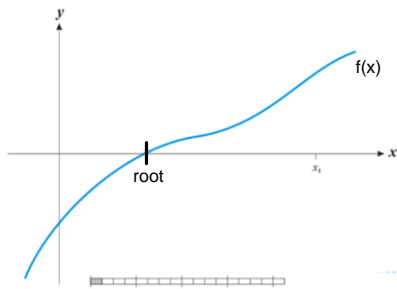


# Newton's method

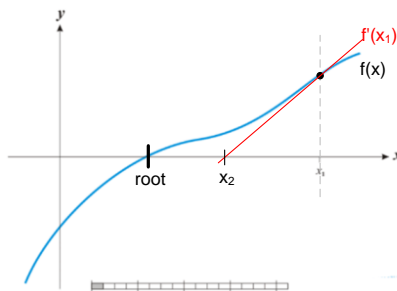
參考網站：

<https://ccjou.wordpress.com/2013/07/08/牛頓法——非線性方程的求根方法/>

為尋找解的一種方法，即找尋  $f(x) = 0$  時的  $x$

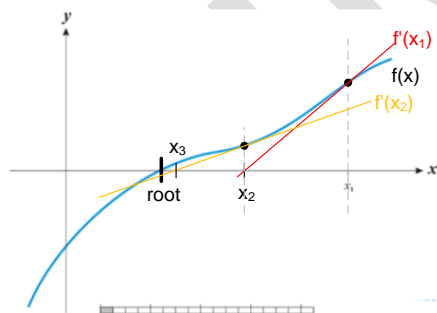


上課解釋：



$$f'(x_1) = \frac{f(x_1)}{x_1 - x_2}, \text{ } f'(x_1), f(x_1), x_1 \text{ 都是已知, 可推得 } x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$$

以此類推，



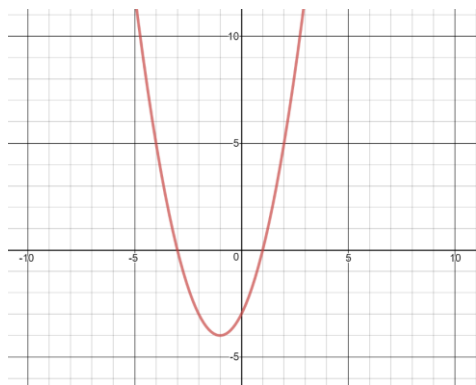
$$f'(x_2) = \frac{f(x_2)}{x_2 - x_3}, \text{ } f'(x_2), f(x_2), x_2 \text{ 都是已知, 可推得 } x_3 = x_2 - \frac{f(x_2)}{f'(x_2)}$$

一直重複同樣的事情直到  $f'(x_i) = 0$  或是  $x_i - x_{i-1}$  在可容許的誤差內時(e.g. 小數第三位都相同)

e.g.

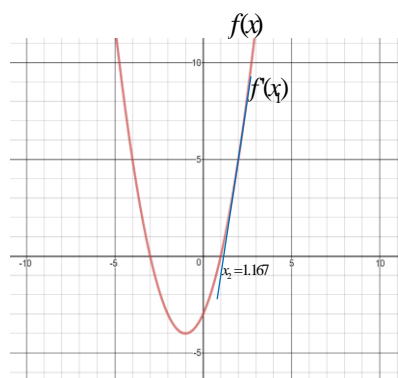
$f(x) = x^2 + 2x - 3$  的圖形如下，我們可預先知道解為 1 和 -2，來看牛頓法求出的解為何，假設我們能

容許誤差為小數第二位

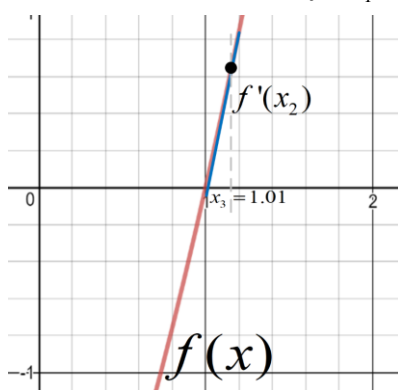


假設我們隨便取  $x_1=2$

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} = 2 - \frac{5}{6} = 1.167$$



$$\text{再迭代一次, } x_3 = x_2 - \frac{f(x_2)}{f'(x_2)} = 1.167 - \frac{0.696}{4.334} = 1.01$$



以下的迭代就不做了，整理一個表格出來

i	$x_i$	$f(x)$	$f'(x)$	$x_{i+1}$
2	1.01	0.04	4.02	1.00
3	1.00	0.00	4.00	1.00
4	1.00	0.00	4.00	1.00

可看到最終我們可收斂至解為 1

網站解釋(和上課有稍許不同而已)

以泰勒級數顯示  $f(x)$

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + O((x - x_0)^2)$$

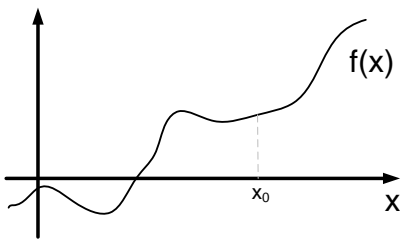
我們欲解  $f(x) = 0 = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + O((x - x_0)^2)$

我們忽略 2 次方以上的項，也就是將  $f(x)$  近似並退化成一個一次多項式，此時就變成解下列問題：

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

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}, \text{ 和剛剛推導出的式子是一樣的}$$

Taylor series



$f(x)$  在  $x_0$  做展開

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2!} f''(x_0)(x - x_0)^2 + \frac{1}{3!} f'''(x_0)(x - x_0)^3 + \dots \\ &= \sum_n \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n \end{aligned}$$

只做說明不做證明：

$$f(x_0) = f(x_0) + 0 + 0 + 0 + \dots = f(x_0)$$

$$f'(x_0) = 0 + f'(x_0) + 0 + 0 + \dots = f'(x_0)$$

$$f''(x_0) = 0 + 0 + f''(x_0) + 0 + \dots = f''(x_0)$$

...

在  $x_0$  這點而言，這個方程式無論微分多少次都成立

若  $x_0 = 0$ ，又稱為 Maclaurin series

e.g.

一些常用的級數

$$(x_0 = 0) \quad e^x = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \dots = \sum_n \frac{x^n}{n!}$$

$$(x_0=0) \sin x = \sin 0 + x \cos 0 + \frac{1}{2} x^2 (-\sin 0) + \frac{1}{3!} x^3 (-\cos 0) + \dots = x - \frac{1}{3!} x^3 + \frac{1}{5!} x^5 - \dots$$

$$(x_0=0) \cos x = \cos 0 + x \sin 0 + \frac{1}{2} x^2 (-\cos 0) + \frac{1}{3!} x^3 (-\sin 0) + \dots = 1 - \frac{1}{2!} x^2 + \frac{1}{4!} x^4 - \dots$$

$$\Rightarrow e^{ix} = 1 + ix + \frac{1}{2}(-1)x^2 + \frac{1}{3!}(-i)x^3 + \dots$$

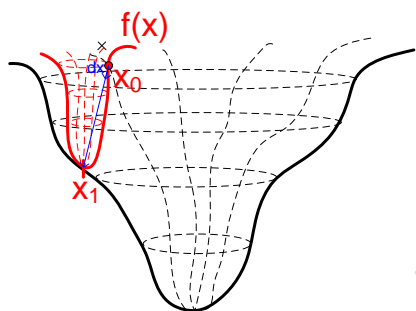
$$= (1 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{4!}x^4 - \dots) + i(x - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5 - \dots) = \cos x + i \sin x$$

## Newton's Method in optimization

有了 Newton's Method，也有了 Taylor series，我們可以利用 Newton's Method 來做 optimization

<https://ch-hsieh.blogspot.tw/2012/04/generalized-newton-raphson-algorithm.html>

<https://zh.wikipedia.org/wiki/應用於最優化的牛頓法>



## 代數意義

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

$$\approx f(x_0) + f'(x_0)dx + \frac{1}{2} f''(x_0)(dx)^2$$

剛剛我們是找  $f(x) = 0$  時的  $x$ ，這裡我們要找的是  $f'(x) = 0$  的  $x$

一樣從  $x_0$  出發，我們希望到找到  $f'(x_0 + dx) = 0$  的  $x$ ，即圖中的點  $x_1$ ，我們將等式左右兩端微分後=0

得

$$\frac{df(x_0 + dx)}{d(dx)} = f'(x_0) + f''(x_0)dx = 0$$

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

$$x_{new} = x_0 + dx = x_0 - \frac{f'(x_0)}{f''(x_0)}$$

若空間維度不只一維

$$x_1 = x_0 - \frac{f'(x_0)}{f''(x_0)} = x_0 - Hf(x_0)^{-1} \nabla f(x_0)$$

其中 Hessian function of  $f(x) = Hf(x) =$

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_0^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_0 \partial x_1} & \dots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_0} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

我們不斷的重複上述動作，直至  $x_i - x_{i-1}(dx)$  的值小至我們可忽略時方可結束

## 幾何意義

應該蠻多人無法將上式的  $x_{new} = x_0 + dx = x_0 - \frac{f'(x_0)}{f''(x_0)}$  和上面的圖聯想在一起，不過，我們可以先看這個式子

$$f(x_0) = f(x_0 + dx) \approx f(x_0) + f'(x_0)dx + \frac{1}{2}f''(x_0)(dx)^2$$

這是一個二次方程式，我們是將經過  $x_0$  的多項式  $f(x)$  簡化為二次多項式，也就是上圖中紅色的

$f(x)$ 。然後，我們再求這個二次多項式的極值時的  $x$ ，這個  $x$  就是  $x_1$ ，這個方法不是很神奇的馬上就找到在  $f(x)$  上最靠近自己的微分=0 的點，是找經過自己的近似二次多項式的微分=0 的點，有點繞口，希望你們能懂。

## 驗證(LSE)

我們得到一個得到極大解或極小解的近似方法，我們就用在前一堂課學到的 LSE 上試試看，由於 LSE 是一個二次多項式，所以 Taylor series 展開的最高次方只會到兩次，其近似的二次多項式就是實際的 LSE 多項式，解出來微分=0 的點就是實際 LSE 的最小值，故做一次就應該到最小值了。

$$LSE = \|A\bar{x} - \bar{b}\|^2 = \bar{x}^T A^T A \bar{x} - 2\bar{x}^T A^T \bar{b} + \bar{b}^T \bar{b} = f(\bar{x})$$

$$\nabla f(\bar{x}) = 2A^T A \bar{x} - 2A^T \bar{b}$$

$$Hf(\bar{x}) = 2A^T A$$

$$\bar{x}_1 = \bar{x}_0 - (2A^T A)^{-1}(2A^T A \bar{x}_0 - 2A^T \bar{b})$$

$$= \bar{x}_0 - (A^T A)^{-1} A^T A \bar{x}_0 + (A^T A)^{-1} A^T \bar{b} = (A^T A)^{-1} A^T \bar{b}$$

其實根據上一堂課的結論，做到這一部已經是 **global** 的最小解了，為了證明已經收斂，我們再做一次 **Newton method**

我們可以看到上式，無論  $\bar{x}$  為何，該 **step** 的最小值都會是  $(A^T A)^{-1} A^T \bar{b}$ ，故如果我們將第一次 **step** 找

到的最小值當作第二次 **step** 的初始值，第二次 **step** 得到的最小值仍會是  $(A^T A)^{-1} A^T \bar{b}$

$$LSE = \|A\bar{x}_1 - \bar{b}\|^2 = \bar{x}_1^T A^T A \bar{x}_1 - 2\bar{x}_1^T A^T \bar{b} + \bar{b}^T \bar{b} = f(\bar{x}_1)$$

$$\nabla f(\bar{x}_1) = 2A^T A \bar{x}_1 - 2A^T \bar{b}$$

$$Hf(\bar{x}_1) = 2A^T A$$

$$\bar{x}_2 = \bar{x}_1 - (2A^T A)^{-1}(2A^T A \bar{x}_1 - 2A^T \bar{b})$$

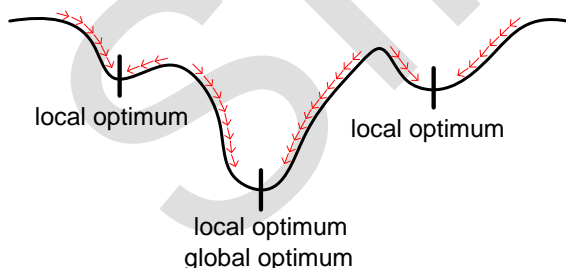
$$= \bar{x}_1 - (A^T A)^{-1} A^T A \bar{x}_1 + (A^T A)^{-1} A^T \bar{b} = (A^T A)^{-1} A^T \bar{b}$$

故只要做一次 **Newton Method** 就收斂

此方法缺點：

1. 若空間維度太高，**Hessian function** 的維度會太高(若有  $n$  維，會產生  $n \times n$  維的矩陣)，做 **Hessian function** 反矩陣會耗費  $O(n^3)$  的時間
2. 只能找到 **local optimization**，若維度太高，容易陷入局部的極小值(**local optimum**)

e.g.



紅色箭頭是各點的  $dx$  方向，一旦到 **local optimum** 後，就不可能離開該點了  
但是相較於其他的近似法，**Newton Method** 可使用最少次的迭代即可收斂

note:

若 **Hessian function** 不可逆，可使用 **pseudo inverse**