# Prediction and Optimization

# 何景盛 B08901123

2023/6/2

#### Abstract

由於人工智慧的發展迅速,各式各樣的技術產生出來,而這些技術背後也有一定的原理,因此勾起我對這些技術原理的渴望,進而引發修習此專題的動機。而此專題修習的部分主要為預測和最優化,並且以數據模擬來驗證其數學模型和演算法。為期十三週,前五週主要為預測,接著一週為相關性,餘下的週數專注在最優化的部分。通過這次專題的學習,令我更深入了解預測模型和最優化算法的理論,這將有助提升我未來在此領域解決問題的能力。

### 1 Prediction Model

- 1. Linear Prediction with optimal parameters
- 2. Nonlinear Prediction with optimal parameters
- 3. Generalized Nonlinear Prediction with optimal parameters
- 4. Curve fitting with optimal parameters
- 5. Using PCA to prediction

預測模型的部分以以上五個模型作預測,以 kaggle 上的 Daily Temperature of Major Cities[1] 這個 dataset 來作温度的預測,評比誤差以 mean square error(MSE) 來作為標準。

# 2 Optimization

- 1. Step Search Method
- 2. Golden Search
- 3. Newton Method
- 4. Gradient Descend
- 5.  $L_{\alpha}$ -Norm

最優化算法的部分以以上五個算法,並用一些  $convex\ function$ (拋物線、拋物面...) 來作為測試,並觀測其收斂性。

# 3 Linear Prediction with optimal parameters

Linear Prediction model 如下 Eq.1:

$$x_p[n] = \sum_{k=1}^{L} a_k x[n-k]$$
 (1)

其中  $x_p[n]$  為模型預測值,x[n] 是輸入資料, $a_k$  為最佳化參數,L 為與預測值跟前幾筆 x[n] 有關。我們的目標是找一組合適的  $a_k$  使得 MSE 最小。首先需要把 data 分成兩組 train data 和 test data train data:  $\{x[n]|n_1 \leq n \leq n_2\}$ ,test data:  $\{x[n]|n_3 \leq n \leq n_4\}$ ,而  $n_1 < n_2 < n_3 < n_4$ ,從 train data 中找出 $a_k$ ,然後代入 Eq.1,進而對數據預測。

使用以下 MSE object function Eq.2作為 test data 的誤差衡量:

$$E = \sum_{n=n_3}^{n_4} (x[n] - x_p[n])^2$$
 (2)

我們目標是從 train data 找出使得 Eq.2最小的  $a_k$ 。

$$E = \sum_{n=n_1}^{n_2} (x[n] - \sum_{k=1}^{L} a_k x[n-k])^2$$
 (3)

因此需要對 Eq.3對  $a_k$  進行偏微分等於 0,推導過程如下。

$$\frac{\partial E}{\partial a_k} = 0$$

for k = 1, 2, ..., L

$$\Rightarrow -2\sum_{n=n_1}^{n_2} x[x-k](x[n] - \sum_{s=1^L} a_s x[n-s]) = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{s=1}^L a_s \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-k]x[n-s] = \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-k]x[n]$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} \sum_{n=n_1}^{n_2} x^2[n-1] & \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-1]x[n-2] & \dots & \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-1]x[n-L] \\ \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-2]x[n-1] & \sum_{n=n_1}^{n_2} x^2x^2[n-2] & \dots & \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-2]x[n-L] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-L]x[n-1] & \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-L]x[n-2] & \vdots & \sum_{n=n_1}^{n_L} x^2[n-L] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_L \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-L]x[n] \\ \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-2]x[n] \\ \vdots \\ \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-L]x[n] \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-1]x[n] \\ \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-2]x[n] \\ \vdots \\ \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-L]x[n] \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \sum_{n=n_1}^{n_2} x^2[n-1] & \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-1]x[n-2] & \dots & \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-1]x[n-L] \\ \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-2]x[n-1] & \sum_{n=n_1}^{n_2} x^2[n-2] & \dots & \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-2]x[n-L] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-L]x[n-1] & \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-L]x[n-2] & \vdots & \sum_{n=n_1}^{n_L} x^2[n-L] \end{bmatrix}^{-1}$$

求得  $a_k$  後,可以把它與 test data 代入 Eq.1,並求出與  $\{x[n_3], x[n_3+1], ..., x[n_4]\}$  相同 index 的  $\{x_p[n_3], x_p[n_3+1], ..., x_p[n_4]\}$  代入 Eq.2,從而觀測 其誤差。

# 4 Nonlinear Prediction with optimal parameters

Nonlinear Prediction model 如下 Eq.5

$$x_p[n] = \sum_{k=1}^{L} a_k x[n-k] + \sum_{k=1}^{L-1} b_k (x[n-k] - x[n-k-1])^2$$
 (5)

其中  $x_p[n]$  為模型預測值,x[n] 是輸入資料, $a_k$  和  $b_k$  為最佳化參數,L 為與預測值跟前幾筆 x[n] 有關。我們的目標是找一組合適的  $a_k$  和  $b_k$  使得 MSE 最小。首先需要和 Linear Prediction 一樣把 data 分為 train data 和 test data,從 train data 中找出  $a_k$  和  $b_k$ ,然後代入 Eq.5,進而對數據預測。

同樣也是使用 MSE object function Eq.2作為 test data 的誤差衡量:

$$E = \sum_{n=n_3}^{n_4} (x[n] - x_p[n])^2$$
 (6)

目標是從 train data 找出使得 Eq.7最小的  $a_k$  和  $b_k$ 。

$$E = \sum_{n=n}^{n_2} (x[n] - \sum_{k=1}^{L} a_k x[n-k] - \sum_{k=1}^{L-1} b_k (x[n-k] - x[n-k-1])^2)^2$$
 (7)

因此需要對 Eq.7分別對  $a_k$  和  $b_k$  進行偏微分等於 0,推導過程如下。

$$\frac{\partial E}{\partial a_k} = 0$$
 for  $k = 1, 2, ..., L$ 

$$\Rightarrow \sum_{s=1}^{L} a_{s} \sum_{n=n_{1}}^{n_{2}} x[n-k]x[n-s] + \sum_{s=1}^{L-1} b_{s} \sum_{n=n_{1}}^{n_{2}} x[n-k](x[n-s]-x[n-s-1])^{2}$$

$$= \sum_{n=n_{1}}^{n_{2}} x[n-k]x[n]$$

$$\Rightarrow \sum_{n=n_{1}}^{L} a_{s} \sum_{n=n_{1}}^{n_{2}} (x[n-k]-x[n-k-1])^{2}x[n-s]$$

$$+ \sum_{s=1}^{L-1} b_{s} \sum_{n=n_{1}}^{n_{2}} (x[n-k]-x[n-k-1])^{2}(x[n-s]-x[n-s-1])^{2}$$

$$= \sum_{n=n_{1}}^{n_{2}} (x[n-k]-x[n-k-1])^{2}x[n]$$

$$(8)$$

綜合 Eq.8和 Eq.9可得出

$$\begin{bmatrix} a_{1} \\ \vdots \\ a_{L} \\ b_{1} \\ \vdots \\ b_{L-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{1,1} & \dots & A_{1,L} & B_{1,1} & \dots & B_{1,L-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{L,1} & \dots & A_{L,L} & B_{L,1} & \dots & B_{L,L-1} \\ B_{1,1} & \dots & B_{L,1} & C_{1,1} & \dots & C_{1,L-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ B_{1,L-1} & \dots & B_{L,L-1} & C_{L-1,1} & \dots & C_{L-1,L-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{1,0} \\ \vdots \\ A_{L,0} \\ B_{0,1} \\ \vdots \\ B_{0,L-1} \end{bmatrix}$$

$$where \quad A_{i,j} = \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-i]x[n-j]$$

$$B_{i,j} = \sum_{n=n_1}^{n_2} x[n-i](x[n-j] - x[n-j-1])^{2}$$

$$C_{i,j} = \sum_{n=n_1}^{n_2} (x[n-i] - x[n-i-1])^{2}(x[n-j] - x[n-j-1])^{2}$$

求得  $a_k$  和  $b_k$  後,方法和 Linear Prediction 一樣,可以把它與 test data 代入 Eq.5,並求出與  $\{x[n3],x[n3+1],...,x[n4]\}$  相同 index 的  $\{x[n_3],x[n_3+1],...,x[n_4]\}$  代入 Eq.6,從而觀測其誤差。

# 5 Generalized Nonlinear Prediction with optimal parameters

Generalized Nonlinear Prediction Model 基本上跟 Nonlinear Prediction Model 樣,差別在非線性項不是 2 次方,而是  $\alpha$  次方,式子如下 Eq.10

$$x_p[n] = \sum_{k=1}^{L} a_k x[n-k] + \sum_{k=1}^{L-1} b_k (x[n-k] - x[n-k-1])^{\alpha}$$
 (10)

其中  $x_p[n]$  為模型預測值,x[n] 是輸入資料, $a_k$  和  $b_k$  為最佳化參數,L 為與預測值跟前幾筆 x[n] 有關, $\alpha$  可以任意選。我們的目標是找一組合適的  $a_k$  和  $b_k$  使得 MSE 最小。首先需要和前面一樣把 data 分為 train data 和 test data,從 train data 中找出  $a_k$  和  $b_k$ ,然後代入 Eq.10,進而對數據預測。

使用 Eq.11來衡量誤差

$$E = \sum_{n=n_3}^{n_4} (x[n] - x_p[n])^2$$
 (11)

這次使用的 object function 有點不一樣,在每筆資料前加一個 w[n] (weight),可以增加其重要性,例如預測温度,在 train datas 找最佳化參數時,可以分為每年季節,可能 train datas 的春天和 test datas 的春天比較有關聯,因此可以增加其權重。其 object function 如下 Eq.12:

$$E = \sum_{n=n_3}^{n_4} w[n](x[n] - \sum_{k=1}^{L} a_k x[n-k] - \sum_{k=1}^{L-1} b_k (x[n-k] - x[n-k-1])^{\alpha})^2$$
 (12)

對 Eq.12取偏微分可求得  $a_k$  和  $b_k$ 

$$\frac{\partial E}{\partial a_k} = 0$$
 for  $k = 1, 2, ..., L$ 

$$\Rightarrow \sum_{s=1}^{L} a_s \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n]x[n-k]x[n-s] + \sum_{s=1}^{L-1} b_s \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n]x[n-k](x[n-s] - x[n-s-1])^{\alpha}$$

$$= \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n]x[n-k]x[n]$$
(13)

 $\frac{\partial E}{\partial b_k} = 0 \quad for \ k = 1, 2, ..., L - 1$ 

$$\Rightarrow \sum_{s=1}^{L} a_s \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n](x[n-k] - x[n-k-1])^{\alpha} x[n-s]$$

$$+ \sum_{s=1}^{L-1} b_s \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n](x[n-k] - x[n-k-1])^{\alpha} (x[n-s] - x[n-s-1])^{\alpha}$$

$$= \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n](x[n-k] - x[n-k-1])^{\alpha} x[n]$$
(14)

綜合 Eq.13和 Eq.14可得出

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_L \\ b_1 \\ \vdots \\ b_{L-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{1,1} & \dots & A_{1,L} & B_{1,1} & \dots & B_{1,L-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{L,1} & \dots & A_{L,L} & B_{L,1} & \dots & B_{L,L-1} \\ B_{1,1} & \dots & B_{L,1} & C_{1,1} & \dots & C_{1,L-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ B_{1,L-1} & \dots & B_{L,L-1} & C_{L-1,1} & \dots & C_{L-1,L-1} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} A_{1,0} \\ \vdots \\ A_{L,0} \\ B_{0,1} \\ \vdots \\ B_{0,L-1} \end{bmatrix}$$

where 
$$A_{i,j} = \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n]x[n-i]x[n-j]$$
  

$$B_{i,j} = \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n]x[n-i](x[n-j]-x[n-j-1])^2$$

$$C_{i,j} = \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n](x[n-i]-x[n-i-1])^2(x[n-j]-x[n-j-1])^2$$

求得  $a_k$  和  $b_k$ ,與 test data 代入 10,並將  $\{x[n3], x[n3+1], ..., x[n4]\}$  相同 index 的  $\{x[n_3], x[n_3+1], ..., x[n_4]\}$  代入 Eq.11,從而觀測其誤差。

# 6 Curve fitting with optimal parameters

以下為多項式的 Curve fitting 的模型:

$$x[n] = \sum_{k=0}^{M} a_k n^k \tag{15}$$

其中 x[n] 為模型預測值, $a_k$  為最佳化參數,M 為多項式數目。求  $a_k$  的方和前面的一樣,用 object function 取偏微分等於 0,而這次嘗試有 weights 和沒有 weights,object function 如下 Eq.17和 Eq.19

使用 Eq.16來衡量誤差

$$E = \sum_{n=n_3}^{n_4} (x[n] - x_p[n])^2$$
 (16)

1. without weight

$$E = \sum_{n=n_1}^{n_2} (x[n] - \sum_{k=0}^{M} a_k n^k)^2$$

$$\frac{\partial E}{\partial a_k} = 0 \quad \text{for } k = 01, 2, ..., M$$

$$\Rightarrow -2 \sum_{n=n_1}^{n_2} n^k (x[n] - \sum_{s=0}^{M} a_s n^s) = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{s=0}^{M} a_s \sum_{n=n_1}^{n_2} n^k n^s = \sum_{n=n_1}^{n_2} n^k x[n]$$
(17)

$$\begin{bmatrix} \sum_{n=n_1}^{n_2} n^{0+0} & \sum_{n=n_1}^{n_2} n^{0+1} & \dots & \sum_{n=n_1}^{n_2} n^{0+M} \\ \sum_{n=n_1}^{n_2} n^{1+0} & \sum_{n=n_1}^{n_2} n^{1+1} & \dots & \sum_{n=n_1}^{n_2} n^{1+M} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sum_{n=n_1}^{n_2} n^{M+0} & \sum_{n=n_1}^{n_2} n^{M+1} & \dots & \sum_{n=n_1}^{n_2} n^{M+M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{n=n_1}^{n_2} n^0 x[n] \\ \sum_{n=n_1}^{n_2} n^1 x[n] \\ \vdots \\ \sum_{n=n_1}^{n_2} n^M x[n] \end{bmatrix}$$

2. with weight

$$E = \sum_{n=n_1}^{n_2} w_n (x[n] - \sum_{k=0}^{M} a_k n^k)^2$$

$$\frac{\partial E}{\partial a_k} = 0 \quad for \ k = 01, 2, ..., M$$

$$\Rightarrow -2 \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n] n^k (x[n] - \sum_{s=0}^{M} a_s n^s) = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{s=0}^{M} a_s \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n] n^k n^s = \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n] n^k x[n]$$
(19)

$$\begin{bmatrix} \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n] n^{0+0} & \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n] n^{0+1} & \dots & \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n] n^{0+M} \\ \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n] n^{1+0} & \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n] n^{1+1} & \dots & \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n] n^{1+M} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n] n^{M+0} & \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n] n^{M+1} & \dots & \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n] n^{M+M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n] n^0 x[n] \\ \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n] n^1 x[n] \\ \vdots \\ \sum_{n=n_1}^{n_2} w[n] n^M x[n] \end{bmatrix}$$

求得  $a_k$  可代入 Eq.15進行預測,最後代入 Eq.16來判斷模型誤差。

# 7 Using PCA to prediction

用 PCA 來進行預測就跟前面的方法有點不同,不是用偏微分來求,假設現在 有 M 筆資料,而每一筆資料為 N-dimension

$$g_1 = [f_{1,1}, f_{1,2}, ..., f_{1,N}]$$
  
 $g_1 = [f_{1,1}, f_{1,2}, ..., f_{1,N}]$ 

:

$$g_1 = [f_{1,1}, f_{1,2}, ..., f_{1,N}]$$

#### PCA 預測流程如下:

第一步,扣掉平均值,形成新 data

$$\begin{split} d_m &= [e_{m,1}e_{m,2}...e_{m,N}] \quad m = 1,2,...,M \\ \mathbf{其中} \ e_{m,n} &= f_{m,n} - \hat{f_n}, \ \hat{f_n} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M f_{m,n} \end{split}$$

第二步,形成  $M \times N$  矩陣 A

A 的第 m 個 row 為  $d_m$ , m=1,2,...,M

第三步,對 A 進行 SVD 分解

$$A = USV^{H} = \lambda_1 u_1 v_1^T + \lambda_2 u_2 v_2^T + \dots + \lambda_k u_k v_k^T, k = min(M, N)$$
  
$$\lambda_1 \ge \lambda_2 \ge \dots \ge \lambda_1$$

第四步,將 A 近似成  $A=USV^H=\lambda_1u_1v_1^T+\lambda_2u_2v_2^T+...+\lambda_hu_hv_h^T, forh\leq k$ 

則每一筆資料可近似為

 $g_m = \lambda_1 u_1 v_1^T + \lambda_2 u_2 v_2^T + \ldots + \lambda_h u_h v_h^T + [\hat{f}_1 \hat{f}_2 \ldots \hat{f_N}]$   $v_1^T$  是資料的最主要成分, $v_2^T$  是資料的最主要成分, $v_3^T$  是資料的最主要成分, $u_3^T$  是資料的最主要成分,如此類推。

以預測温度為例的二維的資料,x為日子,y為温度。

$$g_1 = [x_1y_1]$$
  
 $g_2 = [x_2y_2]$   
 $\vdots$   
 $g_M = [x_My_M]$ 

根據上述方法可求得主要成份  $v_1^T = [a_1 \quad a_2]$ ,並用主成分來求得迴歸線,式子如下:

$$[x_0 y_0] + cv_1^T = [x_1 y_1]$$
$$[x_0 y_0] + c[a_1 a_2] = [x_1 y_1]$$

 ${
m c}$  為常數, $x_0$  為已知日子, $y_0$  為  $x_0$  的温度, $x_1$  為預測的日子,目標是求  $y_1$ ,可以經下列方式求得  $y_1$ :

$$x_0 + ca_1 = x_1$$

$$\Rightarrow c = \frac{x_1 - x_0}{a_1}$$

$$y_1 = y_0 + ca_2$$

$$= y_0 + \frac{x_1 - x_0}{a_1} a_2$$

得到  $y_1$  後可用相同方法求得  $y_2, ..., y_n$ 。最後再用 MSE 來判斷其誤差。

# 8 Correlation

以下 Eq.21為相關性:

$$corr_{X,Y} = \frac{cov_{X,Y}}{\sigma_X \sigma_Y} = \frac{E((X - \mu_X)(Y - \mu_Y))}{\sigma_X \sigma_Y}$$

$$= \frac{\sum_{n=1}^{N} (x[n] - \mu_X)(y[n] - \mu_Y)}{\sqrt{\sum_{n=1}^{N} (x[n] - \mu_X)^2 \sum_{m=1}^{N} (y[m] - \mu_Y)^2}}$$
(21)

where  $\mu_X = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} x[n], \, \mu_Y = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} y[n]$ 

當中 x[n] 為一筆資料,y[n] 為另一筆資料,我們可以用  $corr_{X,Y}$  來觀察這兩筆資料的相關性,而  $corr_{X,Y} \in [-1 \quad 1]$ ,得出  $corr_{X,Y}$  可分為以下的相關性:

- 1. Full Correlation:  $|corr_{X,Y}| \ge 0.9$
- 2. High Correlation:  $0.6 \le |corr_{X,Y}| < 0.9$
- 3. Middle Correlation:  $0.3 \le |corr_{X,Y}| < 0.6$
- 4. Low Correlation:  $|corr_{X,Y}| < 0.3$
- 5. Positive Correlation:  $corr_{X,Y} > 0$
- 6. Negative Correlation:  $corr_{X,Y} < 0$

# 9 Step Search Method

Alg.1為"Step Search Method" 的算法,用於尋找函數的極小值點。首先,算法需要接收以下輸入參數:函數 f,初始搜索範圍的起點  $x_0$  和終點  $x_1$ ,以及一個閾值 Threshold,用於判斷何時停止搜索。

以下將逐步解釋這個偽代碼的每個步驟:

1. 初始化變量:設定初始步長  $\Delta$ ,將迭代次數 n 設為 1,並將  $f_{min,0}$  設為 正無窮大。這些變量將在算法的迭代過程中被更新。

- 2. 進入一個循環,直到  $f_{min,n-1}-f_{min,n}$  的差值小於閾值 Threshold 時停止。
- 3. 在每次迭代中,首先計算函數 f 在  $x_0, x_0 + \Delta, x_0 + 2\Delta$ ,一直到  $x_1$  處的 取值。
- 4. 找到一個位置 c,滿足  $f(x_0+c\Delta) < f(x_0+(c-1)\Delta)$  並且  $f(x_0+c\Delta) < f(x_0+(c+1)\Delta)$ 。這個位置 c 代表了當前搜索範圍內的極小值點的位置。
- 5. 將  $f_{min,n}$  更新為  $f(x_0 + c\Delta)$ , 即當前搜索範圍內的最小函數值。
- 6. 更新搜索範圍:將  $x_0$  更新為  $x_0 + (c-1)\Delta$ ,將  $x_1$  更新為  $x_1 + (c+1)\Delta$ 。 這樣,下一次迭代將在新的搜索範圍內進行。
- 7. 將步長  $\Delta$  更新為  $\Delta/S$ ,其中 S 是一個縮放因子。通過縮小步長,可以使算法更加精細地搜索極小值點。
- 8. 重複步驟 2-7,直到  $f_{min,n-1}-f_{min,n}$  的差值小於閾值 Threshold,表示已經找到了一個滿足要求的極小值點。
- 9. 返回找到的極小值點的坐標: $x=x_0+c\Delta$ ,以及對應的函數值 y=f(x)。

總體而言,這個算法通過不斷縮小搜索範圍和步長來逐步逼近函數的極小值點。它在每次迭代中通過比較函數值來確定當前搜索範圍內的極小值點位置,並不斷更新搜索範圍和步長以獲得更準確的結果。

# Algorithm 1 Step Search Method

```
Step-Search(f, x_0, x_1, Threshold)
```

- 1: Set Init  $\Delta$ , n = 1,  $f_{min,0} \to \infty$ ;
- 2: while  $f_{min,n-1} f_{min,n} > Threshold$  do
- 3: Determine  $f(x_0)$ ,  $f(x_0 + \Delta)$ ,  $f(x_0 + 2\Delta)$ , ...,  $f(x_1)$
- 4: Find c such that  $f(x_0 + c\Delta) < f(x_0 + (c-1)\Delta)$  and  $f(x_0 + c\Delta) < f(x_0 + (c+1)\Delta)$
- 5: Set  $f_{min,n} = f(x_0 + c\Delta)$
- 6: Set  $x_0 \Leftarrow x_0 + (c-1)\Delta$ ,  $x_1 \Leftarrow x_1 + (c+1)\Delta$
- 7:  $\Delta \Leftarrow \Delta/S$
- 8: end while
- 9:  $x = x_0 + c\Delta$
- 10: y = f(x)
- 11: **return** x, y

# 10 Golden Search

Alg.2為黃金搜索( $Golden\ Search$ )算法。它用於在一個區間內尋找一個函數的極小值點。首先算法需要接收以下輸入參數:函數 f,初始搜索範圍的起點  $x_0$ 和終點  $x_1$ ,以及一個閾值 Threshold,用於判斷何時停止搜索。

以下將逐步解釋這個偽代碼的每個步驟:

- 1. 首先,設定一個常數 e,它的值是  $(\sqrt{5}-1)/2$ ,然後計算兩個中點  $x_2$  和  $x_3$ ,它們是根據黃金分割法得出的。具體來說, $x_2$  被設置為  $x_0$  和  $x_1$  的 黄金分割點,而  $x_3$  被設置為  $x_0$  和  $x_2$  的黄金分割點。
- 2. 進入一個循環,直到  $x_0$  和  $x_1$  之間距離差小於閾值 Threshold 時停止。
- 3. 接下來,我們評估函數 f 在  $x_2$  和  $x_3$  上的值,並比較它們。如果  $f(x_2)$  小於  $f(x_3)$ ,則執行以下步驟,更新  $x_0$  的值為  $x_3$ ,更新  $x_3$  的值為  $x_2$ ,計算一個新的  $x_2$ ,它是  $x_1$  和  $x_3$  的黄金分割點。
- 4. 如果  $f(x_2)$  不小於  $f(x_3)$ ,則執行以下步驟,更新  $x_1$  的值為  $x_2$ ,更新  $x_2$  的值為  $x_3$ ,計算一個新的  $x_3$ ,它是  $x_0$  和  $x_2$  的黃金分割點。
- 5. 當循環結束時,我們計算 x 和 y 的值。其中,x 是區間的中點  $(x_1 + x_0)/2$ ,y 是在 x 上計算函數 f 得到的值。
- 6. 最後,返回的結果是找到的極小值點的座標 (x,y)。

## Algorithm 2 Golden Search

```
Golden Search(f, x_0, x_1, Threshold)
 1: Let e=\frac{-1+\sqrt{5}}{2},\ x_2=x_0+\frac{x_1-x_0}{1+e},\ x_3=x_0+\frac{x_2-x_0}{1+e}
2: while |x_0-x_1|>Threshold\ \mathbf{do}
          if f(x_2) < f(x_3) then
               x_0 = x_3
 4:
 5:
                x_3 = x_2
               x_2 = x_1 - \frac{x_1 - x_3}{1 + e}
 6:
 7:
 8:
               x_1 = x_2
 9:
               x_2 = x_3
               x_3 = x_0 + \frac{x_2 - x_0}{1 + e}
10:
          end if
11:
12: end while
13: x = \frac{x_1 + x_0}{2}
14: y = f(x)
15: return x, y
```

## 11 Newton Method

Alg.3為牛頓法(Newton Method)。首先算法需要接收以下輸入參數,函數 f、初始估計值 x 和迭代次數 n。

以下將逐步解釋這個偽代碼的每個步驟:

- 1. 使用 for 循環進行迭代,從 i=0 開始,直到 i 達到 n,執行以下步驟。
- 2. 更新估計值,使用牛頓法的更新公式  $x = x \lambda \frac{f'(x)}{f''(x)}$ ,將當前的估計值 x 更新為新的值。在求解最小值的情況下,這個更新步驟使用函數的一階導數和二階導數來調整估計值,以使其朝著函數最小值的方向移動。具體而言,我們根據當前估計值處的斜率和曲率來調整估計值,使其向梯度下降的方向前進。
- 3. 迭代完成後,得到最終的估計值 x。
- 4. 計算最終的函數值,將最終的估計值 x 代入函數 f 中,計算函數值 y = f(x)  $\circ$
- 5. 最後,返回最終的估計值 x 和函數值 y。

在原始的牛頓法中,我們通過求解方程 f(x)=0 來找到根,但是在求解最小值的情況下,我們需要調整估計值的更新公式和迭代終止條件。常見的做法是使用函數的一階導數和二階導數來更新估計值,並在達到某個停止準則時終止迭代,如梯度接近零或達到預設的迭代次數。

#### Algorithm 3 Newton Method

Newton Method(f, x, n)

1: **for** i=0; i<n; i++ **do** 

2: 
$$x = x - \lambda \frac{f'(x)}{f''(x)}$$

- 3: end for
- 4: y = f(x)
- 5: **return** x, y

## 12 Gradient Descend

Alg.4為梯度下降算法(Gradient Descend)的偽代碼。梯度下降算法是一種用於優化函數的迭代方法,通過不斷調整自變量的值來最小化目標函數。首先算法接受四個輸入參數,函數  $f \times x$  為初始值,即算法開始時的起始點、 $\eta$  為學習率(learning rate)是控制每次迭代步長的參數和 n 為迭代次數,確定算法運行的迭代次數。

#### 算法的主要步驟如下:

- 1. 使用 for 循環進行迭代,從 i=0 開始,直到 i 達到 n,執行以下步驟。
- 2. 計算當前 x 的梯度  $\nabla f(x)$ 。然後更新 x 的值,通過從 x 中減去學習率  $\eta$  乘以梯度  $\nabla f(x)$  得到新的 x 值。這一步是梯度下降算法的核心步驟,通 過向負梯度方向調整 x 的值來逐步逼近函數的最小值。
- 3. 最後,結束 for 循環返回 x 和 y。

總結來說,該算法通過迭代調整 x 的值,以找到使函數最小化的 x 值。每次迭代中,通過計算目標函數在當前 x 處的梯度,來確定下降的方向,並通過學習率控制下降的步長。最終,算法返回找到的 x 和對應的最小值的 y。

#### Algorithm 4 Gradient Descend

Gradient Descend $(f, x, \eta, n)$ 

- 1: **for** i=0; i<n; i++ **do**
- 2:  $x = x \eta \bigtriangledown f(x)$
- 3: end for
- 4: y = f(x)
- 5: **return** x, y

# 13 $L_{\alpha}$ -Norm

 $L_{\alpha}$ -Norm 的方法跟前面 Linear 和 Non-Linear Prediction 計算 MSE 很像,但是在這裡就不用 MSE,而是用  $L_{\alpha}$ -Norm 來計算誤差的距進,以下 Eq.22為  $L_{\alpha}$ -Norm。

$$||z||_{\alpha} = (\sum_{n} |z[n]|^{\alpha})^{1/\alpha}$$
 (22)

我們該用何使用  $L_{\alpha}$ -Norm 來最優化,以下有一個例子說明:

$$E = \|y[n] - x_1b_1[n] - x_2b_2[n] - x_3b_3[n]\|_{\alpha}$$
(23)

如上式  $\mathrm{Eq.23}$ ,假設有一個目標函數 y[n],其中用  $b_1[n]$ 、 $b_2[n]$  和  $b_3[n]$  的線性組合來逼近 y[n],我們需要找出令  $\mathrm{Eq.23}$ 最小的常數  $x_1$ 、 $x_2$  和  $x_3$ ,首先,可以對  $\mathrm{Eq.23}$ 取偏微分,從而求後最小值。另外,求  $\|y[n]-x_1b_1[n]-x_2b_2[n]-x_3b_3[n]\|_{\alpha}$  的最小值是等價於  $\|y[n]-x_1b_1[n]-x_2b_2[n]-x_3b_3[n]\|_{\alpha}^{\alpha}$  的最小值,從而簡化其運算。

# References

- [1] 專題資料
- [2] https://www.kaggle.com/datasets/sudalairajkumar/daily-temperature-of-major-cities