牛顿法求极值

一元函数的情况

为了能让大家更好的理解推导过程的原理，首先考虑一元函数的情况。根据一元函数的泰勒展开公式，我们对目标函数在x0点处做泰勒展开，有：

$$f(x)=f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\frac{1}{2}f''(x_0)(x-x_0)^2+\ldots+\frac{1}{n!}f^{(n)}(x_0)(x-x_0)^n$$

在求解的过程中，一般忽略2次以上的项，则有：

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

可以解得：

$$x=x_0-\frac{f'(x_0)}{f''(x_0)}$$

这样我们就得到了下一点的位置，从而走到x1。接下来重复这个过程，直到到达导数为0的点，由此得到牛顿法的迭代公式：

$$x_{t+1}=x_t-\frac{f'(x_t)}{f''(x_t)}$$

给定初始迭代点x0，反复用上面的公式进行迭代，直到达到导数为0的点或者达到最大迭代次数。

多元函数的情况

根据多元函数的泰勒展开公式，我们对目标函数在x0点处做泰勒展开，有：

$$f(\mathrm{x})=f\left(\mathrm{x}_0\right)+\nabla f(\mathrm{x}_0)^{\mathrm{T}}\left(\mathrm{x}-\mathrm{x}_0\right)+\frac{1}{2}(\mathrm{x}-\mathrm{x}_0)^{\mathrm{T}}\nabla^2 f\left(\mathrm{x}_0\right)\left(\mathrm{x}-\mathrm{x}_0\right)+o\left(\left(\mathrm{x}-\mathrm{x}_0\right)^2\right)$$

忽略二次及以上的项，并对上式两边同时求梯度，得到函数的导数（梯度向量）为：

$$\bigtriangledown(x)=\bigtriangledown f(x_0)+\bigtriangledown^2 f(x_0)(x-x_0)$$

其中即为Hessian矩阵，在后面我们写成H。令函数的梯度为0，则有：

$$\bigtriangledown f(x_0)+\bigtriangledown^2 f(x_0)(x-x_0)=0 \Longrightarrow x=x_0-(\bigtriangledown^2 f(x_0))^{-1}\bigtriangledown f(x_0)$$

这是一个线性方程组的解。如果将梯度向量简写为g，上面的公式可以简写为：

$$x=x_0-H^{-1}g$$

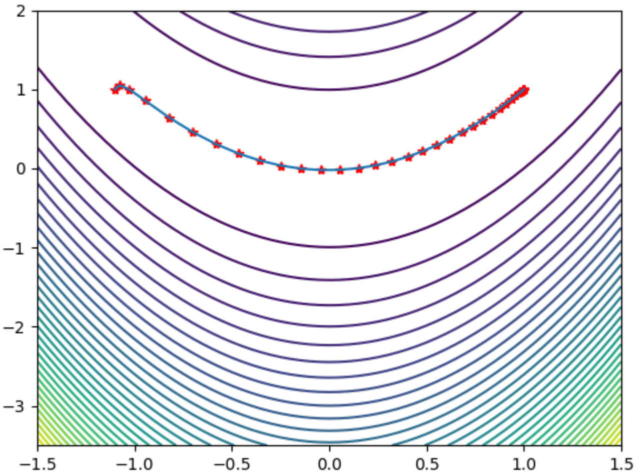
从初始点x0处开始，反复计算函数在处的Hessian矩阵和梯度向量，然后用下述公式进行迭代：

$$x_{k+1}=x_k-H_k^{-1}g_k$$

最终会到达函数的驻点处。其中$-H^{-1}g$称为牛顿方向。迭代终止的条件是梯度的模接近于0，或者函数值下降小于指定阈值。

python实现牛顿法求极值

```
import numpy as np
  import matplotlib.pyplot as plt

  def jacobian(x):
    """
    calculate gradient
    """
    return np.array([-400 * x[0] * (x[1] - x[0] ** 2) - 2 * (1 - x[0]), 200 * (x[1] - x[0] ** 2)])

  def hessian(x):
    """
    calculate Hessian Matrix
    """
    return np.array([[-400 * (x[1] - 3 * x[0] ** 2) + 2, -400 * x[0]], [-400 * x[0], 200]])


  X1 = np.arange(-1.5, 1.5 + 0.05, 0.05)
  X2 = np.arange(-3.5, 2 + 0.05, 0.05)
  [x1, x2] = np.meshgrid(X1, X2)
  f = 100 * (x2 - x1 ** 2) ** 2 + (1 - x1) ** 2  # 给定的函数
  plt.contour(x1, x2, f, 40)  # 画出函数的20条轮廓线


  def newton(x0):
    print('origin points:')
    print(x0, '\n')
    W = np.zeros((2, 10 ** 3))
    i = 1
    imax = 1000
    W[:, 0] = x0
    x = x0
    delta = 1
    alpha = 0.5

    while i < imax and delta > 10 ** (-9):
      p = -np.dot(np.linalg.inv(hessian(x)), jacobian(x))
      x0 = x
      x = x + alpha * p
      W[:, i] = x
      delta = sum((x - x0) ** 2)
      print('step', i, 'result:')
      print(x, '\n')
      i = i + 1
    W = W[:, 0:i]  # 记录迭代点
    return W


  x0 = np.array([-1.1, 1])
  W = newton(x0)

  plt.plot(W[0, :], W[1, :], 'r*', W[0, :], W[1, :])  # 画出迭代点收敛的轨迹
  plt.show()
```



Hessian matrix

正定矩阵：给定一个大小为$n \times n$的矩阵A，如果对于任意长度为n的非零向量，都有$x^TAx > 0$成立，则A是正定矩阵。等价于A的所有特征值都是正的。等价于A的顺序主子式都是正的。

半正定矩阵：给定一个大小为$n \times n$的矩阵A，如果对于任意长度为n的非零向量，都有$x^TAx \geq 0$，则A是半正定矩阵。

负定矩阵：给定一个大小为$n \times n$的矩阵A，如果对于任意长度为n的非零向量，都有$x^TAx < 0$成立，则A是负定矩阵。

基于Hessian矩阵，就可以判断多元函数的极值情况，结论如下：

- 如果是正定矩阵，则临界点处是一个局部极小值
- 如果是负定矩阵，则临界点处是一个局部极大值
- 如果是不定矩阵，则临界点处不是极值