Machine Learning Homework#1

--prediction of PM2.5

b02901120 羅志軒

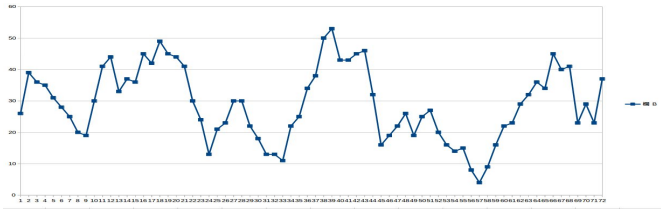
實驗流程

本次作業以豐原觀測站每個月前20天（共12個月）的觀測資料為training data，利用linear regression、gradient descent和regularization來訓練模型，目標為在testing data已知前九個小時PM2.5值的情況下，預測第十個小時的PM2.5值

實驗分析

1.

為確定PM2.5值隨時間變化的關係，以連續72小時為例，將PM2.5值的變化畫出來，如圖一：

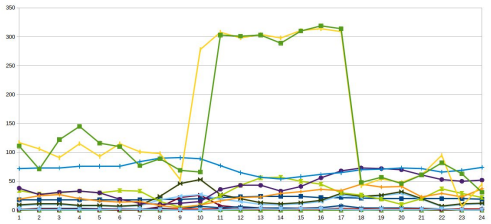


圖一

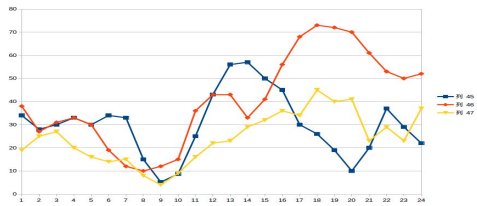
可以發現雖然PM2.5值經常會發生轉折，但大致上會符合前面九點的趨勢，且現在的值通常會和前面一兩點的值相近，可以推測，training data必須包含前九個小時的PM2.5值，且越接近現在的PM2.5值可能越需要重視。

2.

若將PM2.5值和其他的觀測數據做比較，以連續24小時為例，如圖二：



圖二



圖三

可以發現O3（45列）、PM10（46列）、PM2.5（47列）的值和趨勢大致相近，將其獨立並放大來觀察（如圖三）可以推測，現在的PM2.5值可能會和PM10及O3的值相關，甚至還有其他SO2、NO2、CO等數據也會對其產生影響，training data必須將這些資訊納入考量。

實驗結果

1.

以下分別就learning rate、lambda of regularization、iteration、training data差異及模型的差異做比較，如下：（以下的test error為自行測試的結果）

learning rate	lambda	iteration	training data	model	test error
0.000001	100	10000	O3、PM10、 PM2.5	線性	7.12
0.000001	10	10000	O3、PM10、 PM2.5	線性	6.58
0.000001	0	10000	O3、PM10、 PM2.5	線性	6.52
0.000001	0	10000	O3、PM10、 PM2.5、SO2、NO2、NOX、CO	線性	6.538
0.00001(batchsize=565)	0	10000	O3、PM10、 PM2.5、SO2、NO2、NOX、CO	線性	6.420
0.00001(batchsize=565)	0	100000	O3、PM10、 PM2.5、SO2、NO2、NOX、CO	線性	6.410
0.00001(batchsize=565)	0	100000	O3、PM10、 PM2.5、SO2、NO2、NOX、CO	高次	6.456

就以上表格可以發現增加高次項並不會有利於貼近資料分佈，regularization在這效果也並不佳，可能是因為線性函式並不需要特別去壓低weight參數，另外，增加一些和PM2.5相關的資料有助於電腦分析及預測其趨勢，但也不是越多資料越好，過多不相關的資訊可能會造成overfitting。值得一提的是，使用Mini-Batch Gradient Descent將training data切割並random排序，不僅讓訓練速度提昇，更有助於機器以隨機的順序學習並提昇結果，最終調整learning rate到約0.00001會達到最佳值，過大會造成error震盪並發散，過小會需要較多iteration且不容易到達目標值

2.Gradient Descent

以下是Gradient Descent的推導公式：

$$L = \sum (\hat{y} - X \cdot w)^2 = \|(\hat{y} - X \cdot w)\|^2$$
$$= (\hat{y} - X \cdot w)^T \cdot (\hat{y} - X \cdot w)$$
$$= \hat{y}^T \cdot \hat{y} - 2(Xw)^T \cdot \hat{y} + (Xw)^T \cdot (Xw)$$

$$\nabla L = -2X^T \cdot \hat{y} + 2X^T (Xw)$$
$$= 2X^T (Xw - \hat{y})$$

若實作在code上大約是以下的形式：

```
14 def gradient_linear(x_list, w_list, yn_list, b, lamda): #regularization, x_list, y_list-> hole batch list
15     power_arr = np.append(np.ones(62), np.array([2]), axis= 0)
16     #np.power(x_list, power_arr)
17     _sum= np.dot(x_list.T, (yn_list- (np.dot(x_list, w_list)+ b))*(-1)) / len(x_list)
18     _sum_b= np.sum((yn_list- (np.dot(x_list, w_list)+ b))* (-1)) / len(x_list)
19     gradient= 2*_sum+ 2*w_list*lamda
20     gradient_b= 2*_sum_b
21
22     return gradient, gradient_b
```

將training data和weight存成numpy array以內積的方式計算gradient，計算速度將會提昇許多("_sum"為以上公式的$X^T(Xw-\bar{y})$， "_sum_b"為L對b的微分值除以2)