得极小值。
- 若  $H(X)$  是负定矩阵, 则其在  $A$  点处取得极大值。
- 若  $H(X)$  是不定矩阵, 则其在  $A$  点处取不到极值。
- 若  $H(X)$  是半正定矩阵或半负定矩阵, 则需要寻找其他办法确定其在  $A$  点处是否取得极值。

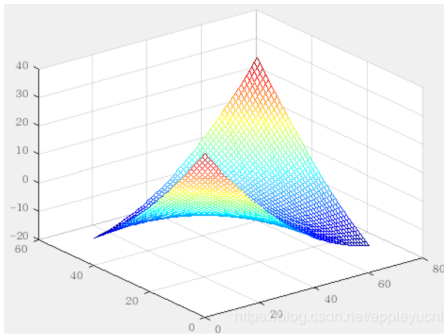
几何直观表示



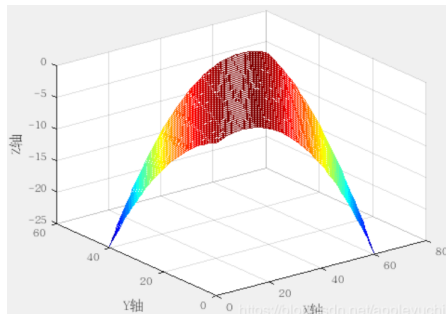
(a) 正定：具有唯一的最小值



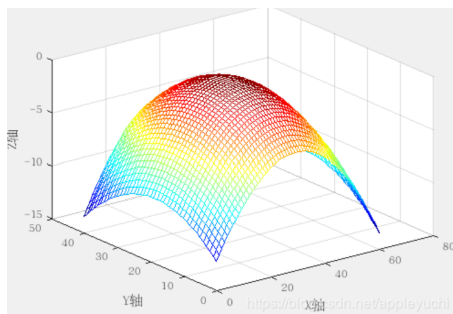
(b) 半正定：具有不唯一的最小值



(c) 不定：存在鞍点，无最小值点，也无最大值点



(d) 半负定：具有不唯一的最大值



(e) 负定：具有唯一的最大值

## 2. 多元函数凹凸性

首先说明一下凸函数的定义：

对于函数  $f(x)$ ，对于其定义域内的任意两点  $x, y$ ，以及任意实数  $\theta \in [0, 1]$ ，若有  $f(\theta x + (1 - \theta)y) \leq \theta f(x) + (1 - \theta)f(y)$  成立，则  $f$  为凸函数。若上式严格成立（将小于等于换成小于），则为严格凸函数。同理可定义凹函数和严格凹函数。

设  $n$  元实函数  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  在点  $A(a_1, a_2, \dots, a_n)$  的邻域上有连续的二阶偏导数则有如下结果：

a. 若  $H(X)$  半正定，则函数是凸函数。

b. 若  $H(X)$  正定，则函数为严格凸函数。

c. 若  $H(X)$  半负定，则函数为凹函数。

d. 若  $H(X)$  负定，则函数为严格凹函数。

### 3. 图像处理

二阶导数表示导数的变化规律，如果函数是一条曲线，且曲线存在二阶导数，那么二阶导数表示的是曲线的曲率，曲率越大，曲线越弯曲。以此类推，多维空间中的一个点的二阶导数就表示该点梯度下降的快慢。以二维图像为例，一阶导数是图像灰度的变化即灰度梯度，二阶导数就是灰度梯度变化程度，二阶导数越大灰度变化越不具有线性。（即灰度改变越大，不是线性的梯度）

在计算机工程学里，二维图像中，Hessian 矩阵是二维正定矩阵，有两个特征值和对应的两个特征向量。两个特征值表示出了图像在两个特征向量所指方向上图像变化的各向异性。如果利用特征向量和特征值构成一个椭圆，这个椭圆就标注出了图像变化的各向异性。

在二维图像中，什么样的结构最具各向同性，又是什么样的结构各向异性更强的。很显然，圆具有最强的各向同性，线性结构越强的结构越具有各向异性。且各特征值应具有以下特性：

特征值1	特征值2	图像特征
-High	-High	斑点结构 (前景为亮)
+High	+High	斑点结构 (前景为暗)
Low	-High	线性结构 (前景为亮)
Low	+High	线性结构 (前景为暗)

上文提到的矩阵的特征值与特征向量所构成的椭圆表现出了图像的各向异性，这种各向异性可以在图像处理中进行应用。在二维图像中，图像中的点性结构具有各向同性，而线性结构具有各相异性。因此可以利用 Hessian 矩阵对图像中的线性结构进行增强，滤去点状结构和噪声点。同样也可用于找出图像中点状信息，滤除其它信息。

在使用 Hessian 矩阵时，不需要将图像进行泰勒展开，只需直接求矩阵中的元素即可。一般对二维图像求二阶导方法只把包含自身在内的三个点的信息囊括了进去，信息量不足。因此，根据线性尺度空间理论（LOG），对一个函数求导，等于函数与高斯函数导数的卷积，即

$$\frac{\partial f}{\partial x} = f(x, y) \cdot \frac{\partial G}{\partial x}$$

$$\frac{\partial^2 G}{\partial x^2} = \frac{-1}{2\pi\sigma^4} \left(1 - \frac{x^2}{\sigma^2}\right) e^{-\frac{x^2+y^2}{2\sigma^2}}$$

$$\frac{\partial^2 G}{\partial y^2} = \frac{-1}{2\pi\sigma^4} \left(1 - \frac{y^2}{\sigma^2}\right) e^{-\frac{x^2+y^2}{2\sigma^2}}$$

$$\frac{\partial^2 G}{\partial x \partial y} = \frac{xy}{2\pi\sigma^6} e^{-\frac{x^2+y^2}{2\sigma^2}}$$

在编写程序时，只需事先将图像分别与三个模板进行卷积，生成三种偏导数的图，然后根据索引对应位置的偏导数即可。对图像进行处理后，图像中大部分的线性结构都会被增强，但是一些细微结构并未被增强太多，而且一些粗的结构中也出现了空洞，这与求导窗口的大小有关，求导窗口太小，很多粗的结构中会出现中空的现象，因为中心区域被认为是点结构了。求导窗口太大，就容易出现细微结构丢失现象。此外高斯模板的方差选取也影响了偏导数的大小。其实这种方式是使用一个方差为  $s$  的高斯核的二阶导数生成一个探测核，用于测量导数方向范围内  $(-s, s)$  内外区域之间的对比度。

#### 4. 基于尺度空间的 Hessian 矩阵特征值简化算法

对于二维图像的 Hessian 矩阵描述每个像素在主方向上的二维导数为：

$$H(X) = \begin{pmatrix} I_{xx} & I_{xy} \\ I_{yx} & I_{yy} \end{pmatrix}$$

根据尺度空间理论，二阶导数可以通过图像与高斯函数的卷积获得，例如在点  $(x, y)$  处有：

$$I_{xx}(x, y; \sigma) = \frac{\partial^2 G(x, y; \sigma)}{\partial x^2} \cdot I(x, y)$$

其中

$$G(x, y; \sigma) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} e^{-\frac{x^2+y^2}{2\sigma^2}}$$

下面可以根据定义求 Hessian 矩阵的特征值的解，我们令

$$|\lambda E - H| = 0$$

并且根据图像的性质可以得到：

$$I_{xy} = I_{yx}$$

代入以上方程可以得到 Hessian 矩阵的特征值解为

$$\lambda = \frac{I_{xx} + I_{yy} \pm \sqrt{(I_{xx} - I_{yy})^2 + 4(I_{xy})^2}}{2}$$

### 三.Hessian 矩阵与 Quasi-Newton 法

#### A. 牛顿法简介

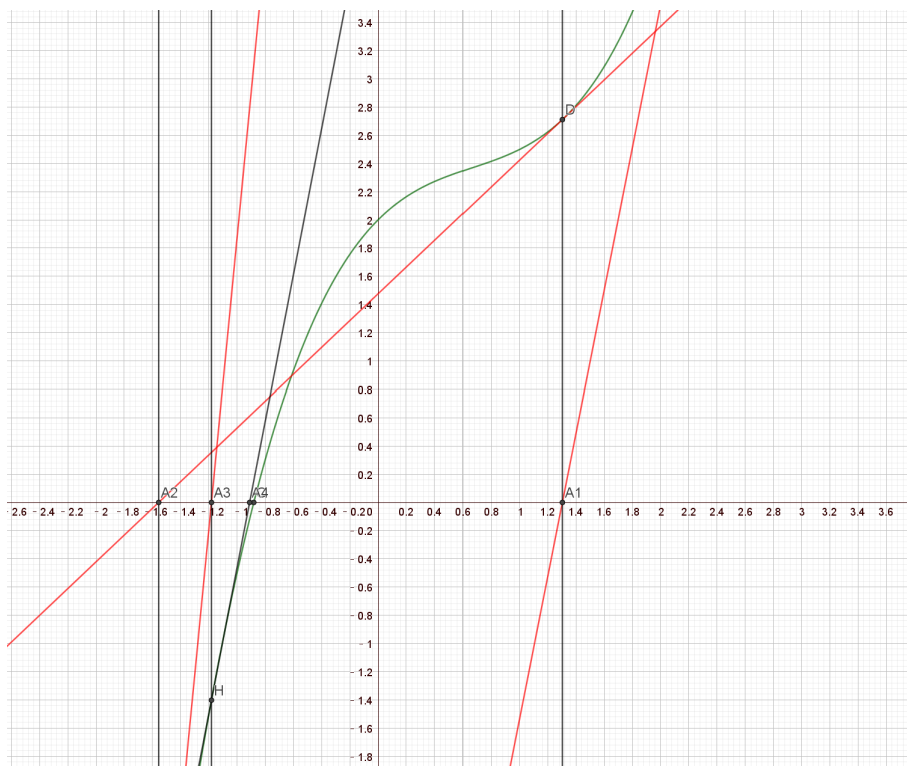
##### 1. 梯度下降法

假设我们要求  $f(x)$  的实数根，也就是求  $f(x)$  与  $x$  轴的交点  $O$  的横坐标。将其在  $x_0$  处一阶 Taylor 展开，并且令其为 0

$$f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) = 0$$

可以发现这是一条直线，也就是  $f(x)$  在  $x = x_0$  处的切线方程，我们求出切线方程与  $x$  轴的交点  $x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$ 。在  $f(x)$  上找到横坐标为  $x_1$  的点，重复上述步骤，如下图所示，可以发现经过多次迭代后有

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} A_n = O$$



By GeoGebra Classic 5

所以在一阶牛顿法中，迭代公式为

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

## 2. 牛顿法

我们对  $f(x)$  进行二阶带 Piano 余项的 Taylor 展开，得到

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}f''(x_0)(x - x_0)^2 + o((x - x_0)^3)$$

我们忽略余项，对上式求导并令其为 0

$$f'(x) = f'(x_0) + f''(x_0)(x - x_0) = 0$$

求得其迭代公式为

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f'(x_n)}{f''(x_n)}$$

由于梯度下降法只用到了二阶导数，而牛顿法用到了二阶导数，所以牛顿法收敛更快。

## 3. 多变量牛顿法

前面两个推导只针对了单变量的问题，对于多变量的情况，牛顿法的迭代公式变为：

$$X_{n+1} = X_n - \frac{f'(X_n)}{f''(X_n)} = X_n - \frac{J_f(X_n)}{H(X_n)} = X_n - J_f(X_n)H^{-1}(X_n)$$

其中用到了一阶偏导数与二阶偏导数，分别对应着 Jacobian 矩阵与 Hessian 矩阵。J 表示 Jacobian 矩阵，对应着一阶偏导数：

$$J_f(X_n) = \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_1}{\partial x_n} \\ \cdots & \ddots & \cdots \\ \frac{\partial y_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

H 表示 Hessian 矩阵，对应着二阶偏导数：

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

多变量的牛顿法由于引入了 Hessian 矩阵，增加了复杂性，特别是当

- ① Hessian 矩阵非正定导致点列无法收敛
- ② Hessian 矩阵维度过大带来巨大的计算量

针对这个问题，在牛顿法无法有效执行的情况下，提出了很多改进方法，比如拟牛顿法。

## B. 改进: 拟牛顿法

### 1. 拟牛顿法简介

将上述问题一般化，考虑用数值方法求解如下无约束的优化问题，即

$$\min f(x), x \in \mathbb{R}^n$$

其中  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  为二阶连续可微函数，通常利用迭代算法

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k, k = 1, 2, \dots$$

其中  $x_k$  为第  $k$  次迭代点， $d_k$  为第  $k$  次搜索方向， $\alpha_k$  为步长因子， $s_k = x_{k+1} - x_k = \alpha_k d_k$  称为步长。不同的步长因子  $\alpha_k$  和不同的搜索方向  $d_k$  就构成了不同的方法。为方便，记  $g(x) = \nabla f(x), G(x) = \nabla^2 f(x), f_k = f(x_k), g_k = g(x_k), G_k = G(x_k)$

求解  $\min f(x), x \in \mathbb{R}^n$  的数值迭代方法有多种，我们在上一节介绍了梯度下降法与牛顿法，也说明了目标函数 Hessian 矩阵不一定可逆并且曲率计算工作量大，于是我们在此介绍拟牛顿法。

拟牛顿法主要思想为构造对称矩阵  $B_k$  近似  $G_k$  (即  $f(x)$  的 Hessian 矩阵) 而无需计算二阶导数，在一定条件下具有超过线性的收敛速率，其基本思想与牛顿法相似。

### 2. 拟牛顿法的具体公式

在  $x_k$  附近使用目标函数的二阶 Taylor 展开来近似  $f$ ，有

$$f(x_k + d) \approx f(x_k) + d^T g_k + \frac{d^T G_k d}{2} \approx f(x_k) + d^T g_k + \frac{d^T B_k d}{2}$$

其中  $B_k \in \mathbb{R}^{n \times n}$  为对称矩阵。若  $B_k$  正定，则对以上式子进行极小化，可以得到拟牛顿法的搜索方向为

$$d_k = -B_k^{-1}g_k$$

对上述 Taylor 展开的两侧求导，可以得到  $G_k s_k \approx y_k$ ，其中  $y_k = g_{k+1} - g_k$ ，于是传统的拟牛顿法要求  $B_{k+1}$  满足以下的标准拟牛顿法条件

$$B_{k+1}s_k = y_k \quad (1)$$

基于方程 (1)，不同的迭代得到诸如 SR1, BFGS, Broyden 族等校正公式。

(1)SR1 校正公式:  $B_{k+1} = B_k + (y_k - B_k s_k)(y_k - B_k s_k)^T / [(y_k - B_k s_k)^T s_k]$

(2)BFGS 校正公式:  $B_{k+1} = B_k + y_k y_k^T / (y_k^T s_k) - B_k s_k s_k^T B_k / (s_k^T B_k s_k)$

(3)DFP 校正公式:  $B_{k+1} = B_k + y_k y_k^T / (y_k^T s_k) - B_k s_k s_k^T B_k / (s_k^T B_k s_k) + \omega_k \omega_k^T$

其中  $\omega_k = (s_k^T B_k s_k)^{\frac{1}{2}} [y_k / (s_k^T y_k) - B_k s_k / (s_k^T B_k s_k)]$

(4)Broyden 族校正公式:  $B_{k+1} = B_k + y_k y_k^T / (y_k^T s_k) - B_k s_k s_k^T B_k / (s_k^T B_k s_k) + \phi_k \omega_k \omega_k^T$

其中  $\omega_k = (s_k^T B_k s_k)^{\frac{1}{2}} [y_k / (s_k^T y_k) - B_k s_k / (s_k^T B_k s_k)]$

方程 (1) 只利用了梯度值的信息而忽略了函数值的信息。对方程 (1) 进行改进，类似于 (1) 的计算，我们得到新拟牛顿方程

$$B_{k+1}s_k = \hat{y}_k$$

其中  $\hat{y}_k = y_k + (r_k / s_k^T s_k) s_k$ ;  $r_k = 3g_{k+1}^T s_k + 3g_k^T s_k + 6(f_k - f_{k+1})$ .

校正公式为  $B_{k+1} = B_k + \hat{y}_k \hat{y}_k^T / (\hat{y}_k^T s_k) - B_k s_k s_k^T B_k / (s_k^T B_k s_k) + \phi_k \omega_k \omega_k^T$ , 其中  $\omega_k = (s_k^T B_k s_k)^{\frac{1}{2}} [\hat{y}_k / (s_k^T \hat{y}_k) - B_k s_k / (s_k^T B_k s_k)]$

无论基于传统拟牛顿方程的校正公式还是基于新拟牛顿方程的校正公式，校正产生  $B_{k+1}$  的实质都是在  $B_k$  的基础之上加上一个修正矩阵  $A_k$ ，即  $B_{k+1} = B_k + A_k$ 。所以若能知道  $A_k$  满足怎样的条件，基于这个条件选取合适的  $A_k$ ，就可以得到合适的  $B_{k+1}$ 。

### 3. $A_k$ 满足的条件和公式的选取

设  $B_{k+1} = B_k + A_k$ ，令其满足拟牛顿方程  $B_{k+1}s_k = y_k$ ，则  $s_k^T (B_k + A_k)s_k = s_k^T y_k$ ，从而可以得到

$$s_k^T B_k s_k = s_k^T y_k - s_k^T A_k s_k$$

设目标函数  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  在开集  $D \subset \mathbb{R}^n$  上二次连续可微， $f$  在  $x_k$  点附近的二次近似为

$$f(x) \approx f_k + (x - x_k)^T g_k + \frac{1}{2}(x - x_k)^T G_k (x - x_k)$$

则有  $f_{k+1} \approx f_k + s_k^T g_k + \frac{1}{2}s_k^T G_k s_k$ ，从而有

$$s_k^T G_k s_k = 2(f_{k+1} - f_k) - 2s_k^T g_k$$

因为  $B_k$  近似等于  $G_k$ ，则由上式可以得到

$$s_k^T B_k s_k = s_k^T G_k s_k \Rightarrow s_k^T y_k - s_k^T A_k s_k = 2(f_{k+1} - f_k) - 2s_k^T g_k \Rightarrow$$

$$s_k^T A_k s_k = 2(f_{k+1} - f_k) + s_k^T (g_{k+1} + g_k)$$

记  $\theta_k = 2(f_{k+1} - f_k) + s_k^T(g_{k+1} + g_k)$ , 则有

$$s_k^T A_k s_k = \theta_k$$

即对任意的拟牛顿算法, 修正矩阵  $A_k$  均满足上式。基于此, 可以给出  $A_k$  的 2 种公式。

$$\begin{cases} A_k = \frac{\theta_k}{(s_k^T u_k)^2} u_k u_k^T \\ A_k = \frac{\lambda_1 \theta_k}{(s_k^T u_k)^2} u_k u_k^T + \frac{\lambda_2 \theta_k}{(s_k^T v_k)^2} v_k v_k^T \end{cases} \quad (\lambda_1 + \lambda_2 = 1)$$

其中  $u_k, v_k \in \mathbb{R}^n$ , 且满足  $s_k^T u_k \neq 0, s_k^T v_k \neq 0$ 。下面选取不同的  $u_k, v_k$  以及  $\lambda_1, \lambda_2$  使他们满足这两种公式。

(1) 取  $u_k = y_k - B_k s_k, A_k = \frac{\theta_k}{(s_k^T u_k)^2} u_k u_k^T, s_k^T (y_k - B_k s_k) \neq 0$  否则  $s_k^T y_k = s_k^T B_k s_k \Rightarrow y_k = B_k s_k$ , 即  $B_k$  已经满足拟牛顿方程。

$$\begin{aligned} A_k &= \frac{\theta_k}{(s_k^T u_k)^2} u_k u_k^T \\ &= \frac{\theta_k}{[s_k^T (y_k - B_k s_k)]^2} (y_k - B_k s_k)(y_k - B_k s_k)^T \\ &= \frac{\theta_k}{s_k^T (y_k - B_k s_k)} \frac{(y_k - B_k s_k)(y_k - B_k s_k)^T}{s_k^T (y_k - B_k s_k)} \\ &= \frac{s_k^T A_k s_k}{s_k^T (y_k - B_k s_k)} \frac{(y_k - B_k s_k)(y_k - B_k s_k)^T}{s_k^T (y_k - B_k s_k)} \\ &= \frac{(y_k - B_k s_k)(y_k - B_k s_k)^T}{(y_k - B_k s_k)^T s_k} \end{aligned}$$

所以  $B_{k+1} = B_k + \frac{(y_k - B_k s_k)(y_k - B_k s_k)^T}{(y_k - B_k s_k)^T s_k}$  即这种选取所得到的校正公式为 SR1 校正公式。

在这里我们提到一种概念: 秩  $k$  对称修正公式, 即在原来的矩阵基础之上加上一个秩为  $k$  的矩阵来对其进行修正。

可以看出, SR1 公式是一种秩 1 对称修正公式。我们叙述迭代找到极小点的过程: 选取初始点  $x_0$  以及初始对称正定矩阵  $B_0$  (例如选取  $B_0 = I_n$ , 其中  $I_n$  为  $n$  阶单位阵, 此时的算法的第一步为最速下降步骤), 令  $k=0$ , 从  $x_k$  出发沿着方向  $p_k = -B_k^{-1} g_k$  进行一维搜索找到  $f(x)$  的最小点得到  $x_{k+1}$ 。以  $x_{k+1}$  为新起点, 计算  $y_k, s_k$  以及  $B_{k+1}$ , 搜索方向为  $p_{k+1} = -B_{k+1} g_{k+1}$ , 以这个方向再次做一维搜索……于是由此算法可以得到一个迭代点累, 这个点列将收敛到  $f(x)$  的极小值点。

(2) 取  $u_k = y_k, v_k = B_k s_k, A_k = \frac{\lambda_1 \theta_k}{(s_k^T u_k)^2} u_k u_k^T + \frac{\lambda_2 \theta_k}{(s_k^T v_k)^2} v_k v_k^T (\lambda_1 + \lambda_2 = 1)$ 。

若  $s_k = 0$ , 则  $g_k = 0$ 。因此在整个迭代的过程中假定  $\|s_k\| \neq 0$ , 否则算法将会在第  $k$  次迭代时停止。因  $s_k \neq 0$ , 则  $s_k^T B_{k+1} s_k = s_k^T y_k \neq 0, s_k^T B_k s_k \neq 0$ ,

$$\begin{aligned} A_k &= \frac{\lambda_1 \theta_k}{(s_k^T u_k)^2} u_k u_k^T + \frac{\lambda_2 \theta_k}{(s_k^T v_k)^2} v_k v_k^T \\ &= \frac{\lambda_1 \theta_k}{(s_k^T y_k)^2} y_k y_k^T + \frac{\lambda_2 \theta_k}{(s_k^T B_k s_k)^2} B_k s_k (B_k s_k)^T \\ &= \frac{\lambda_1 \theta_k}{s_k^T y_k} \frac{y_k y_k^T}{s_k^T y_k} + \frac{\lambda_2 \theta_k}{s_k^T B_k s_k} \frac{B_k s_k (B_k s_k)^T}{s_k^T B_k s_k} \end{aligned}$$

取  $\lambda_1 = \frac{s_k^T y_k}{\theta_k}, \theta_k \neq 0$ . 否则  $B_k$  已经满足拟牛顿方程。则  $\lambda_2 = 1 - \lambda_1 = 1 - \frac{s_k^T y_k}{\theta_k} = -\frac{s_k^T B_k s_k}{\theta_k}$ , 所以  $A_k = \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} - \frac{B_k s_k s_k^T B_k^T}{s_k^T B_k s_k}$ , 那么有  $B_{k+1} = B_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} - \frac{B_k s_k s_k^T B_k^T}{s_k^T B_k s_k}$ , 即该种选取所得到的校正公式为 BFGS 校正公式。

由于 Broyden 族校正公式为  $B_{k+1}^\phi = \phi B_{k+1}^{DFP} + (1 - \phi) B_{k+1}^{BFGS} = B_{k+1}^{BFGS} + \phi \omega_k \omega_k^T$ , 其中  $\omega_k = (s_k^T B_k s_k)^{\frac{1}{2}} [y_k / (s_k^T y_k) - B_k s_k / (s_k^T B_k s_k)]$ 。从而适当选取  $u_k, v_k$  以及  $\lambda_1, \lambda_2$  可以得到 Broyden 族校正公式。

#### 4. 寻找秩 2 修正公式的统一形式

事实上, 最早提出的拟牛顿修正公式是秩 2 修正公式而非秩 1 修正公式。拟牛顿算法最早由 Davidon 于 1959 年提出, 但当文章发表后未受到人们重视。Fletcher 和 Powell 于 1963 年给出了 DFP 秩 2 拟牛顿法, 在此之后的 1965 年 Broyden 给出了秩 1 拟牛顿法。

我们寻找已知  $B_k$ , 求取  $B_{k+1}$  的方法:

令  $B_0 = B_k$ , 代入到  $B_{k+1} = B_k + \frac{1}{v^T s_k} (y_k - B_k s_k) v^T$  得到  $B_1$

$$B_1 = B_0 + \frac{1}{v^T s_k} (y_k - B_0 s_k) v^T, v^T s_k \neq 0$$

矩阵  $B_1$  满足拟牛顿关系但是不满足对称性, 于是我们使用以下的对称化手段, 得到  $B_2$ :

$$B_2 = \frac{1}{2} (B_1 + B_1^T)$$

那么  $B_2$  已经对称化, 但是又不满足了拟牛顿关系, 于是我们继续对  $B_2$  使用上述手段得到  $B_3$ , 并且不断迭代下去。将这两种手段交替进行, 便可以得到一系列的生成矩阵

$$B_{2i+1} = B_{2i} + \frac{1}{v^T s_k} (y_k - B_{2i} s_k) v^T$$

$$B_{2i+2} = \frac{1}{2} (B_{2i+1} + B_{2i+1}^T), i = 1, 2, \dots$$

可以证明序列  $B_n$  有极限, 将其定义为  $B_{k+1}$ , 即

$$B_{k+1} = B_k + \frac{1}{v^T s_k} ((y_k - B_k s_k) v^T + v (y_k - B_k s_k)^T) - \frac{(y_k - B_k s_k)^T s_k}{(v^T s_k)^2} v v^T \quad (A)$$

证明. 现在按上述两种运算计算出  $B_3, B_4$  的表达式, 由此得到一般情况下的表达式。

由  $B_2$  以及上述迭代公式可以得到

$$\begin{aligned} B_3 &= B_2 + \frac{1}{v^T s_k} (y_k - B_2 s_k) v^T \\ &= \frac{1}{2} (B_1 + B_1^T) + \frac{1}{v^T s_k} (y_k - \frac{1}{2} (B_1 + B_1^T) s_k) v^T \\ &= B_0 + \frac{1}{v^T s_k} (y_k - B_0 s_k) v^T + \frac{1}{2v^T s_k} (y_k - B_0 s_k)^T - \frac{1}{2(v^T s_k)^2} (y_k - B_0 s_k)^T s_k v v^T \end{aligned}$$

以及

$$\begin{aligned} B_4 &= \frac{1}{2} (B_3 + B_3^T) \\ &= B_0 + \frac{1}{v^T s_k} \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2^2} \right) [v (y_k - B_0 s_k)^T + (y_k - B_0 s_k) v^T] - \frac{1}{2(v^T s_k)^2} (y_k - B_0 s_k)^T s_k v v^T \end{aligned}$$

由上述递推公式可以得到：一般地，我们有

$$B_{i+2} = B_0 + \left(\sum_{n=1}^{i+2} \frac{1}{2^n}\right) \frac{1}{v^T s_k} [(y_k - B_0 s_k) v^T + v (y_k - B_0 s_k)^T] - \left(\sum_{n=1}^{i+2} \frac{1}{2^n}\right) \frac{(y_k - B_0 s_k)^T s_k}{(v^T s_k)^2} v v^T$$

令  $i \rightarrow \infty$ , 即可以得到极限. □

在此极限表达式中，我们可以分出以下情况：

①当  $v = y_k - B_k s_k$  时，得到的是秩 1 对称公式. 相反地当  $v \neq y_k - B_k s_k$  时，它是秩 2 对称公式。

②取  $v = s_k$ , 所得到的为 Powell 公式。

③取  $v = y_k$ , 则可以得到 DFP 公式。

由于  $\omega_k^T s_k = 0$ , 因此将秩 1 矩阵  $\omega_k \omega_k^T$  乘以一个常数加到 DFP 公式的右侧后,  $B_{k+1}$  仍然满足拟牛顿关系以及对称性, 这是一个包含一个参数的修正公式族：

$$B_{k+1}^T = B_k + y_k y_k^T / (y_k^T s_k) - B_k s_k s_k^T B_k / (s_k^T B_k s_k) + \phi_k \omega_k \omega_k^T$$

其中

$$\omega_k = (s_k^T B_k s_k)^{\frac{1}{2}} [y_k / (s_k^T y_k) - B_k s_k / (s_k^T B_k s_k)]$$

④取  $\phi_k = 1$ , 这就是 DFP 公式。

⑤取  $\phi_k = 0$ , 这就是 BFGS 公式。也就是说 Broyden 族公式和 BFGS 公式之间只相差了一个秩 1 矩阵。

## 5. 逆矩阵的拟牛顿公式

我们在上一节中是通过已有公式和对称画两种手段来进行的，但是我们也可以使用下列方式来得到。现在我们将公式  $B_{k+1} s_k = y_k$  改写为

$$H_{k+1} y_k = s_k$$

以及

$$H_{k+1} = H_k + \Delta H_k$$

在已知  $H_k$  时，我们求出  $\Delta H_k$  就可以通过上式得到  $H_{k+1}$ . 这样做的好处是在第  $k$  步求得  $H_k$  后，可以直接以  $H_k g_k$  为搜索方向，而不必再去求  $B_k$  的逆  $B_k^{-1}$  那样产生大量的计算。

下面我们使用不同于上一节的方式来求出  $\Delta H_k$

设  $\Delta H_k$  是一个秩 2 对称矩阵，因此存在可逆矩阵  $Q$  以及纯量  $\alpha, \beta$ , 使得

$$\Delta H_k = Q \begin{pmatrix} \alpha & & & & \\ & \beta & & & \\ & & 0 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 0 \end{pmatrix} Q^T$$

成立。

取向量  $u, v$  为矩阵  $Q$  的第一、二列, 那么可以将  $H_{k+1}$  写为

$$H_{k+1} = H_k + \alpha uu^T + \beta vv^T$$

将此式代入拟牛顿方程  $H_{k+1}y_k = s_k$ , 可得

$$H_k y_k + \alpha(u^T y_k)u + \beta(v^T y_k)v = s_k$$

上式中  $u, v$  的解不是唯一的。若取  $u = H_k y_k, v = s_k, \alpha = -\frac{1}{u^T y_k} = \frac{1}{y_k^T H_k y_k}, \beta = -\frac{1}{v^T y_k} = \frac{1}{s_k^T y_k}$ , 则可以得到 DFP 公式

$$H_{k+1} = H_k - \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k} + \frac{s_k s_k^T}{s_k^T y_k}$$

其中, 这里的  $H_{k+1}$  是  $B_{k+1}$  的逆矩阵。事实上, 针对  $A = uv^T$  的形式, 我们可以用 Sherman-Morrison 公式从 B 系列的拟牛顿公式中得到 H 系列的对应公式, 反之亦然。

现在我们先引入下面的引理。

引理.(Sherman-Morrison 公式) 若  $A$  为  $n$  阶可逆矩阵,  $u, v$  为  $n$  维向量, 则有

$$(A + uv^T)^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^T A^{-1}}{1 + v^T A^{-1}u}$$

这是不难证明的, 我们在这里直接使用。

现在, 我们应用此公式来求 Broyden 族拟牛顿公式的  $B_{k+1}^\phi$  的逆。在  $B_{k+1}^\phi$  中, 我们令

$$H_1 = B_k - \frac{1}{s_k^T B_k s_k} B_k s_k s_k^T B_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k},$$

$$H_2 = B_k - \frac{1}{s_k^T B_k s_k} B_k s_k s_k^T$$

则有

$$\begin{aligned} (B_{k+1}^\phi)^{-1} &= [H_1 + \phi_k(s_k^T B_k s_k)\omega_k \omega_k^T]^{-1} \\ &= H_1^{-1} - \phi_k(s_k^T B_k s_k) \frac{H_1^{-1} \omega_k \omega_k^T H_1^{-1}}{1 + \phi_k(s_k^T B_k s_k)\omega_k^T H_1^{-1} \omega_k} \end{aligned}$$

$$H_1 = H_2 + \frac{1}{y_k^T s_k} y_k y_k^T$$

$$H_1^{-1} = [H_2^{-1} - \frac{1}{y_k^T s_k} \frac{H_2^{-1} y_k y_k^T H_2^{-1}}{1 + \frac{1}{y_k^T s_k} y_k^T H_2^{-1} y_k}]^{-1}$$

再将  $H_2^{-1}$  使用一次引理并且代入  $H_1^{-1}$  中, 将  $H_1^{-1}$  使用一次引理并且代入  $(B_{k+1}^\phi)^{-1}$  的表达式中, 可以得到  $(B_{k+1}^\phi)^{-1}$  的最终表达式。通过上述代入的过程可以看出, 求  $(B_{k+1}^\phi)^{-1}$  的计算可以对  $B_{k+1}^\phi$  逐次使用引理来得到。经过这连续的三次使用 Sherman-Morrison 公式, 我们最终得到

$$H_{k+1}^\theta = H_k + \frac{s_k s_k^T}{s_k^T y_k} - \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k} + \theta(y_k^T H_k y_k) v_k v_k^T$$

其中

$$v_k = \frac{s_k}{s_k^T y_k} - \frac{H_k y_k}{y_k^T H_k y_k}$$

$$\theta = \frac{(1 - \phi)(s_k^T y_k)^2}{(s_k^T y_k)^2 + \phi[s_k^T B_k s_k y_k^T H_k y_k - (s_k^T y_k)^2]}$$

这就是含参数的 Broyden 族秩 2 修正公式的逆矩阵形式。

当  $\theta = 0$  时,  $\phi = 1$ , 可以得到 DFP 公式

$$H_{k+1} = H_k - \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k} + \frac{s_k s_k^T}{s_k^T y_k}$$

当  $\theta = 1$  时,  $\phi = 0$ , 可以得到 BFGS 公式

$$H_{k+1} = H_k + \frac{s_k s_k^T}{s_k^T y_k} - \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k} + (y_k^T H_k y_k) v_k v_k^T$$

若取  $\theta = \frac{s_k^T s_k}{s_k^T y_k}$  则可以得到秩 1 对称修正公式。

若一个拟牛顿公式中的  $H_k$  与  $B_k$ ,  $s_k$  与  $y_k$  同时互换后可以得到另一个拟牛顿公式, 则称这两个拟牛顿算法为对称算法。从上面的公式中可以看出 DFP 公式的  $H_{k+1}$  与 BFGS 公式的  $B_{k+1}$  是对偶的, BFGS 公式的  $H_{k+1}$  与 DFP 公式的  $B_{k+1}$  是对偶的。因此 DFP 算法与 BFGS 算法是互为对偶的, 而秩 1 对称算法是自对偶的。

## 四. 总结

在线性代数中, 矩阵是联系代数与几何问题的一大重要桥梁。矩阵能够表示绝大部分的几何变换问题, 同时也能在代数问题中发挥不可替代的作用。Hessian 矩阵表示着多变量函数的二阶偏导数, 描述了多变量函数在某个点的二阶近似, 可以用于优化算法以便找到最优解。

在这片文章中我们介绍了 Hessian 矩阵在一部分实际问题中的应用, 涉及到了数学分析、线性代数、计算机工程等众多学科, 这正体现出了数学是科学之基的理念。同时我们深化了牛顿法, 研究了拟牛顿法在解决线性代数问题中的应用, 并探讨其在数值优化领域的意义和潜力。

在数学和计算机科学领域, Hessian 矩阵是一个重要的概念, Hessian 矩阵是一个二阶偏导数矩阵, 用于描述多元函数的局部曲率。其性质包括对称性和特征值的正负性, 特征值决定了函数的凹凸性, 从而指示了函数的极值点的位置和性质。

在优化问题中, Hessian 矩阵的应用十分广泛。例如, 牛顿法是一种基于二阶导数信息的优化方法, 其更新规则涉及到 Hessian 矩阵的逆。通过利用 Hessian 矩阵的信息, 牛顿法可以更快地收敛到函数的极值点, 从而提高优化效率。我们同时提出了拟牛顿法, 与传统的梯度下降法相比, 拟牛顿法在迭代次数和收敛速度上都取得了显著的改进。尤其是在处理大规模线性代数问题时, 拟牛顿法表现出了更好的稳定性和收敛性, 为解决实际工程问题提供了有力的数值优化工具。

随着问题规模的增大和计算资源的限制, 传统的 Hessian 矩阵计算和存储方式已经不能满足需求。因此, 研究者们提出了各种改进和扩展方法, 如 Hessian 矩阵的低秩近似、基于采样的 Hessian 矩阵估计等, 以应对大规模问题中的挑战。通过深入研究 Hessian 矩阵的性质和应用, 我们可以更好地理解优化问题的本质, 并探索更有效的优化算法和技术, 推动科学技术的发展和应用。

**参考文献:**

- [1] Davidon, w.c. Variable metric method for minimization, AEC Research and Development Report ANL-5990, 1959.
- [2] Powell, M.J.D.. On the convergence of the variable metric algorithms, [J]. J. Inst. Math. Appl., 1911, 7: 21-26.
- [3] Broyden, C.G, Dennis, J.E., and more, J.J. On the local and superlinear convergence of Quasi-Newton methods, [J]. J. Inst. Math. Appl., 1973, 12: 223-245.
- [4] Powell, M.J.D.. A new algorithm for unconstrained optimization, in Nonlinear programming, (Eds J.R. Rosen, O.L. Mangasarian and K. Ritter), 1970.
- [5] ZHANG J Z, DENG N Y, CHEN L H. New quasi-Newton equation and related methods for unconstrained optimization, [J]. J Optim Theory Appl, 1999, 102: 147—167.
- [6] 席少霖. 非线性最优化方法 [M]. 北京: 高等教育出版社, 1992.
- [7] Wei Zengxin, Li Guoyin, Qi Liqun. New quasi-Newton methods for unconstrained optimization problems [J]. Applied Mathematics and Computation 2006.