Machine Learning HW1: PM2.5 Prediction

學號：R06922030　系級： 資工碩一　姓名：傅敏桓

請實做以下兩種不同 feature 的模型，回答第 1~3 題：

(1) 抽全部 9 小時內的污染源 feature 的一次項(加 bias)

(2) 抽全部 9 小時內 pm2.5 的一次項當作 feature(加 bias)

備註 ：

a. NR 請皆設為 0，其他的數值不要做任何更動

b. 所有 advanced 的 gradient descent 技術(如: adam, adagrad 等) 都是可以用的

針對以下(1)至(3)問題，我取每個月最末端的 48 筆數據做為 validation set，模型參數初始值均由亂數決定 (偏移項初始值為 1)，透過 adagrad 訓練模型，進行至多 50000 次的 iteration 直到誤差在測試集上小於某個值(1e-6)為止。

1. (2%)記錄誤差值 (RMSE)(根據 kaggle public+private 分數)，討論兩種 feature 的影響

這邊用(a)代表取全部 9 小時內的汙染源一次項的模型，(b)代表單抽 pm2.5 的一次項的模型。

(a)在 kaggle 上分別得到 public=8.17254 和 private=6.09744 的分數

(b)在 kaggle 上分別得到 public=7.41858 和 private=5.58012 的分數

另外，(a)在 validation set 之 RMSE 為 6.826218，(b)則為 7.032354。可以發現(b)的表現普遍都比(a)來得好。有較多參數的模型(a)是比(b)複雜許多，表現比較差的原因除了可能是(a)還沒有被訓練到最好外，我還考慮了以下兩種可能性：

i. 我們的資料可能沒辦法單用線性模型 fit 得太好，參數過多就有 overfitting 的問題

ii. 有一些觀測數據可能和 PM2.5 幾乎不相關，加入模型容易造成預測偏差

我認為(b)也能 work 的原因是 PM2.5 的值似乎不容易陡升陡降，我們若掌握到前幾個小時的觀測值，或者再考慮一些比較關鍵性的 feature，應該就足夠猜出接下來觀測值的走向。

2. (1%)將 feature 從抽前 9 小時改成抽前 5 小時，討論其變化

這邊用(c)代表取全部 5 小時內的汙染源一次項的模型，(d)代表單抽 pm2.5 的一次項的模型。

(c)在 kaggle 上分別得到 public=7.59881 和 private=5.31483 的分數

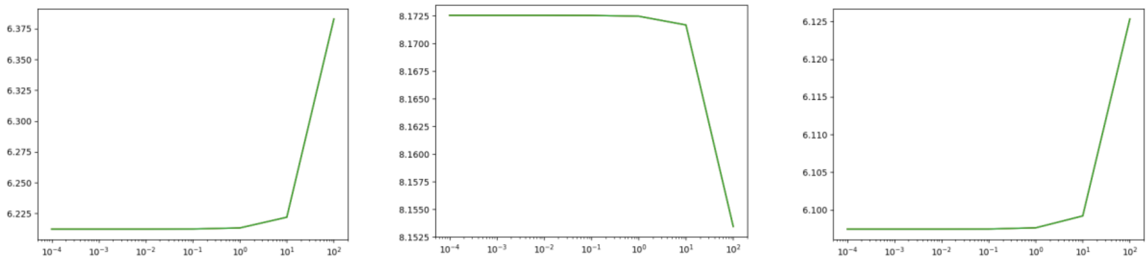
(d)在 kaggle 上分別得到 public=7.56623 和 private=5.75828 的分數

觀察模型(c)與上題(a)之差異，我推測分數進步的原因是參數變少，減輕了模型 overfitting 的現象，或者我們的訓練資料不夠多導致參數多的模型訓練的不夠好。而模型(d)的表現會略差於(b)，我推測原因是(d)的模型參數太少，過度簡化的模型能力不足所致；因(b)(d)這兩個模型在訓練的時候都是停在參數更新量太小，不太可能是有哪一邊模型訓練得不好造成的。

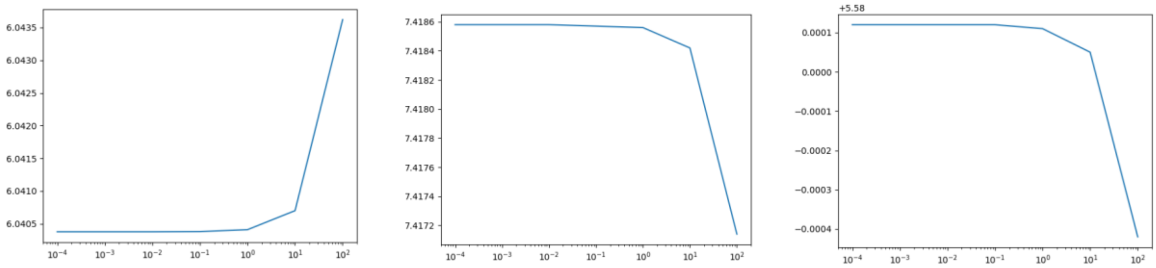
從這兩題的結果我觀察到參數選擇所帶來的差異，參數多的模型雖然理論上預測能力比較強，但有可能過度貼合訓練資料，反而在測試資料上表現不佳；一方面參數過少的模型則能力不足以預測太複雜的資料。（推論畢竟是以 kaggle 分數為基礎，只能討論在這次的作業上各模型的表現，而不代表哪種模型在實務上真的比較好）

3. (1%)Regularization on all the weight with λ=0.1、0.01、0.001、0.0001，並作圖

模型設定與上述(a)(b)相同（只有 0.1 以下實在看不出差別，加入 λ=1.0,10.0,100.0）。
以下是取全部觀測值(a)分別在 train, public 和 private test data 的變化



以下是只取 PM2.5 觀測值(b)分別在 train, public 和 private test data 的變化



可以觀察到隨 λ 值增加，在訓練集上的誤差些微變大，而在測試集上的些微變小（把線畫在一起會看不出變化所以分開來畫，實際上分數差距大約最多 0.02）。雖然可以預期越平滑的（λ 越大）模型越有機會在測試集上表現較好，我認為在這次的線性模型中，常規化的比重對於整體結果仍然影響不大。

4. **(1%)在線性回歸問題中，假設有 N 筆訓練資料，每筆訓練資料的特徵 (feature) 為一向量 x^n，其標註(label)為一純量 y^n，模型參數為一向量 w (此處忽略偏權值 b)，則線性回歸的損失函數(loss function)為$\sum_{n=1}^{N}(y^n - x^n \cdot w)^2$ 。若將所有訓練資料的特徵值以矩陣 $X = [x^1\ x^2\ \cdots\ x^N]^T$ 表示，所有訓練資料的標註以向量 $y = [y^1\ y^2\ \cdots\ y^N]^T$ 表示，請問如何以 X 和 y 表示可以最小化損失函數的向量 w ? 請寫下算式並選出正確答案。(其中 X^TX 為 invertible)**

(a) $(X^TX)X^Ty$　　　(c) $(X^TX)^{-1}X^Ty$
(b) $(X^TX)^{-0}X^Ty$　　　(d) $(X^TX)^{-2}X^Ty$

給定訓練資料的特徵及對應之標註，損失函數可以定義為$L(w) = \sum_{n=1}^{N}(y^n - x^n \cdot w)^2$。我們的目標是找出一組模型參數 w^* 使得損失函數最小，即 $w^* = \arg min_w L(w)$。藉由矩陣乘法的運算規則，我們可以將損失函數改寫為向量內積的形式$(X \cdot w - y)^T(X \cdot w - y)$，然後將$L(w)$對 w 微分：

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L(w)}{\partial w} &= \frac{\partial}{\partial w}(Xw - y)^T(Xw - y) \\
&= \frac{\partial}{\partial w}((Xw)^T - y^T)(Xw - y) \\
&= \frac{\partial}{\partial w}(w^TX^TXw - w^TX^Ty - y^TXw + y^Ty) \\
&= ((w^TX^TX)^T - (y^TX)^T) \\
&= (X^TXw - X^Ty)
\end{aligned}$$

（根據矩陣導數之定義，對任意向量 x 及 u(x)，若 A 非 x 的函數，則有$\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = I$ ，$\frac{\partial A\mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}A^T$）

取以上微分為 0 得到 $w^* = (X^TX)^{-1}X^Ty$，答案為(c)選項。